

## XI. PORUCHY ZÁVISLÉ NA ČASE . PŘECHODY

### 1. Formulace úlohy

Ústředním tématem této kapitoly je výpočet pravděpodobnosti přechodu soustavy z jednoho stacionárního stavu do druhého pod vlivem nějaké vnější, na čas závislé, poruchy. S úlohami tohoto typu se v praxi setkáváme velice často. Značná část experimentů je totiž uspořádána tak, že na zkoumanou fyzikální soustavu působíme nějakými vnějšími vlivy (elektrickým, magnetickým nebo elektromagnetickým polem apod.) a sledujeme odezvu soustavy na působící vnější podněty. Vyhodnocení experimentu pak spočívá ve vytvoření modelu studované soustavy, vypočítání reakce modelu na působící vnější vlivy a porovnání s naměřenými hodnotami; přijatelný souhlas vypočtených a naměřených hodnot pak svědčí ve prospěch přijatého modelu.

Připomeňme si ještě, že v jednoduché podobě jsme již úlohu tohoto typu řešili v odst. VI.2.3; výsledkem provedených výpočtů tam byla tzv. Rabiho formule. Problém, který budeme řešit nyní, je mnohem obecnější. Budeme uvažovat systémy s libovolným počtem diskretních stavů (v odst. VI.2.3 jsme měli soustavu pouze se dvěma stavy), případně i se spojitým spektrem. Porucha  $W(t)$ , působící na takovou soustavu, bude libovolnou funkcí času. Na druhé straně je ovšem pochopitelné, že při tak obecném přístupu bude možné získávat pouze přibližná řešení.

Mějme tedy kvantovou soustavu s hamiltoniánem  $\mathcal{H}_0$  a označme jeho vlastní hodnoty  $E_n$  a vlastní funkce  $\varphi_n$ , takže platí

$$\mathcal{H}_0 \varphi_n = E_n \varphi_n \quad (1)$$

Pro jednoduchost budeme nejprve předpokládat, že spektrum je diskretní a nedegenerované; zobecnění není obtížné a bude provedeno později.

Nechť v čase  $t=0$  začne na soustavu působit nějaká porucha  $W(t)$ . Výsledný hamiltonián pak je

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + W(t) \quad (2a)$$

Z obdobných důvodů jako v předchozí kapitole, zavedeme bezrozměrný reálný parametr  $\lambda \leq 1$  a budeme psát místo (2a)

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \lambda W(t) \quad (2b)$$

Energie reprezentovaná operátorem  $W(t)$  je pro  $t < 0$  rovna nule.

Předpokládejme dále, že v čase  $t=0$  byla soustava ve stavu  $\varphi_i$  s energií  $E_i$ . Jestliže začala v  $t=0$  působit porucha  $W(t)$ , stav  $\varphi_i$  již nebude obecně vlastním stavem porušeného hamiltoniánu  $\mathcal{H}(t)$ . V dalším se zaměříme na výpočet pravděpodobnosti, že v čase  $t > 0$  bude soustava nalezena v nějakém stavu  $\varphi_f$  s energií  $E_f$ . Jinými slovy: budeme se zabývat přechody mezi stacionárními stavy neporušené soustavy, indukovanými poruchou.

Pouhá formulace úlohy je snadná. V čase  $t > 0$  se stav soustavy vyvíjí ve shodě se Schrödingerovou rovnicí (IV.83)

$$i\hbar \frac{d}{dt} \psi(t) = [\mathcal{H}_0 + \lambda W(t)] \psi(t), \quad (3)$$

která má s počáteční podmínkou

$$\psi(t=0) = \varphi_1 \quad (4)$$

jediné řešení.

Hledaná pravděpodobnost  $P_{1f}(t)$ , že soustava bude v čase  $t$  ve stavu  $\varphi_f$  je (viz (IV.73))

$$P_{1f}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \int \varphi_f^* \psi(t) d\tau \right|^2 \quad (5)$$

K výpočtu  $P_{1f}(t)$  je tudíž třeba nalézt řešení rovnice (3), které vyhovuje podmínce (4). Přesné řešení je obecně nemožné, takže opět přichází ke slovu přibližné metody. V dalším budeme hledat  $\psi(t)$  ve tvaru mocninové řady v  $\lambda$  a vypočteme explicitně  $\psi(t)$  i  $P_{1f}(t)$  v přiblížení 1. řádu (vzhledem k  $\lambda$ ). Získané obecné formule budeme pak aplikovat na dva důležité speciální případy: poruchu měnící se v čase periodicky a poruchu působící jen po určitou dobu, avšak během této doby konstantní. V následující kapitole si ještě podrobněji všimneme důležitého tématu - interakce atomu s elektromagnetickým polem.

## 2. Přibližné řešení

Rozvíme hledanou funkci  $\psi(t)$  podle vlastních funkcí operátoru  $\mathcal{H}_0$ :

$$\psi(t) = \sum_k c_k(t) \varphi_k \quad (6)$$

Časová závislost  $\psi(t)$  je soustředěna v koeficientech  $c_k(t)$ , pro něž platí (srov. (IV.8))

$$c_k(t) = \langle \varphi_k | \psi(t) \rangle \quad (7)$$

Rovnice pro koeficienty  $c_k(t)$  získáme obvyklým postupem. Rozvoj (6) dosadíme do (3), místo  $\mathcal{H}_0 \varphi_k$  dosadíme podle (1)  $E_k \varphi_k$ , levou i pravou stranu rovnice vynásobíme funkcí  $\varphi_n^*$  a zintegrujeme přes celý prostor proměnných ve funkcích  $\varphi$  (provedeme tím vlastně projekci obou stran rovnice (3) na stav  $\varphi_n$ ; srov. díl I, str. 108). Označíme-li

$$W_{nk}(t) = \langle \varphi_n | W(t) | \varphi_k \rangle = \int \varphi_n^* W(t) \varphi_k d\tau \quad (8)$$

a využijeme ještě podmínku ortonormality vlastních funkcí operátoru  $\mathcal{H}_0$ :

$$\langle \varphi_n | \varphi_k \rangle = \int \varphi_n^* \varphi_k d\tau = \delta_{nk}, \quad (9)$$

obdržíme soustavu rovnic

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_n(t) = E_n c_n(t) + \sum_k \lambda W_{nk}(t) c_k(t) \quad (10)$$

Rovnice v soustavě (10) jsou vzájemně "svázané" přes maticové prvky  $W_{nk}$ . Jestliže by všechny prvky  $W_{nk}$  byly nulové (porucha  $W$  by nepůsobila), rovnice by byly vzájemně nezávislé a jejich řešení by bylo

$$c_n(t) = b_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad (11)$$

Jestliže jsou prvky  $W_{nk}$  obecně nenulové, ale porucha je slabá, očekáváme, že řešení  $c_n(t)$  rovnic (10) se bude málo lišit od (11). Jinými slovy: napíšeme-li

$$c_n(t) = b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (12)$$

potom by  $b_n(t)$  měla být funkce měnící se s časem jen velmi málo. Dosazením (12) do (10) obdržíme

$$\begin{aligned} i\hbar e^{-iE_n t/\hbar} \frac{d}{dt} b_n(t) + E_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} = \\ = E_n b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_k \lambda W_{nk} b_k(t) e^{-iE_k t/\hbar} \end{aligned}$$

Vynásobíme-li obě strany  $\exp(+iE_n t/\hbar)$  a zavedeme

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}, \quad (13)$$

máme

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk} t} W_{nk}(t) b_k(t) \quad (14)$$

Zatím jsme neprovedli žádnou aproximaci, takže soustava rovnic (14) je ekvivalentní Schrödingerově rovnici (3).

Rozvedeme nyní  $b_n(t)$  v řadu podle mocnin  $\lambda$

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots \quad (15)$$

Rozvoj dosadíme do rovnic (14) a napíšeme podmínky, že koeficienty u  $\lambda^r$  ( $r=0,1,2,\dots$ ) na obou stranách rovnice se musí sobě rovnat:

(a) pro  $r=0$  dostaneme

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(0)}(t) = 0, \quad (16)$$

takže  $b_n^{(0)}$  nezávisí na  $t$  a pro  $\lambda=0$  dostáváme výsledek (11).

(b) pro  $r \neq 0$  získáme

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(r)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk} t} W_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t) \quad (17)$$

Získané rovnice (17) zřejmě dovolují iterační řešení. Koeficienty  $b_n(t)$  v aproximaci  $(r-1)$ -řádu dosadíme na pravou stranu a řešením získaných diferenciálních rovnic 1.řádu obdržíme  $b_n$  v aproximaci  $r$ -tého řádu. Celý proces začneme s koeficienty  $b_n^{(0)}$  vybranými tak, aby byla splněna počáteční podmínka (4).

#### Řešení v aproximaci 1.řádu

Předpokládali jsme, že pro  $t < 0$  je soustava ve stacionárním stavu  $\psi_1$ . Z toho ale plyne, že všechny koeficienty  $b_n(t)$ , kromě  $b_1(t)$ , musí být pro  $t < 0$  rovny nule ( $b_1$  je navíc konstantní), takže

$$b_n(t=0) = \delta_{n1} \quad (18)$$

Protože v čase  $t=0$  to musí být pravda pro všechna  $\lambda$ , platí pro koeficienty rozvoje (15)

$$b_n^{(0)}(t=0) = \delta_{n1} \quad (19a)$$

$$b_n^{(r)}(t=0) = 0 \quad \text{pro } r \geq 1 \quad (19b)$$

Rovnice (16) pak pro všechna  $t > 0$  dává řešení v nulté aproximaci

$$b_n^{(0)}(t) = \delta_{n1} \quad (20)$$

Dosadíme-li ho na pravou stranu (17), obdržíme pro  $r = 1$

$$i\hbar \frac{d}{dt} b_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} W_{nk}(t) \delta_{k1} = e^{i\omega_{n1}t} W_{n1}(t), \quad (21)$$

což je diferenciální rovnice, kterou lze bez problémů integrovat. Vezme-li ještě v úvahu počáteční podmínku (19b), máme

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{n1}t'} W_{n1}(t') dt' \quad (22)$$

Dosadíme-li (20) a (22) do (12) a potom ještě do (6), získáme hledanou vlnovou funkci  $\psi(t)$  v čase  $t$ , vypočtenou v přiblížení 1.řádu (vzhledem k parametru  $\lambda$ ).

Spojení (5) a (7) dává pravděpodobnost  $P_{if}(t)$  přechodu ze stavu  $\psi_i$  do stavu  $\psi_f$  rovnu  $|c_f(t)|^2$ . Protože  $|c_f(t)| = |b_f(t)|$

$$P_{if}(t) = |b_f(t)|^2 \quad (23)$$

kde  $b_f(t)$  je vyjádřeno rozvojem (15) ( $n=f$ ). Je-li koncový stav  $\psi_f$  odlišný od  $\psi_1$ , je  $b_f^{(0)}(t)=0$  a

$$P_{if}(t) = \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 \quad (24)$$

Dosazením z (22) dostaneme (pro  $\lambda = 1$ ) 1. přiblížení pro hledanou pravděpodobnost přechodu ze stavu  $\varphi_1$  do stavu  $\varphi_f$  za čas  $t$

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t') dt' \right|^2 \quad (25)$$

### 3. Dva významné speciální případy: periodická a konstantní porucha

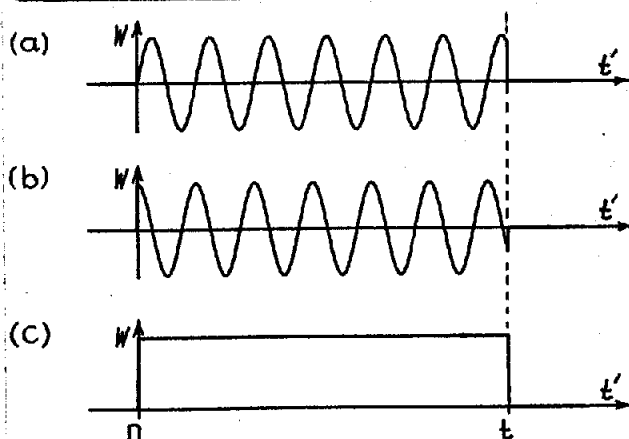
Budeme nyní aplikovat předchozí výsledky na dva konkrétní typy poruch: poruchu periodickou v čase a její speciální případ- poruchu v daném časovém intervalu konstantní.

#### 3.1) Aplikace obecných formulí

Předpokládejme, že porucha  $W(t)$  má jednu z těchto dvou jednoduchých závislostí na čase:

$$W(t) = w \sin \omega t \quad (26a)$$

$$W(t) = w \cos \omega t \quad (26b)$$



Obr.53

Znázornění uvažovaných poruch.

$W(t')$  má uvedený průběh pro  $t' \in \langle 0, t \rangle$ , vně tohoto intervalu je  $W(t')=0$ . (a) porucha (26a), (b) porucha (26b), (c) speciální případ (26b) pro  $\omega=0$ ; porucha konstantní pro  $t' \in \langle 0, t \rangle$ .

Ve výrazech (26) je  $w$  na čase nezávislá měřitelná veličina a  $\omega$  je konstantní kruhová frekvence (obr.53). S podobnými poruchami se ve fyzice setkáváme často; hned v následující kapitole se např. budeme podrobněji zabývat interakcí atomu s monochromatickou elektromagnetickou vlnou.

Pro poruchu (26a) má maticový prvek  $W_{fi}$  (v (8) se integruje přes prostorové (resp. i spinové) souřadnice, nikoliv přes  $t$ !) tvar

$$W_{fi}(t) = w_{fi} \sin \omega t = \frac{w_{fi}}{2i} (e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \quad (27)$$

kde  $w_{fi}$  je obecně komplexní, na čase nezávislé, číslo.

Vypočtíme nyní vlnovou funkci v přiblížení 1. řádu. Dosazením (27) do obecného vzorce (22) získáme

$$b_n^{(1)}(t) = -\frac{w_{ni}}{2\hbar} \int_0^t [e^{i(\omega_{ni}+\omega)t'} - e^{i(\omega_{ni}-\omega)t'}] dt'$$

Výpočet integrálu je snadný a dá výsledek

$$b_n^{(1)}(t) = \frac{w_{ni}}{2i\hbar} \left[ \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} + \omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} \right] \quad (28)$$

Pravděpodobnost přechodu ze stavu  $\psi_i$  do stavu  $\psi_f$  za čas  $t$  je podle (24)

$$P_{if}(t; \omega) = |b_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{|w_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} - \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (29a)$$

( U  $P_{if}$  je explicitně vypsán parametr  $\omega$  , aby se zřetelně zdůraznila závislost na frekvenci poruchy.)

Jestliže vybereme poruchu (26b), změni se jen znaménko mezi zlomky z - na + , takže

$$P_{if}(t; \omega) = \frac{|w_{fi}|^2}{4\hbar^2} \left| \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\omega_{fi} + \omega} + \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\omega_{fi} - \omega} \right|^2 \quad (29b)$$

Význam tohoto řešení je v tom, že porucha (26b) pro  $\omega = 0$  dává poruchu nezávislou na čase (obr.53c). Pravděpodobnost přechodu indukovaná časově konstantní poruchou ( $W(t)=w$  pro  $t > 0$ ) se tudíž získá z (29b) dosazením  $\omega = 0$  :

$$P_{if}(t) = \frac{|w_{fi}|^2}{\hbar^2 \omega_{if}^2} \left| 1 - e^{i\omega_{fi}t} \right|^2 = \frac{|w_{fi}|^2}{\hbar^2} F(t, \omega_{fi}) \quad (30)$$

kde (po jednoduché úpravě )

$$F(t, \omega_{fi}) = \left[ \frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2} \right]^2 \quad (31)$$

Fyzikální obsah formulí (29), (30) rozebereme nejprve pro dva diskretní stavy  $\psi_i$  ,  $\psi_f$  a potom pro případ, kdy koncový stav  $\psi_f$  patří do kontinua stavů.

### 3.2) Přechody mezi dvěma diskretními stavy

Pro pevné  $t$  je pravděpodobnost přechodu  $P_{if}(t; \omega)$  funkcí proměnné  $\omega$ . Uvidíme, že tato funkce má maximum pro

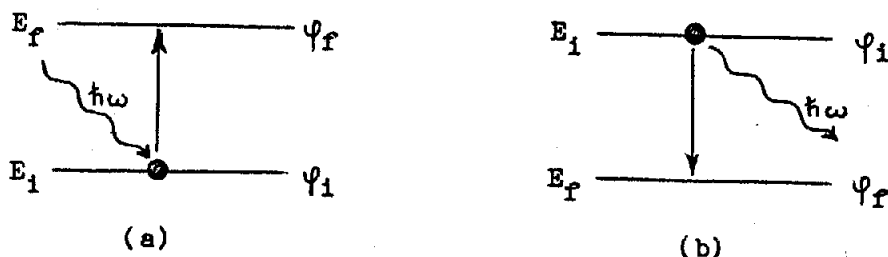
$$\omega = \omega_{fi} \quad (32a)$$

nebo pro

$$\omega = -\omega_{fi} \quad (32b)$$

Objevuje se nám tedy jakýsi rezonanční jev, jestliže se frekvence poruchového pole rovná Bohrově frekvenci  $\omega_{fi}$  pro stavy  $\psi_i$  ,  $\psi_f$  .

Vybereme-li  $\omega \gg 0$ , potom relace (32) dávají rezonanční podmínku pro  $\omega_{f1} > 0$ , resp.  $\omega_{f1} < 0$ . V prvním případě ( $\omega_{f1} > 0$ ) přechází soustava ze stavu s nižší energií  $E_i$  do stavu s vyšší energií  $E_f$  (srov.(13)), takže jde o rezonanční absorpci kvanta  $\hbar\omega$  (obr.54a). Ve druhém případě ( $\omega_{f1} < 0$ ) stimuluje porucha přechod s vyšší hladiny  $E_i$  na nižší hladinu  $E_f$ ; přechod je doprovázen indukovanou emisí kvanta  $\hbar\omega$  (obr.54b). Všimněme si podrobněji prvního případu s tím, že analogické řešení druhého případu ponecháme za cvičení.



Obr.54

Schematické znázornění vzájemné polohy energií  $E_i, E_f$  (pro stavy  $\psi_i, \psi_f$ ). (a) Pro  $E_f > E_i$  dochází absorpcí kvanta  $\hbar\omega$  k přechodu  $\psi_i \rightarrow \psi_f$ . (b) Pro  $E_i > E_f$  je přechod  $\psi_i \rightarrow \psi_f$  spojen s indukovanou emisí kvanta  $\hbar\omega$ . V obou případech je  $\omega \approx \omega_{f1}$ .

Výraz pro  $P_{if}$  podle (29) je úměrný čtverci modulu dvou komplexních sčítanců:

$$A_+ = \frac{1 - e^{i(\omega_{f1} + \omega)t}}{\omega_{f1} + \omega} = -i \exp\left[\frac{i(\omega_{f1} - \omega)t}{2}\right] \frac{\sin[(\omega_{f1} + \omega)t/2]}{(\omega_{f1} + \omega)/2} \quad (33a)$$

$$A_- = \frac{1 - e^{i(\omega_{f1} - \omega)t}}{\omega_{f1} - \omega} = -i \exp\left[\frac{i(\omega_{f1} - \omega)t}{2}\right] \frac{\sin[(\omega_{f1} - \omega)t/2]}{(\omega_{f1} - \omega)/2} \quad (33b)$$

Jmenovatel výrazu  $A_-$  jde pro  $\omega \rightarrow \omega_{f1}$  k nule. Proto pro  $\omega$  blízká k  $\omega_{f1}$  budeme uvažovat pouze člen  $A_-$  a budeme o něm mluvit jako o rezonančním členu (člen  $A_+$  převezme tuto roli pro  $\omega$  jdoucí k  $-\omega_{f1}$ ).

Uvažujme nyní případ, kdy

$$|\omega - \omega_{f1}| \ll |\omega_{f1}| \quad (34)$$

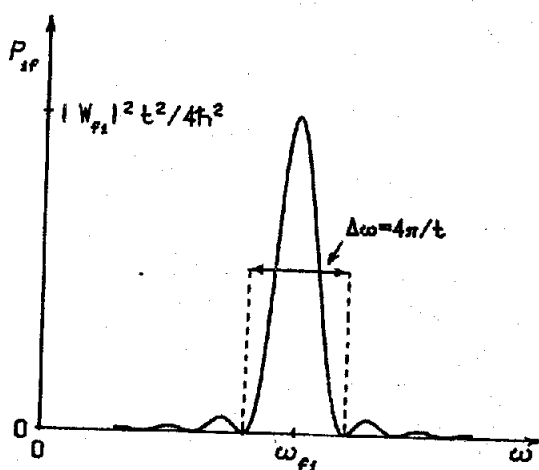
a zanedbejme "antirezonanční" člen  $A_+$ . S výrazem (33b) dostaneme

$$P_{if}(t; \omega) = \frac{|\omega_{f1}|^2}{4\hbar^2} F(t, \omega - \omega_{f1}) \quad (35)$$

kde

$$F(t, \omega - \omega_{f1}) = \left[ \frac{\sin[(\omega_{f1} - \omega)t/2]}{(\omega_{f1} - \omega)/2} \right]^2 \quad (36)$$

Závislost  $P_{if}(t; \omega)$  na  $\omega$  pro pevné  $t$  je v obr.55; je z něho zřetelně vidět rezonanční charakter pravděpodobnosti přechodu. Pravděpodobnost  $P_{if}$  nabývá maxima pro  $\omega = \omega_{fi}$ , kdy je rovna  $|w_{fi}|^2 t^2 / 4\hbar^2$  a pro  $\omega$  vzdalující se od  $\omega_{fi}$  je výrazně menší, osciluje a má průběh připomínající difrakční závislosti z optiky.



Obr.55

Závislost pravděpodobnosti přechodu  $P_{if}$  (v 1. aproximaci) na frekvenci  $\omega$  "sinusové" poruchy (26a) pro dané  $t$ . Pro  $\omega \approx \omega_{fi}$  se objevuje rezonance úměrná  $t^2$ , jejíž šířka je úměrná  $1/t$ .

Za povšimnutí stojí souvislost mezi šířkou  $\Delta\omega$  hlavního maxima  $P_{if}$  a relacemi neurčitosti. Šířku rezonančního maxima  $\Delta\omega$  můžeme přibližně definovat jako vzdálenost dvou nulových bodů  $P_{if}$ , nejbližších  $\omega = \omega_{fi}$ . Uvnitř tohoto intervalu nabývá  $P_{if}$  největší hodnoty; není těžké ověřit, že nejbližší sousední maxima (viz obr.55), v bodech pro něž je  $(\omega - \omega_{fi})t/2 = 3\pi/2$ , jsou rovna  $|w_{fi}|^2 t^2 / 9\pi^2 \hbar^2$ , což je méně než 5%  $P_{if}$  v bodě  $\omega = \omega_{fi}$ . Vezměme tedy

$$\Delta\omega \approx \frac{4\pi}{t} \quad (37)$$

Čím delší čas působení poruchy, tím menší je šířka  $\Delta\omega$ . Výsledek (37) velice připomíná relace neurčitosti pro dvojici energie-čas (viz odst. II.5.5). Předpokládejme, že chceme měřit rozdíl energií  $E_f - E_i = \hbar\omega_{fi}$  tak, že na soustavu necháme působit poruchové pole se "sinusovou" závislostí (26a) a budeme měnit  $\omega$  až zaregistrujeme rezonanci. Jestliže potom bude porucha působit po dobu  $t$ , bude neurčitost  $\Delta E$  určení rozdílu  $E_f - E_i$  podle (37) řádu

$$\Delta E = \hbar \Delta\omega \approx \frac{\hbar}{t} \quad (38)$$

Odtud je zřejmé, že součin  $t \Delta E$  nemůže být menší než  $\hbar$ .

Konečně je ještě třeba se zabývat otázkou, do jaké míry jsou provedené aproximace oprávněné. Nejprve si přitom všimneme zanedbání členu  $A_+$  a potom faktu, že vše počítáme v aproximaci 1. řádu.

Srovnajme absolutní hodnoty  $A_+$  a  $A_-$ . Průběh funkce  $|A_-(\omega)|^2$  je v obr.55.



Protože  $|A_+(\omega)|^2 = |A_-(-\omega)|^2$ , můžeme  $|A_+(\omega)|^2$  získat tak, že nakreslíme  $|A_-(\omega)|^2$  symetricky vzhledem k  $\omega = 0$ . Jestliže maxima těchto dvou křivek jsou v mnohem větší vzdálenosti než je  $\Delta\omega$ , potom je evidentní, že modul  $A_+$  je v bodě  $\omega \approx \omega_{f1}$  zanedbatelný vzhledem k  $|A_-|$ . Zanedbání členu  $A_+$  je tedy oprávněné, jestliže

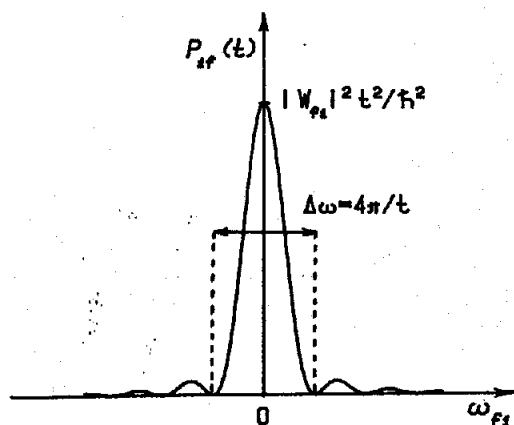
$$2|\omega_{f1}| \gg \Delta\omega \quad (39)$$

což spolu s (37) dá

$$t \gg \frac{1}{|\omega_{f1}|} \approx \frac{1}{\omega} \quad (40)$$

Formule (35) pro  $P_{if}$  tedy dobře platí pouze tehdy, jestliže doba po níž působí "sinusová" porucha je velká ve srovnání s  $\omega^{-1}$ . Fyzikální význam této podmínky je jasný: během intervalu  $\langle 0, t \rangle$  musí porucha realizovat mnoho oscilací, aby se to na soustavě projevilo jako "sinusová" porucha. Jestliže, z druhé strany, bude  $t$  malé ve srovnání s  $\omega^{-1}$ , nebude mít porucha čas projevit svůj oscilační charakter a bude téměř ekvivalentní poruše měnící se lineárně s časem (v případě (26a)) nebo poruše v čase konstantní (v případě (26b)).

Pro časově konstantní poruchu nemůže být podmínka (40) ovšem nikdy splněna, neboť  $\omega = 0$ . Není však obtížné modifikovat předcházející úvahu na tento případ. Poruchu nezávislou na čase jsme dostali tak, že jsme v (29b) položili  $\omega = 0$ . Všímejte si, že v tomto případě  $A_+ = A_-$ , což znamená, že při splnění podmínky (40) není "antirezonanční" člen zanedbatelný. Závislost pravděpodobnosti přechodu  $P_{if}$  na energiové diferencii  $\hbar\omega_{f1}$  (pro pevné  $t$ ) je v obr.56. Maximum této křivky je v bodě  $\omega_{f1}=0$ , což je ve shodě s tím, co jsme zjistili: je-li  $\omega = 0$ , objeví se "rezonance" při  $\omega_{f1}=0$  (musí jít o degenerovanou hladinu s  $E_f=E_i$ ).



Obr.56

Závislost  $P_{fi}$  na  $\omega_{f1} = (E_f - E_i)/\hbar$  pro pevné  $t$  a poruchu nezávislou na čase. Rezonance se objevuje při  $\omega_{f1}=0$  (zákon zachování energie) se stejnou šířkou  $\Delta\omega$  jako v obr.55, ale "intenzitou" 4x větší (je to důsledkem "konstruktivní" interference  $A_+$  a  $A_-$ , které se v tomto případě rovnají).

Zvažme nyní ještě meze použitelnosti výpočtů  $P_{if}$  v aproximaci 1. řádu. Předně si uvědomme, že nestačí požadovat aby porucha byla malá. Uvidíme to např. na výrazu (35), jestliže ho napíšeme pro  $\omega = \omega_{f1}$ :

$$P_{if}(t; \omega = \omega_{f1}) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2} t^2 \quad (41)$$

Pro  $t \rightarrow \infty$  dostáváme absurdní výsledek  $P_{if} \rightarrow \infty$ , zatímco víme, že  $P_{if}$  musí být vždy menší než 1.

Rozumné praktické kritérium pro použitelnost 1. aproximace spočívá v tomto případě v požadavku  $P_{if} \ll 1$ , tj.

$$t \ll \frac{\hbar}{|\omega_{fi}|} \quad (42)$$

Zpravidla bude třeba ještě požadovat, aby podmínka (42) byla kompatibilní s požadavkem (40). Pak musí platit

$$\frac{1}{|\omega_{fi}|} \ll \frac{\hbar}{|\omega_{fi}|}, \quad (43)$$

což znamená, že energiový rozdíl  $|E_f - E_i| = \hbar |\omega_{fi}|$  je mnohem větší než maticový prvek  $|w_{fi}|$  (obdobná podmínka vystupovala ve stacionárním poruchovém počtu).

V případě, že podmínka (42) není splněna, je vhodné zvolit jiný postup řešení než pracně počítat korekce vyšších řádů v rozvoji (15). Vychází se přitom z toho, že při rezonanci  $\omega \approx \omega_{fi}$  jsou poruchou  $W(t)$  vázány prakticky jen stavy  $\varphi_i, \varphi_f$ . Pravděpodobnost přechodu do ostatních stavů je zanedbatelná. Pak je ale možné volit postup blízký tomu, který nás v odst. V.2.3 přivedl k Rabiho formuli. Takto se např. také řeší úloha o elektronové spinové rezonanci.

### 3.3) Přechod do kontinua stavů

Patří-li energie  $E_f$  do spojitě části spektra hamiltoniánu  $\mathcal{H}_0$  (koncové stavy jsou "indexovány" spojitě se měnící proměnnou), nelze mluvit o pravděpodobnosti nalezení soustavy v přesně definovaném stavu

$\varphi_f$  v čase  $t$ . Z kap. IV, odst. 2 víme (viz (IV.77)), že v tomto případě bude veličina  $|\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2$  představovat hustotu pravděpodobnosti.

Hodnotu, kterou chceme srovnávat s experimentem, pak získáme integrací přes odpovídající skupinu možných koncových stavů (integrační proměnná by byla  $f$ ). Objasníme si to nejprve na příkladě.

#### Konkrétní příklad : rozptyl částice

Předpokládejme, že studujeme rozptyl částice s hmotností  $m$  na potenciálu  $W(r)$  (spin neuvažujeme). Vlnovou funkci částice  $\psi(t)$  v čase  $t$  můžeme rozvinout podle rovinných vln (II.35), resp. (D12)

$$\varphi_{\vec{p}}(r) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar} \quad (44)$$

Každé z těchto vln odpovídá stav s přesně určeným impulsem  $\vec{p}$  a energií

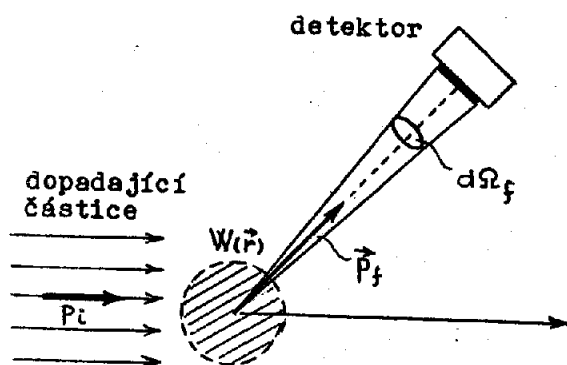
$$E_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m} \quad (45)$$

Hustota pravděpodobnosti naměření impulsu  $\vec{p}$  ve stavu  $\psi(t)$  je

$$|\langle \varphi_{\vec{p}} | \psi(t) \rangle|^2 \quad (46)$$

Detektor použitý pro sledování rozptylu (obr.57) má však konečnou úhlovou aperturu a jeho citlivost na energii dopadajících částic také není dokonalá; tzn., že bude registrovat částici vždy, když její impuls  $\vec{p}$  bude ležet v prostorovém úhlu  $d\Omega_f$  kolem směru vektoru  $\vec{p}_f$  a energie částice bude v nějakém intervalu  $\delta E_f$  kolem bodu  $E_f = \vec{p}_f^2/2m$ . Označíme-li  $D_f$  oblast  $\vec{p}$ -prostoru která splňuje tyto podmínky, potom pravděpodobnost, že detektor zaregistruje částici bude

$$\delta P(\vec{p}_f, t) = \int_{D_f} d^3\vec{p} |\langle \varphi_p | \psi(t) \rangle|^2 \quad (47)$$



Obr.57

Částice přicházející s daným impulsem  $\vec{p}_i$  do oblasti působení potenciálu  $W(\vec{r})$  se s určitou pravděpodobností rozptýlí do prostorového úhlu  $d\Omega_f$  kolem  $\vec{p}_f$ , v němž je detektor schopen registrovat dopad částic.

Rozptyl částice může být pružný (její energie se nemění), takže se mění pouze její impuls (stav). Takovéto měření je příkladem přechodu částice z daného stavu  $\vec{p}_i$  do kontinua stavů  $\vec{p}_f$ . Přestože  $W(\vec{r})$  nezávisí na čase, lze úlohu řešit poruchovým počtem závislým na čase, neboť potenciál  $W(\vec{r})$  působí na částici pouze v určitém časovém intervalu, když prochází vyznačenou oblastí.

Abychom mohli užít výsledky z předchozího odstavce, musíme přejít k integraci přes energii  $E$ . Provedeme to snadno, když si uvědomíme, že je možné psát (jde o přechod ke sférickým souřadnicím v  $\vec{p}$ -prostoru; srov. (VIII.5))

$$d^3\vec{p} = p^2 dp d\Omega \quad (48)$$

a za  $p$  dosadíme z (45). Potom

$$d^3\vec{p} = \varphi(E) dE d\Omega \quad (49)$$

kde  $\varphi(E)$  je hustota koncových stavů rovná (z(45)+(48)+(49))

$$\varphi(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = p^2 \frac{m}{p} = m\sqrt{2mE} \quad (50)$$

Výraz (47) pak je

$$\delta P(p_f, t) = |\langle \varphi_p | \psi(t) \rangle|^2 \cdot \varphi(E) dE d\Omega \quad (51)$$

Obecná formulace.

Sformulujeme nyní získané výsledky v obecné formě. Nechť určitá část spektra  $\mathcal{H}_0$  je spojitá a odpovídající stavy  $\varphi(k)$  jsou rozlišovány spojitě se měnící proměnnou  $k$ . Ortonormalizační podmínka pro stavy  $\varphi(k)$  je (srov. (IV.79))

$$\langle k | k' \rangle = \langle \varphi(k) | \varphi(k') \rangle = \delta(k - k') \quad (52)$$

Stav soustavy s hamiltoniánem  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + W$  je v čase  $t$  určen normalizovanou vlnovou funkcí  $\psi(t)$ . Úkolem je určit pravděpodobnost  $\delta P(k_f, t)$ , že soustava bude nalezena v dané množině koncových stavů  $D_f$  kolem hodnoty  $k_f$  za předpokladu, že energie příslušející těmto stavům se mění spojitě. Z postulátů kvantové mechaniky (viz odst. IV.2) plyne, že

$$\delta P(k_f, t) = \int_{D_f} |\langle \varphi(k) | \psi(t) \rangle|^2 dk \quad (53)$$

Stejně jako v předchozím příkladu, přejdeme od  $k$  k proměnné  $E$ , doplněné podle potřeby o další parametry - označme je souhrnně  $\beta$  - nutné k úplnému určení stavu (srov.  $d\Omega$  v předcházejícím příkladu). Element  $dk$  vyjádříme takto

$$dk = \varphi(\beta, E) d\beta dE, \quad (54)$$

čímž také zavedeme hustotu koncových stavů  $\varphi(\beta, E)$  (velice často, stejně jako v uvedeném příkladu, závisí  $\varphi$  pouze na  $E$ ). Označíme-li ještě  $\delta\beta_f$  a  $\delta E_f$  intervaly v nichž jsou hodnoty  $\beta$  a  $E$  z oblasti  $D_f$ , máme

$$\delta P(k_f, t) = \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} |\langle \varphi(\beta, E) | \psi(t) \rangle|^2 \varphi(\beta, E) dE d\beta \quad (55)$$

3.4) Fermiho zlaté pravidlo

V závěrech předchozího odstavce figuruje přesná vlnová funkce  $\psi(t)$ . Vyjádříme nyní získané výsledky opět v aproximaci 1. řádu. Výchozí stav soustavy (před působením poruchy) bude odpovídat opět diskretnímu stavu  $\varphi_1$  hamiltoniánu  $\mathcal{H}_0$ . Abychom tuto skutečnost zdůraznili, budeme místo  $\delta P(k_f, t)$  psát  $\delta P(\varphi_1, k_f, t)$ .

Uvažujme nejdříve poruchu konstantní v daném časovém intervalu.

Pro ni jsme, v případě přechodu mezi dvěma diskretními stavy, obdrželi výsledek (30), který zůstává v platnosti i pro spojitě se měnící koncové stavy. Podle (30) tudíž platí v aproximaci 1. řádu

$$|\langle \varphi(\beta, E) | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\langle \varphi(\beta, E) | W | \varphi_1 \rangle|^2 F\left(t, \frac{E - E_1}{\hbar}\right) \quad (56)$$

kde  $E$  je energie ve stavu  $\varphi(\beta, E)$ ,  $E_1$  je energie v počátečním stavu  $\varphi_1$  a funkce  $F$  je definována výrazem (31).

Pro pravděpodobnost  $\delta P(\varphi_1, k_f, t)$  tak dostáváme

$$P(\varphi_1, k_f, t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\substack{\beta \in \delta\beta_f \\ E \in \delta E_f}} |\langle \varphi(\beta, E) | \mathcal{W} | \varphi_1 \rangle|^2 \varphi(\beta, E) F(t, \frac{E-E_1}{\hbar}) \quad (57)$$

Jedna z možných reprezentací  $\delta$ -funkce (neúvedená v dod.C) je

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} \frac{\varepsilon}{\pi} \frac{\sin^2(x/\varepsilon)}{x^2}$$

Porovnáme-li ji s (31), vidíme, že pro velká  $t$  ( $1/\varepsilon = t$ ,  $t \rightarrow \infty$ ) se bude funkce  $F$  chovat jako  $\delta$ -funkce (při úpravě použijeme ještě (C10))

$$\lim_{t \rightarrow \infty} F(t, \frac{E-E_1}{\hbar}) = \pi t \delta(\frac{E-E_1}{2\hbar}) = 2\pi \hbar t \delta(E-E_1) \quad (58)$$

Z druhé strany, funkce  $|\langle \varphi(\beta, E) | \mathcal{W} | \varphi_1 \rangle|^2 \varphi(\beta, E)$  se obecně mění, v závislosti na  $E$ , mnohem pomaleji. Budeme předpokládat  $t$  tak velké, že v intervalu  $4\pi\hbar/t$  se středem v  $E=E_1$  (obr.56), bude možné pokládat tuto funkci za konstantní. Jestliže potom nahradíme  $F(t, (E-E_1)/\hbar)$  v (57)  $\delta$ -funkcí podle (58), můžeme výsledek integrace přes  $E$  napsat okamžitě (viz (C7)). Když navíc bude  $\delta\beta_f$  velmi malé, nemusíme provádět integraci přes  $\beta$  (v integrandu nahradíme  $\beta$  hodnotou  $\beta_f$ , vytkneme a  $\int_{\delta\beta_f} d\beta$  dá  $\delta\beta_f$ ). Tak nakonec obdržíme výsledek

$$\delta P(\varphi_1, k_f, t) = \delta\beta_f \frac{2\pi}{\hbar} t |\langle \varphi(\beta_f, E_f=E_1) | \mathcal{W} | \varphi_1 \rangle|^2 \varphi(\beta_f, E_f=E_1) \quad (58)$$

pro energii  $E_1$  z  $\delta E_f$

$$\delta P(\varphi_1, k_f, t) = 0 \quad \text{pro } E_1 \text{ vně intervalu } \delta E_f$$

Skutečnost, že časově konstantní porucha může indukovat pouze přechody do stavů se stejnou energií (přesněji: ještě  $\pm 2\pi\hbar/t$ ) jsme již zaznamenali (viz např. obr.56).

Pravděpodobnost (58) roste lineárně s časem. Vypočteme-li pravděpodobnost přechodu za jednotku času jako

$$\frac{d}{dt} \delta P(\varphi_1, k_f, t), \quad (59)$$

bude konstantní. Obdobně se spočte pravděpodobnost připadající na jednotkový interval proměnné  $\beta_f$ .

Hustota pravděpodobnosti přechodu za jednotku času a na jednotkový interval proměnné  $\beta_f$  tedy je ( $\langle \beta, E | \equiv \varphi(\beta, E)$ )

$$w(\varphi_1, k_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \beta_f, E_f=E_1 | \mathcal{W} | \varphi_1 \rangle|^2 \varphi(\beta_f, E_f=E_1) \quad (60)$$

Formule (60) byla odvozena pro časově konstantní poruchu. Její použití je tak široké, že ji E. Fermi nazval zlatým pravidlem. Později se začala uvádět jako Fermiho zlaté pravidlo.

Závisí-li  $W$  na čase periodicky podle (26), váže taková porucha mezi sebou stavy  $\psi_i$  a stavy z oblasti kontinua  $\psi(\beta_F, E_F)$ , jejichž energie  $E_F$  je blízká k  $E_i + \hbar\omega$  (absorpce; pro emisi  $E_i - \hbar\omega$ ). Vyjdeme-li z (35), dovede nás stejný postup k výsledku

$$w(\psi_i, k_F) = \frac{\pi}{2\hbar} |\langle \beta_F, E_F = E_i + \hbar\omega | W | \psi_i \rangle|^2 \rho(\beta_F, E_F = E_i + \hbar\omega) \quad (61)$$

Při praktických výpočtech pravděpodobnosti přechodu ze stavu  $\psi_i$  do stavu  $\psi_F$  se zpravidla začíná výpočtem maticového prvku  $\langle \psi_F | W | \psi_i \rangle$ . Často se totiž dá ukázat (většinou bez počítání, pouze na základě symetrie soustavy s využitím závěrů teorie grup), že tento maticový prvek je roven nule. Potom se říká, že přechod je zakázaný (ovšem v aproximaci 1. řádu; ve vyšších aproximacích může vycházet pravděpodobnost přechodu nenulová, vždy však bude menší než hodnoty vycházející v 1. řádu, takže např. příslušné čáry ve spektru budou slabé). Takovýmto způsobem se také získávají známá výběrová pravidla s nimiž se setkáme i v následující kapitole.