<u>Лекция 29. </u>Теория нестационарных возмущений

Согласно постулатам квантовой механики волновая функция любой квантовой

системы удовлетворяет временному уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=\hat{H}\Psi(x,t) \qquad (1)$$

где $\hat{H}$ -
гамильтониан системы. Если гамильтониан не зависит явно от времени,

то общее решение временного уравнения Шредингера (1) имеет вид

$$\Psi(x,t)=\sum_n C_n\varphi_n(x)\exp\left(-i\frac{\varepsilon_n t}{\hbar}\right) \qquad (2)$$

Так как решение (2) представляет собой разложение волновой функции системы

по собственным функциям оператора Гамильтона, то вероятность

$$w(E=\varepsilon_n)=\left|C_n(x)\exp\left(-i\frac{\varepsilon_n t}{\hbar}\right)\right|^2=\left|C_n(x)\right|^2$$

не зависит от времени.

Лекция 29 (2 слайд)

Совершенно другое положение имеет место в случае, когда гамильтониан явно

зависит от времени. Такие случаи реализуются, например, когда стационарные

квантовые системы подвергаются воздействию внешних возмущений, зависящих

от времени. В этом случае функция вида (2) уже не является решением временного

уравнения Шредингера (1) ни при каком выборе постоянных C_n. Поэтому

коэффициенты разложения волновой функции $\Psi(x,t)$ по любой полной системе

функций и, в частности, по собственным функциям гамильтониана системы

$$\Psi(x,t)=\sum_n A_n(t)\varphi_n(x) \qquad (5)$$

зависят от времени. Следовательно, вероятность обнаружить квантовую систему в

том

или ином квантовом состоянии зависит от времени.

Лекция 29 (3 слайд)

В частности, если в начальный момент времени квантовая система находилась в

состоянии $\varphi_k(x)$,

единственном входящем в некоторую полную систему функций,

она может быть

не зависящих от времени, то в последующие моменты времени

обнаружена в других состояниях $\varphi_n(x)$,

входящих в ту же систему. Таким образом,

при воздействии на квантовую систему зависящих от времени возмущений она может

совершать переходы из одних стационарных состояний в другие. При этом согласно

k -

основным принципам квантовой механики вероятность перехода из го состояния

n - t $A_n(t)$

в ое к моменту времени определяется квадратом модуля функции в (5).

Поэтому для вычисления вероятности перехода квантовой системы под действием

зависящего от времени возмущения необходимо найти ее волновую функцию из

уравнения (1) и разложить эту функцию по любой полной системе функций.

Лекция 29 (4 слайд)

Пусть зависимость гамильтониана от времени «слабая», то есть гамильтониан представим в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \qquad (6)$$

где от времени зависит только малое возмущение $\hat{V}(t)$.

Основная идея решения уравнения Шредингера (1) в этом случае заключается в следующем. Разложим волновую функцию квантовой системы $\Psi(x,t)$ по образующим полную систему собственным функциям $\varphi_n(x)$ не зависящего от времени гамильтониана $\hat{H}_0$

$$\Psi(x,t) = \sum_n B_n(t) \exp\left(-i\frac{\varepsilon_n t}{\hbar}\right)\varphi_n(x) \qquad (7)$$

где в отличии от (2) коэффициенты B_n

Лекция 29 (5 слайд)

Если возмущение мало, то коэффициенты B_n должны слабо зависеть от времени

и их можно искать в виде ряда по степеням возмущения

$$B_n(t) = C_n + O(V) + O(V^2) + O(V^3) + \dots \qquad (9)$$

причем «нулевое» слагаемое C_n определяется волновой функцией системы до

включения возмущения. Подставляя ряд (9) во временное уравнение (1) и собирая

слагаемые одного порядка малости по V, можно получить явные выражения для $B_n(t)$.

Такой метод нахождения функций $B_n(t)$ называется теорией нестационарных

возмущений. Приведем здесь только окончательные формулы этого метода

Лекция 29 (6 слайд)

Пусть до момента включения возмущения при $t = t_0$ квантовая система находилась в k-ом стационарном состоянии гамильтониана $\hat{H}_0$. Тогда $C_n = \delta_{nk}$, а функции $B_n(t)$ в первом порядке по возмущению V определяются соотношениями

$$B_{n\neq k}(t) = \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{kn}(t')e^{i\omega_{kn}t'}dt' \qquad (10)$$

$$B_{n=k}(t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{kk}(t')dt' \qquad (11)$$

Лекция 29 (7 слайд)

В формулах (10), (11) введены следующие обозначения, часть из которых уже использовалась ранее. Величины:

$$V_{kn}(t) = \int \varphi_k^{*}(x)\hat{V}(x,t)\varphi_n(x)dx$$

представляют собой матричные элементы оператора возмущения в базисе

собственных функций $\varphi_i(x)$, величина

$$\omega_{kn} = \frac{1}{\hbar}\left(\varepsilon_k - \varepsilon_n\right)$$

имеющая размерность «1/время», называется частотой перехода между стационарными состояниями k n.

Лекция 29 (8 слайд)

Согласно основным принципам квантовой механики квадраты модулей коэффициентов $B_n(t)$ определяют вероятности перехода из начального k-го собственного состояния гамильтониана $\hat{H}_0$) в конечное состояния ((n-е собственное состояние гамильтониана $\hat{H}_0$) к моменту времени t. Из формулы (10) следует, что вероятность перехода к моменту времени t

определяется соотношением

$$w_{k\to n} = \left|B_{n\neq k}(t)\right|^2 = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{t_0}^{t} V_{kn}(t')e^{i\omega_{kn}t'}dt'\right|^2 \qquad (12)$$

Лекция 29 (9 слайд)

Соотношение (12) позволяет вычислить вероятность перехода в первом порядке теории возмущений. Условием применимости этого соотношения является

условие малости суммарной вероятности перехода во все состояния $n \neq k$ (или близкая к единице вероятность остаться в состоянии k).

Подчеркнем, что в результате действия зависящих от времени возмущений квантовые системы оказываются в состояниях с неопределенными энергиями и, согласно принципам

квантовой механики при измерениях могут быть обнаружены в различных

состояниях

Лекция 29 (10 слайд)

Поскольку вероятность перехода – мала, то вычислять вероятность того, что

:

система останется в начальном состоянии как

$$w_{k \to k} = \left| B_{n=k}(t = t_1) \right|^2 = \left| 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} V_{kk}(t') dt' \right|^2 \qquad (14)$$

нельзя. Это связано с тем, что неучтенные в (14) слагаемые квадратичны по возмущению и при возведении (14) в квадрат дадут перекрестное слагаемое с единицей, также квадратичное по возмущению как и вероятность перехода (13).

Поэтому вероятность того, что система останется в исходном состоянии, следует вычислять из условия нормировки вероятностей всех возможных переходов, то есть как

$$w_{k \to k} = 1 - \sum_{k \neq n} w_{k \to n} \qquad (15)$$