<u>Лекция 31. </u>Адиабатические и внезапные возмущения

Исследуем общую формулу для вероятностей переходов на предмет зависимости

тности перехода
вероя

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

от времени действия возмущения. В формуле (1) величины $V_{kn}(t)$ чные
есть матри

элементы оператора возмущения в базисе собственных функций стационарного
ониана $\varphi_i(x)$
гамильт

$$V_{kn}(t) = \int \varphi_k^*(x)\hat{V}(x,t)\varphi_n(x)dx \qquad (2)$$

ω_{kn} - яниями k n:
частота перехода между стационарными состо и

$$\omega_{kn} = \frac{1}{\hbar}\left(\varepsilon_k - \varepsilon_n\right) \qquad (3)$$

Лекция 31 (2 слайд)

Фактор $e^{i\omega_{kn}t}$

определяется собственными энергиями или собственными частотами
едуемой квантовой системы, а возмущение $\hat{V}(t)$
иссл связано с внешним
воздействием

на систему. Поэтому эти зависимости, вообще говоря, могут быть абсолютно $\hat{V}(t)$ (
разными по характерным масштабам времени изменения. Пусть и,
следовательно,

V_{kn}) τ.
имеет характерный масштаб изменения, равный Характерный масштаб
$e^{i\omega_{kn}t}$ $\frac{1}{\omega_{kn}}$, орядку величины совпадает с
изменения экспоненты равен что по п

стемы.
характерным периодом движения рассматриваемой квантовой си

Лекция 31 (3 слайд)

Пусть выполнено условие

$$\tau \gg \frac{1}{\omega_{kn}} \qquad (4)$$

(
такие возмущения принято называть адиабатическими). Очевидно, вероятности
ереходов в этом случае будут малы. Это связано с тем, что при
квантовых п
$V_{kn}(t)$ егралом в формуле (1) комплексная экспонента
плавной функции под инт
$e^{i\omega_{kn}t}$
овать, дав одинаковые по модулю, но
успевает много-много раз проосциллир
оторый в этом случае
положительные и отрицательные вклады в интеграл (1), к
ктически
будет мал. Поэтому в случае адиабатических возмущений переходы пра
не происходят.

Лекция 31 (4 слайд)

Внезапные возмущения.

$$\tau \ll \frac{1}{\omega_{kn}} \qquad (6)$$

В этом случае функция $e^{i\omega_{kn}t}$

не успевает измениться в той характерной области,
которой «набирается» интеграл. Поэтому эта функция является, фактически
в
вынесена из под интеграла. Его модуль равен единице,
множителем и может быть
ехода в этом случае дает
поэтому формула для вероятности пер

$$w_{kn} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_{-\infty}^{+\infty} dt V_{kn}\right|^2 \approx \frac{|V|^2 \tau^2}{\hbar^2} \qquad (7)$$

Обратим внимание на то, что в случае внезапных возмущений вероятность

перехода

ависит от разности энергий состояний.

не з

Лекция 31 (5 слайд)

Еще один случай, когда возможно простое решение нестационарной задачи (кроме случая малых возмущений) – это случай внезапно включающихся возмущений, то есть возмущений, которые включаются за очень короткое время и далее от времени не зависят. Пусть до момента времени $t=0$ квантовая система описывалась независящим от времени гамильтонианом $\hat{H}_0$ и находилась в k-ом стационарном состоянии $\varphi_k(x)$ этого гамильтониана, то есть до этого момента времени волновая функция системы определялась одним слагаемым общего решения временного уравнения Шредингера

$$\Psi_0(x,t<0)=\varphi_k(x)\exp\left(-i\frac{\varepsilon_k t}{\hbar}\right) \qquad (8)$$

Лекция 31 (6 слайд)

Далее, пусть в момент времени $t = 0$ $\hat{V}$ мгновенно включается возмущение (алое), которое само от времени не зависит. Таким образом, после необязательно м овая функция $\Psi(x,t)$ включения возмущения волн удовлетворяет уравнению $\hat{H}_0 + \hat{V}$ Шредингера с гамильтонианом

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = \left(\hat{H}_0 + \hat{V}\right)\Psi(x,t) \qquad (9)$$

Так как гамильтониан $\hat{H}_0 + \hat{V}$ от времени не зависит, общее решение уравнения Шредингера имеет вид

$$\Psi(x, t > 0) = \sum_n C_n \psi_n(x) \exp\left(-i \frac{E_n t}{\hbar}\right) \qquad (10)$$

Лекция 31 (7 слайд)

но в формулу (10) входят собственные функции $\psi_n(x)$ и собственные значения E_n гамильтониана $\hat{H}_0+\hat{V}$, а коэффициенты C_n определяют вероятность обнаружить квантовую систему в n-ом стационарном состоянии гамильтониана $\hat{H}_0+\hat{V}$ и, следовательно, определяют вероятность перехода из k-го собственного состояния гамильтониана $\hat{H}_0$ в n-ое собственное состояние гамильтониана $\hat{H}_0+\hat{V}$. Так как возмущение включается мгновенно, то за время включения волновая функция системы не успевает измениться, и, следовательно, функция $\Psi(x,t=0)=\varphi_k(x)$ является начальным условием для решения (10). Поэтому в момент времени $t=0$ справедливо равенство для волновой функции квантовой системы

$$\Psi_0(x,t=0)=\Psi(x,t=0) \qquad (11)$$

и, следовательно,

$$\varphi_k(x)=\sum_n C_n\psi_n(x) \qquad (12)$$

Лекция 31 (8 слайд)

Умножая правую и левую часть равенство (12) на функцию $\psi_m^*(x)$

и интегрируя,

ении возмущения

найдем вероятности переходов при мгновенном включ

$$w_{k\to n} = \left|\int \psi_n^{\ *}(x)\varphi_k(x)dx\right|^2 \qquad (13)$$

Из этого соотношения следует, что вероятность перехода под действием внезапных

возмущений определяется интегралами перекрытия собственных функций

возмущенного и невозмущенного гамильтонианов. Отметим, что в отличие

естационарной теории возмущений оператор $\hat{V}$

от формул н

вошел в конечное

бственные функции оператора $H_0 + \hat{V}$.

выражение неявно, через со

Кроме того,

спользовалась малость возмущения

поскольку при выводе формулы (13) не и

(

оятности переходов,

использовалась только мгновенность его включения), вер

вычисленные согласно формуле (13) могут быть сравнимыми с единицей

Лекция 31 (9 слайд)

Рассмотрим пример. Ядро атома трития ^3H, находившегося в основном состоянии ^3H - испытывает β- распад. Остаточным ядром является ^3He. Считая, что распад происходит мгновенно и вылетевший электрон не взаимодействует с оставшимся атомным электроном, найти вероятность того, что последний будет находится на втором энергетическом уровне водородоподобного иона $^3He^+$.

При β - распаде ядра его заряд увеличивается на единицу, что эквивалентно мгновенному включению возмущения $\hat{V} = e^2 / r$. Так как по условию задачи распад происходит за бесконечно малое время, для вычисления вероятности перехода можно воспользоваться формулой (13)

$$w_{0\to1} = \left| \int \psi_1^*(\vec{r}) \varphi_0(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2 \qquad (14)$$

где в качестве $\varphi_0(\vec{r})$ следует взять волновую функцию электрона в основном состоянии атома трития (заряд ядра которого равен e), в качестве $\psi_1(\vec{r})$, волновую функцию электрона, находящегося на втором энергетическом уровне водородоподобного иона ^3He (заряд ядра $2e$).

Лекция 31 (10 слайд)

Второй энергетический уровень водородоподобного иона является четырехкратно вырожденным, поскольку ему отвечают одна волновая функция с моментом, равным нулю (s - состояние), и три волновых функции p - состояний, отличающихся магнитным квантовым числом m.

Очевидно, вероятности перехода в p - состояния равны нулю, так как интеграл (14) для таких переходов равен нулю из-за ортогональности сферических функций.

Поэтому в условиях данной задачи возможен переход только в s - состояние.