# 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 čase 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

$$\mathcal{H}_0 \varphi_n = E_n \varphi_n \tag{1}$$

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 $\mathcal{W}(t)$. Výsledný hamiltonián pak je

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

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

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

Energie reprezentovaná operátorem $\mathcal{W}(t)$ 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 $\mathcal{W}(t)$, 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)

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

která má s počáteční podmínkou

$$\psi(t=0) = \varphi_i \tag{4}$$

jediné řešení.

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

$$P_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \psi(t) \rangle|^2 \equiv |\int \varphi_f^* \psi(t) d\tau|^2 \tag{5}$$

K výpočtu $P_{if}(t)$ 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 mocninné řady v $\lambda$ a vypočteme explicitně $\psi(t)$ i $P_{if}(t)$ 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

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

$$\psi(t) = \sum_k c_k(t) \varphi_k \tag{6}$$

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

$$c_k(t) = \langle \varphi_k | \psi(t) \rangle \tag{7}$$

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

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

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

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

obdržíme soustavu rovnic

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