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 φ_f je (viz (IV.73))

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

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 λ a vypočteme explicitně $\psi(t)$ i $P_{if}(t)$ v přiblížení 1. řádu (vzhledem k λ). 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 φ_n^* a zintegrujeme přes celý prostor proměnných ve funkcích φ (provedeme tím vlastně projekci obou stran rovnice (3) na stav φ_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

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

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

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

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

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

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

$$i\hbar\, e^{-iE_n t/\hbar} \frac{d}{dt} b_n(t) + E_n b_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar} =$$

$$= E_n b_n(t)\, e^{-iE_n t/\hbar} + \sum_k \lambda W_{nk} b_k(t)\, e^{-iE_k t/\hbar}$$

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

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

máme

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

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

Rozvedeme nyní $b_n(t)$ v řadu podle mocnin λ

$$b_n(t) = b_n^{(o)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \ldots \quad . \tag{15}$$

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

(a) pro $r = 0$ dostaneme

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

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

(b) pro $r \neq 0$ získáme

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

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 $b_n^{(o)}$ vybranými tak, aby byla splněna počáteční podmínka (4).

Řešení v aproximaci 1.řádu

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

$$b_n(t=0) = \delta_{ni} \tag{18}$$

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

$$b_n^{(o)}(t=0) = \delta_{ni} \tag{19a}$$

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

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

$$b_n^{(o)}(t) = \delta_{ni} \tag{20}$$

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

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

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

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

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 λ).

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

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

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

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

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

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

3. Dva významné speciální případy: periodická a konstantní porucha

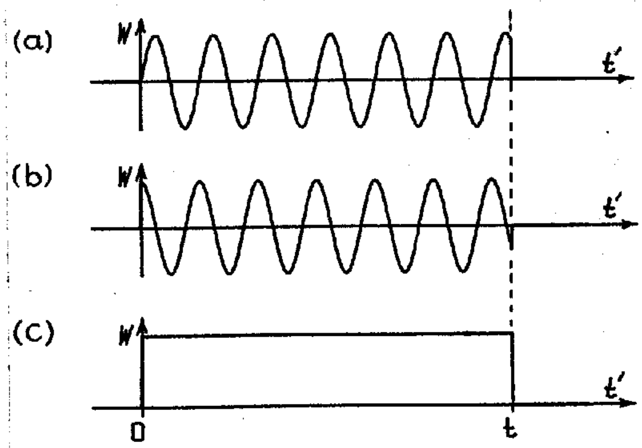
Budeme nyní aplikovat předchozí výsledky na dva konkrétní typy poruch: poruchu periodickou v čase a její speciální případ- poruchu v daném časovém intervalu konstantní.

3.1) Aplikace obecných formulí

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

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

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



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 ω 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

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

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

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

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