

9 NESTACIONÁRNA PORUCHOVÁ METÓDA

9.1 ÚVOD

Typickou úlohou, ktorú rieši nestacionárna poruchová metóda, je interakcia atómu s pulzom žiarenia. Pred dopadom žiarenia je atóm v určitom, povedzme m -tom, stacionárnom stave a zaujímame sa o to, s akou pravdepodobnosťou ho po prechode pulzu žiarenia nájdeme v k -tom stacionárnom stave. Stacionárne stavy atómu pred dopadom žiarenia i po prechode pulzu okolo atómu sú vlastnými stavmi hamiltoniánu H_0 . Interakcia žiarenia s atómom je opísaná „poruchou“ $H'(t)$ a celkový hamiltonián počas interakcie je

$$H(t) = H_0 + H'(t) \quad (1)$$

Nestacionárna poruchová metóda je postupom pre určenie príslušného riešenia časovej Schrödingerovej rovnice s hamiltoniánom tvaru (1) v situáciách, keď člen $H'(t)$ možno považovať v istom zmysle za malú korekciu k H_0 .

9.2 FORMALIZMUS NESTACIONÁRNEJ PORUCHOVEJ METÓDY

Riešenie časovej Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H(t)\psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

s hamiltoniánom (1.1) budeme hľadať v takom tvare, aby porucha $H'(t)$ mohla opisovať priamo odchýlky od riešenia časovej SchR v neprítomnosti poruchy. O rovnici

$$i\hbar \frac{\partial \psi_0(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = H_0 \psi_0(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

už vieme, že jej riešenie možno písať všeobecne v tvare

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (3)$$

kde koeficienty a_n nezávisia od času a E_n , $\Phi_n(\mathbf{r})$ sú vlastné hodnoty a vlastné funkcie hamiltoniánu H_0 :

$$H_0 \Phi_n(\mathbf{r}) = E_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Nestacionárna poruchová metóda vychádza z toho, že riešenie rovnice (1) hľadáme v tvare

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (5)$$

pričom koeficienty $a_n(t)$ už môžu závisieť od času. Takýto postup je z matematického hľadiska umožnený tým, že funkcie $\{\Phi_n(\mathbf{r})\}$ tvoria úplný systém a „každú“ funkciu $\psi(\mathbf{r}, t)$ v danom čase t môžeme rozložiť do radu

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n b_n(t) \Phi_n(\mathbf{r})$$

Hľadanie riešenia v tvare (5) má však tú výhodu, že za časovú závislosť koeficientov $a_n(t)$ je zodpovedná iba porucha: ak ju „vypneme“, prechádza časová SchR (2) na rovnicu (3) a koeficienty $a_n(t)$ prestanú závisieť od času.

Fyzikálna interpretácia (5) je tiež jednoduchá, výrazy

$$P_n(t) = |a_n(t)|^2 e^{-iE_n t/\hbar} = |a_n(t)|^2 \quad (6)$$

odpovedajú pravdepodobnostiam nájsť v čase t sústavu v stave Φ_n .

Poznamenajme ešte, že zápis riešenia vo všeobecnom tvare (5) môžeme použiť vždy, teda aj vtedy, ak porucha nie je malá. Jedinou podmienkou možnosti zápisu riešenia v tvare (5) je úplnosť systému funkcií $\Phi_n(\mathbf{r})$, a tú predpokladáme. Ak však porucha nie je malá, rovnice pre koeficienty $a_n(t)$ nemožno riešiť jednoduchými poruchovými metódami. V prípade malej poruchy sú koeficienty $a_n(t)$ tiež vhodnými základnými pojmami pre fenomenologický opis sústavy. Ak napríklad uvažujeme atóm v poli elektromagnetickej vlny a v danom čase t platí $|a_0(t)|^2 = 0,9$; $|a_1(t)|^2 = 0,1$ potom hovoríme, že s pravdepodobnosťou 90 % sa atóm nachádza v základnom a s pravdepodobnosťou 10 % v prvom excitovanom stave.

Budeme teraz hľadať riešenie rovnice (1) spĺňajúce začiatočnú podmienku

$$\psi(\mathbf{r}, t_0) = \Phi(\mathbf{r}) \quad (7)$$

V ďalšom, pre jednoduchosť, zvolíme $t_0 = 0$. Treba si pritom uvedomiť, že funkcie $\Phi_n(\mathbf{r})$ tvoria úplný systém, preto funkciu $\Phi(\mathbf{r})$ udávajúcu začiatočný stav možno rozvinúť do radu

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (8)$$

Znamená to, že koeficienty $a_n(t)$ v rozvoji (5) musia spĺňať začiatočnú podmienku

$$a_n(t=0) = c_n \quad (9)$$

Rovnice pre $a_n(t)$ nájdeme ľahko, ak rozvoj (5) dosadíme do SchR (1). Potom štandardným spôsobom vynásobíme získanú rovnicu funkciou $\Phi_n^*(\mathbf{r}, t)$, preintegru-

jeme cez \mathbf{r} , využijeme ortonormovanosť systému $\{\Phi_n\}$ a dostaneme

$$\dot{a}_k(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_n H'_{kn}(t) a_n(t) e^{i\omega_{kn}t}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (10)$$

kde bodka označuje deriváciu podľa času, pričom

$$\omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar$$

$$H'_{kn}(t) = \int \Phi_k^*(\mathbf{r}) H'(\mathbf{r}, t) \Phi_n(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (11)$$

Doteraz sme neurobili žiadne priblíženia a systém rovníc (10) je úplne ekvivalentný pôvodnej SchR (1).

Systém rovníc (10) spolu so začiatočnými podmienkami (9) je, ako sa ľahko možno presvedčiť, ekvivalentný systému integrálnych rovníc

$$a_k(t) = c_k + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int_0^t H'_{km}(t') a_m(t') e^{i\omega_{km}t'} dt' \quad (12)$$

Pri riešení systému (12) poruchovou metódou postupujeme podobne ako v šiestej kapitole. Namiesto (1.1) zapíšeme

$$H = H_0 + \lambda H'(t) \quad (13)$$

a rozvineme koeficienty $a_k(t)$ do radu

$$a_k(t) = a_k^{(0)}(t) + \lambda a_k^{(1)}(t) + \lambda^2 a_k^{(2)}(t) + \dots \quad (14)$$

Tento rad dosadíme do (12) (kde namiesto H'_{km} bude teraz $\lambda H'_{km}$), porovnáme koeficienty pri jednotlivých mocninách λ a po skončení výpočtu položíme $\lambda = 1$. S využitím (9) potom dostaneme

$$a_k^{(0)}(t) = c_k$$

$$a_k^{(n)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int_0^t H'_{km}(t') a_m^{(n-1)}(t') e^{i\omega_{km}t'} dt' \quad (15)$$

Koeficient $a_k^{(0)}(t)$ nezávisí od času a argument t môžeme vynechať. Ak je porucha „slabá“, stačí sa často obmedziť len na prvý koeficient $a_k^{(1)}(t)$ a zanedbať vyššie priblíženia. Dostaneme vyjadrenie

$$a_k(t) = c_k + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int_0^t H'_{km}(t') c_m e^{i\omega_{km}t'} dt' \quad (16)$$

9.3 PRECHODY POD VPLYVOM PERIODICKEJ PORUCHY

Z praktického hľadiska dôležitý prípad poruchy predstavuje hamiltonián

$$H'(t) = H'(e^{i\alpha t} + e^{-i\alpha t}) \quad (1)$$

kde H' na pravej strane už nezávisí od času. Aby sme situáciu zbytočne nekomplikovali, budeme najprv skúmať sústavu, ktorej neporušený hamiltonián má len dva vlastné stavy Φ_0, Φ_1 , prislúchajúce k vlastným hodnotám E_0, E_1 . Predpokladáme, že sústava sa v čase $t_0 = 0$ nachádza v stave Φ_0 a zaujímame sa o pravdepodobnosť prechodu za čas t do stavu Φ_1 . Podľa formalizmu z predchádzajúceho článku bude amplitúda pravdepodobnosti hľadaného prechodu v prvom ráde poruchovej teórie daná vzťahom (2.16)

$$a_1(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t H'_{10}(e^{i\alpha\alpha'} + e^{-i\alpha\alpha'}) e^{i\omega_0 t'} dt' \quad (2)$$

kde

$$\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar \quad (3)$$

je bohrovská kruhová frekvencia prechodu $\Phi_0 \leftrightarrow \Phi_1$.

Integrácia v (2) je triviálna:

$$a_1(t) = \frac{-1}{\hbar} H'_{10} \left\{ \frac{1}{\omega + \omega_{10}} (e^{i(\omega + \omega_{10})t} - 1) + \frac{1}{-\omega + \omega_{10}} (e^{i(-\omega + \omega_{10})t} - 1) \right\} \quad (4)$$

Skôr, ako budeme formálne pokračovať ďalej, všimneme si kvalitatívny charakter riešenia. Ak sústava má prejsť zo základného do excitovaného stavu, musí pohltiť energiu $\Delta E = E_1 - E_0$. Podľa elementárnej kvantovej mechaniky (v analógii s Bohrovými postulátmi) očakávame, že to bude možné vtedy, ak frekvencia poruchy ω bude rovná bohrovej frekvencii ω_{10} . Výraz (4) by preto mal mať nejakú výraznú štruktúru v okolí bodu $\omega = \omega_{10}$. Naozaj je to tak. Druhý z členov v zložených zátvorkách má pre malé $\Delta\omega = \omega_{10} - \omega$ tvar

$$\frac{1}{\Delta\omega} (e^{i\Delta\omega t} - 1) \approx \frac{1}{\Delta\omega} (1 - i\Delta\omega t - 1) = -it$$

teda rastie lineárne s časom, kým prvý člen pri ľubovoľnom ω je rýchlo oscilujúcou a v absolútnej hodnote ohraničenou funkciou času. V okolí $\omega_{10} \approx \omega$, kde očakávame prechody $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$, druhý člen zjavne dominuje, obmedzíme sa preto v ďalšej diskusii iba naň. V tomto priblížení pre pravdepodobnosť prechodu za čas t dostaneme

$$P_{10}(t) = |a_1(t)|^2 = \frac{|H'_{10}|^2 \sin^2[(\omega_{10} - \omega)t/2]}{\hbar^2 [(\omega_{10} - \omega)/2]^2} \quad (5)$$

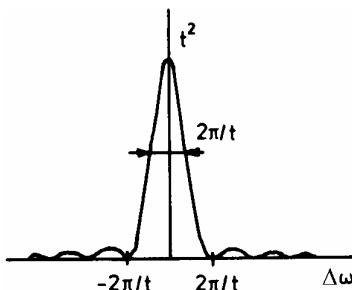
Všimnime si bližšie úlohu faktoru

$$f(\Delta\omega, t) = \frac{\sin^2(\Delta\omega t/2)}{(\Delta\omega/2)^2} \quad (6)$$

vo vzťahu (5), ktorý je ako funkcia $\Delta\omega$ pri konštantnom t znázornený na obr. 9.1. Na obrázku si treba všimnúť ostré maximum v okolí $\Delta\omega = 0$. S rastúcim t výška

tohto maxima rastie ako t^2 a jeho charakteristická šírka klesá ako $2\pi/t$. Znamená to, že významné prechody $\Phi_0 \rightarrow \Phi_1$ nastanú, iba ak platí

$$|\Delta\omega| = \left| \frac{E_1 - E_0}{\hbar} - \omega \right| \leq \frac{2\pi}{t} \quad (7)$$



Obr. 9.1

Vidno teda, že bohrovská podmienka prechodu $\omega = \omega_{10}$ je splnená len s presnosťou $|\Delta\omega| < 2\pi/t$. Ak $|\Delta\omega| \ll 2\pi/t$, potom pre pravdepodobnosť prechodu dostaneme priblíženie

$$P_{10}(t) = \frac{|H'_{10}|^2}{\hbar^2} t^2 \quad (8)$$

Tento výsledok bol získaný v prvom ráde poruchovej metódy, ktorú ale možno použiť len vtedy, ak koeficient $a_1(t)$ je malý v porovnaní s jednotkou. Preto výsledok (8) môže platiť len pre také hodnoty t , pre ktoré

$$|H'_{10}|^2 t^2 / \hbar^2 \ll 1$$

a teda

$$t \ll \hbar / |H'_{10}| \quad (9)$$

Pri odvodení (8) sme v (4) zanedbali prvý člen na pravej strane v porovnaní s druhým. Veľkosť prvého člena je rádové $1/\omega_{10}$ (pri $\omega \approx \omega_{10}$) a veľkosť druhého člena je rádovo t . Preto (8) platí len vtedy, ak $1/\omega_{10} \ll t$. Takto dostaneme pre platnosť (8) podmienku

$$\hbar / (E_1 - E_0) \ll t \ll \hbar / |H'_{10}| \quad (10)$$

Ak má vôbec existovať nejaký čas t , pri ktorom sú priblíženia vedúce k (8) použiteľné, potom z (10) dostaneme podmienku

$$|H'_{10}| \ll E_1 - E_0 \quad (11)$$

Porucha teda musí byť „dostatočne malá“. Podrobnejšie sa s otázkami použiteľnosti poruchovej metódy nebudeme zaoberať.

V aplikáciách sa s ideálnou situáciou, s ktorou sme sa doteraz zaoberali, nestretávame. Uveďme dva príklady realistickejších situácií.

Pulz žiarenia dopadá na atóm v základnom stave a zaujímame sa o to, s akou pravdepodobnosťou prejde atóm do istého excitovaného stavu. Vzhľadom na to, že pulz žiarenia je reprezentovaný istým vlnovým balíkom s konečnými rozmermi, je priblíženie monochromatickej vlny nerealistické. Musíme teda zovšeobecniť predchádzajúce úvahy na prípad poruchy $H'(t)$, ktorá nie je monochromatická. S touto otázkou sa budeme podrobne zaoberať v nasledujúcom článku.

1. Pulz žiarenia dopadá na atóm v základnom stave a zaujímame sa o pravdepodobnosť ionizácie atómu. Vyletujúci elektrón je registrovaný detektorom, ktorý určí energiu elektrónu s presnosťou ΔE a priestorový uhol, pod ktorým elektrón vyletí, s presnosťou $\Delta\Omega$. Nezaujímame sa teda o prechod z daného začiatočného stavu do jediného koncového stavu, ale o prechod do istej skupiny stavov. V tomto prípade odchýlky poruchy od monochromatickosti obvykle nie sú podstatné, preto predchádzajúci postup môžeme použiť len s malými modifikáciami. Jednotlivé koncové stavy označíme indexom k a skupinu koncových stavov, špecifikovanú detektorom, označíme S . Pravdepodobnosť prechodu zo začiatočného stavu 0 do skupiny stavov S je daná súčtom¹²⁵ výrazov typu (5).

Dostaneme tak

$$P_{S0}(t) = \sum_{k \in S} \frac{|H'_{10}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_{k0} - \omega)t/2]}{[(\omega_{k0} - \omega)/2]^2} \quad (12)$$

kde

$$\omega_{k0} = (E_k - E_0)/\hbar$$

V sume (12) budú prispievať najmä stavy, pre ktoré hodnota $\omega_{k0} - \omega$ leží v oblasti maxima funkcie $f(\Delta\omega, t)$. Ak rozdiely energií uvažovaných koncových stavov sú oveľa menšie ako $2\pi\hbar/t$, potom v oblasti spomínaného maxima leží veľmi veľa uvažovaných koncových stavov a vo výraze (12) je možné sumáciu nahradiť integráciou.

Ak označíme $\rho(E_k)dE_k$ počet stavov s energiou v intervale $(E_k, E_k + dE_k)$, dostaneme

$$P_{S0}(t) = \int_S dE_k \rho(E_k) \frac{|H'_{k0}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_{k0} - \omega)t/2]}{[(\omega_{k0} - \omega)/2]^2} \quad (13)$$

¹²⁵ Aby sme úvahy zbytočne nekomplikovali, budeme predpokladať, že koncové stavy elektrónu sú opisované rovinnými vlnami normovanými na konečný objem, takže energetické spektrum je diskrétné.

Vo vzťahu (13) sme symbolicky označili, že integrujeme cez energie stavov uvažovanej skupiny S . Označme energiu, pri ktorej nadobúda funkcia $f(\Delta\omega, t)$ vo vzťahu (13) maximum ako E_1 , teda

$$E_1 = E_0 + \hbar\omega \quad (14)$$

Predpokladajme, že energia E_1 spadá do intervalu energií, cez ktoré v (13) integrujeme. Ak čas t je dostatočne veľký, potom maximum funkcie $f(\Delta\omega, t)$ je veľmi ostré. Výraz $\rho(E_k)|H'_{10}|^2$ sa potom (ako funkcia energie) mení v oblasti tohto maxima obvykle len veľmi málo. Pri výpočte integrálu ho preto možno nahradiť konštantou – napríklad jeho hodnotou v bode E_1 a zostávajúci integrál sa potom dá metódami funkcií komplexnej premennej vypočítať explicitne.¹²⁶ Dostaneme tak:

$$\begin{aligned} P_{S_0}(t) &= \rho(E_1) \frac{|H'_{10}|^2}{\hbar^2} \int_S dE_k \frac{\sin^2[(\omega_{k_0} - \omega)t/2]}{[(\omega_{k_0} - \omega)/2]^2} = \\ &= \rho(E_1) \frac{|H'_{10}|^2}{\hbar^2} 2\pi t \hbar = \frac{2\pi t}{\hbar} |H'_{10}|^2 \rho(E_1) \end{aligned} \quad (15)$$

Naopak, ak energia E_1 neleží v intervale, cez ktorý v (13) integrujeme, môžeme v našom priblížení položiť integrál rovný nule.

Všimnime si, že presne rovnaké výsledky dostaneme, ak vo vzťahu (13) v pod-integrálnom výraze nahradíme

$$\frac{\sin^2[(\omega_{k_0} - \omega)t/2]}{[(\omega_{k_0} - \omega)/2]^2} \rightarrow 2\pi t \delta(\omega_{k_0} - \omega) \quad (16)$$

Zhrňme teda: pravdepodobnosť prechodu do niektorého zo stavov v okolí hladiny E_1 , pre ktorú je (s presnosťou $2\pi\hbar/t$) splnený vzťah (14), je daná vzťahom (15); rastie teda lineárne s časom. Zavádzame preto užitočný pojem pravdepodobnosti prechodu za jednotku času, pre ktorú platí

$$W_{10}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{10}|^2 \rho(E_1) \quad (17)$$

pričom $\rho(E_i)$ má význam hustoty stavov v E -priestore v okolí hladiny E_1 .

Niekedy sa kvôli jednoduchosti zvykne formálne hovoriť i v prípade kvázispojitého alebo spojitého spektra o pravdepodobnosti prechodu za jednotku času do konkrétneho stavu a používa sa formálny výraz (využíva sa vzťah (16))

$$W_{k_0}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{10}|^2 \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \quad (18)$$

¹²⁶ Potrebujeme iba výsledok $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$

Samozrejme, tento vzťah má význam len po preintegrovaní typu

$$W_{10}(t) = \int_S dE_k \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{k0}|^2 \delta(E_k - E_0 - \hbar\omega) \rho(E_k)$$

čím dostaneme vzťah (17). Vzťah (18) má mimoriadne časté použitie v aplikáciách. Niekedy sa nazýva „Fermiho zlaté pravidlo“.

V doterajších úvahách v tomto článku sme sa zaoberali prechodom sústavy z nižšej energetickej hladiny na vyššiu. Celkom analogické úvahy by sme však mohli vykonať i pre prechod sústavy z vyššej hladiny na nižšiu. Po formálnej stránke by bol rozdiel iba v tom, že za také prechody by sa ukázal „zodpovedný“ prvý člen v hamiltoniáne (1). Analóg vzťahu (18) by zodpovedal napríklad situácii, v ktorej uvažujeme prechod elektrónu v tuhej látke z vyššieho energetického pásu do nižšieho. Pásový charakter spektra (obr. 9.2) zapríčiňuje, že koncový stav elektrónu nemôže byť experimentálne jednoznačne vymedzený. Pôjde vždy o prechod do nejakej skupiny stavov, pre ktorý by sme dostali formálny vzťah

$$W_{k1}(t) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{k1}|^2 \delta(E_k - E_1 - \hbar\omega) \quad (19)$$



Obr. 9.2

Fyzikálna interpretácia vzťahov (18) a (19) sa priam „ponúka“. V prípade (18) ide o absorpciu energetického kvanta $\hbar\omega$, kým v prípade (19) ide o jeho stimulovanú emisiu.

Pravda, takáto interpretácia nezodpovedá použitému formalizmu. Vonkajšia porucha je v tomto prístupe opísaná klasicky. Práve vzťahy (18) a (19) poukazujú na nedôslednosť takého prístupu a naznačujú potrebu použiť kvantový opis aj pre „vonkajší činiteľ“ (napríklad pre elektromagnetické pole).

9.4 STIMULOVANÁ EMISIA A ABSORPCIA

V tomto článku uvidíme kváziklasický výpočet pravdepodobnosti emisie a absorpcie fotónu pod vplyvom vonkajšej elektromagnetickej vlny. Aby sa zdôraznil rozdiel od samovoľného (spontánneho) procesu (ako je spontánny prechod z excitovanej hladiny na nižšiu emisiou fotónu), budeme hovoriť o stimulovanej emisii resp. absorpcii. Fyzikálna podstata problému bola už vlastne objasnená v predchádzajúcom článku.

Pravdepodobnosť stimulovaného prechodu bude zrejme úmerná intenzite dopadajúcej vlny a dobe pôsobenia. Skúmanú sústavu potom lepšie charakterizuje príslušný koeficient úmernosti, ktorý má význam pravdepodobnosti prechodu za jednotku času pri jednotkovej intenzite stimulujúcej vlny. V ďalšom si preto ukážeme, ako príslušný prepočet urobiť.

V realistickej situácii sa väčšinou jedná o prechody medzi diskretnými hladinami (teda nie medzi hladinami kvázispojitého spektra).

V tomto prípade musíme počítať s realistickou elektromagnetickou vlnou s istým spektrálnym rozložením (hoci úzkym).

Napriek tomu začneme so skúmaním monochromatickej poruchy, aby sme si jednoducho ukázali, že v prvom priblížení stačí uvažovať vplyv elektrickej zložky. Potom nájdeme pravdepodobnosť prechodu v realistickom prípade vlny so spektrálnym rozložením a nakoniec urobíme prepočet na jednotkovú intenzitu.

Majme teda monochromatickú vlnu, ktorej zodpovedá intenzita elektrického poľa opísaná vzťahom

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E\mathbf{e}[\exp(i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \exp(-i\omega t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})] \quad (1)$$

kde \mathbf{e} je jednotkový vektor polarizácie.

Obmedzme sa pre jednoduchosť na prípad, keď vlnová dĺžka žiarenia je oveľa väčšia ako typický rozmer atómu. Pre viditeľné svetlo je táto podmienka splnená veľmi dobre, typická vlnová dĺžka je $5 \cdot 10^{-7}$ m, zatiaľ čo rozmery atómov sú rádovo 10^{-10} m. V takomto prípade sa intenzita poľa v rámci atómových vzdialeností mení len veľmi málo, a preto priestorovú závislosť vo vzťahu (1) možno zanedbať. Stačí uvažovať

$$\mathbf{E}(t) = E\mathbf{e}[\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)] \quad (2)$$

Priestorová hustota energie elektrického poľa (2) ustrednená v čase je¹²⁷

$$\omega = \frac{\overline{\mathbf{E}^2(t)} \varepsilon_0}{2} = E^2 \varepsilon_0 \quad (3)$$

¹²⁷ Použili sme známy vzťah $\overline{\cos^2(\omega t)} = \frac{1}{2}$.

V prípade rovinatej elektromagnetickej vlny je hustota energie pripadajúca na magnetické pole rovnaká a rovná (ak magnetické pole zapíšeme v tvare analogickom ku (2))

$$w = \frac{B^2}{\mu_0} \quad (4)$$

Hustota toku energie (množstvo energie pretečené jednotkovou plochou za jednotku času) zodpovedajúca uvažovanej elektromagnetickej vlny je teda

$$P = 2wc = 2E^2 \epsilon_0 c \quad (5)$$

Zo vzťahov (2) a (3) je tiež zrejmé, že vplyv magnetického poľa môžeme v našom prípade zanedbať. Vidno to z jednoduchej klasickej úvahy. Na elektrón s nábojom q pôsobí elektrické pole silou

$$qE$$

a magnetické pole silou

$$qvB$$

$$\epsilon_0 E^2 = \frac{B^2}{\mu_0}$$

kde v je typická rýchlosť elektrónu. Z (2) – (4) však dostávame

$$B = E \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} = E/c$$

a teda pre silu od magnetického poľa dostaneme

$$qEv/c \ll qE$$

v prípade nerelativistických rýchlostí.

Zhrňme teda, čo sme doteraz dostali.

Vplyv monochromatickej rovinatej vlny o kruhovej frekvencii ω , ktorej zodpovedá hustota prúdu energie (4), sa dá v uvažovanom priblížení nahradiť vplyvom periodického elektrického poľa (2).

Elektrické pole (2) môžeme vyjadriť pomocou skalárneho potenciálu

$$\mathbf{E}(t) = -\nabla \varphi(t), \quad \text{kde} \quad \varphi(t) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}E(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$$

Pretože interakciu s magnetickým poľom zanedbávame, môžeme vektorový potenciál dať rovný nule. Podľa predchádzajúcej kapitoly môžeme teda interakciu s dopadajúcou elektromagnetickou vlnou v použitom priblížení opísať poruchovým hamiltoniánom

$$H'(t) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}qE(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (6)$$

To je hamiltonián typu (3.1), s ktorým sme sa podrobne zaoberali v predchádzajúcom článku. V praktických prípadoch však dopadajúca vlna nebýva dostatočne monochromatická, aby sme mohli priamo použiť postupy z predchádzajúceho článku. Realistickejšiemu prípadu odpovedá skôr hamiltonián

$$H'(t) = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}qE(t) \quad (7)$$

kde funkcia $E(t)$ opisujúca časový priebeh póla je „približne monochromatická“. Prakticky to znamená, že ak ju vyjadríme v tvare Fourierovho integrálu

$$E(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (8)$$

potom jej Fourierov obraz $\tilde{E}(\omega)$ má výrazné maximum v okolí istej kruhovej frekvencie ω_0 . Poznamenajme, že vhodným výberom začiatočného okamihu $t = 0$ možno vždy dosiahnuť, aby funkcia $\tilde{E}(\omega)$ bola reálna, čo v ďalšom budeme predpokladať.¹²⁸ Pretože funkcia $E(t)$ je reálna, platí $\tilde{E}(\omega) = \tilde{E}(-\omega)$.

Aby sme technicky výpočet ešte zjednodušili, predpokladajme, že pole bolo zapnuté iba po dobu T , t. j.

$$E(t) = 0 \quad \text{pre } t < 0 \quad \text{resp. } t > T \quad (9)$$

V prípade, že čas T je podstatne väčší ako perióda zodpovedajúca frekvencii ω_0 , tento dodatočný predpoklad neovplyvní podstatne charakter spektrálneho rozloženia funkcie $E(t)$.

Zaujímame sa teraz pre konkrétnosť o absorpciu, t. j. prechod medzi hladinami $m \rightarrow k$, kde $E_k > E_m$. Podľa všeobecného formalizmu z článku 9.2 bude amplitúda pravdepodobnosti prechodu pod vplyvom uvažovaného pulzu daná vzťahom (v prvom priblížení)

$$a_{km} = \frac{-1}{i\hbar} \int_0^T H'_{km}(t) e^{i\omega_{km}t} dt = -\frac{\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km}}{i\hbar} \int_0^T E(t) e^{i\omega_{km}t} dt \quad (10)$$

kde

$$\mathbf{d}_{km} = \int q\Phi_n^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \Phi_m(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (11)$$

je elektrický dipólový moment prechodu. Vzhľadom na predpoklad (9) môžeme písať

$$a_{km} = \frac{-1}{i\hbar} \mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km} \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i\omega_{km}t} dt \quad (12)$$

¹²⁸ Poznamenajme, že v literatúre sa používajú často iné konvencie vo vyjadrení Fourierovho integrálu, líšiac sa od (8) faktormi typu $2, 2\pi$ a pod. V technickej praxi býva tiež zvykom integrovať len cez kladné frekvencie. Ak využijeme vzťah $\tilde{E}(\omega) = \tilde{E}(-\omega)$, dostaneme namiesto (8) vyjadrenie $E(t) = 1/\pi \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}(\omega) \cos \omega t d\omega$. Rozličné konvencie sa potom prejavajú aj v odlišnej definícii spektrálnej hustoty prúdu energie a tým aj vo výsledných koeficientoch stimulovanej emisie a absorpcie.

Z vlastností Fourierových integrálov je zrejmé, že integrál v (12) je práve rovný $\tilde{E}(\omega_{km})$, ak spektrálny rozklad píšeme v tvare danom rovnicou (8). V tomto prípade totiž platí

$$\tilde{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} E(t)e^{i\omega_{km}t} dt \quad (13)$$

Vidíme teda, že dostávame, čo sme čakali: stimulovaná absorpcia je možná iba vtedy, ak v dopadajúcej vlne je nenulová komponenta, zodpovedajúca kruhovej frekvencii ω_{km} danej vzťahom

$$\hbar\omega_{km} = E_k - E_m \quad (14)$$

Pravdepodobnosť absorpcie pod vplyvy uvažovaného δ -pulzu nájdeme ľahko

$$P_{km} = |a_{km}|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km}| \tilde{E}^2(\omega_{km}) \quad (15)$$

Koeficient P_{km} udáva pravdepodobnosť prechodu za celý čas trvania pulzu. Často však treba poznať pravdepodobnosť prechodu za jednotku času pri jednotkovej spektrálnej hustote prúdu energie žiarenia dopadajúceho na atóm. Upresnenie „spektrálny“ je tu preto, že pre prechod z hladiny E_k sú závažné iba zložky žiarenia s kruhovou frekvenciou $\omega = (E_k - E_m)/\hbar$ a spektrálna hustota prúdu je hustota pripadajúca na jednotkový interval $\Delta\omega$. Schematicky môžeme pre spektrálnu hustotu prúdu energie $\rho(\omega)$ písať

$$\rho(\omega) = \frac{\Delta W(\omega)}{T\Delta\omega} \quad (16)$$

kde T je čas trvania pulzu a ΔW je energia žiarenia z intervalu $(\omega, \omega + \Delta\omega)$, pripadajúca na celý pulz trvajúci T a na jednotkovú plochu kolmú na smer vlny.

Koeficientom absorpcie potom nazveme pravdepodobnosť prechodu za jednotku času pri jednotkovej spektrálnej hustote prúdu energie žiarenia, teda výraz

$$B_{km}^{\text{abs}} = \frac{P_{km}}{T\rho(\omega_{km})} \quad (17)$$

Ďalší výpočet bude mať trochu technický charakter, preto si najskôr uvedme jednoduchú rozmerovú úvahu. Očakávame, že spektrálna intenzita bude úmerná kvadrátu $\tilde{E}(\omega)$. Pretože rozmer intenzity podľa $E(\omega)$ je Vm^{-1} , podľa (13) je rozmer $[\tilde{E}(\omega)] = \text{Vsm}^{-1}$. Bude teda

$$[\tilde{E}^2(\omega)] = \text{V}^2\text{s}^2\text{m}^{-2}$$

Podľa (16) rozmer¹²⁹

$$T\rho(\omega) = \text{Jsm}^{-2} = \text{V}^2\text{Fsm}^{-2}$$

¹²⁹ Pripomeňme si, že energia kondenzátora je $CU^2/2$, preto $\text{J} = \text{V}^2\text{F}$.

Ak teda čakáme $\rho(\omega)T = \text{konšt } \tilde{E}^2(\omega)$ musí mať uvedená konštanta rozmer $\text{Fs}^{-1} = \text{F m}^{-1} \text{ m}^+ \text{ s}^{-1}$ čo je práve rozmer konštanty $\varepsilon_0 c$ ¹³⁰. Bude teda $\rho(\omega)T \approx \varepsilon_0 c \tilde{E}^2(\omega)$ a podľa (15) a (17) dostaneme

$$B_{km}^{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar^2 \varepsilon_0 c} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km}|^2$$

kde sme už uviedli aj správnu bezrozmernú konštantu 2π , ktorú, pravda, z rozmerových úvah nemôžeme odvodiť.

Prejdime teraz k technickým podrobnostiam výpočtu spektrálnej intenzity žiarenia.

Množstvo energie, ktoré pretečie za čas T jednotkovou plochou kolmou na smer šírenia vlny, je

$$W = c \varepsilon_0 \int_0^T E^2(t) dt$$

Ak sem dosadíme vyjadrenie $E(t)$ podľa (8) a pri výpočte využijeme vzťah

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} d\omega = 2\pi \delta(\omega)$$

ktorý už poznáme z kap. 7, postupne dostaneme

$$\begin{aligned} W(t) &= \varepsilon_0 c \int_{-\infty}^{\infty} E^2(t) dt = \varepsilon_0 c \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} d\omega \tilde{E}(\omega) e^{-i\omega t} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \tilde{E}(\omega') e^{+i\omega' t} = \\ &= \varepsilon_0 c \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \tilde{E}(\omega) \tilde{E}(\omega') \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-it(\omega - \omega')} = \\ &= \varepsilon_0 c \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{d\omega'}{2\pi} \tilde{E}(\omega) \tilde{E}(\omega') 2\pi \delta(\omega - \omega') = \frac{\varepsilon_0 c}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \tilde{E}^2(\omega) \end{aligned} \quad (19)$$

Pritom sme opäť podľa predpokladu (9) integrovali v čase cez celý interval $(-\infty, \infty)$, hoci faktická doba trvania pulzu je len $(0, T)$.

Spektrálnu hustotu prúdu energie žiarenia $\rho(\omega)$ definujeme vzťahom¹³¹

$$\frac{W}{T} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\omega) d\omega \quad (20)$$

¹³⁰ Rozmer ε_0 : Uvažujme doskový kondenzátor s plochami dosák S navzájom vzdialenými o d . Gaussova veta dáva ($N = Q/\varepsilon_0$) $ES = Q/\varepsilon_0$, $E = Q/(\varepsilon_0 S)$. Potenciál $U = Ed = Qd/(\varepsilon_0 S)$. Kapacita $C = Q/U = \varepsilon_0 S/d \Rightarrow [\varepsilon_0] = \text{Fm}^{-1}$.

¹³¹ Porovnaj so (16)

kde T je čas trvania pulzu. Porovnaním (19) a (20) vidno, že platí

$$T\rho(\omega) = \frac{\varepsilon_0 c}{2\pi} \tilde{E}^2(\omega)$$

Teraz prejdeme od vyjadrenia pravdepodobnosti prechodu P_{km} daného vzťahom (15), ku koeficientu absorpcie B_{km}^{abs} definovanému v (18) a dostaneme

$$B_{km}^{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar^2 \varepsilon_0 c} |\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{km}|^2 \quad (21)$$

Pripomeňme ešte raz, že niekedy sa používajú definície $\rho(\omega)$ odlišné faktorom 2 alebo 2π od definície (20). Potom sa od vyjadrenia (21) príslušne líši aj vyjadrenie koeficientu absorpcie.

Priblíženiu (21) sa hovorí dipólové priblíženie, lebo vo vzťahu (21) sa objavuje elektrický dipólový moment prechodu. Svojou povahou (uhlovým rozložením, polarizáciou) emitované žiarenie zodpovedá žiareniu elektrického dipólu. Tieto otázky však bližšie rozoberať nebudeme. Pripomeňme si len, že toto priblíženie sme dostali ako dôsledok dlhovlnného priblíženia (prechod od (1) k (2)) a zanedbania efektov vyšších rádov vo v/c . V prípade, že dipólový elektrický moment (11) je nulový, potom elektrický dipólový prechod nie je možný. V takom prípade by prvé nenulové priblíženie k pravdepodobnosti prechodu mohlo byť dané až (tu zanedbaným) vyšším multipólovým (resp. magnetickým) prechodom.

Otázkou, kedy je maticový element typu (11) nenulový, sa tu podrobnejšie zaoberať nebudeme. O podmienkach na kvantové čísla stavov m, k , ktoré musia byť splnené, aby prechod typu (21) existoval, sa hovorí ako o výberových pravidlách. Ako ilustráciu uvedme výberové pravidlo, ktoré je zrejmé bez väčšieho počítania: Ak by funkcie Φ_k aj Φ_m v (11) mali rovnakú paritu, potom by integrál (11) bol zrejme nulový (vzhľadom na faktor r by totiž celá podintegrálna funkcia bola nepárna). Elektrické dipólové prechody sú teda možné iba medzi stavmi, ktorých vlnové funkcie majú rôznu paritu (t. j. jedna musí byť párna a druhá nepárna).

V atóme vodíka parita vlnovej funkcie je daná orbitálnym kvantovým číslom l . Platí totiž

$$\psi_{nlm}(-\mathbf{r}) = (-1)^l \psi_{nlm}(\mathbf{r})$$

Platí teda výberové pravidlo: Elektrické dipólové prechody „sú zakázané“ v atóme vodíka medzi stavmi, ktorých orbitálne kvantové čísla sa líšia o párne číslo. Podrobnejšou analýzou možno vcelku jednoducho nájsť oveľa silnejšie výberové pravidlá. V atóme vodíka sú napríklad možné elektrické dipólové prechody iba medzi stavmi, ktorých kvantové čísla sa líšia o

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0 \quad \text{alebo} \quad \pm 1$$

Výberové pravidlá sa získajú ľahko pomocou postupov, s ktorými sa zoznámime v kapitole o momente hybnosti. Tieto postupy tiež vedú k jasnému fyzikálnemu pohľadu na povahu výberových pravidiel. Zaoberať sa s nimi už tu by bolo predčasné. Poznamenajme preto len to, že d_{km} dané výrazom (11) obsahuje výraz

$$\int Y_{l'm'}^*(\vartheta, \varphi) r Y_{lm}(\vartheta, \varphi) d\Omega \quad (22)$$

kde $Y_{l'm'}$ sa týka stavu „ k “ a Y_{lm} stavu „ m “. Jednotlivé zložky polohového vektora, t. j. x , y , z môžeme vyjadriť pomocou guľových funkcií $Y_{\lambda\mu}$ a absolútnej hodnoty polohového vektora. Výrazy typu (22) potom budú špeciálnymi prípadmi všeobecných výrazov

$$\int Y_{l'm'}^* Y_{\lambda\mu} Y_{lm} d\Omega \quad (23)$$

a formalizmus momentu hybnosti ukazuje bez komplikovaných výpočtov, čomu sa takéto výrazy rovnajú.

9.5 VZŤAH NEURČITOSTI PRE ENERGIU A ČAS

V predchádzajúcej diskusii sme videli, že v dôsledku nestacionárnej poruchy „zapnutej“ po dobu Δt sústava môže prejsť z jedného stacionárneho stavu (zodpovedajúceho neporušenému hamiltoniánu) do iného, pričom presnosť ΔE , s akou je určená energia tohto stavu, je približne daná vzťahom (porovnaj (3.7))

$$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar \quad (1)$$

Vzťah (1) pripomína vzťah neurčitosti a skutočne sa ukazuje, že existujú preň „hlbšie dôvody“, a teda nie je to iba náhodná zvláštnosť typická pre poruchovú metódu.

Na rozdiel od vzťahu neurčitosti pre veličiny x a p_x vo vzťahu (1) vystupujúce veličiny energia E a čas t nie sú rovnocenné vo formalizme kvantovej mechaniky. Energia je fyzikálna veličina v obvyklom zmysle (t. j. zodpovedá jej určitý operátor – hamiltonián), zatiaľ čo čas vystupuje vo formalizme nie ako veličina, ale ako parameter v Schrödingerovej rovnici. Formálne „odvodenie“ vzťahu (1) naráža na problémy¹³² rovnako ako aj rigorózná formulácia vzťahu neurčitosti typu (1).¹³³ Nebudeme sa preto ani my pokúšať o rigoróznejšie formulácie, namiesto toho uvedme niekoľko príkladov.

¹³² Formálne odvodenie vzťahu typu (1) chápaného v istom zúženom zmysle podáme v kapitole 10.

¹³³ Pozri napr. diskusiu v článku Y. Aharonov – D. Bohm: Physical Review, 122, 1949 (1961).

Príklad 1. Ako názornú ilustráciu nájdeme Fourierov obraz funkcie

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{pre } t < 0 \\ e^{i\omega_0 t} & \text{pre } 0 < t < \tau \\ 0 & \text{pre } t > \tau \end{cases}$$

(máme teda „monochromatické“ kmity „zapnuté“ po dobu τ). Funkciu $f(t)$ možno vyjadriť v tvare

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega) e^{i\omega t} d\omega$$

kde

$$\tilde{f}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt = \int_0^{\tau} e^{i\omega_0 t} e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{i(\omega_0 - \omega)} \cdot [e^{i(\omega_0 - \omega)\tau} - 1]$$

Pre druhú mocninu fourierovskej amplitúdy potom platí

$$|\tilde{f}(\omega)|^2 = \frac{1}{\left[\frac{\omega_0 - \omega}{2}\right]} \sin^2 \left[\frac{\omega_0 - \omega}{2} \tau \right]$$

a to je presne tvar funkcie, s ktorým sme sa už stretli v súvislosti so vzťahom (3.7). Vidíme teda, že v spektrálnom rozklade funkcie $f(t)$ sa vyskytujú najmä frekvencie z intervalu $\Delta\omega$ z okolia ω_0 , pričom platí (rádovo)

$$\Delta\omega \cdot \tau \sim 1$$

kde τ je doba zapnutia.

Príklad 2. Uvažujme sústavu, ktorá sa môže nachádzať v dvoch stacionárnych stavoch ψ_1 a ψ_2 s energiami E_1 a E_2 . Uvažujme teraz superpozíciu

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_1(\mathbf{r}) e^{-iE_1 t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_2(\mathbf{r}) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

Hustota pravdepodobnosti

$$P_1(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r}, t) e^{-iE_1 t/\hbar}|^2 = |\psi_1(\mathbf{r})|^2$$

resp.

$$P_2(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r}, t) e^{-iE_2 t/\hbar}|^2 = |\psi_2(\mathbf{r})|^2$$

by bola stacionárna (nezávislá od času) v prípade, že by sa sústava nachádzala

v niektorom zo stacionárnych stavov ψ_1 , ψ_2 . V stave $\psi(\mathbf{r}, t)$ však hustota pravdepodobnosti bude

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \frac{1}{2} |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + \frac{1}{2} |\psi_2(\mathbf{r})|^2 + \text{Re}\{\psi_1^* \psi_2 e^{-i(E_1 - E_2)t/\hbar}\}$$

Táto pravdepodobnosť osciluje medzi dvoma hodnotami s periódou

$$\tau = \frac{\hbar}{2\pi|E_1 - E_2|}$$

Čas τ predstavuje istú charakteristickú dobu časových zmien v sústave. Platí teda rádovo

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$$

čo môžeme prečítať ako: charakteristická doba zmien prebiehajúcich v sústave, násobená neurčitou energiou sústavy je úmerná Planckovej konštante.

*Príklad 3.*¹³⁴ Zaoberali sme sa prechodmi medzi hladinami v dôsledku vonkajšej poruchy (stimulovanou emisiou a absorpciou). V realistickom prípade je však možný i spontánny prechod z excitovanej hladiny na nižšiu hladinu spojený s tzv. spontánnou emisiou. Vyššie hladiny, ktoré sa nám javili ako stacionárne, sú v skutočnosti iba kvázistacionárne – s istou pravdepodobnosťou prechádzajú emisiou do nižších stavov. Z formalizmu kvantovej teórie možno dostať spontánne prechody až vtedy, keď do hamiltoniánu zahrnieme interakciu skúmanej sústavy s elektromagnetickým poľom, ktoré však už nechápeme ako klasické (vonkajšie) pole, ale považujeme ho tiež za kvantovanú sústavu. Pravdepodobnosť spontánneho prechodu je najvhodnejšie charakterizovať pomocou doby života¹³⁵ τ , ktorá je definovaná tak, aby platilo: ak sa sústava nachádza v excitovanom stave, potom pravdepodobnosť, že po čase t bude stále ešte v tomto stave, je rovná $1/e$. Pretože excitovaný stav zrejme nie je striktné stacionárnym stavom (úplného hamiltoniánu) je jeho energia určená iba s presnosťou ΔE . Na základe predchádzajúcej skúsenosti s poruchovou metódou sa dá očakávať, že *šírka hladiny* ΔE súvisí s dobou života t vzťahom

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar$$

¹³⁴ V tomto príklade sa obmedzíme skôr na sformulovanie istého tvrdenia ako na jeho striktné zdôvodnenie.

¹³⁵ Inokedy sa používa *polčas rozpadu*, ktorý je rovný $\tau \ln 2$.

9.6 BORNOVO PRIBLIŽENIE PRE ROZPTYL ČASTICE NA POTENCIÁLI

Článok s rovnakým názvom bol už zaradený do 7. kapitoly, kde sme použili stacionárnu poruchovú metódu. Svojou povahou je však rozptyl problémom časového vývoja. Stacionárnu poruchovú metódu sme mohli použiť preto, že rozptylový potenciál, ktorý sme chápali ako poruchu, je nezávislý od času. Preto možno približne hľadať úplný systém stacionárnych stavov a problém časového vývoja vyriešiť rozvojom do tohto systému. V tomto článku budeme rozptylovú úlohu riešiť nestacionárnou poruchovou metódou. Hamiltonián má tvar

$$H = H_0 + H'$$

kde

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta, \quad H' = V(\mathbf{r}) \quad (1)$$

a našou úlohou je vypočítať pravdepodobnosť rozptylu zo stavu s hybnosťou $\mathbf{p}_i = \hbar \mathbf{q}$ do stavu s hybnosťou $\mathbf{p}_2 = \hbar \mathbf{k}$. Táto formulácia nie je celkom presná, preto sa vyjadríme presnejšie. Predovšetkým pri realistickom opise rozptylového problému by sme stav dopadajúcej i rozptýlenej častice museli opísať stavovou vlnovou funkciou v tvare vlnového balíka. Situáciu si zjednodušíme tým, že budeme pracovať s harmonickými vlnami typu $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Ak rozptylový potenciál nie je ďalekodosahový¹³⁶, potom v situácii keď dopadajúca častica je ešte ďaleko od rozptylového centra, môžeme ju považovať za voľnú – ako keby porucha bola „vypnutá“.

Predpokladajme teda, že porucha sa „zapne“ v čase $t = 0$, keď častica je ešte ďaleko od centra a nachádza sa v stave

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \quad (2)$$

Podobne predpokladajme, že porucha sa „vypne“ v čase T , keď častica po rozptyle je už opäť ďaleko od centra a nachádza sa v stave

$$\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (3)$$

Prakticky sa však nemôžeme zaujímať o rozptyl častice zo stavu (2) presne do stavu (3). Rôzne možné koncové stavy, ktoré sa líšia tým, že im prislúchajúce vlnové vektory majú smer vnútri určitého priestorového uhla $d\Omega_{\mathbf{k}}$ a ktorých energie

¹³⁶ Ďalekodosahovým potenciálom je napr. coulombovský potenciál, s ktorým sa treba zaoberať osobitne.

sú v istom intervale ($E, E + dE$), sú vzhľadom na konečnú rozlišovaciu schopnosť experimentálnych zariadení nerozoznatel'né.

Zhrňme teda: uvažujeme poruchu, ktorá je nenulová len v časovom intervale $(0, T)$ a počas tohto intervalu je konštantná a rovná $H' = V(\mathbf{r})$. Zaujímame sa o pravdepodobnosť rozptylu častice zo stavu (2) do skupiny stavov v okolí stavu (3). Podobným prípadom sme sa zaoberali podrobne v článku 9.3 a tam uvedený postup môžeme použiť s malými modifikáciami. Prípad konštantnej poruchy je vlastne limitný prípad poruchy (3.1) pre $\omega \rightarrow 0$. Analogickým postupom by sme preto pre pravdepodobnosť prechodu za jednotku času „zo stavu q do stavu k “ dostali výraz typu (3.18)

$$W_{kq} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{kq}|^2 \delta(E_k - E_q) \quad (4)$$

kde

$$H'_{kq} = \int d^3\mathbf{r} \psi_k^*(\mathbf{r}) H' \psi_q(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \int d^3\mathbf{r} e^{i(q-k)\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \quad (5)$$

Výraz (4) je pravda, formálny, a nadobudne zmysel po preintegrovaní cez uvažované koncové stavy.

Zaujímajme sa teda o pravdepodobnosť rozptylu za jednotku času do smerového uhla $d\Omega_k$. Počet koncových stavov v príslušnom elemente \mathbf{k} -priestoru je

$$dN(\mathbf{k}) = \rho(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 dk d\Omega_k = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{km}{\hbar^2} dE_k d\Omega_k$$

keď sme použili vzťah $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m)$. Hľadaná pravdepodobnosť rozptylu za jednotku času bude

$$W_{kq} = \int dN(\mathbf{k}) \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{kq}|^2 \delta(E_k - E_q)$$

a po dosadení dostaneme

$$W_{kq} = \frac{km}{(2\pi)^2 V \hbar^3} \left| \int d^3\mathbf{r} e^{i(q-k)\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \right|^2 d\Omega_k$$

Diferenciálny účinný prierez dostaneme, ak tento výraz predelíme hustotou prúdu dopadajúcich častíc. V našom prípade vzhľadom na (3) je táto hustota prúdu rovná

$$j = \hbar k / mV$$

a pre diferenciálny účinný prierez dostaneme

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r} e^{i(q-k)\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \right|^2 \quad (5)$$

v súhlase so vzťahom (7.6.9).

9.7 PRÍKLADY A PROBLÉMY

1. Lineárny harmonický oscilátor je v základnom stave vnútri kondenzátora. Pole v kondenzátore postupne zapneme a potom zas vypneme, takže jeho intenzitu môžeme opísať funkciou

$$E(t) = \frac{A}{\tau\sqrt{\pi}} \exp[-(t/\tau)^2]$$

Nájdite v prvom ráde poruchovej metódy pravdepodobnosť toho, že v čase $t \rightarrow \infty$ nájdeme oscilátor v jednom z excitovaných stavov. Prediskutujte otázku zachovania energie pri tomto procese.

2. Elektrón sa pohybuje po dlhej organickej molekule, ktorá je vnútri kondenzátora postavená v smere kolmom na dosky. Elektrón modelujeme časticou viazanou na úsečku. V kondenzátore sa objaví pole s časovou závislosťou

$$\begin{aligned} E &= 0 && \text{pre } t < 0 \\ E &= E_0 \exp(-t/\tau) && \text{pre } t > 0 \end{aligned}$$

Nájdite pravdepodobnosti (v prvom ráde poruchovej teórie) toho, že pre $t \rightarrow \infty$ nájdeme elektrón v danom excitovanom stave.

3. Prediskutujte kvalitatívne, čo by sa stalo v prípade atómu vodíka v rovnakej situácii. Uvážte, do ktorých zo stavov $2p$ sa elektrón môže takto dostať zo základného stavu.
4. Nech systém je v čase $t < 0$ vo vlastnom stave ψ_0 hamiltoniánu H_0 . V čase $t = 0$ zapneme „poruchu“ $V(x)$ nezávisiacu od času a necháme ju už zapnutú pre všetky časy $t > 0$. Pre $t > 0$ bude hamiltoniánom sústavy $H = H_0 + V$ a vlastnými stavmi hamiltoniánu budú funkcie Φ_k spĺňajúce $H\Phi_k = (H_0 + V)\Phi_k = \epsilon_k\Phi_k$. Nájdite pravdepodobnosť toho, že v čase $t > 0$ nájdeme sústavu v stave Φ_n . Prediskutujte otázku zachovania energie pri takomto „okamžitom“ zapínaní interakcie.
5. Jadro atómu vodíka s hmotnostným číslom 3 (tzv. trítium) je nestabilné a rozpadá sa na jadro ${}^2_3\text{He}$ podľa schémy



Z hľadiska elektrónu, ktorý obieha okolo jadra, ide o veľmi rýchly proces, pri ktorom sa náhle zmení náboj jadra o jednotku. Predpokladajme, že atóm ${}^1_1\text{H}$ bol pred rozpadom v základnom stave. S akými pravdepodobnosťami bude vznikajúci atóm ${}^2_3\text{He}$ v základnom alebo v niektorom z excitovaných stavov?

6. Niekedy sa stáva, že „dodatočná interakcia“ je zapnutá na oveľa kratší čas, ako sú typické časy pre zmeny prebiehajúce vnútri sústavy. Stáva sa to napríklad vtedy, ak častica, ktorá sa pohybuje rýchlosťou len o málo menšou ako je rýchlosť svetla, letí okolo sústavy (ako atóm vodíka), v ktorej sú typické rýchlosti nerelativistické.

Napíšte základné rovnice pre časovú závislosť koeficientov $a_n(t)$ a riešte ich za predpokladu, že porucha pôsobí len krátky časový okamih $0 < t < T$ a že v rámci tohto krátkeho intervalu môžeme $a_n(t)$ rozvinúť do Taylorovho radu $a_n(t) = a_n(0) + t\dot{a}_n(0) + \dots$. Obmedzte sa na prvý člen v rozvoji a spočítajte koeficient $a_n(T)$, za zjednodušujúceho predpokladu, že „dodatočná interakcia“ vnútri intervalu $0 < t < T$ už nezávisí od času. Prediskutujte oprávnenosť priblíženia.