Мы видим, что вероятность периодически колеблется с частотой $\omega^{(1)}$. Для времен t, малых по сравнению с соответствующим периодом, выражение в фигурных скобках, а с ним и вероятность w_{21} пропорциональны t^2:

$$w_{21} = \frac{1}{\hbar^2} |V_{12}|^2 t^2;$$

эту формулу можно совсем просто получить изложенным в следующем параграфе методом (с помощью уравнения (40,4)).

§ 40. Возмущения, зависящие от времени

Перейдем к изучению возмущений, зависящих явно от времени. Говорить о поправках к собственным значениям энергии в этом случае вообще нельзя, поскольку при зависящем от времени гамильтониане (каковым будет возмущенный оператор $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$) энергия вообще не сохраняется, так что стационарных состояний не существует. Задача заключается здесь в приближенном вычислении волновых функций по волновым функциям стационарных состояний невозмущенной системы.

Для этой цели мы применим метод, соответствующий известному методу вариации постоянных для решения линейных дифференциальных уравнений (*P. A. M. Dirac*, 1926). Пусть $\Psi_k^{(0)}$ — волновые функции (включающие временной множитель) стационарных состояний невозмущенной системы. Тогда произвольное решение невозмущенного волнового уравнения может быть написано в виде суммы $\Psi = \sum a_k \Psi_k^{(0)}$. Будем теперь искать решение возмущенного уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V})\Psi \tag{40,1}$$

в виде суммы

$$\Psi = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)}, \tag{40,2}$$

где коэффициенты разложения являются функциями времени. Подставив (40,2) в (40,1) и помня, что функции $\Psi_k^{(0)}$ удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k^{(0)}}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi_k^{(0)},$$

получим

$$i\hbar \sum_k \Psi_k^{(0)} \frac{da_k}{dt} = \sum_k a_k \hat{V} \Psi_k^{(0)}.$$

Умножив обе стороны равенства слева на $\Psi_m^{(0)*}$ и интегрируя, получим

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}(t)\, a_k, \tag{40,3}$$

где

$$V_{mk}(t) = \int \Psi_m^{(0)*} \hat{V} \Psi_k^{(0)}\, dq = V_{mk} e^{i\omega_{mk} t}, \qquad \omega_{mk} = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}$$

— матричные элементы возмущения, включающие временной множитель (надо, впрочем, иметь в виду, что при зависящем явно от времени V величины V_{mk} тоже являются функциями времени).

В качестве невозмущенной волновой функции выберем волновую функцию n-го стационарного состояния, чему соответствуют значения коэффициентов в (40,2): $a_n^{(0)} = 1$, $a_k^{(0)} = 0$ при $k \neq n$. Для определения первого приближения ищем a_k в виде $a_k = a_k^{(0)} + a_k^{(1)}$, причем в правую сторону уравнения (40,3) (уже содержащую малые величины V_{mk}) подставляем $a_k = a_k^{(0)}$. Это дает

$$i\hbar \frac{da_k^{(1)}}{dt} = V_{kn}(t). \tag{40,4}$$

Для того чтобы указать, к какой из невозмущенных функций вычисляется поправка, введем второй индекс у коэффициентов a_k, написав

$$\Psi_n = \sum_k a_{kn}(t)\, \Psi_k^{(0)}.$$

Соответственно этому, напишем результат интегрирования уравнения (40,4) в виде

$$a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int V_{kn}(t)\, dt = -\frac{i}{\hbar} \int V_{kn} e^{i\omega_{kn} t}\, dt. \tag{40,5}$$

Этим определяются волновые функции первого приближения.

Рассмотрим более подробно важный случай периодического по времени возмущения, имеющего вид

$$\hat{V} = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t}, \tag{40,6}$$

где $\hat{F}$ и $\hat{G}$ — операторы, не зависящие от времени. В силу эрмитовости $\hat{V}$ должно быть

$$\hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{G} e^{i\omega t} = \hat{F}^+ e^{i\omega t} + \hat{G}^+ e^{-i\omega t},$$

откуда находим $\hat{G} = \hat{F}^+$, т. е.

$$G_{nm} = F_{mn}^*. \tag{40,7}$$

Используя это соотношение, имеем

$$V_{kn}(t) = V_{kn}e^{i\omega_{kn}t} = F_{kn}e^{i(\omega_{kn}-\omega)t} + F^*_{nk}e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}. \qquad (40,8)$$

Подставляя в (40,5) и интегрируя, получаем следующее выражение для коэффициентов разложения волновых функций:

$$a^{(1)}_{kn} = -\frac{F_{kn}e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)} - \frac{F^*_{nk}e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)}. \qquad (40,9)$$

Эти выражения применимы, если ни один из знаменателей не обращается в нуль [1]), т. е. если для всех k (при данном n)

$$E^{(0)}_k - E^{(0)}_n \neq \pm\hbar\omega. \qquad (40,10)$$

Для ряда применений полезно иметь выражения для матричных элементов произвольной величины f, определенных с помощью возмущенных волновых функций. В первом приближении:

$$f_{nm}(t) = f^{(0)}_{nm}(t) + f^{(1)}_{nm}(t),$$

где

$$f^{(0)}_{nm}(t) = \int \Psi^{(0)*}_n \hat{f}\Psi^{(0)}_m\,dq = f^{(0)}_{nm}e^{i\omega_{nm}t},$$

$$f^{(1)}_{nm}(t) = \int (\Psi^{(0)*}_n \hat{f}\Psi^{(1)}_m + \Psi^{(1)*}_n \hat{f}\Psi^{(0)}_m)\,dq.$$

Подставив сюда

$$\Psi^{(1)}_n = \sum_k a^{(1)}_{kn}\Psi^{(0)}_k$$

с $a^{(1)}_{kn}$, определяющимися формулой (40,9), легко получить искомое выражение

$$f^{(1)}_{nm}(t) = -e^{i\omega_{nm}t}\sum_k\left\{\left[\frac{f^{(0)}_{nk}F_{km}}{\hbar(\omega_{km}-\omega)} + \frac{f^{(0)}_{km}F_{nk}}{\hbar(\omega_{kn}+\omega)}\right]e^{-i\omega t} + \right.$$
$$\left. + \left[\frac{f^{(0)}_{nk}F^*_{mk}}{\hbar(\omega_{km}+\omega)} + \frac{f^{(0)}_{km}F^*_{nk}}{\hbar(\omega_{kn}-\omega)}\right]e^{i\omega t}\right\}. \qquad (40,11)$$

Эта формула применима, если ни один из членов не становится большим, т. е. если все частоты ω_{kn}, ω_{km} не слишком близки к ω. При $\omega = 0$ мы возвращаемся к формуле (38,12).

Во всех написанных здесь формулах подразумевается, что имеется только дискретный спектр невозмущенных уровней энергии. Они, однако, непосредственно обобщаются на случай наличия также и непрерывного спектра (причем речь по-прежнему идет о возмущении состояний дискретного спектра), что достигается просто прибавлением к суммам по уровням дискретного спектра соответствующих интегралов по непрерывному спектру.

---

[1]) Точнее — не должны быть настолько малыми, чтобы величины $a^{(1)}_{kn}$ перестали быть малыми по сравнению с единицей.

При этом необходимо, чтобы в формулах (40,9), (40,11) знаменатели $\omega_{kn} \pm \omega$ были отличны от нуля при пробегании энергией $E_k^{(0)}$ всех значений не только дискретного, но и непрерывного спектров. Если, как это обычно имеет место, непрерывный спектр лежит выше всех уровней дискретного спектра, то, например, условие (40,10) должно быть дополнено условием

$$E_{\min}^{(0)} - E_n^{(0)} > \hbar\omega, \tag{40,12}$$

где $E_{\min}^{(0)}$ — энергия наиболее низкого уровня непрерывного спектра.

Задача

Определить изменение n-го и m-го решений уравнения Шредингера при наличии периодического возмущения (вида (40,6)) с частотой ω такой, что $E_m^{(0)} - E_n^{(0)} = \hbar(\omega + \varepsilon)$, где ε — малая величина.

Решение. Развитый в тексте метод здесь неприменим, так как коэффициент $a_{mn}^{(1)}$ (40,9) становится большим. Исходим снова из точных уравнений (40,3) с $V_{mk}(t)$ из (40,8). Очевидно, что наиболее существенный эффект возникает от тех членов в суммах в правой стороне уравнений (40,3), в которых зависимость от времени определяется малой частотой $\omega_{mn} - \omega$. Опуская все остальные члены, получим систему из двух уравнений

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = F_{mn}e^{i(\omega_{mn}-\omega)t}a_n = F_{mn}e^{i\varepsilon t}a_n,$$

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = F_{mn}^* e^{-i\varepsilon t}a_m.$$

Делаем подстановку

$$a_n e^{i\varepsilon t} = b_n$$

и получаем уравнения

$$i\hbar\dot{a}_m = F_{mn}b_n, \qquad i\hbar(\dot{b}_n - i\varepsilon b_n) = F_{mn}^* a_m.$$

Исключая из них a_m, получим

$$\ddot{b}_n - i\varepsilon\dot{b}_n + \frac{1}{\hbar^2}|F_{mn}|^2 b_n = 0.$$

В качестве двух независимых решений этих уравнений можно выбрать

$$a_n = Ae^{i\alpha_1 t}, \qquad a_m = -A\frac{\hbar\alpha_1}{F_{mn}^*}e^{i\alpha_2 t} \tag{1}$$

и

$$a_n = Be^{-i\alpha_2 t}, \qquad a_m = B\frac{\hbar\alpha_2}{F_{mn}^*}e^{-i\alpha_1 t}, \tag{2}$$

где A, B — постоянные (которые должны быть определены из условия нормировки) и введены обозначения

$$\alpha_1 = -\frac{\varepsilon}{2} + \Omega, \qquad \alpha_2 = \frac{\varepsilon}{2} + \Omega, \qquad \Omega = \sqrt{\frac{\varepsilon^2}{4} + |\eta|^2}, \qquad \eta = \frac{F_{mn}}{\hbar}.$$

Таким образом, под влиянием возмущения функции $\Psi_n^{(0)}$, $\Psi_m^{(0)}$ перейдут в функции $a_n\Psi_n^{(0)} + a_m\Psi_m^{(0)}$ с a_n, a_m из (1) или (2).

Пусть в начальный момент времени ($t = 0$) система находилась в состоянии $\Psi_m^{(0)}$. Состояние системы в последующие моменты времени определяется линейной комбинацией двух полученных нами функций, обращающейся при $t = 0$ в $\Psi_m^{(0)}$:

$$\Psi = e^{i\varepsilon t/2}\left(\cos\Omega t - \frac{i\varepsilon}{2\Omega}\sin\Omega t\right)\Psi_m^{(0)} - \frac{i\eta^*}{\Omega}e^{-i\varepsilon t/2}\sin\Omega t\cdot\Psi_n^{(0)}. \qquad (3)$$

Квадрат модуля коэффициента при $\Psi_n^{(0)}$ равен

$$\frac{|\eta|^2}{2\Omega^2}(1 - \cos 2\Omega t). \qquad (4)$$

Он определяет вероятность нахождения системы в момент времени t в состоянии $\Psi_n^{(0)}$. Мы видим, что это есть периодическая функция с частотой 2Ω, меняющаяся в пределах от 0 до $|\eta|^2/\Omega^2$.

При $\varepsilon = 0$ (точный резонанс) вероятность (4) обращается в

$$\frac{1}{2}(1 - \cos 2|\eta|t).$$

Она периодически меняется в пределах между 0 и 1; другими словами, система периодически переходит из состояния $\Psi_m^{(0)}$ в состояние $\Psi_n^{(0)}$.

§ 41. Переходы под влиянием возмущения, действующего в течение конечного времени

Предположим, что возмущение $V(t)$ действует всего лишь в течение некоторого конечного промежутка времени (или же, что $V(t)$ достаточно быстро затухает при $t \to \pm\infty$). Пусть перед началом действия возмущения (или в пределе при $t \to -\infty$) система находилась в n-м стационарном состоянии (дискретного спектра). В произвольный последующий момент времени состояние системы будет определяться функцией

$$\Psi = \sum_k a_{kn}\Psi_k^{(0)},$$

где в первом приближении

$$a_{kn} = a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} V_{kn}e^{i\omega_{kn}t}\,dt, \qquad k \neq n,$$
$$a_{nn} = 1 + a_{nn}^{(1)} = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} V_{nn}\,dt; \qquad (41,1)$$

пределы интегрирования в (40,5) выбраны таким образом, чтобы при $t \to -\infty$ все $a_{kn}^{(1)}$ обращались в нуль. По истечении времени действия возмущения (или в пределе $t \to \infty$) коэффициенты a_{kn}