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

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

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}

принимают постоянные значения $a_{kn}(\infty)$, и система будет находиться в состоянии с волновой функцией

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

снова удовлетворяющей невозмущенному волновому уравнению, но отличной от первоначальной функции $\Psi_n^{(0)}$. Согласно общим правилам квадрат модуля коэффициента $a_{kn}(\infty)$ определяет вероятность системе иметь энергию $E_k^{(0)}$, т. е. оказаться в k-м стационарном состоянии.

Таким образом, под влиянием возмущения система может перейти из первоначального стационарного состояния в любое другое. Вероятность перехода из первоначального (i-го) в конечное (f-е) стационарное состояние равна [1])

$$w_{fi} = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty} V_{fi}e^{i\omega_{fi}t}\,dt\right|^2. \tag{41,2}$$

Рассмотрим теперь возмущение, которое, раз возникнув, продолжает затем действовать неограниченно долго (оставаясь, разумеется, все время малым). Другими словами, $V(t)$ стремится к нулю при $t \to -\infty$ и к конечному, отличному от нуля, пределу при $t \to \infty$. Формула (41,2) здесь непосредственно неприменима, так как стоящий в ней интеграл расходится. Эта расходимость, однако, с физической точки зрения несущественна и может быть легко устранена. Для этого напишем, интегрируя по частям:

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar}\int\limits_{-\infty}^{t} V_{fi}e^{i\omega_{fi}t}\,dt = -\left.\frac{V_{fi}e^{i\omega_{fi}t}}{\hbar\omega_{fi}}\right|_{-\infty}^{t} + \int\limits_{-\infty}^{t}\frac{\partial V_{fi}}{\partial t}\frac{e^{i\omega_{fi}t}}{\hbar\omega_{fi}}\,dt.$$

Значение первого члена на нижнем пределе исчезает, а на верхнем пределе формально совпадает с коэффициентами разложения в формуле (38,8) (наличие лишнего периодического множителя $e^{i\omega_{fi}t}$ связано просто с тем, что a_{fi} — коэффициенты разложения полной волновой функции Ψ, а c_{fi} в § 38 — коэффициенты разложения не зависящей от времени функции ψ). Поэтому ясно, что его предел при $t \to \infty$ определяет просто изменение первоначальной волновой функции $\Psi_i^{(0)}$ под влиянием «постоянной части» $V(+\infty)$ возмущения и не имеет, следовательно, отношения к переходам в другие

[1]) Для единообразия, условимся обозначать в дальнейшем (когда речь идет о вероятностях переходов) начальное и конечное состояния соответственно индексами i и f. Кроме того, условимся писать индексы у вероятностей перехода именно в порядке fi, в соответствии с порядком, принятым для индексов матричных элементов.

состояния. Вероятность же перехода определяется квадратом второго члена и равна

$$w_{fi}=\frac{1}{\hbar^2\omega_{fi}^2}\left|\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial V_{fi}}{\partial t}e^{i\omega_{fi}t}\,dt\right|^2. \tag{41,3}$$

Полученные формулы справедливы и в том случае, когда переход совершается из состояния дискретного в состояние непрерывного спектра. Разница состоит лишь в том, что речь идет при этом о вероятности перехода из заданного (i-го) состояния в состояния, находящиеся в интервале значений величин ν_f (см. конец § 38) от ν_f до $\nu_f+d\nu_f$, так что, например, формулу (41,2) надо писать в виде

$$dw_{fi}=\frac{1}{\hbar^2}\left|\int\limits_{-\infty}^{\infty}V_{fi}e^{i\omega_{fi}t}\,dt\right|^2 d\nu_f. \tag{41,4}$$

Если возмущение $V(t)$ мало меняется за промежутки времени $\sim 1/\omega_{fi}$, то значение интеграла в (41,2) или в (41,3) будет очень малым. В пределе при сколь угодно медленном изменении приложенного возмущения вероятность всякого перехода с изменением энергии (т. е. с отличной от нуля частотой ω_{fi}) стремится к нулю. Итак, при достаточно медленном (*адиабатическом*) изменении приложенного возмущения система, находившаяся в некотором невырожденном стационарном состоянии, будет продолжать оставаться в том же состоянии (см. также § 53).

В обратном предельном случае очень быстрого, *внезапного*, включения возмущения производные $\partial V_{fi}/\partial t$ обращаются в бесконечность в «момент включения». В интеграле от $\frac{\partial V_{fi}}{\partial t}e^{i\omega_{fi}t}$ можно тогда вынести из-под знака интеграла сравнительно медленно меняющийся множитель $e^{i\omega_{fi}t}$, взяв его значение в этот момент. После этого интеграл сразу берется, и мы получаем

$$w_{fi}=\frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2\omega_{fi}^2}. \tag{41,5}$$

Вероятности перехода при внезапных возмущениях могут быть найдены и в тех случаях, когда возмущение не является малым.

Пусть система находится в состоянии, описывающемся одной из собственных функций $\psi_i^{(0)}$ первоначального гамильтониана $\hat{H}_0$. Если изменение гамильтониана происходит внезапно (т. е. за время, малое по сравнению с периодами $1/\omega_{fi}$ переходов из данного состояния i в другие), то волновая функция системы «не успевает» измениться и остается той же, что и до возмущения. Она, однако, уже не будет являться собственной функцией нового гамильтониана системы $\hat{H}$, т. е. состояние $\psi_i^{(0)}$ не будет стационарным. Вероятности же w_{fi} перехода системы в какое-либо из новых стационарных состояний определяются, согласно общим правилам квантовой механики, коэффициентами разложения функции $\psi_i^{(0)}$ по собственным функциям ψ_f гамильтониана $\hat{H}$:

$$w_{fi} = \left| \int \psi_i^{(0)} \psi_f^* \, dq \right|^2. \tag{41,6}$$

Покажем, каким образом эта общая формула переходит в формулу (41,5), если изменение гамильтониана $\hat{V} = \hat{H} - \hat{H}_0$ является малым. Умножим уравнения

$$\hat{H}_0 \psi_i^{(0)} = E_i^{(0)} \psi_i^{(0)}, \qquad \hat{H}^* \psi_f^* = E_f \psi_f^*$$

соответственно на ψ_f^* и $\psi_i^{(0)}$, проинтегрируем по dq и вычтем почленно одно из другого. Использовав также свойство самосопряженности оператора $\hat{H}$, получим

$$(E_f - E_i^{(0)}) \int \psi_f^* \psi_i^{(0)} \, dq = \int \psi_f^* \hat{V} \psi_i^{(0)} \, dq.$$

Если возмущение $\hat{V}$ мало, то в первом приближении можно заменить E_f близким к нему невозмущенным уровнем $E_f^{(0)}$, а волновую функцию ψ_f (в правой стороне равенства) — соответствующей функцией $\psi_f^{(0)}$. Тогда получим

$$\int \psi_f^* \psi_i^{(0)} \, dq = \frac{1}{\hbar \omega_{fi}} \int \psi_f^{(0)*} \hat{V} \psi_i^{(0)} \, dq,$$

и формула (41,6) переходит в (41,5).

Задачи

1. На заряженный осциллятор, находящийся в основном состоянии, внезапно накладывается однородное электрическое поле. Определить вероятности перехода осциллятора в возбужденные состояния под влиянием этого возмущения.

Решение. Потенциальная энергия осциллятора в однородном поле (действующем на него с силой F) есть

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2 - Fx = \frac{m\omega^2}{2} (x - x_0)^2 + \text{const},$$

(где $x_0 = F/m\omega^2$), т. е. снова имеет чисто осцилляторный вид (со смещенным положением равновесия). Поэтому волновые функции стационарных состояний возмущенного осциллятора суть $\psi_k(x - x_0)$, где $\psi_k(x)$ — осцилляторные функции (23,12); начальная же волновая функция есть $\psi_0(x)$ из (23,13). С помощью этих функций и выражения (23,11) для полиномов Эрмита находим

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^{(0)} \psi_k \, dx = \frac{(-1)^k}{\sqrt{2^k \pi k!}} e^{-\xi_0^2/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi\xi_0} \frac{d^k}{d\xi^k} e^{-\xi^2 + 2\xi\xi_0} \, d\xi,$$

где введено обозначение $\xi_0 = x_0\sqrt{m\omega/\hbar}$. Стоящий здесь интеграл путем k-кратного интегрирования по частям приводится к интегралу

$$\xi_0^k \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\xi^2 + \xi\xi_0\right) d\xi = \xi_0^k \sqrt{\pi} \exp\left(\xi_0^2/4\right).$$

В результате для искомой вероятности перехода (41,6) получим формулу

$$w_{k0} = \frac{\bar{k}^k}{k!} e^{-\bar{k}}, \qquad \bar{k} = \frac{\xi_0^2}{2} = \frac{F^2}{2m\hbar\omega^3}.$$

Как функция числа k она представляет собой распределение Пуассона со средним значением $\bar{k}$.

Случаю применимости теории возмущений соответствуют малые F такие, что $\bar{k} \ll 1$. Тогда вероятности возбуждения малы и быстро убывают с увеличением k. Наибольшая из них $w_{10} \approx \bar{k}$.

В обратном случае больших F ($\bar{k} \gg 1$) возбуждение осциллятора происходит с подавляющей вероятностью: вероятность осциллятору остаться в нормальном состоянии есть $w_{00} = e^{-\bar{k}}$.

2. Ядро атома, находящегося в нормальном состоянии, испытывает внезапный толчок, в результате которого оно приобретает скорость v; длительность толчка τ предполагается малой как по сравнению с электронными периодами, так и по сравнению с a/v, где a — атомные размеры. Определить вероятность возбуждения атома под влиянием такого «встряхивания» (*А. Б. Мигдал*, 1939).

Решение. Переходим к системе отсчета K', движущейся вместе с ядром после удара. В силу условия $\tau \ll a/v$ ядро можно считать практически не сместившимся за время удара, так что координаты электронов в системе K' и в исходной системе K непосредственно после возмущения совпадают. Начальная волновая функция в системе K' есть

$$\psi_0' = \psi_0 \exp\left(-i\mathbf{q}\sum_a \mathbf{r}_a\right), \qquad \mathbf{q} = \frac{m\mathbf{v}}{\hbar},$$

где ψ_0 — волновая функция нормального состояния при неподвижном ядре, а суммирование в экспоненте производится по всем Z электронам в атоме. Искомая вероятность перехода в k-е возбужденное состояние определяется теперь, согласно (41,6), формулой

$$w_{k0} = \left|\langle k|\exp\left(-i\mathbf{q}\sum_a \mathbf{r}_a\right)|0\rangle\right|^2.$$

В частности, если $qa \ll 1$, то, разлагая экспоненциальный множитель под знаком интеграла и замечая, что интеграл от $\psi_k^*\psi_0$ обращается в нуль в силу ортогональности функций ψ_0 и ψ_k, получим

$$w_{k0} = \left|\langle k|\mathbf{q}\sum_a \mathbf{r}_a|0\rangle\right|^2.$$

3. Определить полную вероятность возбуждения и ионизации атома водорода при внезапном «встряхивании» (см. предыдущую задачу).

Решение. Искомую вероятность можно вычислить как разность

$$1 - w_{00} = 1 - \left|\int \psi_0^2 e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\, dV\right|^2,$$

где w_{00} — вероятность атому остаться в основном состоянии ($\psi_0 = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$ —

волновая функция основного состояния атома водорода; a — боровский радиус). Вычислив интеграл, получим

$$1-w_{00}=1-\frac{1}{\left(1+\frac{1}{4}q^2a^2\right)^4}.$$

В предельном случае $qa \ll 1$ эта вероятность стремится к нулю как $1-w_{00}\approx q^2a^2$, а при $qa\gg 1$ — к единице как $1-w_{00}\approx 1-(2/qa)^8$.

4. Определить вероятность вылета электрона из K-оболочки атома с большим атомным номером Z при β-распаде ядра. Скорость β-частицы предполагается большой по сравнению со скоростью K-электрона (*А. Б. Мигдал*, 1941; *Е. Л. Фейнберг*, 1939).

Решение[1]. В указанных условиях длительность прохождения β-частицы через K-оболочку мала по сравнению с периодом обращения электрона, так что изменение заряда ядра можно считать мгновенным. Роль возмущения играет при этом изменение $V=1/r$ поля ядра при малом (1 по сравнению с Z) изменении его заряда. Согласно (41,5) вероятность перехода одного из двух электронов K-оболочки с энергией $E_0=-Z^2/2$ [2]) в состояние непрерывного спектра с энергией $E=k^2/2$ в интервале $dE=k\,dk$ есть

$$dw=2\frac{4\,|V_{0k}|^2}{(k^2+Z^2)^2}\,dk.$$

В интеграле, определяющем матричный элемент V_{0k}, существенна область близких ($\sim 1/Z$) расстояний от ядра, в которой для волновой функции состояния непрерывного спектра тоже можно пользоваться водородоподобным выражением. Конечное состояние электрона должно иметь момент $l=0$ (совпадающий с моментом начального состояния). С помощью функции R_{10} и нормированной по шкале $k/2\pi$ функции R_{k0}, полученных в § 36, и формулы (f, 3) математических дополнений найдем [3])

$$\left(\frac{1}{r}\right)_{0k}=\frac{4\sqrt{2\pi k}}{\sqrt{1-e^{-2\pi Z/k}}}\;\frac{(1+ik/Z)^{iZ/k}(1-ik/Z)^{-iZ/k}}{(1+k^2/Z^2)}$$

и, поскольку

$$|(1+i\alpha)^{i/\alpha}|^2=\exp\left(-2\frac{\operatorname{arctg}\alpha}{\alpha}\right),$$

окончательно получим

$$dw=\frac{2^7}{Z^4(1+k^2/Z^2)^4}\,f\left(\frac{k}{Z}\right)k\,dk,$$

где введено обозначение

$$f(\alpha)=\frac{1}{1-e^{-2\pi/\alpha}}\exp\left(-4\frac{\operatorname{arctg}\alpha}{\alpha}\right).$$

Предельные значения функции $f(\alpha)$:

$$f=e^{-4}\ \text{при}\ \alpha\ll 1,\quad f=\alpha/2\pi\ \ \text{при}\ \ \alpha\gg 1.$$

---

[1]) В задачах 4 и 5 пользуемся атомными единицами.

[2]) Здесь и ниже используется водородоподобность состояния K-электронов (см. § 74).

[3]) При вычислении удобно пользоваться кулоновыми единицами, перейдя затем к атомным единицам в окончательном результате.

Полная вероятность ионизации K-оболочки получается интегрированием dw по всем энергиям вылетающего электрона. Численный расчет дает $w = 0{,}65\,Z^{-2}$.

5. Определить вероятность вылета электрона из K-оболочки атома с большим Z при α-распаде ядра. Скорость α-частицы мала по сравнению со скоростью K-электрона, но время ее выхода из ядра мало по сравнению со временем обращения электрона (*А. Б. Мигдал*, 1941; *J. Levinger*, 1953).

Решение. После вылета α-частицы действующее на электрон возмущение имеет адиабатический характер. Поэтому искомый эффект определяется в основном временем, близким к нарушающему адиабатичность «моменту включения» возмущения, когда α-частица, выйдя из ядра и двигаясь как свободная, находится еще на расстояниях, малых по сравнению с радиусом K-орбиты. Роль возмущения V, вызывающего ионизацию атома, играет при этом отклонение совместного поля ядра и α-частицы от чисто кулонова поля Z/r. Дипольный момент двух частиц с атомными весами 4 и $A-4$ и зарядами 2 и $Z-2$, находящимися на расстоянии vt друг от друга (v — относительная скорость ядра и α-частицы), равен

$$\frac{2(A-4)-(Z-2)4}{A}vt = \frac{2(A-2Z)}{A}vt.$$

Поэтому дипольный член поля ядра и α-частицы есть [1])

$$V = \frac{2(A-2Z)}{A}vt\frac{z}{r^3},$$

где ось z направлена вдоль скорости $\mathbf{v}$. Матричный элемент этого возмущения сводится к матричному элементу от z: взяв матричный элемент от уравнения движения электрона $\ddot{z} = -Zz/r^3$, получим

$$\left(\frac{z}{r^3}\right)_{0k} = \frac{(E-E_0)^2}{Z}z_{0k}.$$

Искомая вероятность перехода одного из двух электронов K-оболочки равна, согласно (41,2),

$$dw = 2\left|\int\limits_0^\infty V_{0k}e^{i(E_0-E)t}\,dt\right|^2 dk = \frac{8(A-2Z)^2v^2}{A^2Z^2}|z_{0k}|^2\frac{dk}{2\pi}$$

(для вычисления интеграла вводим в подынтегральное выражение дополнительный затухающий множитель $e^{-\lambda t}(\lambda > 0)$, после чего в получающемся результате полагаем $\lambda \to 0$). Для вычисления матричного элемента от $z = r\cos\theta$ замечаем, что поскольку орбитальный момент в начальном состоянии $l = 0$, то $\cos\theta$ имеет отличный от нуля матричный элемент лишь для перехода в состояние с $l = 1$; при этом

$$|(\cos\theta)_{01}|^2 = \frac{1}{3} \quad \text{и} \quad |z_{0k}|^2 = \frac{1}{3}|r_{0k}|^2.$$

Вычисляя r_{0k} с помощью радиальных функций R_{00} и R_{k1}, получим в результате

$$dw = \frac{2^{11}(A-2Z)^2v^2}{3A^2Z^6\left(1+\frac{k^2}{Z^2}\right)^5}f\left(\frac{k}{Z}\right)k\,dk$$

(функция f определена в задаче 4).

[1]) Если разность $A-2Z$ мала, может оказаться необходимым учет также и следующего, квадрупольного члена.