§ 42. Переходы под влиянием периодического возмущения

Другого рода результаты получаются для вероятности перехода в состояния непрерывного спектра, происходящего под влиянием периодического возмущения. Предположим, что в некоторый начальный момент времени $t = 0$ система находится в i-м стационарном состоянии дискретного спектра. Частоту ω периодического возмущения будем предполагать такой, что

$$\hbar\omega > E_{\min} - E_i^{(0)}, \tag{42,1}$$

где $E_{\min}$ — значение энергии, с которого начинается непрерывный спектр.

Из результатов § 40 заранее очевидно, что основную роль будут играть состояния непрерывного спектра со значениями энергии E_f в непосредственной близости к «резонансной» энергии $E_i^{(0)} + \hbar\omega$, т. е. такие, для которых разность $\omega_{fi} - \omega$ мала. По этой же причине в матричных элементах возмущения (40,8) достаточно рассматривать только первый член (с близкой к нулю частотой $\omega_{fi} - \omega$). Подставляя этот член в (40,5) и интегрируя, получим

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_{fi}(t)\,dt = -F_{fi}\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} - 1}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)}. \tag{42,2}$$

Нижний предел интегрирования выбран таким образом, чтобы при $t = 0$ было $a_{fi} = 0$ в соответствии с поставленным начальным условием.

Для квадрата модуля a_{fi} отсюда находим

$$|a_{fi}|^2 = |F_{fi}|^2 \frac{4\sin^2\dfrac{\omega_{fi} - \omega}{2}t}{\hbar^2(\omega_{fi} - \omega)^2}. \tag{42,3}$$

Легко видеть, что при больших t стоящая здесь функция может быть представлена как пропорциональная t.

Для этого замечаем, что имеет место следующая формула:

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2\alpha t}{\pi t\alpha^2} = \delta(\alpha). \tag{42,4}$$

Действительно, при $\alpha \neq 0$ написанный предел равен нулю, а при $\alpha = 0$ имеем $\dfrac{\sin^2\alpha t}{t\alpha^2} = t$, так что предел равен бесконечности. Интегрируя же по $d\alpha$ в пределах от $-\infty$ до $+\infty$ (делаем подстановку $\alpha t = \xi$), получим

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2\alpha t}{t\alpha^2}\,d\alpha = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2\xi}{\xi^2}\,d\xi = 1.$$

Таким образом, функция, стоящая в левой стороне равенства (42,4), действительно удовлетворяет всем требованиям, определяющим δ-функцию.

Соответственно этой формуле мы можем написать при больших t

$$|a_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|F_{fi}|^2 \pi t \delta\left(\frac{\omega_{fi}-\omega}{2}\right)$$

или, подставив $\hbar\omega_{fi} = E_f - E_i^{(0)}$ и воспользовавшись тем, что $\delta(ax) = \delta(x)/a$:

$$|a_{fi}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}|F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i^{(0)} - \hbar\omega)t.$$

Выражение $|a_{fi}|^2 d\nu_f$ есть вероятность перехода из первоначального состояния в состояния, находящиеся в заданном интервале $d\nu_f$. Мы видим, что при больших t она оказывается пропорциональной истекшему с момента $t = 0$ промежутку времени. Вероятность же dw_{fi} перехода в течение единицы времени равна [1])

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}|F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i^{(0)} - \hbar\omega)\, d\nu_f. \tag{42,5}$$

В соответствии с тем, что и ожидалось, она отлична от нуля лишь для переходов в состояния с энергией $E_f = E_i^{(0)} + \hbar\omega$. Если энергетические уровни непрерывного спектра не вырождены, так что под ν_f можно понимать значения одной только энергии, то весь «интервал» состояний $d\nu_f$ сводится к одному состоянию с энергией $E = E_i^{(0)} + \hbar\omega$, и вероятность перехода в это состояние есть

$$w_{Ei} = \frac{2\pi}{\hbar}|F_{Ei}|^2. \tag{42,6}$$

Методически поучителен также и другой способ вывода формулы (42,5), в котором периодическое возмущение предполагается включающимся не в дискретный момент $t = 0$, а медленно нарастает от $t = -\infty$ по экспоненциальному закону $e^{\lambda t}$ с положительной постоянной λ, которую затем устремляют к нулю (*адиабатическое включение*). Соответственно и начальное условие $a_{fi} = 0$ ставится при этом в момент $t = -\infty$. Матричный элемент возмущения имеет теперь вид

$$V_{fi}(t) = F_{fi}e^{i(\omega_{fi}-\omega)t+\lambda t},$$

---

[1]) Легко проверить, что при учете опущенного второго члена в (40,8) получились бы дополнительные выражения, которые, будучи поделены на t, стремятся при $t \to +\infty$ к нулю.

и вместо (42,2) пишем

$$a_{fi} = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} V_{fi}(t)\,dt = -F_{fi}\frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)t+\lambda t}}{\hbar(\omega_{fi}-\omega-i\lambda)}. \qquad (42,7)$$

Отсюда

$$|a_{fi}|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|F_{fi}|^2\frac{e^{2\lambda t}}{(\omega_{fi}-\omega)^2+\lambda^2}.$$

Вероятность же перехода в единицу времени определяется производной

$$\frac{d}{dt}|a_{fi}|^2 = 2\lambda\,|a_{fi}|^2.$$

Теперь замечаем, что имеет место формула

$$\lim_{\lambda\to 0}\frac{\lambda}{\pi(\alpha^2+\lambda^2)} = \delta(\alpha), \qquad (42,8)$$

справедливая в том же смысле, что и (42,4). С ее помощью находим, переходя к пределу $\lambda \to 0$:

$$\frac{d}{dt}|a_{fi}|^2 \to \frac{2\pi}{\hbar^2}|F_{fi}|^2\,\delta(\omega_{fi}-\omega),$$

и мы вновь возвращаемся к формуле (42,5).

§ 43. Переходы в непрерывном спектре

Одним из важнейших применений теории возмущений является вычисление вероятности перехода в непрерывном спектре под влиянием постоянного (не зависящего от времени) возмущения. Мы уже упоминали, что состояния непрерывного спектра практически всегда вырождены. Выбрав определенным образом совокупность невозмущенных волновых функций, соответствующих некоторому данному уровню энергии, мы можем поставить задачу следующим образом: известно, что в начальный момент времени система находилась в одном из этих состояний; требуется определить вероятность перехода в другое состояние той же энергии. Для переходов из начального состояния i в состояния в интервале между ν_f и $\nu_f + d\nu_f$ имеем непосредственно из (42,5) (полагая $\omega = 0$ и меняя обозначения)

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar}|V_{fi}|^2\,\delta(E_f - E_i)\,d\nu_f. \qquad (43,1)$$

Это выражение, как и следовало, отлично от нуля лишь при $E_f = E_i$: под влиянием постоянного возмущения переходы происходят лишь между состояниями с одинаковой энергией. Необходимо отметить, что для переходов из состояний непрерывного спектра величина dw_{fi} не может рассматриваться непосредственно