Практически всегда t достаточно велико ($t \gg 2\pi/\omega$) и эти интервалы не перекрываются. Значит $W_{a\to b}$ мало для всех переходов кроме тех, при которых *невозмущенная система излучает или поглощает энергию* $\hbar\omega$, на что указывают уравнения (55) и (55′) соответственно.

В первом случае вклад в амплитуду перехода дает только первый член и для вероятности перехода получаем выражение

$$W_{a\to b} \approx |A_{ba}|^2 f(t, \omega_{ba} + \omega)/\hbar^2.$$

Основное отличие этого выражения от (40) состоит в замене ω_{ba} на $\omega_{ba} + \omega$. В полной аналогии с рассуждениями § 4 можно рассмотреть переходы в группу уровней с энергией в интервале ΔE ($\gg 2\pi\hbar/t$) с центром в точке $E_a - \hbar\omega$ и при подходящих условиях определить вероятность перехода в единицу времени, которая вновь дается формулой (50) с тем отличием, что теперь V_{ba} и ρ_b относятся к состояниям b, энергия которых меньше энергии начального состояния на $\hbar\omega$. Те же рассуждения применимы к переходам, при которых система поглощает энергию $\hbar\omega$ (см. задачу 2).

Рассмотрим теперь более общий случай, когда V — произвольная периодическая функция t с частотой ω. Сформулируем кратко относящиеся к этому случаю результаты, доказательство которых предоставим читателю. Имеем разложение Фурье

$$V = \sum_{s=1}^{\infty} (A_s e^{is\omega t} + A_s^{\dagger} e^{-is\omega t}).$$

Если $t \gg 2\pi/\omega$, то в первом порядке вклады в вероятность перехода от различных членов этого ряда не интерферируют, поскольку каждый из них вызывает переходы, отвечающие различному изменению энергии. При «A_s-переходах» система теряет с точностью до $2\pi\hbar/t$ энергию $s\hbar\omega$; при «$A_s^{\dagger}$-переходах» система поглощает с точностью до $2\pi\hbar/t$ энергию $s\hbar\omega$.

Раздел II. МГНОВЕННОЕ И АДИАБАТИЧЕСКОЕ ИЗМЕНЕНИЯ ГАМИЛЬТОНИАНА

§ 7. Формулировка задачи и результаты

Часто возникает задача определения изменения состояния системы при изменении внешнего поля. Классический пример такой ситуации представляет атом, помещенный в магнитное поле. Как правило, получаемые результаты существенно зависят от времени T, в течение которого происходило изменение гамильтониана. В этом разделе мы исследуем предельные случаи,

когда T очень мало (мгновенное изменение) и очень велико (адиабатическое изменение).

Будем предполагать, что гамильтониан изменяется непрерывным образом от некоторого начального H_0 в момент времени t_0 до конечного H_1 в t_1. Обозначим

$$T = t_1 - t_0, \quad s = (t - t_0)/T,$$

а $H(s)$ — значение гамильтониана в момент времени $t = t_0 + sT$. Гамильтониан $H(s)$ — непрерывная функция s и

$$H(0) = H_0, \quad H(1) = H_1.$$

Эволюция системы от t_0 до t_1 зависит теперь только от параметра T, который определяет скорость перехода от H_0 к H_1. Удобно ввести обозначение

$$U(t, t_0) = U_T(s).$$

Задача заключается в определении оператора $U(t_1, t_0)$, т. е. $U_T(1)$, и исследовании его зависимости от T.

Особенно простые результаты получаются в упомянутых выше предельных случаях.

В пределе, когда $T \to 0$, т. е. *в случае бесконечно быстрого перехода, динамическое состояние системы остается неизменным*

$$\lim_{T \to 0} U_T(1) = 1. \tag{56}$$

В пределе, когда $T \to \infty$, т. е. *в случае бесконечно медленного или адиабатического перехода, если система первоначально находилась в собственном состоянии гамильтониана* H_0, *то в момент времени* t_1 при выполнении некоторых сформулированных ниже условий *система перейдет в собственное состояние* H_1, *которое получается из исходного состояния по непрерывности.* Этот важный результат известен как адиабатическая теорема [1]).

§ 8. Быстрый переход и мгновенное приближение

Первое из приведенных утверждений немедленно следует из интегрального уравнения (1), которому удовлетворяет оператор эволюции системы. Используя обозначения § 7, запишем

---

[1]) Она также называется теоремой Эренфеста. Работа Эренфеста относится к классической механике и старой квантовой теории. Перенос этой теоремы в квантовую механику сделан в работе: *M. Born and V. Fock.* Zeit. f. Phys. 51, 165 (1928). См. также *T. Kato,* Journ. Phys. Soc. Jup. 5, 435 (1950); *K. O. Friedrichs,* On the Adiabatic Theorem in Quantum Theory, Report IMM. NYU-218, New York, 1955.

его в виде

$$U_T(s) = 1 - i\hbar^{-1}T\int_0^s H(s)\,U_T(s)\,ds.$$

В пределе $T \to 0$ второе слагаемое в правой части стремится к нулю, и мы получаем нужный результат (56).

Для достаточно малых T в первом приближении можно предположить, что $U_T(1) \approx 1$. *Это приближение называется мгновенным.*

Обозначим $|0\rangle$ вектор состояния системы в момент времени t_0, и пусть Q — проектор на подпространство, ортогональное к $|0\rangle$. Считая норму $|0\rangle$ равной 1, имеем

$$Q_0 = 1 - |0\rangle\langle 0|.$$

Мгновенное приближение означает, что

$$U(t_1, t_0)\,|0\rangle \approx |0\rangle.$$

Величина ошибки при таком приближении дается вероятностью $\tilde{\omega}$ найти систему в состоянии, отличном от начального

$$\begin{aligned}\tilde{\omega} &= \langle 0|U^{\dagger}(t_1, t_0)\,Q_0\,U(t_1, t_0)|0\rangle = \\ &= \langle 0|U_T^{\dagger}(1)\,Q_0\,U_T(1)|0\rangle.\end{aligned} \tag{57}$$

Поправку к этому приближению можно вычислить, используя описанную в § 1 теорию возмущений. В данном случае ($H^{(0)} = 0$, $V = H$) приближение первого порядка равно единичному оператору 1, и разложение (17) имеет вид

$$U_T(1) = 1 - i\hbar^{-1}T\int_0^1 H(s)\,ds + (i\hbar)^{-2}T^2\int_0^1 ds_1\int_0^{s_1} H(s_1)\,H(s_2)\,ds_2 + \ldots. \tag{58}$$

В частности, подставляя это разложение в правую часть (57), получаем разложение $\tilde{\omega}$ по степеням T. Поскольку $Q_0|0\rangle = 0$, член низшего порядка пропорционален T^2 и получается подстановкой двух первых членов разложения (58). Введем обозначение

$$\overline{H} = \int_0^1 H(s)\,ds = \frac{1}{T}\int_{t_0}^{t_1} H\,dt. \tag{59}$$

Тогда имеем

$$\tilde{\omega} = \frac{T^2}{\hbar^2}\langle 0|\overline{H}Q_0\overline{H}|0\rangle + O(T^3).$$

И поскольку

$$\langle 0|\overline{H}Q_0\overline{H}|0\rangle = \langle 0|\overline{H}^2|0\rangle - \langle 0|\overline{H}|0\rangle^2 = (\Delta\overline{H})^2,$$

где $\Delta\overline{H}$ — средне-квадратичное отклонение наблюдаемой $\overline{H}$ в состоянии $|0\rangle$, получаем

$$\tilde{\omega} = \frac{T^2 (\Delta \overline{H})^2}{\hbar^2} + O(T^3). \tag{60}$$

Итак, условие применимости мгновенного приближения $\tilde{\omega} \ll 1$ требует, чтобы [1])

$$T \ll \hbar/\Delta\overline{H}. \tag{61}$$

Условие (61) является не чем иным как частной формой соотношения неопределенности для энергии и времени. Согласно определению (59) представляет собой гамильтониан системы, усредненный по интервалу (t_0, t_1). Грубо говоря, в этот интервал времени эволюцию системы определяет гамильтониан $\overline{H}$. В силу соотношения неопределенности для энергии и времени состояние системы, удовлетворяющей такому уравнению движения, не может заметно измениться за время, меньшее $\hbar/\Delta\overline{H}$. Следовательно, неравенство (61) действительно является условием того, что изменение состояния по прошествии промежутка времени T пренебрежимо мало.

§ 9. Мгновенное обращение магнитного поля

В качестве приложения рассмотрим, что произойдет с атомом в постоянном магнитном поле, если направление поля внезапно поменять на противоположное. Будем предполагать выполненными условия LS-связи и считать поле достаточно сильным для того, чтобы полностью отделить полный момент $\boldsymbol{L}$ от полного спина $\boldsymbol{S}$ (эффект Пашена — Бака). Для простоты будем считать, что магнитное поле все время параллельно оси z и меняется от значения $-\mathscr{H}_0$ до $\mathscr{H}_0$ по линейному закону

$$\mathscr{H}(t) = \mathscr{H}_0 [2s - 1] = \mathscr{H}_0 [2(t - t_0)/T - 1]. \tag{62}$$

Согласно результатам главы XVI (§§ 9—12) гамильтониан системы имеет вид

$$H = H^{(0)} + A(\boldsymbol{LS}) - \frac{e}{2mc}(L_z + 2S_z)\mathscr{H}(t), \tag{63}$$

где $H^{(0)}$ — невозмущенный гамильтониан в случае LS-связи. Поскольку согласно (62) среднее по времени от магнитного поля равно нулю, то среднее по времени от H равно гамильтониану атома в отсутствие внешнего поля

$$\overline{H} = H^{(0)} + A(\boldsymbol{LS}).$$

---

[1]) Условие $\tilde{\omega} \ll 1$ не требует, чтобы обязательно $U(t_1\ t_0)|0\rangle \approx |0\rangle$, оно требует только, чтобы эти векторы отличались лишь фазовым множителем. Однако формула (60) предполагает быструю сходимость разложения (58), и неравенство (61) является, вообще говоря, достаточным условием для такой сходимости.

Предположим теперь, что первоначально система находилась в собственном для H состоянии. Поскольку в этот момент выполняются условия, при которых имеет место эффект Пашена — Бака, то вектор состояния почти равен одному из векторов $|\alpha LSM_LM_S\rangle$, определенных в § XVI. 11. Будем считать, что $|0\rangle = |\alpha LSM_LM_S\rangle$. Вычисление средне-квадратичного отклонения $\Delta\bar{H}$ не представляет серьезных трудностей; так как $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ есть собственный вектор $H^{(0)} + AL_zS_z$, то единственный вклад дает только член $^1/_2A(L_+S_- + L_-S_+)$. Проведя вычисления, получаем

$$\Delta\bar{H} = \frac{1}{2}A\hbar^2[2(L(L+1) - M_L^2)(S(S+1) - M_S^2) - 2M_LM_S]^{\frac{1}{2}}.$$

В скобках стоит числовой множитель порядка 1 (он равен нулю в двух предельных случаях, $M_L = \pm L$, $M_S = \pm S$). Следовательно, отклонение $\Delta\bar{H}$ равно по порядку величины $A\hbar^2$, т. е. порядку величины расщепления LS-уровней за счет спин-орбитальной связи.

Как следствие, если

$$T \ll \frac{1}{A\hbar}, \tag{64}$$

то выполняется условие быстрого перехода (61): вектор состояния остается практически тем же при изменении направления поля. Для того чтобы динамическое состояние атома оставалось тем же, достаточно, чтобы изменение вектора состояния сводилось только к домножению на фазовый множитель. Таким образом, неравенство (64) является достаточным, но не необходимым условием неизменности состояния при обращении поля. Мы вернемся к этому вопросу в конце § 14.

§ 10. Адиабатический переход. Общие положения. Тривиальный случай

В оставшейся части этого раздела исследуется другой крайний случай — очень медленное изменение гамильтониана. Мы будем использовать обозначения § 7.

Прежде всего, сформулируем адиабатическую теорему. В ней речь идет о свойствах состояний дискретного спектра гамильтониана $H(s)$. Будем для простоты предполагать спектр H дискретным, хотя это и несущественно [1]).

Пусть $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \ldots, \varepsilon_j, \ldots$ — собственные значения H, а проекторы на соответствующие им подпространства обозначим

[1]) Достаточно, чтобы дискретные собственные значения и отвечающие им подпространства удовлетворяли сформулированным ниже условиям непрерывности, дифференцируемости и «не пересечения». См. *T. Kato*. loc. cit.

$P_1, P_2, \ldots, P_j, \ldots$. Все эти величины предполагаются *непрерывными функциями* s. Дополнительно будем считать, что:

(i) *собственные значения отличаются* друг от друга в течение всего перехода $0 \leqslant s \leqslant 1$

$$\varepsilon_j(s) \neq \varepsilon_k(s), \text{ каковы бы ни были } j \text{ и } k; \tag{65}$$

(ii) *производные* dP_j/ds, d^2P_j/ds^2 определены и кусочно-непрерывны на всем интервале.

Оператор эволюции $U_T(s)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar\frac{d}{ds}U_T(s) = TH(s)U_T(s), \tag{66}$$

а гамильтониан $H(s)$ определяется выражением

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)P_j(s). \tag{67}$$

Адиабатическая теорема утверждает, что $U_T(s)$ *обладает асимптотическим свойством* [1])

$$\lim_{T\to\infty} U_T(s)P_j(0) = P_j(s)\lim_{T\to\infty} U_T(s) \qquad (j = 1, 2, \ldots). \tag{68}$$

Предположим сначала, что подпространства, отвечающие каждому собственному значению $H(s)$, не меняются

$$P_j(s) = P_j(0) \equiv P_j \quad (j = 1, 2, \ldots).$$

В этом случае гамильтониан $H(s)$ имеет простой вид

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)P_j$$

и при любом s коммутирует с каждым из проекторов P_j. Следовательно, каждый проектор есть интеграл движения

$$U_T(s)P_jU_T^\dagger(s) = P_j. \tag{69}$$

Соотношение (69) верно для любых T и *a fortiori* для $T \to \infty$.

---

[1]) Это свойство эквивалентно приведенному в § 7. Действительно, если $|j\rangle$ — собственный вектор $H(0)$, отвечающий собственному значению $\varepsilon_j(0)$, то $P_j(0)|j\rangle = |j\rangle$, и свойство (68) дает

$$\lim_{T\to\infty} U_T(s)|j\rangle = P_j(s)\lim_{T\to\infty} U_T(s)|j\rangle,$$

т. е. вектор $U_T(s)|j\rangle$ при $T \to \infty$ стремится к вектору из подпространства, соответствующего $\varepsilon_j(s)$

Кроме этого, в данном частном случае уравнение (66) явно интегрируется и дает

$$U_T(s) = \exp\left(-iT\int_0^s H(\sigma)\,d\sigma/\hbar\right) = \\ = \sum_j e^{-iT\varphi_j(s)/\hbar} P_j, \tag{70}$$

где нами использовано обозначение

$$\varphi_j(s) = \int_0^s \varepsilon_j(\sigma)\,d\sigma. \tag{71}$$

Итак, если в момент времени t_0 вектор состояния системы был собственным вектором для H_0, отвечающим собственному значению $\varepsilon_j(0)$, то в момент времени t_1 вектор состояния будет отличаться от собственного только фазовым множителем

$$e^{-iT\varphi_j(1)/\hbar}.$$

§ 11. «Представление вращающихся осей»

Точно проинтегрировать уравнение Шредингера в общем случае не удается, так как собственные векторы гамильтониана $H(s)$ вращаются некоторым образом в гильбертовом пространстве. При рассмотрении общего случая первый этап заключается в устранении, насколько это возможно, такого вращения подходящим изменением «представления».

Введем для этого унитарный оператор $A(s)$, обладающий свойством

$$P_j(s) = A(s)\,P_j(0)\,A^{\dagger}(s) \qquad (j = 1, 2, \ldots). \tag{72}$$

Унитарное преобразование $A(s)$ переводит любой базис из собственных векторов оператора $H(0)$ в базис из собственных векторов $H(s)$, причем соответствующие векторы связаны друг с другом непрерывным образом.

Преобразование $A(s)$ однозначно определяется начальным условием

$$A(0) = 1 \tag{73}$$

и дифференциальным уравнением

$$i\hbar\, dA/ds = K(s)\,A(s), \tag{74}$$

где $K(s)$ — подходящий эрмитов оператор. Для того чтобы выполнялись условия (72), необходимо и достаточно, чтобы опе-

ратор $K(s)$ удовлетворял коммутационным соотношениям

$$[K(s), P_j(s)] = i\hbar\, dP_j/ds \qquad (j = 1, 2, \ldots). \tag{75}$$

Необходимость немедленно следует после дифференцирования обеих частей (72) по s. Соотношения (75) достаточны, так как если $A(s)$ и $P_j(s)$ удовлетворяют уравнениям (74) и (75), то выражение

$$A^{+}(s)\, P_j(s)\, A(s)$$

не зависит от s (производная по s равна нулю) и равно своему начальному значению $P_j(0)$.

Соотношения (75) не определяют $K(s)$ однозначно, в частности, можно добавить к $K(s)$ оператор $\sum_k P_k(s) f_k(s) P_k(s)$, где $f_k(s)$ — произвольные операторы, зависящие от s. Другими словами, можно произвольно задавать проекции $P_j(s) K(s) P_j(s)$ $(j = 1, 2, \ldots)$. По причинам, которые станут понятны ниже, мы устраняем произвол, накладывая дополнительные условия

$$P_j(s)\, K(s)\, P_j(s) = 0 \qquad (j = 1, 2, \ldots). \tag{76}$$

Это дает (задача 5)

$$K(s) = i\hbar \sum_j (dP_j/ds)\, P_j(s).$$

Унитарное преобразование $A^{+}(s)$ переводит векторы и операторы шредингеровского «представления» в новое «представление» — «представление вращающихся осей». Наблюдаемая $H(s)$ преобразуется в

$$H^{(A)}(s) = A^{+}(s)\, H(s)\, A(s)$$

и, используя равенства (67) и (72), имеем

$$H^{(A)}(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)\, P_j(0). \tag{77}$$

Точно так же $K(s)$ преобразуется в

$$K^{(A)}(s) = A^{+}(s)\, K(s)\, A(s). \tag{78}$$

Оператор эволюции в новом «представлении» равен

$$U^{(A)}(s) \equiv A^{+}(s)\, U_T(s). \tag{79}$$

Он определяется (см. § 1, ур. (12), где следует взять $V = TH - K$) уравнением и начальным условием

$$i\hbar\, dU^{(A)}/ds = [TH^{(A)}(s) - K^{(A)}(s)]\, U^{(A)}(s), \tag{80}$$

$$U^{(A)}(0) = 1. \tag{81}$$

§ 12. Доказательство адиабатической теоремы

Уравнение (80) легко бы интегрировалось, если бы можно было пренебречь членом $K^{(A)}$ по сравнению с $TH^{(A)}$. Тогда мы имели бы тривиальный случай, рассмотренный в § 10. Обозначим $\Phi_T(s)$ решение соответствующего уравнения Шредингера

$$i\hbar\, d\Phi_T/ds = TH^{(A)}(s)\,\Phi_T(s), \tag{82}$$

$$\Phi_T(0) = 1. \tag{83}$$

Имеем (ур. (70))

$$\Phi_T(s) = \sum_j e^{-iT\varphi_j(s)/\hbar} P_j(0), \tag{84}$$

где φ_j определены равенством (71).

Используя определения (77) и (78), мы видим, что $H^{(A)}(s)$ и $K^{(A)}(s)$ не зависят от T. Следовательно, можно ожидать, что в пределе $T \to \infty$ влияние $K^{(A)}$ в правой части уравнения (80) будет полностью подавлено членом $TH^{(A)}$, и оператор $U^{(A)}(s)$ будет стремиться к $\Phi_T(s)$. Как мы увидим, это действительно имеет место, и (см. ур. (79))

$$U_T(s) \underset{T\to\infty}{\sim} A(s)\,\Phi_T(s). \tag{85}$$

Для доказательства этого утверждения введем новое унитарное преобразование

$$W \equiv \Phi_T^+ U^{(A)} = \Phi_T^+ A^+ U_T. \tag{86}$$

Уравнение, которому удовлетворяет этот оператор, следует из уравнений (80) и (82). В интегральной форме оно имеет вид

$$W(s) = 1 + \frac{i}{\hbar}\int_0^s \overline{K}(\sigma)\, W(\sigma)\, d\sigma, \tag{87}$$

где

$$\overline{K}(s) \equiv \Phi_T^+(s)\, K^{(A)}(s)\, \Phi_T(s) = \tag{88}$$

$$= \Phi_T^+ A^+ K A \Phi_T. \tag{89}$$

Мы собираемся показать, что ядро $K(s)$ есть сумма осциллирующих функций, частоты которых неограниченно растут с ростом T и, как следствие, интеграл в правой части уравнения Вольтерра (87) стремится к нулю при $T \to \infty$.

Любой оператор Q допускает разложение [1])

$$Q = \sum_j \sum_k P_j(0)\, Q P_k(0).$$

---

[1]) Выбранный нами метод состоит в том, что используется представление, в котором оператор $H(0)$ диагонален, и в то же время устраняются различные трудности, связанные с вырождением собственных значений $H(0)$ и произволом в выборе фаз векторов базиса.

В дальнейшем мы используем обозначение

$$Q_{jk} \equiv P_j(0)\,QP_k(0).$$

Используя уравнения (72), (84) и (89), получаем

$$\overline{K}_{jk} = e^{iT(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar} K_{jk}^{(A)},$$

$$K_{jk}^{(A)} = A^{+}(s)\,P_j(s)\,K(s)\,P_k(s)\,A(s). \tag{90}$$

В силу условия (76) все $K_{jj}^{(A)}$ $(j=1, 2, \ldots)$ исчезают и, следовательно, все диагональные части $\overline{K}_{jj}$ разложения $\overline{K}$ равны нулю

$$\overline{K}_{jj} = 0 \quad (j=1, 2, \ldots). \tag{91}$$

Недиагональные части $\overline{K}_{jk}$ $(j \neq k)$ содержат осциллирующий множитель

$$e^{iT(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar} \equiv \exp\left[i\hbar^{-1}T\int_0^s (\varepsilon_j(\sigma)-\varepsilon_k(\sigma))\,d\sigma\right].$$

Частота осцилляций получается дифференцированием фазы экспоненты по s, что дает

$$T\,|\varepsilon_j(s)-\varepsilon_k(s)|/\hbar.$$

Согласно предположению (65) разность $\varepsilon_j-\varepsilon_k$ никогда в нуль не обращается, и, следовательно, частота растет, как T, при $T\to\infty$.

Рассмотрим оператор

$$F(s) \equiv \int_0^s \overline{K}(\sigma)\,d\sigma. \tag{92}$$

Все его диагональные элементы в силу (91) равны нулю

$$F_{jj} = 0.$$

Недиагональные элементы имеют вид

$$F_{jk} = \int_0^s e^{iT(\varphi_j-\varphi_k)/\hbar} K_{jk}^{(A)}\,d\sigma \quad (j \neq k). \tag{93}$$

Операторы $K_{jk}^{(A)}$ непрерывно зависят от s и не зависят от T. Показатель же экспоненты зависит от T, и, следовательно, F_{jk} имеет вид $\int_0^s e^{iT\alpha(\sigma)} f(\sigma)\,d\sigma$, где $f(\sigma)$ — непрерывная функция, а $\alpha(\sigma)$ — непрерывная монотонная функция. Как известно, та-

кой интеграл стремится к нулю при $T \to \infty$. Действительно, интегрируя по частям, имеем

$$F_{jk}(s) = \\ = \frac{\hbar}{iT}\left[e^{iT(\Phi_j-\Phi_k)/\hbar}\frac{K_{jk}^{(A)}}{\varepsilon_j-\varepsilon_k}\Bigg|_0^s - \int_0^s e^{iT(\Phi_j-\Phi_k)/\hbar}\left[\frac{d}{d\sigma}\left(\frac{K_{jk}^{(A)}}{\varepsilon_j-\varepsilon_k}\right)\right]d\sigma\right]. \tag{94}$$

Ясно, что выражение в скобках остается конечным, если $K_{jk}^{(A)}$ и производные по s от $K_{jk}^{(A)}$, ε_j и ε_k остаются конечными. Следовательно, F_{jk} стремится к нулю, как $1/T$, т. е. при $T \to \infty$

$$F(s) = O\left(\frac{1}{T}\right).$$

После интегрирования по частям интеграл в правой части уравнения (87) можно переписать в виде

$$F(s)\,W(s) - \int_0^s F(\sigma)\frac{dW}{d\sigma}\,d\sigma$$

или, используя уравнение $dW/d\sigma = i\bar{K}W/\hbar$,

$$F(s)\,W(s) - i\hbar^{-1}\int_0^s F(\sigma)\,\bar{K}W(\sigma)\,d\sigma. \tag{95}$$

Оба члена в (95) содержат множителем $F(s)$ и, следовательно, при $T \to \infty$ стремятся к нулю, как $1/T$, а значит [1]),

$$W = 1 + O\left(\frac{1}{T}\right). \tag{96}$$

Подставляя (96) в формулу (86) — определение W, получаем

$$U_T(s) \underset{T\to\infty}{\sim} A(s)\,\Phi_T(s)\left[1 + O\left(\frac{1}{T}\right)\right]. \tag{97}$$

---

[1]) Строго говоря, приведенные рассуждения справедливы только, если оператор $K(s)$ ограничен на всем интервале $(0, 1)$ (см. примечание на стр. 207). Тогда можно показать, что $\|F(s)\|$ стремится к нулю, как $1/T$, равномерно по s. Верхние оценки для $\|K(s)\|$ и $\|F(s)\|$ обозначим $\varkappa$ и ε соответственно. Поскольку операторы W, Φ и A унитарны, то нормы операторов K, $K^{(A)}$, $\bar{K}$ и $\bar{K}W$ равны. Точно так же равны нормы F и FW. Следовательно,

$$\|FW\| \leqslant \varepsilon, \quad \left\|\int_0^s F\bar{K}W\,d\sigma\right\| < \varepsilon\varkappa s.$$

Используя для $W - 1$ формулу (95), получаем

$$\|W - 1\| \leqslant \varepsilon\,(1 + \varkappa s).$$

Поскольку $\Phi_T(s)$ коммутирует с проекторами $P_j(0)$ (см. ур. (84)), а унитарный оператор $A(s)$ обладает свойством (72), имеем

$$A(s)\Phi_T(s)P_j(0) = P_j(s)A(s)\Phi_T(s).$$

Отсюда и из асимптотики (97) следуют соотношения (68). ■

§ 13. Адиабатическое приближение

Если T достаточно велико или, точнее, *если образующие базис собственные векторы оператора $H(t)$ вращаются достаточно медленно*, то в первом приближении $U_T(1)$ можно заменить его асимптотикой

$$U(t_1, t_0) \equiv U_T(1) \approx A(1)\Phi_T(1). \tag{98}$$

Это и есть *адиабатическое приближение.*

Пусть $|0\rangle$ — нормированный вектор, представляющий состояние системы в момент времени t_0, а Q_0 — проектор на дополнительное подпространство. Адиабатическое приближение состоит в следующей замене:

$$U(t, t_0)|0\rangle \approx A(1)\Phi_T(1)|0\rangle.$$

Величина погрешности при таком приближении дается вероятностью η найти систему в момент времени t_1 в состоянии, отличном от $A(1)\Phi_T(1)|0\rangle$. Поскольку проектор на пространство, ортогональное этому вектору, равен

$$Q_1 \equiv A(1)\Phi_T(1)Q_0\Phi_T^+(1)A^+(1),$$

получаем

$$\eta \equiv \langle 0|U^+(t_1, t_0)Q_1U(t_1, t_0)|0\rangle =$$
$$= \langle 0|W^+(1)Q_0W(1)|0\rangle.$$

Поправки к адиабатическому приближению можно вычислить методом теории возмущений из § 1. Оператор $A(1)\Phi_T(1)$ играет роль $U^{(0)}$, а $W(1)$ — роль U_I. Метод заключается в сохранении только начальных членов разложения W, которое получается итерированием уравнения (87). Если ограничиться только первым порядком, то получим

$$W(1) \approx 1 + (iF/\hbar), \tag{99}$$

где F — оператор $F(1)$, определенный равенством (92).

Это разложение можно использовать также и для вычисления η. Аналогично вычислению $\tilde{\omega}$ в случае мгновенного приближения, имеем

$$\eta \approx \hbar^{-2}\langle 0|FQ_0F|0\rangle = (\Delta F/\hbar)^2, \tag{100}$$

где ΔF — средне-квадратичное отклонение наблюдаемой F в состоянии $|0\rangle$. Условие применимости адиабатического приближения [1]) $\eta \ll 1$ дает

$$\Delta F \ll \hbar.$$

В приведенной здесь общей форме этот результат не так удобен для использования, как соответствующий результат в случае мгновенного приближения (соотношение (61)). Фигурирующую здесь наблюдаемую F построить гораздо труднее, чем наблюдаемую $\bar{H}$ из предыдущего случая. В то время как $\bar{H}$ получается просто интегрированием $H(t)$, для вычисления F необходимо решить задачу на собственные значения $H(t)$ для каждой точки из интервала (t_0, t_1) и для каждой точки построить оператор $A(s)$.

Проверим условия применимости адиабатического приближения в случае, когда система первоначально находилась в собственном для $H(0)$ состоянии. В действительности, только этот случай и представляет практический интерес.

В дальнейшем будем использовать непосредственно переменную t, не переходя к s. Обозначим $\varepsilon_j(t)$ собственные значения гамильтониана в момент времени t, соответствующие проекторы — $P_j(t)$, оператор «перехода к повернутым осям» — $A(t)$ и $\Phi(t)$ — оператор $\Phi_T(s)$. Тогда определения (67) и (84) изменяются

$$H(t) = \sum_j \varepsilon_j(t) P_j(t), \tag{101}$$

$$\Phi(t) = \sum_j \exp\left[-i\int_{t_0}^{t} \varepsilon_j(\tau)\, d\tau/\hbar\right] P_j(0). \tag{102}$$

Определяющие $A(t)$ уравнения (73) и (74) примут вид

$$i\hbar\, dA/dt = K'(t)\, A(t), \quad A(0) = 1, \tag{103}$$

где

$$K'(t) \equiv K(s)/T = i\hbar \sum (dP_j/dt)\, P_j(t). \tag{104}$$

Согласно определению (92) находим

$$F \equiv F(t_1) = \int_{t_0}^{t_1} \Phi^+(t)\, A^+(t)\, K'(t)\, A(t)\, \Phi(t)\, dt. \tag{105}$$

Дополнительно, для простоты, предположим, что спектр $H(t)$ простой (не вырожден). Выберем множество базисных век-

[1]) Здесь можно сделать те же замечания, что и в сноске к § XVII, 8, в связи с критерием применимости мгновенного приближения.

где ΔF — средне-квадратичное отклонение наблюдаемой F в состоянии $|0\rangle$. Условие применимости адиабатического приближения [1]) $\eta \ll 1$ дает

$$\Delta F \ll \hbar.$$

В приведенной здесь общей форме этот результат не так удобен для использования, как соответствующий результат в случае мгновенного приближения (соотношение (61)). Фигурирующую здесь наблюдаемую F построить гораздо труднее, чем наблюдаемую $\bar{H}$ из предыдущего случая. В то время как $\bar{H}$ получается просто интегрированием $H(t)$, для вычисления F необходимо решить задачу на собственные значения $H(t)$ для каждой точки из интервала (t_0, t_1) и для каждой точки построить оператор $A(s)$.

Проверим условия применимости адиабатического приближения в случае, когда система первоначально находилась в собственном для $H(0)$ состоянии. В действительности, только этот случай и представляет практический интерес.

В дальнейшем будем использовать непосредственно переменную t, не переходя к s. Обозначим $\varepsilon_j(t)$ собственные значения гамильтониана в момент времени t, соответствующие проекторы — $P_j(t)$, оператор «перехода к повернутым осям» — $A(t)$ и $\Phi(t)$ — оператор $\Phi_T(s)$. Тогда определения (67) и (84) изменяются

$$H(t) = \sum_j \varepsilon_j(t) P_j(t), \tag{101}$$

$$\Phi(t) = \sum_j \exp\left[-i\int_{t_0}^{t} \varepsilon_j(\tau)\, d\tau/\hbar\right] P_j(0). \tag{102}$$

Определяющие $A(t)$ уравнения (73) и (74) примут вид

$$i\hbar\, dA/dt = K'(t) A(t), \quad A(0) = 1, \tag{103}$$

где

$$K'(t) \equiv K(s)/T = i\hbar \sum (dP_j/dt) P_j(t). \tag{104}$$

Согласно определению (92) находим

$$F \equiv F(t_1) = \int_{t_0}^{t_1} \Phi^+(t)\, A^+(t)\, K'(t)\, A(t)\, \Phi(t)\, dt. \tag{105}$$

Дополнительно, для простоты, предположим, что спектр $H(t)$ простой (не вырожден). Выберем множество базисных век-

[1]) Здесь можно сделать те же замечания, что и в сноске к § XVII, 8, в связи с критерием применимости мгновенного приближения.

Бора» перехода $i \to j$, $\alpha_{ji}(t)$ характеризует скорость вращения собственных векторов $H(t)$, она равна компоненте вдоль $|j\rangle_t$ скорости вращения оси $|i\rangle_t$.

Подынтегральное выражение в правой части (111) равно произведению функции $\alpha_{ji}(t)$ на осциллирующую с частотой $\omega_{ji}(t)$ экспоненту. Если α_{ji} и ω_{ji} не зависят от времени, то получаем

$$p_{i\to j} \approx \left|\frac{\alpha_{ji}}{\omega_{ji}}\right|^2 2\left(1-\cos\omega_{ji}T\right).$$

Следовательно, величина $p_{i\to j}$ имеет порядок $|\alpha_{ji}/\omega_{ji}|^2$. Если же зависимость от времени α_{ji} и ω_{ji} достаточно гладкая, то $p_{i\to j}$ не превосходит по порядку величины максимального значения отношения $|\alpha_{ji}/\omega_{ji}|^2$ на интервале (t_0, t_1)

$$p_{i\to j} \lesssim \max\left|\frac{\alpha_{ji}(t)}{\omega_{ji}(t)}\right|^2. \tag{112}$$

Точно так же η_i по порядку величины не больше значения, получающегося суммированием правой части неравенства (112) по всем j, отличным от i. Обычно эта сумма не превосходит отношения $|\alpha_i^{\max}/\omega_i^{\min}|^2$, где $\omega_i^{\min}$ — наименьшее значение боровской частоты перехода из состояния i в ближайшее по энергии состояние, $\alpha_i^{\max}$ — максимальное значение положительной величины $\alpha_i(t)$, определяемой равенством

$$\alpha_i^2(t) = \sum_{j\neq i} |\alpha_{ji}(t)|^2.$$

Возвращаясь к определению α_{ji} (109) и замечая [1]), что

$${}_t\langle i\,|\left(\frac{d}{dt}\,|\,i\rangle_t\right) = 0, \tag{113}$$

видим, что α_i есть длина вектора $d|i\rangle_t/dt$, т. е. «угловая скорость» вектора $|i\rangle_t$. Следовательно, в большинстве случаев ус-

---

[1]) Из соотношений (104) и (106) имеем

$$\frac{d}{dt}\,|\,j\rangle_t = \frac{d}{dt}A(t)\,|\,j\rangle_0 = \frac{dP_j}{dt}\,|\,j\rangle_t \qquad (j=1,\,2,\,\ldots).$$

Сравнивая этот результат с тем, который получается при дифференцировании тождества $P_j(t)\,|\,j\rangle_t = |\,j\rangle_t$, получаем $P_j\left(\frac{d}{dt}\,|\,j\rangle_t\right) = 0$. Следовательно,

$${}_t\langle j\,|\left(\frac{d}{dt}\,|\,j\rangle_t\right) = 0 \qquad (j=1,\,2,\,\ldots). \tag{113'}$$

Условие того, что векторы $|\,j\rangle_t$ являются собственными для оператора $H(t)$, определяет их с точностью до фазового множителя. Условие (113′) фиксирует этот фазовый множитель.

ловие $\eta \ll 1$ выполнено, если

$$\left|\frac{\alpha_i^{\max}}{\omega_i^{\min}}\right|^2 \equiv \left|\frac{\text{максимальная угловая скорость } |i\rangle_t}{\text{минимальная боровская частота для } |i\rangle_t}\right| \ll 1. \qquad (114)$$

Условие (114) можно рассматривать как критерий применимости адиабатического приближения. В действительности оно слишком ограничительно, хотя имеет то преимущество, что с ним довольно просто обращаться. Следует отметить, в частности, что для вычисления $\alpha_i(t)$ или $|\alpha_{ji}(t)|$, которые фигурируют в правой части (112), нет необходимости знать $A(t)$, достаточно только решить задачу на собственные значения $H(t)$ и определить с точностью до фазового множителя векторы $|i\rangle_t$, $\langle j\rangle_t$; кроме того, можно показать, что

$$\alpha_{ji}(t) = -{}_t\langle j|\frac{dH}{dt}|i\rangle_t/\hbar\omega_{ji}(t)$$

(см. задачу 6).

§ 14. Адиабатическое обращение магнитного поля

Вернемся к задаче § 9 и будем использовать те же обозначения. Начальные условия возьмем те же самые, но неравенство (64) больше не выполняется.

Поскольку гамильтониан системы определяется выражением (63), мы видим, что α, L, S и $M_J \equiv M_L + M_S$ — хорошие квантовые числа ($H(t)$ коммутирует с $J_z \equiv L_z + S_z$ для любых t). Следовательно, если $|\alpha LSM_LM_S\rangle$ — начальный вектор состояния, то с течением времени он будет меняться, оставаясь в пространстве векторов, имеющих те же значения α, L, S и $M_L + M_S$.

Рассмотрим подробно случай, когда начальное состояние есть ^2P. Имеется всего 6 различных состояний ^2P — это линейные комбинации 6-ти базисных векторов $\left|\alpha\, 1\, \frac{1}{2}\, M_L M_S\right\rangle$ $\left(M_L = 1, 0, -1;\ M_S = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$, которые мы будем обозначать $|M_LM_S\rangle$. Поскольку все они являются собственными векторами $H^{(0)}$, соответствующее собственное значение можно взять за нулевой уровень энергии. Легко определить отвечающие ему уровни энергии H (задача XVI. 7), которые являются функциями параметра $\rho = \mu_B\mathscr{H}/A\hbar^2$ ($\mu_B \equiv e\hbar/2mc$ — магнетон Бора) и изображены на рис. 12. Каждый уровень отвечает вполне определенному значению $M_J = M_L + M_S$, а соответствующий собственный вектор, как показано на рисунке, стремится к некоторому вектору $|M_LM_S\rangle$ в каждом из пределов $\rho \to \pm\infty$. Мы рассмотрим последовательно случаи $M_J = {}^3/_2$ и $M_J = {}^1/_2$.

Рассмотрим вначале случай $M_J = {}^3/_2$. Существует только одно состояние с таким значением J_z, и отвечающий ему вектор есть $|1\,{}^1/_2\rangle$. Это собственный вектор H для любого t, и простое вычисление дает

$$H\,|1\,{}^1/_2\rangle = A\hbar^2\,({}^1/_2 - 2\rho\,(t))\,|1\,{}^1/_2\rangle.$$

Если начальное состояние атома есть $|1\,{}^1/_2\rangle$, то мы имеем описанный в § 10 случай, когда уравнение Шредингера тривиально

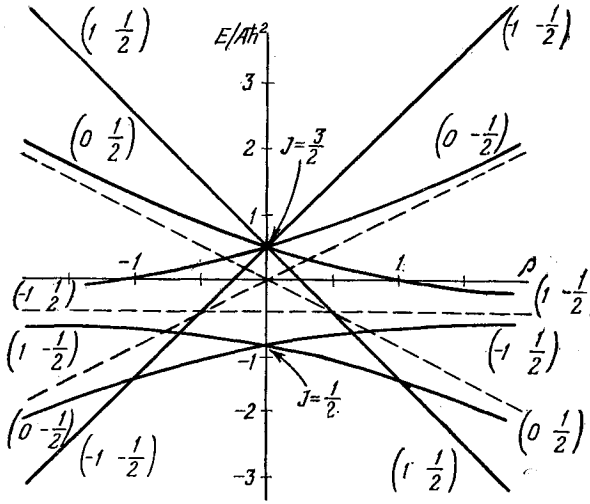

Рис. 12. Положение уровней ^2P как функции напряженности магнитного поля $\mathscr{H}$ ($\rho = \mu_B\mathscr{H}/A\hbar^2$). Числа в скобках у каждой кривой — квантовые числа ($M_L M_S$) собственных состояний в двух предельных случаях: $\rho \to \pm\infty$.

интегрируется. Атом все время остается в этом состоянии, а вектор состояния приобретает только фазовый множитель

$$\exp\left[-iA\hbar\int_{t_0}^{t}({}^1/_2 - 2\rho\,(\tau))\,d\tau\right].$$

В случае линейного изменения магнитного поля (формула (62)) вектор состояния в момент времени T равен

$$\exp(-iA\hbar T)\,|1\,{}^1/_2\rangle,$$

что верно для любого T. В частности, в пределе, когда $A\hbar T \ll 1$, мы получаем результат мгновенного приближения, т. е. вектор $|1\,{}^1/_2\rangle$.

Рассмотрим теперь случай $M_J = {}^1/_2$, когда значению J_z отвечает два собственных вектора H — линейные комбинации век-

торов $|0\,{}^1/_2\rangle$ и $|1\,-{}^1/_2\rangle$. Для решения задачи на собственные значения $H(t)$ в подпространстве, натянутом на эти два вектора, выберем их в качестве базисных векторов, и тогда $H(t)$ будет представлен матрицей

$$A\hbar^2\begin{pmatrix} -\rho & \frac{1}{2}\sqrt{2} \\ \frac{1}{2}\sqrt{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Если ввести матрицы Паули $\boldsymbol{\sigma} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, то эту матрицу можно записать в особенно удобном виде

$$H(t) = \frac{1}{4} A\hbar^2 [(-2\rho - 1) + \boldsymbol{b}\boldsymbol{\sigma}], \tag{115}$$

где вектор $\boldsymbol{b}$ имеет следующие компоненты:

$$b_x = 2\sqrt{2}, \quad b_y = 0, \quad b_z = 1 - 2\rho.$$

Введем также единичный вектор $\boldsymbol{u}$ в направлении $\boldsymbol{b}$:

$$\boldsymbol{b} = b\boldsymbol{u}, \quad b = \sqrt{8 + (1 - 2\rho)^2},$$
$$\boldsymbol{u} \equiv \left(\frac{2\sqrt{2}}{b}, 0, \frac{1 - 2\rho}{b}\right). \tag{116}$$

Заметим, что вектор $\boldsymbol{b}$ и векторный оператор $\boldsymbol{\sigma}$ принадлежат трехмерному векторному пространству, которое, однако, не имеет ничего общего с обычным пространством. Мы использовали простой математический прием, позволивший нам вывести некоторые свойства посредством геометрических соображений, которые справедливы в обычном пространстве.

Из (115) и (116) получаем

$$H(t) = \frac{1}{4} A\hbar^2 [(-1 - 2\rho) + b(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{u})], \tag{117}$$

т. е. $H(t)$ есть функция оператора $(\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{u})$. Задача на собственные значения теперь легко решается, они равны $\frac{1}{4} A\hbar^2(-1 - 2\rho \pm b)$, а проекторы $P_\pm = \frac{1}{2}(1 \pm \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{u})$.

Обозначим соответствующие собственные векторы $|+\rangle$ и $|-\rangle$. Они определены с точностью до фазы, которую можно фиксировать первым из условий (106), но поскольку эта фаза в дальнейшем несущественна, мы не будем на этом останавливаться. Легко проследить за непрерывной эволюцией этих уровней и соответствующих им проекторов как функций параметра $\rho(t)$ (рис. 13). Когда ρ меняется от $-\infty$ до $+\infty$, собственный вектор $|+\rangle$ меняется (исключая фазовый множитель) от $|0\,{}^1/_2\rangle$ до $|1\,-{}^1/_2\rangle$, а соответствующий уровень движется вдоль верх-

ней ветви гиперболы на рис. 13; в то же время собственный вектор $|-\rangle$ меняется от $|1\ -{}^1/_2\rangle$ до $|0\ {}^1/_2\rangle$, а соответствующий уровень движется вдоль нижней ветви гиперболы.

Предположим, например, что начальное состояние системы есть $|0\ {}^1/_2\rangle$. Если изменение направления поля происходит достаточно медленно, то вектором состояния системы всегда будет вектор $|+\rangle$ (с точностью до фазового множителя), и, после того как поле изменит свое направление на противоположное,

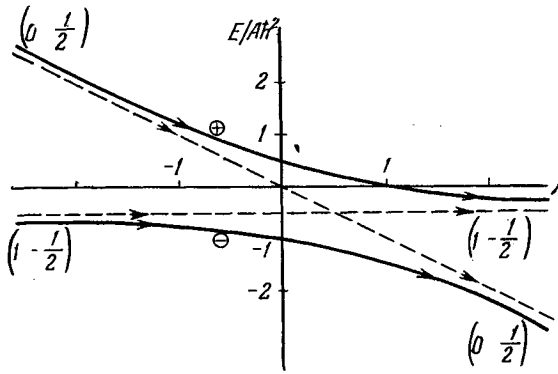

Рис. 13. Изменение двух уровней ^2P, $M_J = 1/2$, при обращении магнитного поля (обозначения те же, что и на рис. 3). Сплошная кривая соответствует адиабатическому обращению, пунктирная — мгновенному.

система будет находиться в состоянии $|1\ -{}^1/_2\rangle$. Используя результаты предыдущего параграфа, можно определить критерий адиабатичности этого перехода. Используя те же обозначения, находим (соотношение (112))

$$\eta_+ = p_{+\to-} \leqslant \max\left|\frac{\alpha(t)}{\omega(t)}\right|^2 \ll 1, \tag{118}$$

где $\omega(t)$ — боровская частота перехода $+\to-$,

$$\omega(t) = \frac{1}{2}A\hbar b = \frac{1}{2}A\hbar\sqrt{8+(1-2\rho)^2}$$

и $\alpha(t)$ — проекция скорости $|+\rangle$ на $|-\rangle$. Отсюда следует, что

$$|\alpha(t)| = |\langle -|(dP_+/dt)|+\rangle| = \frac{1}{2}|\langle -|(\sigma\, d\boldsymbol{u}/dt)|+\rangle|.$$

Так как вектор $d\boldsymbol{u}/dt$ перпендикулярен $\boldsymbol{u}$, а $|+\rangle$ и $|-\rangle$ — собственные векторы оператора $(\sigma\boldsymbol{u})$, то

$$|\alpha(t)| = \frac{1}{2}\left|\frac{d\boldsymbol{u}}{dt}\right| = \frac{\sqrt{8}}{8+(1-2\rho)^2}\left|\frac{d\rho}{dt}\right|.$$

При изменении поля по линейному закону (62) максимум $|\alpha/\omega|$ достигается при $\rho = +{}^1/_2$, т. е.

$$\max\left|\frac{\alpha}{\omega}\right| = \frac{1}{2}\frac{\mu_B\mathscr{H}_0}{A\hbar^2}\frac{1}{A\hbar T}.$$

В этом случае условие (118) выполнено, если

$$T' \equiv \frac{2A\hbar^2}{\mu_B\mathscr{H}_0}T \gg (1/A\hbar), \tag{119}$$

где T' — время, необходимое для изменения магнитной энергии связи $\mu_B\mathscr{H}$ от $-2A\hbar^2$ до $2A\hbar^2$. Именно в течение этого периода вектор $|+\rangle$ вращается от $|0{}^1/_2\rangle$ к $|1-{}^1/_2\rangle$. Условие (119) показывает, что этот период должен быть велик по сравнению с $1/A\hbar$ — периодом, характеризующим переход $+\to-$.

Интересно сравнить условие адиабатического перехода и условие быстрого перехода (64). Последнее, в действительности, является излишне ограничительным. Это необходимое условие для того, чтобы вектор состояния практически не менялся за все время T обращения поля. Однако за исключением определенного выше интервала T', собственные векторы гамильтониана остаются практически фиксированными в течение этого времени, а вектор состояния системы просто умножается на фазовый множитель. Для того чтобы динамическое состояние системы осталось неизменным, т. е. чтобы вектор состояния за время обращения поля изменился разве лишь на фазовый множитель, достаточно, чтобы условие быстрого перехода выполнялось только в интервале времени T', в течение которого происходит вращение собственных векторов H, т. е.

$$T' \ll 1/A\hbar \tag{120}$$

(см. задачу 8).

ЗАДАЧИ И УПРАЖНЕНИЯ

1. Пусть u_1 и u_2 — два ортогональных собственных состояния, отвечающих двукратно вырожденному уровню гамильтониана H_0 системы. Введение постоянного возмущения V устраняет вырождение и расщепляет уровень на два с расстоянием ε между ними. Предположим, что система первоначально находится в состоянии u_1, а возмущение V действует в интервале времени T. Пусть $W_{1\to2}$ — вероятность найти систему в состоянии u_2, после того как возмущение перестает действовать. Показать, что $W_{1\to2}$ периодически зависит от T с частотой $\varepsilon/\hbar$ и что в пределе, когда $\varepsilon T \ll \hbar$, получается результат первого порядка теории возмущений. Что необходимо для того, чтобы $W_{1\to2}$ исчезало, каково бы ни было T?

2. Атом водорода находится в электрическом поле $\mathscr{E} = \mathscr{E}_0\cos\omega t$, осциллирующем с частотой ω, которая больше частоты ионизации атома $me^4/2\hbar^3$.

Если первоначально атом находится в основном состоянии, то какова вероятность в единицу времени перехода в ионизованное состояние (в предположении, что можно использовать плоские волны для описания ионизированных состояний)? Какого угловое распределение электронов, излучаемых в этом процессе возбуждения атома? [*N. B.* Данный процесс является фотоэлектрическим эффектом, для которого тем самым получено полуклассическое описание, при котором электрическое поле не квантуется... Результаты совпадают с теми, которые получаются при корректном подходе с квантованным электромагнитным полем (см. задачу XXI. 12).]

3. При β-распаде атомное ядро испускает электрон со скоростью, которая обычно близка к c, и заряд ядра меняется от Ze до $(Z+1)e$. Показать, что влияние такого перехода на другие электроны можно рассматривать в мгновенном приближении. Оправдать применение метода в случае перехода тритона H^3 ($\equiv 1$ протон $+ 2$ нейтрона) в He^3 ($\equiv 1$ нейтрон $+ 2$ протона), где средняя кинетическая энергия испущенного электрона только 16 *кэв* ($mc^2 = 500$ *кэв*). Первоначально тритон находится в основном состоянии. Какова вероятность найти после распада ион He^+ в $1s$-состоянии? В $2s$-состоянии, в состоянии с $l \neq 0$?

4. Пусть $H(t)$ — гамильтониан неконсервативной системы. Предположим, что существует не зависящий от времени вектор $|u\rangle$, удовлетворяющий уравнению $H(t)|u\rangle = \varepsilon(t)|u\rangle$. Показать, что вектор

$$\exp\left(-i\int_{t_0}^{t}\varepsilon(\tau)\,d\tau/\hbar\right)|u\rangle$$

удовлетворяет уравнению Шредингера для этой системы.

5. Пусть $P_1, P_2, \ldots, P_j, \ldots$ — полный набор ортогональных проекторов. Предположим, что каждый из них есть непрерывная и дифференцируемая функция параметра s и что при изменении s сохраняются соотношения ортогональности и полноты

$$P_jP_k = \delta_{jk}P_k, \quad \sum_j P_j = 1.$$

Показать, что оператор

$$K(s) \equiv i\hbar\sum_j (dP_j/ds)\,P_j \equiv -i\hbar\sum_j P_j\,(dP_j/ds)$$

эрмитов и удовлетворяет коммутационным соотношениям (75). Показать, что справедливы тождества

$$P_jKP_j = 0 \quad (j = 1, 2, \ldots)$$

$$P_jKP_k = i\hbar P_j\,(dP_k/ds)\,P_k = -i\hbar P_j\,(dP_j/ds)\,P_k.$$

6. Пусть операторы $P_j(s)$ $(j = 1, 2, \ldots)$ те же, что и в предыдущей задаче. Показать, что производная от оператора

$$H(s) = \sum_j \varepsilon_j(s)\,P_j(s),$$

где $\varepsilon_j(s)$ — дифференцируемая функция s, удовлетворяет уравнению

$$P_j\,(dH/ds)\,P_k = (\varepsilon_k - \varepsilon_j)\,P_j\,(dP_k/ds)\,P_k + \delta_{jk}\,(d\varepsilon_k/ds)\,P_k.$$

Вывести отсюда, что «угловая скорость» $\alpha_{ji}(t)$, определяемая уравнением (109), выражается также соотношением

$$\alpha_{ji}(t) = \frac{-1}{\hbar\omega_{ji}(t)}\, {}_t\langle j \mid \frac{dH}{dt} \mid i\rangle_t \qquad (j \neq i).$$

7. Однородное магнитное поле $\mathscr{H}$ заданной величины вращается с постоянной угловой скоростью α вокруг оси, составляющей угол θ с направлением магнитного поля В поле помещена бесконечно тяжелая частица со спином $\boldsymbol{J}$. Положим $\hbar = 1$, обозначим $\boldsymbol{u}(t)$ единичный вектор, параллельный магнитному полю, а $\gamma = \mu\mathscr{H}$, где μ — гиромагнитное отношение частицы. Тогда движение спина $\boldsymbol{J}$ определяется гамильтонианом $H(t) = -\gamma(\boldsymbol{J}\boldsymbol{u})$. Пусть $t = 0$ есть начальный момент времени, J_0 — компонента $\boldsymbol{J}$ вдоль $\boldsymbol{u}(0)$, J_z — компонента по оси вращения поля.

Построить унитарный оператор «вращающихся осей», показать, что оператор эволюции в шредингеровском представлении дается формулой

$$U(t) = \exp(-i\alpha J_z t)\exp[i(\gamma J_0 + \alpha J_z)t].$$

Показать справедливость адиабатической теоремы для этого примера; установить непосредственным вычислением и методом § 13 критерий применимости адиабатического приближения $(\alpha \sin\theta/\gamma)^2 \ll 1$.

8. Для определенной в § 14 системы рассмотрим уравнение Шредингера при $M_j = \frac{1}{2}$. Пусть $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ — компоненты решения в определенном там представлении. Возьмем $t_0 = -\frac{1}{2}T$ и обозначим

$$T' = 2A\hbar^2 T/\mu_B\mathscr{H}_0 \ (\ll T), \quad \varkappa = 4/A\hbar T'.$$

Показать, что

$$u = y\exp(-i\varkappa\xi^2), \quad v = i(dy/d\xi)\exp(-i\varkappa\xi^2),$$

где y как функция переменной $\xi = A\hbar t/\sqrt{2}$ удовлетворяет уравнению

$$y'' - \frac{1}{2}i(\sqrt{2} + 4\varkappa\xi)y' + y = 0.$$

Если ввести $x = \xi + (\sqrt{2}/4\varkappa)$, то общее решение этого уравнения можно записать в виде

$$y = A_0 F\left(\frac{i}{4\varkappa} \mid \frac{1}{2} \mid i\varkappa x^2\right) + A_1 x F\left(\frac{1}{2} + \frac{i}{4\varkappa} \mid \frac{3}{2} \mid i\varkappa x^2\right).$$

Пусть начальное состояние есть $|0\frac{1}{2}\rangle$. Показать, используя асимптотику гипергеометрических функций, что вероятность $\tilde{\omega}$ того, что система останется в том же состоянии в конце времени T, дается формулой (справедливой, если $T \gg (T'/A\hbar)^{1/2}$)

$$\tilde{\omega} = \left(\frac{1-\gamma}{1+\gamma}\right)^2, \quad \gamma = \operatorname{th}\frac{\pi}{4\varkappa}.$$

Показать, что условия (119) и (120) действительно отвечают адиабатическому и быстрому переходам соответственно.