

3 Nestacionární poruchová teorie

Schödingerův, Heisenbergův, Diracův obraz

Mějme systém popsany Hamiltoniánem \hat{H} , který lze rozložit na část \hat{H}_0 nezávislé na čase a na časově závislou poruchu \hat{H}_I :

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}_I(t).$$

Dále mějme v čase t_0 vektor $|\psi(t_0)\rangle$ popisující stav systému, libovolný časově nezávislý operátor \hat{A} a časově závislý operátor $\hat{B}(t)$. Fyzikální závěry se nezmění, pokud provedeme unitární transformaci současně stavového vektoru a operátorů, danou unitárním operátorem \hat{U} :

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= \hat{U} |\psi\rangle, \\ \hat{A}' &= \hat{U} \hat{A} \hat{U}^\dagger. \end{aligned}$$

Tuto transformaci můžeme učinit v každém čase t obecně různou. V praxi se užívají tři takovéto transformace (fyzikálně ekvivalentní obrazy).

1. Schrödingerův obraz

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad \hat{A}, \hat{B}(t)$$

Operátor \hat{A} zůstává v čase konstantní, operátor $\hat{B}(t)$ se mění v čase podle svého funkčního předpisu.

Diferenciální rovnice (spolu s počáteční podmínkou) pro evoluční operátor $\hat{U}(t, t_0)$:

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1},$$

která má v případě, že celkový Hamiltonián \hat{H} nezávisí na čase, řešení

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}.$$

Z evoluční rovnice pro evoluční operátor plyne rovnice pro stavový vektor (*časová Schrödingerova rovnice*)

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle.$$

2. Heisenbergův obraz

$$\begin{aligned} |\psi^H(t; t_1)\rangle &= \hat{U}^\dagger(t, t_1) |\psi(t)\rangle = |\psi(t_1)\rangle = \text{konst.}, \\ \hat{A}^H(t; t_1) &= \hat{U}^\dagger(t, t_1) \hat{A} \hat{U}(t, t_1), \\ \hat{B}^H(t; t_1) &= \hat{U}^\dagger(t, t_1) \hat{B}(t) \hat{U}(t, t_1). \end{aligned}$$

(t_1 je vnější parametr). Stavový vektor $|\psi\rangle$ se s časem nemění, veškerý časový vývoj je zahrnut v časové závislosti operátorů.

Diferenciální rovnice pro stavový vektor a pro operátory:

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\psi^H(t; t_1)\rangle}{\partial t} &= 0 & |\psi^H(t_1; t_1)\rangle &= |\psi(t_1)\rangle \\ \frac{\partial \hat{A}^H(t; t_1)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^H(t; t_1), \hat{H}^H(t)] & \hat{A}^H(t_1; t_1) &= \hat{A} \\ \frac{\partial \hat{B}^H(t; t_1)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^H(t; t_1), \hat{H}^H(t)] + \frac{\partial_{t_1}^H \hat{B}(t)}{\partial t} & \hat{B}^H(t_1; t_1) &= \hat{B}(t_1), \end{aligned}$$

kde jsme definovali

$$\frac{\partial_{t_1}^H \hat{B}(t)}{\partial t} \equiv \hat{U}^\dagger(t, t_1) \frac{\partial \hat{B}(t)}{\partial t} \hat{U}(t, t_1).$$

Pokud máme systém v časově neproměnném vnějším poli, tj. $[\hat{H}, \hat{U}(t; t_1)] = 0$, pak

$$\hat{H}^H(t; t_1) = \hat{U}^\dagger(t, t_1) \hat{H} \hat{U}(t, t_1) = \hat{H}.$$

3. Diracův (interakční) obraz

$$\begin{aligned} |\psi^D(t; t_1)\rangle &= \hat{U}_0^\dagger(t; t_1) |\psi(t)\rangle \\ \hat{A}^D(t; t_1) &= \hat{U}_0^\dagger(t; t_1) \hat{A} \hat{U}_0(t; t_1) \\ \hat{B}^D(t; t_1) &= \hat{U}_0^\dagger(t; t_1) \hat{B}(t) \hat{U}_0(t; t_1) \end{aligned}$$

Zde

$$\hat{U}_0(t; t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(t-t_1)}$$

je evoluční operátor Hamiltoniánu \hat{H}_0 , tj. řešení diferenciální rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}_0(t; t_1)}{\partial t} = \hat{H}_0 \hat{U}_0(t; t_1) \quad \hat{U}_0(t_1; t_1) = \hat{1}.$$

Bez újmy na obecnosti volíme čas t_1 stejný jako v případě obrazu Heisenbergova.

Diferenciální rovnice pro stavový vektor a pro operátory:²

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial |\psi^D(t; t_1)\rangle}{\partial t} &= \hat{H}_I^D(t; t_1) |\psi^D(t; t_1)\rangle & |\psi^D(t_1; t_1)\rangle &= |\psi(t_1)\rangle \\ \frac{\partial \hat{A}^D(t; t_1)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}^D(t; t_1), \hat{H}_I^D(t; t_1)] & \hat{A}^D(t_1; t_1) &= \hat{A} \\ \frac{\partial \hat{B}^D(t; t_1)}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{B}^D(t; t_1), \hat{H}_I^D(t; t_1)] + \frac{\partial_{t_1}^D \hat{B}(t)}{\partial t} & \hat{B}^D(t_1; t_1) &= \hat{B}(t_1), \end{aligned}$$

kde (podobně jako u obrazu Heisenbergova)

$$\frac{\partial_{t_1}^D \hat{B}(t)}{\partial t} \equiv \hat{U}_0^\dagger(t, t_1) \frac{\partial \hat{B}(t)}{\partial t} \hat{U}_0(t, t_1).$$

² Ve shodě s definicí operátoru v Diracově obraze je

$$\hat{H}_I^D(t; t_1) = \hat{U}_0^\dagger(t; t_1) \hat{H}_I(t) \hat{U}_0(t; t_1).$$

Řešení první rovnice, která se v literatuře nazývá *Schwingerova-Tomonagova* a je analogií Schrödingerovy rovnice, lze psát ve tvaru

$$|\psi^D(t; t_1)\rangle = \hat{S}(t, t_0; t_1) |\psi^D(t_0; t_1)\rangle,$$

kde *evoluční operátor v Diracově obraze*

$$\hat{S}(t, t_0; t_1) = \hat{U}_0^\dagger(t, t_1) \hat{U}(t, t_0) \hat{U}_0(t_0, t_1)$$

je řešením diferenciální rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \hat{S}(t, t_0; t_1)}{\partial t} = \hat{H}_I^D(t; t_1) \hat{S}(t, t_0; t_1) \quad \hat{S}(t_0, t_0; t_1) = \hat{1}. \quad (3.0.1)$$

V Heisenbergově i Diracově obraze se objevuje vnější parametr t_1 , který udává čas, ve kterém se operátory i stavové vektory všech tří uvedených obrazů rovnají. Nadále budeme volit $t_1 = 0$ a nebudeme tento parametr ve vzorcích explicitně vypisovat.

Pokud H_0 představuje volný Hamiltonián, pak se zavádějí ještě *Møllerovy operátory*

$$\Omega^{(\pm)} = \lim_{t_0 \rightarrow \mp\infty} \hat{S}(0, t_0)$$

a operátor *S*-matice

$$\hat{S} = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} \hat{S}(t, t_0).$$

Řešení rovnice (3.0.1) lze hledat ve tvaru integrální rovnice, kterou lze vyjádřit ve formě řady³

$$\begin{aligned} \hat{S}(t, t_0) &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t_1) \hat{S}(t_1, t_0) dt_1 = \\ &= \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t_1) \left\{ \hat{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_I^D(t_2) \hat{S}(t_2, t_0) dt_2 \right\} dt_1 = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \hat{S}^{(n)}(t, t_0), \end{aligned} \quad (3.0.2)$$

kde

$$\begin{aligned} \hat{S}^{(0)} &= \hat{1} \\ \hat{S}^{(1)} &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t_1) dt_1 \\ &\vdots \\ \hat{S}^{(n)} &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t_1) \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_I^D(t_2) \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} \hat{H}_I^D(t_n) dt_n \cdots dt_2 dt_1 \end{aligned} \quad (3.0.3)$$

Rozvoj (3.0.2) lze formálně sečíst. Jelikož však Diracovy obrazy Hamiltoniánu v různých časech mezi sebou navzájem nekomutují, $[\hat{H}_I^D(t_j), \hat{H}_I^D(t_k)] \neq 0$ pro $t_j \neq t_k$,

³Dysonova řada

musíme užít T-součin, definovaný následujícím způsobem: Nechť operátory $\hat{A}_j(t)$ ve stejném čase komutují, tj. nechť $[A_j(t), A_k(t)] = 0$. Pak

$$\mathbb{T} \left(\hat{A}_N(t_N) \cdots \hat{A}_1(t_1) \right) \equiv \hat{A}_{i_N}(t_{i_N}) \cdots \hat{A}_{i_1}(t_{i_1}) \quad t_{i_N} \geq t_{i_{N-1}} \geq \cdots \geq t_{i_1}$$

Užitím T-součinu můžeme psát

$$\hat{S}(t, t_0) = \mathbb{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_I^D(t') dt' \right)$$

Nestacionární poruchová teorie

Stejně jako u stacionární poruchové teorie budeme i zde předpokládat, že spektrum Hamiltoniánu \hat{H}_0 známe:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 |\phi_m\rangle &= E_m^{(0)} |\phi_m\rangle \\ \langle \phi_m | \phi_n \rangle &= \delta_{mn} \\ \sum_m |\phi_m\rangle \langle \phi_m| &= \hat{1}. \end{aligned}$$

Maticové elementy rozvoje evolučního operátoru v Diracově obraze (3.0.2) v této bázi označíme jako

$$S_{fi}^{(n)}(t, t_0) \equiv \langle \phi_f | \hat{S}^{(n)}(t, t_0) | \phi_i \rangle$$

a pro jednotlivé členy (3.0.3) dostaneme

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(0)}(t, t_0) &= \delta_{fi} \\ S_{fi}^{(1)}(t, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}_{Ifi}(t_1) e^{i\omega_{fi}t_1} dt_1 \\ S_{fi}^{(2)}(t, t_0) &= \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t \int_{t_0}^{t_1} \hat{H}_{Ifm}(t_1) e^{i\omega_{fm}t_1} \hat{H}_{Imi}(t_2) e^{i\omega_{mi}t_2} dt_1 dt_2 \end{aligned} \quad (3.0.4)$$

kde jsme zavedli ⁴

$$H_{Ifi}(t) \equiv \langle \phi_f | \hat{H}_I(t) | \phi_i \rangle \quad \omega_{fi} \equiv \frac{1}{\hbar} (E_f^{(0)} - E_i^{(0)})$$

Pravděpodobnost přechodu z počátečního stavu $|\phi_i\rangle$ připraveného v čase t_0 do koncového stavu $|\phi_f\rangle$ v čase t je

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t_0 \rightarrow t) &\equiv |\langle \phi_f(t) | \phi_i(t_0) \rangle|^2 \\ &= |\langle \phi_f^D(t) | \phi_i^D(t_0) \rangle|^2 \\ &= \left| \langle \phi_f | \hat{S}(t, t_0) | \phi_i \rangle \right|^2 \end{aligned}$$

a v poruchové teorii dostáváme

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t_0 \rightarrow t) = \left| S_{fi}^{(1)}(t, t_0) + S_{fi}^{(2)}(t, t_0) + S_{fi}^{(3)}(t, t_0) + \cdots \right|^2$$

⁴ Občas budeme používat zjednodušené značení $H_{Ifi}(t) = \langle f | \hat{H}_I(t) | i \rangle$.

Pro **časově neproměnnou poruchu** zapnutou v čase t_0 dostaneme do 1. řádu poruchové teorie

$$\mathcal{P}_{i \rightarrow f}(t_0 \rightarrow t) = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{Ifi}|^2 \delta_{\Delta t}(\omega_{fi}) \Delta t \quad (3.0.5)$$

kde $\Delta t = t - t_0$ a

$$\delta_{\Delta t}(\omega_{fi}) \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\sin^2 \frac{\omega_{fi} \Delta t}{2}}{\frac{\omega_{fi}^2 \Delta t}{2}} \xrightarrow{\Delta t \rightarrow \infty} \delta(\omega_{kj})$$

je funkce, která má v okolí nuly ostré maximum pološířky $\simeq 2\pi\Delta t$ a výšky $\Delta t/2\pi$. Za dobu Δt tedy dojde k přechodům prakticky pouze v oblasti tohoto maxima, tj.

$$\omega_{fi} \lesssim \frac{2\pi}{\Delta t}$$

a označíme-li $\Delta E^{(0)} \equiv |E_f^{(0)} - E_i^{(0)}|$, dostaneme

$$\boxed{\Delta E^{(0)} \Delta t \lesssim 2\pi\hbar}$$

Tento vztah se nazývá *relace neurčitosti mezi časem a energií*.

Pokud lze na okolí $E_i^{(0)}$ pohlížet jako na kontinuum hladin (jedná se o přechod do spojité části spektra, nebo je v tomto okolí velké množství diskrétních hladin), pak se (3.0.5) píše ve tvaru *Fermiho zlatého pravidla*

$$\boxed{w_{i \rightarrow F}(t_0 \rightarrow t) \equiv \frac{\mathcal{P}_{i \rightarrow F}(t_0 \rightarrow t)}{\Delta t} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{Ifi}|^2 \rho_f(E) \Big|_{E \simeq E_i^{(0)}}} \quad (3.0.6)$$

což je rychlost přechodu z počátečního stavu i do celého jeho okolí $f \in F$, na kterém je $|H_{Ifi}|^2$ přibližně konstantní.

Pro **harmonickou poruchu** o frekvenci ω

$$\hat{H}_I = \underbrace{\hat{h}^{(+)} e^{i\omega t}}_{\text{emise}} + \underbrace{\hat{h}^{(-)} e^{-i\omega t}}_{\text{absorpce}} \quad (3.0.7)$$

dostaneme užitím podobného postupu jako v případě konstantní poruchy vztah

$$\boxed{\omega_{fi} \simeq \pm\omega, \quad \text{tj. } E_f^{(0)} \simeq E_i^{(0)} \pm \hbar\omega} \quad (3.0.8)$$

platící za předpokladu, že porucha je zapnuta po dostatečně dlouhý čas.

Fermiho zlaté pravidlo v tomto případě zní

$$\boxed{w_{i \rightarrow F}(t_0 \rightarrow t) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| h_{fi}^{(+)} \right|^2 \rho_f(E) \Big|_{E \simeq E_i^{(0)} - \hbar\omega} \quad (\text{stimulovaná emise}),} \\ = \frac{2\pi}{\hbar} \left| h_{fi}^{(-)} \right|^2 \rho_f(E) \Big|_{E \simeq E_i^{(0)} + \hbar\omega} \quad (\text{stimulovaná absorpce}).} \quad (3.0.9)$$

Pokud máme periodickou poruchu, která není harmonická, můžeme ji pomocí Fourierovy transformace na periodickou rozložit a počítat pravděpodobnost přechodu pro každou složku zvlášť.

Díky rovnosti $\langle i | h^{(+)} | f \rangle = \langle f | h^{(-)} | i \rangle$, platí *princip detailní rovnováhy*, který se dá slovně vyjádřit jako

$$\frac{\text{rychlost emise } i \rightarrow [f]}{\text{hustota kvantových stavů } [f]} = \frac{\text{rychlost absorpce } f \rightarrow [i]}{\text{hustota kvantových stavů } [i]}.$$

Poznámka:

Diferenciální rovnici (3.0.1) můžeme také zkoušet v bázi $|\phi_m\rangle$ řešit přímo. Označíme-li

$$S_{fi}(t, t_0) \equiv \langle \phi_f | \hat{S}(t, t_0) | \phi_i \rangle,$$

pak dostaneme

$$i\hbar \frac{\partial S_{fi}(t, t_0)}{\partial t} = \sum_m \hat{H}_{Ifm}(t) e^{i\omega_f m t} S_{mi}(t, t_0) \quad S_{fi}(t_0, t_0) = \delta_{fi}$$

což je soustava vázaných obyčejných diferenciálních rovnic 1. řádu. Soustavu lze explicitně vyřešit například pro dvouhladinový systém, viz příklad 3.2.

3.1 Nabíý harmonický oscilátor

Jednorozměrný harmonický oscilátor s nábojem q , popsany Hamiltoniánem

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2M} \hat{p}^2 + \frac{1}{2} M \Omega^2 \hat{x}^2,$$

vložíme do homogenního časově proměnného elektrického pole s intenzitou

$$E(t) = \frac{A}{\tau\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2}$$

(A, τ jsou reálné parametry).

1. Jak vypadá Hamiltonián interakce oscilátoru s elektrickým polem?
2. Určete hybnost, která se klasicky přenese mezi časy $t_i \rightarrow -\infty$ a $t_f \rightarrow \infty$.
3. Spočítejte pravděpodobnost přechodu ze základního stavu v čase $t_i \rightarrow -\infty$ do prvního excitovaného stavu v čase $t_f \rightarrow \infty$ v rámci 1. řádu nestacionární poruchové teorie.

Řešení:

1. Zadaná intenzita elektrického pole odpovídá potenciálu

$$V(x, t) = -qE(t)x,$$

takže operátor časově závislé opravy k Hamiltoniánu \hat{H}_0 je

$$\hat{H}_I(t) = -qE(t)\hat{x}.$$

2. Přenesená hybnost je dána časovým integrálem elektrické síly

$$P = \int_{t_i}^{t_f} F(t) dt = \int_{-\infty}^{\infty} \left[-\frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \right] dt = \frac{qA}{\tau\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2} dt = qA.$$

3. Příslušné elementy S -matice jsou podle (3.0.4)

$$\begin{aligned}
 S_{10}^{(0)} &= 0 \\
 S_{10}^{(1)} &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle 1 | [-qE(t)\hat{x}] | 0 \rangle e^{i\omega_{10}t_1} dt_1 = \left| \begin{array}{l} \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\Omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \\ \omega_{10} = \frac{E_1^{(0)} - E_0^{(0)}}{\hbar} = \Omega \end{array} \right| \\
 &= \frac{iqA}{\sqrt{2\pi\hbar M\Omega}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(\frac{t}{\tau}\right)^2 + i\Omega t} \frac{dt}{\tau}}_{\sqrt{\pi} e^{-\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right)^2}} = \frac{iqA}{\sqrt{2\hbar M\Omega}} e^{-\left(\frac{\Omega\tau}{2}\right)^2}.
 \end{aligned}$$

Pravděpodobnost přechodu je tedy do prvního řádu poruchové teorie rovna

$$\mathcal{P}_{0 \rightarrow 1} = \left| S_{10}^{(0)} + S_{11}^{(1)} \right|^2 = \frac{q^2 A^2}{2\hbar M\Omega} e^{-\frac{\Omega^2 \tau^2}{2}} = \frac{P^2}{2\hbar M\Omega} e^{-\frac{\Omega^2 \tau^2}{2}}.$$

Poznámka:

Uvedená porucha v prvním řádu poruchové teorie způsobí přechod nanejvýš na sousední energetickou hladinu harmonického oscilátoru.

3.2 Dvuhladinový systém s periodickou poruchou

Dvuhladinový systém je popsán Hamiltoniánem

$$\begin{aligned}
 \hat{H}(t) &= \hat{H}_0 + \hat{H}_I(t), \\
 \hat{H}_0 &= \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} \end{pmatrix} = E_1^{(0)} |\phi_1\rangle \langle \phi_1| + E_2^{(0)} |\phi_2\rangle \langle \phi_2|, \\
 \hat{H}_I(t) &= \Theta(t) \begin{pmatrix} 0 & \gamma e^{i\omega t} \\ \gamma e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} = \Theta(t) [\gamma e^{i\omega t} |\phi_1\rangle \langle \phi_2| + \gamma e^{-i\omega t} |\phi_2\rangle \langle \phi_1|],
 \end{aligned}$$

přičemž operátor $\hat{H}_I(t)$ představuje periodickou poruchu, která je zapnuta v čase $t_0 = 0$ (formálně zapsáno pomocí funkce Θ), γ je reálný parametr, který určuje sílu poruchy, a $E_{1,2}^{(0)}$ jsou neporušené energie.

V čase $t < 0$ je systém ve stavu $|\phi_i\rangle \equiv |\phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

1. Spočítejte neporuchově (tj. řešením soustavy diferenciálních rovnic pro příslušné maticové elementy operátoru S -matice) pravděpodobnost $\mathcal{P}_{1 \rightarrow 2}(t)$, se kterou se bude systém nacházet ve stavu $|\phi_2\rangle$ v čase $t > 0$. Vzorec, který dostanete, se nazývá *Rabiho formule*.
2. Řešte totéž do druhého řádu nestacionární poruchové teorie a získanou pravděpodobnost srovnajte s přesným řešením. Za jaké podmínky toto přibližné řešení dobře aproximuje přesný výsledek?
3. Za jaké podmínky můžeme v čase $t > 0$ naměřit, že se systém nachází ve stavu $|\phi_2\rangle$ s pravděpodobností jedna?