

ЛЕКЦИЯ #03
НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ - 2
ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПОЛЕ
ЗОЛОТОЕ ПРАВИЛО ФЕРМИ

TEST 01

§ 3.1 Квадратичный распад. Квантовый эффект Зенона.

◆ Особый интерес представляет случай перехода под действием гармонического поля в плотный дискретный спектр (а в пределе – в непрерывный спектр). В этом случае условие применимости ТВ (2.37) может одновременно нарушаться для многих конечных состояний, и целесообразно рассматривать внезапное включение поля ($\sigma = 1$).

Измеряемой в эксперименте величиной часто является **суммарная вероятность** во все конечные состояния.

Рассматривая переход из начального состояния $|n\rangle$ в выше лежащие состояния $|k\rangle$, так что $\omega_{kn} > 0$, мы можем сохранить в формуле (2.34) только важнейший, второй член:

$$W_{\Sigma} = \sum_k \frac{|V_{kn}|^2}{4\hbar^2} \left[\frac{1 - 2\sigma \cos \Delta_k t + \sigma^2}{\Delta_k^2} \right] = \sum_k \frac{|V_{kn}|^2}{\hbar^2} \left[\frac{\sin^2 \frac{\Delta_k t}{2}}{\Delta_k^2} \right]. \quad (1)$$

При малых временах (таких, что для всех $|k\rangle$, для которых матричные элементы $|V_{kn}|^2$ дают существенный вклад в сумму, можно считать $\Delta_k t \ll 1$) можно заменить в последнем члене синус его аргументом, и тогда

$$W_{\Sigma} = \sum_k \frac{|V_{kn}|^2}{4\hbar^2} t^2 = \frac{|V_{nn}^2|}{4\hbar^2} t^2. \quad (2)$$

Таким образом, вероятность сохранения системы в исходном состоянии $W_0 = 1 - W_{\Sigma}$ убывает по закону

$$W_0 = 1 - \Sigma t^2. \quad (3)$$

Хотя интервал времени, на котором применимо выражение (3), обычно невелик, такой закон убывания начальной вероятности (закон распада) имеет принципиальное значение.

Пусть при $t = 0$ проведено измерение, установившее наличие системы в начальном состоянии, а в момент $t = \theta$ оно повторено. Вероятность остаться в начальном состоянии

$$W_0^{(1)} = 1 - \Sigma\theta^2 \approx \exp(-\Sigma\theta^2). \quad (4)$$

Пусть теперь повторные измерения проведены дважды – в моменты $t = \theta/2$ и $t = \theta$. Вероятность остаться в начальном состоянии теперь равна

$$W_0^{(2)} = \left[1 - \Sigma \left(\frac{\theta}{2} \right)^2 \right]^2 \approx \exp\left(-\frac{\Sigma\theta^2}{2} \right). \quad (5)$$

Проведенные на том же интервале θ в эквидистантные моменты K измерений уменьшат вероятность распада в K раз и могут сделать ее сколь угодно малой. Это явление называется *квантовым эффектом Зенона* [MS77, X90].

📖 [MS77] В. Misra and E.C.G. Sudarshan
The Zeno's paradox in quantum theory
J. Math. Phys., 1977, v. 18, no. 4, p. 756 – 763

📖 [X90] Л.А. Халфин
Квантовый эффект Зенона
УФН, 1990, т. 160, вып. 10, с. 185 – 188.

Величину $\tau_Z = 1/\sqrt{\Sigma}$ называют *временем Зенона*.

§ 3.2 Линейный распад. Золотое правило Ферми.

★ Суммарная вероятность перехода в резонансные состояния $W_\Sigma \sim N_r(t)\Omega^2 t^2$, где $N_r(t)$ - число состояний, остающихся в резонансе к моменту t . Если δ - среднее спектральное расстояние между соседними уровнями, то $N_r(t) \sim (\delta t)^{-1}$. В итоге $W_\Sigma \sim \Omega^2 \delta^{-1} t$. Скорость перехода в резонансные состояния $\dot{W}_\Sigma \sim \Omega^2 \delta^{-1}$ постоянна. Ее количественный расчет будет нашей ближайшей задачей.

◆ При бóльших временах, но таких, что ширина пика тригонометрической функции больше расстояния между соседними уровнями, суммирование в (1) можно заменить интегрированием:

$$\sum_k f(k) \rightarrow \int f(E_k) \rho(E_k) dE_k = \int f(E_k) \rho(E_k) d(\hbar\omega_k), \quad (6)$$

где $\rho(E_k)$ - энергетическая плотность (конечных) состояний. В этом случае обычно можно пренебречь зависимостью матричных элементов и плотности состояний от энергии и считать их постоянными, равными

значениям V_{kn} и $\rho(E_k)$ для состояния с минимальной расстройкой. Тогда интегрирование дает

$$W_{\Sigma} = \frac{|V_{kn}|^2}{\hbar^2} \rho(E_k) \cdot \frac{\pi}{2} t \cdot \hbar = \frac{2\pi |V_{kn}|^2}{\hbar} \rho(E_k) t. \quad (7)$$

Традиционно принято выбирать возмущение со временной зависимостью $\hat{V}e^{-i\omega t}$, что увеличивает матричный элемент в два раза по сравнению с нашим случаем, и оформлять (7) как утверждение о постоянстве суммарной скорости переходов:

$$\dot{W}_{\Sigma} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{kn}|^2 \rho(E_k). \quad (8)$$

Формула (8) называется *золотым правилом Ферми*.

★ Для вывода (8) существенно суммирование по конечным состояниям с разной энергией – но не обязательно суммирование по всем остальным квантовым числам.

★ Согласно (8), закон распада начальной вероятности имеет вид

$$W_0 = 1 - \Gamma t, \quad (9)$$

где для краткости обозначено $\dot{W}_{\Sigma} = \Gamma$. Формулы (3) и (9) можно интерполировать законом

$$W_0 = 1 - \frac{\Gamma t^2}{\tau_J + t} \quad (10)$$

где τ_J - время кроссовера между квадратичным (3) и линейным (9) законами распада. Сравнивая (3) и (10) при малых t , получаем

$$\tau_J = \frac{\Gamma}{\Sigma} = 2\pi |V_{kn}|^2 \left(|V_{nn}^2| \right)^{-1} \hbar \rho(E_k). \quad (11)$$

По современным представлениям [Sch97], время τ_J представляет оценку продолжительности квантового перехода из начального в конечное состояние и называется *временем прыжка*.

📖 [Sch97] L.S. Schulman

Observational line broadening and the duration of a quantum jump
J. Phys. A: Math. Gen. 1997, v.30, no. 9, L293-L299

Логика такого определения понятна: если внешнее вмешательство (серия измерений) может изменить кинетику перехода из начального состояния – значит, этот переход еще не завершен. Заметим, что τ_J зависит от структуры матричных элементов и значения плотности состояний, но не от величины возмущения.

◆ Если значение энергии $E_k = E_n + \hbar\omega$ принадлежит области непрерывного энергетического спектра, то можно формально сделать спектр системы S дискретным, погрузив ее в куб с большим ребром L и подчинив

ВФ на стенках куба граничным условиям (непроницаемости стенок или периодичности ВФ). Плотность конечных состояний при этом неограниченно растет при увеличении L , и переход (6) оправдан при сколь угодно больших временах. Если же значение $E_k = E_n + \hbar\omega$ принадлежит области дискретного спектра с большой, но конечной плотностью состояний, то замена (6) теряет корректность при временах, больших чем

$$\tau_H = 2\pi\hbar\rho(E_k). \quad (12)$$

Этот масштаб называется *временем Гейзенберга*. Он задает минимальное время измерения, необходимое для того, чтобы разрешить спектральный интервал $\hbar\Delta$ между соседними уровнями. Иначе: до наступления времени Гейзенберга дискретность энергетического спектра не существенна.

§ 3.3 Квазиконтинуум энергетического спектра

◆ Золотое правило Ферми (8) получено в первом порядке теории возмущений в предположении, что населенность начального состояния $W_n = |a_n|^2$ остается неизменной, $W_n \equiv 1$. Более последовательное описание должно учитывать изменение населенности основного состояния. Скорость перехода в состояния непрерывного спектра пропорциональна населенности начального состояния. Считая скорость перехода малой, можно записать *балансное уравнение*

$$\frac{dW_n}{dt} = -\dot{W}W_n. \quad (13)$$

Решение этого уравнения с начальным условием $W_n(0) = 1$ есть

$$W_n(t) = \exp(-\dot{W}t). \quad (14)$$

При переходах в непрерывный спектр под действием монохроматического поля населенность начального состояния убывает со временем по экспоненциальному закону.

☆ По сравнению с чем должна быть мала скорость перехода \dot{W} для применимости балансного уравнения (13)?

◆ Решение (14) показывает, что при учете необратимого процесса перехода в непрерывный спектр начальное состояние (дискретного спектра) из стационарного превращается в квазистационарное, не имеющее точно определенной энергии - а потому позволяющее резонансные переходы в полосу конечной ширины. Этот эффект носит в теории ионизации название *ионизационного уширения уровней*.

Если начальное состояние распадается с постоянной скоростью, то можно положить

$$a_n(t) = e^{-\gamma t}, \quad (15)$$

где $\gamma = \dot{W}/2$. Подставляя это выражение в (2.22) и интегрируя, получаем для вероятности перехода в состояние $|k\rangle$

$$W_k = \frac{|V_{nk}|^2}{4} \left[\frac{1 - 2e^{-\gamma t} \cos \Delta_k t + e^{-2\gamma t}}{\Delta_k^2 + \gamma^2} \right]. \quad (16)$$

Интегрируя по Δ и используя значение $\gamma = \dot{W}/2$, получаем для суммарной населенности конечных состояний

$$W_\Sigma = 1 - e^{-\dot{W}t}, \quad (17)$$

как и должно быть: из (14) и (17) следует сохранение полной вероятности.

Из выражения (16) видно, что ширина резонансной линии при $\gamma t \leq 1$ уменьшается по гиперболическому закону, а затем, при $\gamma t \gg 1$, становится постоянной и равной γ . Замена суммирования интегрированием (6) становится корректной при любых временах, если предельная ширина резонансной линии γ превосходит частотный интервал δ_k между соседними уровнями (в окрестности состояния $|k\rangle$):

$$\frac{\pi}{\hbar} \frac{|V_{nk}|^2}{4} \rho(E_k) \geq \frac{1}{\hbar \rho(E_k)}. \quad (18)$$

Введем безразмерный параметр ν , равный отношению частоты Раби Ω_{nk} к частотному интервалу δ_k ,

$$\nu = \frac{\Omega_{nk}}{\delta_k} = \frac{V_{nk}}{\hbar \delta_k} = V_{nk} \rho(E_k). \quad (19)$$

Область параметров, в которой $\nu \geq 1$ и, следовательно, выполняется неравенство (18), называется областью *квазиконтинуума* энергетического спектра [АК87, сс. 232, 138].

📖 [АК87] Акулин В.М., Карлов Н.В.

Интенсивные резонансные взаимодействия в квантовой электронике.

М.: Наука, 1987 – 312 с.

В области квазиконтинуума условие применимости ТВ (2.37) нарушается сразу для нескольких конечных состояний в окрестности резонанса; число таких резонансных состояний $N_r \sim \nu$. Во-вторых, в этой области ширина полосы заселенных возмущением состояний (γ) превосходит

расстояние между соседними уровнями (δ_k), т.е. число заселенных состояний N_p велико:

$$N_p \sim \hbar\gamma\rho(E_k) \sim |V_{nk}|^2 \rho^2(E_k) \sim v^2 \geq 1 \quad (20)$$

В-третьих, число заселенных конечных состояний $N_p \sim v^2$ существенно превосходит число состояний, находящихся в резонансе, $N_r \sim v$. Наконец и в-четвертых, произведение скорости перехода на время Гейзенберга (12) значительно превосходит единицу, $\dot{W}\tau_H = 2\pi|V_{nk}|^2 \rho^2(E_k) = 2\pi v^2 \gg 1$, т.е. к наступлению времени Гейзенберга в области квазиконтинуума начальное состояние будет почти полностью истощено.

§ 3.4 Переходы в непрерывный спектр

◆ Для вычисления скорости перехода в непрерывный спектр конечные состояния удобно описывать как собственные функции свободной частицы в кубе с большим ребром L , подчиненные условиям периодичности на гранях куба – или как асимптотически близкие к таким ВФ:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \approx \frac{1}{\sqrt{L^3}} \exp i\vec{k}\vec{r}, \quad (21)$$

где \vec{k} - волновой вектор. Для частиц конечной массы (электронов) с законом дисперсии $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ энергетическая плотность таких состояний для частиц, направление волнового вектора которых лежит внутри телесного угла $d\Omega$, равна

$$\rho(E_k) d\Omega_k = L^3 \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{d}{dE} \left[\frac{4\pi}{3} (2mE)^{3/2} \right] \frac{d\Omega_k}{4\pi} = L^3 \frac{\sqrt{2E}}{(2\pi)^3} \left(\frac{m}{\hbar^2} \right)^{3/2} d\Omega_k \quad (22)$$

Матричные элементы перехода из состояния дискретного спектра ψ_n в состояние непрерывного спектра $\psi_{\vec{k}}$ (21)

$$V_{nk} = \int \psi_n \hat{V} \psi_{\vec{k}} d\vec{r} = \frac{V_{nk}^0}{\sqrt{L^3}} \quad (23)$$

зависят от размеров куба периодичности, но полная скорость переходов, определяемая золотым правилом Ферми (8), от L не зависит и является физически осмысленной величиной. По этой причине в расчетах часто полагают $L = 1$ (что, впрочем, не всегда удобно, так как размерность ВФ и матричных элементов помнит о кубе периодичности).