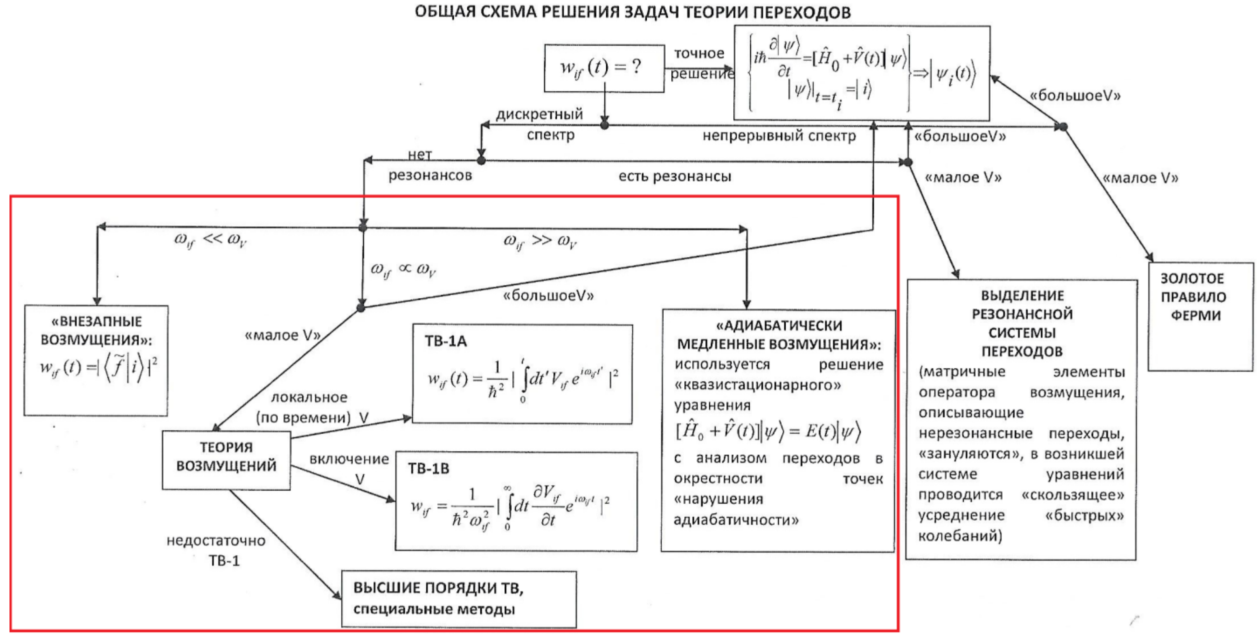
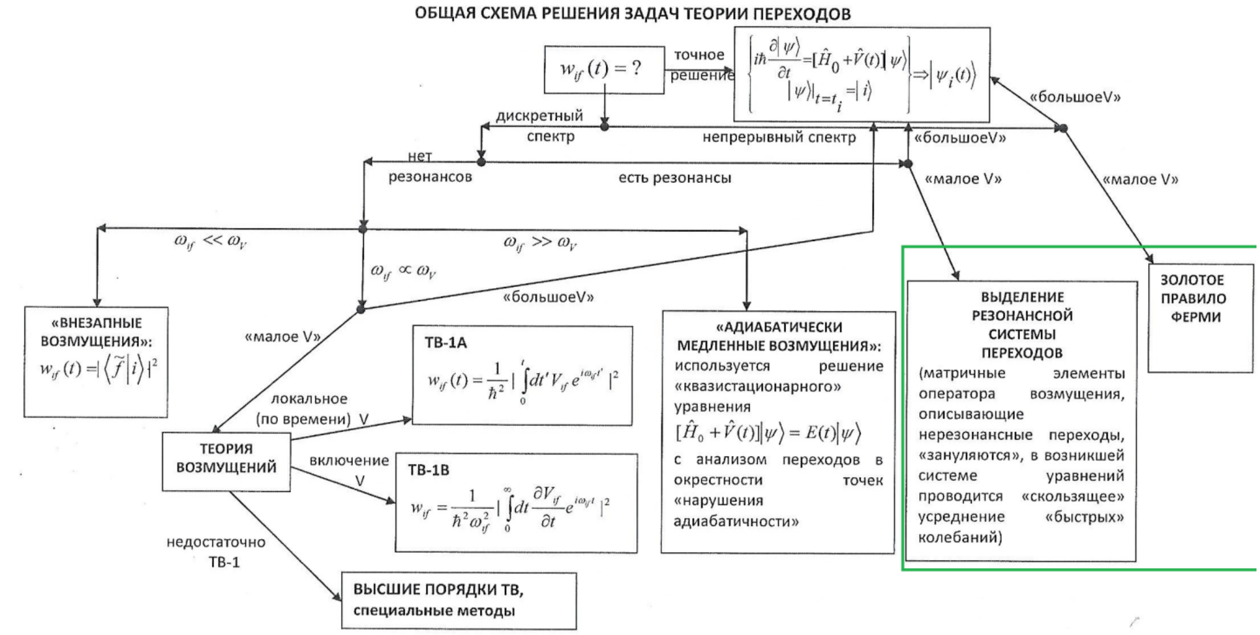
Продолжим! В прошлый раз мы рассматривали нерезонансные переходы в дискретном спектре:



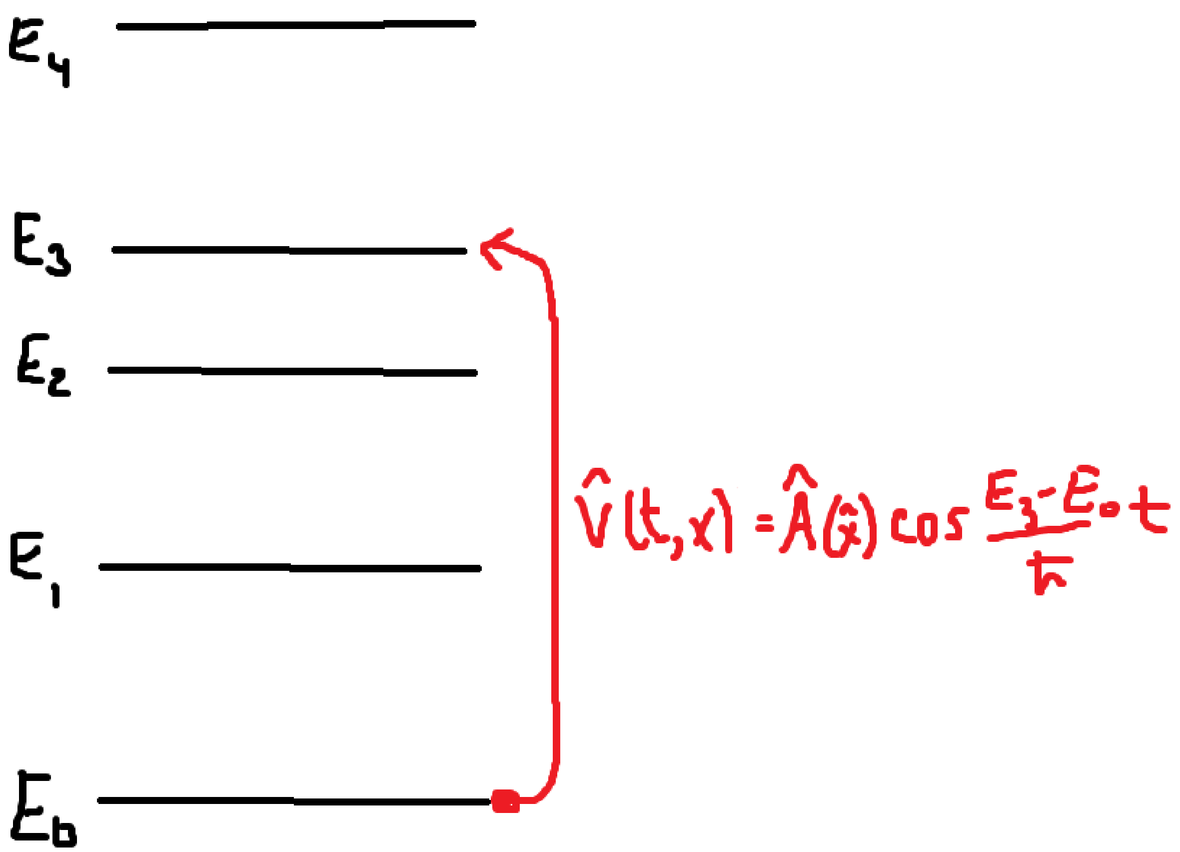

Теперь дайте рассмотрим правую часть схемы Парфёнова:




Посвящённую резонансным переходам. Два случая, два метода – для дискретного спектра и для перехода в непрерывный.

### Случай 1: переход из дискретного спектра в дискретный – то, что Парфёнов обозначает как «Выделение резонансной системы переходов».

***Если у нас резонанс, т.е. одна из частот возмущения попала как на энергию перехода между какими-то уровнями:***




***То частица будет скакать между двумя этими уровнчми, а переходы на все остальные уровни будут сильно подавлены (мы будем считать вероятности перехода туда =0).***

Вспомним, что у нас была система дифуров:

$$\frac{dc_k(t)}{dt} = -\frac{i}{h}\sum_{n=0}^{N} c_n(t)V_{kn}(t)e^{i\omega_{kn}t}$$

Коли у нас всего два уровня, то в этой системе не бесконечного много ДУ, а всего два:

$$\begin{cases} \dfrac{dc_k(t)}{dt} = -\dfrac{i}{h}\left(c_k(t)V_{kk}(t) + c_m(t)V_{km}(t)e^{i\omega_{km}t}\right) \\ \dfrac{dc_m(t)}{dt} = -\dfrac{i}{h}\left(c_k(t)V_{mk}(t)e^{-i\omega_{km}t} + c_m(t)V_{mm}(t)\right) \end{cases}$$

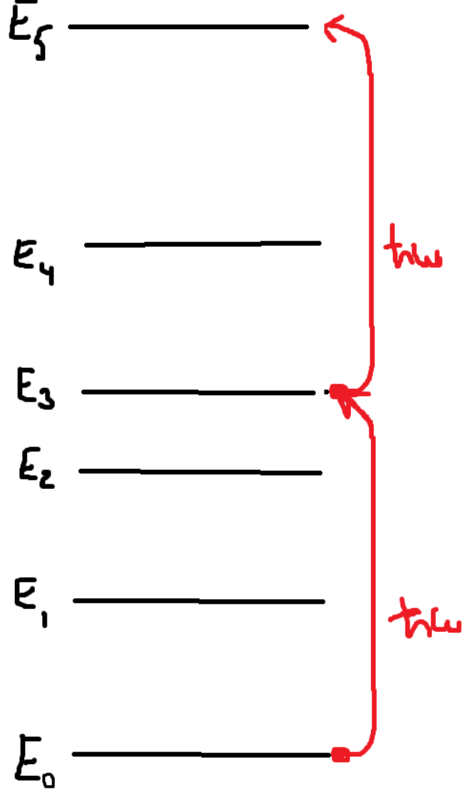
А систему из двух ДУ мы уже решить не можем! Скажу, что поможет замена $c_k(t) = a(t)e^{\frac{i\omega_{km}t}{2}}, c_m(t) = b(t)e^{-\frac{i\omega_{km}t}{2}}$. Тогда

Итогом будут осцилляции между нашими двумя уровнями:


Примером таких осцилляций могут служить осцилляции Раби: https://ru.wikipedia.org/wiki/Частота_Раби

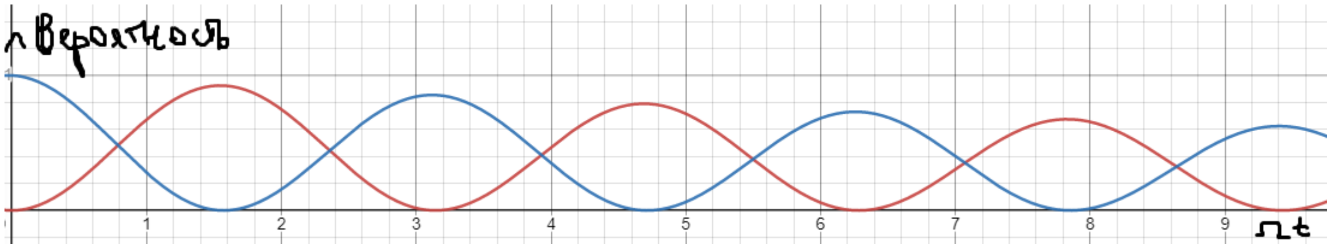
Что может нарушить эту идиллию?

Во-первых, наличие третьего уровня, который также расположен в резонансе:

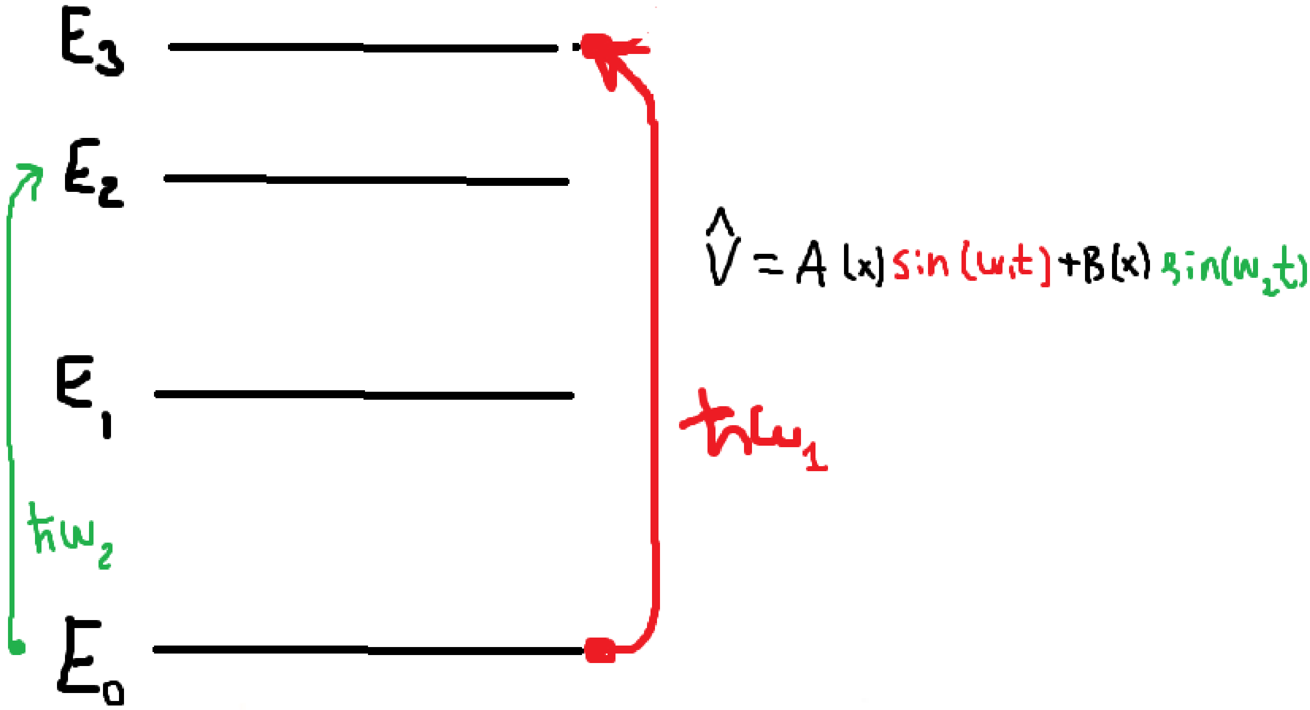



Тогда в системе будет уже три уравнения. Аналогично в системе резонансных уровней может быть и большее число уровней (и дифуров в системе).

Во-вторых, напоминаю, что мы учитываем (по теории возмущений!), что переходов на НЕрезонансные уровни нет. А они есть, просто подавлены. Но со временем вероятность с наших двух уровней будет утекать на другие, не резонансные:



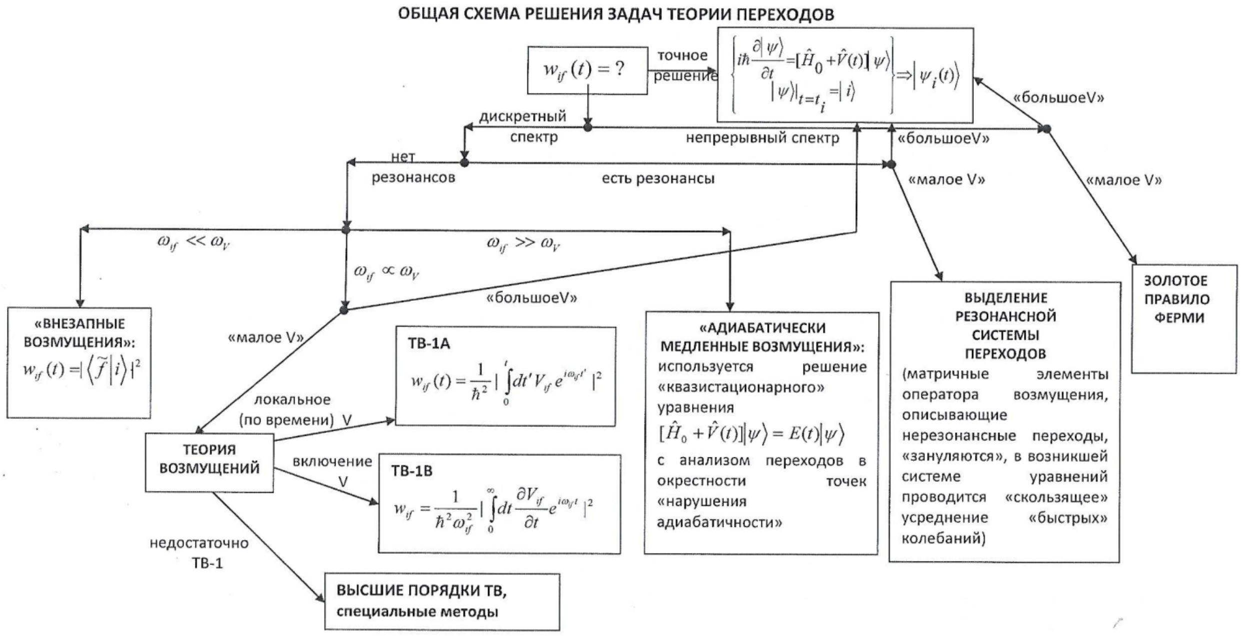
В-третьих, исходное возмущение может содержать не одну, а несколько частот. Тогда для каждой частоты будет своя резонансная система:




К счастью, они независимы (в первом порядке теории возмущений). В этом случае нужно по отдельности рассмотреть каждую из систем.

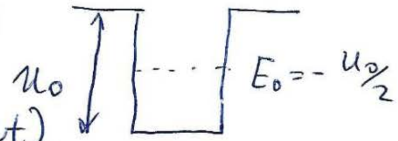
### Случай 2: переход из дискретного спектра в непрерывный – Золотое правило Ферми

Как ясно из заголовка, ЗПФ - золотое правило Ферми – применяется при переходе в непрерывный спектр. Проверим, что понимаем, когда его нужно применять. Определите, каким методом решать каждую задачу:




1) $\hat H = \frac{\hat p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat x^2}{2} - \frac{\hat x\hbar\omega}{100}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\frac{\omega^2 t^2}{1+\omega^4 t^4}$

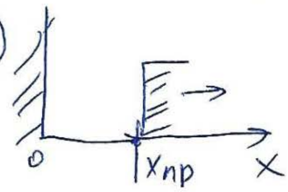
2) Прямоугольная яма, в которой есть только один уровень – связанное состояние:




$\hat V(t) = -U_0\theta\left(1 + \frac{1}{50}\sin\omega t\right),$

где $\omega = 100\frac{U_0}{\hbar}$

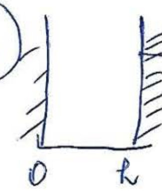
3)




Правая стенка отодвигается вправо по закону

$X_{пр}(t) = L + \frac{2L}{\pi}\mathrm{arctg}\left(\frac{500\hbar t}{mL^2}\right)$

4)




Бесконечно глубокая прямоугольная яма.

$\hat V(t) = \frac{\hbar^2}{100mL^2}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\left[1 - e^{-\frac{3\hbar t}{mL^2}}\right]$

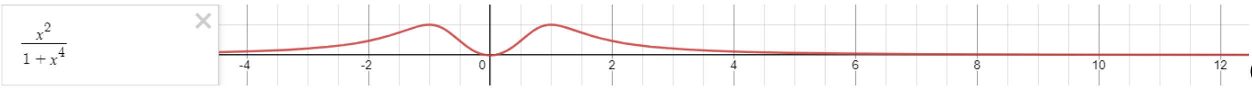
**Настоятельно рекомендую читателю ответить самому, прежде чем листать дальше – это очень полезно, а делается устно. В одном из номеров – золотое правило Ферми (ЗПФ)!**

**Ответы на следующей странице.**

1) – сразу видим, что возмущение мало:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} - \frac{\hat{x}\hbar\omega}{\boxed{100}}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\frac{\omega^2t^2}{1+\omega^4t^4}$$

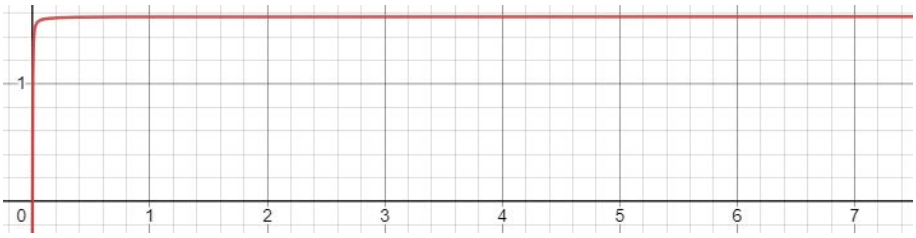
Поэтому сразу теория возмущений. Осталось понять, ТВ-1А или ТВ-1Б. Нарисуем график:




Оно возникло, мигнуло и угасло. Это явно ТВ-1А.

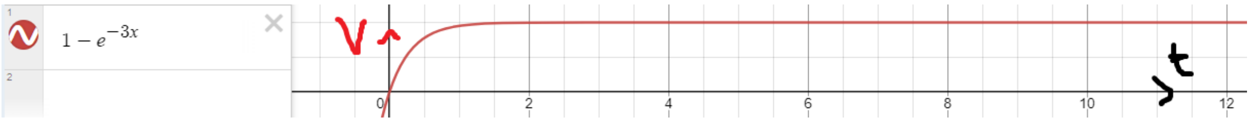
2) В яме всего один уровень. Возмущение вытаскивает частицу из ямы на свободные уровни (где, конечно, энергия может быть уже любой, т.е. спектр непрерывный). Это как раз задача на золотое правило Ферми.

3) Построим график зависимости координаты правой стенки от времени:




Как мы видим, она отъезжает очень быстро! Эту задачу явно надо решать «мгновенным включением».

4) Снова построим график




Видим, что поле «включается». Включается оно недостаточно мгновенно, чтобы можно было применить метод «мгновенное включение» $|\langle f|i\rangle|^2$, зато оно мало:

$$\hat{V}(t) = \frac{\hbar^2}{\boxed{100}mL^2}\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)\left[1 - e^{-\frac{3\hbar t}{mL^2}}\right]$$

Так что ТВ-1В будет лучшим выбором.

Вернёмся к золотому правилу Ферми! Вот формула:

$$\frac{dP_{if}}{dt} = V_{if} = \frac{2\pi}{\hbar}|A_{if}|^2\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

Где:

1) $v_{if}$ – ***скорость*** вероятности перехода с i-тый на f-тый, т.е. $v_{if}(t) = \frac{dp_{if}(t)}{dt}$. Размерность – 1/сек.

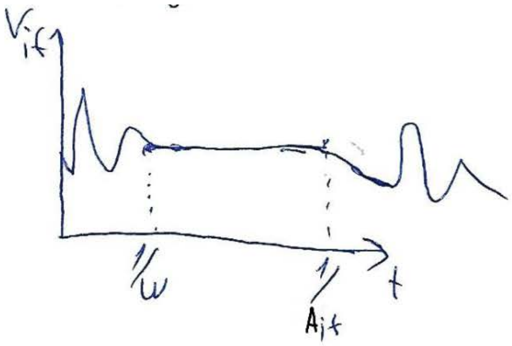
2) Возмущение имеет вид $\hat{V}(t) = (Ae^{i\omega t} + A^{*}e^{-i\omega t})$ - где А – амплитуда синусоидального возмущения!

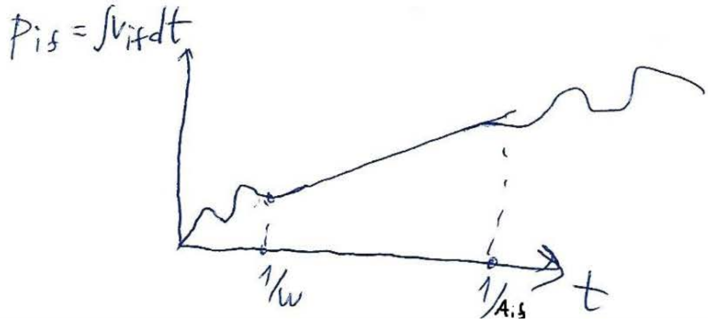
Вывод ЗПФ будет в отдельной методичке, если мне не будет лень её написать. Увы, понимать ЗПФ и уметь пользоваться – две абсолютно разные стадии. Давайте посмотрим.

1) ЗПФ утверждает, что v имеет вид дельта-функции: 0 в отсутствие резонанса и ∞ при его наличии. Категорично! А на другие уровни вероятность попасть будет 0, получается? На самом деле нет. ЗПФ – тоже приближение, основанное на первом порядке теории возмущений, в котором мы пренебрегаем вероятностями перехода на «нерезонансные» уровни.

Тогда зачем нужно ЗПФ, если в резонансе скорость равна бесконечности? К этому мы ещё вернёмся в задачах, а пока скажу, что в ЗПФ основная информация кроется именно ***в коэфе*** перед дельта-функией.

2) Заметим, что v(t) не зависит от времени! Т.е. v константа, а вероятность нарастает линейно. Но вероятность не может нарастать до бесконечности! Ответ тот же, что и в 1) – ЗПФ – это приближение, основанное на ТВ-1, т.е. требующее малости вероятности. Поэтому оно применимо лишь в некотором диапазоне: $\frac{1}{\omega} \ll t \ll \frac{1}{A_{if}}$. Внутри него ЗПФ выполняется:




А за его пределами может быть что угодно.

Откуда условие $\frac{1}{\omega} \ll t \ll \frac{1}{A_{if}}$. берётся? $t \ll \frac{1}{A_{if}}$ – условие малости вероятностей на переходы, кроме начального и резонансного, а $\frac{1}{\omega} \ll t$ - условие превосходства t над периодом Т возмущения. В частности, чтобы ЗПФ работало *хоть в каком-то диапазоне времён t*, требуется $\frac{1}{\omega} \lll \frac{1}{A_{if}}$ ☺

3) Заметим, что мы изначально предположили возмущение синусоидальным:

$$\hat{V}(t) = 2A\cos\omega t = (Ae^{i\omega t} + A^{*}e^{-i\omega t})$$

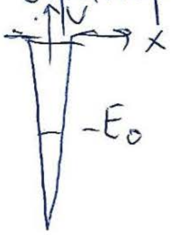
А что, если это не так? Тогда надо раскладывать $\hat{V}(t)$ по частотам. Каждая частота образует свою систему из двух уровней (начального и конечного):

И они действуют независимо друг от друга (вообще это не так, но в первом порядке ТВ, в котором работает ЗПФ – так).

А что, если $\hat{V}(t)$ не периодическое, и не раскладывается по частотам? Ну это совсем экзотический случай, там надо индивидуально думать, мы такое рассматривать не будем.

Теперь переходим к задачам!

Пример: дельта-яма:




Одно связанное состояние: $E_0 = -\frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2m}$

$\psi(x) = \sqrt{\varkappa}\, e^{-\varkappa x}$,

где $\varkappa = \frac{m V_0}{\hbar^2}$.

Мы подействовали на частицу возмущением:

$V(x,t) = U_0 \sin(\omega t - qx)$, где $U_0 \ll |E_0|$, $\omega \gg \frac{|E_0|}{\hbar}$

Найти $p_{00}(t)$ – вероятность остаться на нулевом (связанном) уровне к моменту времени $t$.

Решение: Сверху, при $E > 0$ у нас свободные непрерывные уровни, на один из которых частицу „забрасывает" возмущение $\Rightarrow$ надо использовать ЗПФ.

$$V = \frac{2\pi}{\hbar}\int dt\, |\underbrace{\langle f|\hat{A}|i\rangle}_{A_{if}}|^2\, \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

Рассчитаем матричный элемент $A_{if}$:

$|i\rangle = \sqrt{\varkappa}\, e^{-\varkappa x}$

$|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}$ – ВФ свободного состояния.

Остановимся на |f>.

1) Откуда мы определяем k? Это волновое число «выбитой» из ямы частицы. Логично определить k из ЗСЭ:

Чему равно k? $E = -|E_0| + \hbar\omega \leftarrow$ энергия „заброса" от возмущения

энергия конечного состояния, исходного

$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (потому что $E = \frac{p^2}{2m}$, $p = \hbar k$). Отсюда определяем k

Конкретно в нашей задаче $\omega \gg \frac{|E_0|}{\hbar}$, что позволяет упростить формулу до $E = h\omega = \frac{h^2k^2}{2m} => k = \sqrt{\frac{2m\omega}{h}}$.

2) Обратите внимание на коэф нормировки $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$. У ВФ свободного состояния коэф именно такой и это надо запомнить. Это важно, потому что коэф войдёт в матричный элемент $A_{if}$ и в дальнейшем – в скорость.

Теперь считаем матричный элемент:

$$A_{if} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx}}_{\langle f|} \cdot \underbrace{\frac{i}{2} U_0 e^{iqx}}_{A} \underbrace{\sqrt{\varkappa}\, e^{-\varkappa x}}_{|i\rangle}$$

Подставляем матричный элемент в ЗПФ… О, а тут тоже есть нюанс. От нас требуют найти скорость распада.

Вот это –

$$\frac{dP_{if}}{dt} = V_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |A_{if}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$$

- скорость распада конкретно в f-тое состояние.

А чтобы найти скорость распада из i-того состояния вообще, нужно проинтегрировать по всем возможным конечным состояниям, т.е. по всем возможным волновым числам k:

$$V_{распада} = \frac{2\pi}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\varkappa^3 U_0^2}{2\pi} \frac{1}{[\varkappa^2 + (q-k)^2]^2} \delta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_0 - \hbar\omega\right)$$

Аккуратное взятие интеграла даст

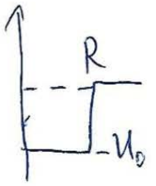
$$V_{распада} = \frac{\varkappa^3 U_0^2}{\hbar^2} \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega}} \left\{ \frac{1}{(\varkappa^2 + (q - \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}})^2)^2} + \frac{1}{(\varkappa^2 + (q + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}})^2)^2} \right\}$$

Да, ответ противный, но тем не менее, он получен аналитически.

А теперь рассмотрим более приближенный к реальности трёхмерный случай:

*Рассмотрим сферическую прямоугольную потенциальную яму. Тут иногда возникает недопонимание: СФЕРИЧЕСКАЯ ПРЯМОУГОЛЬНАЯ потенциальная яма. А разгадка очень проста: это СФЕРИЧЕСКАЯ, ПРЯМОУГОЛЬНАЯ, ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ яма! – К.В.Парфёнов на семинаре*

Итак, сферическая потенциальная яма:




Рассмотрим сферически симметричный случай, с $l=0$:
(А другого быть и не может, т.к. в яму попадает только 1 уровень, а $l=0$ соответствует мин. энергии).

Тогда $\psi(\vec{r}) \to \psi(r) = r\chi(r)$, где $\chi(r) = \begin{cases} A\cos(qr), & r \le R \\ Be^{-\varkappa r}, & r \ge R \end{cases}$

Это мы подсчитали $|f\rangle$; А $|i\rangle$ будет $\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{iQr}$

Где Q определяется вновь из ЗСЭ.
Задача решается аналогично, вот только интеграл будет трёхмерный, т.к. множество исходов трёхмерно – у волнового вектора **Q** три проекции:

$$V_{распада} = \frac{2\pi}{\hbar} \iiint_{R^3} d^3V(\vec{Q}) \, |B_{if}|^2 \, \delta\left(\frac{\hbar^2 Q^2}{2m} - \hbar\omega\right)$$

И дельта-функция снимет лишь один интеграл, потому что определит лишь модуль Q. А вот по θ и φ придётся честно проинтегрировать. Я мог бы их изложить, но вы всё равно не будете их смотреть. Цитата Парфёнова: «*Теперь вы понимаете, почему задачи **для студентов** на ЗПФ, как правило, одномерные?*»

Отметим отличие резонансных переходов из дискретного спектра в дискретный и из дискретного в непрерывный (за что как раз отвечает ЗПФ). В случае резонанса между дискретными уровнями у нас осцилляции:

А в случае непрерывного спектра частица, если до него добирается, становится свободной и вылетает нахрен. Подальше от ямы. Навсегда ☺ Поэтому вместо осцилляций – экспоненциальное падение вероятности остаться в возбуждённом состояние. А ЗПФ нужно, чтобы как раз эту скороть распада найти.