

# Лекция 8

## Электромагнитные переходы квантовых систем

### 1 Вероятность электромагнитных переходов бесспиновой частицы

В Лекции 4 уже рассматривался гамильтониан взаимодействия бесспиновой частицы массы  $m$  и заряда  $q$  с электромагнитным полем, которое задается вектор-потенциалом  $\vec{A}$  (4.8). Скалярный потенциал  $\varphi$  будем далее полагать равным нулю. В результате простых преобразований представим гамильтониан в виде

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{x}) - \frac{q}{2mc} (\widehat{\vec{p}}\vec{A} + \vec{A}\widehat{\vec{p}}) + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_1, \quad (1)$$

где первый член

$$\widehat{H}_0 = \frac{\widehat{\vec{p}}^2}{2m} + U(\vec{x}) \quad (2)$$

представляет гамильтониан частицы при выключенном электромагнитном поле, а второй член

$$\widehat{H}_1 = -\frac{q}{2mc} (\widehat{\vec{p}}\vec{A} + \vec{A}\widehat{\vec{p}}) + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2 \quad (3)$$

гамильтониан взаимодействия частицы с электромагнитным полем. Ввиду того, что скалярный потенциал  $\varphi = 0$ , уравнение непрерывности приведет к

$$\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{A} = \operatorname{div} \vec{A} = 0. \quad (4)$$

Тогда на основании (4.27) заключаем, что

$$\widehat{H}_1 = -\frac{q}{mc} \vec{A} \widehat{\vec{p}} + \frac{q^2}{2mc^2} \vec{A}^2. \quad (5)$$

Естественным параметром малости в расчетах по теории возмущений электромагнитных переходов является безразмерный параметр — постоянная тонкой структуры

$$\alpha = \frac{q^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}. \quad (6)$$

Таким образом, ограничиваясь нижайшим порядком теории возмущений, можно отбросить второй член в (5)

$$\widehat{H}_1 \approx -\frac{q}{mc} \vec{A} \widehat{\vec{p}}. \quad (7)$$

Далее будем считать, что электромагнитная волна распространяется в виде плоской волны

$$\vec{A} = \vec{\varepsilon} A \cos(\omega t - \vec{k} \vec{x}), \quad (8)$$

где  $\vec{\varepsilon}$  — единичный вектор поляризации. Амплитуду  $A$  выберем так, чтобы в объеме  $V$  было  $N$  фотонов с энергией  $\hbar\omega$

$$A = 2c \sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}}. \quad (9)$$

Тогда

$$\widehat{H}_1(t) = we^{i\omega t} + w^* e^{-i\omega t}, \quad (10)$$

где “амплитуда”  $w$  равна

$$w = -\frac{q}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}}\vec{\varepsilon}\exp\left\{-i\vec{k}\vec{x}\right\}\hat{\vec{p}}. \quad (11)$$

Рассмотрим сначала переходы с испусканием кванта света  $\hbar\omega$ . Согласно результатам предыдущей лекции эта вероятность в найжайшем порядке временной теории возмущений задается формулой

$$P_{nm}^+ = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle n|w|m\rangle|^2\rho(E_{\text{кон.}}^+) \quad (12)$$

где

$$\langle n|w|m\rangle = -\frac{q}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}}\langle n|\exp\left\{-i\vec{k}\vec{x}\right\}\vec{\varepsilon}\hat{\vec{p}}|m\rangle. \quad (13)$$

а  $E_{\text{кон.}}^+$  — энергия конечного состояния частицы.

## 2 Полная вероятность перехода с излучением кванта света в длинноволновом приближении

Для оценки матричного элемента (13) будем полагать, что длина волны света намного больше размеров атома. В этом случае можно использовать *длинноволновое приближение*: экспоненту разложить в ряд

$$\exp\left\{-i\vec{k}\vec{x}\right\} \approx 1 - i\vec{k}\vec{x} + \dots \quad (14)$$

и ограничиться первым членом этого разложения. В результате для (13) получаем

$$\langle n|w|m\rangle \approx -\frac{q}{m}\sqrt{\frac{2\pi\hbar N}{\omega V}}\langle n|\vec{\varepsilon}\hat{\vec{p}}|m\rangle. \quad (15)$$

Далее чтобы вычислить матричный элемент используем тождество

$$\vec{x}\widehat{H}_0 - \widehat{H}_0\vec{x} = i\frac{\hbar}{m}\hat{\vec{p}}. \quad (16)$$

В результате получим

$$\langle n|w|m\rangle \approx iq\sqrt{\frac{2\pi N}{\hbar\omega V}}(E_n - E_m)\langle n|\vec{x}|m\rangle\vec{\varepsilon} = i\sqrt{\frac{2\pi N}{\hbar\omega V}}(E_n - E_m)\vec{d}_{nm}\vec{\varepsilon}, \quad (17)$$

где величина

$$\vec{d}_{nm} = q\langle n|\vec{x}|m\rangle \quad (18)$$

называется *дипольным электрическим моментом перехода*  $m \rightarrow n$ . В свою очередь, переходы, обусловленные ненулевым дипольным электрическим моментом перехода, называют *дипольными* и обозначают  $E1$ .

Для вычислений вероятности перехода необходимо просуммировать результат (12) по конечным состояниям электромагнитного поля. Сейчас мы это сделаем используя

так называемую нормировку в “ящике”. С этой целью найде число степеней плоской волны электромагнитного поля с заданной поляризацией в конечном кубе с длинной ребра  $L = V^{\frac{1}{3}}$ . Потребуем, чтобы вдоль одного ребра умещалось целое число волн. Тогда волновой вектор должен удовлетворять условию

$$k_x = \frac{2\pi}{L}n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L}n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L}n_z. \quad (19)$$

Или для импульса

$$p_x = \frac{2\pi\hbar}{L}n_x, \quad p_y = \frac{2\pi\hbar}{L}n_y, \quad p_z = \frac{2\pi\hbar}{L}n_z. \quad (20)$$

Число состояний фотонов в интервале энергий между  $\hbar\omega$  и  $\hbar(\omega + d\omega)$  будет

$$d^3n \equiv dn_x dn_y dn_z = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} p^2 dp d\Omega = \frac{V(\hbar\omega)^2}{(2\pi\hbar c)^3} dE^+ d\Omega, \quad (21)$$

где мы положили  $p = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{E^+}{c}$ . Таким образом для плотности состояний имеем

$$d\rho = \frac{d^3n}{dE^+} = \frac{V(\hbar\omega)^2}{(2\pi\hbar c)^3} d\Omega. \quad (22)$$

Подставляя (22) в (12) получим для вероятности перехода в единицу времени в элемент телесного угла  $d\Omega$

$$dP_{nm}^+ = \frac{N\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\vec{d}_{nm}\vec{\varepsilon}|^2 d\Omega. \quad (23)$$

Для того, чтобы проинтегрировать по телесному углу вспомним, что волновой вектор и вектор поляризации ортогональны друг другу  $\vec{k}\vec{\varepsilon} = 0$  и поэтому

$$|\vec{d}_{nm}\vec{\varepsilon}|^2 = |\vec{d}_{nm}|^2 \sin^2 \theta, \quad (24)$$

где  $\theta$  — угол между направлением дипольного момента  $\vec{d}_{nm}$  и волновым вектором  $\vec{k}$ . Интегрируя по всему телесному углу, получим окончательно

$$P_{nm}^+ = \frac{4}{3} N \frac{\omega^3 |\vec{d}_{nm}|^2}{\hbar c^3}. \quad (25)$$

Для грубой оценки вероятности перехода в атомах положим, что  $|\vec{d}_{nm}| \sim qa$ , где  $a$  — размер атома. Тогда для вероятности (25) получим

$$P_{nm}^+ \sim N \frac{q^2}{\hbar c} \omega \left( \frac{\omega a}{c} \right)^2. \quad (26)$$

Используя в качестве размера атомной орбиты боровский радиус  $a \sim \frac{q^2}{\hbar\omega}$  получим

$$P_{nm}^+ \sim \alpha^3 N \omega. \quad (27)$$

### 3 Вынужденное и спонтанное излучение света

Согласно (25), вероятность испускания одного фотона при переходе в атоме с уровня  $m$  на уровень  $n$  пропорциональна числу фотонов  $N$  падающей электромагнитной волны в единице объема. Частота и поляризация излученного фотона в точности совпадает с частотой и поляризацией электромагнитной волны. Такое излучение называют *вынужденным*. Существование такого типа излучения было предсказано Эйнштейном еще до создания теории квантовых переходов.

Помимо рассмотренных переходов еще есть переходы квантовой системы с излучением фотона, которые обусловлены взаимодействием с вакуумными колебаниями. Такое излучение называют *спонтанным излучением*. Его вероятность в точности равна (23) с  $N = 1$ . Таким образом, полная вероятность излучения фотона в единицу времени в элемент телесного угла  $d\Omega$  с заданной поляризацией есть

$$dP_{nm}^{\text{изл.}} = \frac{(N+1)\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \left| \vec{d}_{nm} \vec{\varepsilon} \right|^2 d\Omega. \quad (28)$$

Аналогичным образом можно рассчитать вероятность поглощения фотона в единицу времени. Для этого нужно рассмотреть второй член взаимодействия (10). В результате для поглощения кванта света, который распространяется внутри телесного угла  $d\Omega$  получим

$$dP_{nm}^{\text{погл.}} = N \frac{\omega^3 \left| \vec{d}_{nm} \vec{\varepsilon} \right|^2}{2\pi\hbar c^3} d\Omega. \quad (29)$$

Из формул (28) и (29) следует, что отношения вероятностей излучения и поглощения связаны друг с другом как

$$\frac{dP_{nm}^{\text{изл.}}}{dP_{nm}^{\text{погл.}}} = \frac{N+1}{N}. \quad (30)$$

Оказывается, что это соотношение приводит к формуле Планка для распределения интенсивности абсолютно черного тела.

### 4 Правила отбора дипольных электромагнитных переходов

Выше было показано, что в длинноволновом приближении матричный элемент для поглощения или испускания света в нижайшем приближении пропорционален скалярному произведению поляризации фотона на матричный элемент дипольного перехода (17). Вычислим это скалярное произведение для переходов квантовой частицы, находящейся в центрально-симметричном поле. Соответствующие волновые функции начального и конечного состояния будут характеризоваться моментом количества движения и его проекцией на ось  $z$ , т.е. в качестве начального  $|m\rangle$  и конечного  $|n\rangle$  состояний выбираются собственные состояния этих операторов

$$|m\rangle = |\ell, M\rangle = R(r)Y_{\ell,M}(\theta, \varphi), \quad |n\rangle = |\ell', M'\rangle = \tilde{R}(r)Y_{\ell',M'}(\theta, \varphi), \quad (31)$$

где  $R(r)$  и  $\tilde{R}(r)$  — радиальные функции, явный вид которых для дальнейшего будет несущественен.

Рассмотрим сначала случай, когда фотон поляризован вдоль оси  $z$

$$\vec{\varepsilon}^{(\parallel)} = (0, 0, 1) \text{ и } \vec{\varepsilon}^{(\parallel)} \vec{r} = r \cos \theta. \quad (32)$$

Матричный элемент оператора (32) равен

$$\langle \ell', M' | \vec{\varepsilon}^{(\parallel)} \vec{r} | \ell, M \rangle = \int_0^\infty dr r^3 \tilde{R}(r) R(r) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta Y_{\ell', M'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell, M}(\theta, \varphi). \quad (33)$$

Рассмотрим интеграл по угловым переменным  $d\varphi$  и  $dz = \sin \theta d\theta$  ( $z \equiv \cos \theta$ ). Используем соотношения между полиномами Лежандра<sup>1</sup>

$$z P_\ell^M(z) = \frac{\ell + M}{2\ell + 1} P_{\ell-1}^M(z) + \frac{\ell - M + 1}{2\ell + 1} P_{\ell+1}^M \quad (34)$$

и свойство их ортогональности

$$\int_{-1}^1 dz P_{\ell'}^M(z) P_\ell^M(z) = 0, \text{ если } \ell \neq \ell'. \quad (35)$$

В результате получим для матричного элемента (33)

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta Y_{\ell', M'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell, M}(\theta, \varphi) = \\ &= \int_0^{2\pi} \exp \{i(M - M')\varphi\} d\varphi \int_{-1}^1 dz z P_\ell^M(z) P_{\ell'}^{M'}(z) = \\ &= 2\pi \delta_{MM'} \int_{-1}^1 dz \left\{ \frac{\ell + M}{2\ell + 1} P_{\ell-1}^M(z) + \frac{\ell - M + 1}{2\ell + 1} P_{\ell+1}^M(z) \right\} P_{\ell'}^M(z) = \delta_{MM'} (A \delta_{\ell, \ell-1} + B \delta_{\ell, \ell+1}). \end{aligned} \quad (36)$$

Таким образом, если фотон поляризован вдоль  $z$ -оси, то дипольные переходы возможны только при условии

$$M = M' \text{ и } \ell' = \ell \pm 1. \quad (37)$$

Теперь рассмотрим фотоны, вектор поляризации которых перпендикулярен оси  $z$ . В этом случае удобно рассмотреть следующие два вектора поляризации

$$\vec{\varepsilon}^{(\pm)} = \frac{1}{2}(1, \pm i, 0), \quad (38)$$

что соответствуют круговой поляризации света распространяющегося вдоль оси  $z$ . Тогда

$$\vec{\varepsilon}^{(\pm)} \vec{r} = r \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (39)$$

и часть матричного элемента (17), соответствующая угловым переменным, будет

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta e^{\pm i\varphi} Y_{\ell', M'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell, M}(\theta, \varphi) = \\ &= \int_0^{2\pi} \exp \{i(M - M' \pm 1)\varphi\} d\varphi \int_{-1}^1 dz \sqrt{1 - z^2} P_\ell^M(z) P_{\ell'}^{M' \pm 1}(z) = \\ &= \delta_{M, M' \pm 1} \int_{-1}^1 dz \sqrt{1 - z^2} P_{\ell'}^{M \pm 1}(z) P_{\ell'}^{M' \pm 1}(z). \end{aligned} \quad (40)$$

---

<sup>1</sup>Справочник по специальным функциям, под ред. М. Абрамовиц и И. Стиган, М."Наука", 1979 г.

Отсюда на основании рекурентных формул для полиномов Лежандра

$$\sqrt{1-z^2}P_\ell^{M\pm 1}(z) = \frac{1}{2\ell+1} [a P_{\ell+1}^M(z) + b P_{\ell-1}^M(z)], \quad (41)$$

где  $a$  и  $b$  некоторые коэффициенты (см., например, справочник<sup>1</sup>) получаем, что для фотона с круговой поляризацией матричный элемент

$$\langle \ell', M' | \vec{\varepsilon}^{(\pm)} \vec{r} | \ell, M \rangle = \delta_{M,M' \pm 1} (\tilde{A} \delta_{\ell,\ell-1} + \tilde{B} \delta_{\ell,\ell+1}). \quad (42)$$

Комбинируя этот результат с результатом (37), заключаем, что дипольные переходы возможны, если выполняются следующие условия

$$\Delta M = 0, \pm 1 \text{ и } \Delta L = \pm 1. \quad (43)$$

Эти условия носят название *правил отбора дипольных переходов*. С ними мы уже встречались в курсе атомной физики.

## 5 Мультипольные переходы

Правила отбора (43) не являются абсолютными. Они только говорят, что если эти условия не выполняются, то невозможны дипольные переходы. Иными словами, в этом случае мы должны взять следующие члены разложения (14). Рассмотрим в качестве примера второй член разложения. Тогда матричный элемент (13) будет пропорционален

$$\langle \ell', M | (\vec{k} \vec{x})(\vec{\varepsilon} \hat{\vec{p}}) | \ell, M \rangle. \quad (44)$$

В общем случае

$$(\vec{k} \vec{x})(\vec{\varepsilon} \hat{\vec{p}}) = \frac{\hbar}{i} \sum_{i,j=1}^3 M_{ij} x_i \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad (45)$$

причем в силу поперечности световой волны  $\sum_{i=1}^3 M_{ii} = 0$ . В свою очередь тензорный оператор  $\frac{\hbar}{i} x_i \frac{\partial}{\partial x_j}$  можно расписать через симметричный и антисимметричный тензорные операторы

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} x_i \frac{\partial}{\partial x_j} &= \frac{\hbar}{2i} \left( x_i \frac{\partial}{\partial x_j} + x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \frac{\hbar}{2i} \left( x_i \frac{\partial}{\partial x_j} - x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right) = \\ &= \frac{\hbar}{2i} \left( x_i \frac{\partial}{\partial x_j} + x_j \frac{\partial}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k. \end{aligned} \quad (46)$$

Далее легко получить операторное равенство

$$x_i \frac{\partial}{\partial x_j} + x_j \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{m}{\hbar^2} (\hat{H}_0 x_i x_j - x_i x_j \hat{H}_0). \quad (47)$$

В результате получим, что матричные элементы (44) выражаются через матричные элементы двух типов

$$\langle \ell', M' | xy | \ell, M \rangle, \langle \ell', M' | xz | \ell, M \rangle, \langle \ell', M' | yz | \ell, M \rangle \quad (48)$$

и

$$\langle \ell', M' | \hat{L}_x | \ell, M \rangle, \langle \ell', M' | \hat{L}_y | \ell, M \rangle, \langle \ell', M' | \hat{L}_z | \ell, M \rangle. \quad (49)$$

Первые переходы называют *квадрупольными электрическими переходами* и обозначают  $E2$ . Переходы типа (49) называют *магнитными дипольными переходами* и обозначают  $M1$ .

Рассмотрим более подробно переходы  $M1$ . При  $(\ell', M') \neq (\ell, M)$  матричный элемент

$$\langle \ell', M' | \hat{L}_z | \ell, M \rangle = \hbar M \langle \ell', M' | \ell, M \rangle = 0. \quad (50)$$

Поэтому ненулевыми матричными элементами переходов  $M1$  будут только от операторов  $\hat{L}_x$  и  $\hat{L}_y$ . Переписывая эти операторы через  $\hat{L}_{\pm}$  (см. Лекцию 3) и пользуясь их свойствами (3.13) приходим к выводу, что

$$\begin{aligned} \langle \ell', M' | \hat{L}_x | \ell, M \rangle &= \frac{1}{2} \langle \ell', M' | \hat{L}_+ + \hat{L}_- | \ell, M \rangle = a_1 \langle \ell', M' | \ell, M+1 \rangle + a_2 \langle \ell', M' | \ell, M-1 \rangle = \\ &= \delta_{\ell', \ell} (a_1 \delta_{M', M+1} + a_2 \delta_{M', M-1}) \\ \langle \ell', M' | \hat{L}_y | \ell, M \rangle &= \frac{1}{2i} \langle \ell', M' | \hat{L}_+ - \hat{L}_- | \ell, M \rangle = b_1 \langle \ell', M' | \ell, M+1 \rangle + b_2 \langle \ell', M' | \ell, M-1 \rangle = \\ &= \delta_{\ell', \ell} (b_1 \delta_{M', M+1} + b_2 \delta_{M', M-1}) \end{aligned} \quad (51)$$

и правила отбора для  $M1$  переходов суть

$$\ell' = \ell \text{ и } M' = M \pm 1. \quad (52)$$

Для частицы в центрально-симметричном поле состояния  $|\ell, M\rangle$  и  $|\ell, M'\rangle$  вырождены. Поэтому переходы между ними не могут быть связаны с поглощением или испусканием энергии. Такого рода переходы могут возникать, когда атом помещен во внешнее магнитное поле и переходы происходят между соседними зеемановскими уровнями.

Другие члены разложения дают переходы более высокой мультипольности  $EJ$  и  $MJ$ . В общем случае можно показать, что в электрических переходах  $EJ$  четность меняется на величину  $(-1)^J$ . Для магнитных переходов  $MJ$  четность меняется на величину  $(-1)^{J+1}$ .

## 6 Время жизни возбужденного состояния

Явление спонтанного перехода квантовой системы с уровня энергии  $E_m$  на более низкий уровень означает, что возбужденные состояния, строго говоря, не являются стационарными. Так уже говорилось о спонтанных переходах с испусканием фотонов. Кроме таких процессов возможны и процессы без излучения энергии. Например, энергия возбуждения электронов в атомах и молекулах может переходить в энергию колебаний ионов. Имеются и другие примеры безызлучательных переходов. В результате переходов получается, что возбужденные квантовые состояния имеют конечное время жизни  $\tau$  и их следует рассматривать как *квазистационарные*. Время жизни квантовой системы в состоянии  $|m\rangle$  определяют как среднее время  $\tau$ , в течении которого вероятность обнаружить систему в этом квантовом состоянии уменьшится в  $e$ -раз.

Вследствие принципа неопределенностей энергия квазистационарных состояний ограничена

$$\Delta E \sim \frac{\hbar}{\tau} \quad (53)$$

и поэтому уже нельзя говорить о энергии этого состояния. Можно только говорить о ее среднем значении. Величину  $\Gamma = \frac{\hbar}{\tau}$ , которая согласно (53) задает энергетический разброс у квазистационарного состояния, называют *естественной шириной линии*.

Построим волновую функцию для квазистационарного состояния. С этой целью рассмотрим общее решение уравнения Шредингера. Ввиду линейности уравнения Шредингера его общее решение есть

$$\psi(\vec{x}, t) = \sum_{\eta} c_{\eta} \varphi_{\eta}(\vec{x}) e^{-i \frac{E_{\eta} t}{\hbar}}. \quad (54)$$

При этом легко показать, что среднее значение энергии по этой волновой функции не зависит от времени. Действительно по определению среднего значения имеем

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &\equiv \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t) \hat{H} \psi(\vec{x}, t) = \\ &\equiv \sum_{\eta'} \sum_{\eta} c_{\eta'}^* c_{\eta} \int d^3x E_{\eta} \varphi_{\eta'}^*(\vec{x}) \varphi_{\eta}(\vec{x}) \exp \left\{ -i \frac{(E_{\eta} - E_{\eta'})t}{\hbar} \right\}. \end{aligned} \quad (55)$$

Теперь воспользуемся условием ортонормированности волновых функций

$$\int d^3x \varphi_{\eta'}^*(\vec{x}) \varphi_{\eta}(\vec{x}) = \Delta_{\eta\eta'}, \quad (56)$$

где мы ввели такое обозначение

$$\Delta_{\eta\eta'} = \begin{cases} \delta_{\eta\eta'} & \text{в случае дискретного спектра} \\ \delta(\eta - \eta') & \text{в случае непрерывного спектра} \end{cases} \quad (57)$$

Подставляя (56) в (55) получим

$$\langle E \rangle = \sum_{\eta} |c_{\eta}|^2 E_{\eta}, \quad (58)$$

что явно не зависит от времени. Тем не менее как видно из (54) это состояние не обладает определенным значением энергии. Таким образом получается, что построенная функция обладает требуемыми свойствами и поэтому при специальном выборе коэффициентов  $c_{\eta}$  может использоваться для описания квазистационарного квантового состояния.

Отметим также, что для рассматриваемого состояния плотность вероятности зависит от времени

$$\rho(\vec{x}, t) \equiv \psi^*(\vec{x}, t) \psi(\vec{x}, t) = \sum_{\eta'} \sum_{\eta} c_{\eta'}^* c_{\eta} \varphi_{\eta'}^*(\vec{x}) \varphi_{\eta}(\vec{x}) \exp \left\{ -i \frac{(E_{\eta} - E_{\eta'})t}{\hbar} \right\}. \quad (59)$$

В случае, когда состояние стационарно

$$c_{\eta} = \Delta_{\eta,m}, \quad (60)$$

плотность состояний становится независимой от времени, а само состояние имеет определенную энергию. С другой стороны, если разброс энергий  $E_{\eta}$  мал по сравнению со средней  $E_m = \langle E \rangle$  можно говорить о квазистационарном состоянии.

Обсудим теперь смысл коэффициентов  $c_\eta$ . Рассмотрим сначала случай, когда спектр  $E_\eta$  непрерывен и коэффициенты можно просто рассматривать как функции энергии  $c(E) \equiv c_\eta$ . Очевидно, что величина  $|c(E)|^2 dE$  равна вероятности обнаружить, что квантовая система имеет энергию в интервале от  $E$  до  $E + dE$ .

Обычно для величины  $|c(E)|^2$  используют *распределение Лоренца* 2

$$|c(E)|^2 = \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma}{(E - E_m)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} \quad (61)$$

причем следует считать, что  $E_m \gg \Gamma$ . Легко показать, что для коэффициентов имеет место обычная имеет место обычная нормировка

$$\int dE |c(E)|^2 = 1. \quad (62)$$

Найдем *закон распада*, т.е. вероятность  $W(t)$  того, что в момент времени  $t$  система находится в том же квантовом состоянии, в котором она находилась в начальный момент времени  $t = 0$ . На основании (54) волновая функция системы в начальный момент времени  $t = 0$  есть

$$\psi(\vec{x}, t = 0) = \int dE c(E) \varphi_E(\vec{x}), \quad (63)$$

а в момент времени  $t \neq 0$

$$\psi(\vec{x}, t) = \int dE c(E) \varphi_E(\vec{x}) e^{-\frac{1}{\hbar} Et}. \quad (64)$$

Интеграл перекрытия между этими состояниями

$$\begin{aligned} & \int d^3x \psi^*(\vec{x}, t = 0) \psi(\vec{x}, t) = \\ &= \int dE \int dE' c^*(E') c(E) e^{-\frac{1}{\hbar} Et} \int d^3x \varphi_{E'}^*(\vec{x}) \varphi_E(\vec{x}) = \\ &= \int dE \int dE' \delta(E - E') c^*(E') c(E) e^{-\frac{1}{\hbar} Et} = \\ &= \int dE |c(E)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} Et} \end{aligned} \quad (65)$$

имеет смысл амплитуды вероятности нахождения квантовой системы в момент времени  $t$  в состоянии, описываемом волновой функцией  $\psi(\vec{x}, t = 0)$ . Подставляя в (65) распределение Лоренца получим для амплитуды вероятности (см. Дополнение к этой Лекции)

$$\int d^3x \psi^*(\vec{x}, t = 0) \psi(\vec{x}, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \left( E_m - \frac{i}{2} \Gamma \right) t \right\}. \quad (66)$$

Соответственно вероятность  $W(t)$  равна

$$W(t) = \exp \left\{ -\Gamma t / \hbar \right\}. \quad (67)$$

С чисто формальной стороны квазистационарное состояние можно рассматривать как состояние с комплексной энергией  $E = E_m - \frac{i}{2} \Gamma$  и его волновую функцию записать в виде

$$\psi_m(\vec{x}, t) = \psi_m(\vec{x}, 0) \exp \left\{ -i \frac{Et}{\hbar} \right\}. \quad (68)$$

В результате вероятность обнаружить это состояние в момент времени  $t$  будет убывать по закону (67)

$$\int d^3x |\psi_m(\vec{x}, t)|^2 = \exp\left\{-\frac{\Gamma t}{\hbar}\right\}. \quad (69)$$

Теперь перейдем к случаю, когда спектр дискретен. Для простоты ограничимся рассмотрением системы, имеющей два уровня  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$ . Вероятность того, что в момент времени  $t$  система находится в том же квантовом состоянии, в котором она находилась в начальный момент времени  $t = 0$ , вычисляется аналогично тому, как это было сделано для непрерывного спектра. Только теперь интегрирование по энергии заменяется суммированием по квантовым состояниям:

$$\begin{aligned} W(t) &= \left| \sum_{n=1}^2 \sum_{n'=1}^2 c_n^* c_{n'} e^{-iE_n t/\hbar} \delta_{nn'} \right|^2 = \left| \sum_{n=1}^2 |c_n|^2 e^{-iE_n t/\hbar} \right|^2 = \\ &= |c_1|^4 + |c_2|^4 + 2|c_1|^2 |c_2|^2 \cos \frac{(E_1 - E_2)t}{\hbar}. \end{aligned} \quad (70)$$

Таким образом получаем, что квантовая система осциллирует с периодом  $T = \frac{2\pi\hbar}{E_1 - E_2}$ .

## Дополнение: вычисление интеграла (67)

Рассмотрим следующий интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{-i\alpha z}}{z^2 + k^2}, \text{ где } \alpha > 0. \quad (71)$$

Рассмотрим подынтегральное выражение как функцию комплексной переменной  $z$ . Она имеет два полюса в точках  $z = \pm ik$  (Рис. 1).

Далее если замкнуть область интегрирования по полуокружности бесконечного радиуса в нижней полуплоскости, то из-за экспоненциально убывающего множителя интеграл даст ноль. Поэтому интеграл (71) можно заменить на интеграл по контуру, изображенном на Рис. 1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{-i\alpha z}}{z^2 + k^2} = \oint dz \frac{e^{-i\alpha z}}{z^2 + k^2}. \quad (72)$$

Контур интегрирования охватывает нижний полюс и поэтому можно применить для интеграла формулу Коши в результате чего получим

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{e^{-i\alpha z}}{z^2 + k^2} = \frac{\pi}{k} e^{-\alpha k}. \quad (73)$$

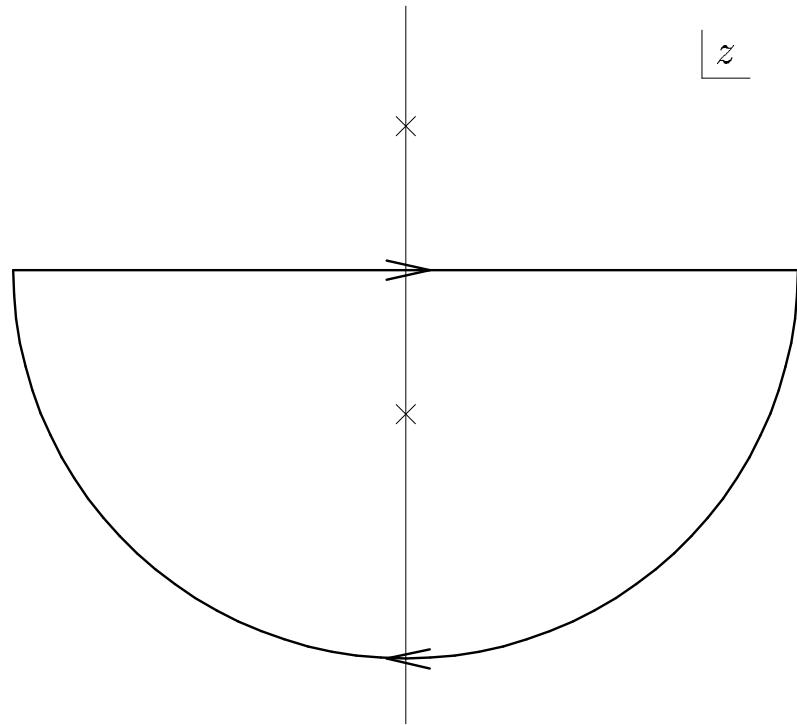


Рис. 1: Контур интегрирования охватывает нижний полюс подынтегральной функции.  
Положения полюсов указаны крестиками.