Časově závislé problémy – Diracova reprezentace [T1]

Problém: $H = H_0 + V(t)$

- kde H_0 umíme řešit, tj. známe stac. stavy $H_0|n\rangle = E_n|n\rangle$
- v $t=0$ připravíme systém ve stavu $|\psi(t=0)\rangle = |i\rangle$
- jaká je pravděpodobnost naměřit systém ve stavu $|n\rangle \neq |i\rangle$ v $t>0$?

obecně ... počáteční stav: $|\psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$

– časový vývoj pro $V=0$ ... $|\psi_0(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle$

– pro $V \neq 0$ píšeme $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle$

Motivace ... poruchový počet ... korekce k $c_n(t)$ ... 0. řád $c_n = \text{konst.}$

ODBOČKA: časový vývoj

Schrödinger: $|\psi\rangle_S = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle$ $\hat{A}_S = \text{konst}$

Heisenberg: $|\psi\rangle_H = \text{konst} = |\psi(0)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi\rangle_S$ $\hat{A}_H = e^{\frac{i}{\hbar}Ht}\hat{A}_S e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}$

Diracův obraz/reprezentace: (interaction) $|\psi\rangle_I = e^{+\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t)\rangle_S$ $\hat{A}_I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\hat{A}_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$

časový vývoj v Diracově reprezentaci:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I = V_I |\psi(t)\rangle_I} \quad (1)$$

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} A_I(t) = [A_I, H_0]} \quad (2)$$

DK: (1) $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t)\rangle_S\right) = -H_0 e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi\rangle_S + e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t} H|\psi\rangle_S$

$$= \underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\, V\, e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}}_{V_I}\ \underbrace{e^{+\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t)\rangle_S}_{|\psi\rangle_I}$$

(2) je vidět – jako Heisenberg ale pro $H \to H_0$ nebo přímo

$$i\hbar \frac{d}{dt}\left[e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\hat{A}_S e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\right] = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\left[A_S H_0 - H_0 A_S\right]e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} = [A_I, H_0]$$

---

zpět k našemu probl: $|\psi(t)\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t)\rangle_S = \sum_n c_n(t)|n\rangle$

přitom $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle_I = V_I|\psi(t)\rangle_I$ .. násobíme na $\langle n|$

$\to$ $i\hbar \frac{d}{dt}c_n(t) = \sum_m \langle n|V_I(t)|m\rangle\, c_m(t)$

$\hookrightarrow \langle n| e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}\hat{V}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}|m\rangle = V_{nm}\cdot e^{i\omega_{nm}t}$

kde $\omega_{nm} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_m)$

většinou nelze řešit → aproximacemi ... např. poruchová teorie
→ numericky .. pro malé problémy (dnes už ne tak malé)
→ $\exists$ pár analytických řeš. příkladů

PŘ: dvouhladinový systém pod vlivem harmonické poruchy

$$H_0 = E_1|1\rangle\langle 1| + E_2|2\rangle\langle 2| \qquad E_2 > E_1$$

$$V(t) = \gamma e^{i\omega t}|1\rangle\langle 2| + \gamma e^{-i\omega t}|2\rangle\langle 1| \qquad \gamma, \omega > 0$$

poč. podm.: $c_1(0)=1$ $\quad c_2(0)=0$ $\quad \dots t_i \quad |m_i\rangle \equiv |1\rangle$

---

rovnice pro $c(t)$ v interakční reprez.:

$$i\hbar\dot{c}_1 = V_{12}e^{i\omega_{12}t}c_2 = \gamma e^{i(\omega-\omega_{21})t}c_2 \qquad \omega-\omega_{21} \equiv \bar{\omega}$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = \gamma e^{-i\bar{\omega}t}c_1$$

řešení: $c_1 = \frac{i\hbar}{\gamma}e^{i\bar{\omega}t}\dot{c}_2$ + dosazení do

$$\to \quad \ddot{c}_2 + i\bar{\omega}\dot{c}_2 + \frac{\gamma^2}{\hbar^2}c_2 = 0 \quad \dots \text{rce k.ř. s konst koef} \dots \quad c_2 = e^{i\lambda t}$$

$$\to \quad \lambda^2 + \bar{\omega}\lambda - \frac{\gamma^2}{\hbar^2} = 0 \quad \to \quad \lambda_{1,2} = \frac{-\bar{\omega} \pm \sqrt{\bar{\omega}^2 + \frac{4\gamma^2}{\hbar^2}}}{2}$$

obec. řešení $\quad c_2 = Ae^{i\lambda_1 t} + Be^{i\lambda_2 t}\Big|_{t=0} = A+B = 0 \quad \dots A = -B$

$$c_1 = \frac{i\hbar}{\gamma}e^{i\bar{\omega}t}\left(Ai\lambda_1e^{i\lambda_1 t} - Ai\lambda_2e^{i\lambda_2 t}\right)\Big|_{t=0} = -\frac{\hbar}{\gamma}(\lambda_1-\lambda_2)A = 0 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{\gamma}{\hbar(\lambda_2-\lambda_1)}$$

pravd. přechodu do $|2\rangle$:

$$|c_2(t)|^2 = A^2\cdot\left|e^{i\lambda_1 t} - e^{i\lambda_2 t}\right|^2 = A^2\left|1 - e^{i(\lambda_2-\lambda_1)t}\right|^2 = A^2\left|e^{i\frac{(\lambda_2-\lambda_1)t}{2}} - e^{-\frac{i}{2}(\lambda_2-\lambda_1)t}\right|^2$$

$$= 4A^2\sin^2\left(\frac{\lambda_2-\lambda_1}{2}t\right) \qquad \lambda_2-\lambda_1 = \sqrt{\bar{\omega}^2 + \frac{4\gamma^2}{\hbar^2}}$$

řešení problému: Rabiho formule:

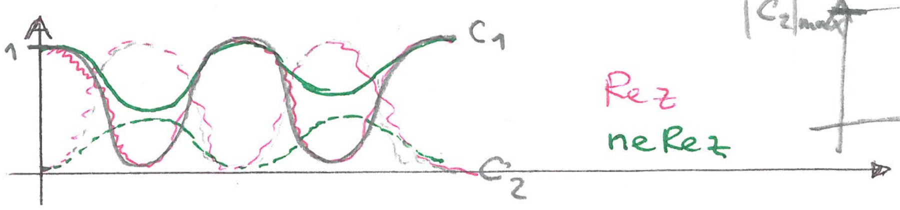
$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega-\omega_{21})^2/4}\sin^2\left\{\sqrt{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega-\omega_{21})^2/4}\cdot t\right\}$$

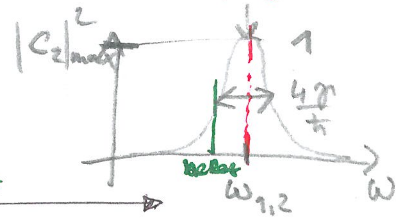
$$|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1 \qquad \text{(unitární čas. vývoj)}$$

diskuse formule: ... maximum pro $\omega = \omega_{21}$ ... vl. frekv. systému
(amplitudy oscilace)

pozn: v rezonanci $|c_2(t)|^2$ nabývá $\forall$ hodnot z $\langle 0, 1\rangle$
jinak $|c_2|^2 < 1$ a $|c_1|$ nejde až do nuly $|c_1| > 1$

Rabiho oscilace:





výměna energie mezi budící silou a systémem .. absorbce / emise

Aplikace modelu

Elektron v MG poli ... spinová mg. rezonance (podobná jaderné)

$$\vec{B} = \underset{\text{směr } z}{\vec{B}_0} + \underset{\text{rotující v } x,y}{\vec{B}_1(t)} = (B_1 \cos\omega t, B_1 \sin\omega t, B_0)$$

mg. moment elektronu: $\vec{\mu} = g\vec{S} = -\frac{e}{m_e}\vec{S}$

Hamiltonián: $H = -\vec{\mu}\cdot\vec{B} = \frac{\hbar e}{2m_e}\,\vec{\sigma}\cdot\vec{B}$

připomínám: $\vec{\sigma} = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$

$|+\rangle\langle-| + |-\rangle\langle+|$ $\quad$ $i(|-\rangle\langle+| - |+\rangle\langle-|)$ $\quad$ $|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|$

tj $\quad H_0 = \frac{\hbar e}{2m_e} B_0 \left(|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-| \right)$

$$V(t) = \frac{\hbar e}{2m_e} B_1 \left(|+\rangle\langle-| e^{-i\omega t} + |-\rangle\langle+| e^{+i\omega t} \right)$$

→ identifikace s předch. modelem: $|\pm\rangle \equiv |E_{1,2}\rangle$; $E_{1,2} = \mp \left| \frac{\hbar e B_0}{2m_e} \right| \equiv \mp \frac{\hbar}{2} |g B_0|$

$\gamma = \frac{\hbar e B_1}{2m_e} = -\frac{\hbar}{2} g B_1 \qquad \omega_{12} = \left| \frac{e B_0}{m_e} \right| = |g B_0|$

rezonanční podmínka: $\omega = \omega_{12} = |g B_0| = 2\omega_L$ ... freq. precese spinu v mg p

další aplikace: maser, NMR, měření MG momentů částic
optické pumpování vlaků ... několik Nobel. cen

časově závislá poruchová teorie

cíl: najít obecné rozvoj $c_n(t)$ v mocninách poruchy $V(t) \to \lambda V(t)$

opět jen značka, abychom rozlišili řády. Nakonec $\lambda = 1$

připomínám: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle_I = \hat{V}_I(t) |\psi\rangle_I$

... lineární rovnice $\to \exists\, U_I(t)$: $|\psi(t)\rangle_I = U_I(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle_I$

(klademe $t_0 = 0$)
obvyklé pokud nepředpokládáme např. $t_0 \to -\infty$

$\Rightarrow \quad i\hbar \frac{d}{dt} \hat{U}_I(t) = \hat{V}_I(t)\, \hat{U}_I(t)$

+ počáteční podmínka $\hat{U}_I(0) = \hat{I}$

tj $\quad U_I(t) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_I(t')\, U_I(t')\, dt'$

+ řešení iteracemi: Dysonův rozvoj

$$U_I(t, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_I(t') \left\{ \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} V_I(t'') \left\{ I - \dots \right\} \right\}$$

Dysonův rozvoj:

$$U_I(t,t_0) = I - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} dt_1\, \hat V_I(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2\, \hat V_I(t_1)\hat V_I(t_2) + \dots$$
$$+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n\, V_I(t_1)V_I(t_2)\dots V_I(t_n) + \dots$$

... rovnou separované mocninné řády ve V_I

Pravděpodobnost přechodu: $|\psi(t)\rangle_I = \sum_n c_n(t)|n\rangle$

současně $|\psi(t)\rangle_I = U_I(t)|i\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|U_I(t)|i\rangle$

tj $c_n(t) \equiv \langle n|U_I(t)|i\rangle$

Srovn. se Schröding. obrázkem

$$|\psi(t)\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t)\rangle_S = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}U(t,t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\psi(t_0)\rangle_S}_{|\psi(t_0)\rangle_I}$$

tj $U_I(t,t_0) = e^{\frac{i}{\hbar}H_0 t}U(t,t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}$

tj Pravd. přechodu mezi stavy H_0: $|\langle n|U_I|i\rangle|^2 = |\langle n|U|i\rangle|^2$

Aplikace Dysonova rozvoje na $c_n(t)$:

$c_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}$ ... nezáv. na čase

$$c_n^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle n|V_I(t')|i\rangle dt' = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} V_{ni}(t')e^{i\omega_{ni}t'}dt'$$

$$c_n^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_m \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt''\, e^{i\omega_{nm}t'}V_{nm}(t')e^{i\omega_{mi}t''}V_{mi}(t'')dt''$$

kde $\omega_{mn} \equiv \frac{1}{\hbar}(E_m - E_n)$

+ nezapomenout, že $p(i\to n) \equiv |c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + \dots|^2$

---

aplikace na 2 hlad. model mimo rezonanci:

$$c_2 = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \gamma e^{i\bar\omega t}dt = -\frac{i\gamma}{\hbar}\frac{1}{i\bar\omega}(e^{i\bar\omega t}-1)$$

$$\to |c_2|^2 = \frac{\gamma^2}{\hbar^2\bar\omega^2}4\cdot\sin^2\frac{\bar\omega}{2}t$$

srovn. s Rabi: $\frac{\gamma^2/\hbar^2}{\cancel{\gamma^2/\hbar^2}+\bar\omega^2/4}\sin^2\left(\sqrt{\cancel{\gamma^2/\hbar^2}+\bar\omega^2/4}\cdot t\right) \longrightarrow \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\bar\omega^2/4}\sin^2\frac{\bar\omega}{2}t$ ✓

problém v rezonanci $\bar\omega = 0$ ... platnost approx: $\gamma \ll \hbar\bar\omega$

bez ohledu na $\bar\omega$: aproximace platí pro $t \ll \frac{1}{\omega_0}$ $\quad \omega_0 \equiv \sqrt{\frac{\gamma^2}{\hbar^2}+\frac{\bar\omega^2}{4}}$

dva obvykle rozlišované případy

1) Skoková porucha

předpokládáme, že časový interval zapínání poruchy je malý ve srovnání se změnami indukovanými poruchou

tj $\boxed{\hat{V}(t) = \Theta(t)\,\hat{V}}$, kde $\Theta(t)$ ... Heaviside $\begin{cases} 0 & t<0 \\ 1 & t>0 \end{cases}$ (volba $t_0=0$)

$\hat{V}$ ... konst. operátor (nezávisí na čase)

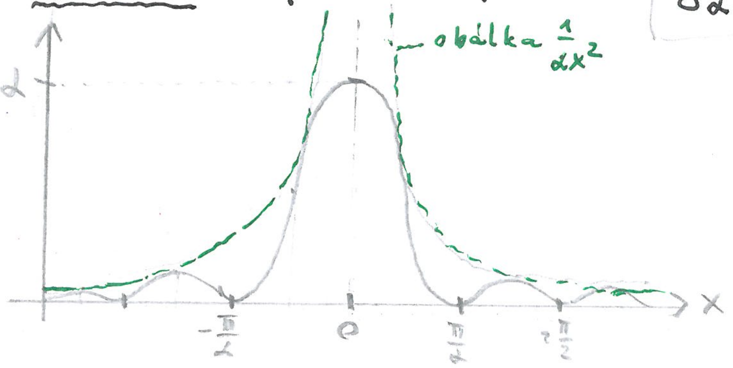
Dysonův rozvoj $\Rightarrow$

$$c_n^{(0)} = \delta_{ni}$$

$$c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \int_0^t e^{i\omega_{ni}t'}dt' = \frac{V_{ni}}{E_n-E_i}\underbrace{\left(1-e^{i\omega_{ni}t}\right)}_{\to\, 2i\, e^{\frac{i\omega t}{2}}\left[e^{-\frac{i\omega t}{2}} - e^{+\frac{i\omega t}{2}}\right]}$$

tj $$|c_n^{(1)}|^2 = \frac{4\,|V_{ni}|^2}{|E_n-E_i|^2}\sin^2\left[\frac{(E_n-E_i)t}{2\hbar}\right] \qquad (*)$$

ODBOČKA: chování funkce $g_\alpha(x) = \dfrac{\sin^2\alpha x}{\alpha x^2}$



- $g_\alpha(x) \neq 0$ jen v okolí $0 \pm$ několik $\frac{\pi}{\alpha}$
- pro $\alpha \to 0$ se peak zužuje a roste amplituda

tj pod libovolnou vůči $f(x)$

$$\int f(x)\,g_\alpha(x)\,dx = f(x=0)\cdot\int g_\alpha(x)\,dx$$

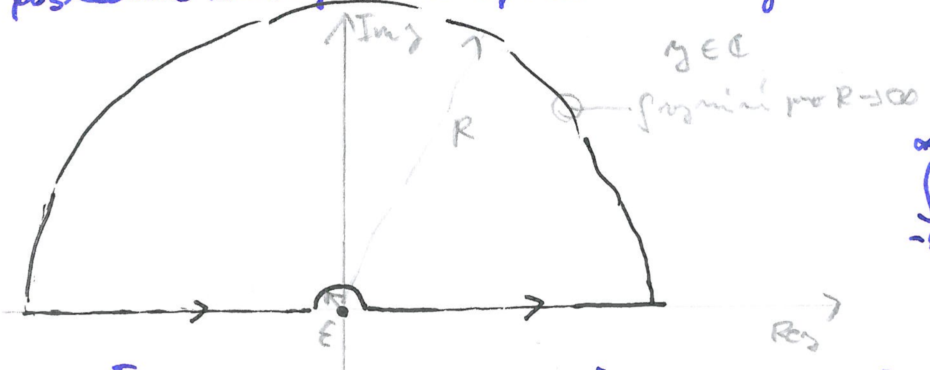
... tj pro $\alpha\to 0$ je $g_\alpha(x) \sim \delta(x)$

přesněji: $g_\alpha(x) \longrightarrow \pi\,\delta(x)$ pro $\alpha \to 0$

faktor π vychází z integrálu

neboť $$\int g_\alpha(x)\,dx = \int \frac{\sin^2 y}{y^2}\,dy = \int \frac{1-\cos 2y}{2y^2} = \mathrm{Re}\int\frac{1-e^{2iy}}{2y^2}\,dy$$

poslední integrál se spočítá integrací v $y\in\mathbb{C}$:



fce je holomorfní uvnitř kontury

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1-e^{2iy}}{2y^2}\,dy = \int_{\curvearrowright}\frac{1-e^{2iz}}{2z^2}\,dz = I$$

po polokružnici o poloměru ε

$z = \varepsilon e^{i\varphi}$ $\quad dz = i\varepsilon e^{i\varphi}$ $\quad \varphi\in(0,\pi)$

$$I = \int_0^\pi d\varphi\; i\varepsilon e^{i\varphi}\left\{\frac{1}{2\varepsilon^2 e^{2i\varphi}}\Big(\underbrace{-2i\varepsilon e^{i\varphi}}_{2iz} \underbrace{- \tfrac{1}{2}(2i\varepsilon e^{i\varphi})^2}_{-\frac{1}{2!}(2iz)^2} - \dots\Big)\right\} = \int_0^\pi d\varphi = \pi$$

nepřispějí v lim $\varepsilon\to 0$

---

pokračování – rozbor (*) na druhé str.

T6

- pro malé časy $t\omega_{ni} \ll 1$ lze $\sin(A) \sim A$ ve (*) a vliv poruchy je $\sim t^2$
- pro ~~t~~ $t\omega_{ni} \approx 1$ třeba držet plnou verzi formule
- pro $t\omega_{ni} \gg 1$ je $p_{n\leftarrow i} \sim \delta(E_n - E_i)$
  přesněji vázání šířky peaku nějaké, že k přechodu dochází jen "relace neurčitosti"
  pro $\frac{|E_n - E_i|}{2\hbar} t \lesssim \pi$ tj $\Delta E \cdot \Delta t \lesssim 2\pi\hbar$
  rozdílenost hladin — doba trvání poruchy

a) přechod mezi diskrétními hladinami ... $E_i = E_n$ ... "rezonanční přechod"

$$p_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar} t \, |\langle n|V|i\rangle|^2 \, \delta_t(E_i - E_n)$$

kde $\delta_t(E_i - E_n) = \dfrac{\sin^2\left(\frac{E_n - E_i}{2\hbar} t\right)}{\pi \frac{t}{2\hbar}(E_n - E_i)^2} \xrightarrow{t \gg \frac{2\pi\hbar}{\Delta E}} \delta(E_i - E_n)$ jak rozebráno výše

... pro fixní i, t lze chápat jako rozdělení $p(n)$ .. nalezení obsazení n-té hladiny

b) přechod do spojité části spektra

$p(n)$ je stále distribuční funkce ... $p(n)\,dn = p(E)\underbrace{\frac{dn}{dE}}_{=\varrho(E)}dE$, kde $E(n)$
.. je rozumné uvádět jako rozdělení energií: "hustota stavů" $\longrightarrow \varrho(E)$

obecně Jakobián přechodu viz příklad

odbočka:
- $p(n)$ je distribuční funkce v n, tj pravděpodobnost nalezení $n \in \langle n_1, n_2\rangle$ je $\int_{n_1}^{n_2} p(n)\,dn$
- $p(n)\varrho(E_n)$ je distribuční funkce v E; tj pravděpodobnost nalezení $E \in \langle E_1, E_2\rangle$ je $\int_{E_1}^{E_2} p(n)\varrho(E)\,dE$

Pravděpodobnost $p_{i\to n}$ chápaná jako rozdělovací funkce energií tedy je

$$\boxed{p_{i\to n} \cdot dE_n = \frac{2\pi}{\hbar} t \, |\langle n|V|i\rangle|^2 \, \delta(E_i - E_n)\, \varrho(E_n)\, dE_n}$$

často se uvádí jako rychlost přechodů vztažená na 1 čas a integrovaná přes $\forall$ energie

$$\boxed{w_{i\to n} = \frac{dp}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|V|i\rangle|^2 \, \varrho(E_n)}$$

anglicky: "transition rate"

Fermiho zlaté pravidlo

Často využívá [illegible] lze vzorec jako univerzální pravidlo pro počítání v Bornově aproximaci a jiné přechody vlivem záření nebo pro rozptyl

příklad: $E_n \to \frac{p^2}{2m}$ .. stavy hladina pro vol. částici $|\vec{p}\rangle = |p, \vec{n}_0\rangle$ směr $p = |\vec{p}|$, $\vec{n}_0 = \frac{\vec{p}}{p}$

potom hustota stavů:

$$d\vec{p}^3 = p^2\,dp\,d\Omega_n = p^2 \frac{dp}{dE}\,d\Omega_n\, dE = \underbrace{p^2 \frac{d}{dE}\left(\sqrt{2mE}\right)}_{\varrho(E) = m\sqrt{2mE}} d\Omega_n \, dE$$

tj

viz příklad na straně T13 → Bornova approximace pro $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ odvození z Fermiho pravidla

2) Harmonická porucha

$$\hat{V}(t) = \hat{v}\, e^{i\omega t} + \hat{v}^+ e^{-i\omega t}$$ (spec. případ $v^+ = v$ $\quad 2\hat{v}\cos\omega t$)

Dyson rozvoj .. 1. řád:

$$c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \left(v_{ni}\, e^{i\omega t'} + v_{ni}^+\, e^{-i\omega t'}\right) e^{i\omega_{ni} t'} dt'$$

$$= \frac{1}{\hbar}\left\{ \frac{1-e^{i(\omega+\omega_{ni})t}}{\omega+\omega_{ni}}\, v_{ni} + \frac{1-e^{i(\omega_{ni}-\omega)t}}{\omega_{ni}-\omega}\, v_{ni}^+ \right\}$$

... stejné části jako pro konst. poruchu $\omega_{ni} \to \omega_{ni} \pm \omega$

... pro $t \to \infty$ (přesněji $(\omega+\omega_{ni})t \gg 1$, ale $|v_{ni}|t \ll \hbar$ aby platila poruch. teorie)

přežijí jen stavy s $E_n \simeq E_i \pm \hbar\omega$ $\longrightarrow$ absorpce

$\longrightarrow$ stimulovaná emise

tj. pro $\omega \neq 0$ se členy nepřekrývají a při umocňování můžeme vynechat jejich součin, tj.

$$p_{i\to n} = |c_n^{(1)}|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}\, t\, |v|^2\, \delta(E_n \pm \hbar\omega - E_i)\, \varrho(E_n)$$

kde $|v|^2 = |v_{ni}|^2$ .. pro absorpci $E_n = E_i + \hbar\omega$

$|v|^2 = |v_{ni}^+|^2 = |v_{in}|^2$ .. pro emisi $E_n = E_i - \hbar\omega$

$\Rightarrow$ stejný maticový element kontroluje opačné procesy

.. princip detailní rovnováhy: $\quad \dfrac{w_{i\to f}}{\rho_f(E)} = \dfrac{w_{f\to i}}{\rho_i(E)}$

3) korekce 2. řádu k poruch. rozvoji

uvažujme případ $\omega = 0$ (skoková porucha); zobecnění snadné

Dysonův rozvoj:

$$c_n^{(2)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_m V_{nm} V_{mi} \int_0^t dt' \, e^{i\omega_{nm} t'} \int_0^{t'} dt'' \, e^{i\omega_{mi} t''}$$

$$= \frac{i}{\hbar} \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_m - E_i} \int_0^t \big(\underbrace{e^{i\omega_{ni} t'}}_{1} - \underbrace{e^{i\omega_{nm} t'}}_{2} \big) \, dt'$$

člen 1 má stejnou čas. závislost jako $c_n^{(1)}$ s $V_{ni} \to \sum_m \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_m - E_i}$

člen 2 pro $m = i$ zruší člen 1
pro $m \neq i$ vzhledem divoce osciluje a nedá člen rostoucí s t

$\Rightarrow$ 1. a 2. řád dohromady vede na rychlost přechodu (integr. přes koncové energie):

$$w_{i \to n}(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| V_{ni} + \sum_{m \neq i} \frac{V_{nm} V_{mi}}{E_i - E_m} \right|^2 \rho(E_n)$$

pozn.:
- podobná struktura jako čas. nezávislá poruch. teor.
- interpretace → suma přes virtuální stavy
  → při přechodech do virt. stavů se nezachov. energie, jen celková energie

Absorpce a ~~x~~ stimul. emise záření

Hamiltonián v Elmg. poli. ~~$H=\frac{p^2}{2m}$~~

$$H = \frac{(\hat p - q/c\,\hat A)^2}{2m} + q\phi + V_0 \quad \text{, kde}$$

V_0 ... vazebný pot. (neuvaž. naiv.)
ϕ, A ... elmg. vlna

$$= \underbrace{\frac{p^2}{2m} + V_0}_{H_0} + \underbrace{q\phi - \frac{q}{2mc}(p\cdot A + A\cdot p)}_{V}$$

v elmg vlně je $\nabla\cdot E = 0$ ⇒ možno volit kalibraci $\phi = 0$, $\nabla\cdot A = 0$

v této kalibraci: $V(t) = -\frac{q}{mc} A\cdot p$ (členy $A\cdot p$ a $p\cdot A$ se liší o)

předp: monochromatická vlna: $\vec A = 2A_0 \vec e \cos\left(\frac{\omega}{c}\vec n\cdot\vec x - \omega t\right)$

kde $\vec n$ = směr šíření; $\vec e$ = polarizace ... 1- vektory

$$\text{tj } V(t) = -\frac{q}{mc}A_0\,\vec e\cdot\vec p\left[\underbrace{e^{i\omega\vec n\cdot\vec x/c - i\omega t}}_{\substack{\cancel{\text{emise}}\\ \text{absorpce}}} + \underbrace{e^{-i\omega\vec n\cdot\vec x/c + i\omega t}}_{\substack{\cancel{\text{absorpce}}\\ \text{emise}}}\right]$$

tj ~~aplikace formule~~

~~$P_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}t\,|V_{in}|^2\,\delta_t(E-E_i)$~~

obecná teorie byla pro $\hat V(t) = \hat v\, e^{i\omega t} + \hat v^+ e^{-i\omega t}$

$$\to \quad v^+_{ni} = -\frac{qA_0}{mc}\langle n|e^{i\omega/c\,\vec n\cdot\vec x}\,\vec e\cdot\vec p|i\rangle$$

$$\frac{dP_{i\to n}}{dt} = w_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{q^2A_0^2}{m^2c^2}\left|\langle n|e^{i\frac{\omega}{c}\vec n\cdot\vec x}\,\vec e\cdot\vec p|i\rangle\right|^2\delta_t(E_n - E_i - \hbar\omega)$$

Dipólová aproximace:

$$e^{i\frac{\omega}{c}\vec n\cdot\vec x} \simeq 1 + i\frac{\omega}{c}\vec n\cdot\vec x - \frac{1}{2}\left(\frac{\omega}{c}\right)^2\cancel{\vec n\cdot(\underbrace{\vec x\vec x}_{\text{dyadický součin}})\cdot\vec n} + \dots$$

stavy $|n\rangle$ jsou nenulové jen na vzdálenostech $x \simeq a_0$ .. Bohrův poloměr

tj pro $a_0 \ll \frac{c}{\omega} = \frac{\lambda}{2\pi}$ ... rozměry atomu jsou typicky menší než vln. délka
.. stačí vzít první člen rozvoje

tj $\langle n|e^{i\frac{\omega}{c}\vec n\cdot\vec x}\,\vec e\cdot\vec p|i\rangle \to \vec e\cdot\langle n|\vec p|i\rangle$ .. nyní volba $\vec e \equiv \vec e_z$

+ využijeme $\langle n|p_z|i\rangle = \frac{m}{i\hbar}\langle n|[z, H_0]|i\rangle = i m\,\omega_{ni}\langle n|z|i\rangle$

$$\text{tj } w_{i\to n} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{\cancel{q^2}A_0^2}{\cancel{m^2}c^2}\cancel{m^2}\,\omega_{ni}^2\left|\vec e\cdot\langle n|q\vec x|i\rangle\right|^2$$

$q\vec x$ … tenzor operátor (dipól) řádu 1

+ aplikace Wigner-Eckartovy věty:

⇒ $\Delta j = 0,1$ $\quad\Delta m = 0,1$

($\Delta m = 0$ pro $\vec e = \vec e_z$)

poznámky:

- vyšší multipóly:

konkrét. příklad $\vec{\epsilon} \equiv \vec{e}_z$, $\vec{n} = \vec{e}_y$

člen v rozvoji exponenciály: $i\frac{\omega}{c}\vec{n}\cdot\vec{x} = i\frac{\omega}{c}y$

tj $\langle n| e^{i\frac{\omega}{c}\vec{n}\cdot\vec{x}}\, \vec{\epsilon}\cdot\vec{p}|i\rangle = \underset{\text{dipól approx}}{\cancel{\ldots}} + i\frac{\omega}{c}\langle n|y\cdot p_z|i\rangle$

píšeme $y\cdot p_z = \frac{1}{2}\underbrace{(y\cdot p_z - z p_y)}_{L_x \ldots \text{"Magnetické" dipólové přechody)}} + \frac{1}{2}(y\cdot p_z + z p_y)$

$$= y p_z + p_y z = \frac{m}{i\hbar}\left\{ y[z, H_0] + [y, H_0] z\right\} = \frac{m}{i\hbar}(YZH_0 - H_0 YZ)$$

$\rightarrow$ kvadrupólový člen $i\frac{\omega}{c}\cdot\frac{1}{2}\frac{m}{i\hbar}(E_i - E_n)\langle n|YZ|i\rangle$

kvadrupólový operátor

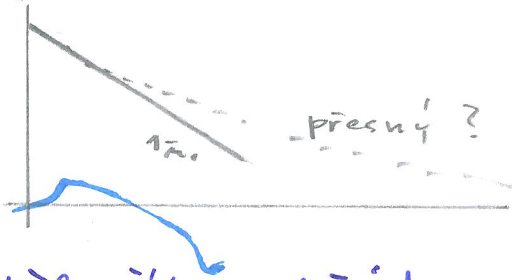
YZ = lin kombinace $Y_2^1 \sim \frac{z(x+iy)}{r^2}$ $\quad Y_2^{-1} \sim \frac{z(x-iy)}{r^2}$

tj $\int Y_l^{m} Y_2^{\pm 1} Y_{l'}^{m'}\, d\Omega$ ~ nenulový jen pro $\Delta l = 0, \pm 2$
$\Delta m = \pm 1$

Rozpad diskrétního stavu do kontinua

v nejnižším řádu poruch. teorie: $|c_i(t)|^2 = 1 - \sum_f |c_f|^2 = 1 - t\sum_{f\neq i} w_{i\to f}$

$\equiv 1 - \frac{\Gamma t}{\hbar}$ Γ... rozmaz. E



Je potřeba jít za 1. řád.

- metoda adiabatického zapínání: $V(t) = e^{\eta t} V$ $\eta \to 0$

vymizí η v 1. řádu? $\quad c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \int_{t_0}^{t} e^{\eta t'} e^{i\omega_{ni} t'} dt'$

$t_0 \to -\infty$: $\quad c_n^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} V_{ni} \frac{e^{\eta t + i\omega_{ni} t}}{\eta + i\omega_{ni}}$

$$\Rightarrow |c_n^{(1)}|^2 = \frac{|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2}$$

$$\frac{d}{dt}|c_n^{(1)}|^2 = \frac{2|V_{ni}|^2}{\hbar^2} \frac{\eta\, e^{2\eta t}}{\eta^2 + \omega_{ni}^2} \xrightarrow{\boxed{\frac{\eta}{\eta^2+\omega^2} \to \pi\delta(\omega)}} \frac{2\pi}{\hbar} |V_{ni}|^2 \delta(E_n - E_i)$$

tj. v limitě $\eta \to 0$ reprodukujeme 1. řád

zkusme vyšší řády: $\quad c_i^{(0)} = 1$

$$c_i^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \cdot \frac{V_{ii}}{\eta} e^{\eta t}$$

$$c_i^{(2)} = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_m |V_{mi}|^2 \lim_{t_0 \to -\infty} \int_{t_0}^{t} dt'\, e^{i\omega_{im} t' + \eta t'} \frac{e^{i\omega_{mi} t' + \eta t'}}{i(\omega_{mi} - i\eta)}$$

stejné, ale musíme oddělit, protože jiné chování [illegible]

$$= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 |V_{ii}|^2 \frac{e^{2\eta t}}{2\eta^2} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2 e^{2\eta t}}{2\eta(E_i - E_m + i\hbar\eta)}$$

lim $\eta \to 0$

$$\Rightarrow \frac{\dot{c}_i}{c_i} = \frac{-\frac{i}{\hbar} V_{ii} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \frac{|V_{ii}|^2}{\eta} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta}}{1 - \frac{i}{\hbar} \frac{V_{ii}}{\eta}} + \text{vyšší členy } V$$

$$= -\frac{i}{\hbar} V_{ii} + \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m + i\hbar\eta} + \text{vyšší členy ve } V$$

$\Rightarrow$ řešení $\quad c_i(t) = e^{-i\Delta_i t/\hbar}$

kde $\Delta_i = V_{ii} + \text{v.p.} \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m} - i\pi \sum_{m \neq i} |V_{mi}|^2 \delta(E_i - E_m)$

pozn: $\langle i | \psi \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} c_i = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i + \Delta_i) t}$ ... Δ_i .. komplexní korekce k energii přidán ~~...~~ mom:

$$\frac{\Gamma}{\hbar} = \sum_{m\neq i} w_{i\to m} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{m\neq i} |V_{mi}|^2 \delta(E_i - E_m) = -\frac{2}{\hbar}\,\mathrm{Im}[\Delta_i]$$

tj. $\Gamma = +2\pi i \sum_{m\neq i} |V_{mi}|^2 \delta(E_i - E_m) = 2\pi i\, |V_{mi}|^2 \varrho(E_i)$

povšiměte si ... reálná část odpovídá poruchové korekci E_i do 2 ř. včetně

~~...~~ význam šířky Γ: $|c_i|^2 = e^{2\,\mathrm{Im}\Delta \cdot t/\hbar} = e^{-\Gamma t/\hbar} = e^{-t/\tau}$

Γ ... tzv. rozpadová šířka ; $\tau \cdot \Gamma = \hbar$ ... τ = doba života

Fourierova transformace ~~...~~ $\langle i|\psi\rangle_S = e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i+\Delta_i)t}$

$$\longrightarrow \quad |f(E)|^2 \sim \frac{1}{[E-(E_i+\mathrm{Re}\Delta_i)]^2 + \Gamma_i^2/4} \quad \ldots \Gamma_i \text{ ... šířka peaku}$$

dá se ukázat, že rovněž vzniká šířka, distribuce, obsazení c_m

---

trik: $V \longrightarrow V e^{\eta t}$ $\qquad \eta \to 0+$

... funguje tak, že $V(t) \xrightarrow[\eta\to 0+]{} V$ ale $|\psi\rangle$ si pamatuje poč. podm. v čase $t \to -\infty$ pro $V=0$

.. jiné odvození L-S rovnice:

časový vývoj v Dirac. obraze: $i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle_I = V_I |\psi_I\rangle$

integrací: $|\psi\rangle_I = |\phi\rangle_I - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} V_I(t')\,|\psi(t')\rangle_I$ $\qquad |\phi\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}E_i t}|p_i\rangle_S$

+ volba $t=0$ = ~~...~~ Ref. čas kdy Dirac = Schrö $\qquad$ jinak $\langle p|\psi\rangle_I = e^{\frac{i}{\hbar}Et}\langle p|\psi\rangle_S$

$$\langle p|\psi\rangle = \langle p|p_i\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{\frac{i}{\hbar}E_p t'} V_{pp'} e^{\eta t'} \langle p'|\psi(t')\rangle_S\, d^3p'\, dt'$$

$\langle p'|\psi(t')\rangle_S \longrightarrow e^{-\frac{i}{\hbar}Et'}|\psi(0)\rangle$

$$= \langle p|p_i\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{-\frac{i}{\hbar}(E-H_0+i\varepsilon)} V_{pp'}\, |\psi(0)\rangle\, dt'$$

p-nezávislé

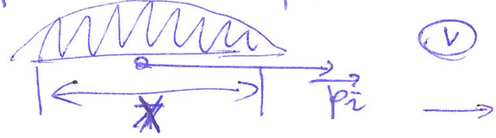
$$|\psi\rangle = |p_i\rangle + \frac{1}{E-H_0+i\varepsilon} V|\psi\rangle \equiv \lim_{t\to-\infty} e^{\frac{i}{\hbar}Ht} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t}|\phi_i\rangle \equiv \Omega^+|\phi_i\rangle$$

Příklad: Účinný průřez v Born. approx. (Messiah)

rozptyl: $H = H_0 + V(r)$

nepomůže H_0 ... počáteční stav $|p_i\rangle \equiv |n\rangle$ + zapneme poruchu

idealizace; prakticky obálka $\Leftrightarrow$ zapínání poruchy při průletu



$$T = \frac{x}{v_i} = \frac{x}{p_i} m$$

poruchový výpočet OK pokud $V \cdot T$ malé, tj < malé V nebo velké p_i tj E_i

budeme zapínat slabě $\rightarrow$ $P_{i\to f} = \frac{2\pi t}{\hbar} |\langle p_f|V|p_i\rangle|^2 \delta_{T \to \eta}(E_i - E_f)\rho(E_f)$

konkr. forma záv. na zapínání

buď $\delta_T(\omega) = \frac{1}{\pi}\frac{\eta}{\eta^2+\omega^2}$ nebo $= \frac{1}{\pi}\cdot\frac{\sin^2 \omega\frac{t}{2}}{\omega^2 \frac{t}{2}}$

ale člen úměrný t nezávisí (kvůli velkým t)

$$\rightarrow \quad w_{i\to f} \equiv \int_{E_f \text{ v okolí } E_i} \frac{dP_{i\to f}}{dt}\, dE_f = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle p_f|V|p_i\rangle|^2 \rho(E_i)$$

$\rho(E_i)$ jsme počítali minule – $d^3p = \underbrace{p^2\, dp\, d\Omega}_{} = \underbrace{\rho(E)\, dE\, d\Omega}_{}$ $\quad \frac{p^2}{2m}$

$\Rightarrow \rho(E) = m p_i = m\sqrt{2Em}$

účinný průřez: konstanta úměrnosti mezi nalét. hustotou toku a počtem událostí za 1 čas

∘ nalét. tok $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}[\psi \nabla\psi^* - \psi^* \nabla\psi]$ $\qquad \psi = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} e^{+\frac{i}{\hbar}\vec{p}_i\cdot\vec{x}}$

$$\nabla\psi = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}}\cdot\frac{i}{\hbar}\vec{p}_i\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_i\cdot\vec{x}}$$

tj $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\cdot\left(-\frac{2i}{\hbar}\vec{p}_i\right) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\vec{p}_i}{m}$

∘ počet událostí .. tj částic nalezených v úhlu $d\Omega$ za 1 čas

$$\int w_{i\to f}\, d\Omega = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle p_f|V|p_i\rangle|^2 \cdot d\Omega \cdot m p_i$$

$$= \underbrace{(2\pi)^4 \hbar^2 m^2 |\langle p_f|V|p_i\rangle|^2}_{\frac{d\sigma}{d\Omega}} \frac{p_i}{m\,(2\pi\hbar)^3}\, d\Omega$$

připomeňme z minulého semestru:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 = |\underbrace{-(2\pi)^2\hbar m \langle p_f|V|\psi\rangle}_{f \,\equiv\, -(2\pi)^2\hbar m \langle p_f|T|p_i\rangle}|^2$$

kde $|\psi\rangle \equiv |\psi^+\rangle = |p_i\rangle + G_0 V|\psi^+\rangle \underset{B.4.}{\doteq} |p_i\rangle$

~~[illegible]~~ (Auto-) korelační funkce

T14

moderní časově závislé metody:

- numerické řešení evoluce vln-balíku (klubka)
- rekonstrukce fyzikálních (bezčas.) veličin pomocí FFT
  (linearita)
- nebo přímo čas. vývoj. → pump & probe experiment
- aplikace na rozptyl / reakční dynamiku

testovací balík

Def: Autokorelační funkce: $c_\psi(t) \equiv \langle\psi(0)|\psi(t)\rangle$

(kross) korelační funkce $c_{\phi,\psi}(t) \equiv \langle\phi(0)|\psi(t)\rangle$

souvislosti: • pravděpodobnosti přechodu .. $P_{i\to n}(t) = \ldots = |\langle\phi_i|\phi_n(t)\rangle|^2$

spec případy volby ψ

• Greenovy operátory (funkce)

$$G(x,t,x',t') = \langle x|\underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')}}_{i\hbar\theta(t-t')}|x'\rangle = i\hbar\langle x|x'(\tau)\rangle$$

$$\tau \equiv t-t' > 0$$

Souvislost Autokorel. fce a spektra H:

def $\sigma(\omega) \equiv \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle e^{i\omega t}dt$ ... F.T. autokor. fce

předp. diskrétní spektrum: $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n|\phi_n\rangle$

$$\to \sigma(\omega) = \frac{1}{2\pi}\sum_n |c_n|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}e^{i\omega t}dt = \sum_n |c_n|^2\delta(\omega-\omega_n)$$

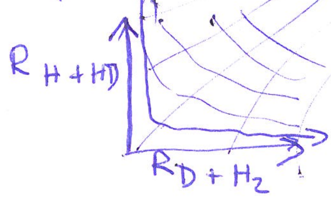
vl. fce: $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(t)\rangle e^{i\omega t}dt = \sum_n c_n|\psi_n\rangle\int e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}e^{i\omega t}dt$

$$= 2\pi\hbar\sum_n c_n|\psi_n\rangle\delta(E_n-E) \qquad E=\hbar\omega$$

.. stačí propagovat Gauss-balík (dost široký) dost dlouho, $\sigma(E) \to$ spektrum

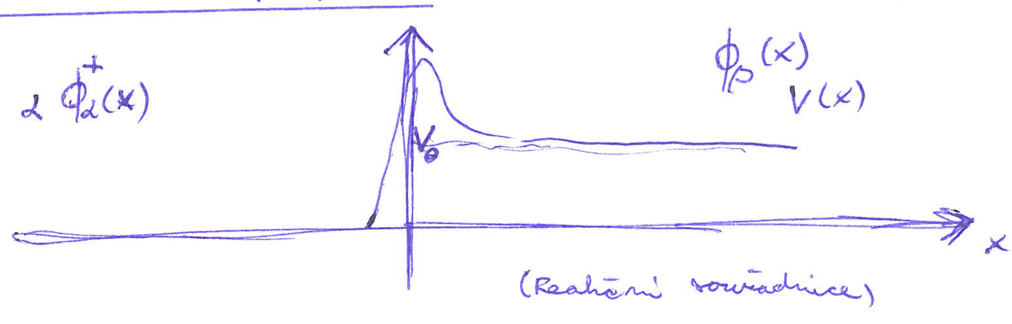
F.T. $|\psi(t)\rangle \to$ vl. fce

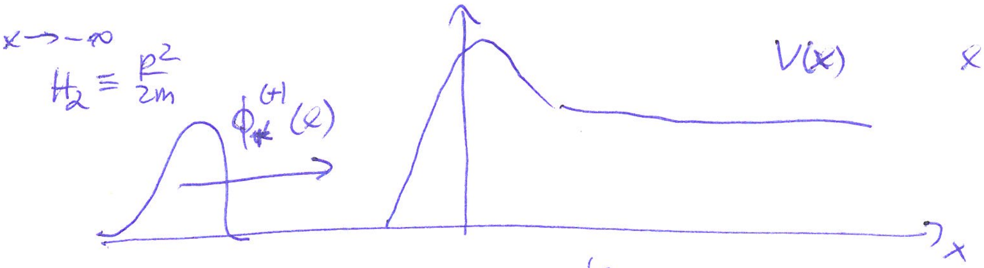
Motivace:



Souvislost s rozptylem

model:





~~...~~ def volný H pro kanály α a β

→ nenorm. norm. vl. stavy $H_\alpha |\phi^\pm_\alpha(E)\rangle = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} |\phi^\pm_\alpha(E)\rangle \qquad E \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$H_\beta |\phi^\pm_\beta(E)\rangle = E\, |\phi^\pm_\beta(E)\rangle \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V_0$$

tj $\langle x|\phi^\pm_\alpha(E)\rangle = \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2 k}}\, e^{\pm ikx}$ ... normování $\langle \phi^+_\alpha(E')|\phi^+_\alpha(E)\rangle = \delta(E-E')$

Experiment ... pouštíme vln. balík ~~s~~ hledané energii:

$$|\phi^+_\alpha\rangle \equiv \phi^+_\alpha(x) = \int_0^\infty \eta_\alpha(E) \langle x|\phi^+_\alpha(E)\rangle dE \quad \text{... podob. kanál } \beta \text{ ... } \eta_\beta(E)$$

měříme

$$|\phi^-_\alpha\rangle \equiv \phi^-_\alpha(x) = \int_0^\infty \eta_\alpha(E) \langle x|\phi^-_\alpha(E)\rangle dE$$

Potom platí: $S_{\alpha\beta}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar\, \eta^*_\beta(E) \eta_\alpha(E)} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \langle \phi^-_\beta| e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\phi^+_\alpha\rangle}_{C_{\beta\alpha}(t)} e^{\frac{i}{\hbar}Et} dt$

kde ϕ_α lokalizováno $H|\phi_\alpha\rangle = H_\alpha|\phi_\alpha\rangle$ a podob. $|\phi_\beta\rangle$

kde $S_{\alpha\beta}$ je S-matice pro rozptyl, tj $R = |S_{\alpha\alpha}|^2$; $T = |S_{\alpha\beta}|^2$

ODRAZ PRŮCHOD

DK: ~~a def...~~

v teorii rozptylu jsme definovali $|\psi+\rangle \equiv \Omega^+ |\phi\rangle_{H_\alpha}$

řešení, která $t \to -\infty$ $\quad |\psi^{(+)}(t)\rangle - |\phi(t)\rangle = 0$

~~...~~ volba ϕ_α tak aby) platilo v $t=0$

~~tj ...~~

tj : $|\phi^{(+)}_\alpha\rangle = \Omega^+_\alpha |\phi^{(+)}_\alpha\rangle = \lim_{t\to-\infty} e^{+\frac{i}{\hbar}Ht} e^{-\frac{i}{\hbar}H_\alpha t} |\phi^{(+)}_\alpha\rangle = \int dE\, \eta_\alpha(E) |\psi^{(+)}_\alpha(E)\rangle$

plné řeš L-S rovnice

~~tj ...~~ $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\phi^+_\alpha\rangle e^{i\omega t} dt = 2\pi\hbar\, \eta_\alpha(E) |\psi^{(+)}_\alpha(E)\rangle$

nyní je možné psát spočíst S-matici

$$(*) = \langle \psi^{(-)}_\beta(E')|\psi^{(+)}_\alpha(E)\rangle \equiv S_{\beta\alpha}(E)\, \delta(E-E')$$

$$(\circledast)\quad \frac{1}{(2\pi\hbar)^2 \eta_\alpha(E)\mu^*_\beta(E')} \int dt \int dt'\, e^{-i\omega' t'} \langle \phi^{(-)}_\beta | e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t')} | \phi^{(+)}_\alpha \rangle e^{i\omega t}$$

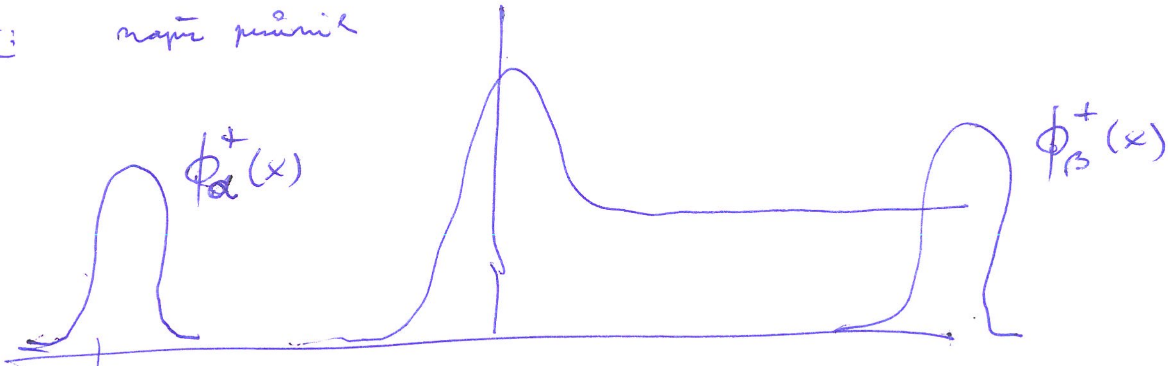
$$+ \text{ substituce} \quad t = \frac{T+\tau}{2} \quad t' = \frac{T-\tau}{2} \quad .. \quad |J| = \frac{1}{2}$$

$$e^{-i\omega' t' + i\omega t} = e^{i\frac{T}{2}(\omega-\omega')} e^{i\frac{\tau}{2}(\omega+\omega')}$$

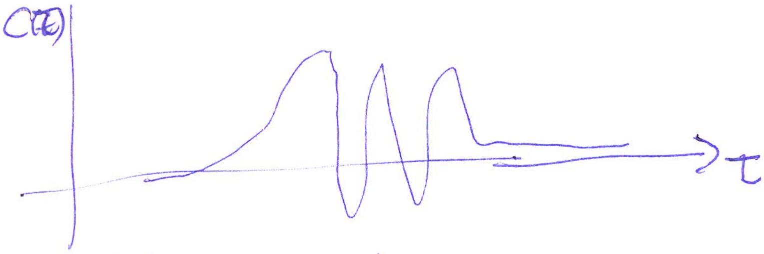
$$\int dT \longrightarrow 2\pi\hbar \cdot 2\, \delta(E-E')$$

$$(\circledast) = \frac{\delta(E-E')}{2\pi\hbar\, \eta_\alpha(E)\mu^*_\beta(E)} \int d\tau \langle \phi^{(-)}_\beta | e^{-\frac{i}{\hbar}H\tau} | \phi^{(+)}_\alpha \rangle e^{i\omega\tau} \qquad \text{c.b.d.}$$

<u>Závěr:</u> např. průnik



čas závislost



podob po odraz
($\phi^+_\alpha(x)$ a $\phi^-_\alpha(x)$ jsou
rovniž 06 což je viděl v hyln. neprez.)

<u>Stručněji:</u> $|\phi^+_\alpha\rangle \overset{t\to-\infty}{=} \int_0^\infty \eta_\alpha(E)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et_0} |E\alpha\rangle\, dE$ .. v oblasti kde $V=0$

$$e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\phi^+_\alpha\rangle = \int_0^\infty \eta_\alpha(E)\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et} |\psi^{(+)}_{E\alpha}\rangle\, dE \quad \text{v obl. kde } H \neq 0$$

podob. $|\phi^-_\beta\rangle \overset{t\to+\infty}{=} \int_0^\infty \mu_\beta(E) |E\beta\rangle\, dE = \int_0^\infty \mu_\beta(E) |\psi^{(-)}_{E\beta}\rangle\, dE$ $\quad t=0$

$$\Rightarrow \langle \phi^-_\beta | e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} | \phi^+_\alpha \rangle \equiv C_{\beta\alpha}(t) = \iint dE\, dE'\, \mu^*_\beta(E')\eta_\alpha(E) \underbrace{\langle \psi^{(-)}_{E'\beta} | \psi^{(+)}_{E\alpha} \rangle}_{S_{\beta\alpha}(E)\,\delta(E-E')} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

$\Rightarrow$ inverzním Fourièrem:

$$S_{\beta\alpha}(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \frac{1}{\mu^*_\beta(E)\eta_\alpha(E)} \int dt \langle \phi^-_\beta | e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} | \phi^+_\alpha \rangle e^{\frac{i}{\hbar}Et}$$

Adiabatická aproximace I.

(jiný typ. approx. ... není poruch. počet)

Předp.: $H(R(t))$ ... $R(t)$ pomalu se měnící paramet. v H
magn. El. pole přís. na spiny

přesný čas. vývoj $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H(R(t))|\psi(t)\rangle$

.. def okamžitou bázi $H(R)|n(R)\rangle = E_n(R)|n(R)\rangle$

čekali bychom, že systém připravený ve stavu $|\psi(0)\rangle = |n(R(0))\rangle$ zůstane ve stavu $|n(R(0))\rangle$ až na fázi:

$$(*) \quad |\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)\, e^{i\alpha_n(t)} |n(R(t))\rangle \quad ; \quad \alpha_n(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(R(t'))\,dt'$$

~~[illegible]~~ tj. že a_n budou konstanty.

jak odhadnout chybu? v daném čase t_0 napíšeme

$$H = H_0 + V \equiv H(R(t_0)) + (t-t_0)\,\dot H(t_0)$$

rozvoj (*) pro ~~[illegible]~~ odpovídá poruch. rozvoji pokud $= E_n(R(t_0))$

korekce 1. řádu: $a_m^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} (t-t_0)\langle m|\dot H|n\rangle e^{i\omega_{mn}(t-t_0)}\,dt$

$$= -\frac{i}{\hbar}\langle m|\dot H|n\rangle \int_{t_0}^{t} (t-t_0)\, e^{i\omega_{mn}(t-t_0)}\,dt$$

$$= -\frac{i}{\hbar}\langle m|\dot H|n\rangle \left[\frac{i\omega_{mn}(t-t_0)\, e^{i\omega_{mn}(t-t_0)} - e^{i\omega_{mn}(t-t_0)}}{-\omega_{mn}^2}\right]_{t_0}^{t}$$

nejv. řád

$$= -\frac{i\hbar\langle m|\dot H|n\rangle}{(E_m-E_n)^2}\left[e^{\frac{i}{\hbar}(E_m-E_n)\tau} - 1\right] \simeq -\frac{i\hbar\langle m|\dot H|n\rangle}{E_m-E_n}\,\frac{i}{\hbar}\tau$$

tj. malé pokud ~~[illegible]~~ $\langle m|\dot H|n\rangle$ se málo mění na čas. škále $\frac{\hbar}{|E_m-E_n|}$

.. selže pokud $E_m \simeq E_n$

→ rozpad diskr. stavu do kontinua

.. křížení hladin atd.