

## TILLEGG 14

## 14 Tidsavhengig perturbasjonsteori

(Avsnittene 11.1–2 i Hemmer, 9.1–3 i B&amp;J, 9.1 i Griffiths)

## 14.1 Innledning

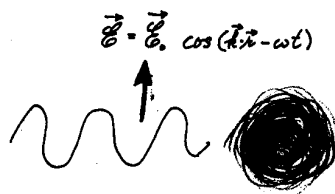
For å illustrere hva tidsavhengig perturbasjonsteori går ut på kan vi som et eksempel betrakte et hydrogenatom. Dersom vi neglisjerer alle vekselvirkninger unntatt Coulombvekselvirkningen mellom elektronet og protonet, beskrives dette systemet av Hamiltonoperatoren

$$\widehat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

med de velkjente energieigenfunksjonene og stasjonære løsningene gitt ved henholdsvis

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad \text{og} \quad \Psi_{nlm}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \psi_{nlm}(\mathbf{r})e^{-iE_{nl}t/\hbar},$$

som svarer til bundne tilstander. Mindre kjent for oss er de *ubundne* tilstandene for elektron-proton-systemet (for  $E \geq 0$ ), som beskrives av  $\psi_{Elm}(\mathbf{r})$  og  $\Psi_{Elm}^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \psi_{Elm}(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar)$ .



Anta nå at vi utsetter dette atomet for en elektromagnetisk bølge. Elektronet (og protonet) påvirkes da av oscillerende elektriske (og i prinsippet også magnetiske) krefter, som svarer til et tidsavhengig potensialledd  $\widehat{V}(t)$  som må adderes til  $\widehat{H}_0$  og leder til Hamiltonoperatoren

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}(t).$$

For en slik tidsavhengig Hamilton-operator eksisterer det (som vi har sett tidligere) ingen stasjonære løsninger, og det er faktisk heller ikke mulig å finne eksakte løsninger av Schrödingerligningen for et slikt tilfelle. Vi må derfor nøye oss med *tilnærmede* løsninger, og her er det at tidsavhengig perturbasjonsteori kommer inn i bildet. I denne teorien (eller regnemethoden) betrakter vi  $\widehat{V}(t)$  som en perturbasjon (forstyrrelse), og målet vårt er selvsagt å finne ut hvordan denne forstyrrelsen påvirker systemet vårt.

Med den forenklete notasjonen <sup>1</sup>

$$\Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t) = \psi_k(\mathbf{r})e^{-iE_k t/\hbar}, \quad i\hbar \frac{\partial \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \widehat{H}_0 \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t) \quad (\text{T14.1})$$

for de “uperturberte” stasjonære løsningene kan vi merke oss at disse *ikke* oppfyller Schrödingerligningen for det perturberte systemet,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\widehat{H}_0 + \widehat{V}(t)]\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (\text{T14.2})$$

Disse uperturberte løsningene viser seg likevel å være svært nyttige. For det første har vi friheten til å preparere systemet i en av disse uperturberte løsningene ved  $t = 0$ :

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = \Psi_i^{(0)}(\mathbf{r}, 0) = \psi_i(\mathbf{r}). \quad (\text{T14.3})$$

Her står  $i$  for *initial*. Initial-tilstanden eller begynnelsestilstanden kan f.eks være den uperturberte grunntilstanden,  $\psi_{100}$ . For det andre danner det uperturberte løsningssettet (T14.1) et fullstendig sett (en basis), og det viser seg hensiktsmessig å skrive den ukjente løsningen av (T14.2) som en utvikling i det uperturberte settet:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_k a_k(t) \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t) = a_i(t) \Psi_i^{(0)}(\mathbf{r}, t) + \sum_{k \neq i} a_k(t) \Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t). \quad (\text{T14.4})$$

Her er det nå et viktig poeng at utviklingskoeffisientene  $a_k$  ikke kan være tidsuavhengige (på tross av at funksjonen  $\Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t)$  inneholder faktoren  $\exp(-iE_k t/\hbar)$ ). Dette innser vi slik:

Med begynnelsestilstanden  $\Psi(\mathbf{r}, 0) = \psi_i(\mathbf{r})$  starter vi opp ved  $t = 0$  med koeffisienten  $a_i(0) = 1$ , mens alle de øvrige koeffisientene er lik null. Vi innser imidlertid raskt at systemet ikke kan forbli i den uperturberte begynnelsestilstanden  $\Psi_i^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ . Som understreket ovenfor er denne nemlig ikke en løsning av den perturberte Schrödingerligningen  $i\hbar \partial \Psi(\mathbf{r}, t) / \partial t = \widehat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$ . Følgelig må koeffisienten  $a_i(t)$  (som er sannsynlighetsamplituden for å finne systemet i begynnelsestilstanden  $\Psi_i^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ ) begynne å avta fra 1, mens noen av de øvrige koeffisientene (amplitudene) må begynne å endre seg fra null. Vi husker at  $|a_k(t)|^2$  er sannsynligheten for å måle energien  $E_k$  og etterlate systemet i den tilsvarende tilstanden, eller — for å si det litt upresist — sannsynligheten for å “finne” systemet i egentilstanden  $\Psi_k^{(0)}$  til  $\widehat{H}_0$ . Derfor er kvadratene  $|a_k(t)|^2$  **overgangs-sannsynlighetene** for  $k \neq i$ ; det er en viss sannsynlighet for at atomet, som ved  $t = 0$  var preparert i f.eks grunntilstanden, ved tiden  $t$  vil bli “funnet” i eksiterte tilstander. (Merk at  $\sum_k |a_k(t)|^2 = 1$ .) Å finne slike overgangs-sannsynligheter er ofte den sentrale oppgaven når en skal bruke kvantemekanisk teori for å beskrive fysiske prosesser der noe *skjer*.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Indeksen <sup>(0)</sup> skal minne oss om at dette er løsninger for den uperturberte Hamilton-operatoren  $\widehat{H}_0$ . For energieigenverdiene  $E_k$  og energieigenfunksjonene  $\psi_k(\mathbf{r})$  dropper vi denne indeksen; husk at for det perturberte systemet eksisterer det ikke hverken energieigenverdier eller -egenfunksjoner.

<sup>2</sup>For å kunne tolke koeffisienten  $a_k(t)$  som sannsynlighetsamplituden for å måle energien  $E_k$  og etterlate systemet i den tilsvarende tilstanden  $\Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t)$ , burde vi strengt tatt “skru av” perturbasjonen rett før målingen ved tiden  $t$ . Ifølge målepostulatet vil da energien  $E_k$  og tilstanden  $\Psi_k^{(0)}(\mathbf{r}, t)$  være et mulig resultat av målingen. Tilsvarende kan vi tenke oss at prepareringen i den uperturberte begynnelsestilstanden  $\psi_i$  gjøres umiddelbart *før* perturbasjonen “skrur på” ved  $t = 0$ . Med et slikt opplegg kan vi virkelig snakke om **overganger mellom stasjonære tilstander**, som er en vanlig uttrykksmåte i tidsavhengig perturbasjonsteori. Merk ellers at overganger mellom tilstander med forskjellig energi er helt akseptabelt. Den tidsavhengige perturbasjonen innebærer at vi har et ikke-konservativt system; energien til hydrogenatomet kan godt endre seg når det utsettes for en tidsavhengig ytre kraft.

## 14.2 Formulering av tidsavhengig perturbasjonsteori

Vi ønsker å løse Schrödingerligningen (T14.2), eller mer generelt ligningen

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = (\widehat{H}_0 + \widehat{V}(t)) |\Psi(t)\rangle, \quad (\text{T14.5})$$

hvor vi antar at  $\widehat{H}_0$  er tidsuavhengig, med et fullstendig sett av ortonormerte egentilstander

$$|\Psi_n^{(0)}(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |\psi_n\rangle \quad (\langle \mathbf{r} | \Psi_n^{(0)}(t)\rangle = \Psi_n^{(0)}(\mathbf{r}, t)). \quad (\text{T14.6})$$

Disse antar vi er kjente. I tråd med diskusjonen ovenfor utvikler vi nå den ukjente løsningen av (T14.5) slik:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t) |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle. \quad (\text{T14.7})$$

Dette er Hilbert-rom-utgaven av (T14.4). Merk at utviklingskoeffisienten

$$a_n(t) = \langle \Psi_n^{(0)}(t) | \Psi(t) \rangle \quad (\text{T14.8})$$

er amplituden for å finne systemet i den uperturberte tilstanden  $|\Psi_n^{(0)}\rangle$  ved tiden  $t$ , og at  $|a_n(t)|^2$  er den tilsvarende sannsynligheten. Siden  $\widehat{V}(t)$  og dermed  $\widehat{H}$  er Hermiteske, vet vi at  $|\Psi(t)\rangle$  forblir normert for alle  $t$ , slik at

$$\sum_n |a_n(t)|^2 = 1, \quad (\text{T14.9})$$

selv om hver enkelt sannsynlighet  $|a_n(t)|^2$  vil endre seg med tiden. Denne tidsavhengigheten (som det er målet vårt å finne) bestemmes selvsagt av Schrödingerligningen (T14.5). Ved innsetting av utviklingen (T14.7) finner vi at

$$\sum_n \left( i\hbar \frac{da_n}{dt} |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle + a_n \underbrace{i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle}_{E_n |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle} \right) = \sum_n a_n \left( \underbrace{\widehat{H}_0 |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle}_{E_n |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle} + \widehat{V}(t) |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle \right).$$

Her legger vi merke til at ledd nr 2 på venstresiden kansellerer mot det første leddet på høyresiden, fordi

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle = \widehat{H}_0 |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle = E_n |\Psi_n^{(0)}(t)\rangle.$$

Multiplikasjon fra venstre med  $\langle \Psi_k^{(0)}(t) |$  og bruk av ortonormeringsrelasjonen

$$\langle \Psi_k^{(0)}(t) | \Psi_n^{(0)}(t) \rangle = \langle \psi_k | \psi_n \rangle = \delta_{kn} \quad (\text{T14.10})$$

gir da et sett av første-ordens differensialligninger for amplitudene:

$$i\hbar \frac{da_k(t)}{dt} = \sum_n \langle \Psi_k^{(0)}(t) | \widehat{V}(t) | \Psi_n^{(0)}(t) \rangle a_n(t), \quad (\text{T14.11})$$

eller

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_k(t) = \sum_n e^{i\omega_{kn}t} V_{kn}(t) a_n(t). \quad (\text{T14.12})$$

Her har vi innført notasjonen

$$\begin{aligned} V_{kn}(t) &\equiv \langle \psi_k | \widehat{V}(t) | \psi_n \rangle \equiv \int \psi_k^*(\mathbf{r}) \widehat{V}(\mathbf{r}, t) \psi_n(\mathbf{r}) d^3r, \quad \text{og} \\ \omega_{kn} &\equiv (E_k - E_n)/\hbar, \end{aligned} \quad (\text{T14.13})$$

som kalles henholdsvis et **matrise-element** av perturbasjonen og en **Bohr-frekvens**.

Merk at det koblede settet (T14.12) av differensialligninger kan skrives på matrisform, om en vil:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}e^{i\omega_{12}t} & \dots \\ V_{21}e^{-i\omega_{12}t} & V_{22} & \\ \vdots & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1(t) \\ a_2(t) \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (\text{T14.14})$$

Dette koblede ligningssettet, på formen (T14.12) eller (T14.14), er fullstendig ekvivalent med Schrödingerligningen; vi har ikke gjort noen tilnærmelser ennå.

Legg merke til at tidsavhengigheten til koeffisientene  $a_k(t)$  avhenger bare av perturbasjonen. Dersom perturbasjonsleddet  $\widehat{V}(t)$  settes lik null, så “hender det ingen ting”; koeffisientene  $a_k(t)$  beholder da de verdiene de hadde ved  $t = 0$ . Dersom vi f.eks hadde  $a_k(0) = \delta_{ki}$ , så blir  $a_k(t) = \delta_{ki}$ , dvs atomet forblir i den opprinnelige tilstanden  $|\Psi_i^{(0)}(t)\rangle$ .

### Tidsavhengig perturbasjonsteori

I tidsavhengig perturbasjonsteori antar vi at perturbasjonen  $\widehat{V}(t)$  er *svak*, slik at koeffisientene  $a_k(t)$  bare endrer seg sakte fra de verdiene de hadde ved  $t = 0$ . Vi antar videre at systemet ble preparert i den uperturberte tilstanden  $|\psi_i\rangle$  ved  $t = 0$ , slik at  $a_k(0) = \delta_{ki}$ . Som en første tilnærming kan vi da på høyresiden av (T14.12) erstatte  $a_n(t)$  med  $a_n(0) = \delta_{ni}$ . For tilstrekkelig små  $t$  og/eller tilstrekkelig svake perturbasjoner har vi da følgende tilnærming:

$$i\hbar \frac{da_k(t)}{dt} \approx \sum_n e^{i\omega_{kn}t} V_{ni}(t) \delta_{ni} = e^{i\omega_{ki}t} V_{ki}(t).$$

I denne tilnærmelsen er altså amplituden for å finne systemet i uperturbert tilstand nr  $f$  ( $f$  for “final”) ved tiden  $t$  gitt ved formelen

$$a_f(t) \approx \delta_{fi} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi}(t') dt'. \quad (\text{T14.15})$$

For  $f \neq i$  er dette en overgangsamplitude ( $a_f \equiv a_{i \rightarrow f}$ ). Vi merker oss at denne amplituden er “av første orden i perturbasjonen  $\widehat{V}$ ”. (Med dette mener vi at integralet inneholder bare én potens av  $\widehat{V}$ .)

Dette betyr at overgangs-sannsynligheten er av andre orden i  $\widehat{V}$ . Fra ligning (T14.9) ser vi da at sannsynligheten for å finne systemet i den opprinnelige tilstanden er

$$|a_i(t)|^2 = 1 - \sum_{f \neq i} |a_{f \neq i}(t)|^2 = 1 - \mathcal{O}(\widehat{V}^2), \quad (\text{T14.16})$$

dvs avviker fra 1 bare til andre orden i perturbasjonen.

### Detaljert balanse

Siden det perturberende leddet  $\widehat{V}(t)$  forutsettes å være Hermitesk, ser vi at matrise-elementet som inngår i amplituden (T14.15) for overgangen  $1 \rightarrow 2$  oppfyller relasjonen

$$V_{21}(t) \equiv \langle \psi_2 | \widehat{V}(t) | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \widehat{V}(t) | \psi_2 \rangle^* \equiv V_{12}^*(t). \quad (\text{T14.17})$$

For den ”reverserte” prosessen — overgang fra tilstand nummer 2 ved tiden  $t = 0$  til tilstand nummer 1 ved tiden  $t$  — følger det da fra (T14.15) at vi (til første orden i perturbasjonen) har

$$\begin{aligned} a_{2 \rightarrow 1}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{12}(t') e^{i\omega_{12}t'} dt' = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t V_{21}^*(t') e^{-i\omega_{21}t'} dt' \\ &= -a_{1 \rightarrow 2}^*(t). \quad (\text{for } \psi_2 \neq \psi_1) \end{aligned} \quad (\text{T14.18})$$

Ved å ta absoluttkvadratet på begge sider av denne ligningen finner vi altså (til 1. orden i perturbasjonen) at sannsynligheten for overgang fra tilstanden  $|\Psi_1(0)\rangle$  ved  $t = 0$  til tilstanden  $|\Psi_2(t)\rangle$  ved tiden  $t$  er den samme som for den reverserte overgangen. Denne likheten, som altså gjelder til første orden i perturbasjonen  $\widehat{V}(t)$ , er et eksempel på det såkalte **prinsippet om detaljert balanse**.

### Perturbasjonsutvikling

Det er lett å forbedre første-ordens-resultatet (T14.15): Ved å integrere (T14.12) har vi

$$a_k(t) = \delta_{ki} + \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_0^t dt' e^{i\omega_{kn}t'} V_{kn}(t') a_n(t'). \quad (\text{T14.19})$$

Ved å gjøre substitusjonene  $k \rightarrow n$  og  $t \rightarrow t'$  i denne formelen har vi videre at

$$a_n(t') = \delta_{ni} + \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{nm}t''} V_{nm}(t'') a_m(t''). \quad (\text{T14.20})$$

Ved å sette det siste uttrykket inn i (T14.19) finner vi at

$$\begin{aligned} a_k(t) &= \delta_{ki} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ki}t'} V_{ki}(t') \\ &\quad + \frac{1}{i\hbar} \sum_n \int_0^t dt' e^{i\omega_{kn}t'} V_{kn}(t') \cdot \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{nm}t''} V_{nm}(t'') a_m(t''). \end{aligned}$$

Denne iterasjonsprosedyren kan gjentas om ønskelig, eller vi kan bryte av iterasjonen ved å sette  $a_m(t'') \approx a_m(t'' = 0) = \delta_{mi}$ . Det siste gir

$$\begin{aligned} a_k(t) &= \delta_{ki} + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega_{ki}t'} V_{ki}(t') \\ &\quad + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^2 \sum_n \int_0^t dt' e^{i\omega_{kn}t'} V_{kn}(t') \int_0^{t'} dt'' e^{i\omega_{ni}t''} V_{ni}(t'') \\ &\quad + \mathcal{O}(\widehat{V}^3). \end{aligned} \quad (\text{T14.21})$$

I denne formelen tipper jeg at du uten nevneverdige problemer klarer å skrive ned det neste leddet ut fra systematikken i de første leddene.

### 14.3 Kvalitativ diskusjon

La oss prøve å forstå kvalitativt hva som skjer etter at vi har preparert systemet i begynnelsestilstanden  $|\psi_i\rangle$  ved  $t = 0$ . Som vi har sett ovenfor, vil det straks begynne å “lekke sannsynlighet” fra begynnelsestilstanden over i andre tilstander. Til å begynne med, for små  $t$ , er denne lekkasjen nokså moderat: Integralene i (T14.15) (for  $f \neq i$ ) er da små og svarer til overgangs-sannsynligheter  $|a_{f \neq i}(t)|^2$  som er mye mindre enn 1, slik at amplituden  $a_i(t)$  for å være i den opprinnelige tilstanden er nesten lik 1. Som vi skjønner av utledningen ovenfor er første-ordens-resultatet (T14.15) da en god tilnærming.

I dette kurset skal vi bare gjøre bruk av dette første-ordens-resultatet. Dette kan vi gjøre med god samvittighet så lenge perturbasjonen er tilstrekkelig svak, eller for tilstrekkelig små tider  $t$ .

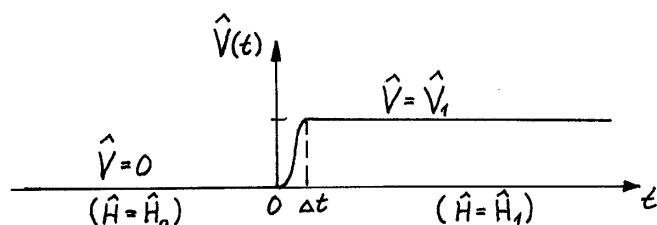
#### “Plutselige” endringer av Hamilton-operatoren

Vi skal nå prøve å skaffe oss litt mer innsikt ved å betrakte to ekstremtilfeller i tidsavhengig perturbasjonsteori, nemlig såkalte **plutselige** endringer av Hamilton-operatoren  $\widehat{H}(t)$ , og det motsatte tilfellet hvor endringen skjer veldig langsomt. Det siste kalles en **adiabatisk** endring.

I det første tilfellet skjer endringen av  $\widehat{H}(t)$ , fra  $\widehat{H}_0$  til  $\widehat{H}_1$ , veldig raskt, i løpet av et tidsintervall  $\Delta t$  som er mye kortere enn noen av de naturlige periodene for det systemet vi betrakter:

$$\Delta t \ll T_{fi} \equiv \frac{2\pi}{\omega_{fi}} = \frac{2\pi\hbar}{E_f - E_i}.$$

Dette er altså hva vi kaller en *plutselig* endring av  $\widehat{H}$  (på engelsk: sudden change):



Under den nevnte forutsetningen vil fasene  $e^{i\omega_{fi}t}$  i (T14.15) holde seg tilnærmet konstante under integrasjonen. Derfor blir overgangs-sannsynligheten ved tiden  $t_0 + \Delta t$  av størrelsesorden

$$|a_{i \rightarrow f}(t_0 + \Delta t)|^2 \sim \left| \frac{1}{\hbar} (V_1)_{fi} \Delta t \right|^2 \ll \left| \frac{2\pi (V_1)_{fi}}{E_f - E_i} \right|^2; \quad f \neq i. \quad (\text{T14.22})$$

Om vi antar at matrise-elementene  $(V_1)_{fi}$  ikke er mye større enn de typiske energiene for dette systemet, ser vi at disse overgangs-sannsynlighetene blir mye mindre enn 1. Dette betyr at “lekkasjen” til andre tilstander i løpet av tiden  $\Delta t$  er ubetydelig, og at sannsynligheten for å finne systemet i den opprinnelige tilstanden er praktisk talt lik 1:

$$|a_i(t_0 + \Delta t)| \approx a_i(t_0) = 1.$$

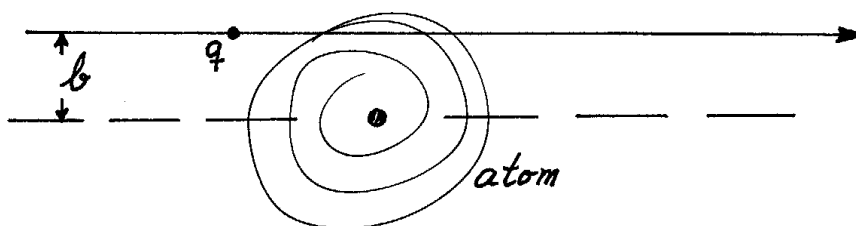
Dette kan vi uttrykke slik: Tilstandsvektoren  $|\Psi(t)\rangle$  og den tilsvarende bølgefunksjonen  $\Psi$  rekker ikke å “reagere umiddelbart” på den plutselige endringen av  $\widehat{H}$ .

Dette kan også forstås på en mer direkte måte: Når endringen av  $\widehat{H}(t)$ , fra  $\widehat{H}_0$  til  $\widehat{H}_1$ , skjer i løpet av tidsintervallet  $\Delta t$ , ser vi fra Schrödingerligningen at tilstandsvektoren endres med beløpet

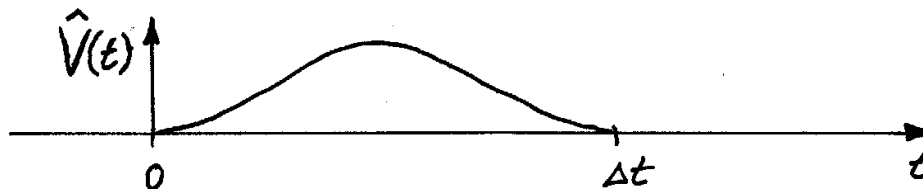
$$\Delta|\Psi(t)\rangle = \Delta t \cdot \frac{1}{i\hbar} \widehat{H}(t) |\Psi(t)\rangle$$

i løpet av dette tidsintervallet. Her ser vi direkte at  $|\Psi(t)\rangle$  blir essensielt uendret når  $\Delta t$  er tilstrekkelig liten.<sup>3</sup>

I denne diskusjonen har vi tenkt oss at endringen av  $\widehat{H}$  er permanent. Som et annet eksempel kan vi godt tenke oss en kort **transient** (forbigående) perturbasjon, hvor  $\widehat{V}(t)$  er en kort puls, slik at  $\widehat{H} = \widehat{H}_0$  både før  $t = 0$  og etter  $t = \Delta t$ . Som et eksempel på en slik pulsformet perturbasjon kan vi betrakte en tung ladet partikkel som f.eks et proton som “skytes” gjennom materie med en hastighet nær lyshastigheten  $c$ .



Et atomært elektron nær protonets bane vil da et kort øyeblikk oppleve en “Coulomb-puls” av veldig kort varighet,  $\Delta t \sim a_0/c \sim 10^{-19}$  s. Dette tidsintervallet er mye kortere enn de “naturlige periodene” til de ytre elektronene i atomet,  $T_{fi} = 2\pi/\omega_{fi} \sim 10^{-16}$  s.



Med matrise-elementer  $V_{fi}$  av størrelsesorden  $e^2/(4\pi\epsilon_0 a_0)$  finner vi da overgangs-sannsynligheter av størrelsesorden

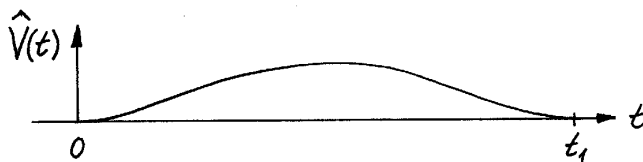
$$\begin{aligned} |a_{i \rightarrow f}|^2 &= \left| \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\Delta t} V_{fi}(t') dt' \right|^2 \sim \left| \frac{\Delta t \cdot V_{fi}}{\hbar} \right|^2 \\ &= \left| \frac{a_0/c}{\hbar} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \right|^2 = \alpha^2, \end{aligned}$$

hvor  $\alpha = e^2/(4\pi\epsilon_0 \hbar c) \approx 127.036^{-1}$  er finstrukturkonstanten. For hvert enkelt atom langs protonets bane er derfor sannsynligheten for eksitasjon (og medfølgende energitap for protonet) liten. Dette er viktig når en skal beregne hvor langt et slikt proton med en gitt utgangsenergi vil trenge inn i f.eks et fast stoff.

<sup>3</sup>Merk at det samme resonnementet kan brukes til å vise at bølgefunksjonen er en kontinuerlig funksjon av tiden.

### Adiabatiske endringer av $\hat{H}$

Den motsatte ytterligheten (i forhold til en plutselig endring) er et tilfelle hvor Hamiltonoperatoren endrer seg veldig *langsomt* i forhold til de naturlige periodene  $T_{fi}$  til systemet. Anta først at endringen er **transient**, som indikert i figuren.



Her er  $\hat{V}(t)$  lik null for  $t < 0$  og for  $t > t_1$ , hvor  $t_1 \gg T_{fi} = 2\pi/\omega_{fi}$ . Ifølge (T14.15) er da overgangsamplituden for  $t > t_1$  gitt ved

$$a_{f \neq i}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t_1} e^{i\omega_{fi}t'} V_{fi}(t') dt', \quad (t \geq t_1).$$

Her merker vi oss at  $V_{fi}(t')$  er en veldig langsomt-varierende funksjon sammenlignet med oscillasjonene til eksponensialfunksjonene

$$e^{i\omega_{fi}t'} = \cos(\omega_{fi}t') + i \sin(\omega_{fi}t')$$

(forutsatt at  $E_f \neq E_i$ ). På grunn av disse raske oscillasjonene vil bidragene til integralet ovenfor kansellere nesten fullstendig, slik at integralet blir veldig lite. For langsomme (adiabatiske) endringer av  $\hat{H}$  kan vi derfor konkludere med

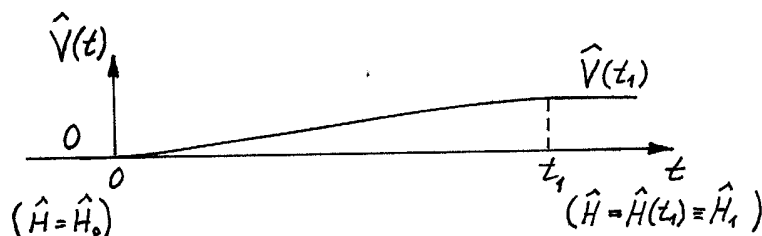
**Den adiabatiske tilnærmelsen:**

Overgangs-sannsynlighetene er neglisjerbare.

(T14.23)

Merk ellers at integralet ovenfor essensielt er Fourier-transformen av matriseelementet  $V_{fi}(t)$ , for frekvensen  $\omega_{fi}$ . Innslaget av slike "høyfrekvente" Fourier-komponenter i  $V_{fi}(t)$  er neglisjerbart; de *dominerende* Fourier-komponentene av  $V_{fi}$  har en for frekvenser i området  $\omega \sim 2\pi/t_1$  ( $\ll \omega_{fi}$ ).

En adiabatisk endring av  $\hat{H}$  behøver ikke å være transient (som i tilfellet ovenfor), men kan i stedet lede til en varig endring av  $\hat{H}$ , som indikert i den neste figuren.



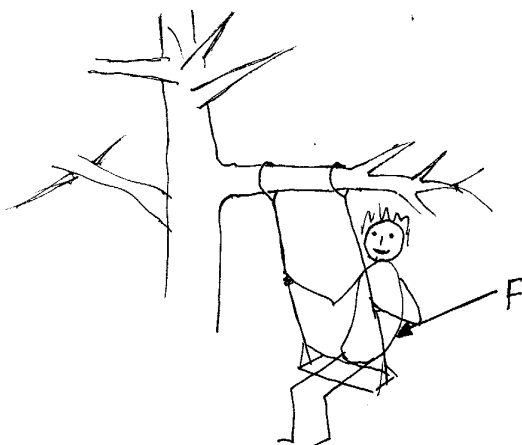
Det går an å vise at dersom systemet er i en gitt egentilstand til  $\hat{H}_0$  ved  $t = t_0$ , så vil det etter  $t = t_1$  være i den tilsvarende egentilstanden til  $\hat{H}_1$  (f.eks grunntilstanden), med overveiende sannsynlighet. (Klassisk analogi: En fiolinstring som er i den grunnharmoniske svingetilstanden, vil forbli i denne under adiabatisk stramming eller slakking av strengen).



### Når endringen av $V$ hverken er plutselig eller adiabatisk

får vi overganger. Et eksempel er når den tunge, ladete partikkelen, f.eks et proton, seiler forbi et atom med en hastighet av samme størrelsesorden som hastigheten til de atomære elektronene. Dette svarer til et perturbasjonsledd  $\hat{V}(t)$  med vesentlige Fourier-komponenter i samme frekvensområde som  $\omega_{fi}$ . Dette kan resultere i betydelige overgangsamplituder til eksiterte eller ioniserte tilstander, og vil da føre til at energitapet for hvert atom som passerer blir mye større enn for et proton med *høy* hastighet.

Halvklassisk kan vi si at det under disse forholdene er gode sjanser for at et atomært elektron får seg en Coulomb-”dult” som er kraftig nok og langvarig nok til å bringe det opp i et høyere energinivå (eksitert eller fritt).



Figuren viser en klassisk parallell som kan brukes til å illustrere de forskjellige tilfellene diskutert ovenfor: Når vi skal gi en av de håpefulle ekstra fart i ”huska”, vil en ”plutselig” (svært kortvarig) kraftpåvirkning hjelpe lite, unntatt når krafta er svært stor (lite populært). Det hjelper også lite med en svært langsomtvarierende kraft (adiabatisk), dvs når denne er så godt som konstant over flere egenperioder for huska. Dette vil bare gi en midlertidig forskyvning av likevektsposisjon og ekstremalposisjoner, men vil ikke endre energien nevneverdig. Skyver vi derimot på i f.eks en halv periode, med en kraft av samme størrelsesorden som de øvrige kreftene i systemet, så monner det!

## 14.4 Harmonisk perturbasjon

En annen måte å få opp farta på er å bruke en periodisk varierende kraft, f.eks harmonisk,  $F = F_0 \cos \omega t$ . Her vet vi fra mekanikken, og kanskje også fra praktiske erfaringer med ”huska”, at *dersom vi velger en eksitasjonsfrekvens  $\omega$  like i nærheten av egenfrekvensen til huska*, så kan energien øke eller minke betydelig, avhengig av om krafta virker i fase eller i motfase med bevegelsen. Dette gjelder selv om krafta  $F_0$  er svak, bare den får virke over mange perioder. Trykker vi derimot på med en eksitasjonsfrekvens  $\omega$  som ligger et langt stykke unna egenfrekvensen for huska, så blir virkningen liten. (Jf tvungne svingninger og resonans. Husk også at det var nettopp slike periodiske perturbasjoner du brukte når du *på egen hånd* økte eller minket farta i huska).

Et tilsvarende **resonans-fenomen** opptrer også i kvantemekanikken, hvor **harmoniske perturbasjoner** spiller en viktig rolle. Vi antar en perturbasjon på formen

$$\hat{V}(\mathbf{r}, t) = \hat{V}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \hat{V}^\dagger(\mathbf{r})e^{i\omega t}. \quad (\text{T14.24})$$

(Som et eksempel kan vi tenke på en elektromagnetisk bølge  $\mathcal{E} = \hat{e}_z \mathcal{E}_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$  som faller inn mot hydrogenatomet. Vekselvirkningsleddet er da tilnærmet gitt ved  $\hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} e \mathcal{E}_0 z \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ .<sup>4</sup> Med

$$\langle \psi_f | \hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}) | \psi_i \rangle \equiv \mathcal{V}_{fi} \quad \text{og} \quad (\text{T14.25})$$

$$\langle \psi_f | \hat{\mathcal{V}}^\dagger(\mathbf{r}) | \psi_i \rangle = \langle \psi_i | \hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}) | \psi_f \rangle^* = \mathcal{V}_{if}^*, \quad (\text{T14.26})$$

blir da matrise-elementet  $V_{fi}(t)$  som opptrer i overgangsamplituden (T14.15)

$$V_{fi}(t) = \langle \psi_f | \hat{V}(\mathbf{r}, t) | \psi_i \rangle = \mathcal{V}_{fi} e^{-i\omega t} + \mathcal{V}_{if}^* e^{i\omega t}. \quad (\text{T14.27})$$

Her er størrelsene  $\mathcal{V}_{fi}$  tidsuavhengige. Dermed er overgangsamplituden (for  $f \neq i$ ) til første orden gitt ved to enkle integraler over oscillerende eksponensialfunksjoner:

$$a_{i \rightarrow f}(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{fi} \int_0^t e^{i(\omega_{fi} - \omega)t'} dt' + \frac{1}{i\hbar} \mathcal{V}_{if}^* \int_0^t e^{i(\omega_{fi} + \omega)t'} dt' \quad (\text{T14.28})$$

$$= \mathcal{V}_{fi} \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} - \omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} - \omega)} + \mathcal{V}_{if}^* \frac{1 - e^{i(\omega_{fi} + \omega)t}}{\hbar(\omega_{fi} + \omega)}. \quad (\text{T14.29})$$

**En liten oppgave:** Vis at denne overgangsamplituden oppfyller prinsippet om detaljert balanse,

$$a_{f \rightarrow i}(t) = -a_{i \rightarrow f}^*(t),$$

slik at overgangs-sannsynligheten ved tiden  $t$  for prosessen  $i \rightarrow f$  er den samme som for den reverserte prosessen  $f \rightarrow i$ . Hint: Husk at  $\omega_{fi} \equiv \omega_f - \omega_i = -\omega_{if}$ .

Her kan vi nå konkret tenke på en overgang fra hydrogenatomets grunntilstand ( $\psi_1$ ) til en av tilstandene for første eksiterte nivå ( $\psi_2$ ). Eksitasjonsenergien er da  $E_f - E_i = E_2 - E_1 = 10.2 \text{ eV}$ , og svarer til en Bohr-frekvens  $\omega_{fi} = (E_2 - E_1)/\hbar = 10.2 \text{ eV}/(6.58 \cdot 10^{-16} \text{ eVs}) = 1.55 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$ .

Det viser seg at størrelsesorden av matrise-elementet  $\mathcal{V}_{fi}$  er omtrent som vi kan gjette oss til ut fra analogien med huska, nemlig produktet av felt-kraften  $e\mathcal{E}_0$  på elektronet og atomradien  $a_0$ :  $\mathcal{V}_{fi} \sim e\mathcal{E}_0 a_0$ . Dette energibeløpet er i praksis mye mindre enn  $\hbar\omega_{fi} = \hbar\omega_{21} = E_2 - E_1$ . Fra uttrykket ovenfor for overgangsamplituden ser vi da at denne blir svært liten, unntatt når nevneren  $\hbar(\omega_{fi} - \omega)$  i det første leddet er liten, dvs unntatt når

$$\omega \approx \omega_{fi} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}. \quad (\text{T14.30})$$

Dette er den **kvantemekaniske resonansbetingelsen** for det tilfellet vi betrakter. Merk analogien med huska: Krafta er svak, men når vi eksiterer i takt med egenfrekvensen  $\omega_{fi}$ , kan overgangsamplituden likevel bli betydelig. Merk også at i dette tilfellet er det siste leddet i formelen ovenfor aldri stort, fordi nevneren  $\omega_{fi} + \omega > \omega_{fi}$  ikke er liten for noen verdi av  $\omega$  ( $\omega$  er positiv).

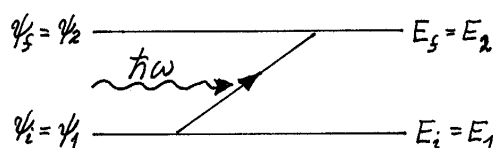
<sup>4</sup>Fordi elektronet er i bevegelse vil det også utsettes for en magnetisk kraft  $-e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ , men siden utsvinget til bølgens  $\mathbf{B}$ -felt er en faktor  $c$  mindre enn for  $\mathcal{E}$ -feltet, vil forholdet mellom den magnetiske kraften og den elektriske gå som  $v/c$ , som for elektronet i hydrogenatomet er av størrelsesorden lik finstrukturkonstanten.

La oss også snu dette eksemplet rundt og betrakte den reverserte prosessen, med en overgang fra tilstanden i første eksiterte nivå ( $\psi_2$ ) til grunntilstanden  $\psi_1$ . Da er Bohr-frekvensen  $\omega_{fi} = \omega_{12} = (E_1 - E_2)/\hbar$  negativ, og for dette tilfellet ser vi at det er bare det siste leddet i (T14.29) som kan bli stort; dette skjer når resonansbetingelsen

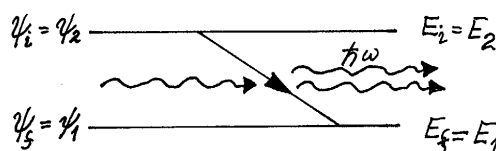
$$\omega \approx -\omega_{fi} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (\text{T14.31})$$

er oppfylt.

I disse eksemplene er det den elektromagnetiske bølgen som gir den harmoniske perturbasjonen med frekvens  $\omega$ . Når resonansbetingelsen er oppfylt,  $\hbar\omega \approx E_2 - E_1$ , ser vi at overgangen fra  $\psi_1$  til  $\psi_2$  svarer til **absorpsjon** av energien  $\hbar\omega$  fra bølgen:



I den reverserte prosessen har vi **stimulert emisjon** av det samme beløpet.<sup>5</sup>



Overgangs-sannsynlighetene for disse prosessene avhenger kritisk av hvor godt resonansbetingelsen er oppfylt, dvs av hvor mye  $\hbar\omega$  avviker fra  $E_2 - E_1$ . Ifølge den lille oppgaven på forrige side er disse sannsynlighetene like store, så vi kan nøye oss med å regne på absorpsjonstilfellet. Da er den første nevneren i (T14.29) identisk med “energi-avviket”, som vi for enkelthets skyld kaller  $\epsilon$ :

$$\hbar(\omega_{fi} - \omega) = E_f - E_i - \hbar\omega = E_2 - E_1 - \hbar\omega \equiv \epsilon.$$

For absorpsjonstilfellet har vi da for overgangs-sannsynligheten

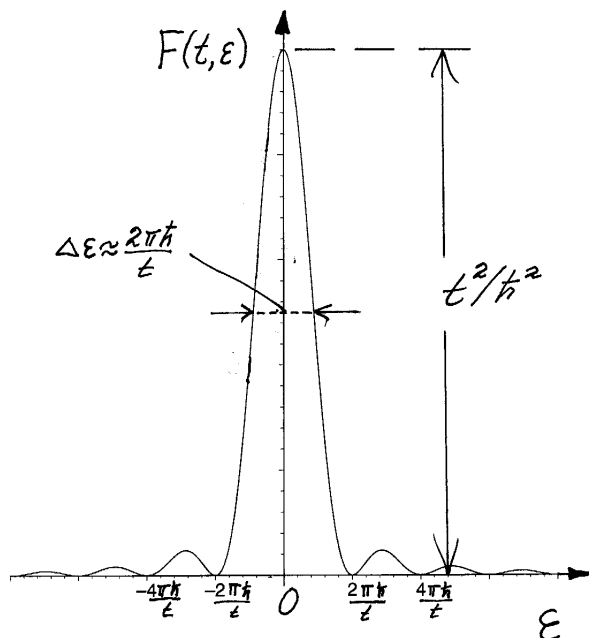
$$|a_{i \rightarrow f}(t)|^2 = |\mathcal{V}_{fi}|^2 F(t, E_f - E_i - \hbar\omega) = |\mathcal{V}_{fi}|^2 F(t, \epsilon) \quad (\text{T14.32})$$

(med  $i = 1$  og  $f = 2$ ). Her er funksjonen  $F(t, \epsilon)$  gitt ved

$$\begin{aligned} F(t, \epsilon) &\equiv \left| \frac{1 - e^{i\epsilon t/\hbar}}{\epsilon} \right|^2 = \left| \frac{e^{i\epsilon t/2\hbar}}{\epsilon} (e^{-i\epsilon t/2\hbar} - e^{i\epsilon t/2\hbar}) \right|^2 \\ &= \frac{t^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2(\epsilon t/2\hbar)}{(\epsilon t/2\hbar)^2}. \end{aligned} \quad (\text{T14.33})$$

<sup>5</sup>Det som *egentlig* skjer i disse overgangene er i det ene tilfellet at atomet **absorberer et foton** med energi  $\hbar\omega$  fra det elektromagnetiske feltet. I det andre tilfellet har vi **stimulert emisjon av et foton**. (Jf Einsteins argument fra 1917, som ble diskutert i Tillegg 8, avsn 8.3.d.) Den teoretiske beskrivelsen av fotoner krever at en kvantiserer det elektromagnetiske feltet, noe som gjøres i et senere kurs. Så når vi her behandler partiklene kvantemekanisk og feltet klassisk, så bruker vi det en gjerne kaller en **halvklassisk strålingsteori**. Resultatene våre for absorpsjon og stimulert emisjon stemmer med dem en finner i den fullt kvantiserte teorien.

Her er det nå et poeng at  $\mathcal{V}_{fi}(E_f, E_i)$  er en langsomtvarierende funksjon av de to energiene, mens  $F(t, \epsilon)$  som funksjon av "avviket"  $\epsilon$  har en veldig skarp topp sentrert i  $\epsilon = 0$  (unntatt for veldig korte tider  $t$ ). Maksimalverdien av denne funksjonen er  $F(t, 0) = t^2/\hbar^2$ , og halvverdibredden  $\Delta\epsilon$  ("bredden av toppen ved halvparten av maksimum") er omtrent lik avstanden ut til første nullpunktet, som vi ser av figuren. Vi har altså at  $\Delta\epsilon \cdot t/2\hbar \approx \pi$ , slik at  $\Delta\epsilon \approx 2\pi\hbar/t$ .



For økende  $t$  øker altså maksimalverdien som  $t^2/\hbar^2$ , mens halvverdibredden avtar som  $2\pi\hbar/t$ . Dette betyr at arealet under denne kurven øker proporsjonalt med  $t$ , samtidig som bredden går mot null. Dette betyr selvsagt at funksjonen  $F(t, \epsilon)$  for økende  $t$  nærmer seg en deltafunksjon i  $\epsilon$ , multiplisert med  $t$  og en konstant, som vi kan kalle  $C$ ,  $F(t, \epsilon) \rightarrow Ct\delta(\epsilon)$ . Denne konstanten kan vi fastlegge ved å beregne arealet under kurven:

$$\begin{aligned} Ct &= \int_{-\infty}^{\infty} F(t, \epsilon) d\epsilon = \frac{t^2}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\epsilon t/2\hbar)}{(\epsilon t/2\hbar)^2} d\epsilon \\ &= \frac{t^2}{\hbar^2} \frac{2\hbar}{t} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx}_{\pi} \implies C = \frac{2\pi}{\hbar}. \end{aligned}$$

For store  $t$  har vi altså

$$\begin{aligned} F(t, \epsilon) &\approx t \frac{2\pi}{\hbar} \delta(\epsilon) \\ &= t \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \end{aligned} \quad (\text{T14.34})$$

slik at overgangs-sannsynligheten for absorpsjon er tilnærmet gitt ved formelen

$$|a_{i \rightarrow f}(t)|^2 \approx t \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (\text{absorpsjon}),$$

eller, med  $i = 1$  og  $f = 2$ :

$$|a_{1 \rightarrow 2}(t)|^2 \approx t \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{21}|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) \quad (\text{absorpsjon}) \quad (\text{T14.35})$$

For den reverserte prosessen ( $2 \rightarrow 1$  via stimulert emisjon) har vi fra prinsippet om detaljert balanse  $a_{1 \rightarrow 2}(t) = -a_{2 \rightarrow 1}^*(t)$ , slik at overgangs-sannsynligheten er gitt ved samme formel:

$$|a_{2 \rightarrow 1}(t)|^2 \approx t \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{21}|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) \quad \left( \begin{array}{c} \text{stimulert} \\ \text{emisjon} \end{array} \right). \quad (\text{T14.36})$$

Proporsjonaliteten med  $t$  i disse formlene er viktig av to grunner:

(i) For det første er det vel opplagt at disse formlene ikke kan være gyldige for vilkårlig store  $t$ . Ellers ville jo sannsynlighetene  $|a_{i \rightarrow f}(t)|^2$  før eller senere bli større enn 1, og det er jo umulig. Poenget her er selvsagt at disse første-ordens-formlene bare er gyldige så lenge sannsynligheten for å være i den opprinnelige tilstanden,  $|a_i(t)|^2$ , er nær 1. Dette krever at summen

$$\sum_{f \neq i} |a_{i \rightarrow f}(t)|^2$$

av alle overgangs-sannsynlighetene er mye mindre enn 1 (jf ligning (T14.9) og diskusjonen i avsnitt 14.2 ovenfor). Formlene (T14.35) og (T14.36) er derfor gyldige bare i et begrenset tidsintervall. Den øvre grensen (på  $t$ ) vil avhenge av hvilket system vi ser på, styrken av perturbasjonen, osv. Merk at dette betyr at  $\delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega)$  i formlene ovenfor er bare en tilnærmet deltafunksjon. Bredden av toppen er endelig. Det er også en *nedre* grense på  $t$ ; vi ønsker at  $t$  er så stor at bredden  $\Delta\epsilon = 2\pi\hbar/t$  er mye mindre enn den relevante energi-skalaen (gitt ved  $E_2 - E_1$ ).

(ii) Disse begrensningene, dvs at  $t$  hverken må være for stor eller for liten, er vanligvis ikke noe problem. Hovedpoenget med resultatene (T14.35) og (T14.36) er nemlig at de like store overgangs-sannsynlighetene *pr tidsenhet* (eng.: transition rates) for henholdsvis absorpsjon og stimulert emisjon er tidsuavhengige. Vi kan altså konstatere at når en harmonisk perturbasjon

$$\hat{V}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \hat{\mathcal{V}}^\dagger(\mathbf{r})e^{i\omega t} \quad (\text{T14.37})$$

fører til absorpsjon og eksitasjon fra  $\psi_1$  til  $\psi_2$ , så er **overgangs-sannsynligheten pr tidsenhet** konstant:

$$w_{1 \rightarrow 2}^{\text{abs.}} \equiv \frac{|a_{1 \rightarrow 2}(t)|^2}{t} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{21}|^2 \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega). \quad (\text{absorpsjon}) \quad (\text{T14.38})$$

Her er

$$\mathcal{V}_{21} \equiv \langle \psi_2 | \hat{\mathcal{V}}(\mathbf{r}) | \psi_1 \rangle.$$

For den reverserte prosessen, de-eksitasjon fra  $\psi_2$  til  $\psi_1$  via stimulert emisjon, har vi vist til 1. orden at overgangs-sannsynligheten pr tidsenhet er like stor:

$$w_{2 \rightarrow 1}^{\text{st.em.}} = w_{1 \rightarrow 2}^{\text{abs.}}. \quad (\text{T14.39})$$

Når  $\psi_1$  og  $\psi_2$  er “diskrete” tilstander, som f.eks grunntilstanden  $\psi_1$  og en eksitert tilstand  $\psi_2$  i hydrogenatomet, kan vi si at overgangen er av typen **diskret**  $\rightarrow$  **diskret**. Resonansbetingelsen,  $\omega \approx \omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ , kan da bare oppfylles ved at vi perturberer med elektromagnetisk stråling med et spektrum som er kontinuerlig i området rundt Bohr-frekvensen  $\omega_{21}$ . Denne problemstillingen skal vi komme tilbake til i Tillegg 15. Men først skal vi se på overganger av typen **diskret**  $\rightarrow$  **kontinuerlig**.

## 14.5 Diskret $\rightarrow$ kontinuerlig overgang. Fermis Gyldne Regel

Som et eksempel kan vi her tenke oss at vi bruker monokromatisk stråling med en fotonenergi  $\hbar\omega$  som er høy nok til å ionisere hydrogenatomet. Dersom begynnelsestilstanden  $\psi_i$  er grunntilstanden  $\psi_1$ , krever dette fotoner med en energi som er høyere enn 13.6 eV. De aktuelle slutt-tilstandene  $\psi_f$  er da kontinuums-tilstander for det emitterte elektronet, med en energi  $E_f \approx \hbar\omega - 13.6$  eV, og den prosessen vi betrakter er foto-ionisering, eller fotoelektrisk effekt om vi vil.

Den totale overgangs-sannsynligheten pr tidsenhet,  $W_i$ , fra begynnelsestilstanden  $\psi_i$  er da

$$W_i = \sum_f w_{i \rightarrow f}, \quad (\text{T14.40})$$

der summasjonen går over alle slutt-tilstander  $\psi_f$  med energi innenfor eller nær toppen vi diskuterte på side 11.

Her kan det ved første øyekast se ut som om vi har et problem, fordi antall kontinuumstilstander i dette energiområdet jo er uendelig stort. For å unngå dette (tilsynelatende) problemet kan vi tenke oss at atomet (og resten av eksperimentet) er plassert inne i en stor boks, gjerne kubisk, med volum  $V_0$ . Ved å velge dette tenkte såkalte "reaksjonsvolumet"  $V_0 = L^3$  tilstrekkelig stort, får vi et såkalt kvasi-kontinuum av slutt-tilstander og energier (istedenfor et kontinuum som vi har for et uendelig volum), slik at antallet aktuelle slutt-tilstander blir endelig.

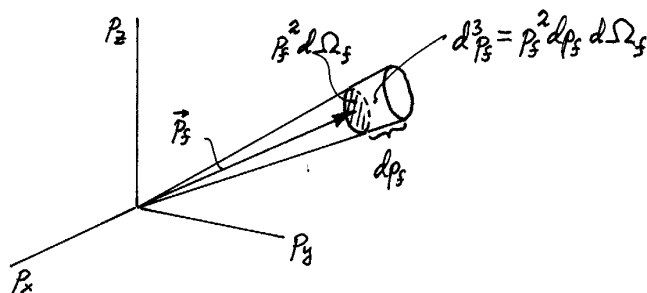
Når vi ser bort fra området nær hydrogenkjernen (protonet) kan vi bruke kontinuumstilstander som har formen

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_0}} e^{i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar}, \quad \mathbf{p}_f = \frac{2\pi\hbar}{L} \{n_x, n_y, n_z\}, \quad n_x = 0, \pm 1, \dots, \text{ etc.} \quad (\text{T14.41})$$

Vi bruker altså periodiske grensebetingelser, som i avsnitt 8.1 i Tillegg 8.

Nær protonet modifiseres disse kontinuumstilstandene på grunn av Coulomb-kraften mellom elektronet og protonet. Dette er viktig når en skal beregne matrise-elementene  $\mathcal{V}_{fi} = \langle \psi_f | \hat{V}(\mathbf{r}) | \psi_i \rangle$ , men påvirker ikke resten av resonnementet nedenfor. Merk at slutt-tilstandene har veldefinert impuls når elektronet godt og vel har blitt frigjort fra protonet. Det er denne impulsen vi observerer når vi registrerer hvor det emitterte elektronet havner.

Elektronet kan emitteres i en vilkårlig retning, idet protonet tar imot den nødvendige rekylen (slik at impulsen er bevart i denne prosessen). La oss i første omgang fokusere på slutt-tilstander som svarer til at elektronet emitteres med en (impuls-)retning innenfor et infinitesimalt romvinkel-element  $d\Omega_f$ .



Fra diskusjonen i avsnitt 8.1.d husker vi at antall *tilstander* i volumet  $V_0$  med impulser i  $d^3p_f = p_f^2 dp_f d\Omega_f$ , dvs antall tilstander i faserom-elementet  $V_0 d^3p$  er

$$dN = \frac{V_0 d^3p_f}{h^3} = \frac{V_0}{h^3} p_f^2 \frac{dp_f}{dE_f} dE_f d\Omega_f \equiv \rho(E_f) dE_f. \quad (\text{T14.42})$$

Med  $dp_f/dE_f = 1/v_f$  finner vi da følgende **tilstandstetthet** (antall tilstander pr energi-enhet med retning innenfor  $d\Omega_f$ ):

$$\begin{aligned} \rho(E_f) = \frac{dN}{dE_f} &= \frac{V_0}{h^3} \frac{p_f^2}{v_f} d\Omega_f && \left( \begin{array}{l} \text{relativistisk, for} \\ \text{partikler og fotoner} \end{array} \right) \\ &= \frac{V_0}{h^3} m p_f d\Omega_f. && \left( \begin{array}{l} \text{ikke-relativistisk, for} \\ \text{partikler med masse } m \end{array} \right) \end{aligned} \quad (\text{T14.43})$$

For hver av de  $dN = \rho(E_f)dE_f$  slutt-tilstandene er overgangs-sannsynligheten pr tidsenhet,  $w_{i \rightarrow f}$ , gitt av (T14.38). Dermed blir den samlede overgangs-sannsynligheten pr tidsenhet til slutt-tilstander i intervallet  $dE_f$  og med retning innenfor  $d\Omega_f$

$$w_{i \rightarrow f} \cdot \rho(E_f) dE_f = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathcal{V}_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \cdot \rho(E_f) dE_f.$$

Her er som vi husker  $\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$  praktisk talt en deltafunksjon i  $E_f$ . Derfor er det nå trivielt å integrere uttrykket ovenfor over energien  $E_f$ : Siden matrise-elementet  $\mathcal{V}_{fi}$  er en langsomtvarierende funksjon både av vinkler og energi, vil både matrise-elementet og tilstandstettheten  $\rho(E_f)$  være konstante under integrasjonen. Den samlede overgangs-sannsynligheten pr tidsenhet for at elektronet emitteres til slutt-tilstander innenfor romvinkelen  $d\Omega_f$  blir da ganske enkelt

$$dW_{(i \rightarrow d\Omega_f)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left\{ |\mathcal{V}_{fi}|^2 \rho(E_f) \right\}_{E_f = E_i + \hbar\omega} \left( \begin{array}{l} \text{Fermis} \\ \text{Gyldne Regel} \end{array} \right). \quad (\text{T14.44})$$

Denne veldig viktige formelen, som først ble utledet av Dirac, er kjent som **Fermis Gyldne Regel**. Fordi denne formelen er så intimt knyttet til (T14.38), blir også den sistnevnte av og til kalt Fermis gyldne regel.

Merk at kvadratet av matrise-elementet inkluderer en faktor  $1/V_0$  fra (T14.41), som kansellerer mot faktoren  $V_0$  i  $\rho(E_f)$ . Dette betyr at resultatet vårt for overgangssannsynligheten pr tidsenhet er uavhengig av det tenkte "reaksjonsvolumet"  $V_0$ , og slik bør det være.

For å finne den *totale* overgangs-sannsynligheten pr tidsenhet (T14.40) for foto-emisjon av elektronet, må en selvsagt beregne matrise-elementet  $\mathcal{V}_{fi}$ , finne ut hvordan dette avhenger av emisjonsvinklene, og så integrere formelen ovenfor over alle vinkler. For å oppnå et nøyaktig resultat må en finne ut hvordan slutt-tilstandene  $\psi_f(\mathbf{r})$  oppfører seg i nærheten av protonet (hvor de viktigste bidragene til matrise-elementet kommer fra). Beregningen blir vesentlig enklere, og resultatet bare tilnærmet korrekt, hvis en tillater seg å bruke impulsbølgefunksjonene (T14.41) for alle  $\mathbf{r}$ . (Se avsnitt 12.6 i Hemmer.)

## 14.6 Spredning på statisk potensial

I en spredningsprosess er partiklene ubundet både før og etter spredningen, så her snakker vi om en overgang av typen **kontinuerlig**  $\rightarrow$  **kontinuerlig**. Anta at vi har en kollisjon mellom to partikler, og at vekselvirkningspotensialet mellom dem er  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ . Ved å innføre **relativ-koordinaten**  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  og den **reduerte massen**  $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$  kan vi behandle et slikt spredningsproblem som et én-partikkel-problem, der en (fiktiv) partikkel med masse  $m$  spres på det statiske potensialet  $V(\mathbf{r})$ . (Se avsnitt 5.8 i Hemmer og 5.7 i B&J).

Hamilton-operatoren for denne “reduerte” partikkelen kan vi skrive som  $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + V(\mathbf{r})$ , der  $\widehat{H}_0 = \widehat{\mathbf{p}}^2/2m$  er Hamilton-operatoren for en fri partikkel og potensialet  $V(\mathbf{r})$  betraktes som en perturbasjon (i dette tilfellet tidsuavhengig).

Som uperturbert basis kan vi da bruke impulsegenfunksjonene (T14.41), som også er egenfunksjoner til  $\widehat{H}_0$ . Anta at “partikkelen” ved  $t = 0$  er preparert i tilstanden

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_0}} e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}/\hbar}.$$

Siden denne er en egentilstand til  $\widehat{H}_0$ , men ikke til den komplette Hamilton-operatoren  $\widehat{H}$ , vil perturbasjonen (dvs potensialet) umiddelbart begynne å lage en “lekkasje av sannsynlighet” fra begynnelsestilstanden og til andre impulsegenstilstander

$$\psi_f(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_0}} e^{i\mathbf{p}_f \cdot \mathbf{r}/\hbar},$$

og vi må spørre oss hvor stor sannsynligheten pr tidsenhet er for overgang fra  $\psi_i$  til  $\psi_f$ .

Én måte å løse dette problemet på er å bruke tidsavhengig perturbasjonsteori.<sup>6</sup> Med det tidsuavhengige matrise-elementet

$$\begin{aligned} V_{fi}(t) = V_{fi} &\equiv \int \psi_f^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d^3r \\ &= \frac{1}{V_0} \int e^{i(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f) \cdot \mathbf{r}/\hbar} V(\mathbf{r}) d^3r, \end{aligned} \quad (\text{T14.45})$$

ser vi at integralet i (T14.15) forenkler seg til  $\int_0^t \exp(i\omega_{fi}t') dt'$ . For  $\mathbf{p}_f \neq \mathbf{p}_i$  finner vi da overgangs-sannsynligheten

$$\begin{aligned} |a_{i \rightarrow f}(t)|^2 &= \left| \frac{V_{fi}}{i\hbar} \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} dt' \right|^2 = |V_{fi}|^2 \cdot \left| \frac{1 - e^{i\omega_{fi}t}}{\hbar\omega_{fi}} \right|^2 \\ &\equiv |V_{fi}|^2 \cdot F(t, E_f - E_i). \end{aligned}$$

Her er

$$F(t, E_f - E_i) \approx t \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_f - E_i);$$

jf (T14.34). Dermed er overgangs-sannsynligheten pr tidsenhet til tilstanden  $\psi_f$

$$w_{i \rightarrow f} \approx \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i). \quad (\text{T14.46})$$

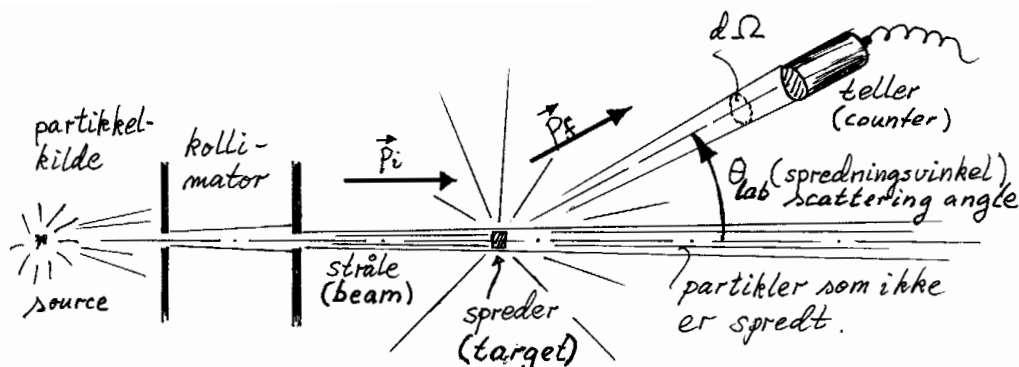
Dette er igjen et eksempel på Fermis gyldne regel. Merk at deltafunksjonen er et uttrykk for at energien er bevart i denne spredningsprosessen, riktignok bare tilnærmet, ifølge dette regnestykket; overganger skjer bare til slutt-tilstander med energi  $E_f = E_i + \mathcal{O}(2\pi\hbar/t)$ .

<sup>6</sup>En annen måte er ved hjelp av spredningsteori, som ikke blir gjennomgått i herværende kurs, men som er en del av TFY4205 Kvantemekanikk II.



## Spredningstverrsnitt

I et spredningseksperiment kan vi preparere begynnelsestilstanden  $\psi_i$  ved å **kollimere** en stråle av partikler med forholdsvis skarpt definert energi, slik at den kollimerte strålen inneholder partikler med en forholdsvis veldefinert impuls  $\mathbf{p}_i$  på vei mot **sprederen** (eng.: target). (Sprederen inneholder vanligvis et stort antall partikler.)



I mange eksperimenter spres prosjektilepartikkelen på en av flere partikler i sprederen. Sprederen er vanligvis i ro i lab.-systemet. Merk at spredningsvinkelen  $\theta_{lab}$  i lab.-systemet er forskjellig fra spredningsvinkelen  $\theta$  i massesenter-systemet (jf Bransden & Joachain, side 591).

Anta at detektoren aksepterer partikler som er spreddt inn i romvinkelen  $d\Omega$ . Ifølge (T14.43) og (T14.46) er da sannsynligheten pr tidsenhet for at en partikkel blir registrert i telleren

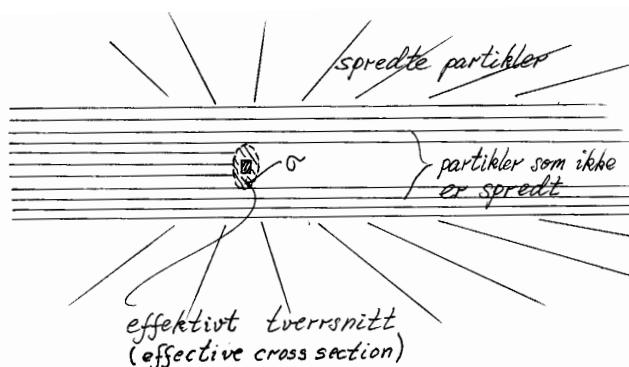
$$\begin{aligned} dW_{(i \rightarrow d\Omega)} &= \int w_{i \rightarrow f} \rho(E_f) dE_f = \frac{2\pi}{\hbar} \{|V_{fi}|^2 \rho(E_f)\}_{(E_f=E_i)} \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \frac{V_0}{h^3} mp d\Omega; \quad (p_f = p_i \equiv p). \end{aligned} \quad (\text{T14.47})$$

Integralet av dette uttrykket over alle vinkler,

$$W_i = \int_{\Omega} dW_{(i \rightarrow d\Omega)},$$

er sannsynligheten pr tidsenhet for at partikkelen i det hele tatt blir spreddt.

La oss før vi går videre gjøre et lite tanke-eksperiment, som når det gjelder tallverdier er helt urealistisk: Anta at vi har en innkommende fluks  $j_i$  på 100 partikler pr  $\text{cm}^2$  pr sekund, og anta at sprederen vår gir en spredningsrate på  $W = 300$  partikler pr sekund. Dette betyr at sprederen *effektivt sett* fjerner et **tverrsnitt** på  $\sigma = 3 \text{ cm}^2$  av den innkommende fluksen:



$$\sigma = \frac{W}{j_i} = \frac{\text{sprednings-rate}}{\text{innkommende fluks}} \quad \left( \begin{array}{c} \text{sprednings-} \\ \text{tverrsnitt} \end{array} \right) \quad (\text{T14.48})$$

$$= \frac{300 \text{ s}^{-1}}{100 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}} = 3 \text{ cm}^2.$$

Moralen i dette tanke-eksperimentet er at størrelsen  $\sigma = W/j_i$  er et mål for *spredningsevnen* til sprederen. Denne evnen til å spre prosjektilpartikler kan differensieres med hensyn på vinkler: Anta at raten av spredte partikler som havner innenfor romvinklelementet  $d\Omega$  er  $dW$ . Dette betyr at spredning innenfor denne romvinkelen effektivt sett fjerner et tverrsnitt

$$d\sigma = \frac{dW}{j_i} = \frac{\text{sprednings-rate inn i } d\Omega}{\text{innkommende fluks}} \quad \left( \begin{array}{c} \text{differensielt sprednings-} \\ \text{tverrsnitt} \end{array} \right) \quad (\text{T14.49})$$

av den innkommende fluksen.

La oss nå igjen vende tilbake til spredningseksperimentet vårt, og forestille oss at hele eksperimentet er plassert i en fiktiv boks med volum  $V_0 = L^3$ . I begynnelsestilstanden tenker vi oss at det er én partikkel inne i dette volumet. Dette svarer til en sannsynlighets-tetthet  $\rho_i = |\psi_i|^2 = 1/V_0$  og en fluks

$$j_i = \Re[\psi_i^* \frac{\hbar}{im} \psi_i'] = |\psi_i|^2 v_i = \frac{1}{V_0} \frac{p}{m}. \quad (\text{T14.50})$$

Dersom også sprederen inneholder bare én partikkel, ender vi da opp med følgende **differensielle spredningstverrsnitt** (pr partikkel i sprederen):

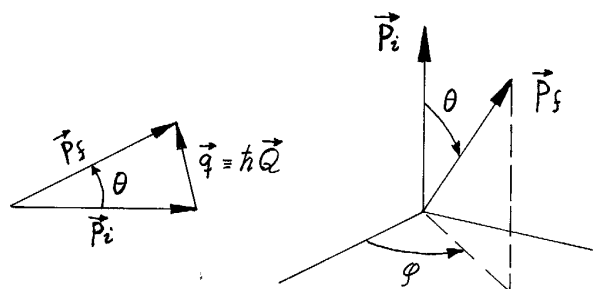
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{dW}{j_i d\Omega} = \left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) d^3r \right|^2 \equiv |f^B(\mathbf{Q})|^2. \quad (\text{T14.51})$$

Her er

$$\mathbf{Q} \equiv (\mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i)/\hbar \equiv \mathbf{q}/\hbar. \quad (\text{T14.52})$$

Kommentarer:

- (i) Resultatet er igjen uavhengig av "reaksjons-volumet"  $V_0$ , slik det skal være.
- (ii) Størrelsen  $f^B(\mathbf{Q})$  kalles **sprednings-amplituden i første Born-tilnærme**. Formelen er bare tilnærmet korrekt, fordi den er utledet ved hjelp av første-ordens perturbasjonsteori.
- (iii) Vektoren  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{p}_f - \mathbf{p}_i \equiv \hbar\mathbf{Q}$  er impulsoverføringen fra sprederen til prosjektilpartikkelen. (Se figuren nedenfor.) Merk at vinkelavhengigheten til dette differensielle spredningstverrsnittet bare kommer inn gjennom  $\mathbf{Q}$ , dersom potensialet  $V(\mathbf{r})$  er kulesymmetrisk.



(iv) Merk også at sprednings-amplituden  $f^B(\mathbf{Q})$  essensielt er Fourier-transformen av potensialet  $V(\mathbf{r})$ . Dersom Born-tilnærmelsen er forholdsvis nøyaktig, kan vi kartlegge  $f^B(\mathbf{Q})$  som funksjon av  $\mathbf{Q}$  eksperimentelt, ved å måle det differensielle spredningstverrsnittet  $d\sigma/d\Omega$  som funksjon av spredningsvinklene ( $\theta$  og  $\phi$ ) for varierende energier  $E_i = p^2/2m$ . Ved Fourier-omvending fra  $f^B(\mathbf{Q})$  til  $V(\mathbf{r})$  kan vi da bestemme vekselvirkningspotensialet  $V(\mathbf{r})$  mellom de to partiklene.

(v) Spredningseksperimenter er i alminnelighet den viktigste metoden når en skal undersøke strukturen til partikler og vekselvirkningen mellom dem. I motsetning til eksemplet ovenfor er slike spredningprosesser oftest **uelastiske**, i den forstand at partikkelinnholdet (og *antallet* partikler) i slutt-tilstanden avviker fra begynnelsestilstanden. Dette er spesielt tilfelle i moderne høy-energi-eksperimenter, hvor antall partikler i slutt-tilstanden (multiplisiteten) øker mer eller mindre proporsjonalt med den tilgjengelige energien. Det er heldigvis noen unntak fra denne regelen, nemlig når kollisjonen resulterer i dannelsen av én eller flere veldig tunge partikler, og da kanskje partikler som ikke har vært sett før. Oppdagelsen av nye tunge partikler er et av de viktigste målene med de eksperimentene som nå utføres ved LHC (Large Hadron Collider) i CERN.