

# Kapitola 16

## Nestacionární poruchová teorie

### Přehled teorie

Uvažujeme hamiltonián tvaru

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}(t),$$

kde  $\hat{H}_0$  nezávisí na čase (volný hamiltonián). Naším cílem je určit pravděpodobnost přechodu ze stavu  $|\psi_i(t_0)\rangle = |\psi_i\rangle$  do stavu  $|\psi_f(t_0)\rangle = |\psi_f\rangle$  časovým vývojem z času  $t_0$  do  $t_f$

$$W_{i \rightarrow f} = |\langle \psi_f(t_0) | \psi_i(t_f) \rangle|^2 = |\langle \psi_f | \hat{U}(t_f, t_0) | \psi_i \rangle|^2. \quad (16.1)$$

Interakční člen  $\varepsilon \hat{V}(t)$  považujeme za malou poruchu.

### Dysonův rozvoj evolučního operátoru v Diracově obraze

Budeme pracovat v Diracově obraze, který se v čase  $t_0$  shoduje se Schrödingerovým. Pravděpodobnost přechodu (16.1) je potom

$$W_{i \rightarrow f} = |\langle \psi_f^D(t_0) | \psi_i^D(t_f) \rangle|^2 = |\langle \psi_f | \hat{S}(t_f, t_0) | \psi_i \rangle|^2. \quad (16.2)$$

Evoluční operátor v Diracově obraze  $\hat{S}(t_f, t_0)$  se řídí diferenciální rovnicí

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}(t, t_0) = \varepsilon \hat{V}^D(t) \hat{S}(t, t_0), \quad \hat{S}(t_0, t_0) = \hat{I}. \quad (16.3)$$

Její řešení hledáme ve formě mocninné (Dysonovy) řady

$$\hat{S}(t_f, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \hat{S}^{(n)}(t_f, t_0). \quad (16.4)$$

Dosazením do (16.3) dostaneme postupně vztahy pro jednotlivé členy

$n = 0$ :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}^{(0)} = 0 \quad \implies \quad \hat{S}^{(0)}(t_f, t_0) = \hat{I}, \quad (16.5)$$

$n = 1$ :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}^{(1)} = \hat{V}^D \hat{S}^{(0)} = \hat{V}^D \quad \Longrightarrow \quad \hat{S}^{(1)}(t_f, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \hat{V}^D(t_1), \quad (16.6)$$

$n = 2$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{S}^{(2)} = \hat{V}^D \hat{S}^{(1)} \quad \Longrightarrow \quad \hat{S}^{(2)}(t_f, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \hat{V}^D(t_2) \hat{S}^{(1)}(t_2, t_0) dt_2 \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}^D(t_2) \hat{V}^D(t_1), \end{aligned} \quad (16.7)$$

takže pro  $n$ -tý člen platí

$$\hat{S}^{(n)}(t_f, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \hat{V}^D(t_n) \hat{V}^D(t_{n-1}) \dots \hat{V}^D(t_1). \quad (16.8)$$

Zavedeme operaci časového uspořádání součinu operátorů (předpokládáme, že ve stejném čase  $t_1 = t_2$  operátory komutují)

$$T \left[ \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) \right] = \begin{cases} \hat{A}(t_1) \hat{B}(t_2) & t_1 \geq t_2 \\ \hat{B}(t_2) \hat{A}(t_1) & t_1 \leq t_2 \end{cases},$$

analogicky pro libovolný počet operátorů.  $n$ -tý člen rozvoje evolučního operátoru v Diracově obraze pak můžeme zapsat pomocí  $T$ -součinu ve tvaru

$$\hat{S}^{(n)}(t_f, t_0) = \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 T \left[ \hat{V}^D(t_n) \hat{V}^D(t_{n-1}) \dots \hat{V}^D(t_1) \right], \quad (16.9)$$

kde všechny integrály mají stejné meze. Dysonovu řadu (16.4) pak lze formálně zapsat jako časově uspořádanou exponenciálu

$$\begin{aligned} \hat{S}(t_f, t_0) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t_f} dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 T \left[ \hat{V}^D(t_n) \hat{V}^D(t_{n-1}) \dots \hat{V}^D(t_1) \right] \\ &= T \left[ \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt \hat{V}^D(t) \right) \right]. \end{aligned} \quad (16.10)$$

## Přechod mezi vlastními stavy volného hamiltoniánu

V dalším se omezíme na přechod mezi vlastními stavy volného hamiltoniánu, tj.

$$\hat{H}_0|\psi_f\rangle = E_f|\psi_f\rangle, \quad \hat{H}_0|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle.$$

Pro jednoduchost předpokládejme, že  $\hat{H}_0$  má čistě bodové spektrum, tj. vlastní vektory  $|\psi_m\rangle$  tvoří ON bázi

$$\hat{H}_0|\psi_m\rangle = E_m|\psi_m\rangle, \quad \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}, \quad \sum_m |\psi_m\rangle\langle\psi_m| = \hat{I}. \quad (16.11)$$

Maticové elementy rozvoje evolučního operátoru v Diracově obraze (16.4), tj. amplitudy přechodu v  $n$ -tém řádu poruchového rozvoje, označíme jako

$$S_{fi}^{(n)}(t_f, t_0) = \langle\psi_f|\hat{S}^{(n)}(t_f, t_0)|\psi_i\rangle. \quad (16.12)$$

Pravděpodobnost přechodu (16.2) je potom rovna

$$W_{i\rightarrow f} = \left| S_{fi}^{(0)}(t_f, t_0) + \varepsilon S_{fi}^{(1)}(t_f, t_0) + \varepsilon^2 S_{fi}^{(2)}(t_f, t_0) + \dots \right|^2. \quad (16.13)$$

Pro nultý řád s použitím (16.5) nalezneme

$$S_{fi}^{(0)}(t_f, t_0) = \delta_{fi}. \quad (16.14)$$

V 1. řádu ze vztahu (16.6) a přechodem do Schrödingerova obrazu (14.20) dostaneme

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(1)}(t_f, t_0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \langle\psi_f|\hat{V}^D(t_1)|\psi_i\rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 \underbrace{\langle\psi_f|\hat{U}_0^\dagger(t_1, t_0)}_{e^{\frac{i}{\hbar}E_f t_1}\langle\psi_f|} \hat{V}(t_1) \underbrace{\hat{U}_0(t_1, t_0)|\psi_i\rangle}_{e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t_1}|\psi_i\rangle} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 e^{i\frac{E_f - E_i}{\hbar}t_1} \langle\psi_f|\hat{V}(t_1)|\psi_i\rangle. \end{aligned}$$

Označíme si maticové elementy interakčního členu ve Schrödingerově obraze  $\hat{V}(t)$  v bázi vlastních vektorů  $\hat{H}_0$

$$V_{mn}(t) = \langle\psi_m|\hat{V}(t)|\psi_n\rangle,$$

a vlastní frekvence odpovídající přeskoku mezi stavy  $|\psi_m\rangle$  a  $|\psi_n\rangle$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}.$$

Maticový element evolučního operátoru v 1. řádu pak zapíšeme ve tvaru

$$S_{fi}^{(1)}(t_f, t_0) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_f} dt_1 e^{i\omega_{fi}t_1} V_{fi}(t_1). \quad (16.15)$$

Ve druhém řádu s použitím (16.7) a báze (16.11) analogickým postupem nalezneme

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(2)}(t_f, t_0) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \langle \psi_f | \hat{V}^D(t_2) \sum_{m_1} |\psi_{m_1}\rangle \langle \psi_{m_1}| \hat{V}^D(t_1) | \psi_i \rangle \\ &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{m_1} \int_{t_0}^{t_f} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 V_{fm_1}(t_2) e^{i\omega_{fm_1}t_2} V_{m_1i}(t_1) e^{i\omega_{m_1i}t_1}. \end{aligned} \quad (16.16)$$

Pro amplitudu přechodu v  $n$ -tém řádu pak platí

$$S_{fi}^{(n)}(t_f, t_0) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \sum_{m_1} \dots \sum_{m_{n-1}} \int_{t_0}^{t_f} dt_n \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 V_{fm_{n-1}}(t_n) e^{i\omega_{fm_{n-1}}t_n} \dots V_{m_1i}(t_1) e^{i\omega_{m_1i}t_1}$$

## Přechody v 1. řádu poruchového rozvoje

V dalším budeme pracovat v 1. řádu poruchového rozvoje a položíme  $\varepsilon = 1$ ,  $t_0 = 0$  a  $t_f = T$ . Počáteční a finální stav musí být různé, jinak dostaneme pro pravděpodobnost přechodu nesmyslný výsledek ( $W_{i \rightarrow f}^{(1)} > 1$ ). Pravděpodobnost přechodu v 1. řádu je potom

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \left| S_{fi}^{(1)}(T, 0) \right|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T dt e^{i\omega_{fi}t} V_{fi}(t) \right|^2. \quad (16.17)$$

### Porucha nezávislá na čase

Pro interakci nezávislou na čase  $\hat{V} \neq \hat{V}(t)$  můžeme (16.17) upravit do tvaru

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \frac{4|V_{fi}|^2}{(E_f - E_i)^2} \sin^2 \left( \frac{(E_f - E_i)T}{2\hbar} \right) = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_{fi}), \quad (16.18)$$

kde  $I_T(\omega)$  je funkce

$$I_T(\omega) = \left| \int_0^T dt e^{i\omega t} \right|^2 = \frac{4}{\omega^2} \sin^2 \left( \frac{\omega T}{2} \right). \quad (16.19)$$

1. řád poruchového rozvoje lze použít pokud platí

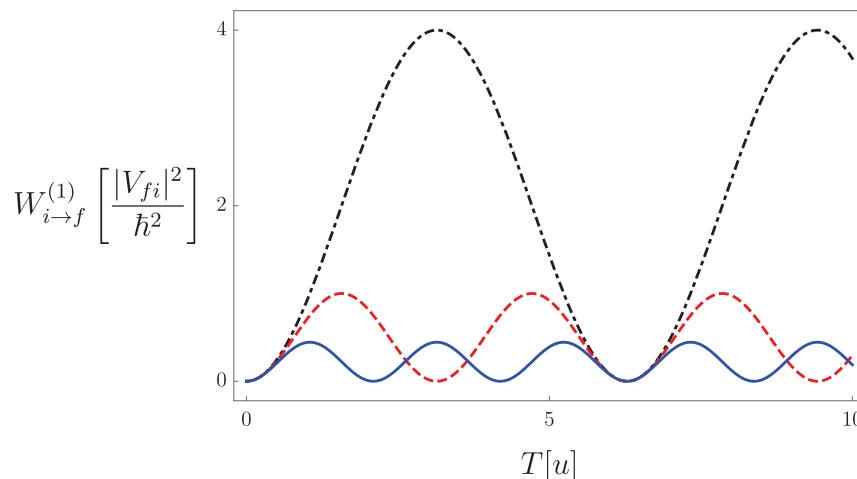
$$|V_{fi}| \ll |E_f - E_i|.$$

Pravděpodobnost přechodu (16.18) jako funkce  $T$  je zobrazena na obrázku 16.1 pro různé hodnoty  $\omega_{fi}$ . S rostoucím  $\omega_{fi}$  výrazně klesá amplituda a oscilace se zrychlují. Je zde vidět rezonanční charakter - pravděpodobnost přechodu je výrazně větší pro malé  $\omega_{fi}$ , tj.

blízké energetické hladiny. V limitě  $\omega_{fi} \rightarrow 0$  (přechod mezi ortogonálními stavy v rámci degenerované hladiny  $E_f = E_i$ ) platí

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \frac{|V_{fi}|^2}{\hbar^2} T^2.$$

Tento vztah lze použít jen pro velmi krátké časy  $T \ll \frac{\hbar}{|V_{fi}|}$ .



Obrázek 16.1: Pravděpodobnost přechodu v 1. řádu poruchové teorie (16.18) jako funkce  $T$  pro různé hodnoty  $\omega_{fi}$ . Černá čerchovaná čára odpovídá  $\omega_{fi} = \frac{1}{u}$ , červená čárkovaná čára  $\omega_{fi} = \frac{2}{u}$  a modrá čára  $\omega_{fi} = \frac{3}{u}$ .

Průběh funkce  $I_T(\omega)$  pro různé hodnoty  $T$  je znázorněn na obrázku 16.2. S rostoucím  $T$  je pík okolo  $\omega = 0$  stále užší a vyšší. Pološířka maxima  $I_T(\omega)$  v nule je přibližně  $\frac{2\pi}{T}$ , mimo tento interval je funkce v podstatě nulová. Za čas  $T$  tak může dojít s nezanedbatelnou pravděpodobností k přechodům pouze do této oblasti, tj.

$$|\omega_{fi}| = \frac{|E_f - E_i|}{\hbar} \equiv \frac{\Delta E}{\hbar} \leq \frac{2\pi}{T}.$$

Odsud plynou "relace neurčitosti mezi časem a energií"

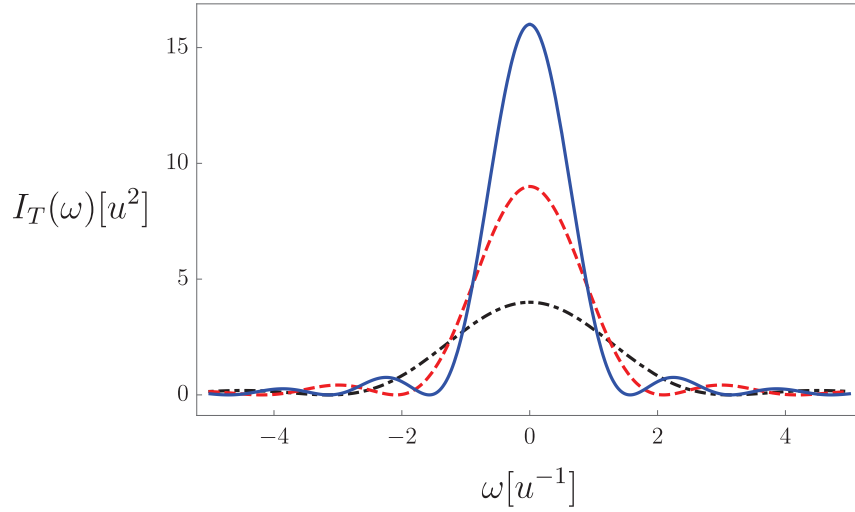
$$\Delta E \leq \frac{\hbar}{T},$$

které říkají, že za čas  $T$  jsme schopni určit energii s přesností maximálně  $\frac{\hbar}{T}$ .

## Harmonická porucha

Uvažujme nyní harmonickou poruchu

$$\hat{V}(t) = \hat{v}e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t}, \quad (16.20)$$



Obrázek 16.2: Funkce  $I_T(\omega)$  (16.19) pro různé hodnoty  $T$ . Černá čerchovaná čára odpovídá  $T = 2u$ , červená čárkovaná čára  $T = 3u$  a modrá čára  $T = 4u$ .

kde  $\omega > 0$ . Její maticové elementy jsou

$$V_{fi}(t) = \langle \psi_f | \hat{v} e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t} | \psi_i \rangle = v_{fi} e^{-i\omega t} + \bar{v}_{if} e^{i\omega t}.$$

Amplitudu přechodu za čas  $T$  v 1. řádu (16.15) postupně upravíme do tvaru

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(1)}(T, 0) &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt e^{i\omega_{fi}t} (v_{fi} e^{-i\omega t} + \bar{v}_{if} e^{i\omega t}) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt (v_{fi} e^{i\omega_- t} + \bar{v}_{if} e^{i\omega_+ t}) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left( v_{fi} e^{i\frac{\omega_- T}{2}} A_T(\omega_-) + \bar{v}_{if} e^{i\frac{\omega_+ T}{2}} A_T(\omega_+) \right), \end{aligned} \quad (16.21)$$

kde jsme označili  $\omega_\pm = \omega_{fi} \pm \omega$  a  $A_T(\omega)$  je funkce

$$A_T(\omega) = \frac{2}{\omega} \sin\left(\frac{\omega T}{2}\right) = \sqrt{I_T(\omega)}. \quad (16.22)$$

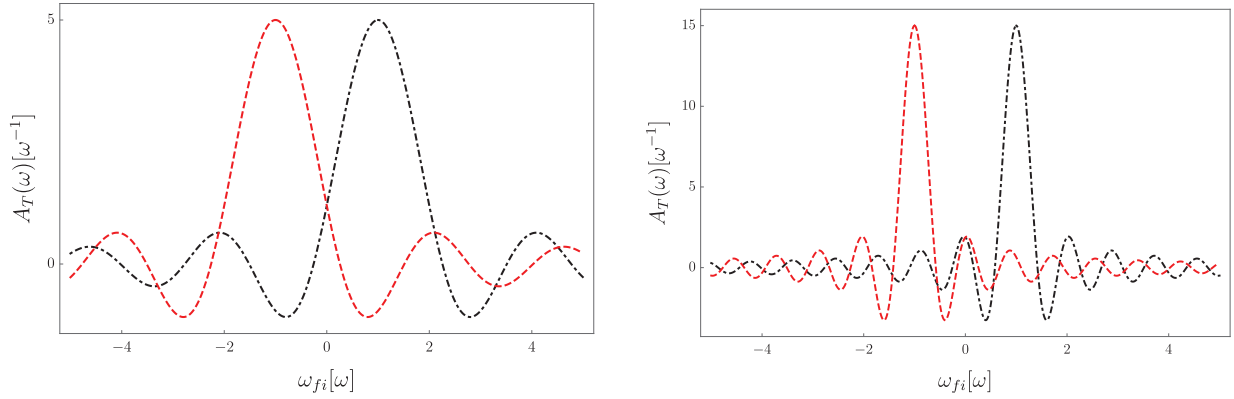
Pravděpodobnost přechodu je v 1. řádu rovna

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \left| v_{fi} e^{i\frac{\omega_- T}{2}} A_T(\omega_-) + \bar{v}_{if} e^{i\frac{\omega_+ T}{2}} A_T(\omega_+) \right|^2,$$

roli tak hraje i interference příspěvků od  $\hat{v} e^{-i\omega t}$  a  $\hat{v}^\dagger e^{i\omega t}$ . Ta je podstatná na krátké časové škále, pro velká  $T$  je možné ji zanedbat. Důvodem je, že  $A_T(\omega)$  má dominantní maximum v nule hodnoty

$$A_T(0) = T,$$

pološírka píku klesá jako  $\frac{\pi}{T}$ .  $A_T(\omega_\pm)$  tak mají hlavní píky v bodech  $\omega_{fi} = \mp\omega$ , které se s rostoucím časem zužují a přestávají překrývat. Průběh funkcí  $A_T(\omega_\pm)$  v závislosti na  $\omega_{fi}$  je znázorněn na obrázku 16.3 pro  $T = \frac{5}{\omega}$  (vlevo) a  $T = \frac{15}{\omega}$  (vpravo).



Obrázek 16.3: Funkce (16.22) pro různé časy -  $T = \frac{5}{\omega}$  (vlevo) a  $T = \frac{15}{\omega}$  (vpravo).  $A_T(\omega_+)$  je červená čárkovaná čára,  $A_T(\omega_-)$  černá čerchovaná čára. S rostoucím časem se dominantní píky zvětšují, zužují a oddělují.

Vlivem harmonické poruchy dochází dominantně ke dvěma procesům. Člen  $\hat{v}^\dagger e^{i\omega t}$  přispívá zejména k přechodům s  $E_f \simeq E_i - \hbar\omega$  (stimulovaná emise), člen  $\hat{v} e^{-i\omega t}$  způsobuje přechody do  $E_f \simeq E_i + \hbar\omega$  (stimulovaná absorpce). Šířka intervalů  $(E_i \pm \hbar\omega - \frac{\Delta E}{2}, E_i \pm \hbar\omega + \frac{\Delta E}{2})$ , kam může  $E_f$  s nezanedbatelnou pravděpodobností patřit, klesá s časem jako  $\Delta E \sim \frac{\hbar}{T}$ . Tyto intervaly se pro velká  $T$  nepřekrývají, takže ve výpočtu pravděpodobnosti stimulované emise můžeme amplitudu absorpce zanedbat a dostaneme podobný výsledek jako pro konstantní poruchu

$$W_{i \rightarrow f}^{emi}(T) = \frac{|v_{if}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_+) = \frac{|v_{if}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_{fi} + \omega). \quad (16.23)$$

Analogicky pro pravděpodobnost stimulované absorpce platí

$$W_{i \rightarrow f}^{abs}(T) = \frac{|v_{fi}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_-) = \frac{|v_{fi}|^2}{\hbar^2} I_T(\omega_{fi} - \omega). \quad (16.24)$$

## Neporuchové rovnice pro evoluční operátor

Můžeme se také pokusit řešit pohybovou rovnici pro evoluční operátor v Diracově obraze (14.23) exaktně. V bázi vlastních vektorů volného hamiltoniánu dostaneme pro maticové elementy evolučního operátoru

$$S_{km}(t, 0) = \langle \psi_k | \hat{S}(t, 0) | \psi_m \rangle,$$

pohybové rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} S_{km}(t, 0) = \sum_j V_{kj}^D(t) S_{jm}(t, 0) = \sum_j e^{i\omega_{kj}t} V_{kj}(t) S_{jm}(t, 0),$$

s počáteční podmínkou

$$S_{km}(0, 0) = \delta_{km}.$$

Alternativně můžeme stav v čase  $t$  rozložit do báze vlastních vektorů volného hamiltoniánu (pro další postup je vhodné z časově závislých Fourierových koeficientů odseparovat volný časový vývoj způsobený  $\hat{H}_0$ )

$$|\psi(t)\rangle = \sum_j d_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} |\psi_j\rangle. \quad (16.25)$$

Schrödingerova rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t)) |\psi(t)\rangle,$$

po dosažení tohoto tvaru  $|\psi(t)\rangle$  a s využitím (16.11) přejde na

$$i\hbar \sum_j \dot{d}_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} |\psi_j\rangle = \sum_j d_j(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \hat{V}(t) |\psi_j\rangle.$$

Skalárním součinem s  $e^{\frac{i}{\hbar} E_k t} \langle \psi_k |$  pak dostaneme pohybové rovnice pro koeficienty rozvoje (16.25)

$$i\hbar \dot{d}_k(t) = \sum_j e^{i\omega_{kj}t} V_{kj}(t) d_j(t), \quad (16.26)$$

s počáteční podmínkou

$$d_k(0) = \delta_{ik}.$$

Přesná amplituda přechodu ze stavu  $|\psi_i\rangle$  do stavu  $|\psi_f\rangle$  je

$$S_{fi}(t, 0) = d_f(t).$$

## Neporuchové rovnice pro dvouhladinový systém

Pro dvouhladinový systém lze v některých případech najít analytické řešení pohybových rovnic (16.26). Nejprve je přepíšeme do maticového tvaru. Vlastní vektory volného hamiltoniánu  $|\psi_{1,2}\rangle$  zvolíme tak, že platí  $E_1 \leq E_2$ , a označíme

$$\omega_{21} = -\omega_{12} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \omega \geq 0.$$

Zavedeme  $d(t)$  jako sloupcový vektor koeficientů rozvoje

$$d(t) = \begin{pmatrix} d_1(t) \\ d_2(t) \end{pmatrix},$$

a matici

$$V^D(t) = \begin{pmatrix} V_{11}(t) & V_{12}(t)e^{-i\omega t} \\ \bar{V}_{12}(t)e^{i\omega t} & V_{22}(t) \end{pmatrix}. \quad (16.27)$$

Operátor  $\hat{V}(t)$  je hermitovský, takže  $V_{11}(t)$  a  $V_{22}(t)$  jsou reálné funkce. Rovnice (16.26) pak lze ekvivalentně zapsat maticově

$$i\hbar \dot{d}(t) = V^D(t) d(t). \quad (16.28)$$



### Konstantní porucha pro dvouhladinový systém

V případě konstantní poruchy  $\hat{V}(t) = \hat{V}$  je matice  $V^D(t)$  (16.27) rovna

$$V^D(t) = \begin{pmatrix} V_{11} & \bar{V}_{21}e^{-i\omega t} \\ V_{21}e^{i\omega t} & V_{22} \end{pmatrix}. \quad (16.29)$$

Má podobný tvar jako matice hamiltoniánu (15.1) pro spin v rotujícím magnetickém poli z kapitoly 15 (až na opačné znaménko  $\omega$ ). Postup řešení rovnice (16.28) je analogický - časovou závislost odseparujeme unitární transformací (rotací)

$$V^D(t) = e^{-\frac{i}{2}\omega t\sigma_3} V^D(0) e^{\frac{i}{2}\omega t\sigma_3}.$$

V rotující soustavě je matice efektivní interakce  $V_{ef}^D$  rovna

$$\begin{aligned} V_{ef}^D &= V^D(0) - \frac{\hbar\omega}{2}\sigma_3 = \begin{pmatrix} V_{11} - \frac{\hbar\omega}{2} & \bar{V}_{21} \\ V_{21} & V_{22} + \frac{\hbar\omega}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{V_{11} + V_{22}}{2} I + \text{Re}V_{21} \sigma_1 + \text{Im}V_{21} \sigma_2 + \frac{V_{11} - V_{22} - \hbar\omega}{2} \sigma_3. \end{aligned}$$

Násobek jednotkové matice je v časovém vývoji irelevantní (způsobí dodatečnou globální fázi, která nemá žádný fyzikální význam). Zbylou část lze zapsat ve tvaru (15.3)

$$V_{ef}^{D'} = \frac{\hbar}{2}\Omega \vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma},$$

pomocí Rabiho frekvence  $\Omega$  a jednotkového vektoru  $\vec{n}_\Omega$  (15.4)

$$\begin{aligned} \Omega &= \sqrt{\Delta^2 + \frac{4}{\hbar^2}|V_{21}|^2}, \quad \Delta = \frac{V_{11} - V_{22}}{\hbar} - \omega, \\ \vec{n}_\Omega &= \frac{1}{\Omega} \left( \frac{2}{\hbar}\text{Re}V_{21}, \frac{2}{\hbar}\text{Im}V_{21}, \Delta \right). \end{aligned} \quad (16.30)$$

Evoluční operátor v Diracově obraze je potom roven (viz. (15.10))

$$\begin{aligned} S(t, 0) &= e^{-\frac{i}{2}\omega t\sigma} e^{-\frac{i}{2}\Omega t\vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma}} \\ &= \left( \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\omega t}{2}\right) \sigma_3 \right) \left( \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) I - i \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma} \right) \\ &= \begin{pmatrix} \left[ \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{-\frac{i}{2}\omega t} & -i\frac{2\bar{V}_{21}}{\hbar\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{-\frac{i}{2}\omega t} \\ -i\frac{2V_{21}}{\hbar\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{\frac{i}{2}\omega t} & \left[ \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) + i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{\frac{i}{2}\omega t} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Pro počáteční podmínku, kdy je částice v čase  $t_0 = 0$  v základním stavu  $\hat{H}_0$ , tj.

$$d(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

je řešením rovnice (16.28) (viz. (15.11))

$$d(t) = S(t, 0) d(0) = \begin{pmatrix} \left[ \cos\left(\frac{\Omega t}{2}\right) - i\frac{\Delta}{\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) \right] e^{-\frac{i}{2}\omega t} \\ -i\frac{2V_{21}}{\hbar\Omega} \sin\left(\frac{\Omega t}{2}\right) e^{\frac{i}{2}\omega t} \end{pmatrix}.$$

Odsud určíme přesné pravděpodobnosti přechodu mezi stavy volného hamiltoniánu za čas  $T$  (viz. (15.12))

$$\begin{aligned} W_{1 \rightarrow 1}(T) &= \cos^2\left(\frac{\Omega T}{2}\right) + \left(\frac{\Delta}{\Omega}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\Omega T}{2}\right), \\ W_{1 \rightarrow 2}(T) &= \frac{4|V_{21}|^2}{\hbar^2\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega T}{2}\right). \end{aligned} \quad (16.31)$$

Vzhledem k (16.30) platí

$$W_{1 \rightarrow 1}(T) + W_{1 \rightarrow 2}(T) = \cos^2\left(\frac{\Omega T}{2}\right) + \underbrace{\frac{\Delta^2 + \frac{4|V_{21}|^2}{\hbar^2}}{\Omega^2}}_1 \sin^2\left(\frac{\Omega T}{2}\right) = 1.$$

Přesný výsledek (16.31) pro přechod mezi stavy  $|1\rangle$  a  $|2\rangle$  můžeme porovnat s poruchovým výsledkem (16.18). Pokud lze  $\hat{V}$  považovat za malou poruchu, tj.

$$\frac{|V_{21}|}{\hbar} \ll \omega, \quad \frac{|V_{11} - V_{22}|}{\hbar} \ll \omega,$$

pak je Rabiho frekvence  $\Omega$  (16.30) srovnatelná s  $\omega$ . V takovém případě je pro krátké časy  $T \ll \frac{2\pi}{\omega}$  přesný výsledek velmi blízký poruchovému

$$W_{1 \rightarrow 2}(T) \approx \frac{4|V_{21}|^2}{\hbar^2\omega^2} \sin^2\left(\frac{\omega T}{2}\right) = W_{1 \rightarrow 2}^{(1)}(T).$$

Porovnání přesných výsledků  $W_{1 \rightarrow 1}(T)$ ,  $W_{1 \rightarrow 2}(T)$  a poruchového vztahu v 1. řádu  $W_{1 \rightarrow 2}^{(1)}(T)$  je na obrázku 16.4.

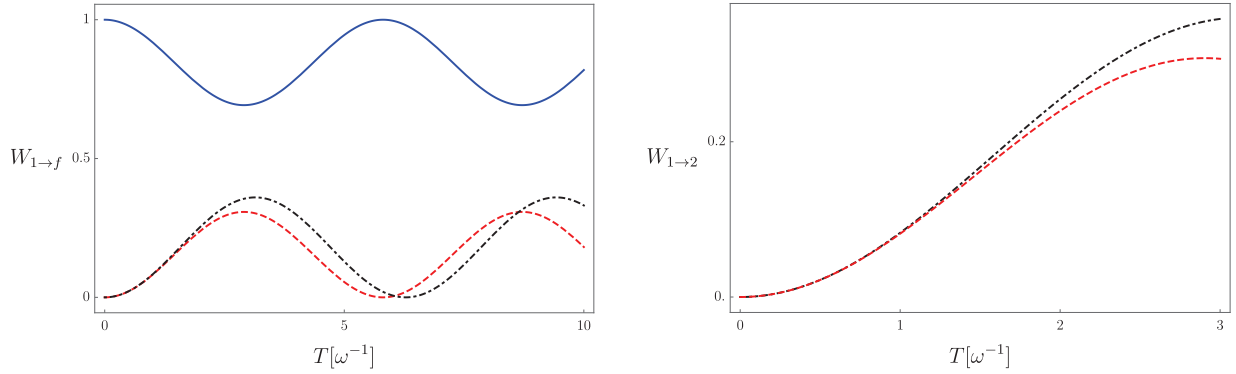
## Harmonická porucha pro dvouhladinový systém, rotating wave aproximace

Přechodovou frekvenci systému přeznačíme na

$$\omega_{21} = -\omega_{12} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \omega_0,$$

a uvažujme harmonickou poruchu tvaru (16.20). Matice interakčního členu v Diracově obraze je

$$V^D(t) = \begin{pmatrix} v_{11}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) & v_{12}e^{-i(\omega+\omega_0)t} + \bar{v}_{21}e^{i(\omega-\omega_0)t} \\ v_{21}e^{-i(\omega-\omega_0)t} + \bar{v}_{12}e^{i(\omega+\omega_0)t} & v_{22}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \end{pmatrix}.$$



Obrázek 16.4: Exaktní pravděpodobnosti přechodu  $W_{1 \rightarrow 1}(t)$  (modrá čára),  $W_{1 \rightarrow 2}(t)$  (červená čárkovaná čára) a pravděpodobnost přechodu v 1. řádu poruchové teorie  $W_{1 \rightarrow 2}^{(1)}(t)$  (černá čerchovaná čára). V obrázku je zvoleno  $V_{11} - V_{22} = 0.1 \hbar\omega$ ,  $|V_{21}| = 0.3 \hbar\omega$ . Rabiho frekvence je potom přibližně  $\Omega \approx 1.08 \omega$ .

V tomto případě obecně neumíme vyřešit pohybové rovnice (16.28) analyticky. Pokud jsme ale blízko rezonance, kdy

$$\Delta = \omega - \omega_0 \approx 0,$$

lze použít tzv. "rotating wave approximation" (RWA). Spočívá v tom, že ve  $V^D(t)$  ponecháme pouze členy úměrné  $e^{\pm i\Delta t}$ . Ostatní členy rychle oscilují a na delší časové škále se jejich vliv vyruší. V RWA je pak interakční člen v Diracově obraze roven

$$V_{RWA}^D(t) = \begin{pmatrix} 0 & \bar{v}_{21}e^{i\Delta t} \\ v_{21}e^{-i\Delta t} & 0 \end{pmatrix}.$$

Má tedy stejný tvar jako pro konstantní poruchu (16.29) s  $V_{11} = V_{22} = 0$  a záměnou  $\omega \rightarrow -\Delta$ . Postup řešení je analogický, efektivní interakce je v tomto případě

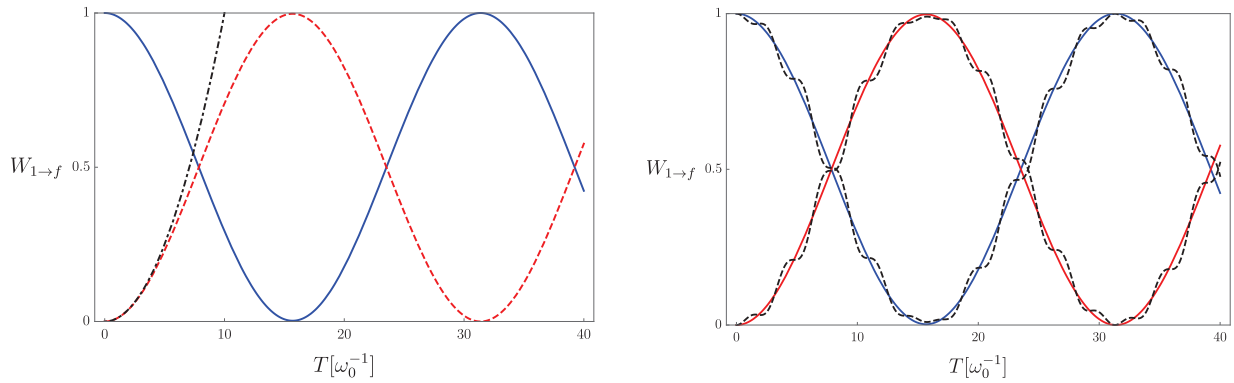
$$V_{ef}^D = V_{RWA}^D(0) + \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & \frac{2}{\hbar}\bar{v}_{21} \\ \frac{2}{\hbar}v_{21} & -\Delta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\Omega\vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma}.$$

Rabiho frekvence  $\Omega$  a jednotkový vektor  $\vec{n}_\Omega$  jsou

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 + \frac{4}{\hbar^2}|v_{21}|^2}, \quad \vec{n}_\Omega = \frac{1}{\Omega} \left( \frac{2}{\hbar}\text{Re } v_{21}, \frac{2}{\hbar}\text{Im } v_{21}, \Delta \right).$$

Pro harmonickou poruchu v RWA jsou tedy pravděpodobnosti přechodu  $W_{i \rightarrow f}^{(RWA)}(T)$  dány vztahy (16.31) s  $\Delta = \omega - \omega_0$ .

Pro ilustraci je na obrázku 16.5 vlevo porovnání výsledků v RWA s 1. řádem poruchového rozvoje (16.24). Poruchový výsledek lze použít jen pro krátké časy. Vpravo je srovnání výsledku v RWA s numerickým řešením rovnic (16.28).



Obrázek 16.5: Vlevo jsou pravděpodobnosti přechodu v RWA (modrá a červená čárkovaná čára) a pravděpodobnost přechodu v 1. řádu poruchového rozvoje (16.24) (černá čerchovaná čára). Vpravo je porovnání pravděpodobností přechodu v RWA s numerickým řešením pohybových rovnic (16.28). V simulacích je zvoleno  $\omega = 1.01 \omega_0$ ,  $v_{ij} = 0.1 \hbar \omega_0$

## Přechody do kontinua, Fermiho zlaté pravidlo

Zaměříme se nyní na přechod do stavu s finální energií  $E_f$ , která buď leží ve spojitém spektru volného hamiltoniánu  $\hat{H}_0$ , nebo v jejím blízkém okolí leží řada dalších diskretních hladin, které od sebe neumíme odlišit. V takovém případě nemá smysl hledat pravděpodobnost přechodu do přesného finální stavu. Můžeme ale zkoumat pravděpodobnost přechodu  $W_{i \rightarrow \mathcal{I}(E_f)}(T)$  do malého okolí  $E_f$

$$\mathcal{I}(E_f) = \left( E_f - \frac{\Delta E}{2}, E_f + \frac{\Delta E}{2} \right), \quad \frac{\Delta E}{E_f} \ll 1,$$

za dlouhý čas  $T$ .

Pracujme nejprve neporuchově, stav částice po čase  $T$  je  $|\psi_i(T)\rangle$ . Označíme (zobecněně) vlastní vektory volného hamiltoniánu jako  $|\alpha\rangle$

$$\hat{H}_0|\alpha\rangle = E(\alpha)|\alpha\rangle,$$

kde  $\alpha$  souhrnně označuje všechna spojitá i diskretní kvantová čísla popisující stav. Pravděpodobnost nalezení částice v nějakém malém okolí  $\mathcal{I}(\alpha_f)$  v čase  $T$  je

$$W_{i \rightarrow f}(T) = \int_{\mathcal{I}(\alpha_f)} d\alpha |\langle \alpha | \psi_i(T) \rangle|^2.$$

Zajímá nás energie finálního stavu, a proto přejdeme od  $\alpha$  k  $E$  a  $\beta$ , kde  $\beta$  zahrnuje všechna další kvantová čísla nutná k popisu stavu. Integrál pak můžeme přepsat do tvaru

$$W_{i \rightarrow f}(T) = \int_{\mathcal{I}(E_f)} \rho(E) dE \int_{\mathcal{I}(\beta_f)} d\beta |\langle \beta, E | \psi_i(T) \rangle|^2, \quad (16.32)$$

kde  $\rho(E)$  je hustota kvantových stavů s energií  $E$ . Například pro volnou částici hraje roli  $\alpha$  hybnost  $\vec{p}$ . Přejdem do sférických souřadnic dostaneme

$$d^3p = p^2 dp d\Omega = \rho(E) dE d\Omega.$$

Pro nerelativistickou částici, kdy  $E(p) = \frac{p^2}{2M}$ , je hustota stavů rovna

$$\rho(E) = p^2 \frac{dp}{dE} = 2ME \frac{d\sqrt{2ME}}{dE} = M\sqrt{2ME}.$$

V dalším budeme uvažovat infinitezimální interval  $\mathcal{I}(\beta_f)$  a omezíme se na 1. řád poruchového rozvoje, tj. skalární součin v (16.32) nahradíme pomocí (16.17) a zapíšeme ve zkratce

$$\int_{\mathcal{I}(\beta_f)} d\beta |\langle \beta, E | \psi_i(T) \rangle|^2 = W_{i \rightarrow \beta_f, E}^{(1)}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T dt e^{i\omega_{E_i} t} V_{(\beta_f, E)_i}(t) \right|^2,$$

kde  $\omega_{E_i} = \frac{E - E_i}{\hbar}$  a  $V_{(\beta_f, E)_i}(t) = \langle \beta_f, E | \hat{V}(t) | \psi_i \rangle$ .

### Konstantní porucha

Pro konstantní poruchu v 1. řádu s použitím (16.18) dostaneme

$$W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathcal{I}(E_f)} |V_{(\beta_f, E)_i}|^2 \rho(E) I_T \left( \frac{E - E_i}{\hbar} \right) dE.$$

Pro funkci  $I_T(\omega)$  platí asymptotické chování

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{I_T(\omega)}{T} = 2\pi \delta(\omega), \quad (16.33)$$

které plyne z limitního vyjádření  $\delta$ -funkce ve tvaru

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2(xt)}{\pi x^2 t} = \delta(x).$$

Má pak smysl zavést rychlost přechodu (pravděpodobnost přechodu za jednotku času) vztahem

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T)}{T}. \quad (16.34)$$

Pro velká  $T$  pak s využitím (16.33) platí

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathcal{I}(E_f)} |V_{(\beta_f, E)_i}|^2 \rho(E) 2\pi \hbar \delta(E - E_i) dE = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \rho(E_f = E_i), \quad (16.35)$$

kde jsme ve zkratce označili  $V_{fi} = V_{(\beta_f, E_f)_i}$ . Vztah (16.35) se nazývá Fermiho zlaté pravidlo. Říká, že pro časově nezávislou poruchu je rychlost přechodu v 1. řádu poruchové teorie konstantní pro dostatečně dlouhý časový interval  $T$ .

## Harmonická porucha

Fermiho zlaté pravidlo platí analogicky i pro harmonickou poruchu. Víme, že v případě diskrétních přechodů pro dlouhé časy platí pro pravděpodobnosti stimulované emise a absorpce vztahy (16.23) a (16.24). Pro přechod do malého intervalu okolo  $E_f$  pak platí

$$W_{i \rightarrow f}^{emi}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathcal{I}(E_f)} |v_{(\beta_f, E)_i}|^2 \rho(E) I_T \left( \frac{E - E_i + \hbar\omega}{\hbar} \right) dE,$$

$$W_{i \rightarrow f}^{abs}(T) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{\mathcal{I}(E_f)} |v_{i(\beta_f, E)}|^2 \rho(E) I_T \left( \frac{E - E_i - \hbar\omega}{\hbar} \right) dE.$$

Pro velká  $T$  pak obdobným způsobem jako v případě časově nezávislé poruchy dostaneme konstantní rychlosti emise a absorpce

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} = \frac{2\pi |v_{if}|^2}{\hbar} \rho(E_f = E_i - \hbar\omega),$$

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{abs} = \frac{2\pi |v_{fi}|^2}{\hbar} \rho(E_f = E_i + \hbar\omega).$$

Pro harmonickou poruchu tvaru (16.20) platí tzv. princip detailní rovnováhy

$$\frac{\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi}}{\rho(E_f)} = \frac{\Gamma_{f \rightarrow i}^{abs}}{\rho(E_i)}.$$

## Rychlosti přechodu pro diskrétní hladiny

Rychlosti přechodu můžeme zavést i pro přeskok mezi diskrétními hladinami. Pro časově nezávislou poruchu z výsledku (16.18) a asymptotického chování (16.33) pro velká  $T$  plyne

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{W_{i \rightarrow f}^{(1)}(T)}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i),$$

kde  $\delta$ -funkce představuje zákon zachování energie. Podobně pro harmonickou poruchu z (16.23) a (16.24) dostaneme

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} = \frac{2\pi |v_{if}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i + \hbar\omega),$$

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{abs} = \frac{2\pi |v_{fi}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega). \quad (16.36)$$

$\delta$ -funkce zde vyjadřuje to, že ke stimulované emisi nebo absorpci dochází pouze v rezonanci, kdy  $E_f = E_i \pm \hbar\omega$ .

## Příklady

**Cvičení 47.** Uvažujte lineární harmonický oscilátor s nábojem  $q$  v prvním excitovaném stavu  $|1\rangle$ . V čase  $t_0 = 0$  zapneme homogenní elektrické pole

$$E(t) = V_0 e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad \tau > 0, \quad V_0 \ll 1.$$

Určete, do jakých stavů volného hamiltoniánu může oscilátor vlivem poruchy přejít v 1. řádu poruchového rozvoje, a určete pravděpodobnost přechodu v limitě  $T \rightarrow \infty$ .

**Návod:** Hamiltonián LHO má vlastní vektory  $|n\rangle$  a vlastní čísla

$$\hat{H}_0 |n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega |n\rangle.$$

Operátor poruchy je

$$\hat{V}(t) = -q \hat{X} E(t).$$

Amplituda přechodu ze stavu  $|1\rangle$  do stavu  $|n\rangle$  za čas  $T$  v 1. řádu je podle (16.15) rovna

$$S_{n1}^{(1)}(T, 0) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt e^{i\omega_{n1}t} V_{n1}(t).$$

Maticové elementy operátoru poruchy

$$V_{n1}(t) = -q V_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \langle n | \hat{X} | 1 \rangle,$$

jsou nenulové jen pro  $n = 0$  nebo  $n = 2$ . Pro tuto poruchu je tedy možný pouze přeskok o jednu hladinu nahoru nebo dolů. S použitím posunovacích operátorů

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger),$$

nalezneme

$$\langle 0 | \hat{X} | 1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega}}, \quad \langle 2 | \hat{X} | 1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}.$$

Pravděpodobnost přechodu na základní hladinu je potom

$$W_{1 \rightarrow 0}^{(1)} = \left| S_{n1}^{(1)}(\infty, 0) \right|^2 = \frac{q^2 V_0^2}{\hbar^2} \frac{\hbar}{2M\omega} \left| \int_0^\infty dt e^{-\frac{t}{\tau}} e^{-i\omega t} \right|^2 = \frac{q^2 V_0^2}{2M\hbar\omega} \frac{1}{\omega^2 + 1/\tau^2}.$$

Pravděpodobnost přechodu na 2. excitovanou hladinu je dvojnásobná

$$W_{1 \rightarrow 2}^{(1)} = \frac{q^2 V_0^2}{M\hbar\omega} \frac{1}{\omega^2 + 1/\tau^2} = 2W_{1 \rightarrow 0}^{(1)}$$

**Cvičení 48.** V RWA nalezněte pravděpodobnost excitace atomu za čas  $T$  pro dvouhladinový atom interagující s klasickou elektrickou vlnou ze cvičení 46. V čase  $t = 0$  je atom v základním stavu.

**Návod:** Interakční člen v Diracově obraze je ve vztahu (14.27). V RWA má potom tvar

$$V_{RWA}^D(t) = -\hbar \begin{pmatrix} 0 & \bar{\alpha}e^{i\Delta t} \\ \alpha e^{-i\Delta t} & 0 \end{pmatrix},$$

kde  $\Delta = \omega - \omega_0$ . Efektivní interakční člen v rotující soustavě je tedy

$$V_{ef}^D = V_{RWA}^D(0) + \frac{\hbar\Delta}{2}\sigma_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \Delta & -2\bar{\alpha} \\ -2\alpha & -\Delta \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\Omega\vec{n}_\Omega \cdot \vec{\sigma}.$$

Rabiho frekvence  $\Omega$  a jednotkový vektor  $\vec{n}_\Omega$  jsou rovny

$$\Omega = \sqrt{\Delta^2 + 4|\alpha|^2}, \quad \vec{n}_\Omega = \frac{1}{\Omega}(-2\text{Re}\alpha, -2\text{Im}\alpha, \Delta).$$

Pravděpodobnost excitace atomu v čase  $T$  bude podle (16.31) rovna

$$W_{g \rightarrow e}^{(RWA)}(T) = \frac{4|\alpha|^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega T}{2}\right).$$

**Cvičení 49.** Uvažujte jednoelektronový atom interagující s klasickou elektromagnetickou rovinnou vlnou popsanou vektorovým potenciálem

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \vec{A}_0(\vec{x})e^{-i\omega t} + \vec{A}_0^*(\vec{x})e^{i\omega t} = A_0\vec{\epsilon}\left(e^{i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)} + e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{x}-\omega t)}\right), \quad (16.37)$$

kde  $\vec{\epsilon}$  je jednotkový vektor. Určete rychlosti stimulované absorpce a emise (16.36).

**Návod:** Volný hamiltonián elektronu v atomu má tvar

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}^2}{2M} + V_0(\vec{x}).$$

Vlivem vnějšího elektromagnetického pole dostaneme hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{1}{2M} \left( \hat{\vec{P}} + e\vec{A} \right)^2 + V_0(\vec{x}) = \hat{H}_0 + \frac{e}{2M} \left( 2\vec{A} \cdot \hat{\vec{P}} - i\hbar\vec{\nabla} \cdot \vec{A} \right) + \frac{e^2 A^2}{2M}.$$

Poslední člen zanedbáme a budeme pracovat v Coulombově kalibraci

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0.$$

Hamiltonián má pak tvar

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t),$$



kde interakční člen je roven

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{M} \vec{A}(t) \cdot \hat{\vec{P}}.$$

Pro porovnání s plně kvantovým výpočtem (který si ukážeme na konci semestru) upravíme nejprve vektorový potenciál a vyjádříme  $A_0$  pomocí hustoty energie na jeden foton  $\frac{\hbar\omega}{V}$  (celý systém bereme v konečném objemu  $V$ ). Coulombova kalibrace pro rovinnou vlnu (16.37) znamená

$$\vec{k} \cdot \vec{\varepsilon} = 0,$$

tj.  $\vec{A}$  leží v rovině kolmé na směr šíření vlny  $\vec{k}$ . Vlna je řešením d'Alembertovy rovnice

$$\square \vec{A} = 0,$$

takže  $k = \frac{\omega}{c}$ . Hustota energie rovinné vlny je

$$u = \frac{1}{2} \left( \varepsilon_0 |\vec{E}|^2 + \frac{1}{\mu_0} |\vec{B}|^2 \right).$$

Určíme elektrickou intenzitu a magnetickou indukci

$$\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = i\omega A_0 \vec{\varepsilon} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} - e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) = -2\omega A_0 \vec{\varepsilon} \sin(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t),$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = i(\vec{k} \times \vec{\varepsilon}) A_0 \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} - e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) = \frac{1}{c} \frac{\vec{k}}{k} \times \vec{E}.$$

Hustota energie je potom ( $\frac{1}{\mu_0} = \varepsilon_0 c^2$ )

$$u = 4\varepsilon_0 A_0^2 \omega^2 \sin^2(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t).$$

Vystředováním za dlouhý čas  $T$  dostaneme

$$\langle u \rangle = 2\varepsilon_0 A_0^2 \omega^2 \equiv \frac{\hbar\omega}{V}.$$

$A_0$  lze tedy vyjádřit jako

$$A_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{2V\varepsilon_0\omega}}.$$

Interakční člen je pak roven

$$\hat{V}(t) = \frac{e}{M} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\varepsilon_0\omega}} \left( e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} \right) \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{P}} \equiv \hat{v} e^{-i\omega t} + \hat{v}^\dagger e^{i\omega t},$$

kde jsme označili

$$\hat{v} = \frac{e}{M} \sqrt{\frac{\hbar}{2V\varepsilon_0\omega}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \vec{\varepsilon} \cdot \hat{\vec{P}}.$$

Interakce je tedy harmonická porucha a pro rychlosti stimulované emise a absorpce z (16.36) plyne

$$\begin{aligned}\Gamma_{i \rightarrow f}^{emi} &= \frac{2\pi |v_{if}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i + \hbar\omega) = \frac{\pi e^2}{M^2 V \varepsilon_0 \omega} \left| \langle f | e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\varepsilon} \cdot \hat{P} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i + \hbar\omega), \\ \Gamma_{i \rightarrow f}^{abs} &= \frac{2\pi |v_{fi}|^2}{\hbar} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{\pi e^2}{M^2 V \varepsilon_0 \omega} \left| \langle f | e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{\varepsilon} \cdot \hat{P} | i \rangle \right|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega).\end{aligned}\tag{16.38}$$

Pokud je klasického pole nulové  $\vec{A} = 0$ , pak  $\hat{H}_0$  je celkový hamiltonián,  $|i\rangle$  a  $|f\rangle$  jsou stacionární stavy a k žádným přechodům nedochází. V reálných situacích ale dochází k tzv. spontánní emisi, kdy elektron z excitované hladiny za typicky velmi krátký čas přeskočí na nižší hladinu i bez přítomnosti vnějšího pole. Semiklasická teorie interakce látky a záření (atom je kvantový, elektromagnetické pole klasické) spontánní emisi vysvětlit nedokáže. Jak uvidíme, spontánní emise je důsledek kvantování elektromagnetického pole.