ΔΙΑΤΑΡΑΓΜΕΝΟ ΣΥΣΤΗΜΑ (δηλαδή εντός ΗΜ πεδίου) χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{U_\varepsilon(\vec{r},t)}_{\text{δυναμική ενέργεια της διαταραχής}} \qquad i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi(\vec{r},t)$$

(μικρή σε σχέση με $\hat{H}_0$)

με αρχική συνθήκη

$$\Psi(\vec{r},0) = \Phi(\vec{r}) = \text{γνωστή}$$

Υποθέτουμε ότι μπορούμε να αναπτύξουμε τις $\Psi(\vec{r},t)$ και $\Psi(\vec{r},0)=\Phi(\vec{r})$ στη βάση των ιδιοσυναρτήσεων του αδιατάρακτου προβλήματος $\{\Phi_k(\vec{r})\}$

$$\hat{H}_0 \Phi_k(\vec{r}) = E_k \Phi_k(\vec{r})$$

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_k f_k \Phi_k(\vec{r})$$

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_k C_k(t)\, e^{-i\Omega_k t}\, \Phi_k(\vec{r}) \qquad E_k = \hbar\Omega_k$$

$$\Rightarrow C_k(0) = f_k$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_k C_k(t)\, e^{-i\Omega_k t}\, \Phi_k(\vec{r}) = \left[\hat{H}_0 + U_\varepsilon(\vec{r},t)\right] \sum_k C_k(t)\, e^{-i\Omega_k t}\, \Phi_k(\vec{r})$$

$$A: \; i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t)\, e^{-i\Omega_k t}\, \Phi_k(\vec{r}) + \cancel{\sum_k C_k(t)\, E_k\, e^{-i\Omega_k t}\, \Phi_k(\vec{r})}$$

$$\Delta: \; \cancel{\sum_k C_k(t)\, e^{-i\Omega_k t}\, E_k \Phi_k(\vec{r})} + U_\varepsilon(\vec{r},t) \sum_k C_k(t)\, e^{-i\Omega_k t}\, \Phi_k(\vec{r})$$

επί $\int dV\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})$ ... δηλ. εσωτερικό γινόμενο ...

$$\Rightarrow i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t)\, e^{-i\Omega_k t} \underbrace{\int dV\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, \Phi_k(\vec{r})}_{\delta(k'-k)} = \sum_k C_k(t)\, e^{-i\Omega_k t} \underbrace{\int dV\, \Phi^*_{k'}(\vec{r})\, U_\varepsilon(\vec{r},t)\, \Phi_k(\vec{r})}_{:= U_{\varepsilon k'k}(t)}$$

$$= \langle \Phi_{k'} | U_\varepsilon(\vec{r},t) | \Phi_k \rangle$$

$$\Rightarrow i\hbar\, \dot{C}_{k'}(t)\, e^{-i\Omega_{k'} t} = \sum_k C_k(t)\, e^{-i\Omega_k t}\, U_{\varepsilon k'k}(t)$$

$$\boxed{\dot{C}_{k'}(t) = \frac{-i}{\hbar} \sum_k C_k(t)\, e^{i(\Omega_{k'}-\Omega_k)t}\, U_{\varepsilon k'k}(t)}$$

στοιχεία πίνακα της δυναμ. ενέργειας της διαταραχής

Γενικώς, για οποιοδήποτε φυσικό μέγεθος M, βρίσκουμε τα στοιχεία πίνακά του ως

$$M_{k'k} := \int dV\, \Phi_{k'}^{*}(\vec{r})\, \hat{M}(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla})\, \Phi_k(\vec{r}) = \langle \Phi_{k'} | \hat{M} | \Phi_k \rangle$$

$|\psi\rangle$ ket

κομψός συμβολισμός

$\langle\phi|$ bra

π.χ. $\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r})$ $\quad \langle \psi | \vec{r} \rangle = \psi(\vec{r})^{*}$

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int d^3r\, \varphi(\vec{r})^{*} \psi(\vec{r})$$

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \int d^3r\, \varphi(\vec{r})^{*} \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla})\, \psi(\vec{r})$$

ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΠΙΝΑΚΑ ΤΕΛΕΣΤΗ

ΔΗΛΑΔΗ
$$\langle \vec{r} | \phi \rangle = \phi(\vec{r})$$

$$\langle \psi | \hat{M} | \phi \rangle = \int dx'' \int dx' \langle \psi | x'' \rangle \langle x'' | \hat{M} | x' \rangle \langle x' | \phi \rangle$$

$$= \int dx'' \int dx' \, \psi(x'')^* \langle x'' | \hat{M} | x' \rangle \phi(x')$$

$$\langle x'' | \hat{x} | x' \rangle = \langle x'' | x | x' \rangle = x' \langle x'' | x' \rangle = x' \delta(x''-x') = x'' \delta(x''-x')$$

$$\langle x'' | \hat{p} | x' \rangle = \ldots \text{αποδεικνυεται} \ldots = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x''-x') \quad \Rightarrow$$

$\Rightarrow$ (αναπτυσσονται σε δυναμεις του $\hat{x}$ και του $\hat{p}$)

$$\langle x'' | \hat{M} | x' \rangle = M\left(x'', -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right) \delta(x''-x') \qquad 1\Delta$$

$$\langle \vec{r}'' | \hat{M} | \vec{r}' \rangle = M(\vec{r}'', -i\hbar \vec{\nabla}'') \, \delta(\vec{r}''-\vec{r}') \qquad 3\Delta$$

Οπότε
$$\langle \Phi_\ell | \hat{M} | \Phi_k \rangle = \int d^3 r'' \int d^3 r' \langle \Phi_\ell | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \hat{M} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \Phi_k \rangle$$

$$= \int d^3 r'' \int d^3 r' \, \Phi_\ell^*(\vec{r}'') \, M(\vec{r}'', -i\hbar \vec{\nabla}'') \, \delta(\vec{r}''-\vec{r}') \, \Phi_k(\vec{r}')$$

$$= \int d^3 r'' \, \Phi_\ell^*(\vec{r}'') \, M(\vec{r}'', -i\hbar \vec{\nabla}'') \, \Phi_k(\vec{r}'')$$

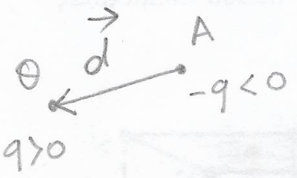
ή
$$= \int d^3 r \, \Phi_\ell^*(\vec{r}) \, M(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \, \Phi_k(\vec{r})$$

Επειδή $\int dV\, |\Psi(\vec r,t)|^2 = 1 \iff \int dV\, \Psi^*(\vec r,t)\,\Psi(\vec r,t) = 1$

$$\Rightarrow \int dV \sum_k C_k^*(t)\, e^{+i\Omega_k t}\, \Phi_k^*(\vec r) \sum_{k'} C_{k'}(t)\, e^{-i\Omega_{k'} t}\, \Phi_{k'}(\vec r) = 1$$

$$\Rightarrow \sum_k \sum_{k'} e^{i(\Omega_k-\Omega_{k'})t}\, C_k^*(t)\, C_{k'}(t) \cdot \underbrace{\int dV\, \Phi_{k'}^*(\vec r)\, \Phi_k(\vec r)}_{\delta_{k'k}} = 1$$

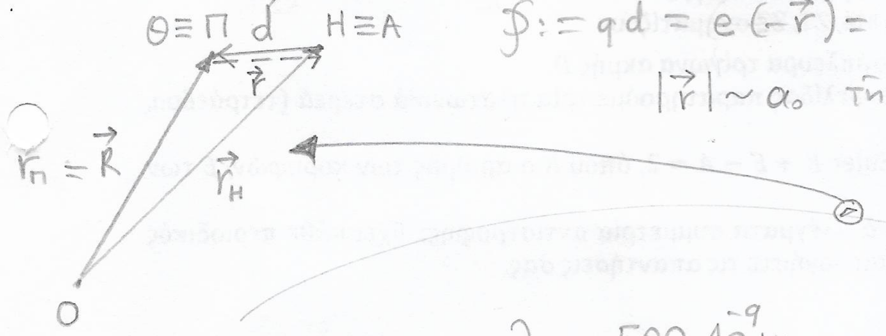
$$\Rightarrow \sum_k |C_k(t)|^2 = 1 \Rightarrow \sum_k |C_k(0)|^2 = 1 \Rightarrow \sum_k |f_k|^2 = 1$$



$\vec d = \vec{A\Theta}$ $\quad \vec{\wp} := q\vec d$

ηλεκτρική διπολική ροπή
electric dipole moment

Έστω Άτομο Υδρογόνου



$\vec{\wp} := q\vec d = e(-\vec r) = -e\vec r$

$|\vec r| \sim a_0$ της τάξεως της ακτίνας Bohr

$a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}\, m$

$$\frac{\lambda}{a_0} \approx \frac{500 \cdot 10^{-9}\, m}{0.5 \cdot 10^{-10}\, m} = 10^4$$

π.χ. οπτικά μήκη κύματος $\lambda \approx 500\, nm$

Άρα στις παρούσες συνθήκες το ηλεκτρικό πεδίο είναι <u>πρακτικά ομογενές</u>! στο χώρο πού καλύπτει το σύστημά μας (εδώ άτομο)

ομογενές $\leftarrow$ ορισμοί $\rightarrow$ ισότροπο

Ἀς περιοριστοῦμε σε δυνάμεις στο ηλεκτρόνιο, οι οποίες προέρχονται από το ηλεκτρικό πεδίο οδεύοντος μονοχρωματικού και πολωμένου ΗΜ κύματος.

$$\boxed{\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_a \exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{r}_H - \omega t + \phi\right)\right]}$$

$\vec{\mathcal{E}}_a$: καθορίζει την πόλωση

$\omega = 2\pi\nu$ — ω: κυκλική συχνότητα, ν: συχνότητα

$\vec{k}$: κυματάνυσμα με μέτρο $k = \frac{2\pi}{\lambda}$

λ: μήκος κύματος

ϕ: αυθαίρετη φάση

$\boxed{\vec{r}_H \simeq \vec{R}}$ για την κλίμακα μεγέθους που μας αφορά εδώ.

$$\frac{\lambda}{a_0} \simeq 10^4 \Rightarrow \lambda >> a_0 \sim |\vec{r}|$$

Δηλαδή το ηλεκτρικό πεδίο είναι πρακτικά ομογενές

$$\vec{\mathcal{E}} \approx \vec{\mathcal{E}}_a \exp\left[i\left(\vec{k}\cdot\vec{R} - \omega t + \phi\right)\right] = \underbrace{\vec{\mathcal{E}}_a \exp\left[i\vec{k}\cdot\vec{R} + \phi\right]}_{:=\vec{\mathcal{E}}_0} \cdot \exp(-i\omega t)$$

$$\Rightarrow \quad \vec{\mathcal{E}} \simeq \vec{\mathcal{E}}_0 \cdot \exp(-i\omega t) = \vec{\mathcal{E}}(t)$$

Δηλαδή το ηλεκτρικό πεδίο έχει πρακτικά μόνο χρονική εξάρτηση.

$V(\vec{r}, t)$ δυναμικό

$U(\vec{r}, t)$ δυναμική ενέργεια

$$\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla} V$$

$$\left.\begin{array}{l} \vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla} V \\ dV = \dfrac{\partial V}{\partial x}dx + \dfrac{\partial V}{\partial y}dy + \dfrac{\partial V}{\partial z}dz = \vec{\nabla} V \cdot d\vec{r} \end{array}\right\} \Rightarrow dV = -\vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{r}$$

$$\Rightarrow V(\vec{r},t) - V(\vec{0},t) = -\vec{\mathcal{E}}\cdot\vec{r} \Rightarrow V(\vec{r},t) = -\vec{\mathcal{E}}\cdot\vec{r}$$

θέτουμε μηδέν

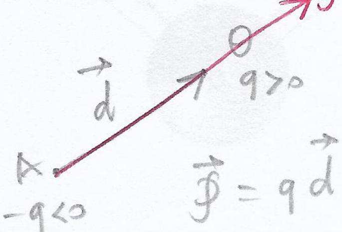
$$\Rightarrow \boxed{U(\vec{r},t) = e\,\vec{\mathcal{E}}\cdot\vec{r} = -\vec{p}\cdot\vec{\mathcal{E}}(t)}$$

Το σύνολο των υποθέσεων, οι οποίες οδήγησαν στη δυναμική ενέργεια της διαταραχής της μορφής αυτής, ονομάζεται προσέγγιση δίπολου (dipole approximation)

Υπενθύμιση Αναλογιών

$\vec{E}$ (Ηλεκτρικό Πεδίο)

$\vec{p} = q\vec{d}$

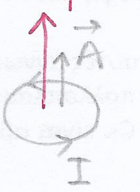


$\vec{p} = q\vec{d}$

$\vec{d} = \vec{A\Theta}$

$\vec{B}$ (Μαγνητική Επαγωγή)

$\vec{\mu} = I\vec{A}$



φορτίο

ή $\vec{\mu} = \frac{q}{2m}(\vec{L} + g\vec{S})$

μάζα

$\vec{p} = q\vec{d}$

ηλεκτρική διπολική ροπή

electric dipole moment

$\vec{\mu} = I\vec{A}$ ή $\vec{\mu} = \frac{q}{2m}(\vec{L} + g\vec{S})$

μαγνητική διπολική ροπή

magnetic dipole moment

$U_E = -\vec{p}\cdot\vec{E}$ δυναμική ενέργεια potential energy

$U_B = -\vec{\mu}\cdot\vec{B}$

$\vec{\tau} = \vec{p}\times\vec{E}$ (μηχανική) ροπή torque

$\vec{\tau} = \vec{\mu}\times\vec{B}$

$[\vec{p}] = Cm$

$[\vec{\mu}] = Am^2$

$F = BIl$

$N = TAm$

$[U_E] = Cm\cdot\frac{V}{m} = CV = Joule$

$[U_B] = Am^2\cdot T = Nm = Joule$

$[\vec{\tau}] = \cancel{C}m\cdot\frac{N}{\cancel{C}} = N\cdot m$

$[\vec{\tau}] = Am^2T = Nm$

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp(-i\omega t) = \vec{\mathcal{E}}(t)$$

θεωρώντας $\vec{\mathcal{E}}_0 \parallel \hat{z}$ και παίρνοντας το πραγματικό μέρος

$$\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}_0 \hat{z} \cos\omega t$$

Άρα $U_{\mathcal{E}} = -\vec{p}\cdot\vec{\mathcal{E}} = -(-e\vec{r})\cdot \mathcal{E}_0 \hat{z}\cos\omega t = e\mathcal{E}_0 z \cos\omega t$

$$\boxed{U_{\mathcal{E}} = e\mathcal{E}_0 z \cos\omega t}$$

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = \int dV\, \Phi_{k'}^*(\vec{r})\, e\mathcal{E}_0 z \cos\omega t\, \Phi_k(\vec{r}) \Rightarrow$$

$$\boxed{U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos\omega t \underbrace{\int dV\, \Phi_{k'}^*(\vec{r})\, z\, \Phi_k(\vec{r})}_{:= Z_{k'k}} = e\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, Z_{k'k}}$$

τα Z_{kk} έχουν τις ιδιότητες

① $Z_{kk} = \int dV\, \underbrace{z}_{\text{περιττή}}\, \underbrace{|\Phi_k(\vec{r})|^2}_{\text{άρτια}} = 0$

εφ' όσον οι ιδιοσυναρτήσεις είναι άρτιες ή περιττές (όπως ισχύει στα άτομα, στα συμμετρικά κβαντικά φρέατα κλπ)

② $Z_{k'k}^* = \left(\int dV\, \Phi_{k'}^*(\vec{r})\, z\, \Phi_k(\vec{r})\right)^* = \int dV\, \Phi_k^*(\vec{r})\, z\, \Phi_{k'}(\vec{r}) = Z_{kk'}$

Δηλαδή συνοπτικά

① $Z_{kk} = 0$

② $Z_{k'k}^* = Z_{kk'}$ και $Z_{k'k} = Z_{kk'}$ αν οι ιδιοσυναρτήσεις είναι πραγματικές

$$\vec{p}_{k'k} := \int dV\, \Phi_{k'}^*(\vec{r})(-e)\vec{r}\, \Phi_k(\vec{r})$$

$$p_{zk'k} = (-e)\int dV\, \Phi_{k'}^*(\vec{r})\, z\, \Phi_k(\vec{r}) = (-e)\cdot Z_{k'k}$$

$$\boxed{U_{\mathcal{E}k'k}(t) = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\; p_{zk'k}}$$

Ας εστιάσουμε σε διστάθμικό σύστημα

E_2 ———— $\Phi_2(\vec{r})$

E_1 ———— $\Phi_1(\vec{r})$

$$U_{\varepsilon 12}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, Z_{12} = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, \wp_{z12}$$

$$U_{\varepsilon 21}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, Z_{21} = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, \wp_{z21}$$

$$U_{\varepsilon kk}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, Z_{kk} = 0$$

Αν οι ιδιοσυναρτήσεις είναι πραγματικές

$$\wp_{z12} = (-e)Z_{12} = (-e)Z_{21} = \wp_{z21} := \wp_z := \wp$$

Τελικά

$$U_{\varepsilon 12}(t) = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, \wp$$

$$U_{\varepsilon 21}(t) = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, \wp$$

$$U_{\varepsilon kk}(t) = 0\,, \quad k=1 \text{ ή } k=2$$

τελικά

$$\boxed{\begin{aligned} U_{\varepsilon k'k}(t) &= -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, \wp\,, & k' &\neq k \\ U_{\varepsilon k'k}(t) &= 0\,, & k' &= k \end{aligned}}$$

$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \Leftrightarrow \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar$ και $\langle x''|$ και $|x'\rangle$

$$\langle x''|\hat{x}\hat{p}|x'\rangle - \langle x''|\hat{p}\hat{x}|x'\rangle = i\hbar \langle x''|x'\rangle$$

$$\langle x''|x''\hat{p}|x'\rangle - \langle x''|\hat{p}\, x'|x'\rangle = i\hbar \langle x''|x'\rangle$$

$$x'' \langle x''|\hat{p}|x'\rangle - x' \langle x''|\hat{p}|x'\rangle = i\hbar\, \delta(x''-x')$$

$$\left.\begin{aligned} &(x''-x')\, \underline{\langle x''|\hat{p}|x'\rangle} = i\hbar\, \delta(x''-x') \\ &\delta(x''-x') = -(x''-x')\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x') \end{aligned}\right\} \Rightarrow$$

$$\cancel{(x''-x')}\, \underline{\langle x''|\hat{p}|x'\rangle} = i\hbar\,(-1)\,\cancel{(x''-x')}\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x') \Rightarrow$$

$$\underline{\langle x''|\hat{p}|x'\rangle} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x''}\delta(x''-x')$$

Θα αποδείξουμε πρώτα ότι $x\,\delta'(x) = -\delta(x)$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, x\,\delta'(x) f(x) = x f(x)\delta(x) - \int dx\, \delta(x)\,(x f(x))' =$$

$$= x f(x)\delta(x) - \int dx\, \delta(x)\,(f(x) + x f'(x))$$

$$= x f(x)\delta(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \underline{\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta(x) f(x)} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta(x)\, x f'(x)$$

$$\underline{-\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta(x) f(x)}$$