ΔΙΑΤΑΡΑΓΜΕΝΟ ΣΥΣΤΗΜΑ (εντός ΗΜ πεδίου) χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών 1

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \underbrace{U_\varepsilon(\vec{r},t)}_{} \quad (1) \qquad i\hbar\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r},t) \quad (2)$$

δυναμική ενέργεια της διαταραχής (μικρή σε σχέση με H_0)

με αρχική συνθήκη $\Psi(\vec{r},0) = \Phi(\vec{r})$ = 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 $\{\Phi_k(\vec{r})\}$

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

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

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_k C_k(t)\, e^{-i\Omega_k t}\,\Phi_k(\vec{r}) \quad (3) \qquad E_k = \hbar\Omega_k$$

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

(1)(2)(3) $\Rightarrow$

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

$$A' = i\hbar\sum_k \dot{C}_k(t)\,e^{-i\Omega_k t}\,\Phi_k(\vec{r}) + \cancel{\sum_k C_k(t)\,E_k\,e^{-i\Omega_k t}\,\Phi_k(\vec{r})}$$

$$\Delta' = \cancel{\sum_k C_k(t)\,e^{-i\Omega_k t}\,E_k\Phi_k(\vec{r})} + U_\varepsilon(\vec{r},t)\sum_k C_k(t)\,e^{-i\Omega_k t}\,\Phi_k(\vec{r})$$

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 δυναμικής 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. $\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r}) \qquad \langle \psi | \vec{r} \rangle = \psi(\vec{r})^{*}$

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

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

Στοιχεια Πινακα Τελεστη

ΔΗΛΑΔΗ

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

$\langle \psi | \vec{r} \rangle = \psi(\vec{r})^*$

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

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

Σχέση πληρότητας

$$\int dx \, |x\rangle \langle x| = 1$$

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

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

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

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

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

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

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

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

ή

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

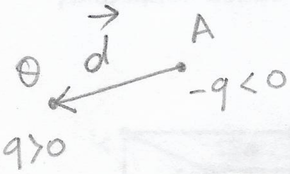
$$\underline{-\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\delta(x) f(x)}$$

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

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

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

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

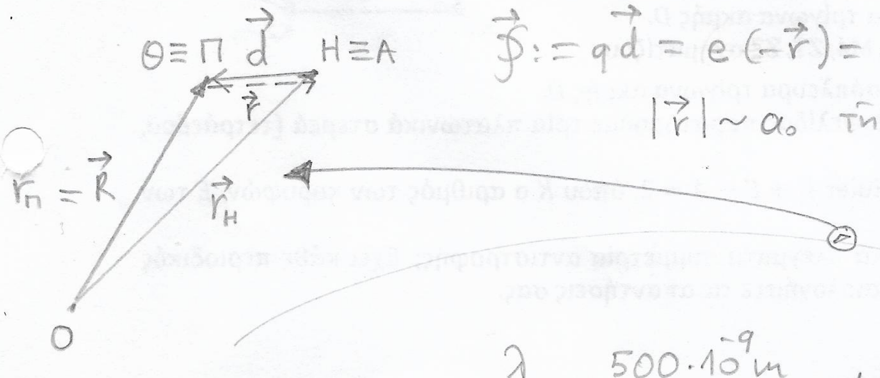


$\vec d = \vec{A\Theta}$ $\qquad \vec{\mathfrak{p}} := q\vec d$

ηλεκτρική διπολική ροπή
electric dipole moment

Έστω Άτομο Υδρογόνου

<u>ΥΠΟΘΕΣΗ</u> $\lambda \gg$ μέγεθος του υπό μελέτη συστήματος



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

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

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

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

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

Άρα στις παρούσες συνθήκες το ηλεκτρικό πεδίο είναι <u>πρακτικά ομογενές</u>!

στο χώρο που καλύπτει το σύστημά μας (εδώ άτομο)

ομογενές $\leftarrow$ ορισμοί $\rightarrow$ ισότροπο

Ας περιοριστούμε σε δυνάμεις, στο ηλεκτρόνιο, οι οποίες προέρχονται από το <u>ηλεκτρικό πεδίο</u> <u>οδεύοντος</u>, <u>μονοχρωματικού</u> και <u>πολωμένου</u> ΗΜ κύματος.

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

$\vec{\mathcal{E}}_a$: 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 <u>πρακτικά</u> <u>ομογενές</u>

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

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

Δηλαδή το ηλεκτρικό πεδίο έχει <u>πρακτικά</u> <u>μόνο</u> <u>χρονική</u> <u>εξάρτηση</u>

$V(\vec{r},t)$ δυναμικό

$U(\vec{r},t)$ δυναμική ενέργεια

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

$$\Rightarrow V(\vec{r},t) - \underbrace{V(\vec{0},t)}_{\text{θέτουμε μηδέν}} = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} \Rightarrow V(\vec{r},t) = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}$$

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

Το σύνολο των υποθέσεων, οι οποίες οδήγησαν στη δυναμική ενέργεια της διαταραχής της μορφής αυτής, ονομάζεται <u>προσέγγιση διπόλου (dipole approximation)</u>

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

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

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

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 σε άτομα, σε 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

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

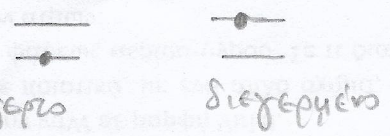
$$p_{zk'k} = (-e)\int dV\, \Phi_{k'}^*(\vec{r})\, z\, \Phi_k(\vec{r}) = (-e)\cdot z_{k'k}$$

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

Ας εστιάσουμε σε διστάθμικό σύστημα

$$E_2 \;\text{———}\; \Phi_2(\vec r)$$

$$E_1 \;\text{———}\; \Phi_1(\vec r)$$



$$U_{\mathcal{E}12}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos\omega t \, z_{12} = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t \, p_{z12}$$

$$U_{\mathcal{E}21}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos\omega t \, z_{21} = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t \, p_{z21}$$

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

Αν οι ιδιοσυναρτήσεις είναι πραγματικές

$$p_{z12} = (-e)\, z_{12} = (-e)\, z_{21} = p_{z21} := p_z := p$$

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

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

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

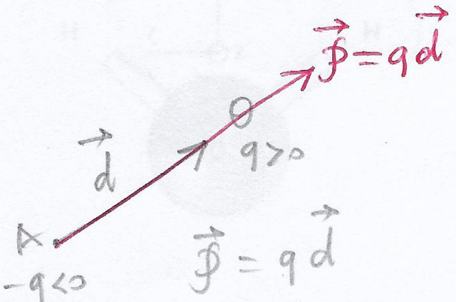
τελικά

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

Ὑπενθύμιση Ἀναλογιῶν

$\vec{E}$ (Ἠλεκτρικό Πεδίο)

$\vec{B}$ (Μαγνητική Ἐπαγωγή)



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

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

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

φορτίο

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

μάζα

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

ἠλεκτρική διπολική ροπή

electric dipole moment

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

μαγνητική διπολική ροπή

magnetic dipole moment

$U_E=-\vec{p}\cdot\vec{E}$ δυναμική ἐνέργεια potential energy $U_B=-\vec{\mu}\cdot\vec{B}$

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

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

$F=BIl$

$N=TAm$

$[U_E]=Cm\dfrac{V}{m}=CV=\text{Joule}$ $[U_B]=Am^2\cdot T=Nm=\text{Joule}$

$[\vec{\tau}]=\cancel{C}m\dfrac{N}{\cancel{C}}=N\cdot m$ $[\vec{\tau}]=Am^2T=Nm$