ΔΙΑΤΑΡΑΓΜΕΝΟ ΣΥΣΤΗΜΑ (εντός ΗΜ πεδίου)

χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U_\varepsilon(\vec{r},t) \quad ①$$

U_ε: δυναμική ενέργεια της διαταραχής (μικρή σε σχέση με H_0)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r},t) \quad ②$$

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 $\{\Phi_k(\vec{r})\}$

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

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

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

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

①②③ $\Rightarrow$

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

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

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

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 πληρότητος

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

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

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

$\Rightarrow$ (αναπτύσσονται σε δυνάμεις 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 $\langle\Phi_\ell|\hat{M}|\Phi_k\rangle = \int d^3r'' \int d^3r' \langle\Phi_\ell|\vec{r}''\rangle\langle\vec{r}''|\hat{M}|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\Phi_k\rangle$

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

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

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 $|x'\rangle$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

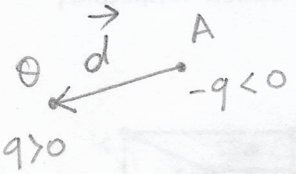
$$-\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \delta(x) f(x)$$

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

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

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

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

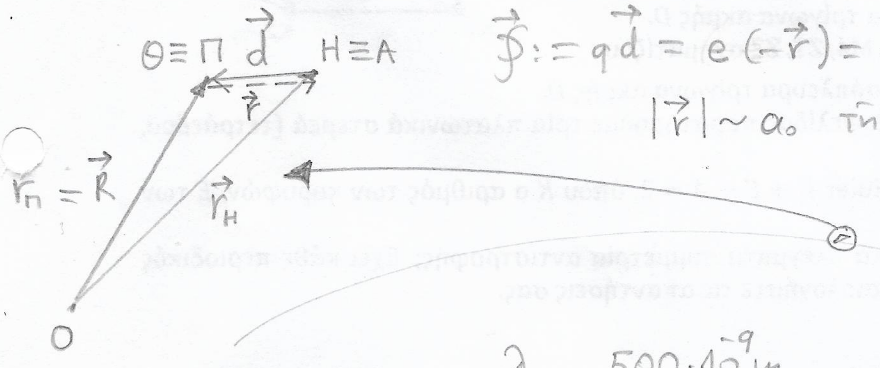


$\vec d = \vec{A\Theta}$ $\qquad \vec{\wp} := q\vec d$

ηλεκτρική διπολική ροπή
electric dipole moment

Έστω Άτομο Υδρογόνου

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



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

$|\vec r| \sim a_0$ της τάξεως της ακτίνας Bohr $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-10}\, m$

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

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

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

ομογενές ← ορισμοί → 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 $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$

λ: μήκος κύματος

ϕ: αυθαίρετη φάση

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

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

Δηλαδή το ηλεκτρικό πεδίο είναι <u>πρακτικά 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

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

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

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

θέτουμε μηδέν

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

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

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

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

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

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

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

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

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

τα Z_{kk} έχουν τις ιδιότητες

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

περιττή   άρτια

εφ' όσον οι ιδιοσυναρτήσεις είναι άρτιες ή περιττές (όπως ισχύει στο άτομο, στο συμμετρικό κβαντικό φρέαρ 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

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

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

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

'Ας εστιάσουμε σε διστάθμικό σύστημα

$$E_2 \;\rule{3cm}{0.4pt}\; \Phi_2(\vec{r})$$

$$E_1 \;\rule{3cm}{0.4pt}\; \Phi_1(\vec{r})$$

αδιέγερτο   διεγερμένο

$$U_{E12}(t) = e\,\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, z_{12} = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, p_{z12}$$

$$U_{E21}(t) = e\,\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, z_{21} = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, p_{z21}$$

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

'Αν οι ιδιοσυναρτήσεις είναι πραγματικές

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

$$U_{E12}(t) = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, p$$

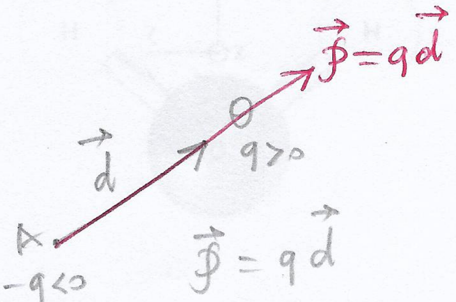
$$U_{E21}(t) = -\mathcal{E}_0 \cos\omega t\, p$$

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

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

Υπενθύμιση Αναλογιών

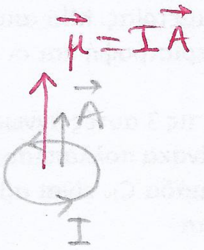
$\vec{E}$ (Ηλεκτρικό Πεδίο)



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

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

$\vec{B}$ (Μαγνητική Επαγωγή)



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

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

$[\vec{p}] = Cm$

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

$F = BIl$
$N = TAm$

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

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

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

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