Cwiczenia 23

27 maja 2014

00:59

Rachunek zaburzeń zależny od czasu

$$H(t) = H_0 + \lambda H'(t)$$

zaburzenie zależne od czasu

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$ – stany i energie niezaburzone

Przyjmijmy, że na początku $|\psi(-\infty)\rangle = |\varphi_n\rangle$ i chcemy wiedzieć jakie będą prawdopodobieństwa przejść do innych stanów w wyniku włączenia zaburzenia $H'(t)$ (np. jonizacja).

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle$$

gdyby było niezaburzone $|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}|\varphi_n\rangle$

My mamy zaburzenie i w związku z tym ogólne rozwiązanie

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)\, e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}|\varphi_n\rangle$$

$$i\hbar \sum_n \left(\dot{c}_n - c_n \frac{iE_n}{\hbar}\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}|\varphi_n\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}(E_n + \lambda H')|\varphi_n\rangle$$

$\langle\varphi_k|\cdot$

$$i\hbar\, \dot{c}_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} = \lambda \sum_n c_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \langle\varphi_k|H'|\varphi_n\rangle$$

$$\dot{c}_k = \frac{\lambda}{i\hbar}\sum_n c_n \underbrace{\langle\varphi_k|H'|\varphi_n\rangle}_{H'_{kn}} \underbrace{e^{\frac{i(E_k-E_n)t}{\hbar}}}_{e^{i\omega_{kn}t}}$$

Rozwijamy: $c_k(t) = c_k^{(0)}(t) + \lambda c_k^{(1)}(t) + \ldots$

$$\dot{c}_k^{(0)} = 0$$ zerowy rząd

$$\dot{c}_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar}\sum_n c_n^{(0)} H'_{kn} e^{i\omega_{kn}t}$$ pierwszy rząd

Przyjmijmy, że początkowo układ [illegible] ze stanu własnego H_0 $\quad c_k^{(0)} = \delta_{km}$

$$\dot{c}_k^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} H'_{km}(t)\, e^{i\omega_{km} t}$$

$$c_k^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{t} H'_{km}(t)\, e^{i\omega_{km} t}\, dt$$

Wyrażenie się upraszcza dla zaburzenia harmonicznego (przyjmijmy włączone w czasie 0 wyłączone w czasie t_0

$$H'(t) = 2H' \sin \omega t \qquad t_0$$

Dla $t \geq t_0$:

$$c_k^{(1)}(t) = c_k^{(1)}(t_0) = \frac{2}{i\hbar} \underset{\langle \varphi_k | H' | \varphi_m \rangle}{\underset{\parallel}{H'_{km}}} \int_0^{t_0} e^{i\omega_{km} t} \sin \omega t$$

$$= -\frac{H'_{km}}{\hbar} \int_0^{t_0} e^{i\omega_{km} t} \left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t} \right) =$$

$$= -\frac{H'_{km}}{\hbar} \left(\frac{1}{i(\omega_{km}+\omega)} \left[e^{i(\omega_{km}+\omega)t_0} - 1 \right] - \frac{1}{i(\omega_{km}-\omega)} \left[e^{i(\omega_{km}-\omega)t_0} - 1 \right] \right) =$$

Rozważmy przypadek pochłaniania energii i wzbudzeń układu $\omega_{km} > 0$ w tej sytuacji

jeśli $\omega \approx \omega_{km}$ dominuje drugi wyraz

$$c_k^{(1)} \approx 2 \frac{H'_{km}}{\hbar(\omega_{km}-\omega)} e^{i\frac{(\omega_{km}-\omega)t_0}{2}} \cdot \sin \frac{(\omega_{km}-\omega)t_0}{2}$$

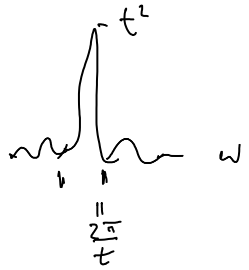
prawdopodobieństwo wzbudzenia do stanu k:

prawdopodobieństwo wzbudzenia do stanu k:

$$\boxed{|C_k^{(1)}|^2 = \frac{4|H'_{km}|^2 \sin^2\left[\frac{(\omega_{km}-\omega)t_0}{2}\right]}{\hbar^2(\omega_{km}-\omega)^2}}$$

W granicy $t_0 \to \infty$ funkcja staje się δ-[illegible]

$$\frac{\sin^2\frac{\omega t}{2}}{\omega^2}$$



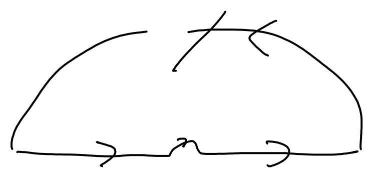
Fakt:

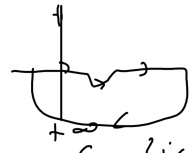
$$\frac{2}{\pi}\frac{\sin^2\frac{\omega t}{2}}{t\omega^2} \xrightarrow{t\to\infty} \delta(\omega)$$

widać że niezerowe tylko dla $\omega = 0$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin^2 x}{x^2}dx = -\frac{1}{4}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{2ix}+e^{-2ix}-2}{x^2} =$$

$$= -\frac{1}{4}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{2ix}}{x^2} + \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-2ix}}{x^2}\right) = \pi$$





$$\lim_{|z|\to\infty}\int_0^{\pi}\frac{1+2iz-\frac{4z^2}{2}}{z^2}Re^{i\varphi}i\,d\varphi = -2\pi \qquad \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{e^{-2ix}}{x^2} = \int_{2\pi}^{\pi} \ldots = -2\pi$$

$$\oint\frac{f(z)}{(z-z_0)^{n+1}}dz = 2\pi i\frac{1}{n!}f^{(n)}(z_0)$$

Czyli $\int^{+\infty}$ … $x=\frac{\omega t}{2}$ $\int^{+\infty}$ …

$$\int_{-\infty} \frac{2}{\hbar} \frac{\sin^2}{t\omega^2} d\omega = \int_{-\infty} \frac{4}{\pi t} \frac{\sin^2 x}{\frac{4x^2}{t}} = 1 \quad \text{ok}$$

Więc dla $t_0 \to \infty$ mamy

$$|c_k^{(1)}|^2 = \frac{2\pi t_0}{\hbar^2} |H'_{km}|^2 \delta(\omega_{km} - \omega)$$

$$P_{m\to k} = \frac{2\pi t_0}{\hbar^2} |H'_{km}|^2 \delta(\omega_{km} - \omega)$$

Rośnie liniowo z t_0.

Prawdopodobieństwo na jednostkę czasu do stanów o energii E_k:

$$\boxed{w = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{km}|^2 \rho(E_k)}$$

– Złota reguła Fermiego

ρ – gęstość stanów w przedziale E_k, $E_k + dE$

$\rho(E_k)dE$ – liczba stanów w przedziale E_k, E_k+dE

Jonizacja atomu wodoru

W chwili początkowej atom wodoru w stanie podstawowym

$$\varphi_0(\vec{r}) = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\vec{E}(t) = 2E_0 \sin\omega t\, \hat{e}_z \quad (\hbar\omega > |E_0| = 13{,}6\,\text{eV})$$

$$H'(t) = e\vec{E}(t)\cdot\vec{r} = 2\underbrace{e\vec{E}_0\vec{r}}_{H'} \sin\omega t$$

Musimy policzyć $H'_{k0} = \langle \varphi_k | H' | \varphi_0 \rangle$

(φ_k) – stany własne o energiach $(\hbar\omega - |E_0|) > 0$

– stany niezwiązane w potencjale Coulombowskim (stany rozproszeniowe – skomplikowane)

[illegible] cząstki swobodnej

weźmy więc stany cząstki swobodnej

- tak jakbyśmy po wybiciu elektronu ignorowali potencjał Coulombowski

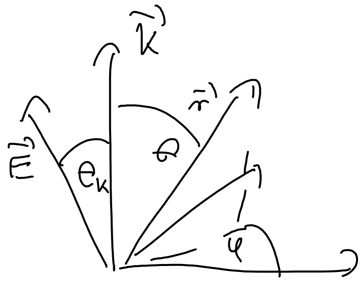
$$\varphi_k(\vec{r}) = \underset{\uparrow}{\frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}}\, e^{i\vec{k}\vec{r}} \qquad , \qquad \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \hbar\omega - |E_0|$$

normalizacja w pudełku o ściankach L

$$H'_{\vec{k}\alpha} = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}\int d^3r\; e^{-i\vec{k}\vec{r}}\; e\vec{E}\circ\vec{r}\; \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} =$$

$$= \frac{e}{\sqrt{\pi L^3 a_0^3}}\int dr\,d\varphi\,d\theta \sin\theta\; \vec{E}\circ\vec{r}\, r^2\, e^{-i\vec{k}\vec{r}}\, e^{-\frac{r}{a_0}}$$

wygodnie przyjąć



$$\vec{E} = (E\cos\theta_k\,,\, -E\sin\theta_k\,,\, 0)$$
$$\vec{k} = (k, 0, 0)$$
$$\vec{r} = (r\cos\theta\,,\, r\sin\theta\cos\varphi\,,\, r\sin\theta\sin\varphi)$$
$$\vec{E}\circ\vec{r} = Er(\cos\theta_k\cos\theta - \sin\theta_k\sin\theta\cos\varphi)$$

$$= \underbrace{\frac{eE}{\sqrt{\pi L^3 a_0^3}}}_{A}\int dr\,d\varphi\,d\theta \sin\theta\, r^3\, e^{-\frac{r}{a_0}}(\cos\theta_k\cos\theta - \sin\theta_k\sin\theta\cos\varphi)\cdot e^{-ikr\cos\theta} =$$

$$= 2\pi A\cos\theta_k \int dr\,d\theta\, r^3 e^{-\frac{r}{a_0}} \sin\theta\cos\theta\, e^{-ikr\cos\theta}$$

$$= 2\pi A \cos\theta_k \int dr\, d\theta\, r^3 e^{-\frac{r}{a_0}} \sin\theta \cos\theta\, e$$

$t = \cos\theta$

$dt = -\sin\theta\, d\theta$

$$\int_{-1}^{1} t e^{-ikrt} = \frac{t}{-ikr} e^{-ikrt}\Big|_{-1}^{1} + \frac{1}{ikr}\int_{-1}^{1} e^{-ikrt}\, dt$$

$$= \frac{2i}{kr}\cos kr - \frac{2i}{(kr)^2}\sin kr =$$

$$= \frac{2i}{kr}\left(\cos kr - \frac{1}{kr}\sin kr\right)$$

$$\frac{2\pi A \cos\theta_k \cdot 2i}{k} \cdot \underbrace{\int_0^\infty dr\, r^2\left(\cos kr - \frac{1}{kr}\sin kr\right) e^{-\frac{r}{a_0}}}_{-\frac{8 a_0^5 k^2}{(1+a_0^2k^2)^3}} =$$

$$= -\frac{32\pi\, e E_0}{\sqrt{\pi a_0^3 L^3}} \frac{k a_0^5 \cos\theta_k}{(1+a_0^2k^2)^3}$$

Chcemy prawdopodob. na jednostkę czasu na kąt bryłowy. Potrzebujemy jeszcze $\rho(E_k)$.

W pudełku mamy: $k_x = \frac{2\pi n_x}{L}$ czyli $\begin{cases} n_x, n_y, n_z \\ i\ \text{dodatnie i ujemne} \end{cases}$

Liczba stanów w kuli $\leq k^2$ $\qquad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq \frac{L^2 k^2}{4\pi^2}$$

$$N(k) = \frac{4}{3}\pi\left(\frac{Lk}{2\pi}\right)^3 = \frac{L^3}{6\pi^2}k^3$$

$$\rho(k)\, dk = \frac{L^3}{2\pi^2}k^2\, dk$$

$$\rho(k,\theta,\varphi)\, dk\, d\Omega = \frac{L^3}{\ldots} k^2 \sin\theta\, dk\, d\theta\, d\varphi$$

$\ldots \frac{\ }{8\pi^3} k \ldots$

$$\rho(E_k)\, dE_k = \rho(k)\, dk$$

$$\frac{dE_k}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m}$$

$$\rho(E_k)\, d\Omega = \frac{m L^3}{8\pi^3 \hbar^2} k \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

Prawdop. na jednostkę czasu że elektron wyemitowany w kąt bryłowy $d\Omega$

$$W d\Omega = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{32^2 \cancel{\pi} e^2 E_0^2}{a_0^3 \cancel{L^3}} \frac{k^2 a_0^{10} \cos^2\theta\, k}{(1+a_0^2k^2)^6} \cdot \frac{m \cancel{L^3}}{8\cancel{\pi^3}\hbar^2 \pi} k \sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

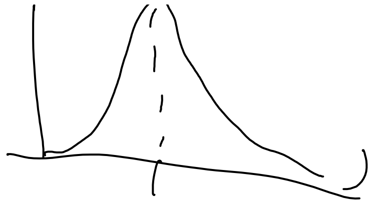
$$= \underbrace{\frac{256\, e^2 E_0^2 a_0^7 k^3}{\pi \hbar^3 (1+a_0^2k^2)^6} \cos^2\theta \ d\Omega}_{\text{elektrony najchętniej wysyłane w kierunku } z}$$

Całk. prawdop. na jednostkę czasu we wszystkich kierunkach

$$W = \frac{256\, e^2 E_0^2 a_0^7 k^3}{\pi \hbar^3 (1+a_0^2k^2)^6}\, 2\pi \underbrace{\int_0^\pi \cos^2\theta \sin\theta\, d\theta}_{\int_{-1}^{1} t^2\, dt = \frac{2}{3}}$$

$$= \frac{1024\, e^2 E_0^2 a_0^7 k^3}{3\hbar^2 (1+a_0^2k^2)^6}$$

$$\left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega - |13{,}6\,\mathrm{eV}| \right.$$



$ka_0 \approx 0{,}6$

$$\frac{\hbar^2 (0{,}6)^2}{2 m a_0^2} \approx 600 \text{ eV}$$