

Fizyka Materii Skondensowanej

Jacek.Szczytko@fuw.edu.pl


Konrad.Dziatkowski@fuw.edu.pl

<http://www.fuw.edu.pl/~szczytko/FMS>

The logo consists of a stylized 'N' made of grey and orange bars, followed by the word 'nanotechnologia' in orange and 'nanostruktur' in grey.



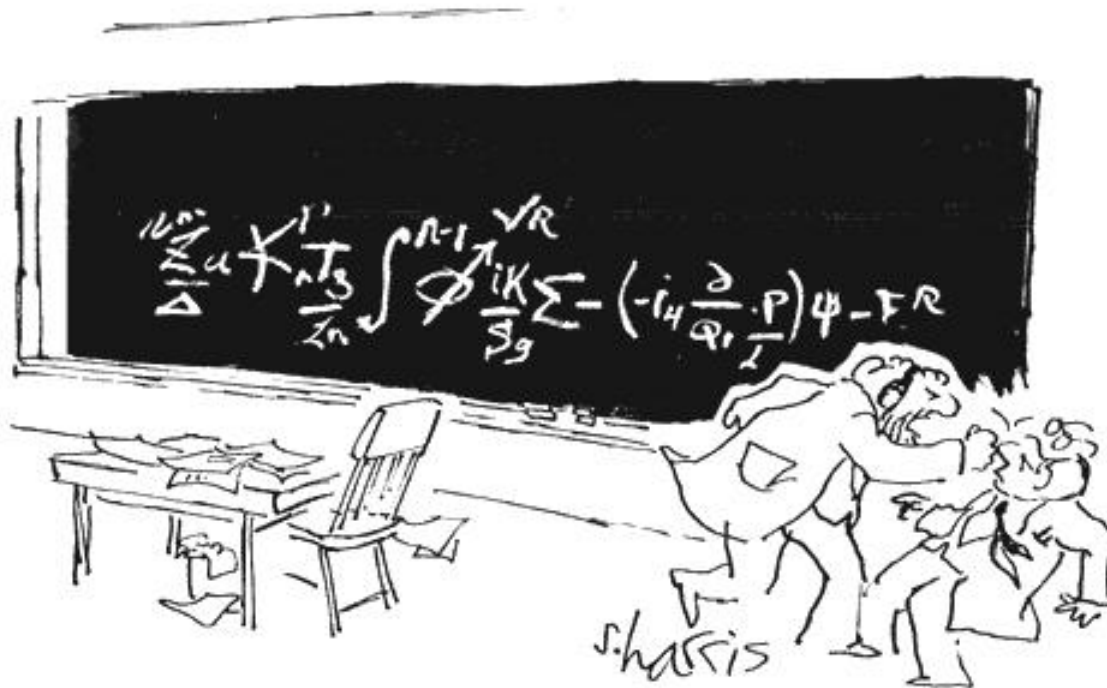
GryPlan

- 4.10 Mechanika kwantowa. Stany. Studnia kwantowa, Stany atomu wodoru. Symetrie stanów.
 - 11.10 Pole magnetyczne, sprzężenie spin orbita, J, L, S
 - 18.10 Dipolowe przejścia optyczne. Reguły wyboru, czas życia
 - 25.10 Lasery – współczynniki Einsteina
 - 8.11 Optyka – powtórzenie, klasyczny współczynnik załamania
 - 14.11 **PONIEDZIAŁEK RANO - KOLOKWIUM**
 - 15.11 Wiązania chemiczne i cząsteczki, hybrydyzacje
 - 22.11 Przejścia optyczne w cząsteczkach, widma oscylacyjno-rotacyjne
 - 29.11 Ciało stałe, kryształy, krystalografia, sieci Bravais
 - 6.12 Pasma, tw. Blocha, masa efektywna, przybliżenie kp
 - 13.12 **KOLOKWIUM**
 - 20.12 Elektrony i dziury cz. 1
 - 3.01 Elektrony i dziury cz. 2 Nanotechnologia
 - 10.01 Urządzenia półprzewodnikowe. Diody, tranzystory, komputery
 - 17.01 Fizyka subatomowa
- 

Dipolowe przejścia optyczne.

Reguły wyboru, czas życia

S. Harris



"You want proof? I'll give you proof!"

Pole elektryczne

Efekt Starka dla atomu wodoru

Pole elektryczne E

$$H' = \vec{p}\vec{E} = ezE_z$$

Moment dipolowy p

Funkcje własne atomu wodoru dla stanu 2p:

$$\Psi_{200}, \Psi_{21-1}, \Psi_{210}, \Psi_{211}$$

Liczmy:

$$\hat{H}'_{ij} = \langle \psi_i | \hat{H}' | \psi_j \rangle$$

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} 2 \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right)$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right)$$

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta)$$

$$Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) \exp(\pm i\varphi)$$

Pole magnetyczne i spin

Atom w polu magnetycznym, efekt Zeemana

$$\psi(\vec{r}, S_z) = \psi(\vec{r})\chi(S_z)$$

Operator spinu

$$\hat{\vec{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$$

$$H' = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{L} + g\hat{S})\vec{B}$$

g-czynnik, zapewnia zgodność z eksperymentem

Całkowity moment pędu: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$

Całkowity moment magnetyczny: $\hat{M} = \hat{M}_L + \hat{M}_S = -g_L \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{L} - g_S \frac{\mu_B}{\hbar} \hat{S}$

$$\hat{M} \nparallel \hat{J}$$

magnetyczna anomalia spinu

Pole magnetyczne i spin

Spin, oddziaływanie spin-orbita

$$H_{SO} = \lambda \hat{L}\hat{S}$$

baza: $|n, l, s, m_l, m_s\rangle$

dla stanów s $\hat{L} = 0 \Rightarrow \hat{L}\hat{S} = 0$

dla stanów p $\hat{L} \neq 0 \Rightarrow \hat{L}\hat{S} \neq 0$

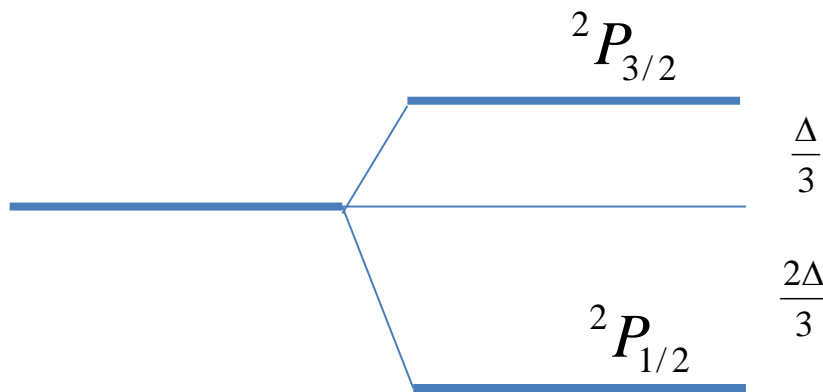
g-czynnik, zapewnia zgodność z eksperymentem

Całkowity moment pędu: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ baza: $|j, m_j\rangle$

$$\lambda = \frac{1}{24} R_\infty \alpha$$

$$Ry = hcR_\infty$$

$$\hat{L} = 1, \hat{S} = \frac{1}{2}$$



baza: $|n, l, s, j, m_j\rangle$

w skrócie: $|j, m_j\rangle$

Pole magnetyczne i spin

Termy elektronowe

$$2s+1 L_j$$

Sposób opisu układu **wielu elektronów**

Funkcja falowa MUSI być antysymetryczna (ze względu na przestawienia cząsteczek)

$$\psi(\vec{r}, S_z) = \psi(\vec{r})\chi(S_z)$$

część orbitalna

część spinowa

$$\hat{L} = 1, \hat{S} = \frac{1}{2}$$

$${}^2P_{3/2}$$

$$\frac{\Delta}{3}$$

$${}^2P_{1/2}$$

$$\frac{2\Delta}{3}$$

baza: $|n, l, s, j, m_j\rangle$

w skrócie: $|j, m_j\rangle$

Pole magnetyczne i spin

Termy elektronowe

$$2s+1 L_j$$

Sposób opisu układu **wielu elektronów**

Funkcja falowa MUSI być antysymetryczna (ze względu na przestawienia cząsteczek)

$$\psi(\vec{r}, S_z) = \psi(\vec{r})\chi(S_z)$$

część orbitalna

część spinowa

Uogólnienie:

$$\psi_N(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, S_1, \dots, S_N) = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)\chi(S_1, \dots, S_N)$$

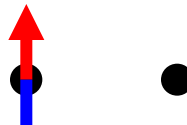
Antysymetryczna funkcja falowa
+ zasada Pauliego
+ oddziaływanie kulombowski
= ODDZIAŁYWANIA WYMIENNE

Spintronika

No dobra, ale...

- **Co to jest spin?**

Magnes



Oto kryształ:

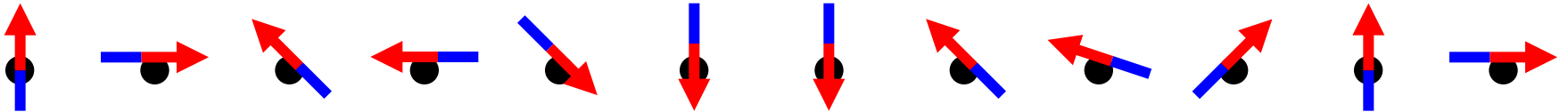


Magnes

PARA

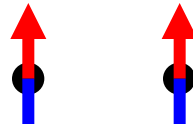


Namagnesowanie M przy braku pola $M = 0$



Magnes

FERRO

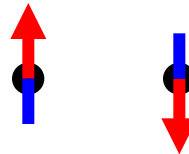


Namagnesowanie M przy braku pola $M > 0$

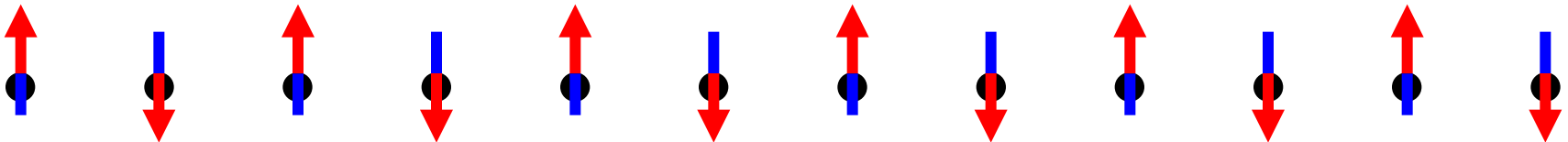


Magnes

ANTYFERRO

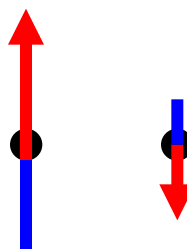


Namagnesowanie M przy braku pola $M = 0$

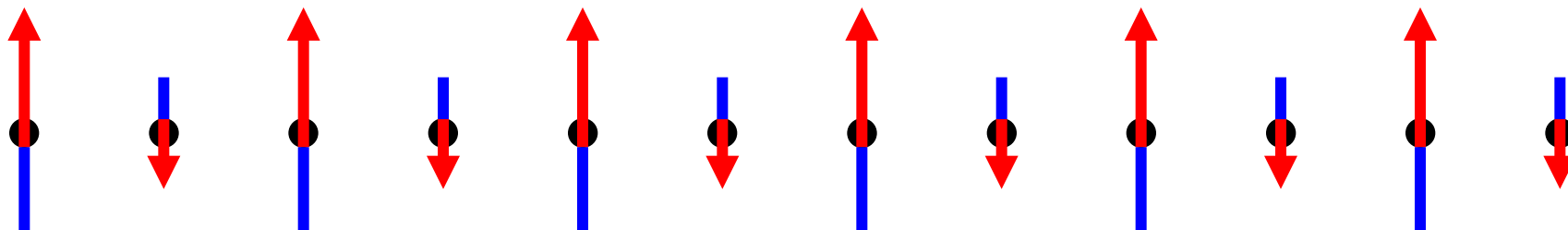


Magnes

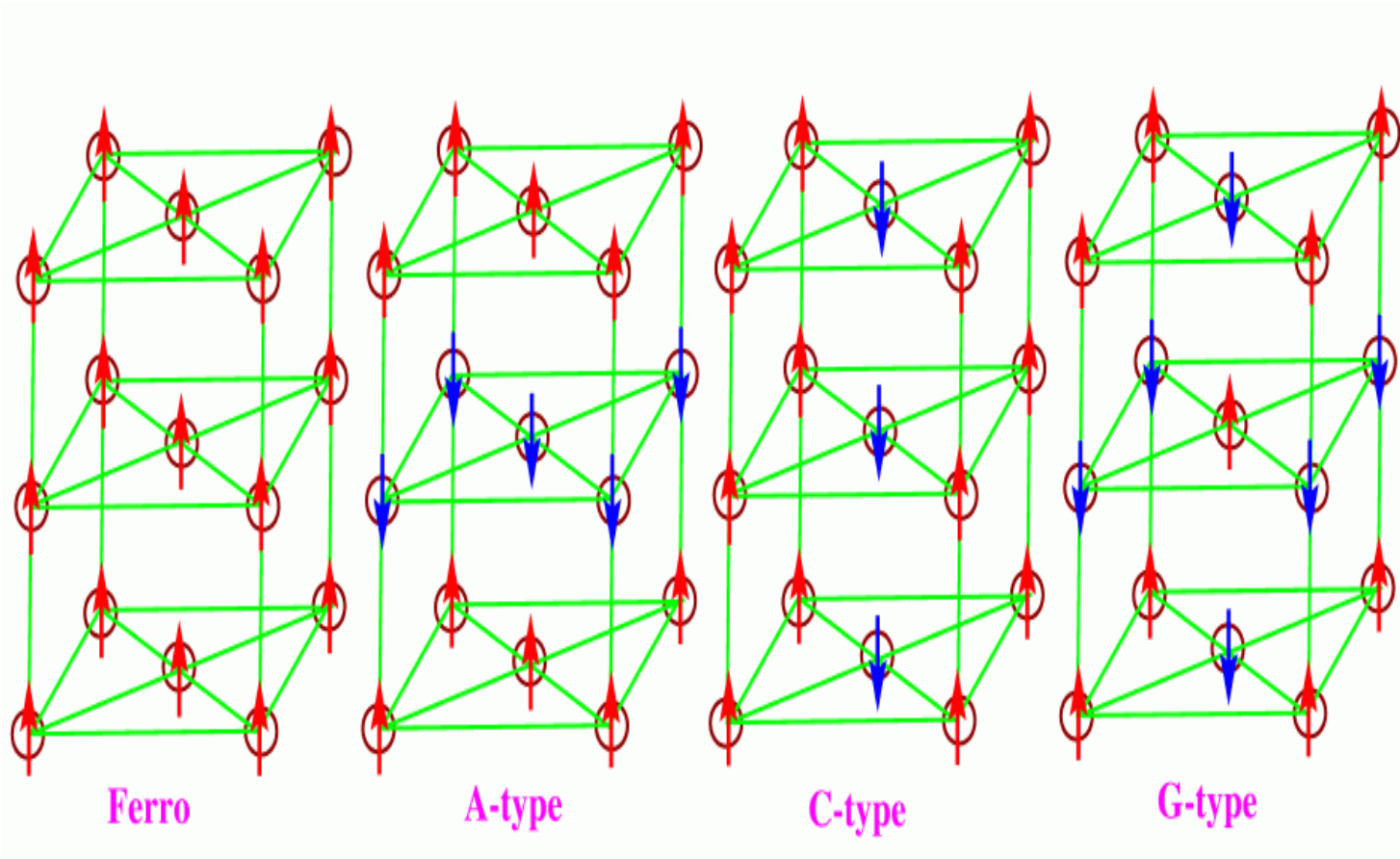
FERRI



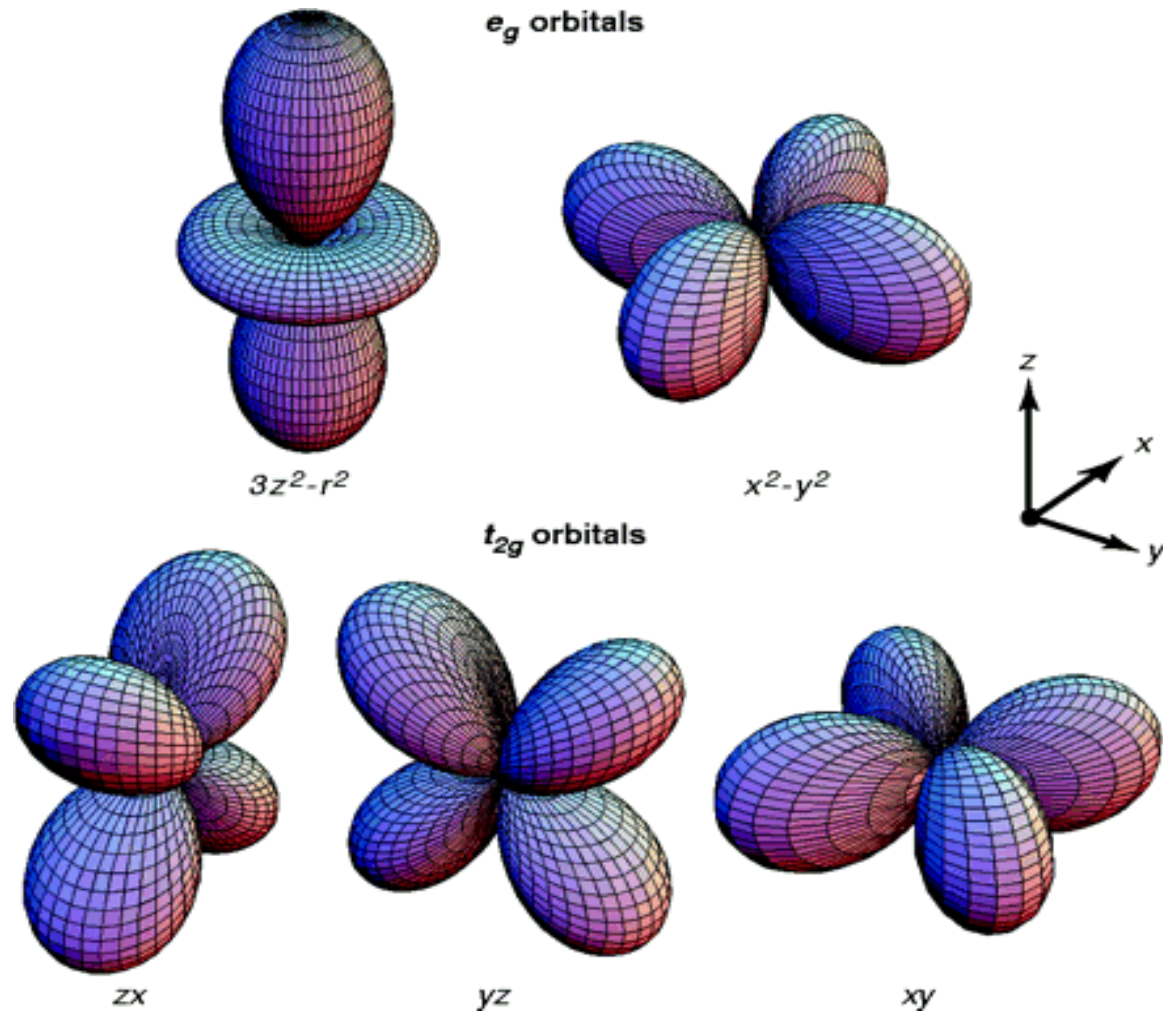
Namagnesowanie M przy braku pola $M > 0$



Magnets



Magnes

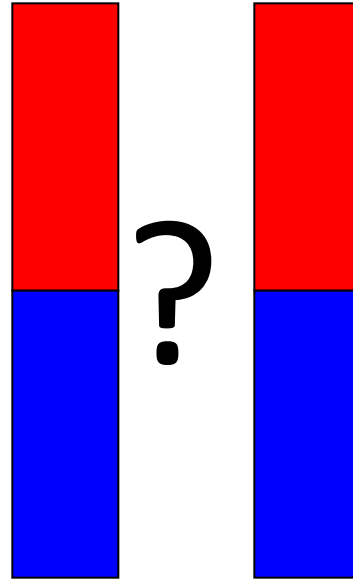


Magnes



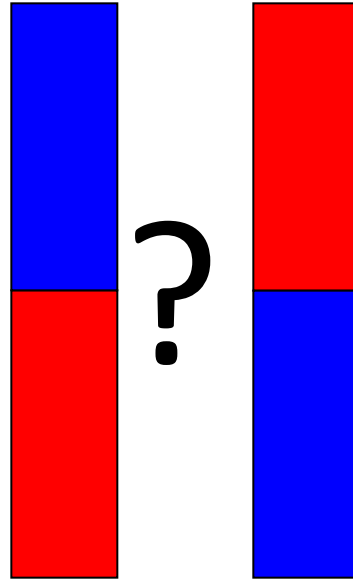
Magnes

FERRO?

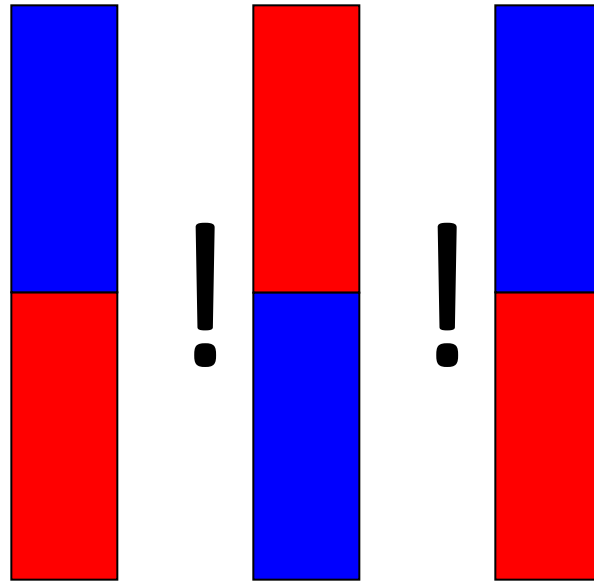


Magnes

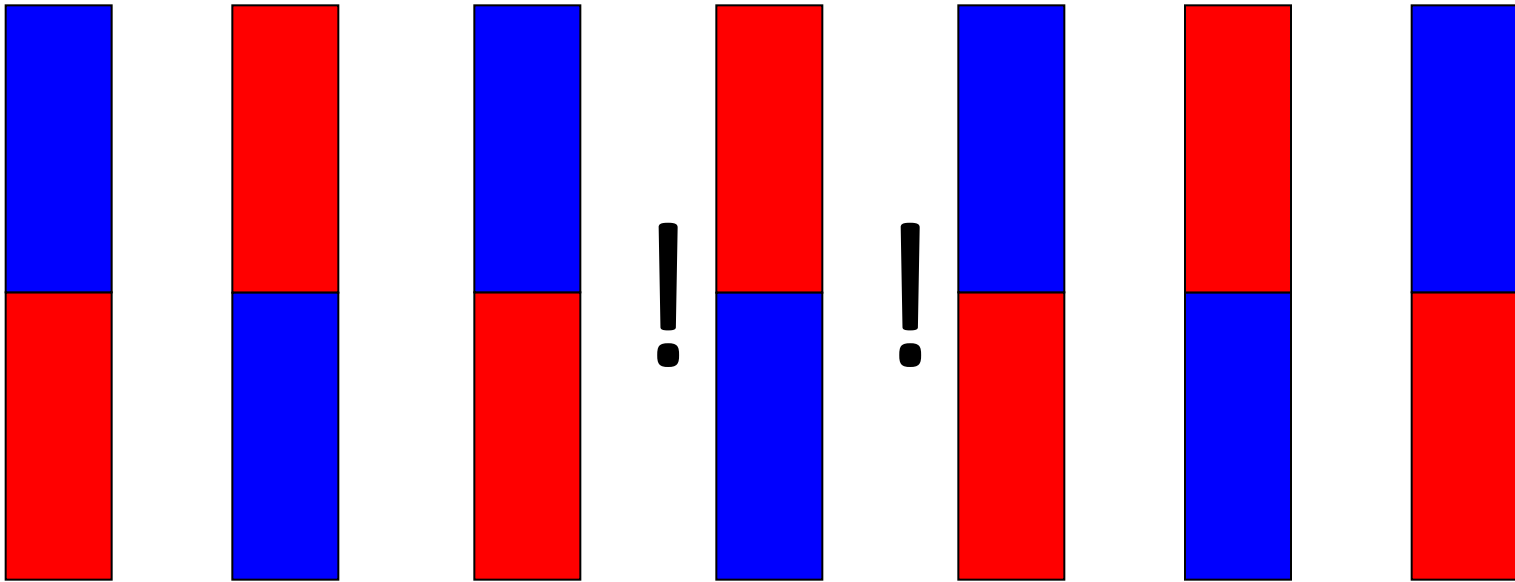
ANTY - FERRO?



Magnes

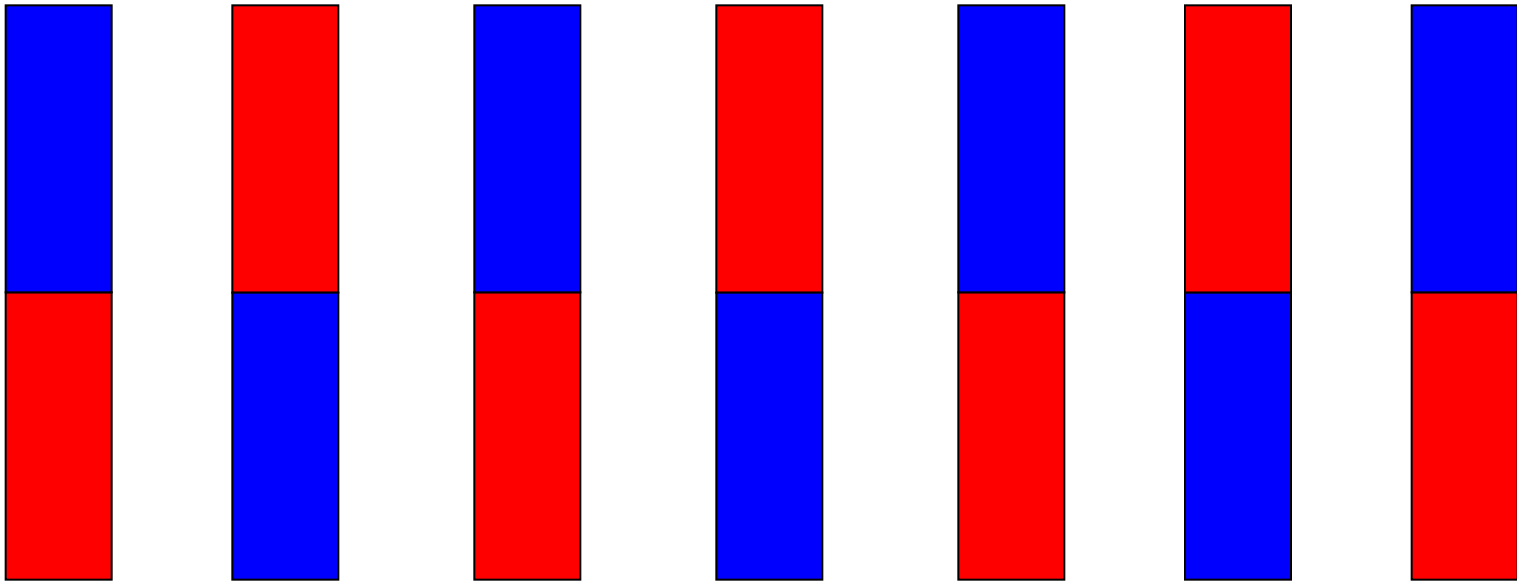


Magnes



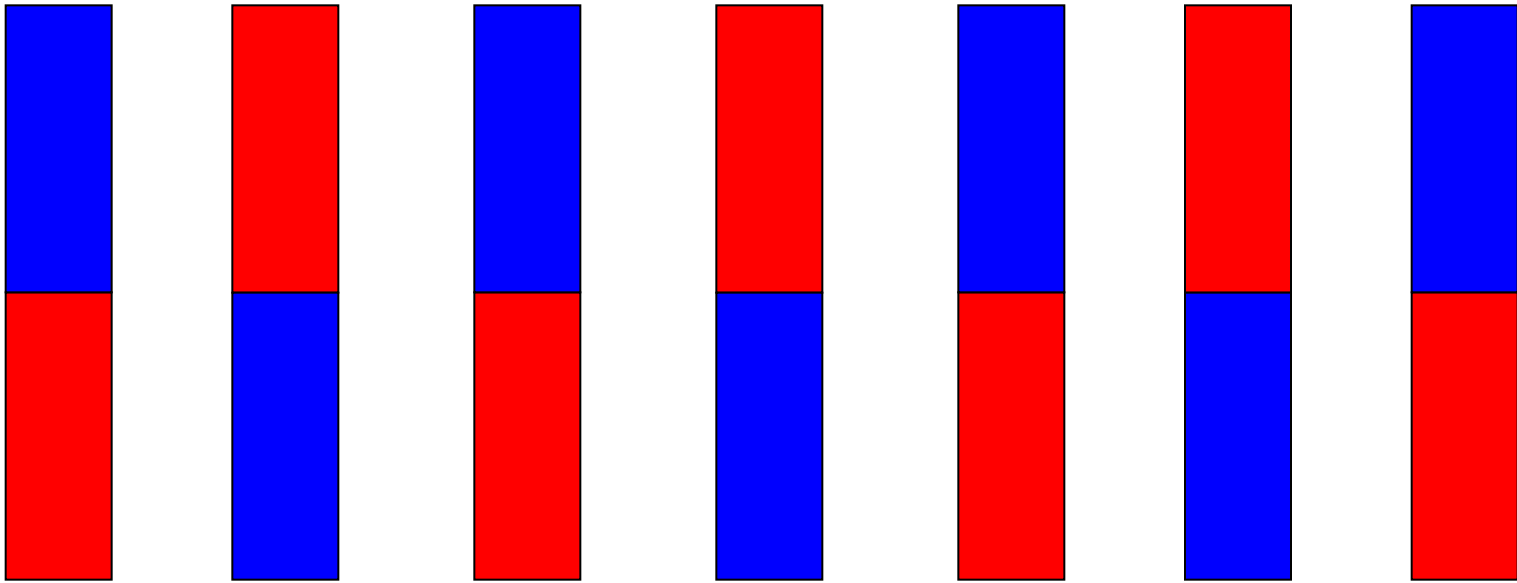
Korzystniejsze jest ustawienie antyferromagnetyczne

Magnes



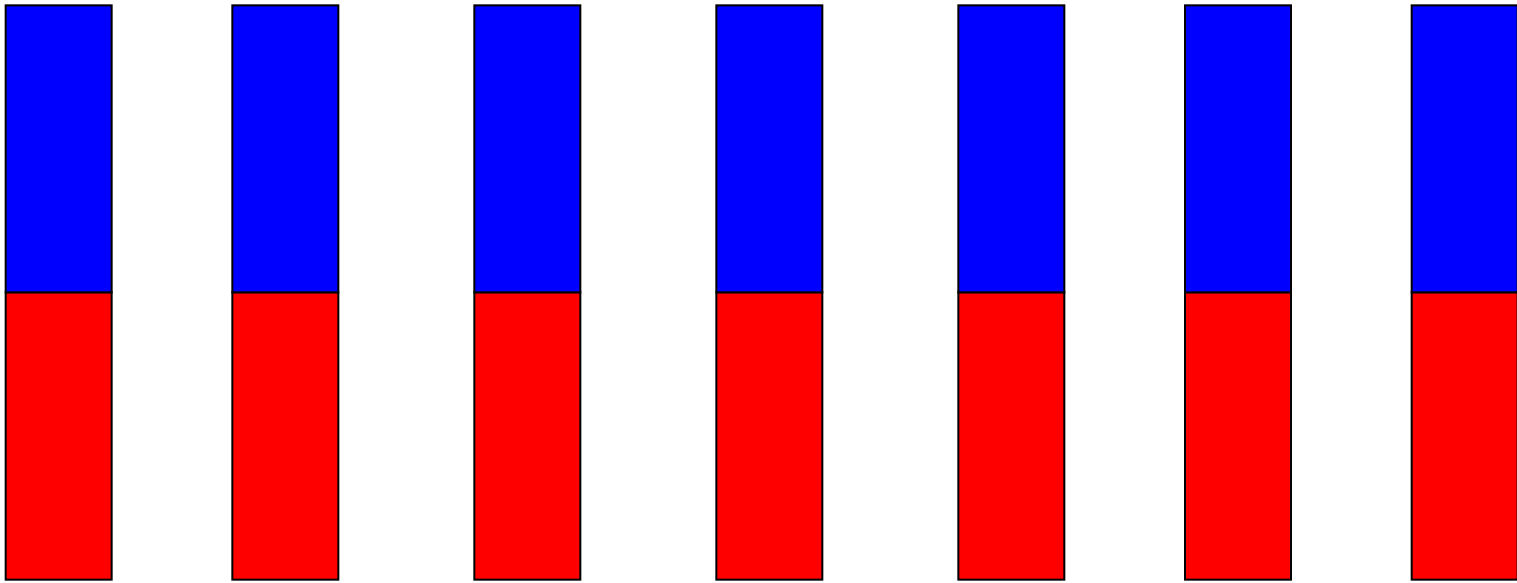
To skąd się biorą magnesy???

Magnes



To skąd się biorą magnesy???

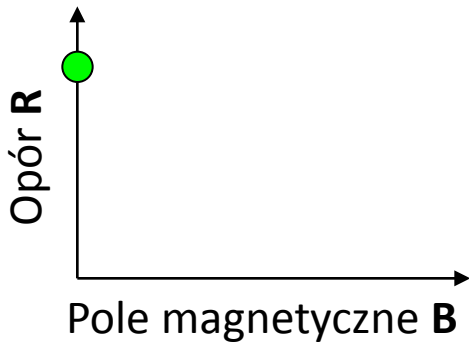
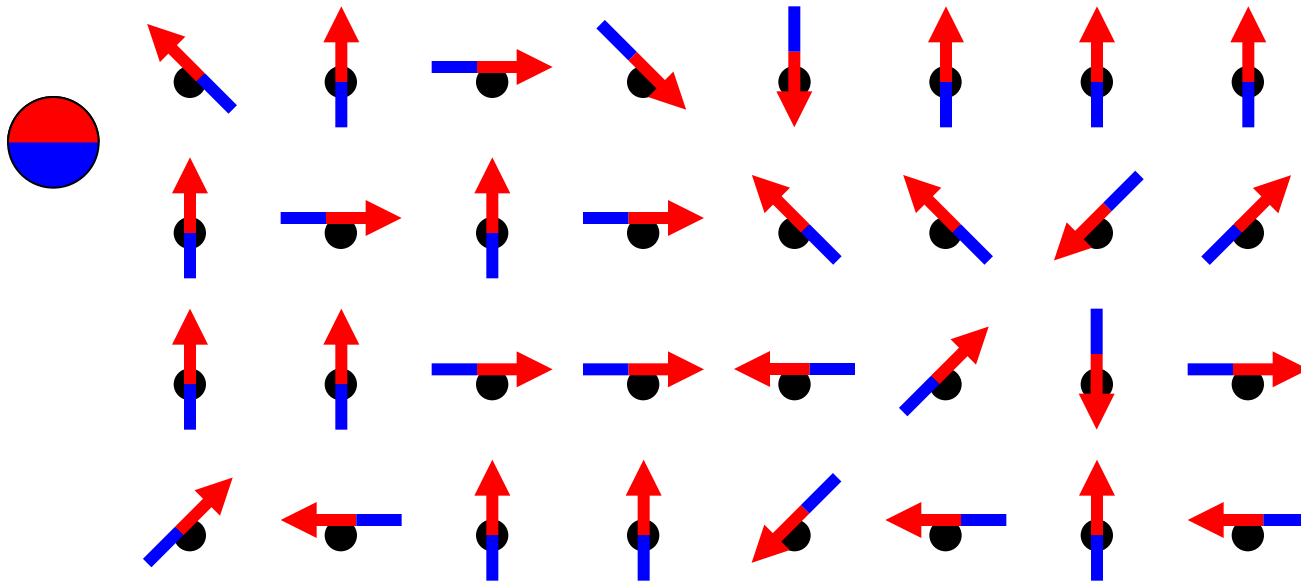
Magnes



To skąd się biorą magnesy???

Magnetoopór

Zewnętrzne pole magnetyczne $B = 0$ T



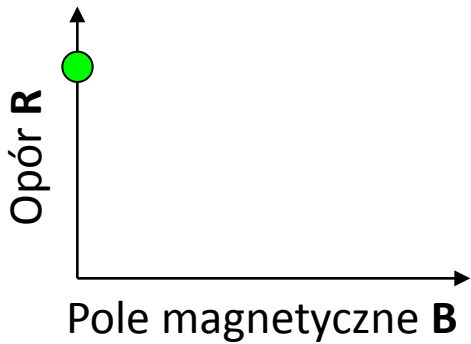
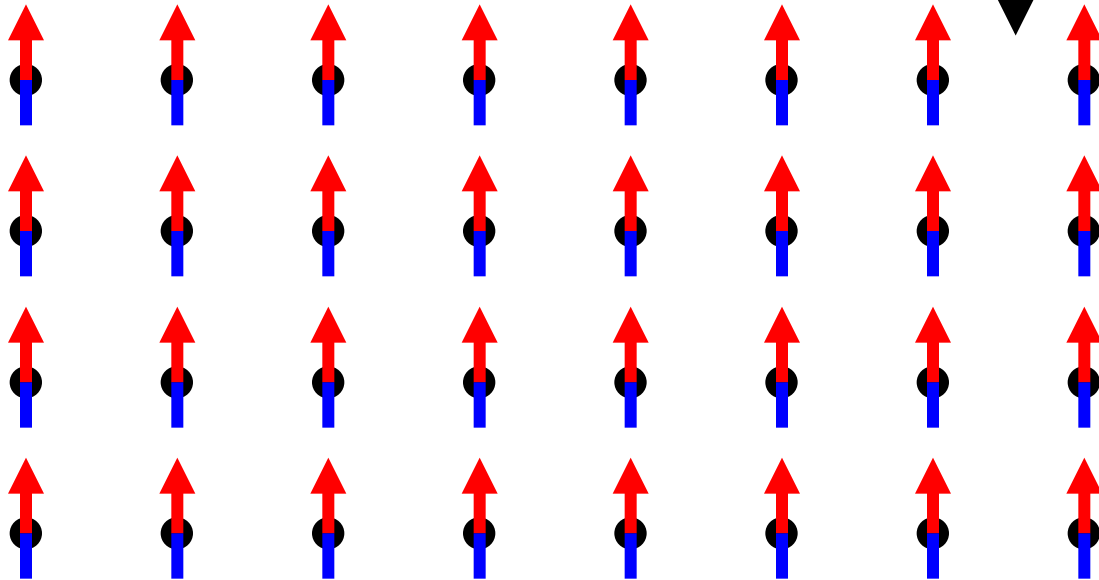
Energia sieci



Energia nośników

Magnetoopór

Zewnętrzne pole magnetyczne $B > 0$ T

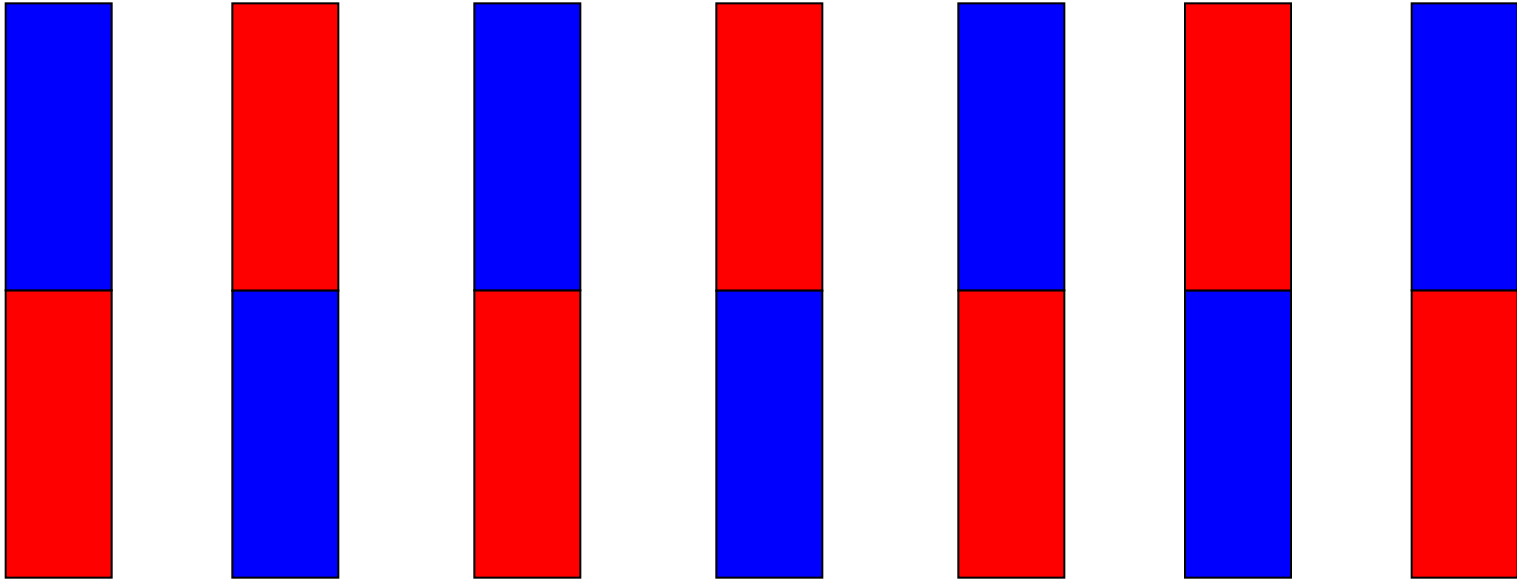


Energia sieci



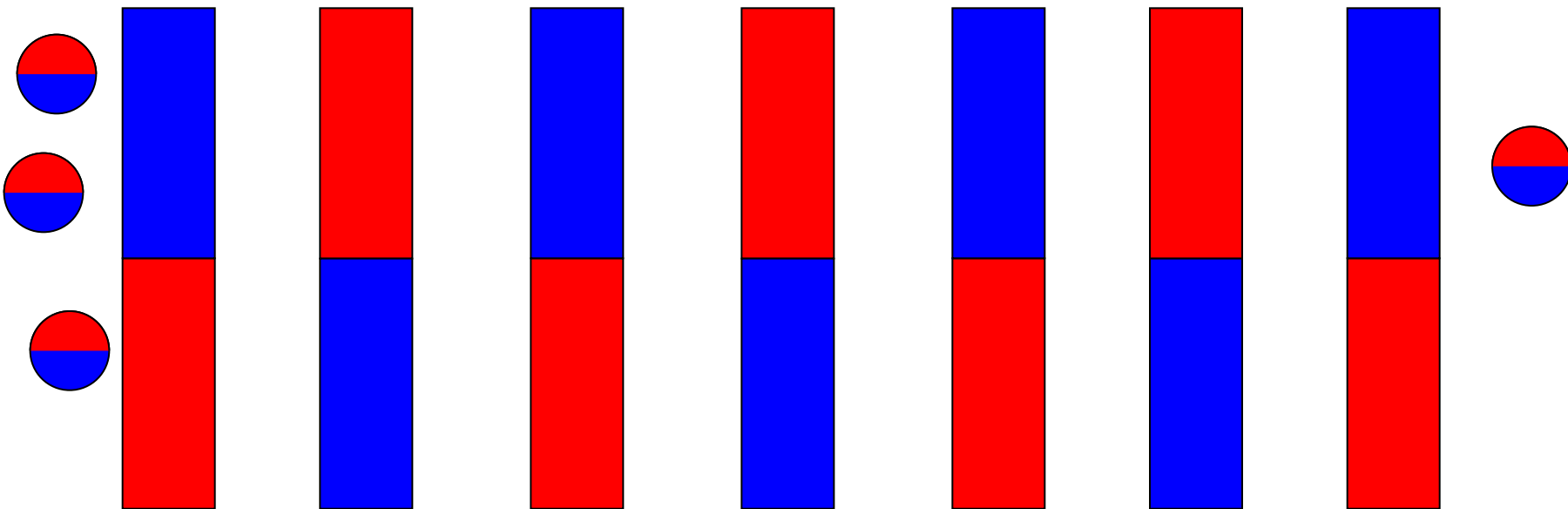
Energia nośników

Magnes



To skąd się biorą magnesy???

Magnes



Nośniki!!!

Spintronika



Nagroda FNP 2006 w obszarze nauk ścisłych:

prof. dr hab. Tomasz Dietl z Instytutu Fizyki PAN oraz Instytutu Fizyki Teoretycznej Uniwersytetu Warszawskiego za opracowanie potwierdzonej w ostatnich latach teorii rozcieńczonych półprzewodników ferromagnetycznych oraz zademonstrowanie nowych metod sterowania namagnesowaniem;

Alexander von Humboldt Research Award in Germany (2003),
Agilent Technologies Europhysics Prize (2005)

Spintronika

Magnetoopór $\square R/R \sim$ kilka %



Spintronika

Magnetoopór $\Delta R/R \sim$ kilka %

Gigantyczny magnetoopór

(Giant Magnetoresistance – GMR) 1988

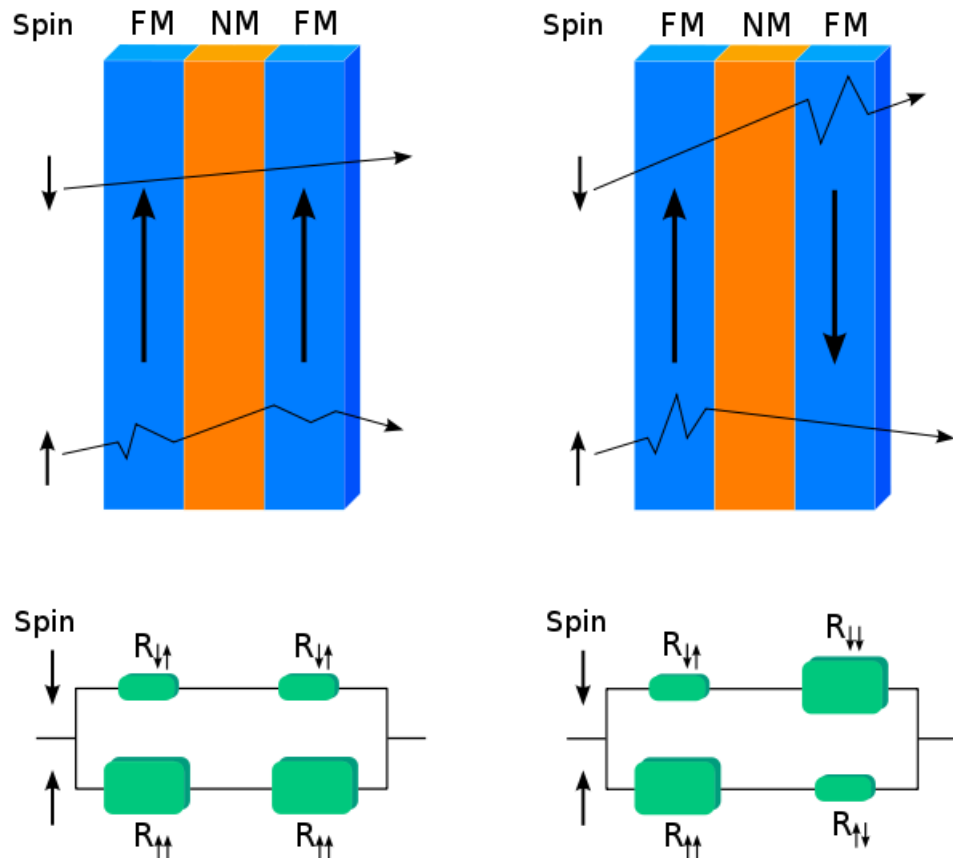
$\Delta R/R \sim 20$ %

Spintronika

Magnetoopór $\Delta R/R \sim$ kilka %

Gigantyczny magnetoopór (Giant Magnetoresistance – GMR) 1988

$\Delta R/R \sim 20$ %

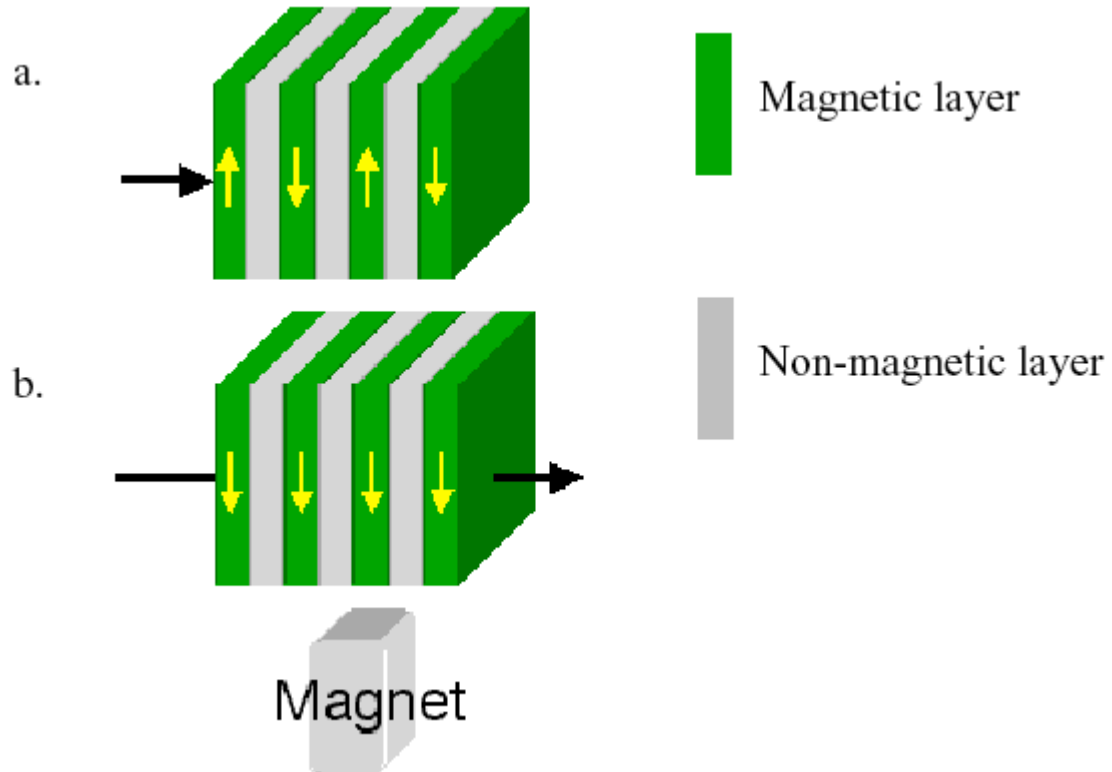


Spintronika

Magnetoopór $\Delta R/R \sim$ kilka %

Gigantyczny magnetoopór (Giant Magnetoresistance – GMR) 1988

$\Delta R/R \sim 20$ %



Spintronika

Magnetoopór $\Delta R/R \sim$ kilka %

Gigantyczny magnetoopór

(Giant Magnetoresistance – GMR) 1988

$\Delta R/R \sim 20$ %

Kolosalny magnetoopór

(Colossal Magnetoresistance – CMR)

1993 $\Delta R/R \sim$ kilka rzędów

wielkości!



2006



Seagate 60GB 1.8-inch Hard Drive



Hitachi 1.0-inch 6GB Micro Drive



Toshiba 60GB 1.8-inch Hard Drive



2009





HTC Desire Z



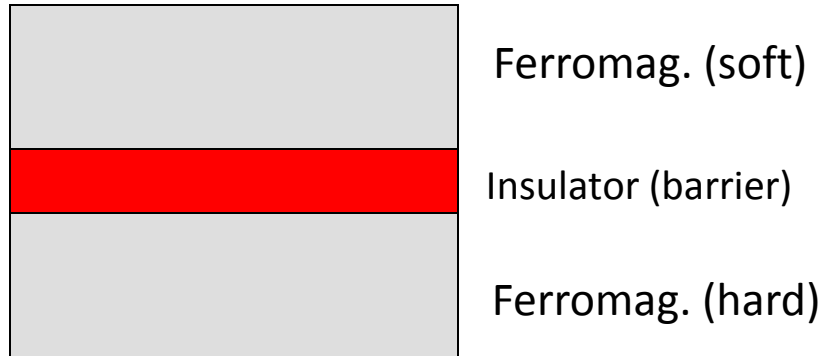
1TB

2011



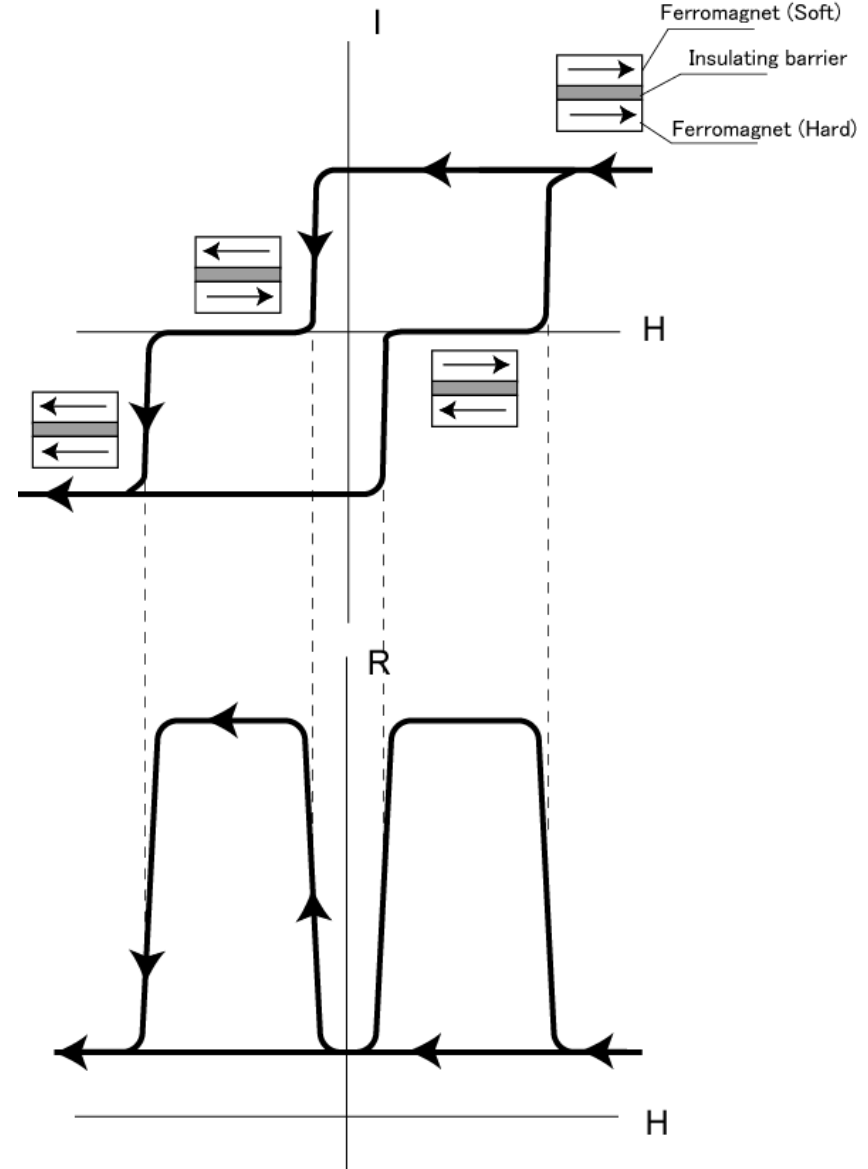
Spintronika

Magnetic tunnel junction (MTJ)



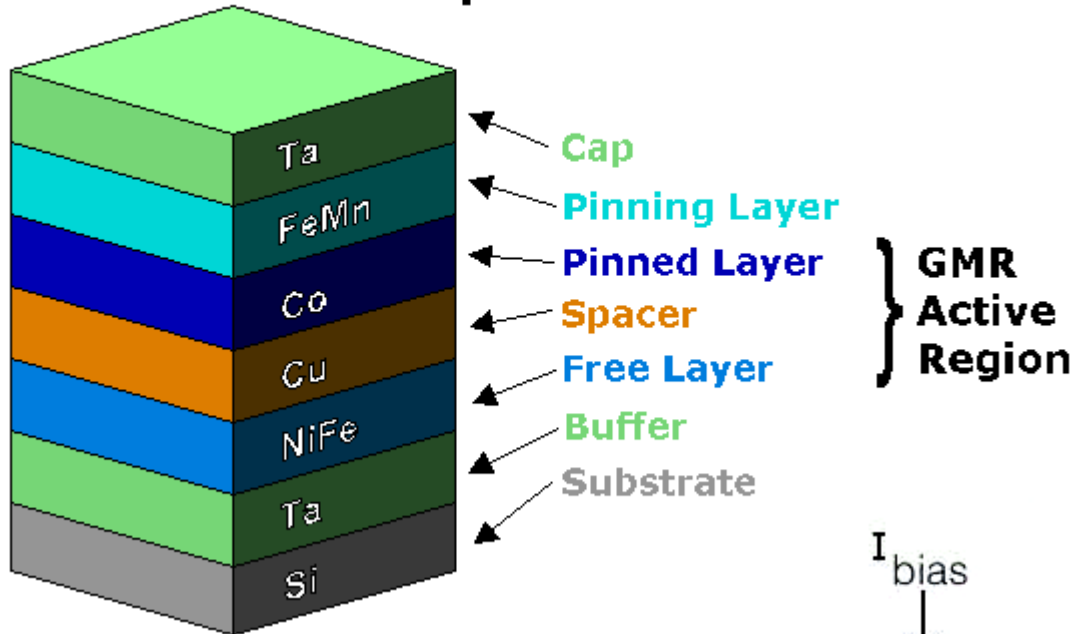
Ferromag.
Co, Py, FeCo, etc.
Barrier
Al₂O₃, MgO, etc.

$$\text{TMR}(\%) = (R_{\text{AP}} - R_{\text{P}}) / R_{\text{P}} * 100$$

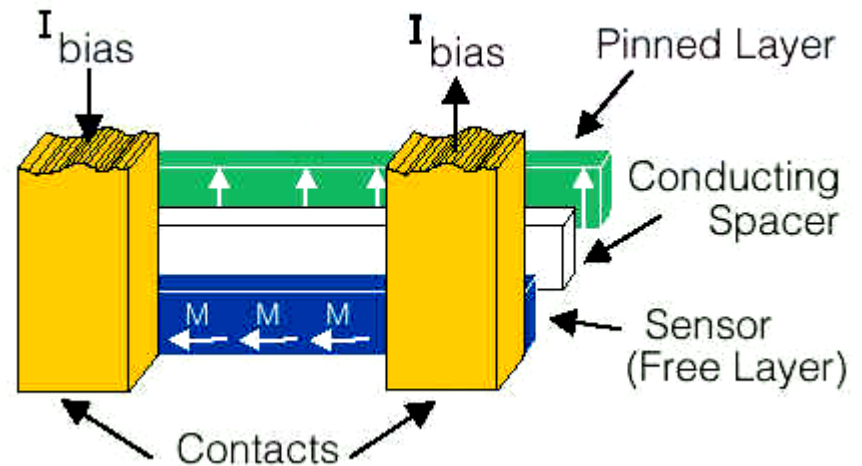


Spintronika

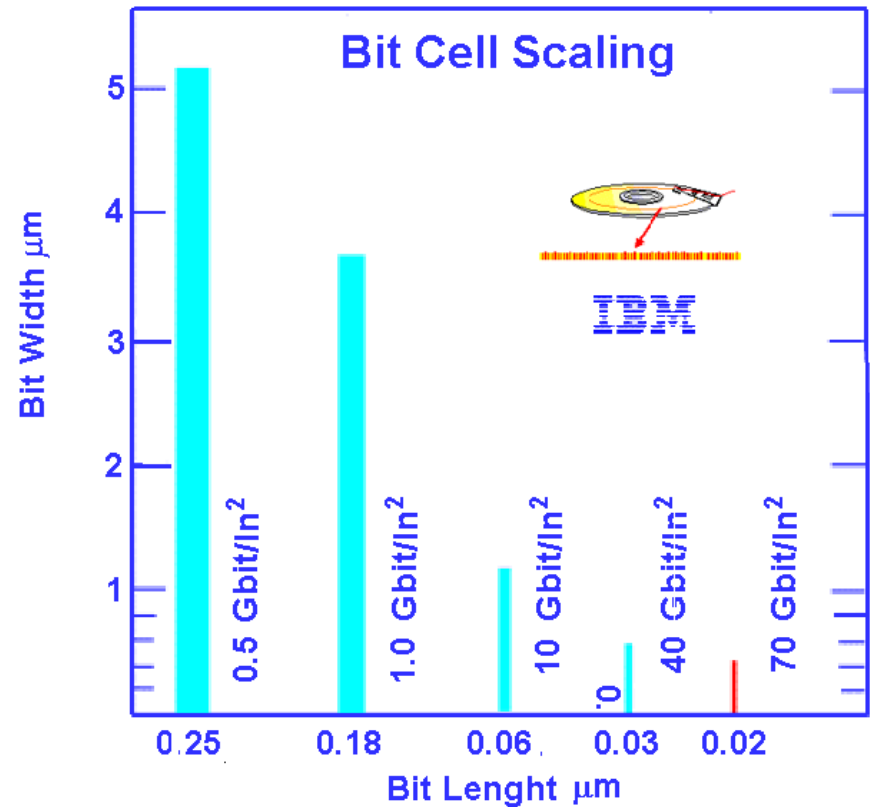
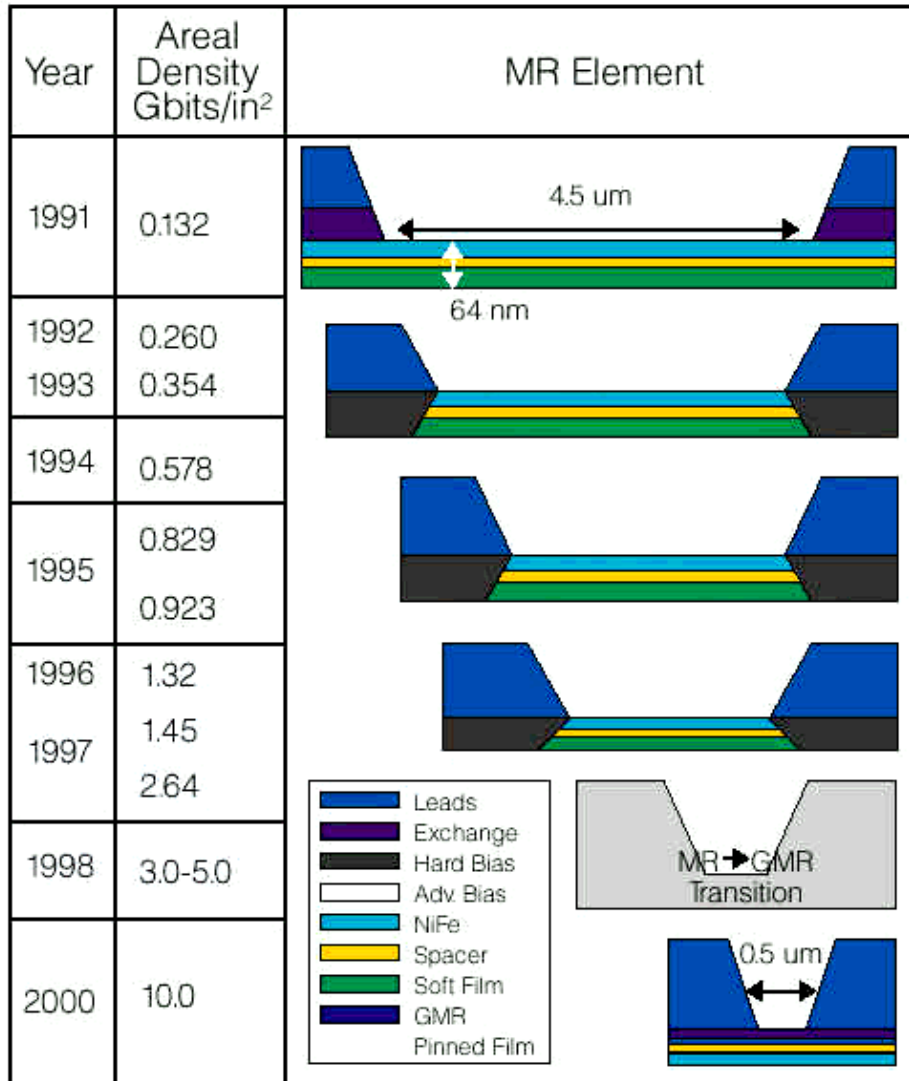
Spin Valve Structure



[gmr_pc.exe](#)



Spintronika



MTJ

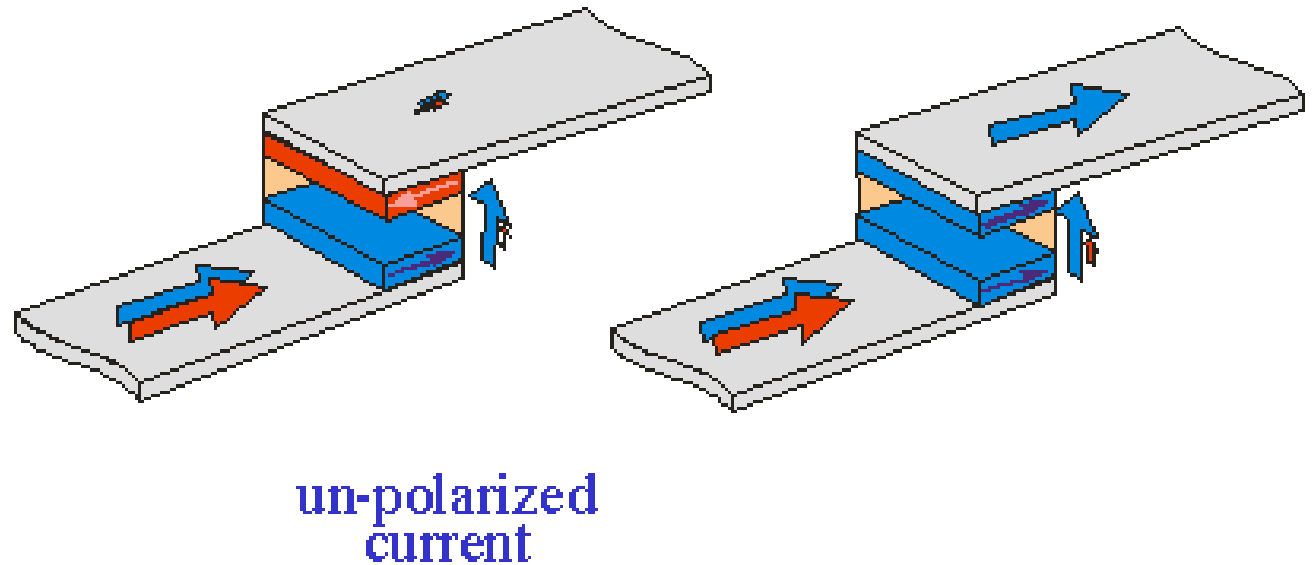
insulating space layer

*current perpendicular to
plane*

Ferromagnetic
electrode 1

Tunneling
barrier

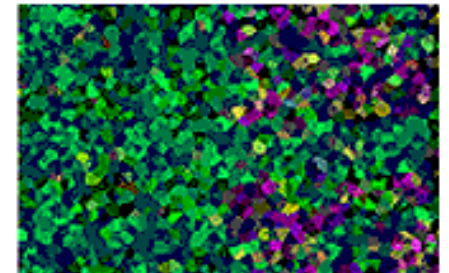
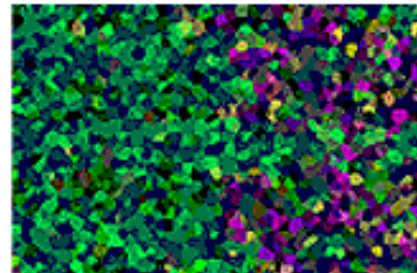
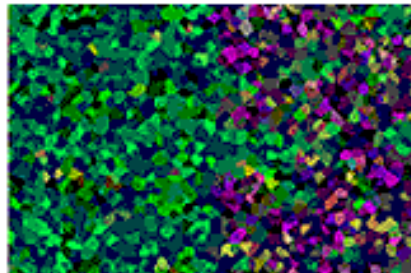
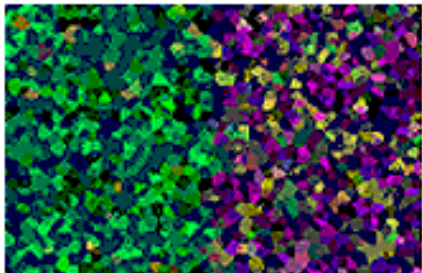
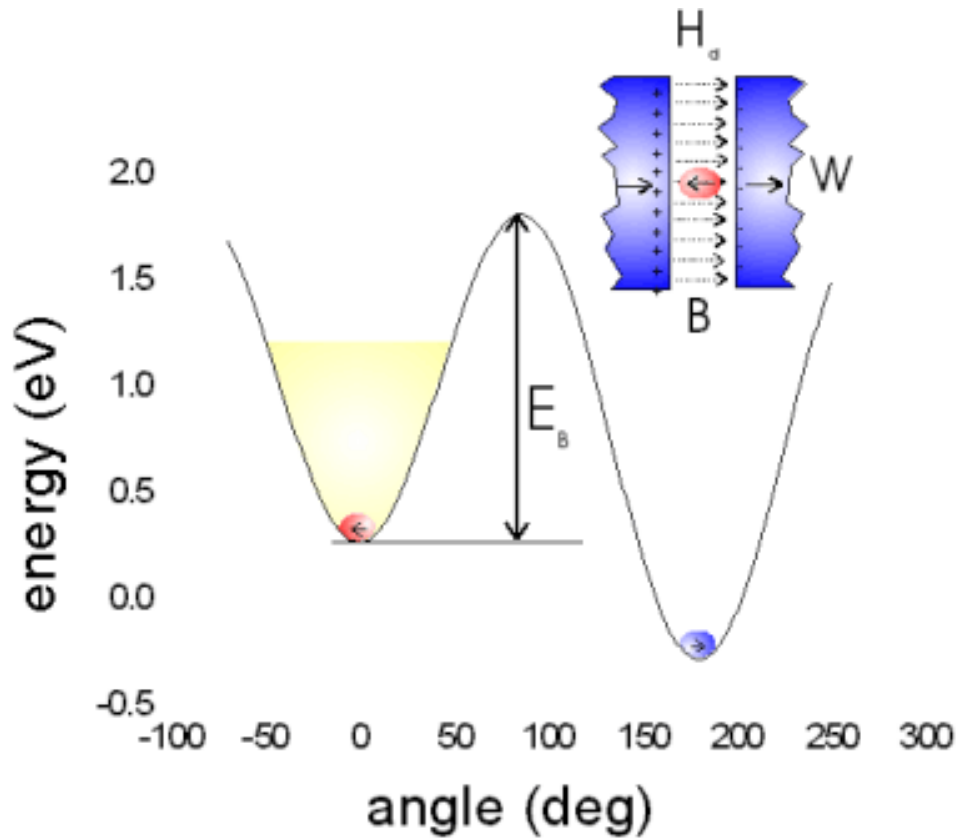
Ferromagnetic
electrode 2



first ferromagnetic electrode acts as spin filter
second FM layer acts as spin detector

Spintronika

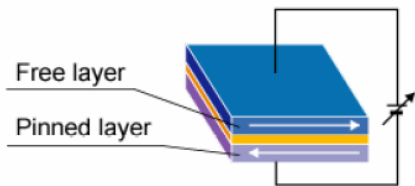
Limit Superparamagnetyczny



$$E_k = K_u V \sin^2(\vartheta)$$

Spintronika

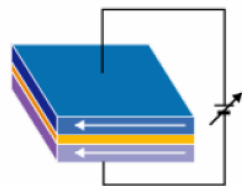
MRAM architecture



Resistance Large

Information "0"

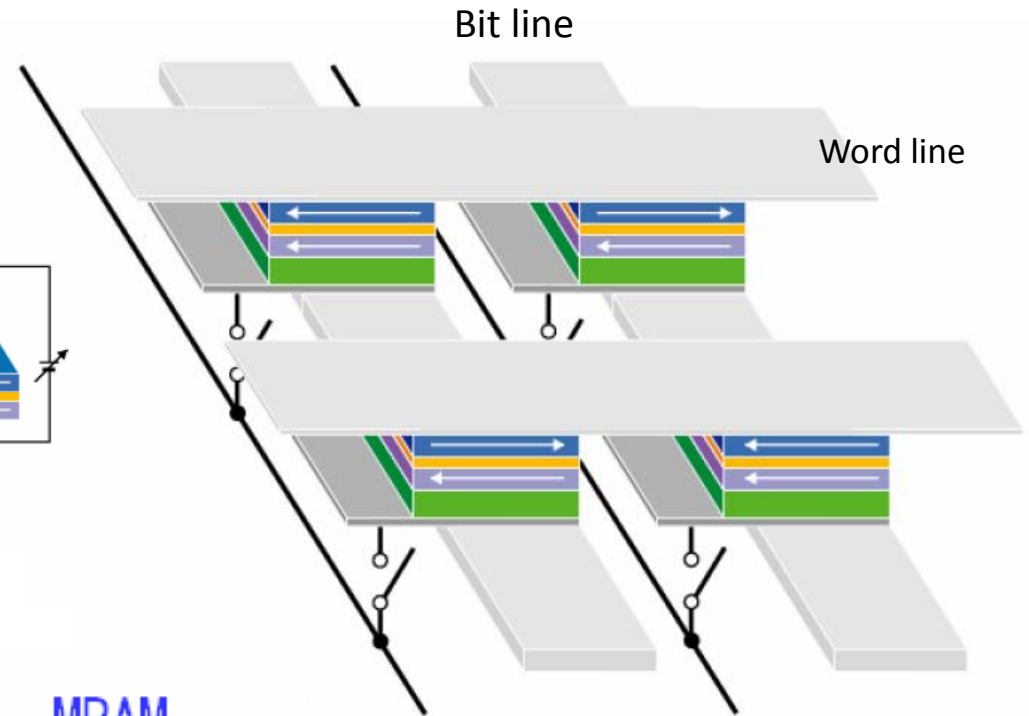
Magnetization Configuration Anti -parallel



Resistance Small

Information "1"

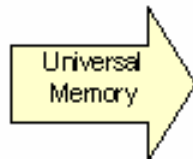
Magnetization Configuration parallel



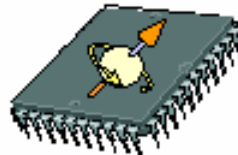
ROM  Non-volatile

DRAM  High Density

SRAM  High Speed



MRAM

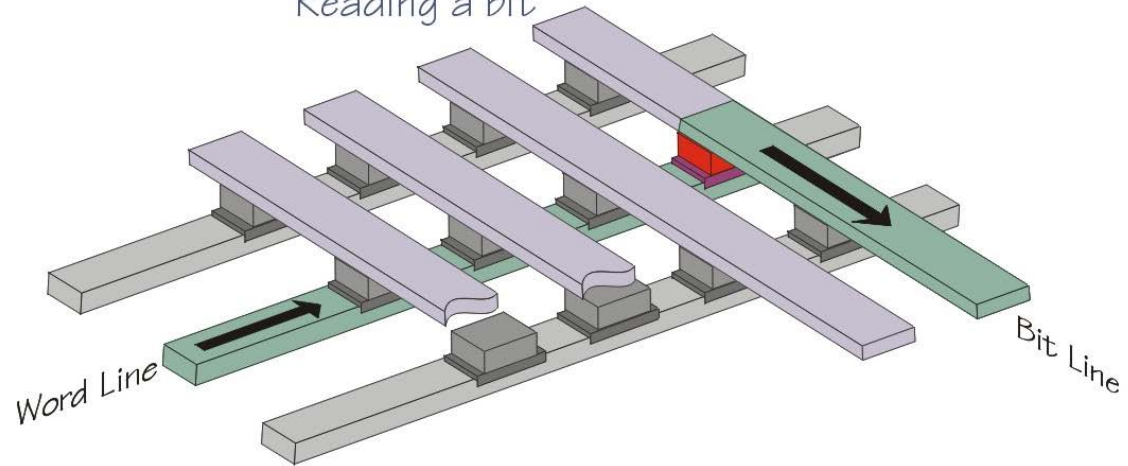


Non-volatile High Speed
High Density

MagRAM Architecture

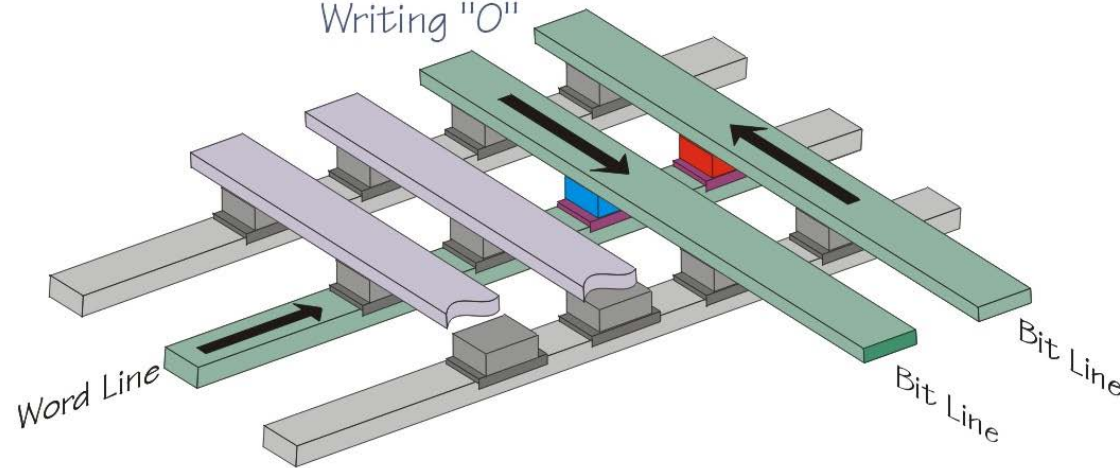


Reading a bit



Writing "1"

Writing "0"



MTJ MagRAM promises

- density of DRAM
- speed of SRAM
- non-volatility

Spintronika

Zalety MRAM

	DRAM	MRAM	Flash EEPROM	FeRAM
Trwałość zapisu	Nie	TAK	TAK	TAK
Czas zapisu	50ns	10 to 50ns	1us or longer	30 to 200ns
Czas odczytu	50ns	10ns to 1us	20 to 120ns	30 to 200ns
Metoda odczytu	Destructive	Non-Destructive	Destructive	Non-Destructive
Rewrite cycle	10^{15}	10^{15}	10^5	10^{12} to 10^{15}
Pobór prądu	100mA	10mA	10 to 100mA	10mA
Prąd uśpienia	100uA	1uA or lower	1uA or lower	1uA or lower

DRAM: Dynamic Random Access Memory

Flash EEPROM: Electrically Erasable Programmable Read-Only Memory

FeRAM: Ferroelectric RAM

MRAM pokonuje DRAM !!

Spintronika

Magnetoopór $\Delta R/R \sim$ kilka %

Gigantyczny magnetoopór

(Giant Magnetoresistance – GMR) 1988

$\Delta R/R \sim 20$ %

Kolosalny magnetoopór

(Colossal Magnetoresistance – CMR)

1993 $\Delta R/R \sim$ kilka rzędów

wielkości!

Kolosalny magnetoopór (CMR)

VOLUME 71, NUMBER 14

PHYSICAL REVIEW LETTERS

4 OCTOBER 1993

Giant Negative Magnetoresistance in Perovskitelike $\text{La}_{2/3}\text{Ba}_{1/3}\text{MnO}_x$ Ferromagnetic Films

R. von Helmolt,^{1,2} J. Wecker,¹ B. Holzapfel,¹ L. Schultz,¹ and K. Samwer²

¹Siemens AG, Research Laboratories, D-8520 Erlangen, Germany

²Institute of Physics, University of Augsburg, D-8900 Augsburg, Germany

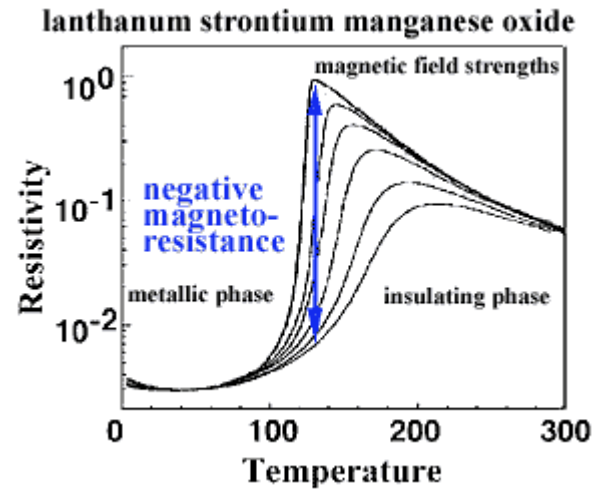
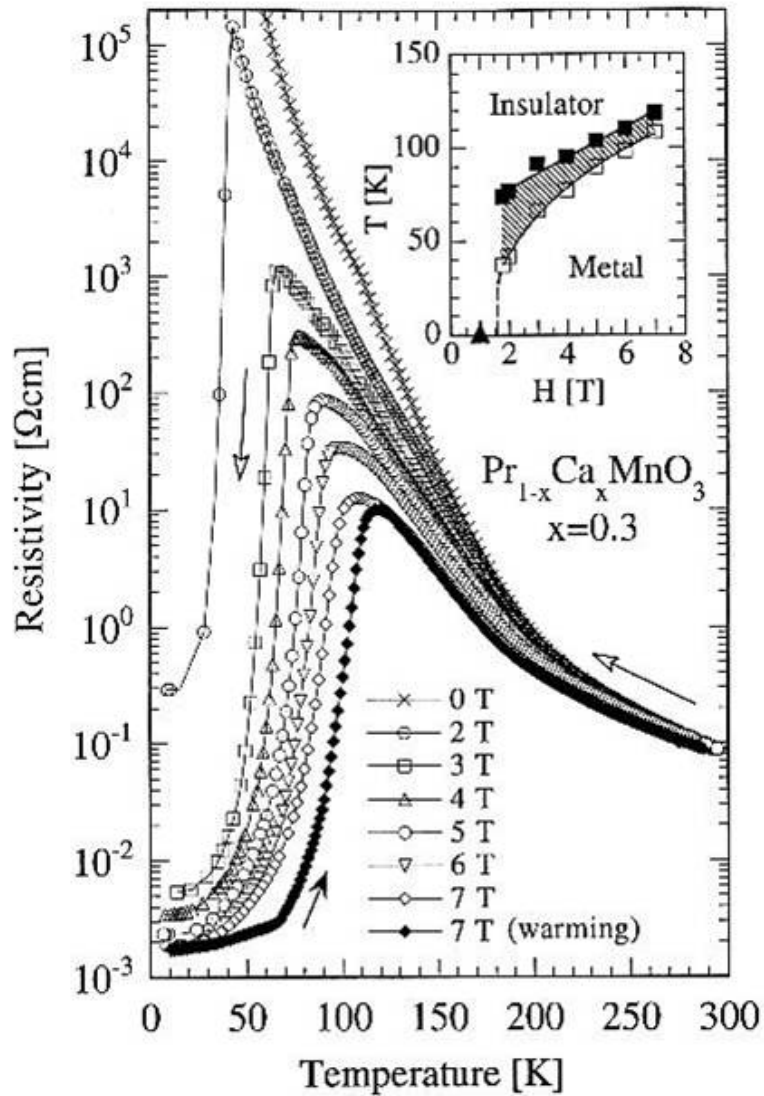
(Received 14 May 1993)

At room temperature a large magnetoresistance, $\Delta R/R(H=0)$, of 60% has been observed in thin magnetic films of perovskitelike La-Ba-Mn-O. The films were grown epitaxially on SrTiO_3 substrates by off-axis laser deposition. In the as-deposited state, the Curie temperature and the saturation magnetization were considerably lower compared to bulk samples, but were increased by a subsequent heat treatment. The samples show a drop in the resistivity at the magnetic transition, and the existence of magnetic polarons seems to dominate the electric transport in this region.

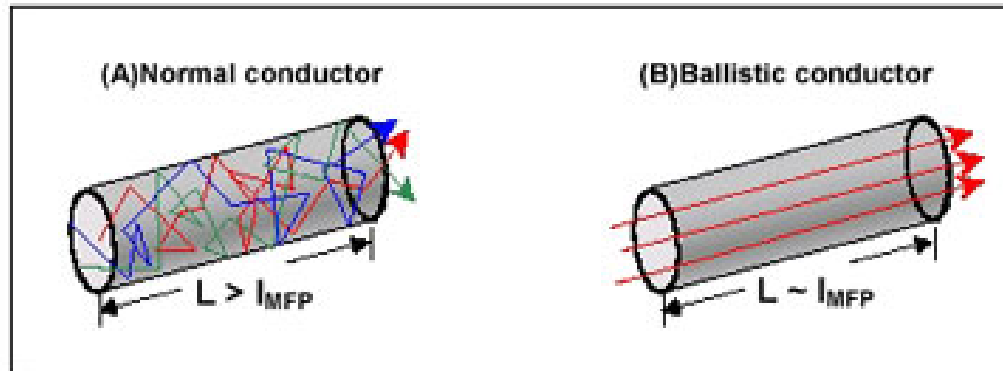
JIN S, TIEFEL TH, MCCORMACK M, FASTNACHT RA, RAMESH R, CHEN LH *et al.*

Thousandfold change in resistivity in magnetoresistive La-Ca-Mn-O films. *Science* **264**, 413–415 (1994)

Kolosalny magnetoopór (CMR)



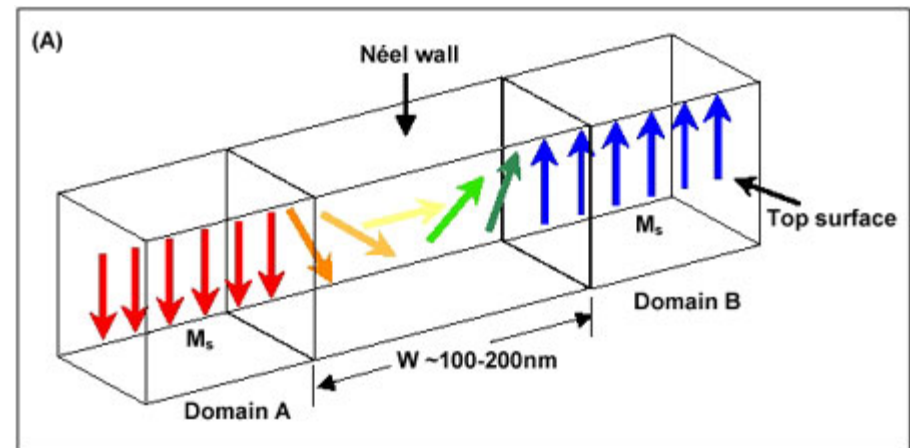
Nano-Spintronika



In normal conductors, the conductor length is larger than the electron mean free path and motion is zigzag, figure (A) above.

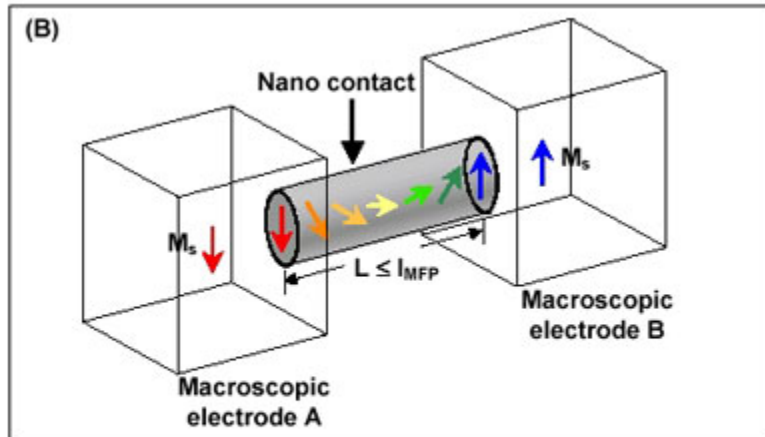
For electrons passing through a nanocontact, the nanocontact length is comparable to or less than electron mean free path and motion is ballistic, figure (B) above.

Ballistic Magnetoresistance

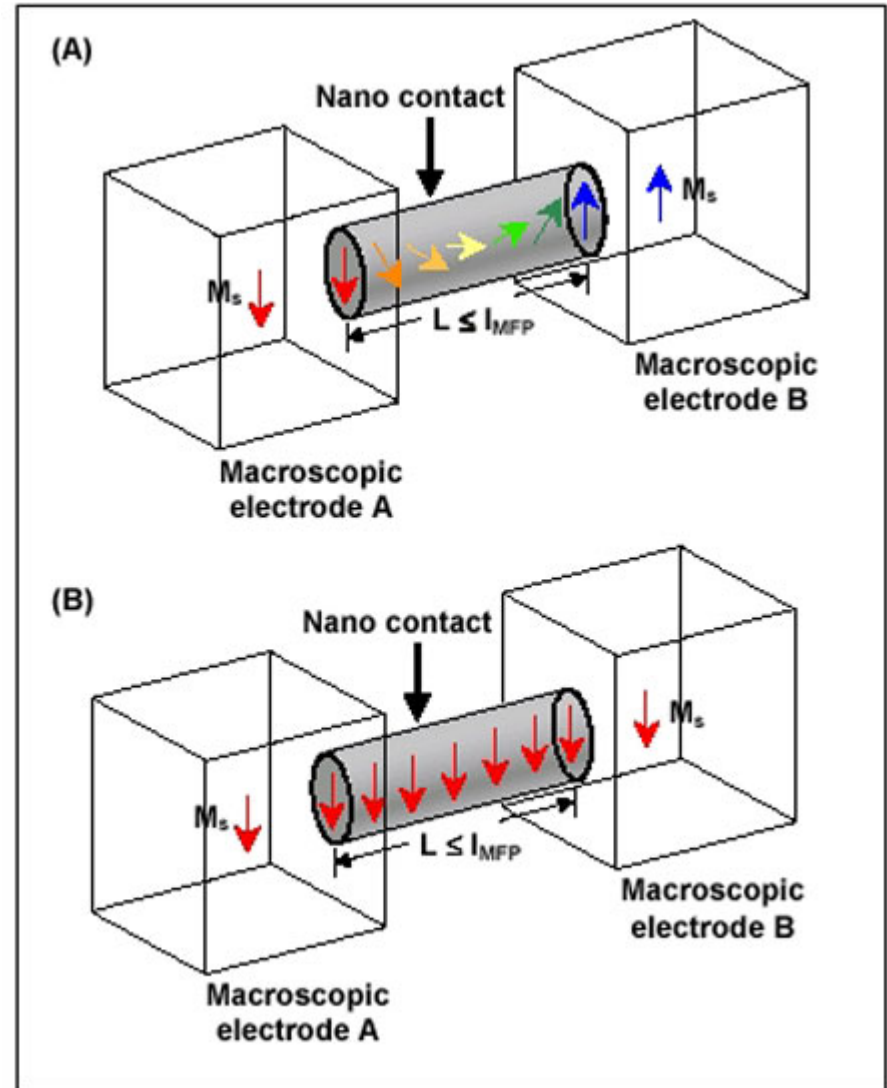


Néel wall in a thin film separates two domains of opposite magnetization. Wall width "W" is several hundred nanometers and BMR effect is negligible.

Nano-Spintronika



Wall width within a nanocontact separating two macroscopic electrodes of opposite magnetization. Wall width is in the nanometer range and electrons passing through the nanocontact experiences a huge scattering moment.



(A) Magnetization across nanocontact opposite in direction, giving rise to high resistance state.

(B) Magnetization across nanocontact parallel in direction, giving rise to low resistance state.

Transition from state A to state B by applied magnetic field - BMR effect.

Spintronika



The Nobel Prize in Physics 2007
Albert Fert, Peter Grünberg



Photo: U. Montan

Albert Fert



Photo: U. Montan

Peter Grünberg

The Nobel Prize in Physics 2007 was awarded jointly to Albert Fert and Peter Grünberg *"for the discovery of Giant Magnetoresistance"*

Pole magnetyczne i spin

Spin, oddziaływanie spin-orbita

$$H_{SO} = \lambda \hat{L}\hat{S}$$

baza: $|n, l, s, m_l, m_s\rangle$

dla stanów s

$$\hat{L} = 0 \Rightarrow \hat{L}\hat{S} = 0$$

dla stanów p

$$\hat{L} \neq 0 \Rightarrow \hat{L}\hat{S} \neq 0$$

g-czynnik, zapewnia zgodność z eksperymentem

Całkowity moment pędu: $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$ baza: $|j, m_j\rangle$

$$\lambda = \frac{1}{24} R_\infty \alpha$$

$$R_y = hcR_\infty$$

$$\hat{L} = 1, \hat{S} = \frac{1}{2}$$



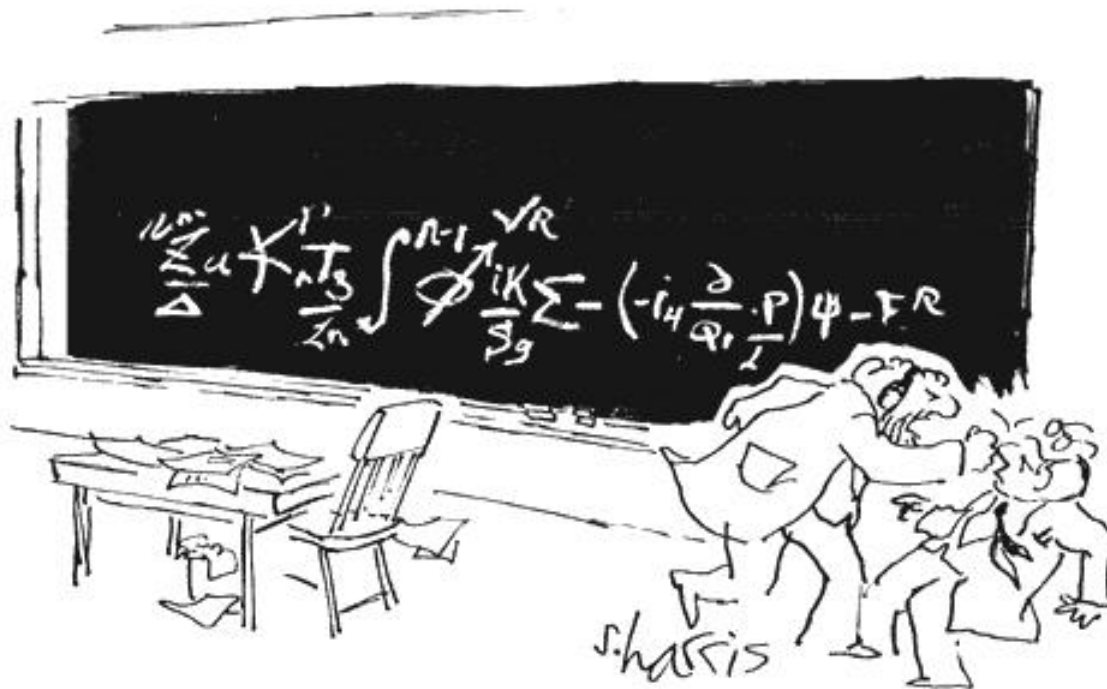
baza: $|n, l, s, j, m_j\rangle$

w skrócie: $|j, m_j\rangle$

Dipolowe przejścia optyczne.

Reguły wyboru, czas życia

S. Harris



"You want proof? I'll give you proof!"

Świat klasyczny i kwantowy

Szczególne rozwiązania równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Potencjał niezależny od czasu

Cząstka swobodna

Potencjał harmoniczny – na ćwiczeniach!

Potencjał w studni

Potencjał centralny (atom wodoru) – ważne!

Rachunek zaburzeń z czasem

Szczególne rozwiązania równania Schrödingera

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t)$$

Potencjał niezależny od czasu

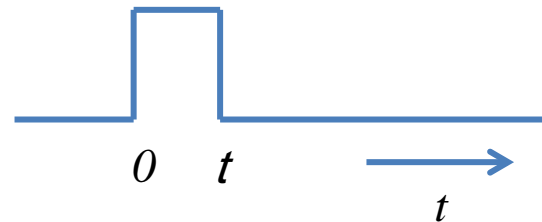
$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \quad \psi(x, t) = A\varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Potencjał ~~niezależny~~ niezależny od czasu

$$H = H_0 + V(t)$$

Najprostszy przypadek:

$$V(t) = \begin{cases} W(t) & \text{dla } 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & \text{dla } t < 0 \text{ i } t > \tau \end{cases}$$



Rachunek zaburzeń z czasem

Równanie Schrödingera z czasem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_0 + V(t)$$

$$\psi(x, t) = \sum_n A_n(t) \varphi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}$$

analogicznie

Potencjał niezależny od czasu

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

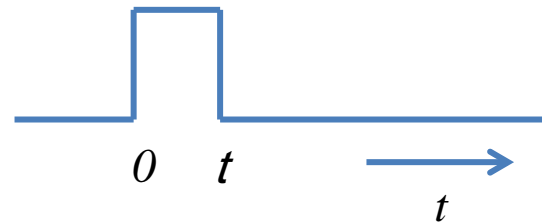
$$\psi(x, t) = A \varphi(x) e^{-iEt / \hbar}$$

Potencjał ~~niezależny~~ niezależny od czasu

$$H = H_0 + V(t)$$

Najprostszy przypadek:

$$V(t) = \begin{cases} W(t) & \text{dla } 0 \leq t \leq \tau \\ 0 & \text{dla } t < 0 \text{ i } t > \tau \end{cases}$$



Rachunek zaburzeń z czasem

Równanie Schrödingera z czasem:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = H_0 + V(t)$$

$$\psi(x, t) = \sum_n A_n(t) \varphi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}$$

Dla $t < 0$ układ był w stanie początkowym m

$$\psi(x, t < 0) = \varphi_m(x) e^{-iE_m t / \hbar}$$

Dla $t > \tau$ układ będzie w jakimś innym stanie

$$\psi(x, t > \tau) = \sum_n A_{nm}(\tau) \varphi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}$$

Przy czym prawdopodobieństwo tego, że układ będzie w stanie stacjonarnym o energii E_n dane jest przez prawdopodobieństwo przejścia układu w czasie t ze stanu początkowego m do stanu n .

$$w_{nm} = |A_{mn}(\tau)|^2$$

Szukamy współczynników A_{mn} .

$$i\hbar \frac{d}{dt} A_n(t) = \sum_l \langle n | W(t) | l \rangle e^{+i\omega_{nl} t}$$

$$\langle n | W(t) | l \rangle = \int \varphi_n^* W(t) \varphi_l dx$$

$$\hbar\omega_{nl} = E_n - E_l$$

Rachunek zaburzeń z czasem

Podstawiamy do równania, bierzemy pod uwagę warunek początkowy (patrz *Mechanika kwantowa* S.A Dawydov)

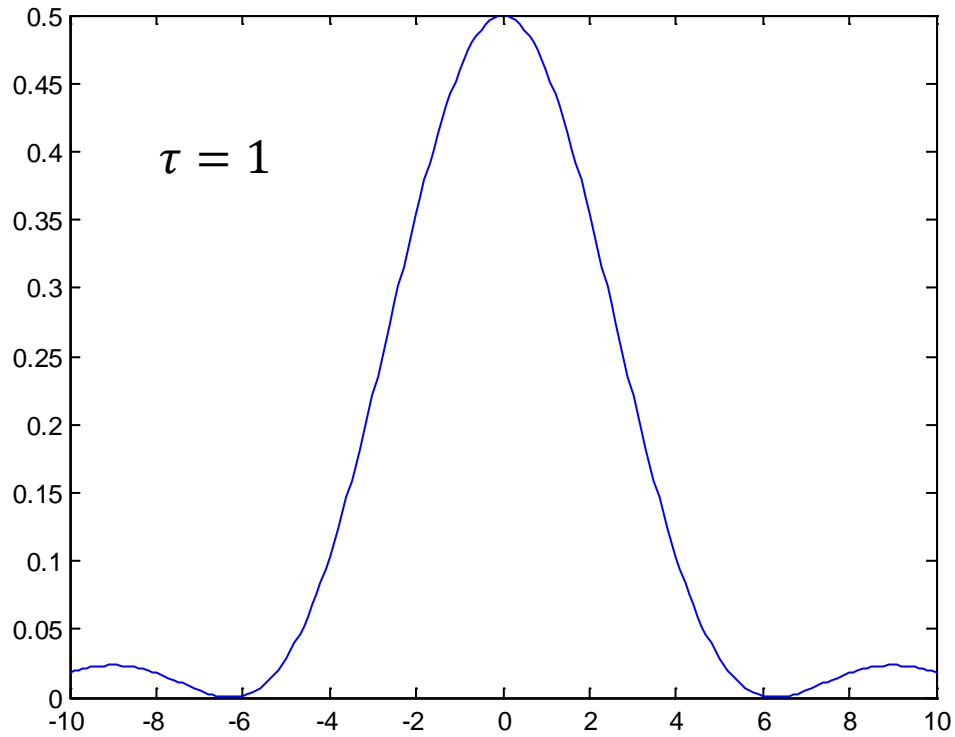
$$w_{mn} = |A_{mn}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle m|W(t)|n\rangle e^{+i\omega_{nl}t} dt \right|^2$$

Dla przypadku gdy $W(t) = \text{const} = W$ dla $0 \leq t \leq \tau$ łatwo jest policzyć:

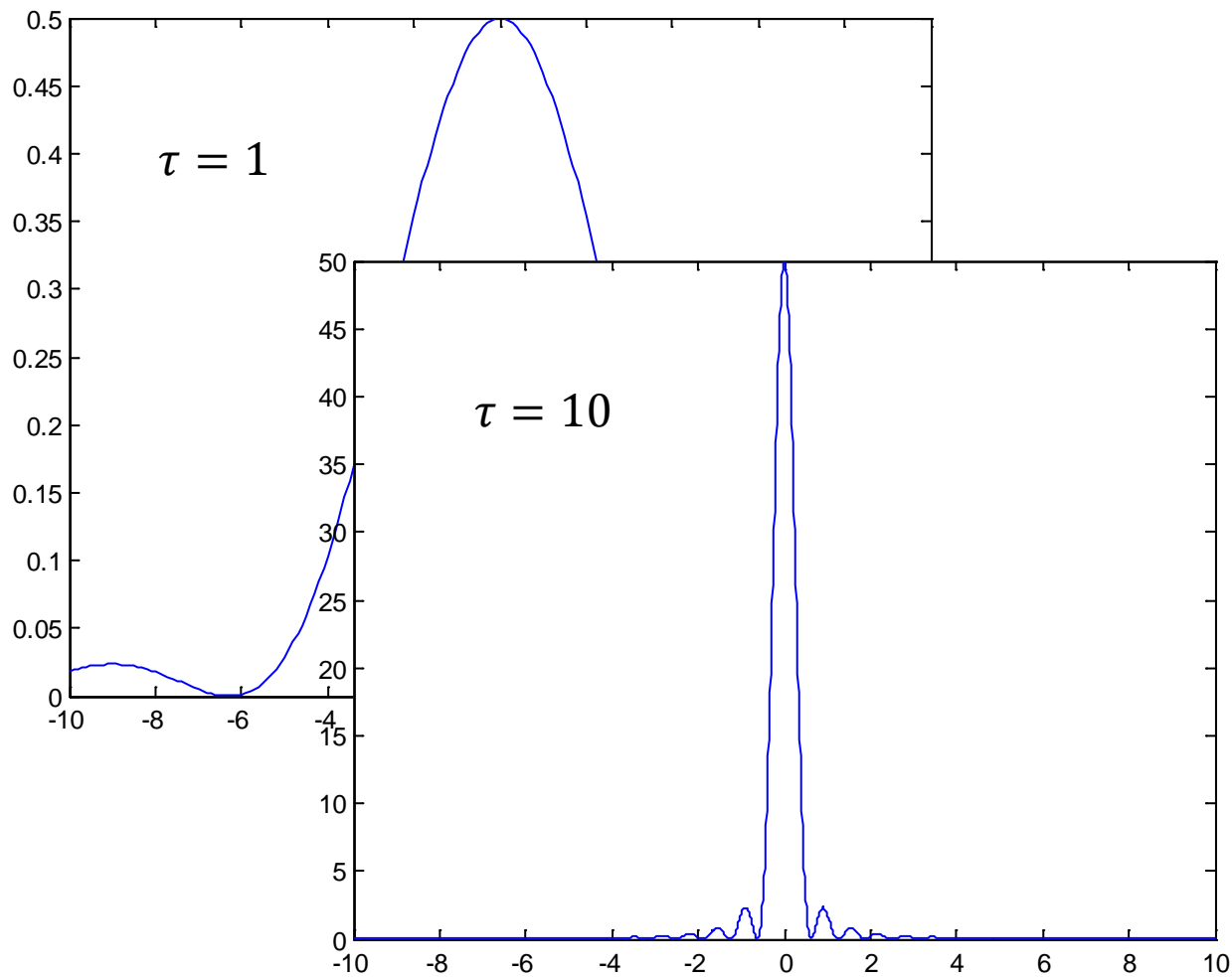
$$\int_0^\tau \langle n|W(t)|l\rangle e^{i\omega_{nl}t} dt = \frac{e^{i\omega_{nl}\tau} - 1}{i\omega_{nl}} \langle n|W|l\rangle$$

Wtedy prawdopodobieństwo przejścia w czasie działania zaburzenia jest dane przez

$$w_{mn} = |A_{mn}(\tau)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} |\langle m|W|n\rangle|^2 \frac{1 - \cos \left[(E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[(E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$

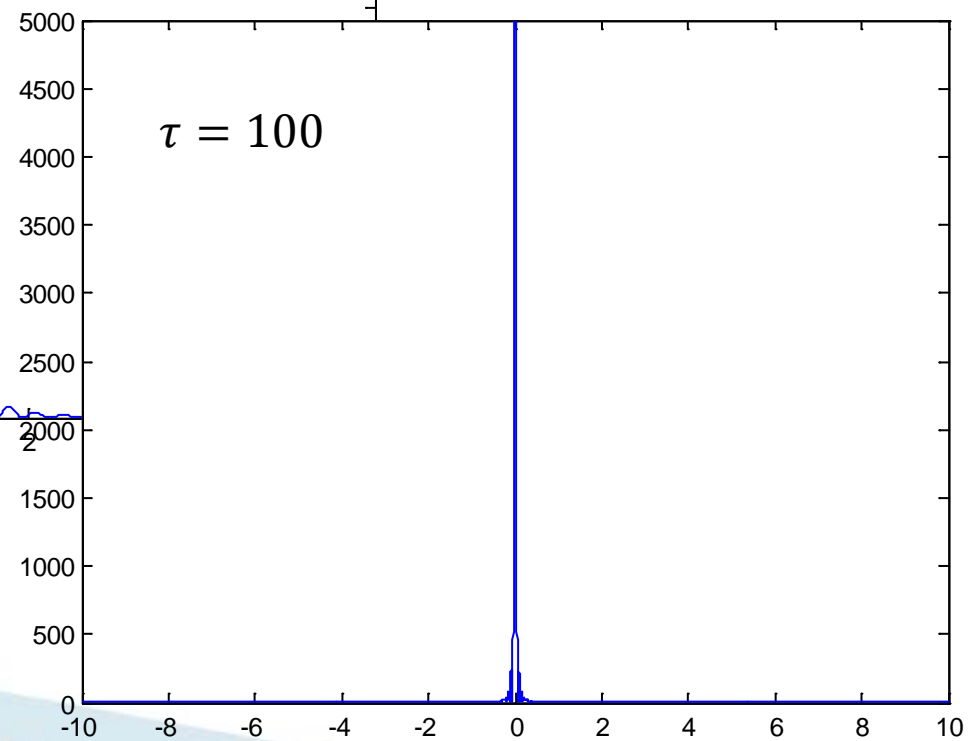
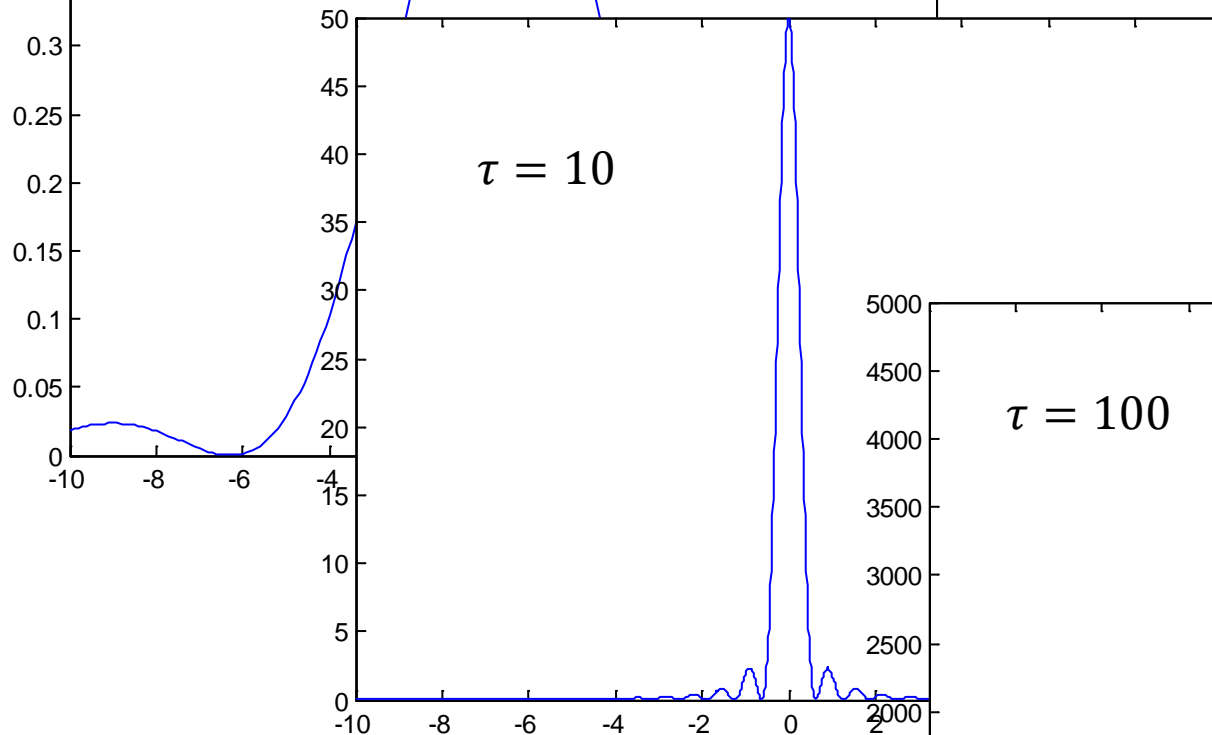
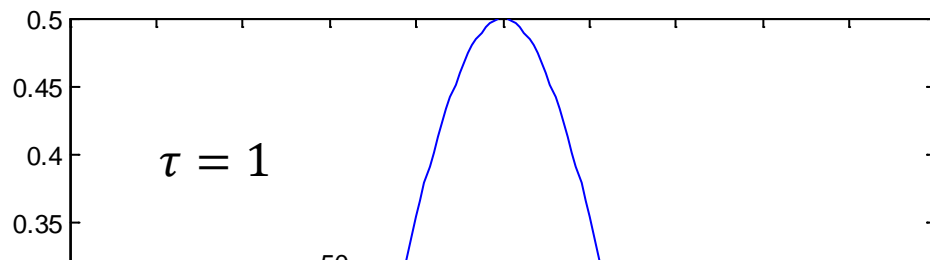


$$\frac{1 - \cos \left[(E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[(E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$



$$\frac{1 - \cos \left[(E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[(E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$

$$\frac{1 - \cos \left[(E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[(E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$



Rachunek zaburzeń z czasem

Podstawiamy do równania, bierzemy pod uwagę warunek początkowy (patrz *Mechanika kwantowa* S.A Dawydov)

$$w_{mn} = |A_{mn}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle m|W(t)|n\rangle e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2$$

Dla przypadku gdy $W(t) = \text{const} = W$ dla $0 \leq t \leq \tau$ łatwo jest policzyć:

$$\int_0^\tau \langle m|W(t)|n\rangle e^{i\omega_{mn}t} dt = \frac{e^{i\omega_{mn}\tau} - 1}{i\omega_{mn}} \langle m|W|n\rangle$$

Wtedy prawdopodobieństwo przejścia w czasie działania zaburzenia jest dane przez

$$w_{mn} = |A_{mn}(\tau)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} |\langle m|W|n\rangle|^2 \frac{1 - \cos \left[(E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[(E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2}$$

$$\text{Dla } \tau \gg \frac{\hbar}{E_n - E_m} \quad \frac{1 - \cos \left[(E_n - E_m) \frac{\tau}{\hbar} \right]}{\left[(E_n - E_m) \frac{1}{\hbar} \right]^2} \approx \tau \pi \hbar \delta(E_n - E_m)$$

Rachunek zaburzeń z czasem

Ostatecznie prawdopodobieństwo przejścia

$$w_{mn} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m|W|n\rangle|^2 \tau \delta(E_m - E_n)$$

Prawdopodobieństwo przejścia jest proporcjonalne do czasu działania zaburzenia, więc prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu dane jest przez:

$$P_{mn} = \frac{w_{mn}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m|W|n\rangle|^2 \delta(E_m - E_n)$$

Rachunek zaburzeń z czasem

W przypadku gdy zaburzeniem jest fala periodyczna wracamy do ogólnego wzoru:

$$w_{nm} = |A_{nm}(\tau)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\tau \langle n|W(t)|m\rangle e^{+i\omega_{nm}t} dt \right|^2$$

dla przypadku gdy $W(t) = w^\pm e^{\pm i\omega t}$ dla $0 \leq t \leq \tau$ łatwo jest policzyć:

$$\int_0^\tau \langle n|w^\pm|l\rangle e^{i(\omega_{nl} \pm \omega)t} dt = \frac{e^{i(\omega_{nl} \pm \omega)\tau} - 1}{i(\omega_{nl} \pm \omega)} \langle n|w^\pm|l\rangle$$

Prawdopodobieństwo przejścia:

$$w_{nm} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|w^\pm|m\rangle|^2 \tau \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Prawdopodobieństwo przejścia na jednostkę czasu dane jest przez:

$$P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|w^\pm|m\rangle|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Rachunek zaburzeń z czasem

Wnioski:

$$W(t) = w^\pm e^{\pm i\omega t}$$
$$0 \leq t \leq \tau$$

$$P_{nm} = \frac{w_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | w^\pm | m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Przejścia są możliwe tylko do stanów $E_m = E_n \pm \hbar\omega$

Układ albo może energię zyskać (zaabsorbować) albo stracić (wyemitować)

Fala elektromagnetyczna

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$P_{nm} = \frac{\omega_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | w^\pm | m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

Ogólna postać hamiltonianu w polu elektromagnetycznym dana jest przez potencjał wektorowy A i skalarny φ :

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 - e\varphi + V$$

Przyjmując odpowiednie cechowanie $\nabla \cdot A = 0$, $\text{div} A = 0$ oraz zaniedbując wyrazy z A^2 (słabe promieniowanie)

$$H \approx \frac{e}{m} \vec{A} \vec{p}$$

Potencjał wektorowy dla fali elektromagnetycznej można wprowadzić w postaci:

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \left\{ e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} + e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \right\}$$

$$\vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad \vec{E} = 2\omega \vec{A}_0 \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})$$

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} \quad \vec{B} = 2(\vec{k} \times \vec{A}_0) \sin(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})$$

Fala elektromagnetyczna

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$H \approx \frac{e}{m} \vec{A} \vec{p}$$

$$P_{nm} = \frac{\omega_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | w^\pm | m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \left\{ e^{-i(\omega t - \vec{k} \vec{r})} + e^{i(\omega t - \vec{k} \vec{r})} \right\}$$

rozwijając w szereg $\vec{p} e^{-i(\vec{k} \vec{r})} \approx \vec{p} \left[1 + (-i\vec{k} \vec{r}) + \frac{(-i\vec{k} \vec{r})^2}{2!} + \dots \right]$

Korzystamy z reguł komutacji $[\vec{r}, H_0] = \vec{r} H_0 - H_0 \vec{r} = \frac{i\hbar}{m} \vec{p}$

dostajemy $\langle n | \vec{p} | m \rangle = im\omega_{nm} \langle n | \vec{r} | m \rangle$

Kolejne człony w rozwinięciu dają przejścia dipolowe magnetyczne, kwadrupolowe elektryczne itd.

Fala elektromagnetyczna

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$H \approx \frac{e}{m} \vec{A} \vec{p}$$

$$P_{nm} = \frac{\omega_{nm}}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | w^\pm | m \rangle|^2 \delta(E_n - E_m \pm \hbar\omega)$$

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \left\{ e^{-i(\omega t - \vec{k} \vec{r})} + e^{i(\omega t - \vec{k} \vec{r})} \right\}$$

rozwijając w szereg $\vec{p} e^{-i(\vec{k} \vec{r})} \approx \vec{p} \left[1 + (-i\vec{k} \vec{r}) + \frac{(-i\vec{k} \vec{r})^2}{2!} + \dots \right]$

po żmudnych obliczeniach dostajemy prawdopodobieństwo emisji promieniowania elektromagnetycznego **dipolowego** (opisanego operatorem $e \vec{r}$)

$$A_{nm} = \frac{\omega_{nm}}{\tau} = \frac{\omega_{nm}^3 e^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} |\langle n | \vec{r} | m \rangle|^2 = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} |\langle n | \vec{r} | m \rangle|^2$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Jest to jeden ze współczynników Einsteina (lasery itp. – za tydzień!) dla stanów niezdegenerowanych

Fala elektromagnetyczna

Zaburzenie w postaci fali elektromagnetycznej.

$$A_{nm} = \frac{\omega_{nm}^3 e^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} |\langle m | \vec{r} | n \rangle|^2 = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} |\langle m | \vec{r} | n \rangle|^2$$

W przypadku degeneracji stanów wprowadza się „siłę linii”

$$A_{nm} = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} \frac{S_{mn}}{g_m} \quad S_{nm} = \sum_i \sum_j |\langle n_i | \vec{r} | m_j \rangle|^2$$

degeneracja poziomego wyjściowego

W przypadku stanów atomu wodoru wygodnie jest przedstawić operator \vec{r} w postaci kołowej:

$$|\langle n_i | \vec{r} | m_j \rangle|^2 = |\langle n_i | z | m_j \rangle|^2 + \frac{1}{2} |\langle n_i | x + iy | m_j \rangle|^2 + \frac{1}{2} |\langle n_i | x - iy | m_j \rangle|^2$$

łatwo jest wtedy całkować harmoniki sferyczne, bo:

Sprawdzić!

$$z = r \cos \vartheta$$

$$x \pm iy = r e^{\pm i\varphi} \sin \vartheta$$

Fala elektromagnetyczna

Kilka uwag

$$A_{nm} = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} \frac{S_{mn}}{g_m}$$

$$S_{nm} = \sum_i \sum_j |\langle n_i | \vec{r} | m_j \rangle|^2$$

Obliczając współczynnika Einsteina dla np. atomu wodoru możemy dostać tzw. *reguły wyboru przejść optycznych*

$\Delta l = \pm 1$ zas. zach. pędu – foton ma spin całkowity

$\Delta m = \pm 1$ przejścia w polaryzacji kołowej s

$\Delta m = 0$ przejścia w polaryzacji liniowej p

Przejścia optyczne są możliwe tylko między poziomami o różnej symetrii, gdyż operator \vec{r} jest antysymetryczny

Na ćwiczeniach!

Fala elektromagnetyczna

Kilka uwag

$$A_{nm} = \frac{4\alpha}{3} \frac{\omega_{nm}^3}{c^2} \frac{S_{mn}}{g_m} \quad S_{nm} = \sum_i \sum_j |\langle n_i | \vec{r} | m_j \rangle|^2$$

Wprowadza się pojęcie *czasu życia ze względu na zanik radiacyjny*:

$$\tau_{nm} = \frac{1}{A_{nm}}$$

W przypadku przejść optycznych dipolowych czas życia jest rzędu nanosekund.

Moc przejścia optycznego $P_{nm} = A_{nm} \hbar \omega_{nm}$

Fala elektromagnetyczna

Przykład

Znajdź polaryzacje przejść optycznych $n=1$ do $n=2$ atomu wodoru w polu magnetycznym z pominięciem spinu (normalny efekt Zeemana). Rozważ propagację światła równoległą i prostopadłą do pola magnetycznego.

$$H' = \frac{\mu_B}{\hbar} (\hat{L} + g\hat{S}) \vec{B}$$

$$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp\left(-\frac{r}{a}\right)$$

$$\psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}} \left(2 - \frac{r}{a}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)$$

$$\psi_{2p0} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}} \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \cos\theta$$

$$\psi_{2p\pm} = \frac{1}{8\sqrt{\pi a^3}} \frac{r}{a} \exp\left(-\frac{r}{2a}\right) \sin\theta \exp(\pm i\varphi)$$

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

$$R_{20}(r) = \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} 2 \left(1 - \frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right)$$

$$R_{21}(r) = \left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2} \frac{2}{\sqrt{3}} \left(\frac{Zr}{2a}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a}\right)$$

$$Y_{00}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{10}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos(\theta)$$

$$Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin(\theta) \exp(\pm i\varphi)$$