1. POTENCJAŁ SKALARNY I WEKTOROWY

Są to pola matematyczne, za pomocą których można opisać pole elektromagnetyczne w alternatywny, łatwiejszy sposób (4 elementy) niż dla $\bar{E}(\bar{r},t)$ i $\bar{B}(\bar{r},t)$ (6 elementów).

→ fizyka: pole magnetyczne $\bar{B}(\bar{r},t)$ jest bezźródłowe, tj.

$\nabla \bar{B}(\bar{r},t) = 0$ ⟺ matematycznie: $\bar{B}(\bar{r},t)$ można opisać jako rotację jakiegoś wektora

$$\boxed{\bar{B}(\bar{r},t) = \nabla \times \bar{A}(\bar{r},t)} \qquad (1a)$$

Tym wektorem jest tzw. potencjał wektorowy $\bar{A}(\bar{r},t)$.

→ fizyka: prawo Faradaya,

$$\nabla \times \bar{E}(\bar{r},t) = -\frac{\partial \bar{B}(\bar{r},t)}{\partial t} \overset{(1a)}{=} -\frac{\partial}{\partial t}\left(\nabla \times \bar{A}(\bar{r},t)\right) = -\nabla \times \frac{\partial \bar{A}(\bar{r},t)}{\partial t}$$

$$\nabla \times \left(\bar{E}(\bar{r},t) + \frac{\partial \bar{A}(\bar{r},t)}{\partial t}\right) = \bar{0}$$

Matematycznie: Jeśli rotacja z jakiegoś wektora jest zerowa, to ten wektor musi być gradientem pewnej funkcji skalarnej. Aby zachować zgodność z konwencją historyczną elektrostatyki przyjmujemy, że ta funkcja to $-U(\bar{r},t)$, gdzie $U(\bar{r},t)$ to tzw. potencjał skalarny. Zatem

$$\boxed{\bar{E}(\bar{r},t) = -\nabla U(\bar{r},t) - \frac{\partial \bar{A}(\bar{r},t)}{\partial t}} \qquad (1b)$$

Potencjał skalarny $U(\bar{r},t)$ → generowany przez ładunki elektryczne

Potencjał wektorowy $\bar{A}(\bar{r},t)$ → generowany przez ruch ładunków elektrycznych (tj. prąd elektryczny)

→ elektrostatyka = nieruchome ładunki = tylko $U(\bar{r},t)$ obecne

→ elektrodynamika = ruchome ładunki = obecne $U(\bar{r},t)$ i $\bar{A}(\bar{r},t)$

Opis pola elektromagnetycznego: $\bar{A}(\bar{r},t)$ i $U(\bar{r},t)$ → 4 elementy

trudniej → $\bar{E}(\bar{r},t)$ i $\bar{B}(\bar{r},t)$ → 6 elementów

2. HAMILTONIAN MINIMALNEGO ODDZIAŁYWANIA

dla pojedynczego elektronu oddziałującego z zewnętrznym polem elektromagnetycznym. Elektron oddziałuje również z otoczeniem, np. atomem, atomami emitera (np. kropki kwantowej), atomami kryształu półprzewodnika itp.

$$\hat{H} = \underbrace{\frac{1}{2m}\left(\hat{p} - q\bar{A}(\bar{r},t)\right)^2}_{\text{człon kinetyczny (kwantowy operator energii kinetycznej)}} + qU(\bar{r},t) + V(\bar{r}) \qquad (2)$$

$V(\bar{r})$ - potencjał elektrostatyczny (nie zależy od czasu!) wiążący elektron z atomem/emiterem/kryształem

m - masa elektronu

! konwencja: $q<0$ → ładunek elektronu

(*) $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ → operator pędu elektronu

$\bar{A}(\bar{r},t)$ → w zależności od modelu wektor albo operator wektorowy

$U(\bar{r},t)$ i $V(\bar{r},t)$ → w zależności od modelu skalar albo operator skalarny

$\bar{A}(\bar{r},t)$ i $U(\bar{r},t)$ → zewnętrzne pole elektromagnetyczne (np. laser oświetlający emiter)

Z (2) i (*) mamy:

$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\bar{A}(\bar{r},t)\right)^2 + qU(\bar{r},t) + V(\bar{r})} \qquad (2a)$$

Niech $\psi(\bar{r},t)$ - funkcja falowa elektronu. Wówczas mamy równanie Schrödingera zależne od czasu:

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial\psi(\bar{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\bar{r},t)} \qquad (3a)$$

a) faza χ funkcji falowej → jest globalna, gdy nie zależy ani od położenia $\bar{r}$ ani czasu t. Wówczas

$$\psi(\bar{r},t) = e^{i\chi}\phi(\bar{r},t) \qquad (4a)$$

r-nie Schrödingera:

$$L^{3a} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\chi}\phi(\bar{r},t)\right) = e^{i\chi}\, i\hbar \frac{\partial \phi(\bar{r},t)}{\partial t},$$

$$P^{3a} \overset{(2a)}{=} e^{i\chi}\hat{H}\phi(\bar{r},t).$$

Czyli (3a) jest spełnione również dla $\phi(\bar{r},t)$

Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w $\psi(\bar{r},t)$

$$P_\psi = |\psi(\bar{r},t)|^2 \overset{(4a)}{=} |e^{i\chi}\phi(\bar{r},t)|^2 = |\phi(\bar{r},t)| = P_\phi \quad (5a)$$

Takie same gęstości prawdopodobieństwa, $P_\psi = P_\phi$ i równanie Schrödingera (3a), zatem $\psi(\bar{r},t)$ i $\phi(\bar{r},t)$ odpowiadają temu samemu stanowi. Faza globalna χ nic fizycznie nie zmienia.

b) faza lokalna $\chi(\bar{r},t)$ → chcemy, by również tu, dla

$$\psi(\bar{r},t) = e^{i\chi(\bar{r},t)}\phi(\bar{r},t), \quad (4b)$$

było spełnione $P_\psi = P_\phi$ oraz równanie Schrödingera dla obu funkcji falowych $\psi(\bar{r},t)$ i $\phi(\bar{r},t)$.

$$P_\psi = |\psi(\bar{r},t)|^2 \overset{(4b)}{=} |e^{i\chi(\bar{r},t)}\phi(\bar{r},t)|^2 = |\phi(\bar{r},t)| = P_\phi \quad (5b) \checkmark$$

→ równanie Schrödingera:

- człon kinetyczny

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\bar{A}(\bar{r},t)\right)^2\psi(\bar{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\bar{A}(\bar{r},t)\right)\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\bar{A}(\bar{r},t)\right)\psi(\bar{r},t) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\bar{r},t) + i\frac{q\hbar}{2m}\nabla\left(\bar{A}(\bar{r},t)\psi(\bar{r},t)\right) + i\frac{q\hbar}{2m}\bar{A}(\bar{r},t)\nabla\psi(\bar{r},t) + \frac{q^2}{2m}\bar{A}^2(\bar{r},t)\psi(\bar{r},t) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\bar{r},t) + i\frac{q\hbar}{2m}\left(\nabla\bar{A}(\bar{r},t)\right)\psi(\bar{r},t) + i\frac{q\hbar}{m}\bar{A}(\bar{r},t)\nabla\psi(\bar{r},t) + \frac{q^2}{2m}\bar{A}^2(\bar{r},t)\psi(\bar{r},t) = \dots$$

$$\rightarrow \nabla\psi(\bar{r},t) = \nabla\left(e^{i\chi(\bar{r},t)}\phi(\bar{r},t)\right) =$$

$$= i\left(\nabla\chi(\bar{r},t)\right)e^{i\chi(\bar{r},t)}\phi(\bar{r},t) + e^{i\chi(\bar{r},t)}\nabla\phi(\bar{r},t)$$

$$\rightarrow \nabla^2\psi(\bar r,t) = i\nabla\Big(\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)e^{i\chi(\bar r,t)}\phi(\bar r,t)\Big) + \nabla\Big(e^{i\chi(\bar r,t)}\nabla\phi(\bar r,t)\Big) =$$

$$= i\big(\nabla^2\chi(\bar r,t)\big)e^{i\chi(\bar r,t)}\phi(\bar r,t) + i^2\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)^2 e^{i\chi(\bar r,t)}\phi(\bar r,t)$$

$$+2i\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)e^{i\chi(\bar r,t)}\nabla\phi(\bar r,t) + e^{i\chi(\bar r,t)}\nabla^2\phi(\bar r,t) =$$

$$= e^{i\chi(\bar r,t)}\Big[i\big(\nabla^2\chi(\bar r,t)\big)\phi(\bar r,t) - \big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)^2\phi(\bar r,t) + 2i\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\big(\nabla\phi(\bar r,t)\big) + \nabla^2\phi(\bar r,t)\Big]$$

$$= e^{i\chi(\bar r,t)}\Big[\underbrace{-i\frac{\hbar^2}{2m}\big(\nabla^2\chi(\bar r,t)\big)\phi(\bar r,t)}_{1} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{2m}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)^2\phi(\bar r,t)}_{2} \underbrace{-i\frac{\hbar^2}{m}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\big(\nabla\phi(\bar r,t)\big)}_{3}$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\big(\nabla^2\phi(\bar r,t)\big)}_{4} + \underbrace{i\frac{q\hbar}{2m}\big(\nabla\bar A(\bar r,t)\big)\phi(\bar r,t)}_{5} + \underbrace{i\frac{q\hbar}{m}\bar A(\bar r,t)\big(\nabla\phi(\bar r,t)\big)}_{6}$$

$$\underbrace{-\frac{q\hbar}{m}\bar A(\bar r,t)\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\phi(\bar r,t)}_{7} + \underbrace{\frac{q^2}{2m}\bar A^2(\bar r,t)\phi(\bar r,t)}_{8} =$$

2,7,8

$$= e^{i\chi(\bar r,t)}\frac{1}{2m}\Big(q\bar A(\bar r,t) - \hbar\big[\nabla\chi(\bar r,t)\big]\Big)^2\phi(\bar r,t)$$

3,6

$$+ i\frac{\hbar}{m}e^{i\chi(\bar r,t)}\Big(q\bar A(\bar r,t) - \hbar\big[\nabla\chi(\bar r,t)\big]\Big)\big[\nabla\phi(\bar r,t)\big]$$

1,5 — 4

$$+ i\frac{\hbar}{2m}e^{i\chi(\bar r,t)}\Big(\nabla\big[q\bar A(\bar r,t) - \hbar\nabla\chi(\bar r,t)\big]\Big)\phi(\bar r,t) - \frac{\hbar^2}{2m}e^{i\chi(\bar r,t)}\big[\nabla^2\phi(\bar r,t)\big] =$$

(!) ta nabla NIE DZIAŁA na $\phi(\bar r,t)$

$$= \frac{1}{2m}e^{i\chi(\bar r,t)}\Big\{q^2\Big[\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\Big]^2\phi(\bar r,t)$$

$$+ 2i\hbar q\Big[\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\Big]\big[\nabla\phi(\bar r,t)\big]$$

$$+ i\hbar q\nabla\Big[\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\Big]\phi(\bar r,t) - \hbar^2\nabla^2\phi(\bar r,t)\Big\} =$$

$$= \frac{1}{2m}e^{i\chi(\bar r,t)}\Big\{q^2\Big[\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\Big]^2\phi(\bar r,t)$$

$$+ \cancel{2}i\hbar q\Big[\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\Big]\big[\nabla\phi(\bar r,t)\big]$$

$$+ i\hbar q\nabla\Big[\Big(\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big[\nabla\chi(\bar r,t)\big]\Big)\phi(\bar r,t)\Big]$$

$$\cancel{- i\hbar q\Big[\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\Big]\big[\nabla\phi(\bar r,t)\big]} - \hbar^2\nabla^2\phi(\bar r,t)\Big\} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}e^{i\chi(\bar r,t)}\Big\{\Big(-i\frac{q}{\hbar}\Big)^2\Big[\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\Big]^2\phi(\bar r,t)$$

$$- i\frac{q}{\hbar}\Big[\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big(\nabla\chi(\bar r,t)\big)\Big]\big[\nabla\phi(\bar r,t)\big]$$

$$- i\frac{q}{\hbar}\nabla\Big[\Big(\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big[\nabla\chi(\bar r,t)\big]\Big)\phi(\bar r,t)\Big] + \nabla^2\phi(\bar r,t)\Big\} =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}e^{i\chi(\bar r,t)}\Big[\nabla - i\frac{q}{\hbar}\Big(\bar A(\bar r,t) - \frac{\hbar}{q}\big[\nabla\chi(\bar r,t)\big]\Big)\Big]^2\phi(\bar r,t)$$

Podsumowując, dla członu kinetycznego mamy, że

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\bar{A}(\bar{r},t)\right)^2 \psi(\bar{r},t) =$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m} e^{i\chi(\bar{r},t)} \left[\nabla - i\frac{q}{\hbar}\left(\bar{A}(\bar{r},t) - \frac{\hbar}{q}\left[\nabla \chi(\bar{r},t)\right]\right)\right]^2 \phi(\bar{r},t) \quad (6a)$$

Do tego miejsca przerobiono 19 V 2026 r.

– ciąg dalszy nastąpi.