0. PRZYPOMNIENIE Z ZAJĘĆ 19 V 2026r.

a) potencjał skalarny $U(\bar{r},t)$ i wektorowy $\bar{A}(\bar{r},t)$

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

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

b) Hamiltonian minimalnego oddziaływania

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

c) równanie Schrödingera

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

d) faza globalna χ → nie zmienia fizyki

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

e) niezmienniczość cechowania i faza lokalna $\chi(\bar{r},t)$

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

→ $P_\psi = P_\phi$

→ chcemy, by równanie Schrödingera było takie samo dla $\psi(\bar{r},t)$ i $\phi(\bar{r},t)$

1. HAMILTONIAN MINIMALNEGO ODDZIAŁYWANIA

→ na zajęciach 19 V 2026r. zdążyliśmy wykazać, że

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

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}e^{i\chi(\bar{r},t)}\left[\nabla - i\frac{q}{\hbar}\left(\bar{A}(\bar{r},t) - \frac{\hbar}{q}\left[\nabla\chi(\bar{r},t)\right]\right)\right]^2\phi(\bar{r},t) \quad (5a)$$

i teraz c.d.

a) drugi człon Hamiltonianu

$$\left[qU(\bar{r},t) + V(\bar{r})\right]\psi(\bar{r},t) = e^{i\chi(\bar{r},t)}\left[qU(\bar{r},t) + V(\bar{r})\right]\phi(\bar{r},t) \quad (5b)$$

b) równanie Schrödingera - pochodna cząstkowa po t:

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

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

$$i\hbar\frac{\partial \psi(\bar{r},t)}{\partial t} = i\hbar e^{i\chi(\bar{r},t)}\left[i\left(\frac{\partial \chi(\bar{r},t)}{\partial t}\right) + \frac{\partial}{\partial t}\right]\phi(\bar{r},t) \qquad (5c)$$

2. NIEZMIENNICZOŚĆ CECHOWANIA potencjału skalarnego i wektorowego.

cel: chcemy, by równanie Schrödingera miała identyczną postać zarówno dla $\psi(\bar{r},t)$ jak i $\phi(\bar{r},t)$ (wszak funkcje opisują ten sam stan), tzn.

$$i\hbar\frac{\partial \psi(\bar{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\bar{r},t) \overset{(2)}{=} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\bar{A}(\bar{r},t)\right)^2 + qU(\bar{r},t) + V(\bar{r})\right]\psi(\bar{r},t) \quad (6a)$$

$$i\hbar\frac{\partial \phi(\bar{r},t)}{\partial t} = \hat{\tilde{H}}\,\phi(\bar{r},t) \overset{(2)}{=} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\tilde{\bar{A}}(\bar{r},t)\right)^2 + q\tilde{U}(\bar{r},t) + V(\bar{r})\right]\phi(\bar{r},t) \quad (6b)$$

Hamiltonian dla nowych pól skalarnych i wektorowych

Równanie (6a) po skorzystaniu z (5) ma postać:

$$i\hbar \cancel{e^{i\chi(\bar{r},t)}}\left[i\left(\frac{\partial \chi(\bar{r},t)}{\partial t}\right) + \frac{\partial}{\partial t}\right]\phi(\bar{r},t) =$$

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

$$+ \cancel{e^{i\chi(\bar{r},t)}}\left[qU(\bar{r},t) + V(\bar{r})\right]\phi(\bar{r},t)$$

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

$$+ q\left(U(\bar{r},t) + \frac{\hbar}{q}\frac{\partial \chi(\bar{r},t)}{\partial t}\right)\phi(\bar{r},t) + V(\bar{r})\phi(\bar{r},t) \qquad (6b')$$

Aby (6b') było tożsame z (6b), to musi być, że

$$\boxed{\begin{aligned} \tilde{\bar{A}}(\bar{r},t) &= \bar{A}(\bar{r},t) - \frac{\hbar}{q}\nabla\chi(\bar{r},t) \qquad (7a) \\ \tilde{U}(\bar{r},t) &= U(\bar{r},t) + \frac{\hbar}{q}\frac{\partial \chi(\bar{r},t)}{\partial t} \qquad (7b) \end{aligned}}$$

Aby fizyka była taka sama dla pól $\tilde{\bar{A}}(\bar{r},t)$ i $\tilde{U}(\bar{r},t)$ jak dla $\bar{A}(\bar{r},t)$ i $U(\bar{r},t)$, to pola elektryczne i magnetyczne (wielkości mierzone) muszą być identyczne.

→ sprawdźmy:

$$\tilde{\bar{B}}(\bar{r},t) \overset{(1a)}{=} \nabla\times\left(\tilde{\bar{A}}(\bar{r},t)\right) \overset{(7a)}{=} \nabla\times\left(\bar{A}(\bar{r},t) - \frac{\hbar}{q}\nabla\chi(\bar{r},t)\right) =$$

$$= \nabla\times\bar{A}(\bar{r},t) - \frac{\hbar}{q}\nabla\times\left(\nabla\chi(\bar{r},t)\right) =$$ ← matematyka: rotacja z gradientu dowolnej funkcji jest zawsze wektorem zerowym!

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

$$\tilde{\bar{E}}(\bar{r},t) \overset{(1b)}{=} -\nabla\tilde{U}(\bar{r},t) - \frac{\partial\tilde{\bar{A}}(\bar{r},t)}{\partial t} \overset{(7)}{=}$$

$$= -\nabla U(\bar{r},t) - \frac{\hbar}{q}\nabla\frac{\partial\chi(\bar{r},t)}{\partial t} - \frac{\partial\bar{A}(\bar{r},t)}{\partial t} + \frac{\hbar}{q}\frac{\partial}{\partial t}\nabla\chi(\bar{r},t) =$$

$$= \bar{E}(\bar{r},t) - \frac{\hbar}{q}\left(\nabla\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t}\nabla\right)\chi(\bar{r},t) =$$ ← u nas zadziała twierdzenie Schwarza o pochodnych mieszanych

$$= \bar{E}(\bar{r},t)$$

ciekawostka: gdy nie działa, to mamy:
→ efekt Aharonova-Bohma
→ tzw. wiry kwantowe

Podsumowując, w przypadkach omawianych na zajęciach, możemy dowolnie zmieniać potencjał skalarny i wektorowy według (7), czyli mamy swobodę tzw. cechowania pola elektromagnetycznego.

3. POTENCJAŁ WEKTOROWY DLA FALI ELEKTROMAGNETYCZNEJ

Pamiętamy, że obserwowane $\bar{E}(\bar{r},t)$ i $\bar{B}(\bar{r},t)$ dla fali elektromagnetycznej wynoszą:

$$\bar{E}(\bar{r},t) = \hat{e}\,E_0\,e^{i(\bar{k}\bar{r}-\omega t+\phi)} + c.c \qquad (8a)$$

$$\bar{B}(\bar{r},t) = \frac{1}{c}\bar{k}\times\bar{E}(\bar{r},t) \qquad (8b)$$

cel: Odtworzyć $\bar{A}(\bar{r},t)$ dla $\bar{E}(\bar{r},t)$ i $\bar{B}(\bar{r},t)$ zadanych (8).

Wybieramy cechowanie hamiltonowskie (Weyla) t.j., że $U(\bar{r},t)=0$. Wówczas, z (1b) i (8a) mamy, że

$$\bar{A}(\bar{r},t) = -\int\bar{E}(\bar{r},t)\,\underset{\downarrow}{dt} \overset{(8a)}{=} -\int\left(\hat{e}\,E_0\,e^{i(\bar{k}\bar{r}-\omega t+\phi)} + c.c\right)dt =$$

$\bar{r}$ jest stałe, bo w (1b) była pochodna cząstkowa

$$= -\hat{e}E_0 e^{i(\bar{k}\bar{r}+\phi)}\frac{e^{-i\omega t}}{-i\omega} - \hat{e}^* E_0^* e^{-i(\bar{k}\bar{r}+\phi)}\frac{e^{i\omega t}}{i\omega} + \bar{C} =$$

$$= -\hat{e}\frac{E_0 i}{\omega} e^{i(\bar{k}\bar{r}-\omega t+\phi)} + \hat{e}^* \frac{E_0^* i}{\omega} e^{-i(\bar{k}\bar{r}-\omega t+\phi)} + \bar{C}$$

Chcemy, by $\bar{C} = \bar{0}$. W tym celu wykorzystajmy swobodę cechowania, by jednocześnie zachować $U(\bar{r},t)=0$. Zatem

$$\bar{A}_{cel}(\bar{r},t) = -\hat{e}\, i \frac{E_0}{\omega} e^{i(\bar{k}\bar{r}-\omega t+\phi)} + c.c$$

$$\bar{A}_{teraz}(\bar{r},t) = \bar{A}_{cel}(\bar{r},t) + \bar{C}$$

zgodnie z (7a) wybieramy $\chi_{cel}(\bar{r},t)$ t., że

$$\frac{\hbar}{q}\nabla\chi_{cel}(\bar{r},t) = \bar{C}$$

$$\nabla\chi_{cel}(\bar{r},t) = \frac{q}{\hbar}\bar{C}$$

$$\left[\frac{\partial\chi_{cel}}{\partial x}, \frac{\partial\chi_{cel}}{\partial y}, \frac{\partial\chi_{cel}}{\partial z}\right] = \frac{q}{\hbar}[C_x, C_y, C_z]$$

czyli $\chi_{cel}(\bar{r},t) = \frac{q}{\hbar}\bar{C}\bar{r}$

Wówczas $\frac{\partial\chi_{cel}(\bar{r},t)}{\partial t} = 0$ i z (7b) oraz założenia, że $U_{teraz}(\bar{r},t)=0$ dostajemy $U_{cel}(\bar{r},t)=0$.

Podsumowując, dla fali elektromagnetycznej możemy napisać, że:

$$\bar{A}(\bar{r},t) = \bar{A}_0 e^{i(\bar{k}\bar{r}-\omega t+\phi)} + c.c. =$$

$$= \underbrace{\bar{A}_0 e^{i\phi} e^{-i\omega t}}_{\bar{A}(t)} e^{i\bar{k}\bar{r}} + c.c. =$$

$$= \bar{A}(t)\, e^{i\bar{k}\bar{r}} + c.c. \qquad (9)$$

4. PRZYBLIŻENIE DIPOLOWE polega na tym, że rozmiar emitera (np. kropki kwantowej) jest dużo mniejszy od długości fali elektromagnetycznej, która na niego pada.

Niech $\bar{r}_0 \rightarrow$ położenie emitera, $\bar{r}$ - położenie elektronu względem emitera

Wówczas:

$$\bar{A}(\bar{r}_0+\bar{r},t) \overset{(9)}{=} \bar{A}(t)e^{i\bar{k}(\bar{r}+\bar{r}_0)}+c.c. = \bar{A}(t)e^{i\bar{k}\bar{r}_0}e^{i\bar{k}\bar{r}} = \ldots$$

$$\rightarrow e^{i\bar{k}\bar{r}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\bar{k}\bar{r})^n}{n!} = 1+i\bar{k}\bar{r}-\frac{1}{2}(\bar{k}\bar{r})^2+\ldots = \boxed{\begin{array}{l} k=\frac{2\pi}{\lambda} \\ \bar{k}=\hat{k}\frac{2\pi}{\lambda} \\ \bar{r}=\hat{r}r \end{array}}$$

$$= 1+i2\pi\frac{r}{\lambda}\hat{k}\hat{r}-\frac{1}{2}4\pi^2\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2(\hat{k}\hat{r})^2+\ldots \approx$$

$$\approx 1$$

$r << \lambda \rightarrow$ przybliżenie dipolowe

$$\approx \bar{A}(t)e^{i\bar{k}\bar{r}_0}$$

laser: $\lambda \sim 100\,nm$
kropka kwantowa : $r \sim 10\,nm$
atom : $r \sim 0.1\,nm$

Podsumowując: $\bar{A}(\bar{r}_0+\bar{r},t) \approx \bar{A}(\bar{r}_0,t) = \bar{A}(t)e^{i\bar{k}\bar{r}_0}$ (10)

Pamiętając o cechowaniu hamiltonowskim, $U(\bar{r},t)=0$ mamy z (2) i (10), że w przybliżeniu dipolowym:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\bar{A}(\bar{r}_0,t)\right)^2+V(\bar{r}) \qquad (11)$$

5. OPERATOR MOMENTU DIPOLOWEGO

Przyjmijmy, że teraz faza lokalna między funkcjami $\psi(\bar{r},t)$ i $\phi(\bar{r},t)$ (por. (4b)), to $\chi(\bar{r},t) = \frac{q}{\hbar}\bar{A}(\bar{r}_0,t)\cdot\bar{r}$ (12)

i robimy nowe cechowanie:

było: $\bar{A}(\bar{r},t) = \bar{A}(\bar{r}_0,t) = \bar{A}(t)e^{i\bar{k}\bar{r}_0}$

jest: $\bar{A}_{nowe}(\bar{r},t) \overset{(7a,12)}{=} \bar{A}(\bar{r}_0,t) - \frac{\cancel{\hbar}}{\cancel{q}}\nabla\left(\frac{\cancel{q}}{\cancel{\hbar}}\bar{A}(\bar{r}_0,t)\,\bar{r}\right)$

$$= \bar{A}(\bar{r}_0,t)-\bar{A}(\bar{r}_0,t)\underbrace{\nabla\bar{r}}_{=1} = \bar{0} \qquad (13a)$$

było: $U(\bar{r},t)=0$ nasze stare cechowanie

jest $U_{nowe}(\bar{r},t) \overset{(7b,12)}{=} 0+\frac{\cancel{\hbar}}{\cancel{q}}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\cancel{q}}{\cancel{\hbar}}\bar{A}(\bar{r}_0,t)\cdot\bar{r}\right) = \frac{\partial\bar{A}(\bar{r}_0,t)}{\partial t}\cdot\bar{r} =$

$$= -\bar{E}(\bar{r}_0,t)\cdot\bar{r} \qquad (13b)$$

(1b) dla starego cechowania

Wówczas z równań (2) i (13), Hamiltonian dla nowego cechowania jest równy: il. skalarny jest przemienny

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - i\frac{q}{\hbar}\cdot\bar{0}\right)^2 - q\,\bar{r}\cdot\bar{E}(\bar{r}_0,t)+V(\bar{r})$$

i ostatecznie

$$\boxed{\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_I , \\ \hat{H}_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r}), \\ \hat{H}_I &= -\bar{d}\cdot\bar{E}(\bar{r}_0,t), \\ \bar{d} &= q\,\bar{r}. \end{aligned}}$$

(14a)

(14b) → Hamiltonian emitera bez udziału światła

(14c) → Hamiltonian oddziaływania światła z emiterem

(14d)

$\bar{d}$ → moment dipolowy (kwantowomechanicznie: operator momentu dipolowego $\hat{\bar{d}} = q\,\hat{\bar{r}}$)

6. ZŁOTA REGUŁA FERMIEGO

Określa ona prawdopodobieństwo przejścia układu na jednostkę czasu ze stanu $|\psi_1\rangle$ do stanu $|\psi_2\rangle$.

$$\boxed{W_{1\to 2} = \frac{2\pi}{\hbar}|M_{12}|^2\, g(E_2)} \qquad (15)$$

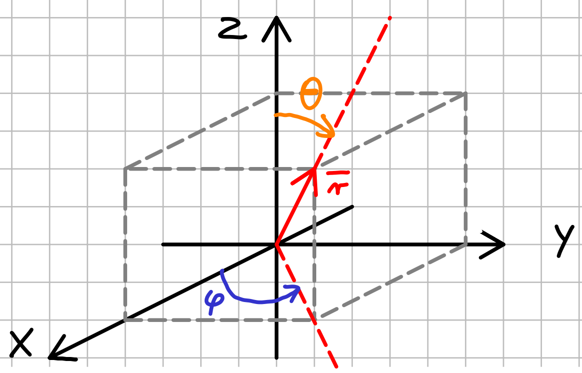
$g(E_2)$ → gęstość stanów $|\psi_2\rangle$ o energii E_2 (aby przejście było prawdopodobne, stanów końcowych powinno być dużo, tj. dużo „wolnych miejsc" do zmiany energii)

$$\boxed{M_{12} = \langle\psi_2|\hat{H}_I|\psi_1\rangle} \qquad (16)$$

M_{12} → macierzowy element Hamiltonianu oddziaływania układu ze światłem

7. REGUŁY WYBORU na przykładzie at. wodoru

a) współrzędne sferyczne ⚠ (wkt. matematyczny)



$$\begin{cases} x = r\cos\varphi\sin\theta & (17a) \\ y = r\sin\varphi\sin\theta & (17b) \\ z = r\cos\theta & (17c) \end{cases}$$

oczywiście, $\bar{r} = (x, y, z)$ (18)

b) f. falowa e^- w atomie wodoru

$$\boxed{\psi(r,\theta,\varphi) = \langle r,\theta,\varphi|\psi\rangle = F(r,\theta)\, e^{im\varphi}} \qquad (19)$$

c) przejście od $|\psi_1\rangle$ do $|\psi_2\rangle$

$$\psi_j(r,\theta,\varphi) = \langle r,\theta,\varphi|\psi_j\rangle = F_j(r,\theta)\, e^{im_j\varphi} \qquad (19')$$

Wówczas otrzymujemy, że

$$M_{12} \overset{(16)}{=} \langle\psi_2|\hat{H}_I|\psi_1\rangle = \left\{ \begin{array}{c} \text{zupełność przestrzeni } R^3 \\ \int d^3\bar{r}\, |\bar{r}\rangle\langle\bar{r}| \end{array} \right\} =$$

$$= \langle\psi_2| \int d^3\bar{r}\, |\bar{r}\rangle\langle\bar{r}|\, \hat{H}_I \,| \int d^3\bar{r}'\, |\bar{r}'\rangle\langle\bar{r}'|\psi_1\rangle =$$

$$= \int d^3\bar{r} \int d^3\bar{r}'\, \langle\psi_2|\bar{r}\rangle\langle\bar{r}|\hat{H}_I|\bar{r}'\rangle\langle\bar{r}'|\psi_1\rangle \overset{(14c,d)}{=}$$

$$= \int d^3\bar{r} \int d^3\bar{r}'\, \langle\psi_2|\bar{r}\rangle\langle\bar{r}|\left(-q\, \hat{\bar{r}}'' \cdot \bar{E}(\bar{r}_0,t)\right)|\bar{r}'\rangle\langle\bar{r}'|\psi_1\rangle =$$

← operator położenia (nazwany „r")

$$= \int d^3\bar{r} \int d^3\bar{r}'\, \langle\psi_2|\bar{r}\rangle\left(-q\, \bar{r}' \cdot \bar{E}(\bar{r}_0,t)\cdot\delta(\bar{r}-\bar{r}')\right)\langle\bar{r}'|\psi_1\rangle =$$

$$= -q \int d^3\bar{r}\, \langle\psi_2|\bar{r}\rangle\, \bar{r}\cdot\bar{E}(\bar{r}_0,t)\, \langle\bar{r}|\psi_1\rangle$$

→ współrzędne sferyczne:

$$\int d^3\bar{r}\, f(\bar{r}) = \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \underbrace{r^2 \sin\theta}_{\text{Jakobian}} \cdot f(r,\theta,\varphi)$$

→ z (8a) mamy $\bar{E}(\bar{r}_0,t) = \hat{e}\,\mathcal{E}(\bar{r}_0,t) + c.c.$

i otrzymujemy:

$$\boxed{\begin{aligned} M_{12} = -q \int_0^\infty dr \int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, r^2 \sin\theta \\ \cdot\, \psi_2^*(r,\theta,\varphi)\left[\bar{r}\cdot\hat{e}\,\mathcal{E}(\bar{r}_0,t) + c.c.\right]\psi_1(r,\theta,\varphi) \end{aligned}} \qquad (20)$$