Pauli líkanið

Uehlenbeck og Goudsmit

$\longrightarrow$ spuni rafeindar $\bar{S}$

$$\bar{M}_S = g\,\frac{\mu_B}{\hbar}\,\bar{S}$$

krafðist vegna tilrauna $g=2$ (gyromagnetic ratio) segulspuna hlutfall.

Pauli notaði $g=2$ sem forsendu í líkan sitt

Dirac jafnan $\longrightarrow$ spuni kemur sjálfkrafa með $g=2$

því hættir mönnum til þess að segja: spuni er afleiðing Lorentz óbreytileikans

Dirac jafnan er 1. stigs afleiðujafna, ef $\bar{p} \to \bar{p} - q\bar{A}$ er notað fyrir víxlverkunina við rafsegulsvið (min

$\longrightarrow$ $g=2$

sama er hægt fyrir Schrödinger jöfnuna skrifa sem 1. stigs jöfnu

nota : $\bar{p} \to \bar{p} - q\bar{A}$

$\longrightarrow$ $g=2$

Levy-Leblond, Comm. Math. Phys. 6 (1967) 286

spuna má leiða út sem afleiðingu Galilei ummyndana

> Í raun er hann afleiðing sameiginlegra einkenna Lorentz og Galilei ummyndanna

spuni er skammtafyrirbæri

Ef spuni væri vegna hringsnúnings eindar með endanlega stærð

$\longrightarrow j \neq \pm 1/2$

---

spuni tengist ekki $\bar{p}$ og $\bar{x}$

$\to$ við „brautar ástands rúmið" Σ_r

bætist spuna ástands rúmið Σ_s

Pauli

i) spuni er hverfiþungi

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad \ldots\ldots$$

ii) Í Σ_s eru S^2 og S_z FMVM

Σ_s er því spannað af eiginvektorum S^2 og S_z

$$S^2 |s,m\rangle = s(s+1)\hbar^2 |s,m\rangle$$

$$S_z |s,m\rangle = m\hbar |s,m\rangle$$

iii) $\Sigma = \Sigma_r \otimes \Sigma_s$

$\to$ spuna og brautar virkjar víxlast

iv) rafeindin er $1/2$ spuna eind $(s = 1/2)$

---

ath. ef víxlverkun spunans við skammtað rafsegulsvið er tekin til greina (QED)

$\longrightarrow g = 2.0023193048 \pm 0.000\,000\,000\,8$

$g_{mælt} = 2.0023193048 \pm 0.000\,000\,000\,4$!

(1982)

Sér eiginleikar $\frac{1}{2}$ hverfiþunga

$$S^2|\pm\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|\pm\rangle$$

$$S_z|\pm\rangle = \pm\frac{1}{2}\hbar|\pm\rangle$$

almennasta spuna ástand $|\chi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$
$\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

$\bar{S} = \frac{\hbar}{2}\bar{\sigma} \leftarrow$ Pauli fylki

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\mathrm{tr}\,\sigma_i = 0, \quad \det\sigma_i = -1$$

$$(\bar{\sigma}\cdot\bar{A})(\bar{\sigma}\cdot\bar{B}) = \bar{A}\cdot\bar{B} + i\bar{\sigma}\cdot(\bar{A}\times\bar{B})$$

A, B vektorar, eða vigurvirkjar sem víxlast við σ

$$\left.\begin{array}{l} S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \\ S_xS_y + S_yS_x = 0 \\ S_xS_y = \frac{i}{2}\hbar S_z, \quad S_+^2 = S_-^2 = 0 \end{array}\right\}$$

gildir sérstakl. f. $s = 1/2$

$$|r, \Sigma\rangle = |r\rangle \otimes |\Sigma\rangle$$

$$\langle r', \Sigma' | r, \Sigma\rangle = \delta_{\Sigma'\Sigma}\,\delta(\bar{r}' - \bar{r})$$

$$\langle r, \Sigma | \psi\rangle = \psi_\Sigma(r)$$

$$\psi^+(r) = (\psi_+^*, \psi_-^*)$$

$\longrightarrow$ spinorar $\quad \psi(r) = \begin{pmatrix} \psi_+(r) \\ \psi_-(r) \end{pmatrix}$

„brautarvirkjar" verða þá 2×2 fylki á hornalínuformi

$$\hat{X} \longrightarrow \begin{pmatrix} x & 0 \\ 0 & x \end{pmatrix}$$

$$\hat{p} \longrightarrow -i\hbar\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}$$

má líta á sem

$$\hat{X}\cdot\mathbb{I} \qquad \hat{p}\cdot\mathbb{I}$$

$\uparrow$ einingafylki (enginn spuna virki)

Hlandverkir virkjar

$$L_z S_z = -i\frac{\hbar^2}{2}\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial\varphi} & 0 \\ 0 & -\frac{\partial}{\partial\varphi} \end{pmatrix}$$

nota Pauli fylki $\quad \hookrightarrow L_z\left(\frac{\hbar}{2}\sigma_z\right)$

$$\bar{S}\cdot\bar{P} = \frac{\hbar}{2}\left(\sigma_x P_x + \sigma_y P_y + \sigma_z P_z\right)$$

Líkindi Mælinga

$$d\mathcal{P}(r,+) = |\langle \bar{r},+|\psi\rangle|^2 d\bar{r}$$

$$= |\psi_+(\bar{r})|^2 d\bar{r}$$

$$d\mathcal{P}(\bar{r}) = \left\{ |\psi_+(\bar{r})|^2 + |\psi_-(\bar{r})|^2 \right\} d\bar{r}$$

Schrödinger jafna Paulis

$$i\hbar\partial_t\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix} = \left\{\frac{1}{2m}\left[-i\hbar\bar{\nabla} - \frac{e\bar{A}}{c}\right]^2\right\}\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix}$$

$$+ V(\bar{r})\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix} - \frac{eg}{2mc}\frac{\hbar}{2}\bar{\sigma}\cdot\bar{B}\begin{pmatrix}\psi_+\\ \psi_-\end{pmatrix}$$

$$B = \bar{\nabla}\times\bar{A}$$

Truflanareikningur

Rayleigh-Schrödinger aðferð

truflana reikn er hægt að nota ef

$$H = H_0 + W$$

þ.s. eigingildi og ástönd H_0 eru þekkt

$$H_0 |\varphi_p^i\rangle = E_p^0 |\varphi_p^i\rangle$$

rófið er sundurlaust, H_0 og W eru óháð tíma t.

W er lítið þ.e. fylkisstök w eru minni en fjarlægð eigingilda H_0 innbyrðis.

$$W = \lambda \hat{W} \quad \text{með} \quad \lambda \ll 1$$

$\{|\varphi_p\rangle\}$ er fullkominn einingarréttur grunnur

$|u\rangle$ er alltaf grunnurinn fyrir H_0 og E_n eru alltaf eigingildi H_0

Höldum (bara) nú að finna E_n og $|u\rangle$

[103], daß Randmagnetoplasmonen aus der Kopplung von Intra-Landauniveauübergängen an den Schnittpunkten der Fermienergie mit den Randzuständen entstehen. Genauso sollten in den Dots die Randplasmonen aus den Übergängen zwischen den diskreten Energieniveaus in quantisierten 0DES hervorgehen. Im quantenmechanischen Limes entspricht dann die Aufspaltung Übergängen zwischen Einteilchenenergieniveaus, die im Magnetfeld ein "Anti-Crossing" aufweisen.

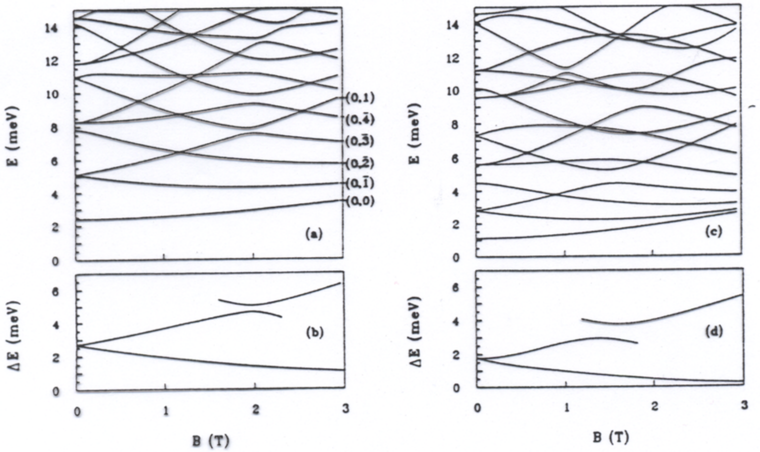
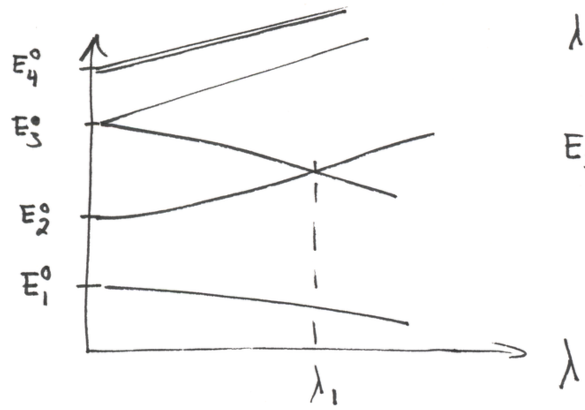


Abb. 7.4: (a) Magnetfelddispersion der Einteilchenenergieniveaus für ein Potential $V(x,y) = \frac{1}{2}m^*\Omega_0^2(x^2+y^2) + c(x^4+y^4)$, dessen parabolischer Charakter durch den anharmonischen Term (x^4+y^4) gestört ist ($\hbar\Omega_0 = 2.0meV$ und $c = 0.2\hbar\Omega_0(m^*\Omega_0/\hbar)^2$). Die Energieniveaus sind nach den Quantenzahlen des reinen parabolischen Potentials klassifiziert (vgl. Abb. 2.6). In (b) sind die Energien ΔE der Übergänge $(0,0) \rightarrow (0,\bar{1})$ und $(0,0) \rightarrow (0,1)$ aufgetragen. (c) und (d) enthalten die entsprechenden Ergebnisse für das Potential eines Kastens der Breite 100nm mit unendlich hohen Wänden.

Ein "Anti-Crossing" der Einteilchenenergieniveaus, die für ein parabolisches Potential in Abb. 2.6 dargestellt sind, kann nur durch ein Potential mit einer

2

Ef hægt væri að leysa $H|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle$ þá gæti t.d. sést.



$\lambda = \lambda_1$: truflun veldur margfeldni

E_3^0 : truflun lyftir margfeldni

(levelcrossing)

Í truflana reikn. er gert ráð fyrir að λ sé nógu lítið til þess að auka margfeldni komi ekki fyrir

Nálgunarlausn

$|n\rangle$ er ekki grunnurinn frá H_0

Gerum ráð fyrir að

$$E(\lambda) = \varepsilon_0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \cdots$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \cdots$$

samleitni ekki tryggð

ekki hægt að ná í allar lausnir á þennan hátt!

þessar lausnir eru settar inn:

$$(H_0 + \lambda\hat{W})\left[\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle\right] = \left\{\sum_{q'=0}^{\infty} \lambda^{q'} \Sigma_{q'}\right\}\left\{\sum_{q=0}^{\infty} \lambda^q |q\rangle\right\}$$

síðan er jafnan leyst f. hvert veldi af λ

0.
$$H_0|0\rangle = \Sigma_0|0\rangle$$

1.
$$(H_0 - \Sigma_0)|1\rangle + (\hat{W} - \Sigma_1)|0\rangle = 0$$

2.
$$(H_0 - \Sigma_0)|2\rangle + (\hat{W} - \Sigma_1)|1\rangle - \Sigma_2|0\rangle = 0$$

sleppum hærri liðum en λ^2

Veljum norm þ.a.

$$\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = 1 \;, \quad \langle 0|\psi(\lambda)\rangle = \in \mathbb{R}$$

valinn fasinn á $|\psi(\lambda)\rangle$

$$\rightarrow \langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = \{\langle 0| + \lambda\langle 1|\}\{|0\rangle + \lambda|1\rangle\} + O(\lambda^2)$$

$$= \langle 0|0\rangle + \lambda\{\langle 1|0\rangle + \langle 0|1\rangle\} + O(\lambda^2)$$

í núllta gráðu $\rightarrow \langle 0|0\rangle = 1$

$$\langle\psi(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle =$$

$$\{\langle 0| - \lambda\langle 1| + \lambda^2\langle 2|\}\{|0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle\} + \cdots$$

liðir fyrir λ^2 eru

$$\lambda^2\{\langle 0|2\rangle + \langle 2|0\rangle + \langle 1|1\rangle\}$$

$$\rightarrow \langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\tfrac{1}{2}\langle 1|1\rangle$$

í samræmi við

$$\langle 0|\psi(\lambda)\rangle = \langle 0|0\rangle + \lambda\langle 0|1\rangle + \lambda^2\langle 0|2\rangle + \cdots$$

$$\in \mathbb{R} \quad , \lambda \in \mathbb{R}$$

$$\rightarrow \langle 0|2\rangle \in \mathbb{R}$$
$$\langle 0|1\rangle \in \mathbb{R}$$

Núllta gráðu jafnan sýnir að $|0\rangle$ er eiginvigur H_0 með eigingildi Σ_0 eins og einnig sést þegar $\lambda \to 0$ er athugað

$|0\rangle$ er ekki endilega grunnástand

ath. hér hefði eins mátt velja
$$\langle \psi(\lambda)|0\rangle = 1$$
sjá G. Baym

$$\rightarrow \langle 1|0\rangle = \langle 0|1\rangle = 0$$

og á sama hátt

$$\langle 0|2\rangle = \langle 2|0\rangle = -\frac{1}{2}\langle 1|1\rangle$$

Truflanareikn f. Einföld ástönd

Lítum á eitt eigingildi (einfallt) með ástand $|\varphi_n\rangle = |0\rangle$

Önnur eigingildi mega vera margföld!

1. stigs

$$\underbrace{\langle\varphi_n|(H_0-\Sigma_0)|1\rangle}_{=0} + \langle\varphi_n|(\hat{W}-\Sigma_1)|\varphi_n\rangle = 0$$

Vörpum jöfnunni á öll ástönd nema $|\varphi_n\rangle$ $p\neq n$

$$\langle\varphi_p^i|(H_0-E_n^0)|1\rangle + \langle\varphi_p^i|(\hat{W}-\Sigma_1)|\varphi_n\rangle = 0$$

$$\Downarrow$$

$$(E_p^0-E_n^0)\langle\varphi_p^i|1\rangle + \langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle = 0$$

$$\rightarrow \langle\varphi_p^i|1\rangle = \frac{1}{E_n^0-E_p^0}\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle \quad p\neq n$$

Síðan vantar líka $\langle\varphi_n|1\rangle$

en áður fékkst $\langle 0|1\rangle = \langle\varphi_n|1\rangle = 0$

$$\rightarrow |1\rangle = \sum_{p\neq n}\sum_i \frac{\langle\varphi_p^i|\hat{W}|\varphi_n\rangle}{E_n^0-E_p^0}|\varphi_p^i\rangle$$

$\longrightarrow$

5

$\longrightarrow \quad \mathcal{E}_1 = \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle$ eða

$$\boxed{E_n(\lambda) = E_n^0 + \lambda \langle \varphi_n | \hat{W} | \varphi_n \rangle + O(\lambda^2)}$$

á svipaðann hátt

$$\boxed{|\psi_n(\lambda)\rangle = |\varphi_n\rangle + \lambda \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{\langle \varphi_p^i | \hat{W} | \varphi_n \rangle}{E_n^0 - E_p^0} |\varphi_p^i\rangle + O(\lambda^2)}$$

2. stigs

$$\boxed{E_n(\lambda) = E_n^0 + \langle \varphi_n | W | \varphi_n \rangle + \sum_{p \neq n} \sum_i \frac{|\langle \varphi_p^i | W | \varphi_n \rangle|^2}{E_n^0 - E_p^0} + O(\lambda^3)}$$

því nær sem $|\varphi_p^i\rangle$ er $|\varphi_n\rangle$ og því sterkari sem víxlverkunin er $|\langle\,|\,|\,\rangle|^2$

því meir hrinda þessi ástönd hvort öðru burt

$\uparrow \downarrow$

6

Truflanareikn. fyrir margfallt ástand

Eiginngildi E_n^0 með margfeldni g_n

Eiginvektorar spanna $\mathcal{E}_n^0$ $\quad (|\varphi_n^i\rangle)$

E_n^0 klofnar í f_n stig, $f_n \leq g_n$

1. stigs

$$(H_0 - \mathcal{E}_0)|1\rangle + (\hat{W} - \mathcal{E}_1)|0\rangle = 0$$

$$\longrightarrow \langle \varphi_n^i | \hat{W} | 0 \rangle = \mathcal{E}_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$$

$$\longrightarrow \sum_p \sum_j \langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_p^j \rangle \langle \varphi_p^j | 0 \rangle = \mathcal{E}_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$$

$|0\rangle \in \mathcal{E}_n^0$

$\langle \varphi_p^j | 0 \rangle = \delta_{p,n}$

þ.e. $|0\rangle$ er hornrétt á alla vigra sem ekki liggja í $\mathcal{E}_n^0$ hlutrúminu

$\longrightarrow$

til þess að finna eigingildi (λ^1) og eiginvigra (λ^0) Hamiltonsvirkjans fyrir margfalt orkugildi E_n^0

setjið $(W^{(n)})$, sem eru fylkjastök W í E_n^0 á hornalínuform

$\longrightarrow$

$$\sum_{j=1}^{g_n} \langle \varphi_n^i | \hat{W} | \varphi_n^j \rangle \langle \varphi_n^i | 0 \rangle = \Sigma_1 \langle \varphi_n^i | 0 \rangle$$

Eigingildisjafna $\longrightarrow$ gefur fn eigingildi Σ_1^i

Brillouin-Wigner truflanareikn (G. Baym bls 241)

stórir st.

$$\left.\begin{aligned} (H_0 + \lambda \hat{W}) | N \rangle &= E_n | N \rangle \\ H_0 | n \rangle &= \Sigma_n | n \rangle \end{aligned}\right\}$$

litlir st.

Hvernig má finna E_n og $|N\rangle$ umrita:

$$(E_n - H_0) | N \rangle = \lambda \hat{W} | N \rangle$$

innfeldi með $\langle m|$

$$(E_n - \Sigma_m) \langle m | N \rangle = \lambda \langle m | \hat{W} | N \rangle \qquad (*)$$

fyrir $|N\rangle$ þ.a.

veljum normun $\langle n|N\rangle = 1$

alltaf má rita

$$|N\rangle = \sum_m |m\rangle\langle m|N\rangle$$

$$= |n\rangle\langle n|N\rangle + \sum_{m\neq n} |m\rangle\langle m|N\rangle$$

nú má nota (*) til þess að umrita þetta sem:

$$|N\rangle = |n\rangle + \sum_{m\neq n} |m\rangle \frac{1}{E_n - \varepsilon_m} \lambda \langle m|\hat{W}|N\rangle$$

enn hefur engri nálgun verið beitt

Er í raun heildisjafna fyrir Ψ

$$\Psi_n(x) = \varphi_n(x) + \lambda \int dx' \sum_{m\neq n} \frac{\varphi_m(x)\varphi_m(x')}{E_n - \varepsilon_m} \hat{w}(x') \Psi_n(x')$$

$$\Psi_n(x) = \varphi_n(x) + \lambda \int dx' \, G(x,x') \hat{w}(x') \Psi_n(x')$$

Heildisjafna jafngild báðum Schrödinger J.

hægt er að finna jöfnu fyrir G með innsetningu

⋮

---

nálgunarlausn

<u>ítrun</u>

$$|N\rangle = |n\rangle + \sum_{m\neq n} |m\rangle \frac{1}{E_n - \varepsilon_m} \lambda \langle m|\hat{W}|N\rangle$$

$\rightarrow$

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda \sum_m{}' |m\rangle \frac{1}{E_n - \varepsilon_m} \langle m|\hat{W}|n\rangle$$

$$+ \lambda^2 \sum_{jm}{}' |j\rangle \frac{1}{E_n - \varepsilon_j} \langle j|\hat{W}|m\rangle \frac{1}{E_n - \varepsilon_m} \langle m|\hat{W}|n\rangle$$

$$+ \lambda^3 \sum_{kjm}{}' |k\rangle \frac{1}{E_n - \varepsilon_k} \langle k|\hat{W}|j\rangle \frac{1}{E_n - \varepsilon_j} \langle j|\hat{W}|m\rangle \frac{1}{E_n - \varepsilon_m} \langle m|\hat{W}|n\rangle$$

$+ \ldots$

Ekki veldaröð í λ því E_n er fall af λ !

λ kemur fyrir í öllum veldum líka taka (*)

$$(E_n - \varepsilon_m)\langle m|N\rangle = \lambda\langle m|\hat{W}|N\rangle$$

$$\rightarrow E_n = \varepsilon_m + \lambda \frac{\langle m|\hat{W}|N\rangle}{\langle m|N\rangle}$$

setja $m \rightarrow n$

$$E_n = \varepsilon_n + \lambda\langle n|\hat{W}|N\rangle$$

setja inn $|N\rangle$

$\longrightarrow$

Ef $\frac{1}{E_n - \varepsilon_k}$ er skrifað sem röð í λ

fæst Rayleigh-Schrödinger

Eins má sýna

$$E_n = \varepsilon_n + \lambda\langle n|\hat{W}|n\rangle + \lambda^2 \sum_m{}' \frac{|\langle m|\hat{W}|n\rangle|^2}{E_n - \varepsilon_m}$$

$$+ \lambda^3 \sum_{jm} \frac{\langle n|\hat{W}|m\rangle\langle m|\hat{W}|j\rangle\langle j|\hat{W}|n\rangle}{(E_n - \varepsilon_m)(E_n - \varepsilon_j)}$$

$$+ \cdots$$

þessar jöfnur f. E_n og $|N\rangle$ má skrifa áfram á einfaldan hátt ⊕

Ekki einfaldar veldis raðir ⊕

Óbeinar jöfnur vegna E_n hægra megin ⊖

Samleytni mikilvæg ⊕

Lausn (ognálgun) í öðrum grunni

H er hér settur á Hornalínuform í „öllu" rúminu ekki bara í hlutrúmi eins eigingildis

án nálgunar

$$(E_n - \varepsilon_m)\langle m|N\rangle = \langle m|W|N\rangle$$

Level crossing er möguleg hér

sem áður

$$|N\rangle = \sum_p |p\rangle\langle p|N\rangle$$

sett inn

$$\to \sum_p (E_n - \varepsilon_m)\langle m|p\rangle\langle p|N\rangle = \sum_p \langle m|W|p\rangle\langle p|N\rangle$$

$$\to \sum_p (E_n - \varepsilon_m)\langle p|N\rangle\delta_{m,p} - \sum_p W_{mp}\langle p|N\rangle = 0$$

N.B. Tengist í raun hinum reikn., sem næst er fjallað um

$$\to \sum_p \left\{\delta_{m,p}\varepsilon_m + W_{mp}\right\}\langle p|N\rangle = E_n\langle m|N\rangle$$

Setjum $\langle p|N\rangle = C_{pn}$ þá fæst

$$\sum_p \left\{\delta_{m,p}\varepsilon_m + W_{mp}\right\}C_{pn} = E_n C_{mn}$$

Óendanlega stórt fylki í eigingildisjöfnu án nálgunar

nálgun tökum einungis nokkur lægstu ástöndin með

t.d. $n = 1,2$

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & \varepsilon_2 + W_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C_{1n} \\ C_{2n} \end{pmatrix} = E_n\begin{pmatrix} C_{1n} \\ C_{1n} \end{pmatrix}$$

Athugasemd um hvað er gert í hvorri viðbót

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$$

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2$$

$$= E_0 \langle\psi|\psi\rangle$$

$$\rightarrow \quad \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$

Nálgunarreikningur

Rayleigh Ritz

* Aðferð nothæf þó truflun sé ekki smá

* einföld til þess að meta orku lægsta bundins ástands kerfis

---

Einfallt að sanna
$\longleftarrow$

$$\langle H\rangle = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \geq E_0$$

fyrir hvaða $|\psi\rangle$ sem er, grunnástandið gefur jafnaðarmerkið

Til einföldunar gerum ráð fyrir stjórnum einföldum eigingildum

$\langle H\rangle$ hefur stöðupunkta fyrir eiginástönd sín.

$|\psi\rangle \rightarrow$ stöðup. $\longleftrightarrow$ eiginástand H

(2)

því má vinna á eftirfarandi hátt

velja $|\Psi_\alpha\rangle$ sem reynslu ástand

Ψ_α þarf að uppfylla jaðarskilyrði
Einnig má velja það m. hliðsjón
af aðfellu formum jöfnu.

þá finnst grunnástandsorkan E_0
með því að lágmarka

$$E_0(\Psi) = \frac{\langle\Psi|H|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle}$$

með $|\Psi_\alpha\rangle$

$$E_0(\alpha) = \frac{\langle\Psi_\alpha|H|\Psi_\alpha\rangle}{\langle\Psi_\alpha|\Psi_\alpha\rangle}$$

$$\frac{\partial E_0(\alpha)}{\partial\alpha} = 0 \quad \text{og} \quad E_0''(\alpha) > 0$$

(3)

til þess að finna fyrsta örvaða ástandið
þarf ástand sem er hornrétt á $|0\rangle = |\Psi_\alpha\rangle$

Hægt er að sýna að E_1 finnst með því
að lágmarka

$$E_1(\Psi) = \frac{\{\langle\Psi| - \langle\Psi|0\rangle\langle 0|\}H\{|\Psi\rangle - \langle 0|\Psi\rangle|0\rangle\}}{\{\langle\Psi| - \langle\Psi|0\rangle\langle 0|\}\{|\Psi\rangle - \langle 0|\Psi\rangle|0\rangle\}}$$

og

$$E_n(\Psi) = \frac{\langle\Psi|(1-P_{n-1})H(1-P_{n-1})|\Psi\rangle}{\langle\Psi|1-P_{n-1}|\Psi\rangle}$$

með

$$P_{n-1} = \sum_{k=0}^{n-1} |k\rangle\langle k|$$

Í raun er aðferðin ekki notadrjúg til
þess að finna orku örvaðra ástanda

Lægstu orku gildin geta verið vel ákvörðuð
þótt „eigin föllin" gefi ekki alltaf góða mynd

4

þekkt dæmi

Hreintónasveifill

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

aðfellu lausn Schrödinger, $x \to \infty$

$$\psi_0 \sim e^{-\alpha x^2} \qquad \alpha > 0$$

gefur rétt grunnástand

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

hō vill svo til að

$$\psi_1 \sim x e^{-\alpha x^2}$$

er hornrétt á ψ_0 og gefur líka rétta lausn

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

Samkonar má gera fyrir vetnisatómið

$$\psi = x e^{-\beta x^{3/2}}$$

$$\psi' = e^{-\beta x^{3/2}} - \beta x^{3/2} e^{-\beta x^{3/2}}$$

$$\psi'' = -\beta x^{1/2} e^{-\beta x^{3/2}}$$
$$- \frac{3}{2}\beta x^{1/2} e^{-\beta x^{3/2}}$$
$$+ \beta^2 x^2 e^{-\beta x^{3/2}}$$

$$\to \quad \psi'' \underset{x\to\infty}{=} \cdots + \beta^2 x^2 e^{-\beta x^{3/2}} = \cdots \beta^2 x \psi$$

$$\psi = x e^{-\beta x}$$
$$\psi' = e^{-\beta x} - \beta x e^{-\beta x}$$
$$\psi'' = -2\beta e^{-\beta x} + \beta^2 x e^{-\beta x}$$

$$\to \quad \psi'' \underset{x\to\infty}{=} \beta^2 \psi$$

þ.a. ekki sama og diffurjöfnan krefst.

Hvað um mættið

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{ef } x<0 \\ \alpha x & \text{ef } x>0 \end{cases}$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \alpha x\right\}\psi = E\psi \iff H\psi = E\psi$$

$$\longrightarrow \psi'' - \frac{2m\alpha}{\hbar^2}x\psi + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0$$

aðfellur fyrir $x \to 0$ og $x \to \infty$

benda á lausn

$$\longleftarrow \quad \psi = xe^{-\beta x^{3/2}}$$

$$\langle\beta|\beta\rangle = 2(2\beta)^{-3}$$

í raun dugar $\psi = xe^{-\beta x}$ mjög vel (athugum)

$$E_0(\beta) = \langle\beta|H|\beta\rangle$$

$$E_0(\beta) = \frac{1}{2}\left\{\int_0^\infty dx\, e^{-2\beta x}\left[\frac{\hbar^2 x}{2m}(2\beta - \beta^2 x) + \alpha x^3\right]\right\}(2\beta)^3$$

$$\cancel{= \frac{1}{2}(2\beta)^3\int_0^\infty dx\, e^{-2\beta x}\left\{\frac{\hbar^2\beta}{m} + x\left(\alpha - \frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\right)\right\}x^2}$$

$$E_0(\beta) = \frac{1}{2}\left\{\int_0^\infty dx\, e^{-2\beta x}\left[\frac{\hbar^2\beta}{m}x - \frac{\hbar^2\beta^2}{2m}x^2 + \alpha x^3\right](2\beta)^3\right\}$$

$$= \frac{1}{2}(2\beta)^3\left\{\frac{\hbar^2\beta}{m}\frac{1}{(2\beta)^2} - \frac{\hbar^2\beta^2}{2m}\frac{2}{(2\beta)^3} + \alpha\frac{6}{(2\beta)^4}\right\}$$

$$= \frac{\hbar^2\beta^2}{m} - \frac{\hbar^2\beta^2}{2m} + \frac{3}{2}\frac{\alpha}{\beta}$$

$$= \boxed{\frac{\hbar^2\beta^2}{2m} + \frac{3}{2}\frac{\alpha}{\beta} = E_0(\beta)}$$

$$E_0'(\beta) = \frac{\hbar^2\beta}{m} - \frac{3}{2}\frac{\alpha}{\beta^2} = 0$$

$$\longrightarrow \beta_0^3 = \frac{3}{2}\alpha\frac{m}{\hbar^2}$$

nákvæm lausn er til
Eiginföllin eru Airy-föll

$$\longrightarrow E_0^{\text{hnik}}(\beta^0) = \left(\left(\frac{3}{2}\right)^5\frac{(\hbar\alpha)^2}{m}\right)^{1/3}$$

$$E_0^{\text{rétt}} = \left(\frac{1}{2}\frac{(\hbar\alpha)^2}{m}\right)^{1/3} 2.338$$

$$\longrightarrow \frac{E_0^{\text{hnik}}}{E_0^{\text{rétt}}} \simeq \frac{\left(\frac{3}{2}\right)^{5/3}}{\left(\frac{1}{2}\right)^{1/3}2.338} \sim 1{,}06$$

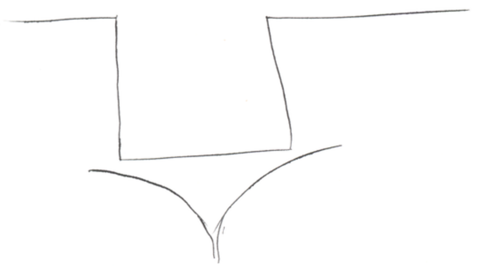
þannig sést þó að bylgjufallið
sé ekki heppilegt til reikninga
þar sem ~~[illegible]~~ stór x eru mikilvæg
þá er eigingildið samt gott.

Hér var engin truflanaröð möguleg!

---

dæmi um notkun hnikareiknings
fyrir grunn og örvað ástand
er vetnisatómið í djúpum brunni

Helíum atóm



þar sem kerfið er ekki nálganlegt með
2D

(hnitakerfi kassans og $\frac{1}{r}$ passa illa saman)

Dæmi um truflanareikning
fyrir kerfi með margfallt ástand

$$H = AS_z^2 + \epsilon(S_x^2 - S_y^2)$$

fyrir kerfi með heildarspuna $S=1$ $\quad |A| >> |\epsilon|$

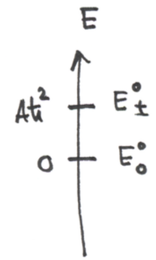
leysum fyrst fyrir

$$H_0 = AS_z^2 = A\hbar^2\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

H_0 hefur greinilega eiginvektorana

$$\left.\begin{array}{l}|+\rangle_0 = \begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}\\ |-\rangle_0 = \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}\end{array}\right\} \text{ með } E^0_\pm = A\hbar^2$$

$$|0\rangle_0 = \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix} \text{ með } E^0_0 = 0$$



Nákvæm lausn

$$H = \hbar^2 \begin{pmatrix} A & 0 & \epsilon \\ 0 & 0 & 0 \\ \epsilon & 0 & A \end{pmatrix}$$

$$H|n\rangle = E_n |n\rangle$$

$$(H - E_n)|n\rangle = 0$$

$$\to \det(H - E_n \mathbb{I}) = 0 \qquad \begin{vmatrix} \hbar^2 A - E_n & 0 & \epsilon\hbar^2 \\ 0 & -E_n & 0 \\ \epsilon\hbar^2 & 0 & \hbar^2 A - E_n \end{vmatrix}$$

$$\to -(A\hbar^2 - E_n)^2 E_n + (\epsilon\hbar^2)^2 E_n = 0$$

$$\to \text{ein lausn er } E_n = 0 \;, \quad E_0 = 0$$

$$\to \quad E_n^2 - 2A\hbar^2 E_n + (A\hbar^2)^2 - (\epsilon\hbar^2)^2 = 0$$

$$W = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & \epsilon \\ 0 & 0 & 0 \\ \epsilon & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$W_{11} = (1,0,1)\hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & \epsilon \\ 0 & 0 & 0 \\ \epsilon & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar^2 \epsilon$$

$$\vdots$$

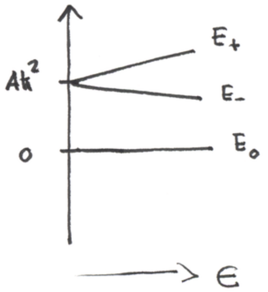
$$W = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & 0 & \epsilon \\ 0 & 0 & 0 \\ \epsilon & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Hlutrúmið sem við höfum áhuga á

lausnir eru

$$E_\pm = A\hbar^2 \pm \epsilon\hbar^2$$

$$E_0 = 0 \quad : \begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix}$$



með

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|+\rangle_0 \pm |-\rangle_0\right\} \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\\pm1\end{pmatrix}$$

Nálgunarlausn

1. stig truflun fyrir $E_\pm$

því er

$$\sum_{j=1}^{g_n} \langle\varphi_n^i|W|\varphi_n^j\rangle\langle\varphi_n^j|0\rangle = \varepsilon^1 \langle\varphi_n^i|0\rangle$$

$$\hbar^2\begin{pmatrix}0 & \epsilon\\ \epsilon & 0\end{pmatrix} v = \varepsilon v$$

eigingildi $\quad E^1_\pm = \pm\epsilon\hbar^2$

með eiginvektora $\quad v \sim \begin{pmatrix}1\\\pm1\end{pmatrix}$

$$\longrightarrow \quad |\psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|+\rangle_0 \pm |-\rangle_0\right\}$$

---

1. truflun gefur því

$$E_\pm = A\hbar^2 \pm \epsilon\hbar \quad \text{með} \quad |\psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|+\rangle_0 \pm |-\rangle_0\right\}$$

$$E_0 = 0 \quad \text{með} \quad |0\rangle_0$$

allar hærri liðir verða núll, svo lausnin er nákvæm

Tímaháð truflun

þekkjum

$$H_0|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle$$

H_0 er óháð t → eiginástöndin eru sístæð

klukkan $t=0$ bætist við truflun:

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

$$W(t) = \lambda \hat{W}(t) \qquad \lambda \ll 1$$

upphaflega var kerfið í $|\varphi_i\rangle$ eiginást H_0 sem er venjulega ekki eiginástand $H(t)$

Viljum reikna líkindi þess að kerfið verði í öðru eiginástandi H_0, $|\varphi_f\rangle$ klukkan $t>0$

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |\langle\varphi_f|\psi(t)\rangle|^2$$

Hér verða sömu aðeins athuganir færslur á milli eiginástanda H_0 sem $W(t)$ getur valdið.

Hér verður litið á litla truflun $\lambda \ll 1$

Eins hefði mátt athuga

Hæga truflun (adiabatísk): $d_t W(t)$ sé lítið

Snögga truflun:

$$H = \begin{cases} H_0 & t<0 \\ H_0 + W(t) & 0<t<t_0 \\ H_0 & t>t_0 \end{cases}$$

o.s.fr.

* mjög stuttlega verður fjallað um afturvirkni eða „damping" kenningar

Væntanlega meira í skammtafræði II

Dofnun – Damping

hvað gerist þar? (slutt lega)

t.d.

H_0 : atóm , $W(t)$: skammtað rafsegulsvið

(þarf ekki að vera)

Sjálfgeislun :

$$|\varphi_i\rangle \to |\varphi_f\rangle + \gamma$$

tegund lausnar aðferðar → rétt svar

Rafsegulgeislunin verkar á atómið
(γ getur verið endurupptogin)
→ línubreidd og hliðrun
Lamb-hliðrun
⋮

Líkön

Wigner Weisskopf
Heitler-Ma
⋮

skammtaljósfræði
Damping theory
leysing
superradiance
línubreidd
línuhliðrun
+
" Önnur kerfi

* Gullna regla Fermis

Engin ....

* Valreglur

* línuleg svörun (einfalt líkan fyrir eina ögn)

og samanburður við tímaháða truflun

↑ endurtekið í skammtafræði II fyrir fjölendakerfi !

Vitjum fimma

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |\langle \varphi_f | \Psi(t) \rangle|^2$$

ef $\quad i\hbar d_t |\Psi(t)\rangle = \{H_0 + \lambda \hat{W}(t)\} |\Psi(t)\rangle$

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad , \quad \lambda << 1$$

$$\hat{W}(t) = 0 \quad \text{ef} \quad t < 0$$

$$|\Psi(0)\rangle = |\varphi_i\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\varphi_n\rangle \quad \text{liðum}$$

$$\longrightarrow \quad C_n(t) = \langle \varphi_n | \Psi(t) \rangle$$

$$\sum_k \left\{ i\hbar d_t |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\Psi(t)\rangle - \{H_0 + \lambda \hat{W}(t)\} |\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\Psi(t)\rangle \right\}$$

$\langle \varphi_n | \cdot$

nákvæm

$$\longrightarrow \boxed{i\hbar d_t C_n(t) = E_n C_n(t) + \lambda \sum_k \hat{W}_{nk}(t) C_k(t)}$$

Nálgun

reyna lausn

$$b_n(t) = b_n^{(0)}(t) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \cdots$$

jafna stuðla við sama veldi á λ

$$\longrightarrow \quad i\hbar d_t b_n^{(0)}(t) = 0$$

$$i\hbar d_t b_n^{(r)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t) b_k^{(r-1)}(t)$$

$$r \neq 0$$

---

upphafsst. $\quad b_n(0) = \delta_{ni} \quad$ f. öll λ

$$\longrightarrow \quad b_n^{(0)}(0) = \delta_{ni}$$

$$b_n^{(r)}(0) = 0 \qquad r \neq 0$$

$$\longrightarrow \quad \underbrace{b_n^{(0)}(t) = \delta_{ni}}_{\text{núllta stigs lausnin}}$$

$$\longrightarrow i\hbar d_t b_n^{(1)}(t) = \sum_k e^{i\omega_{nk}t} \hat{W}_{nk}(t)\delta_{ki}$$

$$= e^{i\omega_{ni}t} \hat{W}_{ni}(t)$$

$$\longrightarrow b_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\int_0^t e^{i\omega_{ni}t'} \hat{W}_{ni}(t')dt'$$

$$\mathcal{P}_{if}(t) = |c_f(t)|^2 = |b_f(t)|^2$$

$$\sim \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 \quad \text{ef } i \neq f$$

$$\longrightarrow \boxed{\mathcal{P}_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2}\left|\int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t')\,dt'\right|^2}$$

bera saman við fourier umformun

$$\hat{W}_{fi}(t) = \frac{\hat{W}_{fi}}{2i}\left(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}\right)$$

Ef valið er $\hat{W}(t) = \hat{W}\cos\omega t$

þá fæst

$$\mathcal{P}_{if}(t;\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2$$

Ef $\omega \to 0$ þá er um fasta truflun ~~að ræða~~, sem kveikt er á kl. $t=0$

$$\longrightarrow \mathcal{P}_{if}(t,0) = \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2\omega_{fi}^2}\left|1-e^{i\omega_{fi}t}\right|^2$$

$$= \frac{|W_{fi}|^2}{\hbar^2\omega_{fi}^2}\left(\frac{\sin(\omega_{fi}t/2)}{\omega_{fi}/2}\right)^2$$

Hreintóna truflun

$$\hat{W}(t) = \hat{w}\sin\omega t$$

$$\longrightarrow \hat{W}_{fi}(t) = \hat{w}_{fi}\sin\omega t$$

$\longleftarrow$ fyrir fasta truflun

og

$$P_{if}(t;\omega) = \frac{|w_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} - \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2$$

Athugum fyrst þegar $|\varphi_i\rangle$ og $|\varphi_f\rangle$ eru strjál ástönd í orku

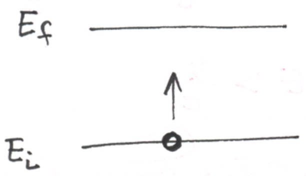
herma fyrir

$$\omega \simeq \begin{cases} \omega_{fi} \\ -\omega_{fi} \end{cases} \qquad \omega \geq 0 \quad \text{Veljum}$$

Hér er hugsað um fast t

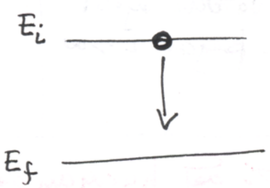
$$\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

herm-ísog



$\omega_{fi} > 0$ kerfi tekur við $\hbar\omega$

Örvuð útgeislun



$\omega_{fi} < 0$ kerfi gefur $\hbar\omega$

$\omega_{fi} > 0 \qquad |\omega - \omega_{fi}| \ll |\omega_{fi}|$

$$P_{if}(t;\omega) = \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}+\omega)t}}{\omega_{fi}+\omega} \pm \frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2$$

$\boxed{\text{andhermuliður}} \ll \boxed{\text{hermuliður}}$

ω um ω_{fi}

$\longrightarrow$ athugum hermulið

Ef reynt er að mæla $E_f - E_i = \hbar\omega_{fi}$ með því að beita „hreintóna truflun" á kerfið í tímann t þá er breidd hermunar

truflunin verður fyrst hreintóna þegar $t \to \infty$

$$\Delta E = \hbar\Delta\omega \simeq \frac{4\pi\hbar}{t} > \frac{\hbar}{t}$$

$$\longrightarrow \Delta E > \frac{\hbar}{t}$$

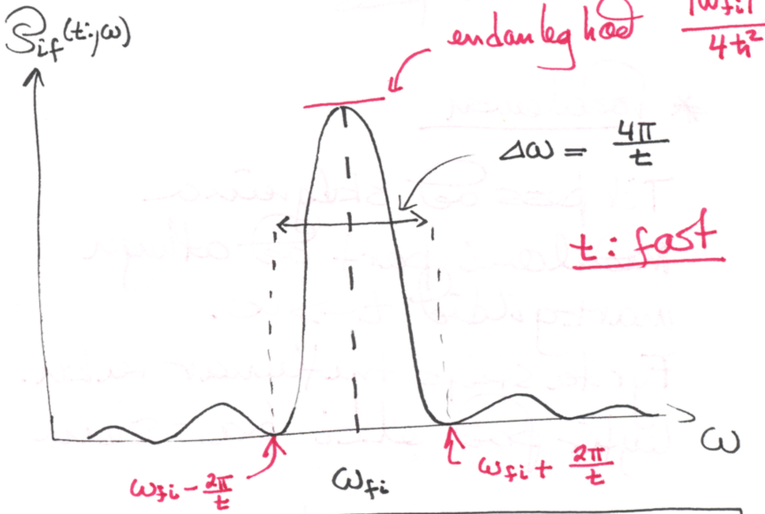
Skilyrði að herman og andherman séu aðgreinan-legar $2|\omega_{fi}| \gg \Delta\omega \longrightarrow 2|\omega_{fi}| \gg \frac{4\pi}{t}$

aldrei uppfyllt fyrir fasta truflun! $\longrightarrow t \gg \frac{1}{|\omega_{fi}|} \sim \frac{1}{\omega}$ hér

Athugum, þegar $\omega_{fi} > 0$ $\quad |\omega-\omega_{fi}| << |\omega_{fi}|$

$$\to S_{if}(t;\omega) \simeq \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left|\frac{1-e^{i(\omega_{fi}-\omega)t}}{\omega_{fi}-\omega}\right|^2$$

$$\simeq \frac{|W_{fi}|^2}{4\hbar^2}\left(\frac{\sin\left(\frac{(\omega_{fi}-\omega)t}{2}\right)}{\frac{1}{2}(\omega_{fi}-\omega)}\right)^2$$



því lengri tími $t \to \Delta\omega$ minna

← nákvæmni staðsetningar hermu ω_{fi}

← hermu nálgun í lagi ef $t >> \frac{1}{|\omega_{fi}|} \simeq \frac{1}{\omega}$

1. stig nálgun í lagi ef $t << \frac{\hbar}{|W_{fi}|}$ ← nauðsynlegt...

$\to S_{fi} \le 1$ ← líkindi

1.5 + 2.5 reikn

* stöku ástöndin

þegar reiknað er fyrir stöt ástönd þá kemur reglulega fyrir að eindin komist í upphafsástandið því er ekki hægt að tala um meðal orku þess

* raðalausn

Til þess að skilgreina meðalorku þarf að athuga markgildið $t \to \infty$.
Fyrsta stigs truflunar reikn. leyfir það ekki þar sem

$$t << \frac{1}{|W_{fi}|}$$

10

ath.

það er í raun raðlausnin og stökuástöndin

$$b_n(t) = \sum_{=0} \lambda\, b_n^{(p)}$$

sem koma í veg fyrir að náttúruleg línubreidd $\Delta\omega$ finnist þegar $t \to \infty$

$*$

Ef öðrum nálgunum hefði verið beitt

„Damping theory" Heitle

Wigner Weisskopf

hefði línubreidd fundist.

~~athugum fyrstu stæðuna~~

~~eins og áður~~

$$\cancel{i\hbar d_t b_n(t) = \sum_m W_{nm} b_m(t) e^{i\omega_{nm} t}}$$

(*)

Kemur síðar

Hér er ekki mögulegt að mæla líkindi færslu til eins stakts loka ástands $|\varphi_f\rangle$

→ summa verður yfir lokaástöndin því aðeins líkindin fyrir færslu til hóps þeirra eru mælanleg!

Hér verður $|\langle\varphi_f|\psi(t)\rangle|^2$ aðeins líkinda þéttleiki

Gullna regla Fermis

Athugum þegar $|\varphi_f\rangle$ er eitt samfelldra ástanda

Ef loka ástandið er eitt samfeldra ástanda

upphafs ástandið $|\varphi_i\rangle$ er hér enn stakt

samfeld ástönd

$$\longrightarrow \langle\alpha|\alpha'\rangle = \delta(\alpha-\alpha')$$

líkindi þess að finna kerfið í hópi ástanda D_f

$$\mathcal{P}(\alpha_f,t) = \int_{\alpha\in D_f} d\alpha\, |\langle\alpha|\psi(t)\rangle|^2$$

Viljum merkja ástöndin með orkunni og ef til vill einhverri stærð β (ef H_0 var ekki CSCO)

breytuskipti:

$$d\alpha = \rho(\beta,E)\,d\beta\, dE$$

$\uparrow$ (ástands þéttleiki) kom vegna breytuskipta

$$\mathcal{P}(\alpha_f,t) = \int_{\beta,E\in D_f} d\beta\, dE\, \rho(\beta,E)\, |\langle\beta,E|\psi(t)\rangle|^2$$

nota sömu reikninga og áður fyrir $|\psi(t)\rangle$ (normað) í hermu við hreintóna eða fasta truflun

$\longrightarrow$

þetta má einnig réttlæta þ.a. $|\langle\beta,E|W|\varphi_i\rangle|^2\rho(\beta,E)$ breytist mikið hægar með E heldur en

$$\left\{\frac{\sin(\ )}{(\ )}\right\}^2$$ ef t er stórt

$$|\langle \beta, E|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|\langle\beta,E|W|\varphi_i\rangle|^2 \left\{\frac{\sin\left(\frac{(E-E_i)t}{2\hbar}\right)}{\frac{E-E_i}{2\hbar}}\right\}^2$$

$t \to \infty$

$$\to \frac{1}{\hbar^2}|\langle\beta,E|W|\varphi_i\rangle|^2\, 2\pi\hbar t\,\delta(E-E_i)$$

Líkinda þéttleikinn fyrir færsluna á einingar tíma og β_f einingu

$$w(\varphi_i,\alpha_f) = \frac{d}{dt}\frac{\delta}{\delta\beta}\mathcal{P}(\varphi_i,\alpha_f,t)$$

$$\boxed{w(\varphi_i,\alpha_f) = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\beta_f,E_f=E_i|W|\varphi_i\rangle|^2\rho(\beta_f,E_f=E_i)}$$

fyrir fasta truflun

Gullna regla Fermis

og

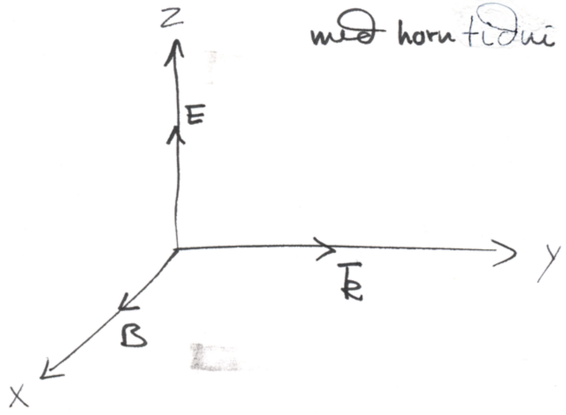
$$w(\varphi_i,\alpha_f)=\frac{2\pi}{\hbar}|\langle\beta_f,E_f=E_i+\hbar\omega|W|\varphi_i\rangle|^2\rho(\beta_f,E_f=E_i+\hbar\omega)$$

Atóm í rafsegulsviði

Rafsegulsviðið verður betur tekið fyrir í Skammtafræði II

flöt rafsegul bylgja ferðast í y-átt

með horntíðni $\omega = ck$



$$\bar{A}(\bar{r},t) = A_0\hat{e}_z e^{i(ky-\omega t)} + A_0^*\hat{e}_z e^{-i(ky-\omega t)}$$

$$\to \begin{cases} E(\bar{r},t) = -\partial_t \bar{A}(\bar{r},t) = i\omega\hat{e}_z\{A_0 e^{i(ky-\omega t)} - c.c.\}\\ B(\bar{r},t)=\bar{\nabla}\times\bar{A}(\bar{r},t) = ik\hat{e}_x\{A_0 e^{i(ky-\omega t)} - c.c.\}\end{cases}$$

$$\frac{W_{II}}{W_I} \approx \frac{\frac{q}{m}\hbar k A_0}{\frac{q}{m} p A_0} = \frac{\hbar k}{p} \approx \frac{a_0}{\lambda} << 1$$

$\frac{\hbar}{p} \sim$ atómstærð a_0

$k = \frac{2\pi}{\lambda}$

tíma upphaf valið þ.a. $\mathrm{Re}\,A_0 = 0$ og

$$\left.\begin{aligned} i\omega A_0 &= \frac{\mathcal{E}}{2} \\ ik A_0 &= \frac{\mathcal{B}}{2} \end{aligned}\right\} \rightarrow \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}} = \frac{\omega}{k} = c$$

og

$$\bar{E}(r,t) = \mathcal{E}\,\hat{e}_z \cos(ky-\omega t)$$
$$\bar{B}(r,t) = \mathcal{B}\,\hat{e}_x \cos(ky-\omega t)$$

Hamiltonvirkinn er þá

$$H = \frac{1}{2m}\left\{\bar{P} - q\bar{A}(\bar{R},t)\right\}^2 + V(R) - \frac{q}{m}\bar{S}\cdot\bar{B}(\bar{R},t)$$

veikt rafsegulsvið

$$H_0 = \frac{\bar{P}^2}{2m} + V(R)$$

$$W(t) = \underbrace{-\frac{q}{m}\bar{P}\cdot\bar{A}}_{W_I(t)} \underbrace{- \frac{q}{m}\bar{S}\cdot\bar{B}}_{W_{II}(t)} + \underbrace{\frac{q^2}{2m}\bar{A}^2}_{\text{sleppa}}$$

hægt f. mjög veikt svið

←

$$\langle \varphi_f | P_z | \varphi_i \rangle = \frac{i}{\hbar} m (E_f - E_i) \langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle$$

3

Tvípólsnálgun (raftvípóll)

$$W_I(t) = -\frac{q}{m} P_z \left\{ A_0 e^{iky - i\omega t} + A_0^* e^{-iky + i\omega t} \right\}$$

$$e^{iky} = 1 + iky - \frac{k^2 y^2}{2} + \cdots$$

$y \sim a_0$ atómstærð

$ky \sim \frac{a_0}{\lambda} \ll 1$ (nota $A_0 = \frac{\mathcal{E}}{2i\omega}$)

$$\rightarrow \boxed{W_I(t) \simeq \underbrace{\frac{q\mathcal{E}}{m\omega} P_z \sin\omega t}_{= W_{DE}(t)} \simeq W(t)}$$

Valreglur

t.d. í gullnu reglunni birtist

$$\langle \varphi_f | W_{DE}(t) | \varphi_i \rangle = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega} \sin\omega t \langle \varphi_f | P_z | \varphi_i \rangle$$

$$= iq \frac{\omega_{fi}}{\omega} \mathcal{E} \sin\omega t \langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle$$

1. stigs línulegt diffurjöfnukneppi

skiptum um föll (engin nálgun)

ef $\lambda \hat{W}(t) = 0 \longrightarrow$

$$C_n(t) = b_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

$\longrightarrow$ reynum lausn á forminu (ef $\lambda \hat{W}(t) \neq 0$)

$$C_n(t) = b_n(t) e^{-iE_n t/\hbar}$$

og vonum að $b_n(t)$ sé hægt breytilegt fall af t

nákvæm

$$\longrightarrow \boxed{i\hbar \frac{d}{dt} b_n(t) = \lambda \sum_k e^{i\omega_{nk} t} \hat{W}_{nk}(t) b_k(t)}$$

með

$$\omega_{nk} = \frac{E_n - E_k}{\hbar}$$

Ef $\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle \neq 0$ þá er færslan tvípólsfærsla

annars gæti hún verið raf fjórpóls- eða segultvípólsfærsla .....

$$\varphi_{n_i l_i m_i} = R_{n_i l_i} Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi)$$

$$\varphi_{n_f l_f m_f} = R_{n_f l_f} Y_{l_f m_f}(\theta, \varphi)$$

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

$\longrightarrow$ hornhluti $\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle$

$$= \int d\Omega\, Y^*_{l_f m_f}(\theta, \varphi)\, Y_{10}(\theta)\, Y_{l_i m_i}(\theta, \varphi)$$

$$\neq 0 \quad \text{ef} \begin{cases} l_f = l_i \pm 1 \\ m_f = m_i \end{cases}$$

5

$\bar{I}$ rauninni ef önnur skautun hefði verið
t.d. $\bar{E}$ samsíða $\hat{e}_x$ eða $\hat{e}_y$

$\longrightarrow \quad m_f = m_i \pm 1 \qquad Y_{l,\pm 1}$

Valreglur raftvípóls eru því

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta m &= 0, \pm 1 \end{aligned}}$$

ef spuna brautar víxlverkun var með
$f(r)\,\bar{L}\cdot\bar{S}$

þá fæst

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta J &= 0, \pm 1 \\ \Delta l &= \pm 1 \\ \Delta m_J &= 0, \pm 1 \end{aligned}}$$

6

Segultvípóll

$$W_{DM} = -\frac{q}{2m}(L_x + 2S_x)\,\mathcal{B}\cos\omega t$$

$$\longrightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} \Delta l &= 0 \\ \Delta m_l &= \pm 1, 0 \\ \Delta m_s &= \pm 1, 0 \end{aligned}} \qquad \boxed{\begin{aligned} \Delta l &= 0 \\ \Delta J &= \pm 1, 0 \\ \Delta m_J &= \pm 1, 0 \end{aligned}}$$

raf fjórpóll

$$W_{QE} = -\frac{q}{2m}(YP_z + ZP_y)\,\mathcal{E}\cos\omega t$$

$$\longrightarrow \quad \boxed{\begin{aligned} \Delta l &= 0, \pm 2 \\ \Delta m &= 0, \pm 1, \pm 2 \end{aligned}}$$

NMR $\longleftrightarrow$ segultvípóll

Norðurljós; Grænalínan $\quad \Delta l = 2 \quad$ raf fjórpóll

Örvun, ekki við hermu

Ef ω er ekki nærri neinni Bohr tíðni ω_{fi} þá leiðir truflunin til þess að atómið öðlast tímaháð tvípólsvægi $\langle \bar{D} \rangle (t)$

$$W_{DE}(t) = \frac{q\Sigma}{m\omega} P_z \sin\omega t$$

$$\to W_{ni} = \frac{q\Sigma}{m\omega} \langle \varphi_n | P_z | \varphi_i \rangle$$

$$|\psi(t=0)\rangle = |\varphi_0\rangle$$

$$\to |\psi(t)\rangle = e^{-iE_0 t/\hbar} |\varphi_0\rangle + \lambda \sum_{n\neq 0} b_n^{(1)}(t) e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle$$

$$\to |\psi(t)\rangle = \left\{ |\varphi_0\rangle + \sum_{n\neq 0} \frac{q\Sigma}{2im\hbar\omega} \langle \varphi_n | P_z | \varphi_0 \rangle \cdot \left(\frac{e^{-i\omega_{n0}t} - e^{i\omega t}}{\omega_{n0}+\omega} - \frac{e^{-i\omega_{n0}t} - e^{-i\omega t}}{\omega_{n0}-\omega} \right) |\varphi_n\rangle \right\} e^{-iE_0 t/\hbar}$$

Hér mætti vaða (cgs)

$$\bar{D} = \bar{E} + 4\pi \bar{P} \quad , \quad \bar{P} = \langle D_z \rangle (\omega) \sim \chi \bar{E}$$

$$\to \bar{D} = (1 + 4\pi\chi) \bar{E} = \epsilon \bar{E}$$

og þannig reikna $\boxed{\epsilon(\omega)}$

útskýra

nota $|\psi(t)\rangle$ til þess að reikna

$\langle D_z\rangle(t) = \langle\psi(t)|qZ|\psi(t)\rangle$ þ.s. öllum liðum Σ^2 og hærri er sleppt, eins öllum liðum með tíðni ω_{no} (sem verða deyfðir í raun), nota síðan

$$\langle\varphi_n|P_z|\varphi_0\rangle = \frac{im}{\hbar}(E_n - E_0)\langle\varphi_n|Z|\varphi_0\rangle \quad (*)$$

þ.a. fæst

$$\langle D_z\rangle(t) = \frac{2q^2}{\hbar}\Sigma\cos\omega t\sum_n \frac{\omega_{no}|\langle\varphi_n|Z|\varphi_0\rangle|^2}{\omega_{no}^2-\omega^2}$$

Skilgreina (oscillator strength)
sveifil styrkleika

$$f_{no} = \frac{2m\omega_{no}|\langle\varphi_n|Z|\varphi_0\rangle|^2}{\hbar}$$

$$\langle D_z\rangle(t) = \sum_n f_{no}\frac{q^2}{m(\omega_{no}^2-\omega^2)}\Sigma\cos\omega t$$

(rétt eins og fjaðrandi bundin rafeind, sígild)

Sanna má

$$\sum_n f_{no} = 1 \quad \longleftrightarrow \text{summuregla}$$

nota $(*)$ $\rightarrow$

$$f_{no} = \frac{1}{i\hbar}\langle\varphi_0|Z|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|P_z|\varphi_0\rangle - \frac{1}{i\hbar}\langle\varphi_0|P_z|\varphi_n\rangle\langle\varphi_n|Z|\varphi_0\rangle$$

$$\Rightarrow \sum_n f_{no} = \frac{1}{i\hbar}\langle\varphi_0|(ZP_z - P_zZ)|\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1$$

Örvun við hermu

Tvípóls víxlverkun fyrir rafsegulsviðið

$$W_{DE}(t) = \frac{q\mathcal{E}}{m\omega} P_z \sin\omega t$$

þá fæst

$$\langle \varphi_f | W_{DE}(t) | \varphi_i \rangle = iq \frac{\omega_{fi}}{\omega} \mathcal{E} \sin\omega t \cdot \langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle$$

líkindin fyrir ósagshermu

$$\mathcal{P}_{if}(t,\omega) = \frac{q^2}{4\hbar^2} \left(\frac{\omega_{fi}}{\omega}\right)^2 |\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle|^2 \mathcal{E}^2 \left(\frac{\sin\left(\frac{(\omega_{fi}-\omega)t}{2}\right)}{(\omega_{fi}-\omega)/2}\right)^2$$

Í „raun" er inn geislinn ekki endilega einlitur → innflæðið af orku rafsegulsviðsins á bil $(\omega, \omega + d\omega)$

$$= I(\omega)\,d\omega$$

gerum ráð fyrir að inn bylgjurnar séu ekki sam fasa

→ $\overline{\mathcal{P}}_{if}$ er summa líkindanna fyrir hverja bylgju

því kemur í stað „orkunnar" $\mathcal{E}^2$

$$2I(\omega)\,d\omega \frac{1}{\epsilon_0 c}$$

$$\Rightarrow \overline{\mathcal{P}}_{if}(t) = \frac{q^2}{2\epsilon_0 c\hbar^2} |\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle|^2 \cdot \int_0^\infty d\omega \left(\frac{\omega_{fi}}{\omega}\right)^2 I(\omega) \left(\frac{\sin((\omega_{fi}-\omega)t/2)}{(\omega_{fi}-\omega)/2}\right)^2$$

veljá $\frac{4\pi}{t} \ll \Delta$ $\quad t \to \infty$

$$\to \mathcal{P}_{if}(t) = \frac{\pi q^2}{\epsilon_0 c\hbar^2} |\langle \varphi_f | z | \varphi_i \rangle|^2 I(\omega_{fi})\, t$$

$$\mathcal{P}_{if}(t) = C_{if}\, I(\omega_{fi})\, t$$

með

$$C_{if} = \frac{4\pi^2}{\hbar} |\langle\varphi_f|z|\varphi_i\rangle|^2 \alpha$$

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

því fæst að <u>forsk líkindin á einingar tíma</u> eru

$$\boxed{w_{if} = C_{if}\, I(\omega_{fi})}$$

1. stigs truflun fyrir stök ástönd leiðir til $\mathcal{P}_{ii}(t)$ minkar frá upphafsgildinu $\mathcal{P}_{ii}(0) = 1$ eins og $\dots t^2$

2. stigs truflun sýnir að eindin kemur reglulega aftur í upphafsástandið

þegar lokaástandið er samfella þá verður forskan eingang....

og nú þarf ~~aðra~~ ~~aðferð~~ heldur en truflunar röð til þess að geta ~~því~~ lýst því sem gerist þegar $t \to \infty$

Dofnun D_{XIII}

Hentar aðferðin sem minnst var á var nákvæm

athugum nálgun (Weisskopf Wigner)

Stakt upphafsástand → ástanda

eingengt ferli → búumst við líftíma ....

dæmi

atóm — ljóseind, jón

sjálfgeislun
α-geislavirkni
ljósrofun

þá hér sé betra að líta á skömmtun rafsegulsviðsins eða ...

1. truflanareikn. Fermi gullna reglan

$$P_{ii}(t) \simeq 1 - \Gamma t$$

aðferðin bregst $t \to \infty$, en við búumst við $P(t) \simeq e^{-\Gamma t}$ þá

Ekki til góð samleitin röð fyrir $e^{-\Gamma t}$ fyrir lítið Γ þegar $t \to \infty$

→ truflanareikn. nægir ekki eins og hann var framkvæmdur

Líkan

róf H_0 skiptist í tvennt

$H_0|\varphi_i\rangle = E_i|\varphi_i\rangle$ ekki margfalt, sundurlaust einstakt ástand

$H_0|\alpha\rangle = E|\alpha\rangle$ samfellt $E \geq 0$

$$\langle \alpha | \alpha' \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij}$$

fullkomin grunnur

$$\langle \varphi_i | \alpha \rangle = 0$$

$$|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i| + \int d\alpha\, |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1$$

$$|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$$

$$\left.\begin{array}{l} \langle \varphi_i | W | \varphi_i \rangle = \langle \alpha | W | \alpha \rangle = 0 \\ \langle \alpha | W | \alpha' \rangle \end{array}\right\}$$ gera ráð fyrir

W er ekki beint tímaháð

Lausn

$$|\psi(t)\rangle = b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\varphi_i\rangle + \int d\alpha\, b(\alpha,t) e^{-iEt/\hbar} |\alpha\rangle$$

→ inn í Schrödinger jöfnu og innfalda síðan með $|\alpha\rangle$ eða $|\varphi_i\rangle$

→ $$\boxed{\begin{array}{ll} i\hbar d_t b_i(t) = \int d\alpha\, e^{i(E_i - E)t/\hbar} \langle \varphi_i | W | \alpha \rangle\, b(\alpha,t) & (1) \\ i\hbar d_t b(\alpha,t) = e^{i(E - E_i)t/\hbar} \langle \alpha | W | \varphi_i \rangle\, b_i(t) & (2) \end{array}}$$

með upphafsskil.

$$b_i(0) = 1$$

$$b(\alpha,0) = 0$$

---

leysa (2) og setja inn í (1)

→

$$d_t b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int d\alpha \int_0^t dt' e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} |\langle \alpha | W | \varphi_i \rangle|^2 b_i(t')$$

nota

$$d\alpha = \rho(\beta, E)\, d\beta\, dE$$

$$K(E) \equiv \int d\beta\, |\langle \beta, E | W | \varphi_i \rangle|^2 \rho(\beta, E)$$

$$\to d_t b_i(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty dE \int_0^t dt' K(E) e^{i(E_i - E)(t-t')/\hbar} b_i(t')$$

afleiðuheildisjafna (nákvæm)

Hér er notað

$$\int_0^t d\tau\, e^{i(E_i-E)\tau/\hbar} \xrightarrow[t\to\infty]{} \hbar\left\{\pi\delta(E_i-E)+i\mathcal{P}\left(\frac{1}{E_i-E}\right)\right\}$$

athuga

$$g(E_i,t-t') = -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^\infty dE\, K(E)\, e^{i(E_i-E)(t-t')/\hbar}$$

K(E) breytist hægt með E miðað við fasa sveifluna

$$\longrightarrow \int_0^t g(E_i,t-t')\, b_i(t')\,dt'$$

$$\simeq b_i(t)\int_0^t g(E_i,t-t')\,dt'$$

$$= -\left(\frac{\Gamma}{2}+i\frac{\Delta E}{\hbar}\right) b_i(t)$$

með

$$\Delta E = \mathcal{P}\int_0^\infty \frac{K(E)}{E_i-E}\,dE$$

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}\int d\beta\, |\langle \beta, E=E_i|W|\varphi_i\rangle|^2 \rho(\beta, E=E_i)$$

fyrir nákvæmari reikninga og önnur ástönd en s-ástönd þarf að nota Lorentz-óbreytanlegar jöfnur

~~[illegible]~~

þ.a. lausnin verður

$$\boxed{\begin{aligned} b_i(t) &= e^{-\Gamma t/2}\, e^{-i\Delta E\, t/\hbar} \\ b(\alpha,t) &= \frac{\langle\alpha|W|\varphi_i\rangle}{\hbar}\, \frac{1-e^{-\Gamma t/2}\, e^{i(E-E_i-\Delta E)t/\hbar}}{\frac{1}{\hbar}(E-E_i-\Delta E)+i\frac{\Gamma}{2}} \end{aligned}}$$

$$\Delta E = \mathcal{P}\int_0^\infty \frac{K(E)}{E_i-E}\, dE$$

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}\int d\beta\, |\langle\beta, E=E_i|W|\varphi_i\rangle|^2 \rho(\beta, E=E_i)$$

sem er óháð E hér, en ekki í Heitler aðferð

Hér þarf að draga frá „sérstaka" sjálforku fyrir 2s ástandið fæst því t.d. í vetni $\Delta\omega_E \sim 1040$ Mhz samanborið við 1057 Mhz í mælingum ; LAMB-hliðrun athugasemdir

$$P_{ii}(t) = |b_i(t)|^2 = e^{-\Gamma t} \xrightarrow[t\to\infty]{} 0$$

-> eingent ferli (ekki afturkvæmt)
með líftíma $\tau = \frac{1}{\Gamma}$

---

hliðrun $E_i \to E_i + \Delta E$

ΔE er annarstigs tíma óháð truflun
á E_i vegna tengslana (gegnum W)
við $|\alpha\rangle$

Aðferð Heitlers

Eins og áður er jafnan

$$i\hbar d_t b_n(t) = \sum_m W_{nm} b_n(t) e^{i\omega_{nm}t} \qquad (*)$$

upphafsástand $|\varphi_i\rangle$

$$\to \quad b_n(0) = 0 \qquad b_i(0^+) = 1 \qquad \text{ef } n \neq i$$

Vegna einföldunar má leyfa lausnir fyrir $t<0$ (og þar má velja b_n að vild)

$$b_n(t) = b_0(t) = 0 \qquad t<0$$

$$b_i(0^+) - b_i(0^-) = 1 \qquad \text{stökk}$$

öll hin eru ~~sam~~ samfeld við $t=0$

til þess að (*) gildi fyrir öll t þarf

$$i\hbar d_t b_n(t) = \sum_m W_{nm} b_m(t) e^{i\omega_{nm}t} + i\hbar\delta_{ni}\delta(t)$$

fourier

$$b_n(t) = -\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dE\, G_{ni}(E)\, e^{i(E_n - E)t/\hbar}$$

$$i\hbar\delta(t) = -\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{i(E_i - E)t/\hbar}$$

tryggja samleitni f. $t<0$, $b=0$
$E \to E + i\epsilon$

Innsetning $n \neq i$

$$(E+i\epsilon-E_n)U_{ni}(E)G_{ii}(E)\frac{1}{E+i\epsilon-E_n}$$

$$= \sum_{m\neq i} W_{nm} U_{mi} G_{ii}(E)\frac{1}{E+i\epsilon-E_m} + W_{ni}G_{ii}(E)$$

$$\to \quad U_{ni}(E) = W_{ni} + \sum_{m\neq i} W_{nm} U_{mi}\frac{1}{E+i\epsilon-E_m}$$

(**)

$$(E+i\epsilon-E_i)G_{ii}(E) = \delta_{ii} + G_{ii}(E)W_{ii} + \sum_{m\neq i} W_{im}G_{mi}$$

$$(E+i\epsilon-E_i)G_{ii}(E) = 1 + G_{ii}(E)W_{ii} + \sum_{m\neq i} W_{im}U_{mi}G_{ii}\frac{1}{E+i\epsilon-E_m}$$

$$(E+i\epsilon-E_i)G_{ii}(E) = 1 + G_{ii}\Big(W_{ii} + \sum_{m\neq i} W_{im}U_{mi}G_{ii}\frac{1}{E+i\epsilon-E_m}\Big)$$

notað í schrödinger

$$(E+i\epsilon - E_n) G_{ni}(E) = \sum_m W_{nm} G_{mi}(E) + \delta_{ni} \quad (**)$$

Veljum

$$G_{ni}(E) = U_{ni}(E) G_{ii}(E) \frac{1}{E+i\epsilon-E_n}, \quad (n\neq i)$$

þá fæst $\quad U_{ii} \equiv 0,$

$$\boxed{U_{ni}(E) = W_{ni} + \sum_{m\neq i} W_{nm} U_{mi} \frac{1}{E+i\epsilon-E_m}}$$

þessa jöfnu þarf að leysa fyrir U_{ni} til þess að finna $b_n(t)$

umritum fyrir $G_{ii} \to b_i$

$$G_{ii} = \frac{1}{E-E_i+\frac{1}{2}i\hbar\Gamma_{ii}(E)}$$

$$\frac{1}{2}\hbar\Gamma_{ii}(E) = i W_{ii} + i \sum_{m\neq i} W_{im} U_{mi} \frac{1}{E+i\epsilon-E_i}$$

Ef $\Gamma_{ii}(E)$ væri orkuóháð þá fengist Wigner Weißkopf niðurstöðurnar aftur

Γ_{ii} hefur raunhluta $>0 \to$ línubreidd

og þverhluta $\to$ hliðrun

nú má gera nálgun fyrir Γ_{ii}

og samt halda línubreidd og hliðrun

1. stigs nálgun t.d. fyrir Γ_{ii} er alls ekki 1. nálgun fyrir b_i í λ

Ef nú er tekið kerfi með $\mathrm{Re}(\Gamma) \ll E_n$ og markgildið $t\to\infty$ athugað þá fæst

$$\mathrm{Re}(\Gamma(E_i+\Delta E)) = \sum_n w_{ni}$$

þar sem

$$w_{ni} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{ni}(E_n)|^2 \delta(E_n-E_i-\Delta E)$$

eru forðulíkurnar frá i í n

og ΔE er hliðrun orku ástandsins n

$$\Delta E = \frac{1}{2}\hbar\, \mathrm{Im}(\Gamma(\tilde{E}_n))$$

Hér þarf að draga frá sjálforku ástandanna, endurst...

!

Hér er ekki mögulegt að mæla líkindi færslu til eins loka ástands $|\varphi_f\rangle$

$\rightarrow$ summa verður yfir loka ástönd því líkindin fyrir færslu til hóps þeirra eru mælanleg!

1

Línuleg svörun

$$H_0 |\alpha\rangle = E^0_\alpha |\alpha\rangle$$

Við H_0 bætist tímaháð truflun

$$\delta V(t) = \delta V e^{-i(\omega + i\eta)t} \qquad \eta \rightarrow 0^+$$

$$\rightarrow \lim_{t \rightarrow -\infty} \delta V(t) = 0$$

það er sem sé kveikt hægt á truflunni

þ.a.

$$\rho(t \rightarrow -\infty) = \rho^0$$

Fyrir Fermi eindir þá getur safnaðstæðin gefið

$$\rho^0 = f(H_0)$$

því samsvarandi stóru kórdreifingu

$$\rho^0 = Z^{-1} e^{-H_0/kT}$$

$$Z = tr\{e^{-H_0/kT}\}$$

Hreyfijafna $\rho(t)$

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [H(t), \rho(t)]$$

sem við viljum leysa línulega með tilliti til δV

$$i\hbar\dot{\rho}(t) = [H_0, \rho(t)] + [\delta V(t), \rho(t)]$$

athuga fylkisstök

$$\langle\alpha|\rho(t)|\beta\rangle = \rho_{\alpha\beta}(t)$$

og nota $\rho(t) = \rho^0 + \delta\rho(t)$

þá fæst í línulegri nálgun:

$$i\hbar\delta\dot{\rho}(t) = [H_0, \delta\rho(t)] + [\delta V(t), \rho^0]$$

þ.a.

$$i\hbar\delta\dot{\rho}_{\alpha\beta}(t) = (E_\alpha^0 - E_\beta^0)\delta\rho_{\alpha\beta}(t) + \langle\alpha|[\delta V(t), \rho^0]|\beta\rangle$$

því fæst

$$i\hbar\delta\dot{\rho}_{\alpha\beta}(t) = \hbar\omega_{\alpha\beta}\delta\rho_{\alpha\beta}(t) + (n_\beta - n_\alpha)\langle\alpha|\delta V(t)|\beta\rangle$$

því $\rho_0|\beta\rangle = f(H_0)|\beta\rangle = f(E_\beta)|\beta\rangle$

$$\equiv n_\beta|\beta\rangle$$

Notum Fourier umformun

tryggja samleitni

$$\delta\rho(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega' t + \eta t}\delta\rho(\omega')$$

$$\delta V(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i(\omega' + i\eta)t}\delta V(\omega')$$

því verður hreyfijafnan

$$\hbar(\omega' + i\eta)\delta\rho_{\alpha\beta}(\omega') = \hbar\omega_{\alpha\beta}\delta\rho_{\alpha\beta}(\omega') + (n_\beta - n_\alpha)\langle\alpha|\delta V(\omega')|\beta\rangle$$

$$\rightarrow \delta\rho_{\alpha\beta}(\omega') = \frac{1}{\hbar}\left\{\frac{n_\beta - n_\alpha}{\omega' + (\omega_\beta - \omega_\alpha) + i\eta}\right\}\langle\alpha|\delta V(\omega')|\beta\rangle$$

Fourier umformum tilbaka

$$\delta V(\omega') = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\omega' t}\,\delta V(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(\omega-\omega')t}\,\delta V$$

$$= 2\pi\,\delta(\omega-\omega')\,\delta V$$

$$\rightarrow \delta\rho_{\alpha\beta}(\omega') = \frac{1}{\hbar}\left\{\frac{n_\beta - n_\alpha}{\omega' + (\omega_\beta - \omega_\alpha) + i\eta}\right\} 2\pi\delta(\omega-\omega')\langle\alpha|\delta V|\beta\rangle$$

$$\rightarrow \delta\rho_{\alpha\beta}(t) = \frac{1}{\hbar}\left\{\frac{n_\beta - n_\alpha}{\omega' + \omega_{\beta\alpha} + i\eta}\right\}\langle\alpha|\delta V|\beta\rangle\, e^{-i\omega t + \eta t}$$

---

eða

$$\boxed{\begin{gathered}\delta\rho_{\alpha\beta}(t) = \delta\rho_{\alpha\beta}\, e^{-i\omega t + \eta t} \\ \text{og} \\ \delta\rho_{\alpha\beta} = \frac{1}{\hbar}\left\{\frac{n_\beta - n_\alpha}{\omega + \omega_{\beta\alpha} + i\eta}\right\}\langle\alpha|\delta V|\beta\rangle\end{gathered}}$$

Svörunarföll

Í kerfi frjálsra agna er þéttleikinn

$$n(\vec r) = \mathrm{tr}\{\delta(\hat{\vec r} - \vec r)\rho^0\}$$

$$= \sum_\alpha \langle\alpha|\delta(\hat{\vec r} - \vec r) f(H_0)|\alpha\rangle$$

$$= \sum_\alpha \int d\vec r' \langle\alpha|\vec r'\rangle\langle\vec r'|\delta(\hat{\vec r} - \vec r) f(H_0)|\alpha\rangle$$

$$= \sum_{\alpha\beta} \int d\vec r' \langle\alpha|\vec r'\rangle\langle\vec r'|\delta(\hat{\vec r} - \vec r)|\beta\rangle\langle\beta| f(H_0)|\alpha\rangle$$

$$= \sum_\alpha \int d\vec r'\, \psi_\alpha^*(\vec r')\,\delta(\vec r' - \vec r)\,\psi_\beta(\vec r')\, f(E_\alpha)$$

$$= \sum_\alpha |\psi_\alpha(\vec r)|^2 f(E_\alpha)$$

truflunin $\delta V(t)$ veldur þéttleika hnikum $\delta n(\mathbf{r})e^{-i\omega t+\eta t}$ sem finna má:

$$\delta n(\mathbf{r}) = \mathrm{tr}\{\delta(\hat{\mathbf{r}}-\mathbf{r})\delta\rho\}$$

$$= \sum_\alpha \langle\alpha|\delta(\hat{\mathbf{r}}-\mathbf{r})\delta\rho|\alpha\rangle$$

$$= \sum_\alpha \int d\mathbf{r}'\langle\alpha|\mathbf{r}'\rangle\langle\mathbf{r}'|\delta(\hat{\mathbf{r}}-\mathbf{r})\delta\rho|\alpha\rangle$$

$$= \sum_{\alpha\beta}\int d\mathbf{r}'\psi_\alpha^*(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r}')\delta\rho_{\beta\alpha}$$

$$= \sum_{\alpha\beta}\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r})\delta\rho_{\beta\alpha}$$

<u>því fæst</u>

$$\delta n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta}\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r})\frac{1}{\hbar}\left\{\frac{n_\alpha-n_\beta}{\omega+\omega_{\alpha\beta}+i\eta}\right\}\cdot\langle\alpha|\delta V|\beta\rangle$$

$$\delta n(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta}\int d\mathbf{r}'\,\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r})\psi_\alpha^*(\mathbf{r}')\psi_\beta(\mathbf{r}')\cdot\frac{1}{\hbar}\left\{\frac{n_\alpha-n_\beta}{\omega+\omega_{\alpha\beta}+i\eta}\right\}\delta V(\mathbf{r}')$$

$\rightarrow$

$$\boxed{\delta n(\mathbf{r}) = \frac{1}{\hbar}\int d\mathbf{r}'\,D(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega)\,\delta V(\mathbf{r}')}$$

þar sem

$$D(\mathbf{r},\mathbf{r}';\omega) \equiv \sum_{\alpha\beta}\psi_\alpha^*(\mathbf{r})\psi_\beta(\mathbf{r})\psi_\alpha^*(\mathbf{r}')\psi_\beta(\mathbf{r}')\cdot\left\{\frac{n_\alpha-n_\beta}{\omega+\omega_{\alpha\beta}+i\eta}\right\}$$

er þéttleika svörunarfallið

Hér var kveikt á truflunni
með
$$\delta V(t) = e^{-i(\omega+i\eta)t}\delta V$$

Jafnvel þó $\omega = 0$ þá er enn kveikt á henni (hún verður síðan föst)
$$\delta V(t) = \delta V e^{\eta t}$$

og
$$\delta \rho_{\alpha\beta}(t) = \frac{1}{\hbar}\left\{\frac{n_\beta - n_\alpha}{\omega_\beta - \omega_\alpha + i\eta}\right\} e^{\eta t}\langle\alpha|\delta V|\beta\rangle$$

kerfinu hefur hér verið komið úr jafnvægi með á kveikingunni (óvermin, adiabatic)

Berum þetta saman við línulega nálgun á
$$\delta\rho^{th} = f(H+\delta V) - f(H)$$

Hér eru borin saman kerfi í jafnvægi (ekki kveikt á truflun) jafnt hitastig

---

$$\delta\rho^{th} = f(H_0+\delta V) - f(H_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, f(E)\left\{\delta(E-H-\delta V) - \delta(E-H)\right\}$$

notum
$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi i}\left\{\frac{1}{x-i\eta} - \frac{1}{x+i\eta}\right\} \qquad \eta \to 0^+$$

$$\to \delta\rho^{th} = \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dE\, f(E)\left\{\frac{1}{E-H_0-\delta V-i\eta} - \frac{1}{E-H_0-\delta V+i\eta} - \frac{1}{E-H_0-i\eta} + \frac{1}{E-H_0+i\eta}\right\}$$

nota nú $\frac{1}{1\pm x} \simeq 1 \mp x + \cdots$ ef $x \ll 1$

þ.a.

$$\frac{1}{E-H_0-\delta V+i\eta} = \frac{1}{(E_0-H_0+i\eta)\left(1-\frac{\delta V}{E-H_0+i\eta}\right)}$$

$$\simeq \frac{1}{E-H_0+i\eta}\left(1+\delta V\frac{1}{E-H_0+i\eta}\right)$$

því fæst

$$\delta\rho^{th} \simeq \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dE f(E)\left\{\frac{1}{E-H_0-i\eta}\delta V\frac{1}{E-H_0-i\eta}\right.$$

$$\left. - \frac{1}{E-H_0+i\eta}\delta V\frac{1}{E-H_0+i\eta}\right\}$$

og fyrir fylkisstökin

$$\delta\rho^{th}_{\beta\alpha} \simeq \frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} dE f(E)\left\{\frac{1}{(E-E_\beta-i\eta)}\langle\beta|\delta V|\alpha\rangle\frac{1}{(E-E_\alpha-i\eta)}\right.$$

$$\left. - \frac{1}{(E-E_\beta+i\eta)}\langle\beta|\delta V|\alpha\rangle\frac{1}{(E-E_\alpha+i\eta)}\right\}$$

Nú þarf ~~að~~ gæta sérstaklega að hornalínustökunum

$$\langle\alpha|\delta V|\alpha\rangle\left\{\frac{1}{(E-E_\alpha-i\eta)^2} - \frac{1}{(E-E_\alpha+i\eta)^2}\right\}$$

$$= \langle\alpha|\delta V|\alpha\rangle\frac{4(E-E_\alpha)i\eta}{((E-E_\alpha)^2+\eta^2)^2}$$

$$= -\langle\alpha|\delta V|\alpha\rangle 2\pi i\,\delta'(E-E_\alpha)$$

þar sem

$$\delta(x-y) \underset{\epsilon\to 0}{=} \frac{\epsilon}{\pi\{(x-y)^2+\epsilon^2\}}$$

því fæst

$$\delta\rho^{th}_{\beta\alpha} \simeq \bar{\delta}_{\alpha\beta} f'(E^0_\alpha)\langle\beta|\delta V|\alpha\rangle$$

$$+ (1-\bar{\delta}_{\alpha\beta})\frac{f(E^0_\beta)-f(E^0_\alpha)}{E^0_\beta-E^0_\alpha}\langle\beta|\delta V|\alpha\rangle$$

$$\bar{\delta}_{\alpha\beta} = \begin{cases} 1 & \text{ef } E^0_\alpha = E^0_\beta \\ 0 & \text{ef ekki}\end{cases}$$

hér var notaður leitarreitningur