Tugas 18

Albert Andersen, 23 Oktober 2023

Kerjakan tugas berikut.

1. Diketahui bahwa interaksi antara atom suatu material dengan medan tertentu dari cahaya didefinisikan sebagai hamiltonian berikut

$$\hat{H}(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}}+e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right)^2-e\Phi(\boldsymbol{r},t)+V(r)$$

Dengan bentuk medan listrik dan magnet dari cahaya dideskripsikan sebagai berikut

$$\vec{E}(\boldsymbol{r},t)=-\boldsymbol{\nabla}\Phi(\mathbf{r},\mathrm{t})-\frac{\partial \boldsymbol{A}(r,t)}{\partial t}\text{ dan }\vec{B}(\boldsymbol{r},t)=\boldsymbol{\nabla}\times\mathbf{A}(\mathbf{r},\mathrm{t})$$

Dimana $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ dan $\Phi(\boldsymbol{r},t)$ adalah potensial vektor dan skalar yang tentunya memiliki invariant dari transformasi gauge berikut

$$\Phi'(\boldsymbol{r},t)=\Phi(\boldsymbol{r},t)-\frac{\partial\chi(r,t)}{\partial t}\text{ dan }A'(\boldsymbol{r},t)=A(\boldsymbol{r},t)+\nabla\chi(\boldsymbol{r},t)$$

Lalu dengan mengasumsikan fungsi gelombang sebagai

$$\psi'^{(\boldsymbol{r},t)}=\hat{R}\,\psi(\boldsymbol{r},t)$$

Dimana $\hat{R}$ merupakan *unitary operator* berikut

$$\hat{R}=e^{-\frac{ie\chi}{\hbar}}\text{ dan }\hat{R}^{+}=e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}$$

Maka dapat dilakukan juga transformasi gauge untuk persamaan Hamiltonian dari persamaan Schrodinger *time-dependent* sebagai berikut

$$\hat{H}'\psi'^{(\boldsymbol{r},t)}=i\hbar\frac{\partial\psi'^{(\boldsymbol{r},t)}}{\partial t}$$

Buktikan bahwa persamaan Hamiltonian tersebut dapat ditransformasi gauge!

Jawaban :

Mendapatkan terlebih dahulu persamaan Hamiltonian dalam bentuk unitary operator untuk memudahkan serta fungsi gelombang $\psi(\boldsymbol{r},t)$. Catatan : menghilangkan tanda operator dan menyederhanakan bentuk fungsi ruang dan waktu untuk memudahkan penulisan berikut

$$H'R\psi=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(R\psi)$$

$$H'R\psi=i\hbar R\frac{\partial\psi}{\partial t}+i\hbar\frac{\partial R}{\partial t}\psi$$

$$H'RR^{+}\psi=RHR^{+}\psi+i\hbar\frac{\partial R}{\partial t}R^{+}\psi$$

$$H'\psi=RHR^{+}\psi+i\hbar\frac{\partial R}{\partial t}R^{+}\psi$$

Dimana $RR^{+}=\hat{1}$ dan $\hat{\boldsymbol{P}}=-i\hbar\boldsymbol{\nabla}$. Maka operator Hamiltonian di atas menjadi

$$H'\psi = e^{-\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(\frac{1}{2m}[-i\hbar\nabla + eA]^2 - e\Phi + V(r)\right)R^+\psi + i\hbar\frac{\partial e^{-\frac{ie\chi}{\hbar}}}{\partial t}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi$$

$$H'\psi = e^{-\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(\frac{1}{2m}(-\hbar^2\nabla^2 - ei\hbar\nabla.A - eAi\hbar\nabla + e^2A^2) - e\Phi + V(r)\right)R^+\psi + e\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi$$

Untuk bagian berwarna ungu menjadi

$$(\dots) = e^{-\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(\frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\nabla^2 - ei\hbar\nabla.A - eAi\hbar\nabla + e^2A^2\right)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi - e\Phi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi + V(r)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right)$$

Bagian warna merah menjadi

$$(\dots) = -\hbar^2\nabla^2\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right) - ei\hbar\nabla\left(Ae^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right) - eAi\hbar\nabla\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right) + e^2A^2e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi$$

Dengan mengambil bagian $\nabla = \frac{\partial}{\partial r}$ terlebih dahulu menjadi

$$\nabla\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right) = \psi\nabla e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} + \nabla\psi.e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} = \psi\frac{ie}{\hbar}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi + \nabla\psi.e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}$$

Dan turunan kedua ∇ berikut

$$\begin{aligned}
\nabla\left(\nabla\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right)\right) &= \frac{ie}{\hbar}\nabla\left(\psi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi\right) + \nabla\left(\nabla\psi.e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\right)\\
&= \frac{ie}{\hbar}(\nabla^2\chi)\psi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} + \frac{ie}{\hbar}\nabla\left(\psi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\right)\nabla\chi + \nabla^2\psi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} + \nabla e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\psi\\
&= \frac{ie}{\hbar}(\nabla^2\chi)\psi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} + \frac{ie}{\hbar}\left(\psi\frac{ie}{\hbar}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi + \nabla\psi.e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\right)\nabla\chi + (\nabla^2\psi)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} + \frac{ie}{\hbar}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi\nabla\psi\\
&= \frac{ie}{\hbar}(\nabla^2\chi)\psi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} - \frac{e^2}{\hbar^2}(\nabla\chi)^2\psi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} + \frac{ie}{\hbar}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi\nabla\psi + (\nabla^2\psi)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}} + \frac{ie}{\hbar}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi\nabla\psi
\end{aligned}$$

$$\nabla^2\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right) = \frac{ie}{\hbar}(\nabla^2\chi)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi - \frac{e^2}{\hbar^2}(\nabla\chi)^2e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi + 2\frac{ie}{\hbar}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi\nabla\psi + e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}(\nabla^2\psi)$$

Maka didapat

$$\begin{aligned}
-ei\hbar A.\nabla\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right) &= -ei\hbar A\left(\psi\frac{ie}{\hbar}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi + \nabla\psi.e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\right)\\
&= e^2\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\right)A(\nabla\chi)\psi - ei\hbar\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\right)A\nabla\psi = e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}(e^2A(\nabla\chi) - ei\hbar A\nabla)\psi
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-ei\hbar\nabla\left(Ae^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right) &= -ei\hbar(\nabla A)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi - ei\hbar A.\nabla\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right)\\
&= -ei\hbar(\nabla A)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi + e^2\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\right)A(\nabla\chi)\psi - ei\hbar\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\right)A\nabla\psi\\
&= e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}(-ei\hbar(\nabla A) + e^2A(\nabla\chi) - ei\hbar A\nabla)\psi
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\hbar^2\nabla^2\left(e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right) &= -ei\hbar(\nabla^2\chi)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi + e^2(\nabla\chi)^2e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi - 2ei\hbar e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\nabla\chi\nabla\psi - \hbar^2e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}(\nabla^2\psi)\\
&= e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(-ei\hbar(\nabla^2\chi) + e^2(\nabla\chi)^2 - 2ei\hbar\nabla\chi\nabla - \hbar^2\nabla^2\right)\psi
\end{aligned}$$

Maka bagian berwarna merah menjadi

$$(\ldots) = e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(-\hbar^2\nabla^2 - 2ei\hbar A\nabla - 2ei\hbar\nabla\chi\nabla - ei\hbar(\nabla A) - ei\hbar(\nabla^2\chi) + e^2(A^2 + A\nabla\chi + \nabla\chi A + (\nabla\chi)^2)\right)\psi$$

$$= e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}(-\hbar^2\nabla^2 - e2(A+\nabla\chi)i\hbar\nabla - ei\hbar\nabla(A+\nabla\chi) + e^2(A+\nabla\chi)^2)\psi$$

$$= e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(P^2 + eA'P + ePA' + e^2A'^2\right)\psi$$

$$= e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(\hat{\boldsymbol{P}} + e\boldsymbol{A}'\right)^2\psi$$

Sehingga dengan kembali ke persamaan berwarna ungu menjadi

$$(\ldots) = e^{-\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(\frac{1}{2m}e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\left(\hat{\boldsymbol{P}} + e\boldsymbol{A}'\right)^2\psi - e\Phi e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi + V(r)e^{\frac{ie\chi}{\hbar}}\psi\right)$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} + e\boldsymbol{A}'\right)^2\psi - e\Phi\psi + V(r)\psi$$

Dengan memasukkan bagian berwarna ungu ke persamaan Hamiltonian menjadi

$$H'\psi = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} + e\boldsymbol{A}'\right)^2\psi - e\Phi\psi + V(r)\psi + e\frac{\partial\chi}{\partial t}\psi$$

$$H'\psi = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} + e\boldsymbol{A}'\right)^2\psi - e\Phi'\psi + V(r)\psi$$

Dengan menghilangkan bagian fungsi gelombang ψ maka didapat transformasi gauge dari persamaan Hamiltonian sebagai berikut

$$H' = \frac{1}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{P}} + e\boldsymbol{A}'\right)^2 - e\Phi' + V(r)$$

2. Untuk interaksi dengan pendekatan *semi-classical field* dari cahaya maka hasil kalkulasi dari *bracket* persamaan Schrodinger *time-dependent* didapat

$$\dot{C}_l(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k C_k(t)\langle l|\hat{H}^{(I)}|k\rangle e^{i\omega_{lk}t}$$

   Dengan $\omega_{lk} = (E_l - E_k)/\hbar$. Lalu ingin dicari untuk probabilitas atom dapat transisi dari *state* $|i\rangle$ ke $|f\rangle$ dalam waktu t yaitu

$$P_{i\to f}(t) = C_f^*(t)C_f(t) = \left|C_f(t)\right|^2$$

   Untuk mendapatkan nilai probabilitas, harus diketahui besar koefisien $C_f(t)$ dan konjugatnya. Maka temukan dengan teori perturbasi untuk besar koefisien $C_f(t)$ cukup sampai orde-2 saja!

Jawaban :

Untuk mencari koefisien $C_f(t)$ dengan teori perturbasi, dapat dilakukan dengan cara membuat *power series* dari koefisien tersebut seperti biasa pada buku lainnya (*bookkeeping*).

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

Dan bentuk Hamiltoniannya juga berubah seperti berikut

$$\hat{H}^{(I)} \approx \lambda H^{(I)}$$

Dengan $0 \leq \lambda \leq 1$. Untuk kali ini diambil $\lambda = 1$ maka persamaan turunan koefisien menjadi

$$\dot{C}_l^{(0)}(t) + \lambda \dot{C}_l^{(1)}(t) + \lambda^2 \dot{C}_l^{(2)}(t) + \cdots = -\frac{i}{\hbar}\sum_k \left(C_k^{(0)}(t) + \lambda C_k^{(1)}(t) + \lambda^2 C_k^{(2)}(t) + \cdots\right)\langle l|\lambda \hat{H}^{(I)}|k\rangle e^{i\omega_{lk}t}$$

Dalam persamaan di atas diambil yang memiliki orde-λ yang sama sehingga

$$\dot{C}_l^{(0)}(t) = 0$$

$$\dot{C}_l^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k C_k^{(0)}(t)\langle l|\hat{H}^{(I)}|k\rangle e^{i\omega_{lk}t}$$

$$\dot{C}_l^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k C_k^{(1)}(t)\langle l|\hat{H}^{(I)}|k\rangle e^{i\omega_{lk}t}$$

Dan seterusnya untuk orde yang semakin tinggi. Untuk itu dapat dirumuskan menjadi

$$\dot{C}_l^{(n)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\sum_k C_k^{(n-1)}(t)\langle l|\hat{H}^{(I)}|k\rangle e^{i\omega_{lk}t}$$

Asumsi dari teori perturbasi adalah menyangka bahwa medan yang dikenakan '*lemah*' sehingga **perubahan populasi atom sangat kecil**. Hal ini mendorong pernyataan aproksimasi bahwa hanya keadaan $k = i$ yang memungkinkan ke keadaan $l = f$. Sehingga untuk orde-1 didapat

$$\dot{C}_f^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} C_i^{(0)}(t)\langle f|\hat{H}^{(I)}|i\rangle e^{i\omega_{fi}t}$$

dan bisa diintegralkan menjadi

$$c_f^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t C_i^{(0)}(t')\langle f|\hat{H}^{(I)}|i\rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt'$$

Lalu untuk orde kedua didapat

$$c_f^{(2)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t C_i^{(1)}(t')\langle f|\hat{H}^{(I)}|i\rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt'$$

$$c_f^{(2)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} C_i^{(0)}(t'')\langle f|\hat{H}^{(I)}|i\rangle e^{i\omega_{fi}t''}\, dt'' \times \langle f|\hat{H}^{(I)}|i\rangle e^{i\omega_{fi}t'}$$