

Κωνσταντίνος Σιμσερίδης

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΟΠΤΙΚΗ



Κβαντική Οπτική

Κωνσταντίνος Σιμσερίδης

Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Τμήμα Φυσικής

Τομέας Φυσικής Συμπυκνωμένης Ύλης

Τίτλος πρωτοτύπου: «Κβαντική Οπτική»

Copyright © 2023, ΚΑΛΛΙΠΟΣ, ΑΝΟΙΚΤΕΣ ΑΚΑΔΗΜΑΪΚΕΣ ΕΚΔΟΣΕΙΣ



(ΣΕΑΒ + ΕΛΚΕ-ΕΜΠ)

Το παρόν έργο διατίθεται με τους όρους της άδειας Creative Commons Αναφορά Δημιουργού – Μη Εμπορική Χρήση – Παρόμοια Διανομή 4.0. Για να δείτε τους όρους της άδειας αυτής επισκεφτείτε τον ιστότοπο <https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/legalcode.el>

Αν τυχόν κάποιο τμήμα του έργου διατίθεται με διαφορετικό καθεστώς αδειοδότησης, αυτό αναφέρεται ρητά και ειδικώς στην οικεία θέση.

Συντελεστές έκδοσης

Γλωσσική επιμέλεια:

Ελευθερία Σκορδαλάκη

Τεχνική επεξεργασία:

Κωνσταντίνος Σιμσερίδης

ΚΑΛΛΙΠΟΣ

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Ηρώων Πολυτεχνείου 9 15780

Ζωγράφου

www.kallipos.gr

Βιβλιογραφική αναφορά:

Κωνσταντίνος Σιμσερίδης. (2023). *Κβαντική Οπτική*. Κάλλιπος, Ανοικτές Ακαδημαϊκές Εκδόσεις.

Διαθέσιμο στο:

<http://dx.doi.org/10.57713/kallipos-185>

ISBN:

978-618-5726-65-2

Αφιερώνεται
στους φοιτητές και στις φοιτήτριες
των Πανεπιστημίων μας.
Κ. Σ.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

Ευχαριστίες	xxi
Συντμήσεις - Λεξικό - Γλωσσάριο	xxiii
Συμβολοθήκη	xxix
1 Περιδιάβαση	1
2 Κβαντική φύση του φωτός	17
2.1 Μέλαν σώμα και συναφείς έννοιες	17
2.2 Πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία: Νόμος του Planck και σύγκριση με τις προσεγγίσεις των Rayleigh-Jeans και Wien	21
2.3 Δύο διατυπώσεις του νόμου Stefan-Boltzmann: (1) Πυκνότητα ενέργειας, (2) Ένταση ακτινοβολίας	23
2.4 Εξισώσεις Maxwell: Διατύπωση με όρους ολικού φορτίου και ολικού ρεύματος	26
2.5 Συνοριακές συνθήκες σε διεπιφάνεια	27
2.6 Ύπαρξη ΗΜ κυμάτων απουσία πυκνότητας φορτίου και πυκνότητας ρεύματος	30
2.7 Πεδία εντός ιδανικού αγωγού	31
2.8 Πεδία στο σύνορο ιδανικού αγωγού	32
2.9 Πεδία σε κοιλότητες	32
2.10 Κανονικοί ΗΜ τρόποι εντός ορθογώνιας παραλληλεπίπεδης κοιλότητας	33
2.11 Στοιχειώδης αριθμός κανονικών τρόπων ΗΜ πεδίου ανά στοιχειώδες διάστημα συχνότητας	36
2.11.1 1η περίπτωση: Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες	37
2.11.2 2η περίπτωση: Ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα	38
2.12 Απόδειξη του κλασικού νόμου των Rayleigh-Jeans από το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας και τον στοιχειώδη αριθμό κανονικών τρόπων ΗΜ πεδίου ανά στοιχειώδες διάστημα συχνότητας	38
2.13 Απόδειξη του νόμου Planck όπως περίπου την έκανε ο Planck	39
2.14 Απόδειξη του νόμου μετατοπίσεως του Wien	42
2.15 Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο	46

3	Διεργασίες αλληλεπιδράσεως φωτονίου - δισταθμικού συστήματος	51
3.1	Διεργασίες αλληλεπιδράσεως φωτονίου - δισταθμικού συστήματος: (Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση, Αυθόρμητη Εκπομπή, Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή. Συντελεστές Einstein A και B	51
3.1.1	(Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση	52
3.1.2	Αυθόρμητη Εκπομπή	54
3.1.3	Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή	55
3.2	Εξαγωγή του νόμου του Planck από τις διεργασίες εκπομπής και απορροφήσεως και τη στατιστική Boltzmann. Σχέση συντελεστών Einstein A και B	57
3.3	Σύγκριση εκπομπών	59
3.4	Σύγκριση διεγερμένων ή εξαναγκασμένων διεργασιών	61
3.5	Σύγκριση στατιστικών Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac, Bose-Einstein	62
4	Συνεχές και διακριτό φάσμα	67
4.1	Συνεχές φάσμα: στερεά, Διακριτό φάσμα: άτομα και μόρια, κέντρα χρώματος, τεχνητά άτομα και μόρια	67
4.2	Κέντρα χρώματος	68
4.2.1	Πλήρης επίλυση του τετραγωνικού απειρόβαθου φρέατος	75
4.3	Κβαντικές τελείες	79
4.3.1	Πλήρης επίλυση του τετραγωνικού πεπερασμένου φρέατος	80
4.4	Από απομονωμένα μονοσταθμικά συστήματα σε δισταθμικό, τρισταθμικό, τετρασταθμικό σύστημα	88
4.4.1	Δισταθμικό Σύστημα	88
4.4.1.1	Πρώτο προσεγγιστικό επίπεδο	91
4.4.1.2	Δεύτερο προσεγγιστικό επίπεδο	93
4.4.1.3	Τρίτο προσεγγιστικό επίπεδο	96
4.4.2	Τρισταθμικό Σύστημα	98
4.4.3	Τετρασταθμικό Σύστημα	100
4.5	Διακριτό - συνεχές ενεργειακό φάσμα, υποζώνες	105
4.6	Θεώρημα Slater και συνέπειες	106
4.6.1	Αδιατάρακτο πρόβλημα	106
4.6.2	Διαταραγμένο πρόβλημα	107
4.7	Από την εξίσωση Schrödinger, μέσω της Εξισώσεως Περιβάλλουσας Συναρτήσεως, μέσω της Προσεγγίσεως Ενεργού Μάζας, στην Εξίσωση Ενεργού Μάζας	107
4.8	Ιδιοκαταστάσεις ηλεκτρονίου σε κβαντικό φρέαρ με σταθερή ενεργό μάζα	110
4.9	Πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων οιονεί διδιαστάτου ηλεκτρονικού αερίου	112
4.10	Χωρική πυκνότητα κατελιγμένων καταστάσεων, δηλαδή ηλεκτρονιακή πυκνότητα	114
4.11	Χωρική πυκνότητα ηλεκτρονίων, ενεργειακή πυκνότητα ηλεκτρονίων, συνολικός αριθμός ηλεκτρονίων	116
4.12	Πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων οιονεί μονοδιαστάτου ηλεκτρονιακού αερίου	117
4.13	Πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων τριδιαστάτου ηλεκτρονιακού αερίου	119
4.14	Βαθμοί ελευθερίας: μετατοπιστικοί, δονητικοί, περιστροφικοί	120
5	Ημικλασική προσέγγιση I	125
5.1	Ημικλασική αντιμετώπιση. ΗΜ πεδίο: κλασικά, Δισταθμικό σύστημα: κβαντικά	126
5.2	Αδιατάρακτο σύστημα, δηλαδή, χωρίς ΗΜ πεδίο	126
5.3	Διαταραγμένο σύστημα. Χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών, Διπολική Ροπή, Προσέγγιση Διπόλου	128
5.3.1	Πώς καταλήγουμε σε Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων	128

5.3.2	Διπολικές Ροπές	130
5.3.3	Στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής	133
5.4	Εξισώσεις περιγράφουσες τη χρονική εξέλιξη δισταθμικού συστήματος. Συχνότητα Rabi. Προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (RWA, Rotating Wave Approximation)	135
5.5	Λύση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων, οι οποίες προκύπτουν μετά την RWA, με την απλοϊκή επαναληπτική μέθοδο Newton	150
5.6	Εναλλακτική λύση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων, οι οποίες προκύπτουν μετά την RWA	150
5.7	Υπολογισμός των συντελεστών Einstein	152
5.8	Υπολογισμός των συντελεστών Einstein χρησιμοποιώντας τις λύσεις που προέκυψαν στην Ενότητα 5.4	154
5.9	«Ιδιοενέργειες» του διαταραγμένου δισταθμικού συστήματος, δηλαδή υπό HM πεδίο	155
5.10	Επίλυση των εξισώσεων, οι οποίες περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη τρισταθμικού συστήματος με ιδιοκαταστάσεις απλού αρμονικού ταλαντωτή	155
5.11	Πολυσταθμικό σύστημα με ισαπέχουσες στάθμες εντός της προσεγγίσεως περιστρεφόμενου κύματος	173
6	Ημικλασική προσέγγιση II	179
6.1	Ταλαντώσεις Rabi σε δισταθμικό σύστημα πέραν της προσεγγίσεως περιστρεφόμενου κύματος	180
6.2	Η μέθοδος επανισώσεως	180
6.2.1	Μέθοδος επανισώσεως πρώτης και δεύτερης τάξεως	180
6.2.2	Ταλαντώσεις Rabi σε Δισταθμικό Σύστημα με τη μέθοδο επανισώσεως	183
6.2.3	Λύσεις για διάφορες περιπτώσεις αρχικών συνθηκών	192
6.3	Αποτελέσματα των μεθόδων NRWA, RWA, και AM πρώτης και δεύτερης τάξεως	204
6.3.1	Αποτελέσματα για ηλεκτρόνιο τοποθετημένο αρχικώς στην κάτω στάθμη	204
6.3.1.1	Αποσυντονισμός	204
6.3.1.2	Συντονισμός	205
6.3.2	Αποτελέσματα για ηλεκτρόνιο τοποθετημένο αρχικώς και στις δύο στάθμες με την ίδια πιθανότητα, αλλά με διαφορά φάσεως	207
6.3.2.1	Αποσυντονισμός	207
6.3.2.2	Συντονισμός	208
6.3.3	Σύγκριση των περιπτώσεων συντονισμού και αποσυντονισμού με τη μέθοδο επανισώσεως	208
7	Επιτρεπόμενες και απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις	213
7.1	Επιτρεπόμενες και Απαγορευμένες Οπτικές Μεταβάσεις εντός της Προσεγγίσεως Διπόλου	213
7.2	Ατομικά πρότυπα	214
7.2.1	Το πρότυπο του Rutherford	215
7.2.2	Το πρότυπο του Bohr	216
7.3	Εξίσωση Schrödinger σε σφαιρικές συντεταγμένες	218
7.3.1	Πρότυπο ατομικών τροχιακών	221
7.4	Άτομο Υδρογόνου: Μορφή ατομικών τροχιακών	227
7.5	Κομβικές επιφάνειες	230
7.6	Ομοτιμία, επιτρεπόμενες και απαγορευμένες μεταβάσεις, κανόνες επιλογής	230
7.7	Άτομο Υδρογόνου: Υπολογισμός στοιχείων πίνακα της διπολικής ροπής, Επιτρεπόμενες και απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις, Κανόνες επιλογής	231
8	Κβαντική προσέγγιση I	239
8.1	Πλήρης κβαντική προσέγγιση έναντι ημικλασικής προσεγγίσεως	239

8.2	Σχέσεις μεταξύ κυματανυσμάτων, κυκλικών συχνοτήτων και φάσεων ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου	240
8.3	Στάσιμο ΗΜ κύμα σε κοιλότητα	243
8.4	Χαμιλτονιανή ΗΜ πεδίου με τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβιβάσεως και αναβιβάσεως) φωτονίων	252
8.5	Χαμιλτονιανή δισταθμικού συστήματος με σπίνορες και τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβιβάσεως και αναβιβάσεως) ηλεκτρονίων	254
8.6	Χαμιλτονιανή τρισταθμικού και πολυσταθμικού συστήματος με σπίνορες και τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβιβάσεως και αναβιβάσεως) ηλεκτρονίων	257
8.7	Χαμιλτονιανή αλληλεπιδράσεως δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου	259
8.8	Σύνοψη Χαμιλτονιανών	264
8.9	Μέσες (αναμενόμενες) τιμές μεγεθών για τη Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings	265
8.10	Απορρόφηση φωτονίου	267
8.11	Εκπομπή φωτονίου	270
9	Κβαντική προσέγγιση II	275
9.1	Απορρόφηση φωτονίου: αναλογία μεταξύ των μεγεθών, τα οποία περιγράφουν τις ταλαντώσεις Rabi στην ημικλασική και στην κβαντική προσέγγιση	275
9.2	Απορρόφηση φωτονίου: λύση διαφορικών εξισώσεων με μέθοδο των ιδιοτιμών για ένα και πολλά φωτόνια στην κοιλότητα	276
9.2.1	Ένα φωτόνιο στην κοιλότητα	276
9.2.2	Πολλά φωτόνια στην κοιλότητα	278
9.3	Σχέσεις μεταθέσεως μποζονίων και σχέσεις αντιμεταθέσεως φερμιονίων	279
9.4	Τελεστές κλίμακας	280
9.5	Συμπύκνωμα Bose-Einstein	280
10	Τελεστής και πίνακας πυκνότητας	285
10.1	Καθαρή κατάσταση και μεικτή κατάσταση	285
10.2	Πίνακας πυκνότητας και τελεστής πυκνότητας	287
10.3	Πίνακας πυκνότητας και τελεστής πυκνότητας σε καθαρή κατάσταση δισταθμικού συστήματος	290
10.4	Η χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας: η εξίσωση von Neumann	291
10.5	Η χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας παρουσία μηχανισμών αποδιεγέρσεως	292
11	LASER	295
11.1	LASER He-Ne	296
11.2	Εξισώσεις ρυθμών των πληθυσμών των συμμετεχουσών στην εκπομπή συνεκτικής ΗΜ ακτινοβολίας σταθμών και της πυκνότητας ακτινοβολίας	298
11.3	Αριθμός διαμήκων τρόπων εντός εύρους γραμμής εκπομπής	303
11.4	Εύρεση των πληθυσμών των σταθμών και της πυκνότητας ΗΜ ακτινοβολίας στη στάσιμη κατάσταση, Κρίσιμη άντληση, Αναστροφή πληθυσμού	303
11.5	Αριθμητική επίλυση των εξισώσεων των ρυθμών σε κάθε στιγμή	308
11.6	Εργαστήριο προσομοιώσεως: εξάσκηση στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων των ρυθμών	309
11.7	Στάσιμα ΗΜ κύματα σε 3Δ κοιλότητα: Διαμήκεις τρόποι και εγκάρσιοι τρόποι	311
11.8	Μορφή του TEM ₀₀ και των TEM _{p'q} ανώτερης τάξεως σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη και σε κυλινδρική κοιλότητα	315
11.9	Είδη Laser - ενδεικτικές εφαρμογές	317
11.10	LASER επαφής p-n ή αλλιώς LASER διόδου	318
11.11	LASER κβαντικών τελειών	321

11.12	Τεχνικές απομονώσεως των TEM ₀₀ και TEM _{p'q} ανωτέρας τάξεως	321
12	Διάφορα	325
12.1	Εξισώσεις Fresnel, Γωνία Brewster	325
12.2	Ολική εσωτερική ανάκλαση	334
12.3	Εκπομπή πολωμένης δέσμης	336
12.4	Διάνυσμα Raynting	336
A	Ασκήσεις	341
A.1	Ασκήσεις κεφαλαίου 1: Περιδιάβαση	341
A.2	Ασκήσεις κεφαλαίου 2: Κβαντική φύση του φωτός	341
A.3	Ασκήσεις κεφαλαίου 3: Μηχανισμοί αλληλεπιδράσεως φωτονίου - Δισταθμικού Συστήματος	348
A.4	Ασκήσεις κεφαλαίου 4: Συνεχές και διακριτό φάσμα	350
A.5	Ασκήσεις κεφαλαίου 5: Ημικλασική προσέγγιση I	350
A.6	Ασκήσεις κεφαλαίου 6: Ημικλασική προσέγγιση II	353
A.7	Ασκήσεις κεφαλαίου 7: Επιτρεπόμενες κι απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις	353
A.8	Ασκήσεις κεφαλαίου 8: Κβαντική προσέγγιση I	360
A.9	Ασκήσεις κεφαλαίου 9: Κβαντική προσέγγιση II	363
A.10	Ασκήσεις κεφαλαίου 10: Τελεστής και πίνακας πυκνότητας	363
A.11	Ασκήσεις κεφαλαίου 11: Laser	363
A.12	Ασκήσεις κεφαλαίου 12: Διάφορα	365
B	Βοηθητικά Μαθηματικά και Λεπτομέρειες Πράξεων	367
B.1	Αριθμητική πρόοδος	367
B.2	Γεωμετρική πρόοδος	367
B.3	Μια αναπαράσταση της συναρτήσεως δ	368
B.4	Μερικές τριγωνομετρικές σχέσεις	369
B.5	Περιστρεφόμενα κύματα	370
B.6	Στοιχεία πίνακα τελεστή	370
B.7	Λύση Συστήματος Διαφορικών Εξισώσεων με τη μέθοδο των Ιδιοτιμών	372
Γ	Προγράμματα matlab	375
Γ.1	fornu0ofT.m	375
Γ.2	forlambda0ofT.m	376
Γ.3	WienDisplacementANDPlanckofLambda.m	377
Γ.4	WienDisplacementANDPlanckofLambdaMultipleT.m	378
Γ.5	Oscillations.m	379
Γ.6	N1N2DNrho.m	380

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΕΙΚΟΝΩΝ

- 1.1 Σχηματικά, ένα δισταθμικό σύστημα ($\Delta\Sigma$). 3
- 1.2 Σχηματικά, πώς πλησιάζοντας δύο μονοσταθμικά συστήματα ($M\Sigma$), τα οποία βρίσκονται σε άπειρη απόσταση, το ένα αριστερά (A) και το άλλο δεξιά (Δ), φτιάχνουμε ένα δισταθμικό σύστημα ($\Delta\Sigma$). Ο ενεργειακός διαχωρισμός των δύο σταθμών καθορίζεται από το ολοκληρωμα μεταβιβάσεως $t = \langle \phi_A | \hat{H} | \phi_\Delta \rangle$, δηλαδή, από το πόσο ισχυρά αλληλεπιδρούν τα άλλοτε (άνω τμήμα της εικόνας) απομονωμένα $M\Sigma$ για να φτιάξουν το ενιαίο $\Delta\Sigma$ (κάτω τμήμα της εικόνας). Χάριν απλότητας, υποθέτουμε πως κάθε απομονωμένο $M\Sigma$ έχει στάθμη ενέργειας ϵ , ενώ το ενιαίο σύστημα, δηλαδή το $\Delta\Sigma$, έχει στάθμες ενέργειας E_1 και E_2 , οι οποίες, σε μια πρώτη προσέγγιση Ισχυρής Δεσμεύσεως, απέχουν ενεργειακά κατά $2|t|$ 3
- 1.3 Η (Εξαναγκασμένη) Απορρόφηση, η Αυθόρμητη Εκπομπή και η Εξαναγκασμένη Εκπομπή. 4
- 1.4 [Άνω] Η αρχή των αξόνων O , το θετικό φορτίο Θ , το οποίο μπορεί να αντιπροσωπεύει ο πυρήνας Π ενός ατόμου, το αρνητικό φορτίο A , το οποίο μπορεί να αντιπροσωπεύει ένα ηλεκτρόνιο H κινούμενο γύρω από τον πυρήνα. Ορίζουμε $\vec{d} := \vec{A}\Theta$. Συνήθως, όταν μελετάμε ένα άτομο, θεωρούμε το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα $\vec{r} = \vec{O}H = -\vec{d}$. Η ηλεκτρική διπολική ροπή ορίζεται ως $\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d}$, πράγμα που μπορούμε επομένως να γράψουμε $\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r}$, αν αναφερόμαστε π.χ. στο άτομο του υδρογόνου. Για αυτήν την τελευταία περίπτωση σημειώνονται ακόμα τα διανύσματα $\vec{O}\Pi := \vec{R}$ και $\vec{O}H := \vec{r}_H$. [Κάτω] Πολύ σχηματικά: Στις παρούσες συνθήκες, το μήκος κύματος είναι πολύ μεγαλύτερο από τη χωρική έκταση του συστήματος, κάτι σαν $\lambda \gg \alpha$, οπότε το ηλεκτρικό πεδίο είναι πρακτικά ομογενές. Επί παραδείγματι, για οπτικά μήκη κύματος, $\lambda \sim 500 \text{ nm}$, και για το άτομο του υδρογόνου, $\alpha \sim a_0$ (ακτίνα Bohr), οπότε $\lambda/a_0 \sim 10^4$. Το τρίγωνο $O\Theta A$ ($O\Pi H$), το οποίο απεικονίζεται στην επάνω εικόνα, απεικονίζεται στην κάτω εικόνα μικρότερο από το μήκος κύματος, αλλά στην πραγματικότητα είναι πολύ ($\sim 10^4$ φορές) μικρότερο. 6
- 1.5 Ηλεκτρικό και μαγνητικό δίπολο. 6

- 1.6 Παρουσιάζονται ταλαντώσεις της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες ενός δισταθμικού συστήματος ($\Delta\Sigma$) σε συντονισμό ($\Delta = 0$, συνεχείς γραμμές) και εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$, διακεκομμένες γραμμές). Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = 2\pi/\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}$, ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης είναι $\mathcal{A} = \Omega_R^2/(\Omega_R^2 + \Delta^2)$. Απλώς, για να κάνουμε τη γραφική παράσταση, θέσαμε κάποιες τιμές στα Ω_R και Δ . $\Delta = \omega - \Omega$ είναι ο λεγόμενος αποσυντονισμός (detuning) και Ω_R η συχνότητα Rabi, η οποία δείχνει κατά πόσο εμπλέκονται οι στάθμες από το ηλεκτρικό πεδίο. 7
- 1.7 Μια σύγκριση της Προσεγγίσεως Περιστρεφόμενου Κύματος (ΠΠΚ) [Rotating Wave Approximation (RWA)] με την πλήρη αριθμητική λύση [noRWA], για κάποιες αυθαίρετες τιμές των Ω_R , Ω , ω , Δ . Παρουσιάζονται οι πιθανότητες παρουσίας του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες συναρτήσει του χρόνου, για αρχική τοποθέτηση στη στάθμη 1. Οι καμπύλες της ΠΠΚ είναι ομαλότερες, διότι λείπουν οι υψίσυχνι όροι $\pm(\Omega + \omega)$ και έχουν κρατηθεί μόνο οι χαμηλόσυχνι όροι $\pm(\Omega - \omega)$. Επίσης, διακρίνεται ασθενές dephasing, δηλαδή, οι καμπύλες της ΠΠΚ σιγά σιγά καθυστερούν έναντι των καμπυλών των πλήρων αριθμητικών λύσεων. 8
- 1.8 Δύο παραδείγματα ταλαντώσεων Rabi κατά την απορρόφηση φωτονίου, δηλαδή, η αρχική συνθήκη είναι 4 φωτόνια στην κοιλότητα και 1 ηλεκτρόνιο στην κάτω στάθμη. Χρησιμοποιούμε κάποιες αυθαίρετες τιμές των παραμέτρων για να κάνουμε μια ενδεικτική ζωγραφιά. Δεξιά οι δύο στάθμες εμπλέκονται περισσότερο (η παράμετρος g είναι μεγαλύτερη). Παρουσιάζουμε σε συντονισμό ($\Delta = 0$) κι εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$), τη χρονική εξέλιξη της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα, $\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle = n - \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t)$, αλλά και της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των ηλεκτρονίων στην άνω στάθμη, $\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle = \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t)$, αλλά και στην κάτω στάθμη, $\langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle$. $\Omega_n = \sqrt{(A/2)^2 + ng^2}$ 10
- 1.9 Αλλάζουμε μία παράμετρο μόνο (εκ των r_N , τ_1 , τ_0 , A/A) και παρακολουθούμε τη χρονική εξέλιξη των αδιαστατοποιημένων πληθυσμών των δύο σταθμών (v_1 , v_2), καθώς και της αδιαστατοποιημένης πυκνότητας ενέργειας HM κυμάτων εντός της κοιλότητας (ρ), συναρτήσει του αδιαστατοποιημένου χρόνου (τ). 13
- 1.10 Πρόσπτωση HM κύματος σε διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ δύο μέσων 1 και 2. Επίπεδο προσπτώσεως q είναι το επίπεδο που σχηματίζουν το προσπίπτον κυματόνισμα \vec{k}_i και το κάθετο στη διεπιφάνεια, στο σημείο προσπτώσεως, μοναδιαίο άνυσμα \hat{n} , δηλαδή εδώ το επίπεδο xy . Φαίνονται οι γωνίες προσπτώσεως, ανακλάσεως, διαθλάσεως ή διελεύσεως θ_i , θ_r , θ_t , αντιστοίχως, καθώς και οι s (κάθεται στο q) και p (ανήκουσες στο q) συνιστώσες του προσπίπτοντος, ανακλωμένου, διαθλωμένου ή διερχομένου ηλεκτρικού πεδίου \vec{E}_{si} , \vec{E}_{pi} , \vec{E}_{sr} , \vec{E}_{pr} , \vec{E}_{st} , \vec{E}_{pt} , αντιστοίχως. 14
- 2.1 Σε κάποιο σώμα προσπίπτουν ηλεκτρομαγνητικά κύματα. Σχηματική παρουσίαση των συντελεστών απορροφήσεως (α), διελεύσεως (τ), ανακλάσεως (ρ). Ισχύει $\alpha + \tau + \rho = 1$ 18
- 2.2 Ακτινοβολία μέλανος σώματος σύμφωνα με τον νόμο του Planck (δείτε §2.2 και §2.13). Εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία και όχι από το σχήμα, τη σύσταση του σώματος, τη γωνία εκπομπής. 19
- 2.3 Κοιλότητα με οπή: Προσεγγιστική πραγμάτωση μέλανος σώματος, ανοίγοντας μια ελάχιστη οπή στο τοίχωμα ενός αδιαφανούς περιβλήματος. 20
- 2.4 Το υλικό Vantablack κατασκευασμένο από νανοσωλήνες άνθρακα (Surrey NanoSystems), το οποίο, κατά τους κατασκευαστές, απορροφά 99.96% του προσπίπτοντος σε αυτό φωτός. Εδώ, επάνω σε φύλλο αργιλίου. 20

- 2.5 Σύγκριση των νόμων Rayleigh-Jeans (Εξ. 2.10), Wien (Εξ. 2.11), Planck (Εξ. 2.12). Έχουμε θέσει $\rho_0 = 1$ (Εξ. 2.13), χάριν απλότητας, για να κάνουμε τη ζωγραφιά. Διακρίνεται η απόκλιση της κλασικής θεωρίας Rayleigh-Jeans από τον νόμο του Planck (ο οποίος συμφωνεί με το πείραμα) πολύ σύντομα αυξάνοντας το $x = \frac{h\nu}{k_B T}$ και η απόκλιση του ταιριάσματος Wien από τον νόμο του Planck σε αρκετά χαμηλά x . Το x περιλαμβάνει τη συχνότητα, ν , αλλά και τη θερμοκρασία, T 24
- 2.6 [Αριστερά] Ο νόμος των Stefan-Boltzmann στην 1η διατύπωση αφορά την πυκνότητα ενέργειας ρ (μονάδες J/m^3) εντός μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία θερμοκρασίας T και διατυπώνεται ως $\rho(T) = aT^4$. $a = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^3} \approx 7.5657 \times 10^{-16} \frac{J}{m^3 K^4}$. [Δεξιά] Ο νόμος των Stefan-Boltzmann στη 2η διατύπωση αφορά την ενέργεια, η οποία εκπέμπεται ανά μονάδα επιφάνειας ανά μονάδα χρόνου, δηλαδή την εκπεμπόμενη ισχύ ανά μονάδα επιφάνειας ή αλλιώς την ένταση της ακτινοβολίας I (μονάδες $\frac{J}{m^2 s} = \frac{W}{m^2}$) και διατυπώνεται ως $I = \sigma T^4$. $\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} \approx 5.67 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$ 24
- 2.7 Συνοριακές συνθήκες για την 1η Εξίσωση Maxwell. Η κατεύθυνση των διανυσμάτων \vec{E}_1 και \vec{E}_2 έχει σχεδιαστεί επίτηδες αυθαιρέτως. Ομοίως, για τη 2η Εξίσωση Maxwell, όπου το \vec{E} πρέπει να αντικατασταθεί με \vec{B} 27
- 2.8 Συνοριακές συνθήκες για την 3η Εξίσωση Maxwell. Η κατεύθυνση των διανυσμάτων \vec{E}_1 και \vec{E}_2 έχει σχεδιαστεί αυθαιρέτως. Εδώ ο βρόχος βρίσκεται στο επίπεδο (\hat{e}, \hat{g}) 28
- 2.9 Συνοριακές συνθήκες για την 4η Εξίσωση Maxwell. Η κατεύθυνση των διανυσμάτων \vec{B}_1 και \vec{B}_2 έχει σχεδιαστεί αυθαιρέτως. 29
- 2.10 Στην επιφάνεια ενός ιδανικού αγωγού, η κάθετη συνιστώσα του \vec{B} και η εφαπτομενική συνιστώσα του \vec{E} μηδενίζονται, οπότε τα πεδία μπορούν να έχουν μόνο κάποιους από τους προσανατολισμούς, οι οποίοι παρουσιάζονται στην παρούσα εικόνα. 33
- 2.11 Ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα με τελείως (ιδανικώς) αγωγίμα τοιχώματα. Εντός της κοιλότητας υπάρχει κενό ή κατά προσέγγιση αέρας. Για λόγους καθαρότητας του σχήματος, έχει χρωματιστεί μόνο η κάτω έδρα όπου $x = 0$ και η άνω έδρα όπου $x = a_x$, αλλά και οι έξι έδρες αποτελούνται από τελείως (ιδανικώς) αγωγίμα τοιχώματα. 33
- 2.12 Οι δυνατές τιμές του k είναι διακριτές και ο στοιχειώδης k -όγκος είναι $\frac{8\pi^3}{V}$, όπου V ο όγκος της κοιλότητας (Εξ. 2.80). Σε κάθε μία από τις 8 κορυφές του στοιχειώδους αυτού όγκου υπάρχει μία k -κατάσταση, η οποία όμως του ανήκει κατά το $1/8$, επειδή υπάρχουν 8 όμοιοι τέτοιοι στοιχειώδεις όγκοι. 37
- 2.13 Υπάρχουν 2 πιθανές πολώσεις του ηλεκτρικού πεδίου κάθετα στο \vec{k} 38
- 2.14 Η γραφική λύση της εξίσωσης $3(e^x - 1) - xe^x = 0$. Η μία ρίζα είναι $x_0 = 0$, η οποία όμως δεν ανήκει στο πεδίο ορισμού της $\rho(x)$. Η άλλη ρίζα είναι $x_0 \approx 2.821439$ 43
- 2.15 Η γραφική λύση της εξίσωσης $5(e^\psi - 1) - \psi e^\psi = 0$. Η μία ρίζα είναι $\psi_0 = 0$, η οποία όμως δεν ανήκει στο πεδίο ορισμού της $\rho(\psi)$. Η άλλη ρίζα είναι $\psi_0 \approx 4.965114$ 44
- 2.16 Ο νόμος του Planck στη μορφή $\rho(\lambda, T)$ για $T = 1595$ K, αλλά και το λ_0 του νόμου μετατοπίσεως του Wien. Η θερμοκρασία εκλέχτηκε ως αναφορά στο ιστορικό άρθρο του W. W. Coblentz [18]. 44
- 2.17 [Άνω Εικόνα] Ο νόμος του Planck $\rho(\lambda, T)$ για κάποιες θερμοκρασίες μέλανος σώματος. Παρατηρούμε τη μετατόπιση του φάσματος προς μικρότερα μήκη κύματος, καθώς αυξάνεται η απόλυτη θερμοκρασία του μέλανος σώματος, T , πράγμα που εκφράζει ο νόμος μετατοπίσεως του Wien. Σημειώνονται και τα λ_0 όπου έχουμε κάθε φορά μέγιστο της $\rho(\lambda, T)$. Παρατηρούμε πως γενικώς όλη η κατανομή $\rho(\lambda, T)$ αυξάνεται, καθώς αυξάνουμε τη θερμοκρασία T . [Κάτω Εικόνα] Το ΗΜ ορατό φάσμα. 45

2.18	Ο νόμος του Planck, $\rho(\nu, T)$, για κάποιες χαρακτηριστικές θερμοκρασίες μέλανος σώματος. Παρατηρούμε τη μετατόπιση του φάσματος προς μεγαλύτερες συχνότητες, καθώς αυξάνεται η απόλυτη θερμοκρασία του μέλανος σώματος, T , πράγμα που εκφράζει ο νόμος μετατοπίσεως του Wien. Επίσης, παρατηρούμε πως γενικώς όλη η κατανομή $\rho(\nu, T)$ αυξάνεται, καθώς αυξάνουμε τη θερμοκρασία T	45
2.19	Σχηματικά, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο.	46
2.20	(α') Η διάταξη, η οποία χρειάζεται για τη μελέτη των ενεργειών των ηλεκτρονίων, τα οποία εκπέμπονται κατά το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (ΦΗΦ). (β') Η μορφή της χαρακτηριστικής καμπύλης ρεύματος τάσεως $I(V)$ για δύο διαφορετικές εντάσεις προσπίπτουσας ΗΜ ακτινοβολίας. Στην περίπτωση ii, η ένταση της ΗΜ ακτινοβολίας είναι μεγαλύτερη από την περίπτωση i. Παρατηρούμε ότι υπάρχει κάποια τιμή της τάσεως, $-V_0$, για την οποία το ρεύμα, I , μηδενίζεται και στις δύο περιπτώσεις, δηλαδή η V_0 είναι ανεξάρτητη της εντάσεως της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. (γ') Η σχέση $V_0(\nu)$. (δ') Η διάταξη, η οποία χρησιμοποιείται για την επίδειξη της συχνοτικής εξαρτήσεως στο ΦΗΦ.	47
3.1	Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Απορρόφηση (Stimulated Absorption) ενός φωτονίου με ενέργεια E_ϕ και ορμή p_ϕ , συνοδευόμενη από μετάβαση ηλεκτρονίου μεταξύ δύο ενεργειακών σταθμών E_1 και E_2 ενός ατόμου.	53
3.2	Αυθόρμητη Εκπομπή (Spontaneous Emission) ενός φωτονίου με ενέργεια E_ϕ και ορμή p_ϕ , συνοδευόμενη από μετάβαση ηλεκτρονίου μεταξύ δύο ενεργειακών σταθμών E_2 και E_1 ενός ατόμου.	54
3.3	Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή (Stimulated Emission) ενός φωτονίου με ενέργεια E_ϕ και ορμή p_ϕ , συνοδευόμενη από μετάβαση ηλεκτρονίου μεταξύ δύο ενεργειακών σταθμών E_2 και E_1 ενός ατόμου. Ένα αρχικό διεγείρον φωτόνιο προκαλεί τη δημιουργία ενός ακόμα φωτονίου ιδίων χαρακτηριστικών (ενέργεια, ορμή, φάση, πόλωση).	55
3.4	Η γωνία Brewster.	56
3.5	Η γραφική παράσταση της $f(x) = e^x - 1$, εδώ $x = h\nu/k_B T$	60
3.6	Το διάγραμμα Hertzprung-Russell, η κατανομή της φωτεινότητας έναντι της επιφανειακής θερμοκρασίας των αστέρων [7].	61
3.7	Απεικόνιση των κατανομών Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac και Bose-Einstein.	63
4.1	Απλοϊκή αναπαράσταση της ενεργειακής δομής. [Αριστερά] Διακριτό Φάσμα. [Δεξιά] Συνεχές φάσμα.	68
4.2	[Αριστερά] Κρύσταλλος χλωριούχου καλίου (KCl). Η δομή μπορεί να περιγραφεί με ένα εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα [fcc, face-centered cubic] με διατομική βάση (ζεύγος κατιόντος - ανιόντος). Επί παραδείγματι, σε κάθε πλεγματοειδές σημείο τοποθετείται (i) ένα κατιόν ακριβώς στο πλεγματοειδές σημείο και (ii) ένα ανιόν σε σημείο απέχον απόσταση $(a/2)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$, όπου a είναι η πλεγματοειδής σταθερά. Για παράδειγμα, στο πλεγματοειδές σημείο στην αρχή των αξόνων $[(0, 0, 0)]$ έχουμε ένα κατιόν και το αντίστοιχο ανιόν βρίσκεται στο κέντρο της συμβατικής κυβικής κυψελίδας. Οπότε, κάθε τυχόν κενό ανιόντος χλωρίου έχει 6 κατιόντα καλίου ως πρώτους γείτονες. [Δεξιά] Επίπεδη αναπαράσταση. Χρωματικό κέντρο με παγιδευμένο ηλεκτρόνιο σε ένα κενό Cl^- . Το ηλεκτρόνιο έχει φύγει από ένα ανιόν Cl^- , π.χ. λόγω ακτινοβολήσεως. Η κατανομή της κυματοσυναρτήσεως του ηλεκτρονίου καθορίζεται από τη μορφή του δημιουργηθέντος στην άδεια θέση τριδιαστάτου κβαντικού φρέατος.	70
4.3	Ιδιοσυναρτήσεις, ιδιοενέργειες και ενεργειακή διασπορά ($k_n = n\pi/L, n = 1, 2, 3, \dots$) του σωματιδίου στο απλοϊκό πρότυπο απειροβάθου φρέατος. Στην εικόνα της ενεργειακής διασποράς, η γκριζα συνεχής γραμμή αντιπροσωπεύει ένα σωματίδιο που κινείται ελεύθερα μέσα στον κρύσταλλο. Στο δεσμευμένο σωματίδιο, όμως, επιτρέπονται μόνο συγκεκριμένες ενέργειες (διακριτές ενεργειακές καταστάσεις).	71

- 4.4 [Αριστερά] Φάσματα απορροφήσεως χρωματικών κέντρων, ληφθέντα στον αέρα, σε 298 K, στο υπεριώδες - ορατό, από κρυστάλλους NaCl, KCl, KBr, ακτινοβοληθέντες με πηνίο Tesla [1]. Το χρώμα εξαρτάται από το μέγεθος του χώρου τον οποίο αφήνει η ατέλεια, άρα από την πλεγματική παράμετρο ή πλεγματική σταθερά, a . Η κορυφή του φάσματος απορροφήσεως είναι έτσι μετατοπισμένη επειδή $a_{\text{NaCl}} < a_{\text{KCl}} < a_{\text{KBr}}$. [Δεξιά] Εξάρτηση της κορυφής του φάσματος απορροφήσεως από την a σε κρυστάλλους αλογονούχων αλκαλίων [1]. Αύξηση της a δημιουργεί μεγαλύτερα κενά, όταν λείπει κάποιο ιόν, επομένως ευρύτερο φρέαρ δυναμικής ενέργειας και άρα μικραίνει η ενεργειακή απόσταση θεμελιώδους - 1ης διεγερμένης στάθμης και επομένως μικραίνει η ενέργεια (αυξάνεται το μήκος κύματος) του φωτονίου του αντιστοιχούντος στη μετάβαση. 72
- 4.5 [Αριστερά] Σε ένα μεγάλο σύστημα, όπως π.χ. σε έναν κρύσταλλο, το περιβάλλον κάθε απορροφητή ή εκπομπού σπανιώς είναι ταυτόσημο, με άλλα λόγια, τα κβαντικά φρέατα δεν είναι ολόιδια. [Δεξιά] Δονητικά και χωρικά επίπεδα. Τα φάσματα, αντικατοπτρίζοντας την κατάσταση αυτή, θα είναι ευρέα. 74
- 4.6 [Άνω] Εξήγηση της μετατοπίσεως Stokes μεταξύ απορροφήσεως και εκπομπής. [Κάτω] Μετατοπίσεις Stokes χρωματικών κέντρων KCl, KBr, KI, εικόνα προσαρμοσμένη από την αναφορά [4]. Σε συμφωνία με την αναφορά [5], στο KCl η μετατόπιση Stokes είναι ≈ 1.1 eV. 74
- 4.7 Σχηματική απεικόνιση ενός πεπερασμένου τετραγωνικού κβαντικού φρέατος δυναμικής ενέργειας. 75
- 4.8 Οι τέσσερις πρώτες ιδιοσυναρτήσεις, $\psi_n(x)$, ενός απειρόβαθου τετραγωνικού φρέατος. Ο αριθμός των κόμβων είναι $n - 1$ 78
- 4.9 Ένα τετραγωνικό, μη απειρόβαθο κβαντικό φρέαρ, επί παραδείγματι σε μία ετεροδομή AlAs/GaAs/AlAs. Φαίνεται το εύρος του φρέατος (well width) L , το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας (bottom of conduction band) E_C , το μέγιστο της ζώνης σθένους (top of valence band) E_V , η ασυνέχεια μεταξύ των ζωνών αγωγιμότητας των δύο υλικών (conduction band offset) ΔE_C και η ασυνέχεια μεταξύ των ζωνών σθένους των δύο υλικών (valence band offset) ΔE_V . Τα φρέατα έχουν ζωγραφιστεί, πολύ σχηματικά, ως τετραγωνικά, αλλά το σχήμα τους εξαρτάται από πολλούς παράγοντες, παράγοντες αρκετά πέρα από τον σκοπό του συγγράμματος. 79
- 4.10 Κβαντικός περιορισμός σε 0Δ, 1Δ, 2Δ και 3Δ (άνω) και οι αντίστοιχες πυκνότητες καταστάσεων (κάτω). 80
- 4.11 Σχηματική απεικόνιση ενός πεπερασμένου τετραγωνικού κβαντικού φρέατος δυναμικής ενέργειας. 80
- 4.12 Γραφική επίλυση των εξισώσεων $\tan(\xi) = f(\xi)$ (δείτε την Εξ. 4.129, διακεκομμένες γραμμές) και $\tan(\xi) = g(\xi)$ (δείτε την Εξ. 4.130, στικτές γραμμές), για διάφορες τιμές της παραμέτρου α , η οποία εκφράζει την αποτελεσματικότητα του κβαντικού φρέατος εντός των διαστημάτων που παρατίθενται δεξιά. 88
- 4.13 Από δύο μονοσταθμικά συστήματα (ΜΣ), τα οποία βρίσκονται σε άπειρη απόσταση, το ένα αριστερά (Α) με ιδιοενέργεια ϵ_A και το άλλο δεξιά (Δ) με ιδιοενέργεια ϵ_Δ , στο ενιαίο δισταθμικό σύστημα (ΔΣ), το οποίο έχει ιδιοενέργειες E_1 και E_2 , διαφορετικές από τις ϵ_A και ϵ_Δ 89
- 4.14 Οι κυματοσυναρτήσεις της θεμελιώδους και της πρώτης διεγερμένης στάθμης του ενιαίου κβαντικού φρέατος (δηλαδή του ΔΣ), οι οποίες παράγονται από την κανονικοποιημένη πρόσθεση (όπως δείχνει το ιδιοάνυσμα \vec{v}_1) και από την κανονικοποιημένη αφαίρεση (όπως δείχνει το ιδιοάνυσμα \vec{v}_2) των κυματοσυναρτήσεων των θεμελιωδών σταθμών των δύο πρώην απομονωμένων κβαντικών φρεάτων (των δύο ΜΣ δηλαδή). 94
- 4.15 Κατελιμμένο, ημικατελιμμένο και άδειο δισταθμικό σύστημα. 97
- 4.16 Το πόσο απότομη είναι η καμπυλότητα κοντά στο ακρότατο της ζώνης εκφράζεται από την ενεργό μάζα, m^* . Εδώ φαίνεται η περίπτωση $m^* < m_e$ 109

4.17	Συνορεύουν δύο διαφορετικά υλικά, επί παραδείγματι, GaAs και $Al_xGa_{1-x}As$ ώστε το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας, E_{c0} , βρίσκεται υψηλότερα στο τριμερές από ότι στο διμερές. Σχηματίζεται ένα φρέαρ (well).	110
4.18	Ένα κβαντικό πηγάδι μεταξύ τριών στρωμάτων υλικών με καμπύλωση ζωνών.	110
4.19	Από τις καρτεσιανές στις πολικές συντεταγμένες στο επίπεδο $k_x k_y$	114
4.20	Όταν το $\varepsilon - E_i$ είναι εντός του διαστήματος $(0, \infty)$, δηλαδή, $\varepsilon > E_i$, τότε το ολοκλήρωμα ισούται με 1, αλλιώς ισούται με 0.	114
4.21	Πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων οιονεί διδιαστάτου ηλεκτρονικού αερίου, χαρακτηριστικά κλιμακωτή.	115
4.22	Πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων οιονεί μονοδιαστάτου ηλεκτρονικού αερίου, με τη χαρακτηριστική πριονωτή μορφή και τα ιδιάζοντα σημεία van Hove. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα έχουμε θέσει $E_{i=0} = 0.5$, $E_{i=1} = 1.5$, $E_{j=0} = 2$, $E_{j=1} = 4$, σε αυθαίρετες μονάδες, απλώς για να κάνουμε τη ζωγραφιά.	118
4.23	Πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων τριδιαστάτου ηλεκτρονικού αερίου.	120
5.1	Σχηματικά, ένα δισταθμικό σύστημα ($\Delta\Sigma$) και τα σχετικά μεγέθη: ιδιοενέργειες των δύο σταθμών, E_2 και E_1 , κυκλική συχνότητα του ΗΜ πεδίου, ω , ενεργειακή απόσταση των δύο σταθμών, $\hbar\Omega$, συχνότητα Rabi, η οποία μας λέει κατά πόσο εμπλέκονται οι στάθμες από το ΗΜ πεδίο, Ω_R , και αποσυντονισμός, $\Delta = \omega - \Omega$	126
5.2	Σύγκριση των δυναμικών ενεργειών Yukawa και Coulomb, οι οποίες χάριν απλότητας θεωρούνται εδώ ως $V_{Yukawa}(r) = -\frac{1}{r}e^{-k_0r}$ και $V_{Coulomb}(r) = -\frac{1}{r}$ και τα r, k_0 αδιάστατα (θετικά). Η δυναμική ενέργεια Coulomb επιδρά σε μεγαλύτερες αποστάσεις, ενώ η δυναμική ενέργεια Yukawa αποσβένεται γρηγορότερα, λόγω του παράγοντα e^{-k_0r}	127
5.3	(Άνω) Η αρχή των αξόνων O, το θετικό φορτίο Θ , το οποίο μπορεί να αντιπροσωπεύει ο πυρήνας Π ενός ατόμου, το αρνητικό φορτίο A, το οποίο μπορεί να αντιπροσωπεύει ένα ηλεκτρόνιο Η κινούμενο γύρω από τον πυρήνα. Ορίζουμε $\vec{d} := \vec{A}\Theta$. Συνήθως, όταν μελετάμε ένα άτομο, θεωρούμε το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα $\vec{r} = \vec{A}\Theta$. Η ηλεκτρική διπολική ροπή ορίζεται ως $\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d}$, πράγμα που μπορούμε επομένως να γράψουμε $\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r}$, αν αναφερόμαστε π.χ. στο άτομο του υδρογόνου. Για αυτήν την τελευταία περίπτωση σημειώνονται ακόμα τα διανύσματα $\vec{O}\Pi := \vec{R}$ και $\vec{O}\Theta := \vec{r}_H$. (Κάτω) Πολύ σχηματικά: Στις παρούσες συνθήκες, το μήκος κύματος είναι πολύ μεγαλύτερο από τη χωρική έκταση του συστήματος, κάτι σαν $\lambda \gg \alpha$, οπότε το ηλεκτρικό πεδίο είναι πρακτικά ομογενές. Επί παραδείγματι, για οπτικά μήκη κύματος, $\lambda \sim 500$ nm, και για το άτομο του υδρογόνου $\alpha \sim \alpha_0$ (ακτίνα Bohr), οπότε $\lambda/\alpha_0 \sim 10^4$. Το τρίγωνο OΘA (OΠH), το οποίο απεικονίζεται στην επάνω εικόνα, απεικονίζεται στην κάτω εικόνα μικρότερο, αλλά στην πραγματικότητα είναι πολύ ($\sim 10^4$ φορές) μικρότερο.	131
5.4	Ηλεκτρικό και μαγνητικό δίπολο.	132
5.5	Δισταθμικό σύστημα. Όταν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην κάτω στάθμη E_1 το σύστημα χαρακτηρίζεται αδιέγερτο, ενώ όταν βρίσκεται στην άνω στάθμη E_2 διεγερμένο.	134
5.6	Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό, $\omega = \Omega$ ($\Delta = 0$). Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$, ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως, $\mathcal{A} = 1$. Τυπικά, χωρίς να έχουμε στο μυαλό μας κάποιο συγκεκριμένο σύστημα, θέσαμε $\Omega_R = 1$ s ⁻¹	141
5.7	Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό, $\omega = \Omega$ ($\Delta = 0$), για αρχικές συνθήκες $C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$, $C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi}$ και διάφορες τιμές της διαφοράς φάσεως $\theta - \phi$. Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$, ενώ το πλάτος τους εξαρτάται από τη διαφορά φάσεως $\theta - \phi$. Τυπικά, χωρίς να έχουμε στο μυαλό μας κάποιο συγκεκριμένο σύστημα, θέσαμε $\Omega_R = 1$ s ⁻¹	142

- 5.8 Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό ($\Delta = 0$, συνεχείς γραμμές) και εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$, διακεκομμένες γραμμές). Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = \frac{2\pi}{2\lambda} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}$, ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως είναι $\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$. Τυπικά, χωρίς να αναφερόμαστε σε συγκεκριμένο σύστημα, θέσαμε $\Omega_R = 1 \text{ s}^{-1}$ και $\Delta = 0.5 \text{ s}^{-1}$. Παρατηρούμε τις αλλαγές στην περίοδο και στο μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως, όταν το δισταθμικό σύστημα βρίσκεται εκτός συντονισμού. Στο Παράρτημα Γ υπάρχει το πρόγραμμα matlab Oscillations.m, το οποίο δημιουργεί την παρούσα εικόνα. 148
- 5.9 Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό ($\Delta = 0$, συνεχείς γραμμές) και εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$, διακεκομμένες γραμμές). Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = \frac{2\pi}{2\lambda} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}$, ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως $\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$. Εντελώς τυπικά θέσαμε στην εικόνα $\Omega_R = 0.1 \text{ s}^{-1}$ και $\Delta = 0.5 \text{ s}^{-1}$, δηλαδή σχετικά μικρό Ω_R . Στο Παράρτημα Γ υπάρχει το πρόγραμμα matlab Oscillations.m που δημιουργεί την παρούσα εικόνα. 149
- 5.10 Ταλαντώσεις τρισταθμικού συστήματος σε συντονισμό, δηλαδή με $\omega = \Omega \Leftrightarrow \Delta = 0$, για $\Omega_R > \Omega'_R$ (άνω), $\Omega_R < \Omega'_R$ (μέση) και $\Omega_R = \Omega'_R$ (κάτω). Τυπικά, χωρίς να έχουμε στο μυαλό μας κάποιο συγκεκριμένο σύστημα, θέσαμε στην άνω εικόνα $\Omega_R = 1 \text{ s}^{-1}$ και $\Omega'_R = 0.5 \text{ s}^{-1}$, στη μεσαία εικόνα $\Omega_R = 0.5 \text{ s}^{-1}$ και $\Omega'_R = 1 \text{ s}^{-1}$ και στην κάτω εικόνα $\Omega_R = \Omega'_R = 1 \text{ s}^{-1}$ 168
- 6.1 $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$ για $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = -0.5$ (αριστερή στήλη) και $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = 0.5$ (δεξιά στήλη), μεταβάλλοντας το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma}$. (a), (b) $\epsilon_2 = 0.4$. (c), (d) $\epsilon_2 = 0.1$. (e), (f) $\epsilon_2 = 0.04$. (g), (h) $\epsilon_2 = 0.01$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη --), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ...) και τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-). 205
- 6.2 $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, για $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$, μεταβάλλοντας το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$. (a) $\epsilon_1 = -0.9$. (b) $\epsilon_1 = 0.9$. (c) $\epsilon_1 = -0.6$. (d) $\epsilon_1 = 0.6$. (e) $\epsilon_1 = -0.2$. (f) $\epsilon_1 = 0.2$. (g) $\epsilon_1 = -0.1$. (h) $\epsilon_1 = 0.1$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη --), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ...) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-). 206
- 6.3 $\Delta = 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, μεταβάλλοντας το $\epsilon = \frac{\Omega_R}{\omega}$. (a) $\epsilon = 0.9$. (b) $\epsilon = 0.5$. (c) $\epsilon = 0.1$. (d) $\epsilon = 0.05$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη --), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ...) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-). 206
- 6.4 $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$ για $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = -0.5$ (αριστερή στήλη) και $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = 0.5$ (δεξιά στήλη), μεταβάλλοντας το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma}$ με $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (a), (b) $\epsilon_2 = 0.4$. (c), (d) $\epsilon_2 = 0.1$. (e), (f) $\epsilon_2 = 0.04$. (g), (h) $\epsilon_2 = 0.01$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη --), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ...) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-). 207
- 6.5 $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, για $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$, μεταβάλλοντας το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$ με $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (a) $\epsilon_1 = -0.9$. (b) $\epsilon_1 = 0.9$. (c) $\epsilon_1 = -0.6$. (d) $\epsilon_1 = 0.6$. (e) $\epsilon_1 = -0.2$. (f) $\epsilon_1 = 0.2$. (g) $\epsilon_1 = -0.1$. (h) $\epsilon_1 = 0.1$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη --), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ...) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-). 208

6.6	$\Delta \neq 0. P_1$ vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$ για $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = 0.5$ και $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$, μεταβάλλοντας το $\theta - \phi$. (a) $\theta - \phi = 0$. (b) $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (c) $\theta - \phi = \frac{2\pi}{3}$. (d) $\theta - \phi = \pi$. (e) $\theta - \phi = \frac{4\pi}{3}$. (f) $\theta - \phi = \frac{5\pi}{3}$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη ---), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ...) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία ·-).	209
6.7	$\Delta = 0. P_1$ vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, μεταβάλλοντας το $\epsilon = \frac{\Omega_R}{\omega}$ με $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (a) $\epsilon = 0.9$. (b) $\epsilon = 0.5$. (c) $\epsilon = 0.1$. (d) $\epsilon = 0.05$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη ---), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ...) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία ·-).	209
6.8	$\Delta = 0. P_1$ vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, $\epsilon = \frac{\Omega_R}{\omega} = 0.1$, μεταβάλλοντας το $\theta - \phi$. (a) $\theta - \phi = 0$. (b) $\theta - \phi = \frac{\pi}{6}$. (c) $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (d) $\theta - \phi = \frac{\pi}{2}$. (e) $\theta - \phi = \frac{2\pi}{3}$. (f) $\theta - \phi = \frac{5\pi}{6}$. (g) $\theta - \phi = \pi$. (h) $\theta - \phi = \frac{7\pi}{6}$. (i) $\theta - \phi = \frac{4\pi}{3}$. (j) $\theta - \phi = \frac{3\pi}{2}$. (k) $\theta - \phi = \frac{5\pi}{3}$. (l) $\theta - \phi = \frac{11\pi}{6}$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη ---), μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ...) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία ·-).	210
6.9	$\Delta \neq 0. P_1$ vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, κρατώντας σταθερό το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$ και μεταβάλλοντας το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$. (a) $\epsilon_1 = 0.5$. (b) $\epsilon_1 = 1$. (c) $\epsilon = 5$. (d) $\epsilon_1 = 10$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη ---), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως στον αποσυντονισμό (διακεκομμένη -), τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως στον αποσυντονισμό (διακεκομμένη - τελεία ·-), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως στον συντονισμό (διακεκομμένη --) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως στον συντονισμό (διακεκομμένη - τελεία ·-).	211
7.1	Το πρότυπο του Bohr (1913) [6] αποτελεί εξέλιξη του προτύπου του Rutherford (1911) [5] και κατατάσσεται στην παλαιά κβαντική θεωρία. Το ηλεκτρόνιο περιστρέφεται σε ορισμένες μόνο επιτρεπόμενες κυκλικές τροχιές, οι οποίες χαρακτηρίζονται από έναν κβαντικό αριθμό $n = 1, 2, 3, \dots$. Όταν μεταβαίνει από μια αρχική τροχιά σε μια άλλη τελική, εκπέμπει ή απορροφά ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία $h\nu$	216
7.2	Φασματικές γραμμές εκπομπής για το άτομο του υδρογόνου.	218
7.3	Φαινόμενο Zeeman: διαχωρισμός των ενεργειακών καταστάσεων ενός υποφλοιού λόγω της επιδράσεως εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.	219
7.4	Σύγκριση ενεργειών και θέσεων, στη θεμελιώδη κατάσταση, μεταξύ του προτύπου Bohr και του προτύπου των Ατομικών Τροχιακών.	222
7.5	Οι κώνοι αναπαριστούν τους δυνατούς προσανατολισμούς της τροχιακής στροφορμής, π.χ. για $\ell = 2$ ($m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$). Για μαγνητικό πεδίο κατά τη διεύθυνση z , η τροχιακή στροφορμή δεν μπορεί να προσανατολιστεί ακριβώς παράλληλα ή αντιπαράλληλα με το πεδίο. Οι συνιστώσες x και y της τροχιακής στροφορμής είναι μη καθορισμένες.	223
7.6	Οι κώνοι αναπαριστούν τους δυνατούς προσανατολισμούς του ηλεκτρονιακού σπιν. Για μαγνητικό πεδίο κατά τη διεύθυνση z , το σπιν δεν μπορεί να προσανατολιστεί ακριβώς παράλληλα ή αντιπαράλληλα με το πεδίο. Οι συνιστώσες x και y του σπιν είναι μη καθορισμένες.	224
7.7	Σχηματική προσεγγιστική απεικόνιση των σχετικών ενεργειών των διαφόρων φλοιών και υποφλοιών.	226
7.8	Η θεμελιώδης ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του ατόμου του Νατρίου.	227
7.9	Οι σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ) : η απόσταση από το κέντρο r , η πολική γωνία θ , η αζιμουθιακή γωνία φ . Σημειώνονται και τα μοναδιαία ανύσματα $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$	228

- 7.10 Τα πέντε πρώτα ατομικά τροχιακά $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ [11]. Τα χρώματα (πορτοκαλί, γαλανό) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η πορτοκαλί περιοχή είναι θετική, η γαλανή είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$. Δεξιά φαίνονται οι κομβικές επιφάνειες στα $2p$ με λεπτομέρεια. 229
- 7.11 Τα πέντε ατομικά τροχιακά $3d$ [11]. Τα χρώματα (πορτοκαλί, γαλανό) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η πορτοκαλί περιοχή είναι θετική, η γαλανή είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$ 229
- 7.12 Όλα τα ατομικά τροχιακά υδρογονοειδών κυματοσυναρτήσεων έως το $7s$. Τα χρώματα αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η κόκκινη περιοχή είναι θετική, η μπλε είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$. Εικόνα από wikipedia [12]. 230
- 7.13 Το ολοκλήρωμα σε όλο τον χώρο μιας άρτιας συναρτήσεως δεν είναι εκ ταυτότητος μηδέν, αλλά μπορεί να μηδενίζεται, όπως π.χ. της εικονιζομένης άρτιας συναρτήσεως. 234
- 8.1 $\vec{E} \times \vec{B} \uparrow \uparrow \vec{k}$ 242
- 8.2 [Αριστερά] Για τρέχοντα ΗΜ κύματα έχουμε $\vec{E} \times \vec{B} \uparrow \uparrow \vec{k}$. [Δεξιά] Υποθέτουμε ότι $\vec{E} \times \vec{B} \uparrow \uparrow \vec{k}$ με τον προσανατολισμό σε άξονες που δείχνει το σχήμα. 244
- 8.3 Στις θέσεις $z = 0$ και $z = L$ τοποθετούνται επίπεδα, ιδανικώς αγωγίμα κάτοπτρα. 245
- 8.4 Αγωγή κάτοπτρα πριν από $z = 0$ και μετά από $z = L$ 246
- 8.5 Σωματάρια (εδώ φωτόνια, απεικονίζονται με πράσινες βούλες) δημιουργούνται και καταστρέφονται μέσω των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής. Υπακούουν στις μποζονικές σχέσεις μεταθέσεως (δείτε Ενότητα 9.3). Αυτή η αναπαράσταση είναι γνωστή και ως δεύτερη κβάντωση (second quantization). Ο αριθμός των φωτονίων είναι ίσος με τον αριθμό των κόμβων της ιδιοσυναρτήσεως. 253
- 8.6 [Αριστερά] Ηλεκτρική διπολική ροπή (electric dipole moment). [Δεξιά] (Ηλεκτρική) διπολική ροπή μεταβάσεως [transition (electric) dipole moment]. 259
- 8.7 Δύο παραδείγματα ταλαντώσεων Rabi κατά την απορρόφηση φωτονίου, δηλαδή, η αρχική συνθήκη είναι 4 φωτόνια στην κοιλότητα και 1 ηλεκτρόνιο στην κάτω στάθμη. Χρησιμοποιούμε κάποιες αυθαίρετες τιμές για τις παραμέτρους. Δεξιά οι δύο στάθμες εμπλέκονται περισσότερο (η παράμετρος g είναι μεγαλύτερη). Παρουσιάζουμε σε συντονισμό ($\Delta = 0$) κι εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$), τη χρονική εξέλιξη της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα, $\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle = n - \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t)$, αλλά και της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των ηλεκτρονίων στην άνω στάθμη, $P_2(t) = \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle = \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t)$, αλλά και στην κάτω στάθμη, $P_1(t)$ 269
- 8.8 Δύο παραδείγματα ταλαντώσεων Rabi κατά την εκπομπή φωτονίου, δηλαδή, η αρχική συνθήκη είναι 4 φωτόνια στην κοιλότητα και 1 ηλεκτρόνιο στην άνω στάθμη. Χρησιμοποιούμε κάποιες αυθαίρετες τιμές για τις παραμέτρους. Δεξιά οι δύο στάθμες εμπλέκονται περισσότερο (η παράμετρος g είναι μεγαλύτερη). Παρουσιάζουμε σε συντονισμό ($\Delta = 0$) κι εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$), τη χρονική εξέλιξη της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα, $\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle_{(E)} = n + \frac{g^2(n+1)}{\Omega_{n+1}^2} \sin^2(\Omega_{n+1} t)$, αλλά και της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των ηλεκτρονίων στην κάτω στάθμη, $P_1(t) = \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle = \frac{g^2(n+1)}{\Omega_{n+1}^2} \sin^2(\Omega_{n+1} t)$, αλλά και στην άνω στάθμη, $P_2(t)$ 272

9.1	[Αριστερά] Εικόνα συμβολής δεσμών ατόμων που βρίσκονται σε BEC. Περισσότερες τέτοιες εικόνες μπορείτε να δείτε στις ιστοσελίδες του Atomic Quantum Gases @ MIT. Η εικόνα αυτή (https://www.rle.mit.edu/cua_pub/ketterle_group/Projects_1997/Interference/Straight_Int.jpg) ανήκει στην ομάδα του MIT και είναι μια ευγενική προσφορά του Καθηγητή Wolfgang Ketterle. [Δεξιά] Χρωματική απεικόνιση της κατανομής ταχυτήτων σε BEC ατόμων ^{87}Rb χαμηλώνοντας τη θερμοκρασία. Από αριστερά προς δεξιά: μόλις πριν την εμφάνιση της BEC, μόλις μετά την εμφάνιση της BEC και σε σχεδόν καθαρή BEC [4]. Εικόνα από [5].	281
11.1	Μια διάταξη LASER.	296
11.2	Το ενεργειακό διάγραμμα του LASER He-Ne. Παρουσιάζονται οι κυριότερες μόνο στάθμες και μεταβάσεις.	297
11.3	Σχηματικά ένα σύστημα με δύο στάθμες LASER και δύο επικουρικές στάθμες, στο οποίο έχουμε άντληση από τη θεμελιώδη στην άνω στάθμη LASER.	298
11.4	Η συνάρτηση φασματικής γραμμής, $F(\nu)$, εκφράζει τη μορφή της γραμμής εκπομπής. FWHM (Full Width at Half Maximum) σημαίνει Πλήρες Εύρος στο Ήμισυ του Μεγίστου. Σημειώνονται η κεντρική συχνότητα ν_0 , το FWHM εύρος της $\Delta\nu_0^{\text{FWHM}}$, δύο διαδοχικές συχνότητες διαμήκων τρόπων ν_m, ν_{m+1} και η μεταξύ τους απόσταση $\Delta\nu_{m,m+1} = \frac{c}{2L}$. Ως παράδειγμα, παρουσιάζονται τυπικές τιμές για την ερυθρή γραμμή ενός LASER He-Ne. Φαίνεται ότι στο συγκεκριμένο παράδειγμα το FWHM εύρος χωρά 4 διαμήκεις τρόπους.	302
11.5	Μία αναπαράσταση των Εξ. 11.47, 11.48, 11.49, 11.51 με τη βοήθεια του προγράμματος matlab N1N2DNrho.m, το οποίο παρατίθεται στο Παράρτημα Γ.	306
11.6	Η γραφική παράσταση των ν_1, ν_2, ρ συναρτήσει του τ που προκύπτει από τα προγράμματα matlab. Στην εικόνα εμφανίζεται ρ , αλλά πρόκειται για το αδιάστατο ρ της Εξ. 11.75.	311
11.7	Η επίδραση της μεταβολής του r_N στη μεταβολή των ν_1, ν_2, ρ συναρτήσει του τ . Κρατάμε σταθερά τα $\tau_0 = 10, \frac{A'}{A} = 10^{-9}$ και $\tau_1 = 0.5$, ενώ μεταβάλλουμε το r_N θέτοντας τις τιμές 0.5, 1.5, 2.0, 2.5. Στην εικόνα εμφανίζεται ρ , αλλά πρόκειται για το αδιάστατο ρ της Εξ. 11.75.	312
11.8	Ορθογώνια παραλληλεπίπεδη και κυλινδρική κοιλότητα.	313
11.9	Διαμήκεις και εγκάρσιοι τρόποι ν_{pqm} σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα.	316
11.10	[Αριστερά] Εγκάρσιοι τρόποι $\text{TEM}_{p'q'}$ σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα [7]. [Δεξιά] Εγκάρσιοι τρόποι $\text{TEM}_{p'q'}$ σε κυλινδρική κοιλότητα [8]. Ο TEM_{00} είναι περισσότερο συγκεντρωμένος κοντά στον άξονα z από τους $\text{TEM}_{p'q'}$ ανώτερης τάξεως: καθώς αυξάνονται οι δείκτες, οι τρόποι καταλαμβάνουν μεγαλύτερη έκταση στο επίπεδο xy	317
11.11	Μια διάταξη laser διόδου με τα δύο ηλεκτρόδια (+) και (-) σε ορθή πόλωση. Οι άνω και κάτω επιφάνειες, που είναι κάθετες στο επίπεδο του σχήματος, έχουν διαστάσεις της τάξεως του mm^2 . Η περιοχή της επαφής, δηλαδή το «μεσαίο» στρώμα, είναι της τάξεως των 100 nm, ενώ οι πλευρικές επιφάνειες είναι της τάξεως των 10-100 μm . Δηλαδή, η διάταξη είναι αρκετά μικρή ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε πολλές καθημερινές μικροσυσκευές.	319
11.12	Η αρχή λειτουργίας της επαφής p - n ως laser. Άνω: οι ημιαγωγοί τύπου p και τύπου n , ξεχωριστά. Μέση: η δομή χωρίς πόλωση, δηλαδή χωρίς εξωτερική διαφορά δυναμικού, σε θερμοδυναμική ισορροπία. Κάτω: η δομή με ορθή πόλωση, με εξωτερική διαφορά δυναμικού V . Όταν έχει πια σχηματιστεί η δομή, υπάρχουν «τρία στρώματα», διότι έχουμε και την περιοχή της επαφής (όπου φαίνονται κεκλιμένες οι ζώνες). Κατά την ορθή πόλωση έχουμε αναστροφή πληθυσμού στην περιοχή της επαφής, πράγμα που υποδηλώνεται με το πορτοκαλί βέλος. Δηλαδή, στην περιοχή αυτή υπάρχουν πολλά ηλεκτρόνια, τα οποία, καθώς μεταπίπτουν μέσω του ενεργειακού χάσματος E_g , εκπέμπουν φωτόνια και επανασυνδέονται με οπές. Τα φωτόνια αυτά, στη συνέχεια, προκαλούν εξαναγκασμένη εκπομπή σε ηλεκτρόνια της περιοχής επαφής.	320

- 11.13 Ο κορμός μιας διατάξεως κβαντικών τελειών, ο οποίος μεταδίδει δεδομένα στα 25 Gbps. Εικόνα τροποποιημένη από δελτίο τύπου της Fujitsu, 2010. 321
- 11.14 Εγκάρσιοι τρόποι $TEM_{p',q'}$ σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα [7]. Ο TEM_{00} είναι περισσότερο συγκεντρωμένος κοντά στον άξονα z από τους $TEM_{p',q'}$ ανώτερης τάξεως: καθώς αυξάνονται οι δείκτες, οι τρόποι καταλαμβάνουν μεγαλύτερη έκταση στο επίπεδο xy . 322
- 12.1 Πρόσπτωση ΗΜ κύματος σε διαχωριστική επιφάνεια δύο μέσων 1 και 2. Επίπεδο προσπτώσεως είναι το επίπεδο που σχηματίζουν το προσπίπτον κυματόνισμα \vec{k}_i και το κάθετο στη διεπιφάνεια, στο σημείο προσπτώσεως, μοναδιαίο άνυσμα \hat{n} , δηλαδή εδώ το επίπεδο xy . Φαίνονται οι γωνίες προσπτώσεως, ανακλάσεως, διαθλάσεως $\theta_i, \theta_r, \theta_t$, αντιστοίχως, καθώς και οι s και p συνιστώσες του προσπίπτοντος, ανακλωμένου, διαθλωμένου ηλεκτρικού πεδίου $\vec{E}_{si}, \vec{E}_{pi}, \vec{E}_{sr}, \vec{E}_{pr}, \vec{E}_{st}, \vec{E}_{pt}$, αντιστοίχως. 327
- 12.2 [Αριστερά] Πόλωση TE ή αλλιώς πόλωση s ($\vec{E} \perp q$). Φαίνονται τα $\vec{E}_i, \vec{E}_r, \vec{E}_t, \vec{B}_i, \vec{B}_{i\perp}, \vec{B}_{i\parallel}, \vec{B}_r, \vec{B}_{r\perp}, \vec{B}_{r\parallel}, \vec{B}_t, \vec{B}_{t\perp}, \vec{B}_{t\parallel}$. [Δεξιά] Πόλωση TM ή αλλιώς πόλωση p ($\vec{E} \in q$). Φαίνονται τα $\vec{B}_i, \vec{B}_r, \vec{B}_t, \vec{E}_i, \vec{E}_{i\perp}, \vec{E}_{i\parallel}, \vec{E}_r, \vec{E}_{r\perp}, \vec{E}_{r\parallel}, \vec{E}_t, \vec{E}_{t\perp}, \vec{E}_{t\parallel}$. Ο δείκτης \perp σημαίνει συνιστώσα κάθετη στη διαχωριστική επιφάνεια και ο δείκτης \parallel συνιστώσα παράλληλη στη διαχωριστική επιφάνεια. Με τις χρωματιστές βούλες δηλώνονται ίσες γωνίες. 328
- 12.3 Αν θέλουμε να μην υπάρχει ανάκλαση TE (να μην υπάρχει ανακλώμενη s πόλωση), το ΗΜ κύμα δεν αλλάζει μέσο διαδόσεως. Δηλαδή πρόκειται για τετριμμένη λύση, σε αυτήν την περίπτωση δεν υπάρχει διεπιφάνεια. Συμπέρασμα: Δεν είναι δυνατόν να μην υπάρχει ανακλώμενη s πόλωση. 331
- 12.4 [Αριστερά] Αν θέλουμε να μην υπάρχει ανάκλαση TM (να μην υπάρχει ανακλώμενη p πόλωση), η μία περίπτωση (επιλογή (1)) είναι το ΗΜ κύμα να μην αλλάζει μέσο διαδόσεως. Δηλαδή πρόκειται για τετριμμένη λύση, σε αυτήν την περίπτωση δεν υπάρχει διεπιφάνεια. Τα $r_{TM} = 0, t_{TM} = 1$, λόγω της Εξ. 12.37, επαληθεύουν την Εξ. 12.34, δηλαδή $r_{TM} - nt_{TM} = -1$. [Δεξιά] Αν θέλουμε να μην υπάρχει ανάκλαση TM (να μην υπάρχει ανακλώμενη p πόλωση), στην άλλη περίπτωση (επιλογή (2)), η ανακλώμενη δέσμη είναι κάθετη στη διαθλώμενη δέσμη. Όμως, η ανακλώμενη δέσμη, η οποία εδώ σημειώνεται με την πορτοκαλί γραμμή, αφορά την πόλωση TE. Ισχύει $n = n_t/n_i = \tan \theta_i$ και η γωνία θ_i , η οποία ικανοποιεί τη σχέση αυτή ονομάζεται γωνία Brewster, θ_B . Δηλαδή, $\tan \theta_B = n_t/n_i = n$. Τα $r_{TM} = 0, t_{TM} = 1/n$ επαληθεύουν την Εξ. 12.34, δηλαδή $r_{TM} - nt_{TM} = -1$. Συμπέρασμα: Είναι δυνατόν να μην υπάρχει ανακλώμενη πόλωση p και αυτό συμβαίνει όταν $\theta_i = \theta_B$ 333
- 12.5 Ολική εσωτερική ανάκλαση: η διαθλώμενη ακτίνα εφάπτεται στη διεπιφάνεια, δηλαδή στην ουσία δεν περνά στο άλλο υλικό, $\theta_t = \frac{\pi}{2}$. Η τιμή της θ_i στην οποία συμβαίνει αυτό ονομάζεται κρίσιμη γωνία, δηλαδή $\theta_i^{cr} = \theta_i$. Τότε ισχύει $\sin \theta_i^{cr} = \frac{n_t}{n_i} = n$ 335
- 12.6 Όταν η γωνία προσπτώσεως ισούται με τη γωνία Brewster ($\theta_i = \theta_B$), τότε από μη πολωμένη προσπίπτουσα δέσμη προκύπτουν πλήρως πολωμένη ανακλώμενη δέσμη και μερικώς πολωμένη διαθλώμενη δέσμη. 336
- 12.7 Το διάνυσμα Poynting της προσπίπτουσας δέσμης, \vec{S}_i , ένα κομμάτι της διεπιφάνειας, A , και η προβολή του, $A_{\perp i}$, κάθετα στο \vec{S}_i . $A_{\perp i} = A \cos \theta_i$ 337
- A.1 Η λύση των Εξ. 11.73, 11.74, 11.75, αν μεταβάλλουμε το $\tau_0 = 10$ ή 5.0 ή 1.0, διατηρώντας $\tau_1 = 0.5, r_N = 1.5, A'/A = 10^{-9}$. Στην εικόνα εμφανίζεται ρ , αλλά πρόκειται για το αδιάστατο ρ της Εξ. 11.75. 364
- A.2 Αλλάζουμε μία παράμετρο μόνο και παρακολουθούμε τη χρονική εξέλιξη των διαφορικών εξισώσεων ρυθμών. 365

B.1	Η $\delta_a(x)$ για $a = 3, 6$	368
B.2	$f(x) = \frac{\sin^2 x}{x^2}$	369
B.3	Περιστρεφόμενα κύματα (Rotating Waves).	370

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

1	Μαθηματικά σύμβολα.	xxix
2	Φυσικές Σταθερές (δεδομένα από NIST:CODATA [1]).	xxx
2.1	Ορισμοί σωμάτων.	19
2.2	Τα $\frac{a\omega}{\pi c}$ που προκύπτουν από την εξίσωση 2.78 για την περίπτωση της κυβικής κοιλότητας, για διάφορες τιμές των φυσικών αριθμών m_x, m_y, m_z . Στη στήλη «πλάτος» σημειώνεται αν προκύπτει μηδενικό ηλεκτρικό πεδίο από τις αντίστοιχες εξισώσεις 2.66, 2.67, 2.68, καθώς και μηδενικό μαγνητικό πεδίο από τις αντίστοιχες εξισώσεις 2.72, 2.73, 2.74.	36
2.3	Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο με πηγή μια λάμπα ατμών υδραργύρου.	48
5.1	Ιδιοσυναρτήσεις των τριών χαμηλότερων ενεργειακά καταστάσεων του μονοδιάστατου απλού αρμονικού ταλαντωτή και η ομοτιμία τους.	156
7.1	Οι φασματικές σειρές του υδρογόνου.	217
7.2	Η δομή των τεσσάρων πρώτων ενεργειακών φλοιών στο πρότυπο ατομικών τροχιακών.	225
7.3	Η ηλεκτρονιακή διαμόρφωση των ευγενών αερίων.	227
7.4	Επιτρεπόμενες (ΕΠΙΤΡ.) και απαγορευμένες (ΑΠΑΓ.) οπτικές μεταβάσεις στο άτομο του Υδρογόνου, μεταξύ των φλοιών 1 και 2, στο πλαίσιο της προσεγγίσεως διπόλου. Το * σημαίνει ότι στο άτομο του υδρογόνου η αρχική και η τελική κατάσταση αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια, είναι δηλαδή εκφυλισμένες, οπότε στην πραγματικότητα δεν υπάρχουν τέτοιες μεταβάσεις. Οι $2p_x$ και $2p_y$ κατασκευάζονται από το άθροισμα ή τη διαφορά των 21 ± 1	233
11.1	Τρόποι κυβικής κοιλότητας. Οι αριθμοί τρόπων $m_x = p, m_y = q, m_z = m$ είναι ανεξάρτητοι μη αρνητικοί ακέραιοι, υποκείμενοι μόνο στον περιορισμό ότι όχι περισσότεροι από έναν μπορούν να μηδενίζονται συγχρόνως, αλλιώς το ΗΜ πεδίο στην κοιλότητα μηδενίζεται.	314
11.2	Τα πρώτα πολυώνυμα Hermite, σχετιζόμενα με την ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα και τα πρώτα πολυώνυμα Laguerre, σχετιζόμενα με την κυλινδρική κοιλότητα.	316
11.3	Είδη LASER και μερικά μέλη κάθε είδους. Στην πρώτη στήλη αναφέρονται τα ενεργά μέσα και στη δεύτερη τα μήκη κύματος σε nm.	318

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον συνεργάτη μου Κωνσταντίνο Λαμπρόπουλο (BSc, MSc, PhD) για την πολύτιμη βοήθειά του. Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον συνεργάτη μου Λάζαρο Χαλκοπιάδη (BSc, φοιτητή MSc) για τη βοήθειά του. Αμφότεροι, του Τμήματος Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών (ΕΚΠΑ).

ΣΥΝΤΜΗΣΕΙΣ - ΛΕΞΙΚΟ - ΓΛΩΣΣΑΡΙΟ

Σύντμηση	Όνομα	Abbreviation	Name
1Δ	μονοδιάστατος	1D	one-dimensional
2Δ	διδιάστατος	2D	two-dimensional
3Δ	τριδιάστατος	3D	three-dimensional
ΜΣ	μονοσταθμικό σύστημα	1LS	single-level system
ΔΣ	δισταθμικό σύστημα	2LS	two-level system
ΤΣ	τρισταθμικό σύστημα	3LS	three-level system
ΠΣ	πολυσταθμικό σύστημα	MLS	multi-level system
ΑΠ	ατόμου - πεδίου	AF	atom - field
ΗΜ	ηλεκτρομαγνητικός	EM	electromagnetic
	Διεθνές Σύστημα Μονάδων	S.I.	Système International
	Πλήρες Εύρος στο	FWHM	Full Width at
	Ήμισυ του Μεγίστου		Half Maximum
	Υψηλότερο Κατειλημμένο	HOMO	Highest Occupied
	Μοριακό Τροχιακό		Molecular Orbital
	υπέρυθρος	IR	infrared
	Ενίσχυση Φωτός μέσω	LASER	Light Amplification by
	Εξαναγκασμένης Εκπομπής		Stimulated Emission
	Ακτινοβολίας		of Radiation
	Δίοδος Εκπέμπουσα Φως	LED	Light-Emitting Diode
	Χαμηλότερο Άδειο	LUMO	Lowest Unoccupied
	Μοριακό Τροχιακό		Molecular Orbital
	ΠΠΚ	Προσέγγιση	RWA
Περιστρεφόμενου Κύματος		Approximation	
ΙΑ	Ισχυρή Δέσμευση	TB	Tight Binding
	Εγκάρσιος Ηλεκτρικός	TE	Transverse Electric
	Εγκάρσιος ΗλεκτροΜαγνητικός	TEM	Transverse ElectroMagnetic
	Εγκάρσιος Μαγνητικός	TM	Transverse Magnetic

υπεριώδης	UV	ultraviolet
απορρόφηση		absorption
συντελεστής απορροφήσεως		absorption coefficient
ενεργό μέσο		active medium
αλογονούχο αλκάλιο		alkaline halide
τελεστής καταστροφής		annihilation operator
αντιμετάθεση	$AB = -BA$	anticommutation
αντιμεταθέτης	$\{A, B\} = AB + BA$	anticommutator
οπή (άνοιγμα)		aperture
τεχνητό άτομο		artificial atom
τεχνητό μόριο		artificial molecule
άτομο		atom
ζώνη		band
ανιχνευτής/αναγνώστης		barcode scanner/reader
γραμμωτού κώδικα		
μέλαν σώμα		black body
μετατόπιση προς μπλε		blueshift
μποζόνιο		boson
διεύρυνση		broadening
ομογενής διεύρυνση		homogeneous broadening
ανομογενής διεύρυνση		inhomogeneous broadening
νανοσωλήνας άνθρακα	CNT	carbon nanotube
κοιλότητα		cavity
χοντροκομμένος		coarse grained
κέντρο χρώματος		color center
μετάθεση	$AB = BA$	commutation
μεταθέτης	$[A, B] = AB - BA$	commutator
αγωγιμότητα		conductance
ειδική αγωγιμότητα		conductivity
ζώνη αγωγιμότητας		conduction band
ασυνέχεια μεταξύ ζωνών		
αγωγιμότητας δύο υλικών	ΔE_C	conduction band offset
αγωγός		conductor
καλός αγωγός		good conductor
ιδανικός αγωγός		ideal conductor
συνεχής		continuous
συνοχή		coherence
συνεκτικός		coherent
τελεστής δημιουργίας		creation operator
κυβική		cubic
κυλινδρική		cylindrical
παράγοντας αποσβέσεως		damping factor
απώλεια συνοχής		decoherence
αποδιέγερση		de-excitation
ατέλεια		defect
πίνακας πυκνότητας		density matrix
πυκνότητα (ιδιο) καταστάσεων		density of states
τελεστής πυκνότητας		density operator
δ	δ	delta function

αποσυντονισμός	detuning
διάταξη, συσκευή	device
διαφορική μορφή	differential form
περίθλαση	diffraction
δίπολο	dipole
προσέγγιση διπόλου	dipole approximation
διακριτός	discrete
κατευθυντικότητα	directionality
βαφή, χρωστική	dye
ενεργός θερμοκρασία	effective temperature
ενεργός μάζα	effective mass
ιδιοάνυσμα	eigenvector
ιδιοτιμή	eigenvalue
ιδιοενέργεια	eigenenergy
ιδιοκατάσταση	eigenstate
ιδιοσυνάρτηση	eigenfunction
ηλεκτρική διπολική ροπή	electric dipole moment
ηλεκτρική εκκένωση	electrical discharge
εκπομπή	emission
συντελεστής εκπομπής	emission coefficient
ή εκπεμπότητα	or emissivity
περίβλημα	enclosure
περιβάλλουσα συνάρτηση	envelope function
διέγερση	excitation
διεγερμένη κατάσταση	excited state
συχνότητα	frequency
φερμιόνιο	fermion
ορθή πόλωση	forward bias
χάσμα	gap
Γ συνάρτηση Γάμμα	Γ Gamma function
γκρίζο σώμα	gray body
θεμελιώδης κατάσταση	ground state
ύψος	height
ετεροδομή	heterostructure
οπή (έλλειψη ηλεκτρονίου)	hole
ομογενής	homogeneous
φιλοξενών κρύσταλλος	host crystal
πρόσμειξη	impurity
πυρακτωμένη πηγή φωτός	incandescent light source
πρόσπτωση, προσπίπτον	incidence, incident
μη συνεκτικός	incoherent
μη συνοχή	incoherence
ανομογενής	inhomogeneous
διεπιφάνεια	interface
συμβολή	interference
ολοκληρωτική μορφή	integral form
τελεστές κλίμακας	ladder operators
πλέγμα	lattice
πλεγματική σταθερά	lattice constant

	πλεγματική παράμετρος		lattice parameter
	μήκος		length
	χρόνος ζωής		lifetime
	διαμήκεις τρόποι		longitudinal modes
	τελεστής καταβιβάσεως		lowering operator
	μαγνητική διπολική ροπή		magnetic dipole moment
	πίνακας		matrix
	ίχνος πίνακα		matrix trace
	μετασταθής στάθμη		meta-stable level
	μικροκύματα		microwaves
	μεικτή κβαντική κατάσταση		mixed quantum state
	τρόπος		mode
	μονοχρωματικότητα		monochromaticity
	νανοσωματίδιο		nanoparticle
	κόμβος, δεσμός		node
	μη ακτινοβόλουσα		non-radiative
	κανονικοί τρόποι		normal modes
	αδιαφανές σώμα		opaque body
	ορθορομβικό		orthorhombic
	συνάρτηση επιμερισμού		partition function
	μορφή, μοτίβο		pattern
	φάση		phase
	φωτόνιο		photon
	φωτοηλεκτρικό φαινόμενο		photoelectric effect
	φωτονική		photonics
	πόλωση		polarization
	αναστροφή πληθυσμού		population inversion
	περιθλασίμετρο σκόνης		powder diffractometer
	τελεστής θέσεως		position operator
	δυναμική ενέργεια		potential energy
ΘAM	θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως	PTV	primitive translation vectors
	άντληση		pumping
	καθαρή κβαντική κατάσταση		pure quantum state
	κβαντικός περιορισμός		quantum confinement
	κβαντικό φρέαρ		quantum well
	κβαντικό σύρμα		quantum wire
	κβαντική τελεία		quantum dot
	κβάντωση		quantization
	παραλληλεπίπεδο		“rectangular”
	ακτίνα		radius
	ακτινοβολία		radiation
	ακτινοβόλουσα		radiative
	τελεστής αναβιβάσεως		raising operator
	μετατόπιση προς ερυθρό		redshift
	ανάκλαση, ανακλώμενο		reflection, reflected
	συντελεστής ανακλάσεως		reflection coefficient
	ανακλαστικότητα		reflectance
	διάθλαση, διαθλώμενο		refraction, refracted
	αφησυχασμός		relaxation

δεξαμενή		reservoir
αντίσταση		resistance
ειδική αντίσταση		resistivity
ανάστροφη πόλωση		reverse bias
περιστροφή		rotation
θωράκιση		screening
δεύτερη κβάντωση		second quantization
σπίνορας		spinor
αυθόρμητη εκπομπή		spontaneous emission
μέγεθος κηλίδας		spot size
καταστατικό διάνυσμα		state vector
εξαναγκασμένη απορρόφηση		stimulated absorption
εξαναγκασμένη εκπομπή		stimulated emission
στάσιμη κατάσταση		steady state
στάσιμα κύματα		standing waves
μετατόπιση Stokes		Stokes shift
υποζώνη		subband
σύγχροτρο		synchrotron
πηνίο Τέσλα		Tesla coil
τετραγωνική		tetragonal
χρόνος πτήσεως		time of flight
(μηχανική) ροπή		torque
ολική εσωτερική ανάκλαση		total internal reflection
ολοκλήρωμα μεταβιβάσεως (ή καλύτερα ...)		transfer integral (or better ...)
ολοκλήρωμα αλληλεπιδράσεως		interaction integral
διέλευση, διερχόμενο		transmission, transmitted
συντελεστής διελύσεως		transmission coefficient
διαπερατότητα ή διελευσιμότητα		transmittance
μετατόπιση		translation
εγκάρσιοι τρόποι (ηλεκτρική) διπολική		transverse modes (electric) transition
ροπή μεταβάσεως		dipole moment
διαφανές σώμα		transparent body
συντονισμός		tuning
ζώνη σθένους		valence band
ασυνέχεια μεταξύ ζωνών	ΔE_V	valence band offset
σθένους δύο υλικών		
δόνηση, ταλάντωση		vibration
κενό		vacancy, void
κυματόνυσμα		wave vector
κυματοσυνάρτηση		wave function
λευκό σώμα		white body
πλάτος		width

ΣΥΜΒΟΛΟΘΗΚΗ

Πίνακας 1: Μαθηματικά σύμβολα.

Σύμβολο	Νόημα	Meaning
$:=$	ορίζεται ως ίσο	defined as equal
$\stackrel{\text{def}}{=}$	ίσο από ορισμό	equal by definition
\equiv	ταντίζεται	equivalent
\mathcal{N}	το σύνολο των φυσικών αριθμών	the set of natural numbers
\mathcal{Z}	το σύνολο των ακεραίων αριθμών	the set of integers
\mathcal{R}	το σύνολο των πραγματικών αριθμών	the set of real numbers
\mathcal{C}	το σύνολο των μιγαδικών αριθμών	the set of complex numbers
\exists	υπάρχει / υπάρχουν	exists, exist
\nexists	δεν υπάρχει / δεν υπάρχουν	does not exist, do not exist
\nearrow	συμβολίζει αύξηση	denotes increase
\searrow	συμβολίζει μείωση	denotes decrease

Πίνακας 2: Φυσικές Σταθερές (δεδομένα από NIST:CODATA [1]).

Σύμβολο	Όνομα	Τιμή
e	στοιχειώδες φορτίο	$1.602176565(35) \times 10^{-19} \text{ C}$
h	σταθερά Planck	$6.62606957(29) \times 10^{-34} \text{ J s}$
\hbar	ανηγμένη σταθερά Planck	$4.135667516(91) \times 10^{-15} \text{ eV s}$
k_B	σταθερά Boltzmann	$1.054571726(47) \times 10^{-34} \text{ J s}$ $1.3806488(13) \times 10^{-23} \text{ J/K}$
c	ταχύτητα φωτός στο κενό	$8.6173324(78) \times 10^{-5} \text{ eV/K}$ $2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$
m_p	μάζα πρωτονίου	$1.672621777(74) \times 10^{-27} \text{ kg}$
m_n	μάζα νετρονίου	$1.674927351(74) \times 10^{-27} \text{ kg}$
m_e	μάζα ηλεκτρονίου	$9.10938291(40) \times 10^{-31} \text{ kg}$
ϵ_0	διηλεκτρική σταθερά κενού	$8.854187817... \times 10^{-12} \text{ F/m}$
μ_0	μαγνητική διαπερατότητα κενού	$4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$

Θα συμβολίζουμε τις μονάδες μετρήσεως ενός φυσικού μεγέθους M με $[M]$.

Βιβλιογραφία

- [1] CODATA *Internationally recommended values of the Fundamental Physical Constants*. National Institute of Standards and Technology (NIST), USA. 2021.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

ΠΕΡΙΔΙΑΒΑΣΗ

Σύνοψη

Επιχειρείται μια πανοραμική περιδιάβαση στα περιεχόμενα του βιβλίου. Εξηγούνται έννοιες, οι οποίες θα αναπτυχθούν περαιτέρω παρακάτω.

Προαπαιτούμενη γνώση: Απαιτείται κάποια γνώση Κβαντικής Μηχανικής, Ηλεκτρομαγνητισμού και Στατιστικής Φυσικής, όμως θα εξηγήσουμε όσα χρειαζόμαστε.

Το βιβλίο αποτελεί εξέλιξη του βιβλίου [1] και νεότερων πανεπιστημιακών παραδόσεων [2]. Άλλες πηγές, τις οποίες θα μπορούσαν να συμβουλευτούν οι αναγνώστες και αναγνώστριες είναι τα βιβλία και πανεπιστημιακές παραδόσεις [3, 4, 5, 6].

Ας ξεκινήσουμε με μια πανοραμική περιδιάβαση στα περιεχόμενα. Ας εξηγήσουμε τις βασικές έννοιες, οι οποίες θα αναπτυχθούν περαιτέρω παρακάτω, κι ας σκιαγραφήσουμε τη δομή του βιβλίου. Στο βιβλίο υπάρχουν επίσης πίνακες με συντημήσεις, ένα γλωσσάριο, δηλαδή λεξικό όρων, καθώς και μία συμβολοθήκη, η οποία περιλαμβάνει φυσικές σταθερές και σύμβολα. Πριν από όλα ο συγγραφέας θεωρεί απαραίτητο να διατυπώσει ένα αξίωμα: «Υπάρχει τουλάχιστον ένα λάθος.» Οπότε, γενικώς, σε όλες τις δραστηριότητες των θνητών υπάρχουν λάθη. Στη διαδικασία ευρέσεώς τους μαθαίνουμε περισσότερα και κατανοούμε καλύτερα. Δεν είναι αμαρτία να κάνεις λάθος, αλλά να νομίζεις πως δεν κάνεις ποτέ λάθος. Ας ελπίσουμε πως αυτή η διατύπωση θα παρακινήσει αναγνώστες κι αναγνώστριες να σκεφτούν, να βρουν και να επιστημάνουν λάθη και παραλείψεις ώστε να γίνει το σύγγραμμα, ας ελπίσουμε σε μια επόμενη έκδοση, καλύτερο. Στον Κινέζο φιλόσοφο Κομφούκιο, 551 - 479 π.Χ., ο οποίος δηλαδή απεβίωσε τη χρονιά που έγινε η μάχη των Πλαταιών, αποδίδεται, μεταξύ άλλων, η ρήση «το ακούω και το ξεχνώ, το βλέπω και το θυμάμαι, το κάνω και το καταλαβαίνω», ρήση, η οποία θα πρέπει να συνοδεύει και τη διαδικασία της μαθήσεως γενικώς. Παρακολουθώντας ιδίως ένα πανεπιστημιακό μάθημα, θα πρέπει να χρησιμοποιούνται παραδόσεις, σημειώσεις, οργανωμένη ηλεκτρονική τάξη, ηλεκτρονικό βιβλίο, λυμένα θέματα παλαιών ετών, ασκήσεις, βιντεοδιαλέξεις και πειράματα, αν είναι δυνατόν. Υπεράνω όλων, πρέπει να υπάρχει ζωντανή αλληλεπίδραση μεταξύ διδάσκοντος-διδάσκουσας και διδασκόμενων. Η χαρά της αλληλεπίδρασεως δεν αντικαθίσταται με τίποτε. Ας έχουμε στον νου μας πως δεν είναι σκοπός η αξιολόγηση, αλλά η ανέλιξη. Τέλος, με παιγνιώδη διάθεση, αντί για bullets, το παρακάτω αρχικό

σχόλιο σχετικά με τη μετάθεση και την αντιμετάθεση, καθώς και τα σχόλια για τα κεφάλαια, επισημαίνονται σε γραμμική Β.

⌈ ⌋ ≡ ≡ - ⌈ ⌋ ⌈ ⌋ ≡ ≡ Πρώτα πρώτα ως προς τον συμβολισμό: Για να απλοποιήσουμε τον συμβολισμό A (πράξη) B , θα γράφουμε AB . Εδώ η «πράξη» μπορεί να είναι στις απλούστερες περιπτώσεις η πρόσθεση ή ο πολλαπλασιασμός αριθμών ή πινάκων, αλλά μπορεί να είναι και οποιαδήποτε άλλη εξωτική πράξη. Αν και θα τα συζητήσουμε διεξοδικότερα παρακάτω, ας πούμε μερικά λόγια για τη μετάθεση (commutation) και την αντιμετάθεση (anticommutation). Ορίζονται λοιπόν τα εξής αντικείμενα, ο μεταθέτης (commutator)

$$[A, B] := AB - BA,$$

και ο αντιμεταθέτης (anticommutator)

$$\{A, B\} := AB + BA.$$

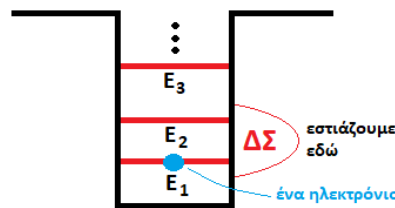
Αν ο μεταθέτης μηδενίζεται, δηλαδή, $[A, B] = 0$, τότε $AB = BA$, δηλαδή τα αντικείμενα A και B μετατίθενται (commute), με άλλα λόγια, το AB δεν διαφέρει από το BA . Αυτό λέγεται διεθνώς μεταθετική ιδιότητα (commutative property). Αν ο αντιμεταθέτης μηδενίζεται, δηλαδή $\{A, B\} = 0$, τότε $AB = -BA$, δηλαδή τα αντικείμενα A και B αντιμετατίθενται (anticommute), με άλλα λόγια, το AB είναι αντίθετο του BA . Αυτό λέγεται διεθνώς αντιμεταθετική ιδιότητα (anticommutative property). Δυστυχώς στην ελληνική κατώτερη, μέση και εν μέρει ανώτατη εκπαίδευση, διδάσκουμε στα παιδιά τη μεταθετική ιδιότητα ως «αντιμεταθετική». Είναι καιρός να αλλάξει επιτέλους. [Να σημειωθεί ακόμα πως στα ελληνικά μεταφράζεται συχνά η λέξη *permutation* = rearrangement of a sequence, ως «μετάθεση». Είναι και αυτή ατυχής μετάφραση, θα έπρεπε να λέγεται *αναδιάταξη*. Αλλά, ούτως ή άλλως αυτό αφορά άλλη περιοχή των Μαθηματικών, δηλαδή τις πιθανότητες.] Η αναπαράσταση με τελεστές (operators) καταστροφής ή καταβίβασης (annihilation or lowering) και δημιουργίας ή αναβίβασης (creation or raising), δηλαδή με τελεστές κλίμακας (ladder operators) ονομάζεται στη φυσική δεύτερη κβάντωση (second quantization). Έτσι, τα μποζόνια (bosons), όπως είναι τα φωτόνια (photons), μετατίθενται (commute), δηλαδή οι τελεστές οι οποίοι περιγράφουν καταστροφή και δημιουργία μποζονίων ακολουθούν σχέσεις μεταθέσεως, με αντικείμενα $[\]$, ενώ τα φερμιόνια (fermions), όπως είναι τα ηλεκτρόνια (electrons), αντιμετατίθενται (anticommute), δηλαδή οι τελεστές οι οποίοι περιγράφουν καταστροφή και δημιουργία φερμιονίων ακολουθούν σχέσεις αντιμεταθέσεως, με αντικείμενα $\{ \}$.

⌘ † ‡ Στο Κεφάλαιο 2 γίνεται μια εισαγωγή στην κβαντική φύση του φωτός. Παρουσιάζονται η εξιδανίκευση «μέλαν σώμα» και συναφείς έννοιες. Συνοπτικά, μέλαν σώμα είναι ένα αντικείμενο το οποίο απορροφά όλα τα ΗΜ (ηλεκτρομαγνητικά) κύματα που προσπίπτουν επάνω του, ανεξαρτήτως συχνότητας και γωνίας προσπτώσεως, δηλαδή κάτι «κατάμαυρο», αν μπορούμε να εκφραστούμε με αυτόν τον χυδαίο τρόπο. Ορίζεται ένα από τα κεντρικότερα φυσικά μεγέθη του βιβλίου αυτού, δηλαδή η πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, αρχικώς, μέλανος σώματος, σε θερμοδυναμική ισορροπία, $\rho(\nu, T)$. Οι μονάδες μετρήσεως στο S.I. είναι $[\rho(\nu, T)] = \frac{J}{m^3 Hz}$, οπότε οι μονάδες μετρήσεως του $[\rho(\nu, T)d\nu] = \frac{J}{m^3}$, δηλαδή το $\rho(\nu, T)d\nu$ είναι πυκνότητα ενέργειας. Παρουσιάζονται οι σημαντικοί νόμοι για την ακτινοβολία μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία, δηλαδή για την ποσότητα $\rho(\nu, T)$: Rayleigh-Jeans (κλασικός, θεωρία, σε απόλυτη ασυμφωνία με το πείραμα), Wien (εμπειρικός, ταίριασμα με το πείραμα σε υψηλές συχνότητες), Planck (κβαντικός, θεωρία που συμφωνεί με το πείραμα σε όλες τις συχνότητες). Διατυπώνεται ο νόμος Stefan-Boltzmann (και πάλι για το μέλαν σώμα) σε δύο μορφές: η πρώτη διατύπωση αφορά την πυκνότητα ενέργειας, $\rho(T)$, με μονάδες $[\rho(T)] = \frac{J}{m^3}$, και η δεύτερη αφορά την ένταση ακτινοβολίας, I , με μονάδες $[I] = \frac{J}{s m^2} = \frac{W}{m^2}$.

Υπενθυμίζονται οι εξισώσεις Maxwell σε διαφορική και ολοκληρωτική μορφή, οι συνοριακές συνθήκες σε διεπιφάνεια μεταξύ δύο μέσων, καθώς και τα ΗΜ πεδία σε κοιλότητες. Κατόπιν, ορίζεται μια άλλη σημαντική ποσότητα, η $g(\nu) = \frac{dN}{d\nu}$, δηλαδή, ο στοιχειώδης αριθμός κανονικών τρόπων ΗΜ πεδίου σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας. Κανονικοί τρόποι (normal modes) σημαίνει συχνότητες και μορφές. Η ποσότητα $g(\nu)$ και η κλασική φυσική, δηλαδή το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας, οδηγούν στον νόμο των

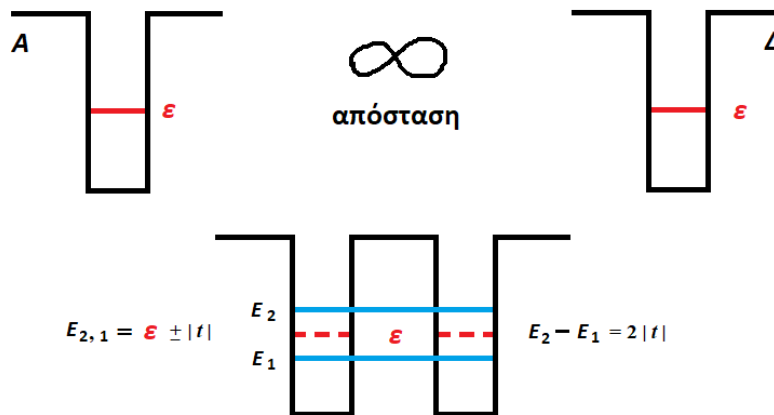
Rayleigh-Jeans, ο οποίος έρχεται σε απόλυτη ασυμφωνία με το πείραμα. Αντιθέτως, η ποσότητα $g(\nu)$ και κάποιες (παλαιο)κβαντικές υποθέσεις οδηγούν στον νόμο του Planck, ο οποίος συμφωνεί με το πείραμα σε όλες τις συχνότητες. Όμως, ο νόμος του Planck, «αποδεικνύομενος» με αυτόν τον τρόπο, μας θυμίζει τον φοιτητή - τη φοιτήτρια που, μην ξέροντας πώς να λύσει το θέμα των εξετάσεων, δοκιμάζει περιέργα κόλπα, αρκεί να βγει το σωστό αποτέλεσμα. Μια στιβαρή απόδειξη του νόμου του Planck έκανε ο Einstein. Αυτά θα ειπωθούν στο Κεφάλαιο 3. Στη συνέχεια, παρουσιάζεται ο νόμος μετατοπίσεως Wien στη μορφή $\lambda_0 T = \text{σταθερά}$ (σε ποιο μήκος κύματος λ_0 έχουμε μέγιστο της ΗΜ ακτινοβολίας μέλανος σώματος θερμοκρασίας T) και στη μορφή $\nu_0/T = \text{σταθερά}'$ (σε ποια συχνότητα ν_0 έχουμε μέγιστο της ΗΜ ακτινοβολίας μέλανος σώματος θερμοκρασίας T). Τέλος, περιγράφεται το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, το οποίο, κι αυτό, μαζί με την ακτινοβολία μέλανος σώματος, μας έπεισε για την κβαντική φύση του φωτός. Όλα αυτά έγιναν στο τέλος του 19ου και στην αρχή του 20ού αιώνα, ήδη αρκετά παλαιά στον χρόνον την ουρά.

☞ † † ☞ Το Κεφάλαιο 3 είναι αφιερωμένο στους μηχανισμούς αλληλεπίδρασεως ΗΜ ακτινοβολίας - ΔΣ. Απαραίτητες συντομογραφίες εδώ είναι οι: ΜΣ = μονοσταθμικό σύστημα (single-level system), ΔΣ



Εικόνα 1.1: Σχηματικά, ένα δισταθμικό σύστημα (ΔΣ).

= δισταθμικό σύστημα (two-level system), ΤΣ = τρισταθμικό σύστημα (three-level system), ΠΣ = πολυσταθμικό σύστημα (multi-level system). Επί παραδείγματι, ΔΣ μπορεί να είναι δύο διαδοχικές στάθμες ενός ατόμου, μορίου, κβαντικής τελείας ή αλλιώς νανοσωματιδίου. Σχηματικά αυτό απεικονίζεται στην Εικόνα 1.1. Το πώς φτιάχνεται ένα ΔΣ από δύο ΜΣ, τα οποία πλησιάζουμε, θα το δούμε αργότερα, στο Κεφάλαιο 4. Πάντως, σχηματικά, η εξήγηση δίνεται στην Εικόνα 1.2. Ας υποθέσουμε, χάριν απλότητας, πως κάθε απομο-



Εικόνα 1.2: Σχηματικά, πώς πλησιάζοντας δύο μονοσταθμικά συστήματα (ΜΣ), τα οποία βρίσκονται σε άπειρη απόσταση, το ένα αριστερά (Α) και το άλλο δεξιά (Δ), φτιάχνουμε ένα δισταθμικό σύστημα (ΔΣ). Ο ενεργειακός διαχωρισμός των δύο σταθμών καθορίζεται από το ολοκλήρωμα μεταβιβάσεως $t = \langle \phi_A | \hat{H} | \phi_\Delta \rangle$, δηλαδή, από το πόσο ισχυρά αλληλεπιδρούν τα άλλοτε (άνω τμήμα της εικόνας) απομονωμένα ΜΣ για να φτιάξουν το ενιαίο ΔΣ (κάτω τμήμα της εικόνας). Χάριν απλότητας, υποθέτουμε πως κάθε απομονωμένο ΜΣ έχει στάθμη ενέργειας ϵ , ενώ το ενιαίο σύστημα, δηλαδή το ΔΣ, έχει στάθμες ενέργειας E_1 και E_2 , οι οποίες, σε μια πρώτη προσέγγιση Ισχυρής Δεσμύσεως, απέχουν ενεργειακά κατά $2|t|$.

νωμένο ΜΣ έχει στάθμη ενέργειας ϵ . Τότε, το ενιαίο σύστημα, δηλαδή το ΔΣ, έχει, σε μια απλή προσέγγιση

Ισχυρής Δεσμεύσεως (Tight-Binding), στάθμες ενέργειας E_1 και E_2 , οι οποίες απέχουν ενεργειακά κατά $2|t|$, όπου t είναι το ολοκλήρωμα μεταβιβάσεως, $t = \langle \phi_A | \hat{H} | \phi_B \rangle$, το οποίο δείχνει πόσο ισχυρά αλληλεπιδρούν τα ΜΣ για να φτιάξουν το ΔΣ. [Αν τα απομονωμένα ΜΣ δεν είναι όμοια, οπότε οι στάθμες τους δεν έχουν την ίδια ενέργεια, το αποτέλεσμα είναι ποιοτικά παρόμοιο.]

Συνοπτικά, οι μηχανισμοί ή διεργασίες αλληλεπιδράσεως ΗΜ ακτινοβολίας - ΔΣ είναι: (Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση [(Stimulated) Absorption], Αυθόρμητη Εκπομπή [Spontaneous Emission], Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή [Stimulated Emission]. Εξαναγκασμένη χαρακτηρίζεται μια διεργασία όταν οφείλεται στην ενεργειακή πυκνότητα ΗΜ ακτινοβολίας, ρ , ενώ αυθόρμητη όταν δεν οφείλεται στη ρ . Ο λόγος που βάζουμε παρένθεση στο «(Εξαναγκασμένη) Απορρόφηση» είναι διότι δεν υπάρχει άλλος τρόπος: αναγκαστικά η απορρόφηση θα είναι εξαναγκασμένη, δηλαδή θα οφείλεται στη ρ . Από τους μηχανισμούς αυτούς, η Εξαναγκασμένη Εκπομπή, η οποία εισήχθη από τον Einstein, είναι θεμελιώδους σημασίας για τη λειτουργία των LASER. Άλλωστε το ακρωνύμιο αυτό σημαίνει: Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation. Να σημειώσουμε πως σε όλο αυτό το βιβλίο, κυρίως εστιάζουμε σε ένα ηλεκτρόνιο μέσα σε ένα ΔΣ ή ΤΣ ή ΠΣ και στη λόγω της ηλεκτρικής διπολικής ροπής του αλληλεπίδραση, λόγω του ηλεκτρικού του φορτίου, με το ΗΜ πεδίο. Ομοίως όμως, θα μπορούσαμε, αν υπήρχε χώρος και χρόνος, να επεκταθούμε σε φαινόμενα που απαιτούν μαγνητική διπολική ροπή και αλληλεπίδραση λόγω του σπιν του ηλεκτρονίου. Ίσως αυτό γίνει σε επόμενη έκδοση. Η πιθανότητα (Εξαναγκασμένης) Απορροφήσεως είναι

$$dW_{\text{απορ}}^{\text{εξ}} = B_{12}\rho(\nu, T)dt,$$

δηλαδή, ανάλογη του χρόνου dt και της $\rho(\nu, T)$, με συντελεστή αναλογίας B_{12} . Ο δείκτης 12 σημαίνει ότι με την απορρόφηση φωτονίου το ηλεκτρόνιο θα μεταβεί από τη στάθμη 1 στη στάθμη 2. Η πιθανότητα Αυθόρμητης Εκπομπής είναι

$$dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}} = A_{21}dt,$$

δηλαδή, ανάλογη του χρόνου dt , με συντελεστή αναλογίας A_{21} . Ο δείκτης 21 σημαίνει ότι με την εκπομπή φωτονίου το ηλεκτρόνιο θα μεταβεί από τη στάθμη 2 στη στάθμη 1. Αφού η διεργασία είναι αυθόρμητη, η $dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}}$ δεν εξαρτάται από την $\rho(\nu, T)$. Η πιθανότητα Εξαναγκασμένης Εκπομπής είναι

$$dW_{\text{εκπ}}^{\text{εξ}} = B_{21}\rho(\nu, T)dt,$$


δηλαδή, ανάλογη του χρόνου dt και της $\rho(\nu, T)$, με συντελεστή αναλογίας B_{21} . Ο δείκτης 21 σημαίνει ότι με την εκπομπή φωτονίου το ηλεκτρόνιο θα μεταβεί από τη στάθμη 2 στη στάθμη 1. Αυτά απεικονίζονται συνοπτικά στην Εικόνα 1.3. Στην (Εξαναγκασμένη) Απορρόφηση, ένα φωτόνιο απορροφάται, με αποτέλεσμα




Εικόνα 1.3: Η (Εξαναγκασμένη) Απορρόφηση, η Αυθόρμητη Εκπομπή και η Εξαναγκασμένη Εκπομπή.

το ηλεκτρόνιο να ανεβαίνει από την κάτω στην άνω στάθμη. Στην Αυθόρμητη Εκπομπή, ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο βρισκόταν στην άνω στάθμη, πέφτει αυθόρμητως στην κάτω στάθμη, η οποία τυχαίνει να ήταν άδεια κι ως αποτέλεσμα, εκπέμπεται ένα φωτόνιο, το οποίο όμως έχει τυχαία κατεύθυνση, φάση, πόλωση. Στην Εξαναγκασμένη Εκπομπή, ένα διεγείρον φωτόνιο, ας το πούμε φωτόνιο - διεγέρτης, με ενέργεια $E_\phi = h\nu$, ορμή $p_\phi = E_\phi/c$, αναγκάζει το ηλεκτρόνιο, το οποίο αρχικά βρισκόταν στην άνω στάθμη, να πέσει στην άδεια κάτω στάθμη, με αποτέλεσμα να εκπέμπεται ένα ακόμα φωτόνιο. Αυτό το δεύτερο φωτόνιο είναι ολόιδιο με το διεγείρον φωτόνιο, έχουν δηλαδή, ίδια ενέργεια, ορμή (κατεύθυνση), φάση, πόλωση. Στη διεργασία αυτή

οφείλονται οι ιδιότητες του LASER: ίδια ενέργεια (energy) \Rightarrow μονοχρωματικότητα (monochromaticity), ίδια ορμή (momentum) \Rightarrow κατευθυντικότητα (directionality), ίδια φάση (phase) \Rightarrow συνοχή (coherence), ίδια πόλωση (polarization) \Rightarrow πολωμένο φως (polarized light). Εννοείται πως πρέπει να έχουμε διατήρηση ενέργειας και ορμής, αλλά αυτά τα συζητάμε διεξοδικά στο Κεφάλαιο 3.

 Το Κεφάλαιο 4 είναι αφιερωμένο στο συνεχές και στο διακριτό φάσμα. Διακριτό ενεργειακό φάσμα έχουν τα άτομα και τα μόρια αλλά και τα τεχνητά άτομα και μόρια, δηλαδή, οι κβαντικές τελείες ή νανοσωματίδια, τις οποίες εν πολλοίς κατασκευάζουν οι άνθρωποι είτε με φυσικό είτε με χημικό τρόπο, αλλά και τα κέντρα χρώματος, τα οποία εμφανίζονται συνήθως ως ατέλειες στους κρυστάλλους. Μερικά άλλα ανθρώπινα κατασκευάσματα έχουν διακριτό-συνεχές ενεργειακό φάσμα με την έννοια πως σε μία ή δύο διαστάσεις έχουν διακριτό φάσμα και στις υπόλοιπες συνεχές. Τέτοια είναι τα κβαντικά σύρματα με διακριτό φάσμα σε δύο διαστάσεις και συνεχές σε μία και τα κβαντικά φρέατα με διακριτό φάσμα σε μία διάσταση και συνεχές σε δύο. Συνεχές φάσμα έχουν τα στερεά, είτε κρυσταλλικά είτε άμορφα (με σημαντικές διαφορές). Επίσης, αφιερώνουμε χώρο στα κέντρα χρώματος και τις κβαντικές τελείες, που έχουν διακριτό φάσμα. Ακόμα, στο Κεφάλαιο 4 μελετάμε τη μετάβαση από δύο ΜΣ σε ένα ενιαίο σύστημα, το ΔΣ, πράγμα που γίνεται με τρεις, διαβαθμισμένης απλοϊκότητας, παραλλαγές της μεθόδου Ισχυρής Δεσμεύσεως. Για τα κβαντικά φρέατα, σύρματα και τελείες, περιγράφουμε κυρίως τις ηλεκτρονιακές τους καταστάσεις και την αντίστοιχη πυκνότητα καταστάσεών τους.

 Στο Κεφάλαιο 5 ασχολούμαστε με τη λεγόμενη ημικλασική προσέγγιση (semiclassical approximation) της αλληλεπιδράσεως ΗΜ πεδίου - ΔΣ, ΤΣ, ΠΣ. Ημικλασική σημαίνει ότι, ενώ αντιμετωπίζουμε το ΗΜ πεδίο κλασικά, αντιμετωπίζουμε το ΔΣ, ΤΣ, ΠΣ κβαντικά, δηλαδή, ως ένα σύστημα ιδιοκαταστάσεων. Εδώ εισάγουμε τον αναγνώστη ή την αναγνώστρια στην προσέγγιση διπόλου. Η ηλεκτρική διπολική ροπή μεταξύ δύο φορτίων, ενός θετικού (Θ) $q > 0$ κι ενός αρνητικού (Α) $-q < 0$, ορίζεται ως $\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d}$, όπου ορίζουμε $\vec{d} = \vec{A}\Theta$ (Εικόνα 1.4). Συνήθως, όταν μελετάμε ένα άτομο, θεωρούμε το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα $\vec{r} = -\vec{d}$. Τότε, $\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d} = -e\vec{r}$, αν αναφερόμαστε π.χ. στο άτομο του υδρογόνου.

Θα χρησιμοποιήσουμε χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών. Εδώ, με τον όρο *αδιατάρακτο* σύστημα εννοούμε το σύστημα ιδιοκαταστάσεων χωρίς ΗΜ πεδίο, ενώ με τον όρο *διαταραγμένο* σύστημα εννοούμε πως προστίθεται η δυναμική ενέργεια της αλληλεπιδράσεως με το ΗΜ πεδίο, η οποία είναι χρονικά εξαρτημένη. Ας ονομάσουμε \hat{H}_0 τη Χαμιλτονιανή του αδιατάρακτου συστήματος, $U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$ τη δυναμική ενέργεια της διαταραχής και \hat{H} τη Χαμιλτονιανή του διαταραγμένου συστήματος. Τότε

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t).$$

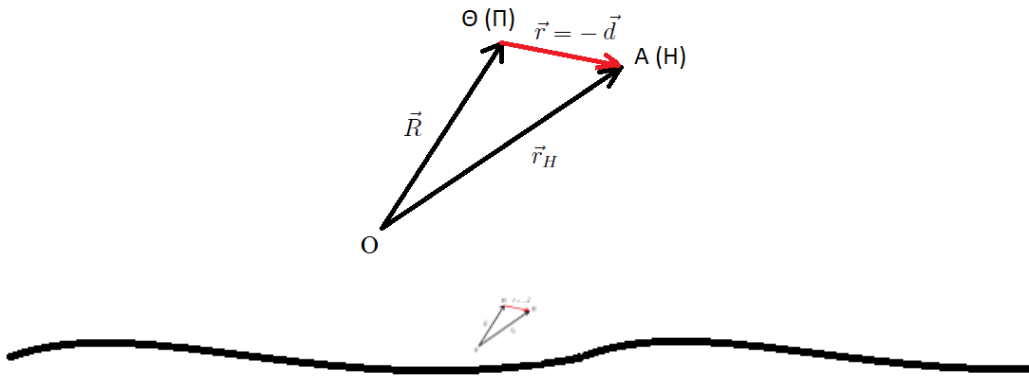
Η δυναμική ενέργεια της διαταραχής, δηλαδή, της αλληλεπιδράσεως με το ηλεκτρικό πεδίο $\vec{\mathcal{E}}$, έχει τη μορφή

$$U_{\mathcal{E}} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}}.$$

Σχεδόν παντού σε αυτό το βιβλίο αγνοούμε την ιδιοστροφομή (το σπιν) του ηλεκτρονίου και άρα τη δυναμική ενέργεια της αλληλεπιδράσεως με το μαγνητικό πεδίο, η οποία έχει παρόμοια μορφή, δηλαδή,

$$U_{\mathcal{B}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{\mathcal{B}},$$

όπου $\vec{\mu}$ είναι η μαγνητική διπολική ροπή και $\vec{\mathcal{B}}$ είναι η μαγνητική επαγωγή. Υπάρχουν ωραίες αναλογίες μεταξύ της ηλεκτρικής διπολικής ροπής εντός ηλεκτρικού πεδίου και της μαγνητικής διπολικής ροπής εντός μαγνητικού πεδίου, οι οποίες υπενθυμίζονται παρακάτω, καθώς παραθέτουμε την ηλεκτρική διπολική ροπή (electric dipole moment), τη μαγνητική διπολική ροπή (magnetic dipole moment), τη δυναμική ενέργεια ηλεκτρικού διπόλου, τη δυναμική ενέργεια μαγνητικού διπόλου και την αντίστοιχη κάθε φορά (μηχανική) ροπή (torque). \vec{L} είναι η τροχιακή στροφομή, \vec{S} η ιδιοστροφομή, g ένας αδιάστατος παράγων, και q , m είναι το φορτίο, η μάζα του σωματιδίου, αντιστοίχως.

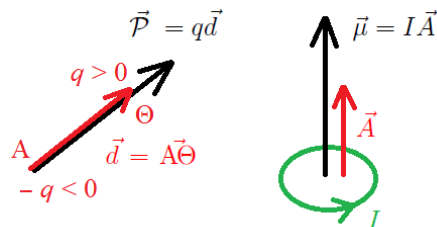


Εικόνα 1.4: [Άνω] Η αρχή των αξόνων O , το θετικό φορτίο Θ , το οποίο μπορεί να αντιπροσωπεύει ο πυρήνας Π ενός ατόμου, το αρνητικό φορτίο A , το οποίο μπορεί να αντιπροσωπεύει ένα ηλεκτρόνιο H κινούμενο γύρω από τον πυρήνα. Ορίζουμε $\vec{d} := \vec{A\Theta}$. Συνήθως, όταν μελετάμε ένα άτομο, θεωρούμε το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα $\vec{r} = -\vec{d}$. Η ηλεκτρική διπολική ροπή ορίζεται ως $\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d}$, πράγμα που μπορούμε επομένως να γράψουμε $\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r}$, αν αναφερόμαστε π.χ. στο άτομο του υδρογόνου. Για αυτήν την τελευταία περίπτωση σημειώνονται ακόμα τα διανύσματα $\vec{O\Pi} := \vec{R}$ και $\vec{O\H} := \vec{r}_H$. [Κάτω] Πολύ σχηματικά: Στις παρούσες συνθήκες, το μήκος κύματος είναι πολύ μεγαλύτερο από τη χωρική έκταση του συστήματος, κάτι σαν $\lambda \gg \alpha$, οπότε το ηλεκτρικό πεδίο είναι πρακτικά ομογενές. Επί παραδείγματι, για οπτικά μήκη κύματος, $\lambda \sim 500 \text{ nm}$, και για το άτομο του υδρογόνου, $\alpha \sim \alpha_0$ (ακτίνα Bohr), οπότε $\lambda/\alpha_0 \sim 10^4$. Το τρίγωνο $O\Theta A$ ($O\Pi H$), το οποίο απεικονίζεται στην επάνω εικόνα, απεικονίζεται στην κάτω εικόνα μικρότερο από το μήκος κύματος, αλλά στην πραγματικότητα είναι πολύ ($\sim 10^4$ φορές) μικρότερο.

Υπενθύμιση Αναλογιών

$\vec{\mathcal{E}}$ (Ηλεκτρικό Πεδίο)

\vec{B} (Μαγνητικό Πεδίο)



Εικόνα 1.5: Ηλεκτρικό και μαγνητικό δίπολο.

$$\vec{\mathcal{P}} = q\vec{d} \quad \text{ηλεκτρική διπολική ροπή}$$

$$\vec{\mu} = I\vec{A} \quad \text{μαγνητική διπολική ροπή}$$

$$\text{ή } \vec{\mu} = (q/2m)(\vec{L} + g\vec{S})$$

$$U_{\mathcal{E}} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}} \quad \text{δυναμική ενέργεια}$$

$$U_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad \text{δυναμική ενέργεια}$$

$$\vec{\tau} = \vec{\mathcal{P}} \times \vec{\mathcal{E}} \quad \text{(μηχανική) ροπή}$$

$$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B} \quad \text{(μηχανική) ροπή}$$

$$[\vec{\mathcal{P}}] = \text{Cm}$$

$$[\vec{\mu}] = \text{Am}^2$$

$$[U_{\mathcal{E}}] = \text{Cm} \frac{\text{N}}{\text{C}} = \text{Nm} = \text{J}$$

$$[U_B] = \text{Am}^2 \frac{\text{N}}{\text{Am}} = \text{Nm} = \text{J}$$

$$[\vec{\tau}] = \text{Cm} \frac{\text{N}}{\text{C}} = \text{Nm}$$

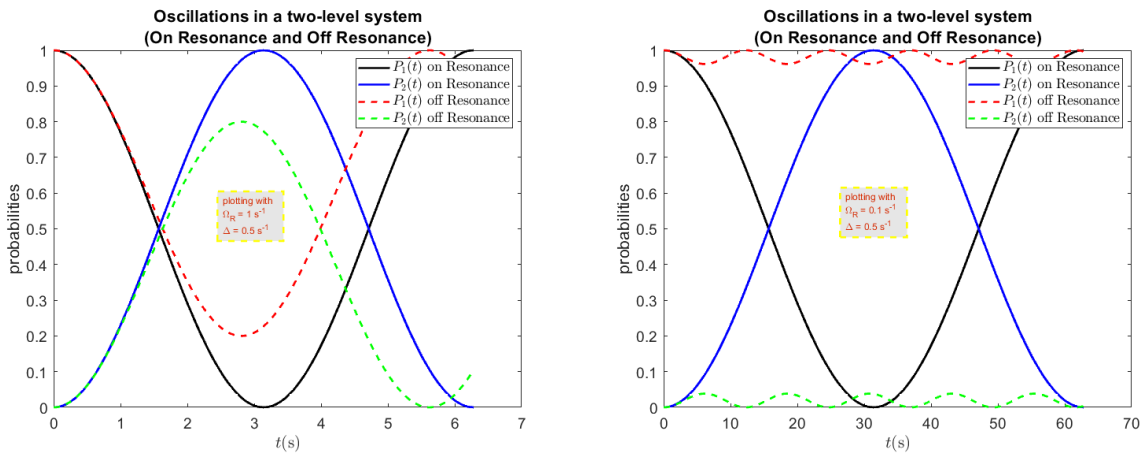
$$[\vec{\tau}] = \text{Am}^2 \frac{\text{N}}{\text{Am}} = \text{Nm}$$

Η ουσία της προσεγγίσεως, την οποία χρησιμοποιούμε, παρασταίνεται στην Εικόνα 1.4. Το μήκος κύματος είναι πολύ μεγαλύτερο από τις χωρικές διαστάσεις του υπό μελέτη συστήματος, δηλαδή,

$$\lambda \gg \alpha.$$

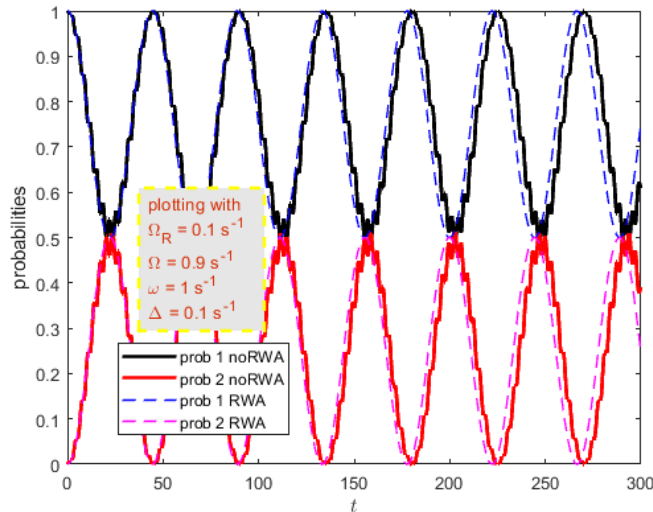
Αν, επί παραδείγματι, εξετάσουμε το άτομο του υδρογόνου, $\alpha = \alpha_0$ είναι, ας πούμε, η ακτίνα *Bohr*. Αν εξετάσουμε οπτικά μήκη κύματος, δηλαδή, $\lambda \sim 500 \text{ nm}$, επειδή $\alpha_0 \approx 0.529 \text{ \AA} \sim 0.5 \times 10^{-1} \text{ nm}$, τότε $\lambda/\alpha_0 \sim 10^4$, δηλαδή, η προσέγγιση ισχύει για οπτικές μεταβάσεις και ατομική φυσική. Αν συμβαίνει όντως κάτι τέτοιο, δηλαδή, αν το μήκος κύματος είναι πολύ μεγαλύτερο από τη χωρική έκταση του συστήματος, τότε σε καλή προσέγγιση το ηλεκτρικό πεδίο έχει μόνο χρονική εξάρτηση αλλά είναι χωρικά ομογενές. Στη φυσική, ομογενής σημαίνει παντού ίδιος, σε κάθε σημείο του χώρου δηλαδή, ενώ *ισότροπος* σημαίνει ίδιος προς όλες τις κατευθύνσεις.

Με αυτές τις προϋποθέσεις, στο κεφάλαιο 5 μελετάμε και επιλύουμε αναλυτικά τη χρονική εξέλιξη $\Delta\Sigma$, $T\Sigma$, με ένα ηλεκτρόνιο τοποθετημένο κάπως αρχικά (π.χ. στην κάτω στάθμη) και εν τέλει λαμβάνουμε τις λεγόμενες ταλαντώσεις Rabi, δηλαδή, το πώς κυμαίνονται οι πιθανότητες παρουσίας του ηλεκτρονίου σε κάθε στάθμη συναρτήσει του χρόνου. Για τον σκοπό αυτό, κάνουμε τη λεγόμενη Προσέγγιση Περιστρεφόμενου Κύματος (ΠΠΚ) [Rotating Wave Approximation (RWA)]. Πρακτικά, αυτό σημαίνει πως αν ονομάσουμε ω την κυκλική συχνότητα του ΗΜ πεδίου και $\hbar\Omega$ τον ενεργειακό διαχωρισμό, π.χ. των δύο σταθμών στο $\Delta\Sigma$, επιλύοντας, μας προκύπτουν γρήγοροι όροι περιέχοντες $\pm(\omega + \Omega)$, και αργοί όροι περιέχοντες $\pm(\omega - \Omega)$, αλλά από αυτούς κρατάμε τους αργούς μόνο. Αυτές οι ταλαντώσεις που κάνει το ηλεκτρόνιο μεταξύ των σταθμών ονομάζονται ταλαντώσεις Rabi και τις συναντούμε εδώ για πρώτη φορά στο πλαίσιο της ημικλασικής προσεγγίσεως. Ένα τέτοιο παράδειγμα ταλαντώσεων της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες, στο πλαίσιο της ΠΠΚ, φαίνεται στην Εικόνα 1.6. Μια σύγκριση της ΠΠΚ με την πλήρη αριθμητική λύση, χωρίς δηλαδή να αγνοήσουμε τους γρήγορους όρους, φαίνεται στην Εικόνα 1.7. Τέλος, στο Κεφάλαιο 5 εξετάζεται το ΠΣ με την ΠΠΚ, υπό την προϋπόθεση ότι οι στάθμες είναι ισαπέχουσες.



Εικόνα 1.6: Παρουσιάζονται ταλαντώσεις της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες ενός δισταθμικού συστήματος ($\Delta\Sigma$) σε συντονισμό ($\Delta = 0$, συνεχείς γραμμές) και εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$, διακεκομμένες γραμμές). Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = 2\pi/\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}$, ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης είναι $\mathcal{A} = \Omega_R^2/(\Omega_R^2 + \Delta^2)$. Απλώς, για να κάνουμε τη γραφική παράσταση, θέσαμε κάποιες τιμές στα Ω_R και Δ . $\Delta = \omega - \Omega$ είναι ο λεγόμενος αποσυντονισμός (*detuning*) και Ω_R η συχνότητα Rabi, η οποία δείχνει κατά πόσο εμπλέκονται οι στάθμες από το ηλεκτρικό πεδίο.

☞ ≠ Ψ ☒ Το Κεφάλαιο 6 είναι επίσης αφιερωμένο στην ημικλασική προσέγγιση. Εδώ εστιάζουμε σε πλήρεις αριθμητικές λύσεις, αλλά και συγκρίνουμε με προσεγγιστικές μεθόδους, όπως είναι η δημοφιλής ΠΠΚ αλλά και η θεωρία επανισώσεως πρώτης και δευτέρας τάξεως [7]. Οπότε, και στο Κεφάλαιο 6, μελετάμε ταλαντώσεις Rabi σε $\Delta\Sigma$ και $\Pi\Sigma$, στην ημικλασική προσέγγιση. Η επίλυση του διαταραγμένου από την



Εικόνα 1.7: Μια σύγκριση της Προσεγγίσεως Περιστρεφόμενου Κύματος (ΠΠΚ) [Rotating Wave Approximation (RWA)] με την πλήρη αριθμητική λύση [noRWA], για κάποιες αυθαίρετες τιμές των Ω_R , Ω , ω , Δ . Παρουσιάζονται οι πιθανότητες παρουσίας του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες συναρτήσει του χρόνου, για αρχική τοποθέτηση στη στάθμη 1. Οι καμπύλες της ΠΠΚ είναι ομαλότερες, διότι λείπουν οι υψίσυχνι όροι $\pm(\Omega + \omega)$ και έχουν κρατηθεί μόνο οι χαμηλόσυχνι όροι $\pm(\Omega - \omega)$. Επίσης, διακρίνεται ασθενές *dephasing*, δηλαδή, οι καμπύλες της ΠΠΚ σιγά σιγά καθυστερούν έναντι των καμπυλών των πλήρων αριθμητικών λύσεων.

ηλεκτρική συνιστώσα του ΗΜ πεδίου, $\Delta\Sigma$ προσεγγίζεται με τρεις τρόπους: (α') προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (ΠΠΚ) [rotating wave approximation (RWA)], (β') μέθοδος επανισώσεως (ΜΕ) [averaging method, (AM)] και (γ') αριθμητικά, επιλύοντας τις αυθεντικές διαφορικές εξισώσεις, χωρίς προσέγγιση (noRWA). Στους τρόπους (α') και (β') οι λύσεις είναι προσεγγιστικές. Ενδεικτικά δοκιμάζουμε τις παρακάτω αρχικές συνθήκες:

1. $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$ (αρχική τοποθέτηση του ηλεκτρονίου στην κάτω στάθμη),
2. $C_1(0) = 0, C_2(0) = 1$ (αρχική τοποθέτηση του ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη),
3. $C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}, C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi}$ (αρχική ισοπίθανη τοποθέτηση του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες, αλλά γενικώς με διαφορετική αρχική φάση).

Τα αποτελέσματα των προσεγγιστικών μεθόδων (α') και (β') συγκρίνονται με τα αποτελέσματα της αριθμητικής επιλύσεως των σχετικών διαφορικών εξισώσεων (γ') [με matlab, με τις μεθόδους τραπεζίου, Runge-Kutta (2,3) και Runge-Kutta (4,5)]. Η μελέτη αυτή περιλαμβάνει την περίπτωση συντονισμού ($\Delta = 0$), αλλά και την περίπτωση αποσυντονισμού ($\Delta \neq 0$).

☞ † † ☞ Το Κεφάλαιο 7 είναι αφιερωμένο στις λεγόμενες επιτρεπόμενες κι απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις, κυρίως στο πλαίσιο της προσεγγίσεως διπόλου και στους λεγόμενους κανόνες επιλογής, οι οποίοι μας λένε εν συντομία «τι επιτρέπεται και τι απαγορεύεται». Ένα πρότυπο σύστημα, το οποίο συνήθως χρησιμοποιείται για να επιδειχθούν οι έννοιες αυτές, είναι το άτομο του υδρογόνου. Θα το χρησιμοποιήσουμε κι εδώ. Επί τη ευκαιρία, αναλύουμε την ομοιότητα (αν είναι άρτια ή περιττή) και τις κομβικές επιφάνειες (επιφάνειες όπου μηδενίζεται η κυματοσυνάρτηση) των ατομικών τροχιακών του ατόμου του υδρογόνου. Εξηγούνται οι λεγόμενες επιτρεπόμενες κι απαγορευμένες μεταβάσεις εντός της προσεγγίσεως διπόλου και οι σχετικοί κανόνες επιλογής. Στο πλαίσιο της προσεγγίσεως διπόλου, τελικά όλα ανάγονται στο ολοκλήρωμα

$$\vec{r}'_{k'k} = \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \vec{r} \Phi_k(\vec{r}),$$

το οποίο εκφράζει το στοιχείο πίνακα της θέσεως του αρνητικού φορτίου ως προς το θετικό, π.χ. της θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα. k και k' είναι οι καταστάσεις ή στάθμες, μεταξύ των οποίων αναρωτιόμαστε αν μπορεί να πραγματοποιηθεί μετάβαση. Εάν αυτό το ολοκλήρωμα είναι μηδενικό, τότε η οπτική μετάβαση «απαγορεύεται», ενώ όταν είναι μη μηδενικό, η οπτική μετάβαση «επιτρέπεται». Όσο μεγαλύτερο είναι αυτό το ολοκλήρωμα, τόσο ισχυρότερη είναι η οπτική μετάβαση. Ο λόγος είναι ότι το στοιχείο πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής, η οποία προσπαθεί να εμπλέξει τις καταστάσεις k και k' μέσω του ηλεκτρικού πεδίου, $\vec{\mathcal{E}}$, είναι

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e \vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}_{k'k}.$$

Όπως βλέπουμε, εν τέλει, όλα ανάγονται στη συμμετρία των ιδιοσυναρτήσεων του αδιατάρακτου προβλήματος, διότι το ποιος από αυτές είναι άρτιες ή περιττές καθορίζει το αν θα μηδενίζεται ή όχι το στοιχείο πίνακα $\vec{r}_{k'k}$, δεδομένου ότι η συνάρτηση \vec{r} είναι προφανώς περιττή. Επίσης, στο Κεφάλαιο 7 αναφερόμαστε και σε υβριδικά τροχιακά sp , sp^2 , sp^3 .

Στο Κεφάλαιο 8 περνάμε στην πλήρη κβαντική αντιμετώπιση της αλληλεπίδρασης φωτονίων - $\Delta\Sigma$, $T\Sigma$, $P\Sigma$ και στην κβάντωση HM πεδίου εντός κοιλότητας, η οποία γίνεται με κάπως ευρετικό τρόπο. Κύριο βάρος εδώ δίνεται στις ταλαντώσεις Rabi του αριθμού των φωτονίων εντός της κοιλότητας και της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στις στάθμες ενός $\Delta\Sigma$ (ή $T\Sigma$, $P\Sigma$), καθώς το ηλεκτρόνιο αλληλεπιδρά με τα φωτόνια εντός της κοιλότητας. Εδώ λοιπόν εμπλέκονται πολλά φωτόνια και ένα ηλεκτρόνιο, το οποίο μπορεί να ανεβοκατεβαίνει στάθμες καθώς αλληλεπιδρά με τα φωτόνια. Φαινόμενα που αφορούν πολλά φερμιόνια είναι εκτός της ύλης του βιβλίου. Το φωτόνιο είναι μποζόνιο, δηλαδή καλόβολο, με την έννοια ότι πολλά μποζόνια μπορούν να καταλάβουν την ίδια κβαντική κατάσταση. Το ηλεκτρόνιο όμως είναι φερμιόνιο, δηλαδή ακατάδεκτο, με την έννοια ότι δύο φερμιόνια δεν μπορούν να καταλάβουν την ίδια κβαντική κατάσταση. Έτσι, ενώ μπορούμε να συμπεκνώσουμε μποζόνια, δεν μπορούμε να συμπεκνώσουμε (καθαρά) φερμιόνια (αν και για παράδειγμα, τα ζεύγη Cooper μπορούν να συμπεκνωθούν). Η Χαμιλτονιανή του m τρόπου του HM πεδίου, $\hat{H}_{HM,m}$, εκφράζεται με τελεστές καταστροφής και δημιουργίας φωτονίων (μποζονίων). Η Χαμιλτονιανή του HM πεδίου είναι το άθροισμα όλων των όρων $\hat{H}_{HM,m}$. Η Χαμιλτονιανή του $\Delta\Sigma$, $\hat{H}_{\Delta\Sigma}$, (ή $T\Sigma$, $P\Sigma$), η οποία περιγράφεται με σπίνορες, εκφράζεται με τελεστές καταστροφής και δημιουργίας ηλεκτρονίων (φερμιονίων). Επίσης, χρειαζόμαστε μια Χαμιλτονιανή, η οποία να εκφράζει την αλληλεπίδραση του m τρόπου του HM πεδίου με το $\Delta\Sigma$ (ή $T\Sigma$, $P\Sigma$), ως την πούμε $\hat{H}_{HM,m-\Delta\Sigma}$. Αυτή έχει κι εναλλακτικούς συμβολισμούς, όπως $U_{\mathcal{E},m}$, $\hat{H}_{AF,m}$. Το AF έχει τη ρίζα του στην παλαιά ατομική φυσική, σημαίνει atom-field. Το U μας υπενθυμίζει πως είναι η διαταράσσουσα δυναμική ενέργεια, η οποία προέρχεται από το ηλεκτρικό πεδίο \mathcal{E} . Έτσι, εν τέλει, πρέπει να αθροίσουμε όλες αυτές τις επιμέρους Χαμιλτονιανές.

Μια τέτοια συνολική δημοφιλής Χαμιλτονιανή είναι η Χαμιλτονιανή Rabi. Περιγράφει έναν HM τρόπο m , ένα $\Delta\Sigma$ και τη μεταξύ τους αλληλεπίδραση. Μετά από κάποιες αρχικές απλοποιήσεις, μπορεί να γραφτεί στη μορφή

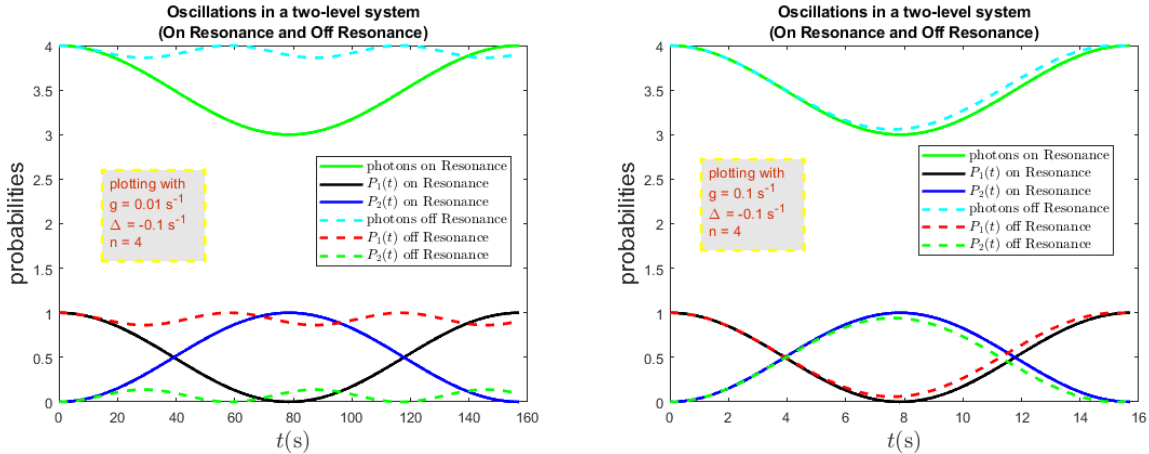
$$\hat{H}_{R,m} = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g_m (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m).$$

Ο πρώτος όρος εκφράζει τον m τρόπο του HM πεδίου, ο δεύτερος όρος εκφράζει το $\Delta\Sigma$ και ο τρίτος όρος εκφράζει τη μεταξύ τους αλληλεπίδραση. ω_m είναι η (κυκλική) συχνότητα του τρόπου m του HM πεδίου και \hat{a}_m^\dagger (\hat{a}_m) είναι ο τελεστής δημιουργίας (καταστροφής) ενός τέτοιου φωτονίου. $\hbar\Omega$ είναι η ενεργειακή απόσταση των δύο σταθμών και \hat{S}_+ (\hat{S}_-) είναι ο τελεστής αναβίβασης (καταβίβασης) του ηλεκτρονίου μεταξύ της άνω και κάτω στάθμης. Τέλος, η g_m εκφράζει την ισχύ και την επιτρεψιμότητα της αλληλεπίδρασης του m τρόπου του HM πεδίου με το $\Delta\Sigma$. Ο τρίτος όρος της Χαμιλτονιανής Rabi μπορεί να αναπτυχθεί σε τέσσερις προσθετούς. Εξ αυτών, ο πρώτος εκφράζει ανέβασμα του ηλεκτρονίου και δημιουργία φωτονίου ($\hat{S}_+ \hat{a}_m^\dagger$), ο δεύτερος ανέβασμα ηλεκτρονίου και καταστροφή φωτονίου ($\hat{S}_+ \hat{a}_m$), ο τρίτος κατέβασμα ηλεκτρονίου και δημιουργία φωτονίου ($\hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger$) και ο τέταρτος κατέβασμα ηλεκτρονίου και καταστροφή φωτονίου ($\hat{S}_- \hat{a}_m$). Αν υπάρχει μόνο ένα είδος φωτονίων στην κοιλότητα, δηλαδή ένας μόνο τρόπος m , τότε ο πρώτος και ο τέταρτος προσθετέος φαντάζουν παράλογοι ενεργειακά. Αν τους απορρίψουμε, καταλήγουμε στη Χαμιλτονιανή

Jaynes-Cummings [8], μια μορφή της οποίας είναι

$$\hat{H}_{JC,m} = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g_m (\hat{S}_+ \hat{a}_m + \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger).$$

Με τη Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings θα μελετήσουμε απορρόφηση και εκπομπή φωτονίου και τις σχετικές ταλαντώσεις Rabi της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στις στάθμες (στην κάτω στάθμη $\langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle$, στην άνω στάθμη $\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle$) και του αριθμού των φωτονίων του τρόπου m στην κοιλότητα ($\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle$). Δύο παραδείγματα φαίνονται στην Εικόνα 1.8. Υπολογίζουμε, μεταξύ άλλων, τις μέσες (αναμενόμενες) τιμές $\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle$,



Εικόνα 1.8: Δύο παραδείγματα ταλαντώσεων Rabi κατά την απορρόφηση φωτονίου, δηλαδή, η αρχική συνθήκη είναι 4 φωτόνια στην κοιλότητα και 1 ηλεκτρόνιο στην κάτω στάθμη. Χρησιμοποιούμε κάποιες αυθαίρετες τιμές των παραμέτρων για να κάνουμε μια ενδεικτική ζωγραφιά. Δεξιά οι δύο στάθμες εμπλέκονται περισσότερο (η παράμετρος g είναι μεγαλύτερη). Παρουσιάζουμε σε συντονισμό ($\Delta = 0$) και εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$), τη χρονική εξέλιξη της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα, $\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle = n - \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t)$, αλλά

και της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των ηλεκτρονίων στην άνω στάθμη, $\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle = \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t)$, αλλά

και στην κάτω στάθμη, $\langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle = \sqrt{(\Delta/2)^2 + ng^2}$.

$\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle$, $\langle \hat{S}_+ \hat{a}_m \rangle$, $\langle \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger \rangle$, για την $\hat{H}_{JC,m}$. Τέλος, σημειώνουμε πως οι ιδιοκαταστάσεις ηλεκτρονίου στο ΔS και HM τρόπου m , χωρίς όμως τη μεταξύ τους αλληλεπίδραση, συνήθως εκφράζονται ως $|\uparrow, n_m\rangle$, $|\downarrow, n_m\rangle$, όπου n_m είναι ο αριθμός των φωτονίων του HM τρόπου m και $|\uparrow\rangle$ ($|\downarrow\rangle$) σημαίνει πως το ηλεκτρόνιο είναι στην άνω (κάτω) στάθμη.

☞ † ‡ ☐ Το Κεφάλαιο 9 είναι κι αυτό αφιερωμένο στην πλήρη κβαντική προσέγγιση. Μιλάμε για μποζόνια, φερμιόνια, μεταθέσεις, αντιμεταθέσεις, τελεστές κλίμακας και δεύτερη κβάντωση. Μας ενδιαφέρει:

- ο μεταθέτης (commutator), $[A, B] = AB - BA$ και
- ο αντιμεταθέτης (anticommutator), $\{A, B\} = AB + BA$.
- * Αν μηδενίζεται ο μεταθέτης, $AB = BA$, έχουμε μεταθετική ιδιότητα (commutative property).
- * Αν μηδενίζεται ο αντιμεταθέτης, $AB = -BA$, έχουμε αντιμεταθετική ιδιότητα (anticommutative property).

Σχέσεις μεταθέσεως μποζονίων (π.χ. φωτονίων): Αν ονομάσουμε \hat{a}_m τον τελεστή καταστροφής (annihilation operator) μποζονίων και \hat{a}_m^\dagger τον τελεστή δημιουργίας (creation operator) μποζονίων στην κατάσταση

ή τρόπο m , όπου $\hbar\omega_m$ είναι η ενέργεια του δημιουργούμενου ή καταστρεφόμενου μποζονίου, τότε για τα μποζόνια ισχύουν οι σχέσεις μεταθέσεως (commutation relations):

$$\begin{aligned} [\hat{a}_m, \hat{a}_\ell^\dagger] &= \delta_{m\ell}, \\ [\hat{a}_m, \hat{a}_\ell] &= 0, \\ [\hat{a}_m^\dagger, \hat{a}_\ell^\dagger] &= 0. \end{aligned}$$

Όταν $[A, B] = 0 \Rightarrow AB - BA = 0 \Rightarrow AB = BA$, δηλαδή οι ποσότητες A και B μετατίθενται, πράγμα που δείχνει την προέλευση της ονομασίας. Ταυτοχρόνως, ο \hat{a}_m^\dagger μπορεί να ονομαστεί τελεστής αναβιβάσεως (raising operator) διότι αναβιβάζει την ενέργεια κατά $\hbar\omega_m$, ο \hat{a}_m μπορεί να ονομαστεί τελεστής καταβιβάσεως (lowering operator) διότι καταβιβάζει την ενέργεια κατά $\hbar\omega_m$ και επομένως, αφού πρόκειται για μία σκάλα (κλίμακα) αναβιβάσεων και καταβιβάσεων, οι τελεστές $\hat{a}_m, \hat{a}_m^\dagger$ ονομάζονται τελεστές κλίμακας (ladder operators).

Σχέσεις αντιμεταθέσεως φερμιονίων (π.χ. ηλεκτρονίων): Αν ονομάσουμε \hat{a}_i τον τελεστή καταστροφής (annihilation operator) φερμιονίων και \hat{a}_i^\dagger τον τελεστή δημιουργίας (creation operator) φερμιονίων στην κατάσταση i , όπου $\hbar\Omega_i$ είναι η ενέργεια του δημιουργούμενου ή καταστρεφόμενου φερμιονίου, τότε για τα φερμιόνια ισχύουν οι σχέσεις αντιμεταθέσεως (anticommutation relations):

$$\begin{aligned} \{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} &= \delta_{ij}, \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} &= 0, \\ \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} &= 0. \end{aligned}$$

Όταν $\{A, B\} = 0 \Rightarrow AB + BA = 0 \Rightarrow AB = -BA$, δηλαδή οι ποσότητες A, B αντιμετατίθενται, πράγμα που δείχνει την προέλευση της ονομασίας. Ταυτοχρόνως, ο \hat{a}_i^\dagger μπορεί να ονομαστεί τελεστής αναβιβάσεως (raising operator) διότι αναβιβάζει την ενέργεια κατά $\hbar\Omega_i$, ο \hat{a}_i μπορεί να ονομαστεί τελεστής καταβιβάσεως (lowering operator) διότι καταβιβάζει την ενέργεια κατά $\hbar\Omega_i$ και επομένως, αφού πρόκειται για μία σκάλα (κλίμακα) αναβιβάσεων και καταβιβάσεων, οι τελεστές $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ ονομάζονται κι αυτοί τελεστές κλίμακας (ladder operators). Εναλλακτικώς, χρησιμοποιούνται οι συμβολισμοί: \hat{S}_+ για τον τελεστή αναβιβάσεως στην άνω στάθμη του $\Delta\Sigma$ από την κάτω στάθμη του $\Delta\Sigma$ και \hat{S}_- για τον τελεστή καταβιβάσεως στην κάτω στάθμη του $\Delta\Sigma$ από την άνω στάθμη του $\Delta\Sigma$. Ταυτοχρόνως, ο \hat{S}_+ θα μπορούσε να ονομαστεί τελεστής δημιουργίας ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη και καταστροφής ηλεκτρονίου στην κάτω στάθμη, ενώ ο \hat{S}_- θα μπορούσε να ονομαστεί τελεστής καταστροφής ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη και δημιουργίας ηλεκτρονίου στην κάτω στάθμη. Αν εφαρμόσουμε τη σχέση $\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$ για την ίδια κατάσταση, π.χ. θέτοντας $i = j = r$, έχουμε $\{\hat{a}_r^\dagger, \hat{a}_r^\dagger\} = 0 \Rightarrow \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_r^\dagger = 0$, το οποίο σημαίνει ότι δεν μπορούμε να βάλουμε δύο φερμιόνια στην ίδια κατάσταση, πράγμα που είναι η απαγορευτική αρχή Pauli.

Στη γραμμική άλγεβρα, καθώς και στις εφαρμογές της στην κβαντική μηχανική, ορίζεται ο τελεστής αναβιβάσεως (raising operator), ο οποίος αυξάνει την ιδιοτιμή ενός άλλου τελεστή, και ο τελεστής καταβιβάσεως (lowering operator), ο οποίος μειώνει την ιδιοτιμή ενός άλλου τελεστή. Αυτοί συλλογικά ονομάζονται τελεστές κλίμακας (ladder operators). Στην κβαντομηχανική, ο τελεστής αναβιβάσεως καλείται συχνά τελεστής δημιουργίας (creation operator), και ο τελεστής καταβιβάσεως καλείται συχνά τελεστής καταστροφής (annihilation operator). Γνωστές εφαρμογές των τελεστών κλίμακας είναι στον απλό αρμονικό ταλαντωτή και στη στροφορμή. Σε πολλές περιοχές της Φυσικής και της Χημείας, η χρήση αυτών των τελεστών αντί κυματοσυναρτήσεων είναι γνωστή ως δεύτερη κβάντωση (second quantization).

✂ † ‡ ☐ Στο Κεφάλαιο 10 συζητούμε τον τελεστή και τον πίνακα πυκνότητας. Διευκρινίζουμε τι είναι καθαρή κατάσταση (το σύστημα περιγράφεται από μία κυματοσυνάρτηση), τι είναι μεικτή κατάσταση (το σύστημα δεν είναι εφικτό να περιγραφεί από μία καλά ορισμένη κυματοσυνάρτηση, π.χ. επειδή είναι συζευγμένο με μια δεξαμενή, με την οποία μπορεί να ανταλλάσσει θερμότητα, σωματίδια κ.ά.). Επίσης, συζητάμε τη σχέση του τελεστή και του πίνακα πυκνότητας με τη χρονική εξέλιξη του συστήματος και την εξίσωση von

Neumann. Ο τελεστής πυκνότητας για μια καθαρή κατάσταση μπορεί να γραφτεί

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad |\Psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \\ c_N(t) \end{bmatrix}.$$

Δηλαδή, $|\Psi\rangle = \sum_k c_k(t) |\Phi_k\rangle$, όπου $|\Phi_k\rangle$ είναι η βάση μας. Έτσι, $\langle\Psi| = [c_1^*(t) \quad c_2^*(t) \quad \dots \quad c_N^*(t)]$, οπότε, η αναπαράσταση του τελεστή πυκνότητας σε μορφή πίνακα είναι

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^*(t) & c_2^*(t) & \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1(t)c_1^*(t) & c_1(t)c_2^*(t) & \dots \\ c_2(t)c_1^*(t) & c_2(t)c_2^*(t) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}.$$

Η χρονική εξέλιξη του τελεστή πυκνότητας περιγράφεται από την εξίσωση Liouville - von Neumann

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)],$$

όπου $\hat{H} = \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$ είναι η Χαμιλτονιανή του συστήματος. Αν συμπεριλάβουμε αφησυχασμούς λόγω αυθόρμητης εκπομπής ή αποδιεγέρσεις, συγκρούσεις με άτομα αερίου κ.ά., τότε

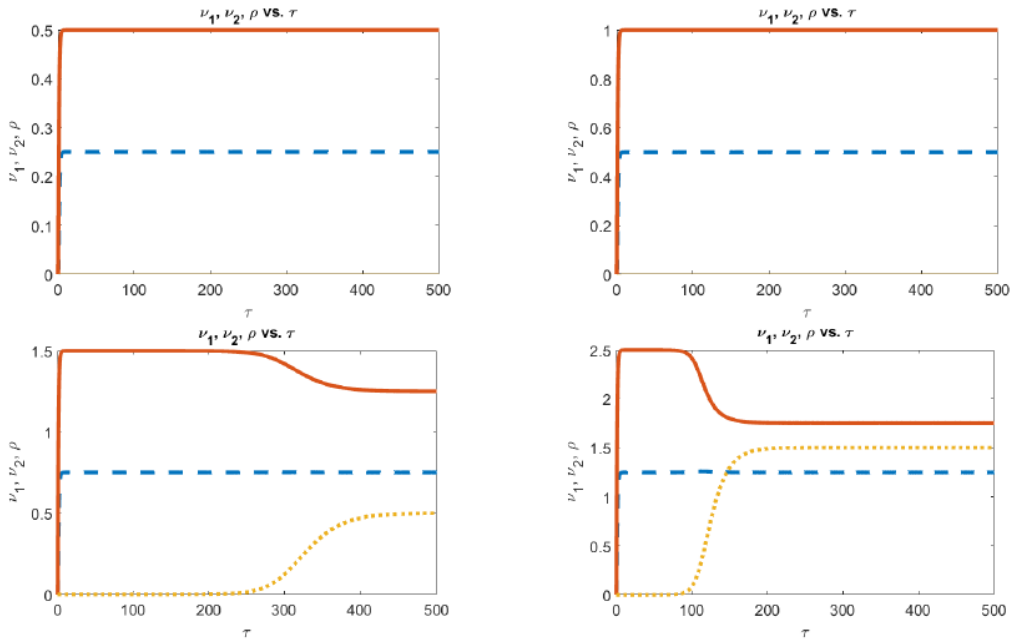
$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] - \frac{i\hbar}{2} \{\hat{\Gamma}, \hat{\rho}(t)\},$$

όπου $\hat{\Gamma}\Phi_k(\vec{r}) = \gamma_k \Phi_k(\vec{r})$, $\gamma_k \in \mathfrak{R}$, και η Χαμιλτονιανή γράφεται $\hat{H} = \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) - \frac{i\hbar}{2} \hat{\Gamma}$.

Το Κεφάλαιο 11 αφιερώνεται στα LASER και, πιο συγκεκριμένα, στις αρχές λειτουργίας τους, τις εξισώσεις ρυθμών για τους πληθυσμούς των σταθμών και για την πυκνότητα ενέργειας των ΗΜ κυμάτων στην κοιλότητα, τους διαμήκεις και εγκάρσιους τρόπους, τα είδη LASER. Ως ένα πρότυπο σύστημα εξετάζουμε το LASER He - Ne, ενώ αναφερόμαστε και σε άλλα είδη LASER, όπως το LASER επαφής p-n, το LASER κβαντικών τελειών και λοιπά. Εστιάζουμε στις εξισώσεις ρυθμών για τους πληθυσμούς N_1 και N_2 των σταθμών, οι οποίες συμμετέχουν στην εκπομπή συνεκτικών ΗΜ κυμάτων, και για την πυκνότητα ενέργειας των ΗΜ κυμάτων εντός της κοιλότητας ρ , δηλαδή στα dN_1/dt , dN_2/dt , $d\rho/dt$. Εξηγούμε τι είναι διαμήκεις και τι εγκάρσιοι τρόποι. Συζητάμε τα εύρη των γραμμών των οπτικών μεταβάσεων. Εκτός από τη χρονική εξέλιξη των N_1 , N_2 , ρ , γενικώς, εστιάζουμε και στις τιμές των N_1 , N_2 , ρ , στη στάσιμη κατάσταση (steady-state), όταν δηλαδή έχει αποκατασταθεί δυναμική ισορροπία μεταξύ της στατιστικής συλλογής των $\Delta\Sigma$ (έχουμε μεγάλο αριθμό $\Delta\Sigma$ εντός της κοιλότητας) και της πυκνότητας ακτινοβολίας στην κοιλότητα. Εξηγούμε τι είναι άντληση, τι είναι κρίσιμη άντληση και τι αναστροφή πληθυσμού. Οι διαφορικές εξισώσεις, οι οποίες εμπλέκουν τα N_1 , N_2 , ρ , γενικώς, δεν λύνονται αναλυτικώς, αλλά αριθμητικώς. Εν προκειμένω, τις επιλύουμε με matlab· ένα παράδειγμα φαίνεται στην Εικόνα 1.9. Να σημειώσουμε, τέλος, πως αν και η εκπομπή συνεκτικών ΗΜ κυμάτων (κοινώς lasing) γίνεται συνήθως μεταξύ δύο επιλεγμένων σταθμών ($\Delta\Sigma$), και άλλες στάθμες εμπλέκονται στην όλη διαδικασία με βοηθητικό ρόλο.

Οι διαφορικές εξισώσεις ρυθμών LASER στην αδιάστατη μορφή έχουν τη μορφή

$$\begin{aligned} \frac{dv_1}{d\tau} &= v_2 + \rho(v_2 - v_1) - \frac{v_1}{\tau_1}, \\ \frac{dv_2}{d\tau} &= r_N + \rho(v_1 - v_2) - v_2, \\ \frac{d\rho}{d\tau} &= -\frac{\rho}{\tau_0} + \left\{ \frac{A'}{A} v_2 + \rho(v_2 - v_1) \right\} \frac{1}{\tau_0(1 - \tau_1)}. \end{aligned}$$



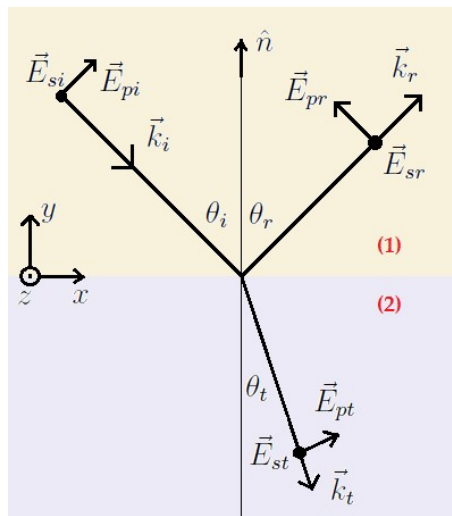
Εικόνα 1.9: Αλλάζουμε μία παράμετρο μόνο (εκ των $r_N, \tau_1, \tau_0, A'/A$) και παρακολουθούμε τη χρονική εξέλιξη των αδιαστατοποιημένων πληθυσμών των δύο σταθμών (ν_1, ν_2), καθώς και της αδιαστατοποιημένης πυκνότητας ενέργειας HM κυμάτων εντός της κοιλότητας (ρ), συναρτήσει του αδιαστατοποιημένου χρόνου (τ).

Τα ν_1, ν_2, ρ, τ είναι αδιαστατοποιημένα N_1, N_2, ρ, t (χρόνος), ενώ τα $r_N, \tau_1, \tau_0, A'/A$ είναι αδιάστατες παράμετροι, των οποίων η σημασία θα εξηγηθεί στο Κεφάλαιο 11. Στη στάσιμη κατάσταση, αγνοώντας το $A'/A \ll 1$, ισχύουν οι εξισώσεις

$$\begin{aligned} \nu_1 &= \tau_1 r_N, \quad \forall r_N \\ \nu_2 &= \begin{cases} r_N, & \forall r_N \leq 1 \\ \tau_1 r_N + (1 - \tau_1), & \forall r_N \geq 1 \end{cases} \\ \rho &= \begin{cases} 0, & \forall r_N \leq 1 \\ r_N - 1, & \forall r_N \geq 1 \end{cases} \end{aligned}$$

Ένα παράδειγμα αριθμητικής επιλύσεως των εξισώσεων ρυθμών φαίνεται στην Εικόνα 1.9, όπου μεταβάλλουμε μόνο μία από τις παραμέτρους $r_N, \tau_1, \tau_0, A'/A$. Λεπτομέρειες στο Κεφάλαιο 11. Τέλος, στο Κεφάλαιο 11 θίγουμε την απομόνωση του θεμελιώδους τρόπου TEM_{00} , καθώς και τρόπων ανωτέρας τάξεως $TEM_{p'q'}$ (εδώ TEM σημαίνει transverse electromagnetic).

☞ ☎ ☐ Στο Κεφάλαιο 12 παρατίθενται διάφορα άλλα χρήσιμα στοιχεία. Μεταξύ άλλων, εξετάζουμε τις εξισώσεις Fresnel, οι οποίες αφορούν την προσπτώση HM κύματος σε διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ δύο μέσων, 1 και 2 (Εικόνα 1.10). Επίπεδο προσπτώσεως q είναι το επίπεδο, το οποίο σχηματίζουν το προσπίπτον κυματόνισμα \vec{k}_i και το κάθετο στη διεπιφάνεια, στο σημείο προσπτώσεως, μοναδιαίο άνυσμα \hat{n} , δηλαδή, στην Εικόνα 1.10, το επίπεδο xy . Φαίνονται οι γωνίες προσπτώσεως, ανακλάσεως, διαθλάσεως ή διελεύσεως, $\theta_i, \theta_r, \theta_t$, αντιστοίχως, καθώς και οι συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου \vec{E} , οι λεγόμενες s εκ του γερμανικού senkrecht ή TE (transverse electric) με $\vec{E}_s \perp q$ και οι λεγόμενες p εκ του parallel ή TM (transverse magnetic) με $\vec{E}_p \in q$, δηλαδή, οι συνιστώσες του προσπίπτοντος (incident, i), ανακλωμένου (reflected, r), διαθλωμένου ή αλλιώς διερχομένου (transmitted, t) ηλεκτρικού πεδίου $\vec{E}_{si}, \vec{E}_{ri}, \vec{E}_{sr}, \vec{E}_{pr}, \vec{E}_{st}, \vec{E}_{pt}$, αντιστοίχως. Η γωνία προσπτώσεως, για την οποία δεν υπάρχει ανακλώμενη p πόλωση, ονομάζεται γωνία Brewster. Θα ορίσουμε ακόμα την ανακλαστικότητα ή ανακλασιμότητα (reflectance), $R := |\vec{E}_r|^2/|\vec{E}_i|^2$, και τη δια-



Εικόνα 1.10: Πρόσπτωση ΗΜ κύματος σε διαχωριστική επιφάνεια μεταξύ δύο μέσων 1 και 2. Επίπεδο προσπτώσεως q είναι το επίπεδο που σχηματίζουν το προσπίπτον κυματόνισμα \vec{k}_i και το κάθετο στη διεπιφάνεια, στο σημείο προσπτώσεως, μοναδιαίο άνυσμα \hat{n} , δηλαδή εδώ το επίπεδο xy . Φαίνονται οι γωνίες προσπτώσεως, ανακλάσεως, διαθλάσεως ή διελεύσεως θ_i , θ_r , θ_t , αντιστοίχως, καθώς και οι s (κάθετες στο q) και p (ανήκουσες στο q) συνιστώσες του προσπίπτοντος, ανακλωμένου, διαθλωμένου ή διερχομένου ηλεκτρικού πεδίου \vec{E}_{si} , \vec{E}_{pi} , \vec{E}_{sr} , \vec{E}_{pr} , \vec{E}_{st} , \vec{E}_{pt} , αντιστοίχως.

περατότητα ή διελυσσιμότητα (transmittance), $T := (|\vec{E}_t|^2/|\vec{E}_i|^2) \sqrt{\varepsilon_2\mu_1/\varepsilon_1\mu_2} (\cos \theta_i/\cos \theta_t)$, τα οποία συνδέονται με τη σχέση $R + T = 1$, το διάνυσμα Poynting $\vec{S} := \vec{E} \times \vec{H}$ το οποίο έχει μονάδες ισχύος ανά μονάδα επιφανείας, καθώς και σχετιζόμενα μεγέθη και ιδιότητες.

Μετά την περιδιάβαση αυτή, ας πάρουμε τα πράγματα από την αρχή, σιγά σιγά ...

⌘ ⌘ ⌘ ⌘ ⌘ ⌘ ⌘ ⌘ ⌘ ⌘

Βιβλιογραφία

- [1] Κ. Σιμσερίδης. *Κβαντική Οπτική και Lasers*. Αθήνα: Κάλλιπος, 2015. ISBN: 9789606030734. URL: <http://hdl.handle.net/11419/2108>.
- [2] Κ. Σιμσερίδης. *Σημειώσεις του μαθήματος Κβαντική Οπτική και Lasers*. Αθήνα: Τμήμα Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2021. URL: <https://eclass.uoa.gr/courses/PHYS107/>.
- [3] S. Kryszewski. *Quantum Optics Lecture notes for students*. Gdańsk: Institute of Theoretical Physics και Astrophysics, University of Gdańsk, 2010.
- [4] O. Svelto. *Principles of Lasers*. 5th edition. New York, Dordrecht, Heidelberg, London: Springer, 2010. ISBN: 9781441913012. DOI: [10.1007/978-1-4419-1302-9](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-1302-9).
- [5] R. Loudon. *The Quantum Theory of Light*. 3rd edition. Oxford: Oxford University Press, 2000. ISBN: 0198501765.
- [6] M. Fox. *Quantum Optics An introduction*. Oxford: Oxford University Press, 2006. ISBN: 9780198566724.
- [7] L. Chalkopiadis και C. Simserides. “Averaging method and coherence applied to Rabi oscillations in a two-level system”. Στο: *Journal of Physics Communications* 5 (2021). 16 pages, σ. 095006. DOI: [10.1088/2399-6528/ac1abf](https://doi.org/10.1088/2399-6528/ac1abf).
- [8] E. T. Jaynes και F. W. Cummings. “Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser”. Στο: *Proceedings of the IEEE* 51 (1963), σσ. 89–109. DOI: [10.1109/PROC.1963.1664](https://doi.org/10.1109/PROC.1963.1664).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΦΥΣΗ ΤΟΥ ΦΩΤΟΣ

Σύνοψη

Συζητείται η κβαντική φύση του φωτός. Το κεφάλαιο αφιερώνεται σε φαινόμενα και έννοιες, οι οποίες ιστορικά οδήγησαν στην αντίληψή μας για την κβαντική φύση του φωτός. Συγκεκριμένα: Αρχικώς, αναφερόμαστε στην έννοια μέλαν σώμα και σε συναφείς έννοιες. Κατόπιν, περιγράφουμε την πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία. Αναφερόμαστε στον νόμο του Planck και τον συγκρίνουμε με τις προσεγγίσεις των Rayleigh-Jeans και Wien. Μετά, παραθέτουμε δύο διατυπώσεις του νόμου των Stefan-Boltzmann, την πρώτη με πυκνότητα ενέργειας και τη δεύτερη με ένταση ακτινοβολίας. Στη συνέχεια, συζητάμε τις εξισώσεις του Maxwell σε διατύπωση με όρους ολικού φορτίου και ολικού ρεύματος, καθώς και τις συνοριακές συνθήκες σε διεπιφάνεια. Επίσης, συζητάμε την ύπαρξη ΗΜ κυμάτων άπουσία πυκνότητας φορτίου και πυκνότητας ρεύματος, πεδία εντός ιδανικού αγωγού, πεδία στο σύνορο ιδανικού αγωγού, πεδία σε κοιλότητες. Κατόπιν συζητάμε τους κανονικούς ΗΜ τρόπους εντός ορθογώνιας παραλληλεπίπεδης κοιλότητας και υπολογίζουμε τον στοιχειώδη αριθμό κανονικών τρόπων ΗΜ πεδίου ανά στοιχειώδες διάστημα συχνότητας. Τότε πια είμαστε σε θέση να αποδείξουμε τον κλασικό νόμο των Rayleigh-Jeans, από το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας και τον στοιχειώδη αριθμό κανονικών τρόπων ΗΜ πεδίου ανά στοιχειώδες διάστημα συχνότητας. Ο νόμος αυτός αποτελεί μια παταγώδη αποτυχία της κλασικής φυσικής. Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε την απόδειξη του νόμου του Planck, όπως την έκανε ο Planck. Μετά αποδεικνύουμε τον νόμο μετατοπίσεως του Wien σε διάφορες παραλλαγές. Τέλος, περιγράφουμε το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο.


Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Φυσικής και Μαθηματικών, καθώς και Ηλεκτρομαγνητισμού και Στατιστικής Φυσικής.

2.1 Μέλαν σώμα και συναφείς έννοιες

Ας παραθέσουμε μερικούς ορισμούς. Έστω ότι σε κάποιο σώμα προσπίπτουν ηλεκτρομαγνητικά (ΗΜ) κύματα ή όπως λέμε ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, όπως σχηματικά παρουσιάζεται στην Εικόνα 2.1. Τότε,

Κωνσταντίνος Σιμσερίδης (2023). «Κβαντική Οπτική».

Αθήνα: Κάλλιπος, Ανοικτές Ακαδημαϊκές Εκδόσεις. <http://dx.doi.org/10.57713/kallipos-185>

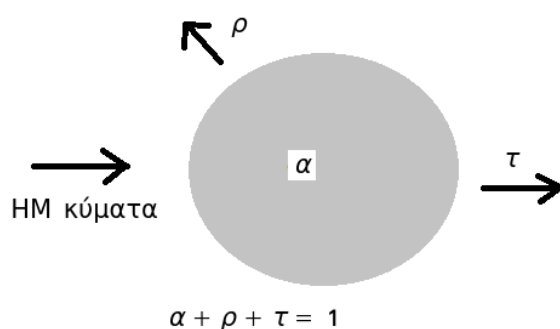
 Creative Commons Αναφορά Δημιουργού - Μη Εμπορική Χρήση - Παρόμοια Διανομή 4.0

ορίζουμε τα ακόλουθα φυσικά μεγέθη:

- **Συντελεστής απορρόφησης** (absorption coefficient), α , είναι το ποσοστό της ΗΜ ακτινοβολίας που απορροφάται από το σώμα.
- **Συντελεστής διελύσεως** (transmission coefficient), τ , είναι το ποσοστό της ΗΜ ακτινοβολίας που διέρχεται από το σώμα.
- **Συντελεστής ανακλάσεως** (reflection coefficient), ρ , είναι το ποσοστό της ΗΜ ακτινοβολίας που ανακλάται από το σώμα.

Τα τρία παραπάνω μεγέθη συνδέονται με τη σχέση

$$\alpha + \tau + \rho = 1. \quad (2.1)$$

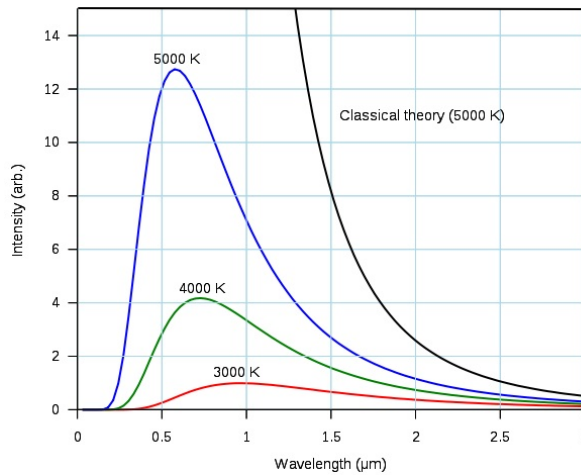


Εικόνα 2.1: Σε κάποιο σώμα προσπίπτουν ηλεκτρομαγνητικά κύματα. Σχηματική παρουσίαση των συντελεστών απορρόφησης (α), διελύσεως (τ), ανακλάσεως (ρ). Ισχύει $\alpha + \tau + \rho = 1$.

Ερώτηση: Τι θα πει στα απλά ελληνικά «μέλαν»; *Απάντηση:* «μαύρο». Ο επιστημονικός ορισμός, όμως, είναι αυστηρότερος... **Μέλαν σώμα** (black body) είναι ένα εξιδανικευμένο φυσικό σώμα, το οποίο **απορροφά όλη** την προσπίπτουσα σε αυτό ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία **ανεξαρτήτως συχνότητας** και **ανεξαρτήτως γωνίας προσπτώσεως**. Το μέλαν σώμα αφήνει όλη την προσπίπτουσα ακτινοβολία να μπει μέσα του, δηλαδή ανακλά μηδενικό ποσοστό της προσπίπτουσας ακτινοβολίας ($\rho = 0$), εσωτερικά απορροφά όλην αυτήν την προσπίπτουσα ακτινοβολία ($\alpha = 1$), χωρίς να αφήνει ακτινοβολία να το διαπεράσει ($\tau = 0$) και αυτό ισχύει για όλες τις συχνότητες και για όλες τις γωνίες προσπτώσεως. Άρα, ένα μέλαν σώμα είναι τέλειος απορροφητής της προσπίπτουσας ΗΜ ακτινοβολίας.

Βεβαίως, αν συνέβαιναν μόνο τα παραπάνω ($\alpha = 1, \rho = \tau = 0$), τότε, λόγω της συνεχούς απορρόφησης ενέργειας, η θερμοκρασία του σώματος θα αυξανόταν συνεχώς. Έτσι, **ένα μέλαν σώμα, το οποίο βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία, άρα και σε σταθερή θερμοκρασία** θα πρέπει να **επαν-εκπέμπει** ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, η οποία καλείται **ακτινοβολία μέλανος σώματος** (black-body radiation), έτσι ώστε να διατηρείται το ενεργειακό ισοζύγιο. Η ακτινοβολία μέλανος σώματος γίνεται σύμφωνα με τον νόμο του Planck (§2.2, §2.13, Εικόνα 2.2) με τέτοιο τρόπο **ώστε το φάσμα της εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία ανεξαρτήτως σχήματος, ανεξαρτήτως συστάσεως του μέλανος σώματος, ανεξαρτήτως γωνίας εκπομπής**. Ένα μέλαν σώμα σε θερμοδυναμική ισορροπία έχει τις αξιοσημείωτες ιδιότητες [1]:

- (I1). Είναι ένας **ιδανικός εκπομπός**, δηλαδή, εκπέμπει σε κάθε συχνότητα τουλάχιστον όση ενέργεια εκπέμπει οιοδήποτε άλλο σώμα ταυτόσημης θερμοκρασίας.
- (I2). Είναι ένας **ισότροπος εκπομπός**, δηλαδή, η ακτινοβολία διασπείρεται ισοτρόπως, ανεξαρτήτως κατευθύνσεως.



Εικόνα 2.2: Ακτινοβολία μέλανος σώματος σύμφωνα με τον νόμο του Planck (δείτε §2.2 και §2.13). Εξαρτάται μόνο από τη θερμοκρασία και όχι από το σχήμα, τη σύσταση του σώματος, τη γωνία εκπομπής.

Τα πραγματικά σώματα εκπέμπουν κλάσμα της ακτινοβολίας μέλανος σώματος. **Συντελεστής εκπομπής** ή **εκπεμπότητα** (emission coefficient or emissivity), ϵ , ορίζεται το ποσοστό της ΗΜ ακτινοβολίας που επανεκπέμπεται από το σώμα. Εξ ορισμού, ένα μέλαν σώμα σε θερμοδυναμική ισορροπία έχει ϵ ίσο με τη μονάδα,

$$\epsilon_{\text{μέλανος σώματος}}^{\text{σε θερμοδυναμική ισορροπία}} := 1. \quad (2.2)$$

Δηλαδή, συνοψίζοντας, για το μέλαν σώμα, ισχύει

$$\alpha = 1, \rho = \tau = 0, \epsilon = 1. \quad (2.3)$$

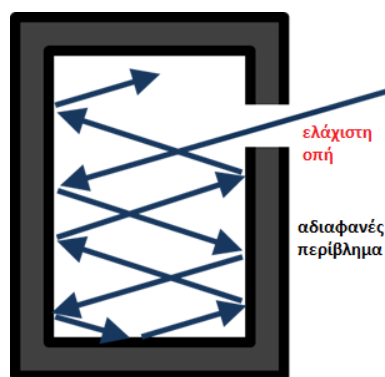
Πίνακας 2.1: Ορισμοί σωμάτων.

μέλαν σώμα (black body)	$\alpha = 1, \rho = \tau = 0, \epsilon = 1$
γκρίζο σώμα (gray body)	$\alpha, \rho, \tau, \epsilon < 1$
λευκό σώμα (white body)	$\rho = 1, \alpha = \tau = 0$
αδιαφανές σώμα (opaque body)	$\tau = 0, \alpha + \rho = 1$
διαφανές σώμα (transparent body)	$\tau = 1, \alpha = \rho = 0$

Καλούμε **γκρίζο σώμα** (gray body) ένα σώμα με $\epsilon < 1$. Καλούμε **λευκό σώμα** (white body) ένα σώμα που ανακλά όλη την προσπίπτουσα ακτινοβολία ($\rho = 1$), οπότε $\alpha = \tau = 0$. Όλα αυτά υποτίθεται ότι ισχύουν ανεξαρτήτως συχνότητας, κατεύθυνσης και θερμοκρασίας. Καλούμε **αδιαφανές σώμα** (opaque body) ένα σώμα που δεν διαπερνάται από την ΗΜ ακτινοβολία ($\tau = 0$), οπότε $\alpha + \rho = 1$. Ονομάζουμε **διαφανές σώμα** (transparent body) ένα σώμα που διαπερνάται εντελώς από την ΗΜ ακτινοβολία ($\tau = 1$), οπότε $\alpha = \rho = 0$. Οι ορισμοί συνοψίζονται στον Πίνακα 2.1.

Η ακτινοβολία από τους αστέρες, τους πλανήτες και άλλα σώματα χαρακτηρίζεται πολλές φορές από μια **ενεργό θερμοκρασία** (effective temperature), δηλαδή τη θερμοκρασία ενός μέλανος σώματος, το οποίο θα εξέπεμπε την ίδια συνολική (δηλαδή ολοκληρωμένη σε όλες τις συχνότητες) ένταση ακτινοβολίας I (μονάδες $[I] = \text{W/m}^2$, §2.3).

Μία προσεγγιστική πραγμάτωση μέλανος σώματος φαίνεται στην Εικόνα 2.3. Μια προσέγγιση του μέλανος σώματος μπορεί να γίνει ανοίγοντας μια **ελάχιστη οπή** στο τοίχωμα ενός **αδιαφανούς περιβλήματος** (opaque enclosure), π.χ. στο τοίχωμα ενός κοινού κουτιού, δημιουργώντας έτσι μια **κοιλότητα με οπή** (cavity with a hole) [2]. Στη φωτονική (photonics), μερικές φορές αναφέρουμε τον όρο **κοιλότητα** (cavity), εννοώντας ότι υπάρχει και η ελάχιστη οπή. Λόγω της ελαχιστότητας της οπής σε σχέση με την κοιλότητα,



Εικόνα 2.3: Κοιλότητα με οπή: Προσεγγιστική πραγμάτωση μέλανος σώματος, ανοίγοντας μια ελάχιστη οπή στο τοίχωμα ενός αδιαφανούς περιβλήματος.

το φως, το οποίο εισέρχεται στην κοιλότητα (σχεδόν) ανακλάται επ' αόριστον ή απορροφάται και δεν είναι πιθανόν να εξέλθει από την κοιλότητα, πράγμα που καθιστά το σύστημά μας σχεδόν τέλειο απορροφητή. Το αν το σύστημα αυτό είναι σε θερμοδυναμική ισορροπία και επομένως η ακτινοβολία, την οποία εκπέμπει, είναι ακτινοβολία μέλανος σώματος, η οποία ακολουθεί τον νόμο του Planck, εξαρτάται από τη φύση των τοιχωμάτων και τα άλλα περιεχόμενα του περιβλήματος. Η κοιλότητα με οπή δεν είναι βεβαίως τέλειο μέλαν σώμα. Αν το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας είναι μεγαλύτερο από τη διάμετρο της οπής, μέρος της θα ανακλαστεί. Ομοίως, ακόμα και σε θερμοδυναμική ισορροπία, το φάσμα της ακτινοβολίας εντός πεπερασμένης κοιλότητας δεν θα υπακούει εντελώς στον νόμο Planck για μήκη κύματος συγκρίσιμα ή μεγαλύτερα από το μέγεθος της κοιλότητας [3]. Ας υποθέσουμε τώρα ότι η κοιλότητα διατηρείται σε σταθερή θερμοκρασία T και η παγιδευμένη ακτινοβολία βρίσκεται σε θερμοδυναμική ισορροπία με το περίβλημα. Η οπή θα αφήσει εν γένει ένα τμήμα της ακτινοβολίας να δραπετεύσει. Εάν η οπή είναι μικρή, η ακτινοβολία, η οποία εισέρχεται και εξέρχεται, θα έχει αμελητέα επίδραση στην ισορροπία της ακτινοβολίας εντός της κοιλότητας. Η ακτινοβολία που δραπετεύει θα είναι προσεγγιστικά ακτινοβολία μέλανος σώματος με την κατανομή του νόμου του Planck, χαρακτηριστική της θερμοκρασίας T , και δεν θα εξαρτάται από τις ιδιότητες της κοιλότητας με την οπή, τουλάχιστον για μήκη κύματος αρκετά μικρότερα από το μέγεθος της οπής. Η κοιλότητα με οπή χρησιμοποιείται ήδη τουλάχιστον από το 1898 όταν και την περιέγραψαν οι Otto Lummer και Ferdinand Kurlbaum. Το σχέδιό τους ήταν μια οπή σε ένα λευκόχρυσο κουτί, με το εσωτερικό του μαυρισμένο με οξείδιο του σιδήρου [4] ή αργότερα το 1901, μαυρισμένο με μείγμα οξειδίων χρωμίου, νικελίου και κοβαλτίου [5]. Παρακάτω αναφέρουμε μερικές ακόμη προσεγγιστικές πραγματώσεις μέλανος σώματος.



Εικόνα 2.4: Το υλικό Vantablack κατασκευασμένο από νανοσωλήνες άνθρακα (Surrey NanoSystems), το οποίο, κατά τους κατασκευαστές, απορροφά 99.96% του προσπίπτοντος σε αυτό φωτός. Εδώ, επάνω σε φύλλο αργιλίου.

Υπάρχει ενδιαφέρον για **σχεδόν μέλανα** (near-black) σώματα ή υλικά για εφαρμογές, όπως είναι η απόκρυψη (ιδίως από ραντάρ), οι συλλέκτες ηλιακής ενέργειας και οι ανιχνευτές υπέρυθρης ακτινοβολίας. Ως τέλειος εκπομπός ακτινοβολίας, ένα θερμό υλικό με συμπεριφορά σχεδόν μέλανος σώματος θα έφτιαχνε μία αποτελεσματική υπέρυθρη θερμάστρα, ειδικά στο διάστημα ή στο κενό όπου η θέρμανση με μεταφορά δεν είναι δυνατή. Τα σχεδόν μέλανα σώματα είναι ακόμα χρήσιμα στα τηλεσκόπια και στις κάμερες ως αντιανακλαστικές επιφάνειες για τη μείωση του διάχυτου ή αδέσποτου φωτός και για τη συλλογή πληροφοριών

περί αντικειμένων σε περιοχές υψηλής οπτικής αντιθέσεως, π.χ. για την παρατήρηση πλανητών σε τροχιά γύρω από τους αστέρες τους, όπου και τα σχεδόν μέλανα σώματα απορροφούν φως που έρχεται από άσχετες πηγές. Μια πρώτη προσέγγιση μέλανος σώματος είναι η αιθάλη. Τα τελευταία χρόνια έχει δειχθεί ότι σχεδόν τέλεια μέλανα σώματα ($\alpha \approx 0.99$) μπορούν να κατασκευαστούν με νανοσωλήνες άνθρακα [6, 7], ενώ ένα απλό μαύρο χρώμα έχει $\alpha < 0.975$. Το υλικό «super black» έχει $\alpha \approx 0.996$ και $\rho \approx 0.004$. Εδώ και λίγα χρόνια ανακοινώθηκε από την Surrey NanoSystems η κατασκευή από νανοσωλήνες άνθρακα του υλικού Vantablack, το οποίο κατά τους κατασκευαστές απορροφά 99.96% του προσπίπτοντος σε αυτό φωτός. Μια εικόνα του Vantablack πάνω σε φύλλο αργιλίου φαίνεται στην Εικόνα 2.4. Το όνομα προέρχεται από το vertically aligned nanotube arrays (VANATA) (καθέτως ευθυγραμμισμένες σειρές νανοσωλήνων) [8] και τη λέξη «black». Καθέτως ευθυγραμμισμένες σειρές νανοσωλήνων άνθρακα (vertically aligned carbon nanotubes, CNTs) σαν ένα ασαφές, μπερδεμένο δάσος μικρών δένδρων, χρησιμοποιήθηκαν προσφάτως για να αναπτυχθεί ένα υλικό, το οποίο είναι μία τάξη μεγέθους σκοτεινότερο από άλλα πολύ μαύρα υλικά [9]. Σύμφωνα με τους συγγραφείς [9], «οι ιεραρχικές δομές μετάλλων - νανοσωλήνων άνθρακα επιδεικνύουν σε όλες τις κατευθύνσεις απορρόφηση μέλανος σώματος με συντελεστή ανακλάσεως 1×10^{-5} στις περιοχές από υπεριώδες έως τα THz, ο οποίος δηλαδή είναι μία τάξη μεγέθους χαμηλότερος από οιοδήποτε μέχρι τώρα αναφερθέν ευρζωνικό απορροφητικό υλικό.»

Ο νόμος του Planck, ο οποίος διατυπώθηκε το 1900, περιγράφει την πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία, $\rho(\nu, T)d\nu$. Συγκεκριμένα,

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu. \quad (2.4)$$

Οι μονάδες του $\rho(\nu, T)$ είναι $[\rho(\nu, T)] = \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{Hz}}$. Αυτή είναι μια διατύπωση του νόμου του Planck συναρτήσει της συχνότητας, ν . Υπάρχουν κι άλλες διατυπώσεις, π.χ. συναρτήσει του μήκους κύματος, λ , της κυκλικής συχνότητας, ω , του κυματηριθμού, k .

2.2 Πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία: Νόμος του Planck και σύγκριση με τις προσεγγίσεις των Rayleigh-Jeans και Wien

Η πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία, $\rho(\nu, T)d\nu$, έμελλε να γίνει **ένα από τα ζητήματα, τα οποία απεκάλυψαν την κβάντωση της ΗΜ ακτινοβολίας**. Παραθέτουμε παρακάτω τρεις εξισώσεις, οι οποίες παρουσιάστηκαν στην προσπάθεια να εξηγηθεί η πειραματική συμπεριφορά. Συγκεκριμένα: την έκφραση των Rayleigh-Jeans (θεωρία, κλασική φυσική, 1900), την έκφραση του Wien (ταίριασμα με τα πειραματικά δεδομένα της εποχής, σε υψηλές συχνότητες, 1896) και εν τέλει την έκφραση του Planck (θεωρία, παλαιά κβαντική μηχανική, 1900), η οποία ταυτίζεται με την πειραματική συμπεριφορά σε όλη την περιοχή συχνοτήτων. Έχουμε λοιπόν, τον νόμο των Rayleigh-Jeans (θεωρία, κλασική φυσική, 1900),

$$\rho_{\text{RJ}}(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2 k_B T}{c^3} = \rho_{\text{RJ}}, \quad (2.5)$$

τον νόμο του Wien (ταίριασμα με τα πειραματικά δεδομένα της εποχής, σε υψηλές συχνότητες, 1896), δηλαδή, «fitting»,

$$\rho_{\text{W}}(\nu, T) = \frac{\alpha\nu^3}{e^{b\nu/T}} \frac{\text{σταθερές από νόμο του Planck}}{c^3} \frac{8\pi h}{e^{h\nu/k_B T}} \nu^3 = \rho_{\text{W}}, \quad (2.6)$$

όπου οι σημειώσεις επάνω και κάτω από το «=» σημαίνουν ότι πριν το «=» είναι η μορφή που πρότεινε ο Wien, ενώ μετά το «=» χρησιμοποιούνται οι σταθερές, οι οποίες προβλέπονται από τον νόμο του Planck

στο ασυμπτωτικό όριο υψηλών συχνοτήτων, όπου ο νόμος του Wien προσεγγίζει τον νόμο του Planck. Τέλος, παραθέτουμε τον νόμο του Planck (θεωρία, παλαιά κβαντική μηχανική, 1900), ο οποίος ταυτίζεται με τα πειραματικά δεδομένα για οποιαδήποτε συχνότητα,

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} = \rho \quad (2.7)$$

Ας κάνουμε αλλαγή μεταβλητής, ορίζοντας

$$x = \frac{h\nu}{k_B T} \quad (2.8)$$

Άρα,

$$\nu = \frac{k_B T}{h} x \Rightarrow d\nu = \frac{k_B T}{h} dx. \quad (2.9)$$

Τότε εμφανίζεται η ουσιαστική διαφοροποίηση των παραπάνω νόμων:

$$\rho_{RJ}(x) = \rho_0 x^2 \quad (2.10)$$

$$\rho_W(x) = \rho_0 \frac{x^3}{e^x} \quad (2.11)$$

$$\rho(x) = \rho_0 \frac{x^3}{e^x - 1} \quad (2.12)$$

$$\rho_0 := \frac{8\pi}{h^2} \left(\frac{k_B T}{c} \right)^3 \quad (2.13)$$

με μονάδες $[\rho_0] = \frac{J_s}{m^3} = \frac{J}{m^3 Hz}$. Εννοείται ότι στο πεδίο ορισμού της συναρτήσεως της Εξ. 2.12 δεν ανήκει το 0, δηλαδή δεν μιλάμε για μηδενική συχνότητα ή άπειρη θερμοκρασία. Ένας εναλλακτικός συμβολισμός, ο οποίος απαντάται στη βιβλιογραφία για το $\rho(\nu, T)$ είναι το $u(\nu, T)$.

Ο νόμος του Planck εξήχθη από τον Planck (1900), αλλά και αργότερα, πιο ρωμαλέα, από τον Einstein (1916), συναρτήσει της συχνότητας και της απολύτου θερμοκρασίας, δηλαδή στη μορφή $\rho(\nu, T)$. Μπορούμε να κατασκευάσουμε εναλλακτικές διατυπώσεις, όπως αναφέρθηκε παραπάνω, π.χ. συναρτήσει του μήκους κύματος λ , δηλαδή στη μορφή $\rho(\lambda, T)$, το οποίο γίνεται συχνά μέσω της απαιτήσεως

$$\int_0^\infty \rho(\lambda, T) d\lambda := \int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu. \quad (2.14)$$

Αυτό αποτελεί μια επιπλέον υπόθεση, την οποία απλώς παραθέτουμε εδώ. Η $\rho(\lambda, T)$ έχει διαφορετικές μονάδες και έχει διαφορετική θέση μεγίστου από την $\rho(\nu, T)$, οπότε, κατά τη γνώμη μας, η εισαγωγή της δεν είναι ιδιαίτερως βολική. Από την απαίτηση 2.14 προκύπτει

$$\int_0^\infty \rho(\lambda, T) d\lambda = \int_0^\infty \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} d\nu. \quad (2.15)$$

Όμως,

$$c = \lambda\nu \Leftrightarrow \nu = \frac{c}{\lambda} \Rightarrow \frac{d\nu}{d\lambda} = -\frac{c}{\lambda^2}. \quad (2.16)$$

Οπότε,

$$\int_0^{\infty} \rho(\lambda, T) d\lambda = -8\pi hc \int_{\infty}^0 \frac{1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} d\lambda = 8\pi hc \int_0^{\infty} \frac{d\lambda}{\lambda^5 (e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1)} \Rightarrow \quad (2.17)$$

ο νόμος του Planck συναρτήσσει του μήκους κύματος και της θερμοκρασίας είναι

$$\rho(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5 (e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1)} \quad (2.18)$$

Ορίζοντας

$$\psi = \frac{hc}{\lambda k_B T} \quad (2.19)$$

και

$$\rho'_0 = 8\pi \frac{(k_B T)^5}{(hc)^4} \quad (2.20)$$

η Εξ. 2.18 γράφεται

$$\rho(\psi) = \rho'_0 \frac{\psi^5}{e^{\psi} - 1} \quad (2.21)$$

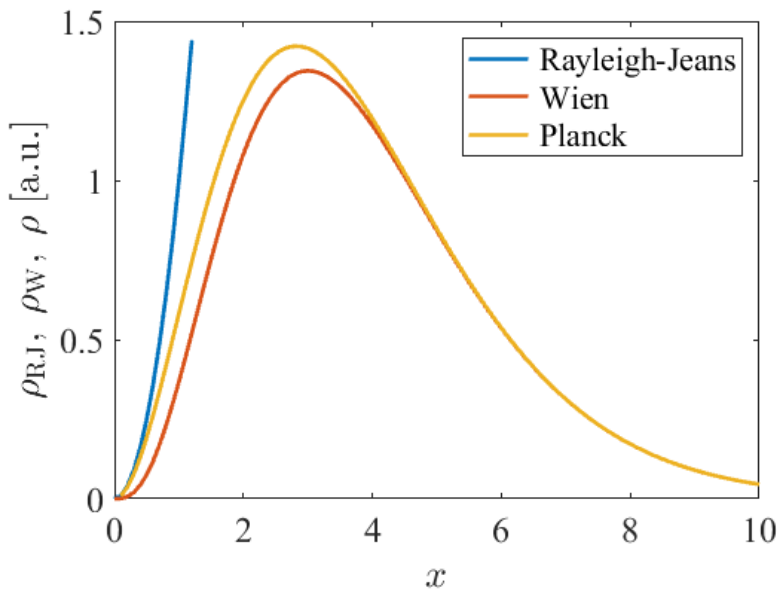
Οι μονάδες του ρ'_0 είναι $[\rho'_0] = \frac{J}{m^3 m}$. Άρα και οι μονάδες του $\rho(\lambda, T)$ είναι $[\rho(\lambda, T)] = \frac{J}{m^3 m}$, **διαφορετικές από τις μονάδες του $\rho(\nu, T)$** , οι οποίες είναι $[\rho(\nu, T)] = \frac{J}{m^3 Hz}$. Με άλλα λόγια, παρόλο που χρησιμοποιούμε το ίδιο σύμβολο (ρ), δεν πρόκειται για το ίδιο φυσικό μέγεθος. Φυσικά, στην Εξ. 2.21, το πεδίο ορισμού της $\rho(\psi)$ δεν περιλαμβάνει το 0, δηλαδή, το μήκος κύματος και η θερμοκρασία δεν μπορούν να απειριστούν.

Οι τρεις παραπάνω προσεγγίσεις συγκρίνονται στην Εικόνα 2.5. Διακρίνεται η παλαιότερα καλουμένη *υπεριώδης καταστροφή* (*ultraviolet catastrophe*), δηλαδή ο απειρισμός της κλασικής προσεγγίσεως Rayleigh-Jeans αυξάνοντας τη συχνότητα. Δηλαδή, η κλασική προσέγγιση είναι ικανοποιητική μόνο σε πολύ χαμηλές συχνότητες, αλλά μετά, καθώς αυξάνεται η συχνότητα, προβλέπει απειρισμό της ρ σε καταστροφική αντίθεση με τα πειραματικά δεδομένα. Η προσέγγιση Wien παρουσιάζει πρόβλημα στο αντίθετο όριο, δηλαδή σε χαμηλές συχνότητες, όπου απομακρύνεται από την πειραματική συμπεριφορά, πράγμα που παλαιότερα αποκαλείτο *πρόβλημα μακρινού υπερύθρου* (*far-infrared problem*). Οι ονομασίες αυτές έχουν σχέση με τα διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα γύρω στο 1900 και είναι, υπό αυτήν την έννοια, παραπλανητικές. Στην πραγματικότητα, η περιοχή, όπου αρχίζουν οι αποκλίσεις, εξαρτάται, προφανώς, από τη θερμοκρασία του μέλανος σώματος: Οι εκφράσεις 2.10, 2.11, 2.12 διαφέρουν μόνο στη συνάρτηση του x , το οποίο εξαρτάται κατά την Εξ. 2.8 όχι μόνο από τη συχνότητα, ν , αλλά και από τη θερμοκρασία, T .

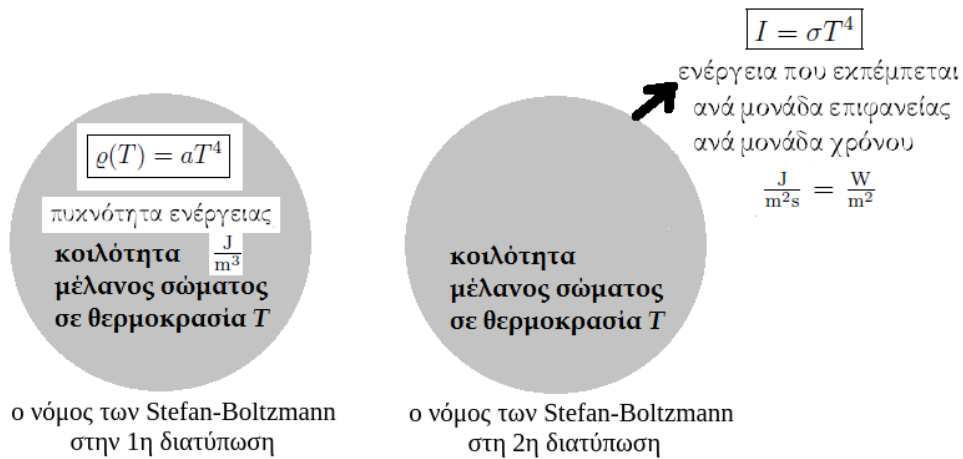
2.3 Δύο διατυπώσεις του νόμου Stefan-Boltzmann: (1) Πυκνότητα ενέργειας, (2) Ένταση ακτινοβολίας

Παραθέτουμε δύο συνήθεις διατυπώσεις του νόμου των Stefan-Boltzmann, ο οποίος αναφέρεται σε μέλαν σώμα με θερμοκρασία T .

Ο νόμος Stefan-Boltzmann στην 1η μορφή αφορά **την πυκνότητα ενέργειας** (μονάδες J/m^3) **εντός μέλανος σώματος** θερμοκρασίας T . Για να την υπολογίσουμε, θα πρέπει να ολοκληρώσουμε την Εξ. 2.7, δηλαδή



Εικόνα 2.5: Σύγκριση των νόμων Rayleigh-Jeans (Εξ. 2.10), Wien (Εξ. 2.11), Planck (Εξ. 2.12). Έχουμε θέσει $\rho_0 = 1$ (Εξ. 2.13), χάριν απλότητας, για να κάνουμε τη ζωγραφιά. Διακρίνεται η απόκλιση της κλασικής θεωρίας Rayleigh-Jeans από τον νόμο του Planck (ο οποίος συμφωνεί με το πείραμα) πολύ σύντομα αυξάνοντας το $x = \frac{h\nu}{k_B T}$ και η απόκλιση του ταιριάσματος Wien από τον νόμο του Planck σε αρκετά χαμηλά x . Το x περιλαμβάνει τη συχνότητα, ν , αλλά και τη θερμοκρασία, T .



Εικόνα 2.6: [Αριστερά] Ο νόμος των Stefan-Boltzmann στην 1η διατύπωση αφορά την πυκνότητα ενέργειας ρ (μονάδες J/m^3) εντός μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία θερμοκρασίας T και διατυπώνεται ως $\rho(T) = aT^4$. $a = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^3} \approx 7.5657 \times 10^{-16} \frac{J}{m^3 K^4}$. [Δεξιά] Ο νόμος των Stefan-Boltzmann στη 2η διατύπωση αφορά την ενέργεια, η οποία εκπέμπεται ανά μονάδα επιφανείας ανά μονάδα χρόνου, δηλαδή την εκπεμπόμενη ισχύ ανά μονάδα επιφανείας ή αλλιώς την ένταση της ακτινοβολίας I (μονάδες $\frac{J}{m^2 s} = \frac{W}{m^2}$) και διατυπώνεται ως $I = \sigma T^4$. $\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} \approx 5.67 \times 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$.

το $\rho(\nu, T)$ σε όλες τις συχνότητες. Ας χρησιμοποιήσουμε και την Εξ. 2.8. Συνοπτικά

$$\rho(T) := \int_0^\infty \rho(\nu, T) d\nu = \int_0^\infty \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1} d\nu \stackrel{\text{Εξ.2.8}}{=} \frac{8\pi h}{c^3} \left(\frac{k_B T}{h}\right)^3 \frac{k_B T}{h} \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx}_{\pi^4/15} \Rightarrow$$

$$\rho(T) = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^3} T^4. \quad (2.22)$$

Δηλαδή,

$$\boxed{\rho(T) = aT^4} \quad (2.23)$$

πράγμα που αποτελεί τον νόμο των Stefan-Boltzmann στην 1η διατύπωση. Εδώ,

$$a = \frac{8\pi^5 k_B^4}{15c^3 h^3} \approx 7.5657 \times 10^{-16} \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{K}^4}. \quad (2.24)$$

Βεβαίως οι μονάδες του $\rho(T)$ είναι $[\rho(T)] = \text{J/m}^3$ (πυκνότητα ενέργειας). Ο νόμος των Stefan-Boltzmann στην 1η διατύπωση αποδίδεται στην Εικόνα 2.6 αριστερά. Άλλο εναλλακτικό σύμβολο για το $\rho(T)$ είναι $\dot{u}(T)$.

Ο νόμος Stefan-Boltzmann στην 2η διατύπωση αφορά την **ενέργεια που εκπέμπεται από το μέλαν σώμα ανά μονάδα επιφανείας ανά μονάδα χρόνου**, δηλαδή την εκπεμπόμενη ισχύ ανά μονάδα επιφανείας ή αλλιώς την ένταση της ακτινοβολίας I (μονάδες $\frac{\text{J}}{\text{m}^2 \text{s}} = \frac{\text{W}}{\text{m}^2}$). Ας θεωρήσουμε δεδομένο [10, 11, 12] από την κινητική θεωρία των αερίων ότι ο αριθμός κρούσεων των σωματιδίων (εδώ φωτονίων) στα τοιχώματα ανά μονάδα επιφανείας και ανά μονάδα χρόνου (μονάδες $1/\text{m}^2 \text{s}$) ή αλλιώς η ροή σωματιδίων (εδώ φωτονίων) είναι

$$\Phi_\sigma = \frac{n}{4} \langle v \rangle, \quad (2.25)$$

όπου n είναι η πυκνότητα σωματιδίων (μονάδες $1/\text{m}^3$) και $\langle v \rangle$ η μέση ταχύτητα των σωματιδίων (εδώ φωτονίων). Άρα, για τα φωτόνια,

$$\Phi_\gamma = \frac{n}{4} c, \quad (2.26)$$

Αλλά,

$$I = \langle h\nu \rangle \Phi_\gamma, \quad (2.27)$$

όπου

$$\langle h\nu \rangle = \frac{\rho}{n} \quad (2.28)$$

είναι η μέση τιμή της ενέργειας που μεταφέρει κάθε φωτόνιο. Από τις εξισώσεις 2.26, 2.27, 2.28 έπεται ότι

$$I = \frac{c}{4} \rho. \quad (2.29)$$

Οπότε, λόγω της Εξ. 2.23

$$I = \left(\frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} \right) T^4 \quad (2.30)$$

ή

$$\boxed{I = \sigma T^4} \quad (2.31)$$

πράγμα που αποτελεί τον νόμο Stefan-Boltzmann στη 2η και συνηθέστερη διατύπωση. Εδώ

$$\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} \approx 5.67 \times 10^{-8} \frac{\text{W}}{\text{m}^2 \text{K}^4}. \quad (2.32)$$

Ο νόμος των Stefan-Boltzmann στη 2η διατύπωση αποδίδεται στην Εικόνα 2.6 δεξιά. Δηλαδή, στη 2η διατύπωση, ο νόμος Stefan-Boltzmann λέει ότι η ολική εκπεμπόμενη ένταση ακτινοβολίας από ένα μέλαν σώμα σε θερμοκρασία T είναι ανάλογη προς την 4η δύναμη της θερμοκρασίας.

Ηλεκτρομαγνητικά ζητήματα ...

Για να αποδείξουμε τον νόμο του Planck, αλλά και για να αποδείξουμε τον κλασικό νόμο των Rayleigh-Jeans, χρειάζεται να γνωρίζουμε, μεταξύ άλλων, τους κανονικούς τρόπους ΗΜ πεδίου σε μια κοιλότητα και ειδικότερα τον στοιχειώδη αριθμό κανονικών τρόπων ανά στοιχειώδες διάστημα συχνότητας, $g(\nu) = dN/d\nu$. Οπότε, θα χρειαστεί να εξετάσουμε μερικά ηλεκτρομαγνητικά ζητήματα ...

2.4 Εξισώσεις Maxwell: Διατύπωση με όρους ολικού φορτίου και ολικού ρεύματος

Γνωρίζουμε το θεώρημα Gauss

$$\oint_{S=\partial V} \vec{\Delta} \cdot d\vec{a} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{\Delta} dV, \quad (2.33)$$

και το θεώρημα Stokes

$$\oint_{L=\partial S} \vec{\Delta} \cdot d\vec{\ell} = \int_S \vec{\nabla} \times \vec{\Delta} \cdot d\vec{a}. \quad (2.34)$$

Το $\vec{\Delta}$ δηλώνει κάποιο διανυσματικό πεδίο όπως, επί παραδείγματι, το ηλεκτρικό πεδίο ή τη μαγνητική επαγωγή, $S = \partial V$ δηλώνει μια επιφάνεια S , η οποία αποτελεί το σύνορο ενός όγκου V , $L = \partial S$ δηλώνει μια καμπύλη L , η οποία αποτελεί το σύνορο μιας επιφάνειας S . Ακόμα, $d\vec{\ell}$, $d\vec{a}$, και dV δηλώνουν στοιχειώδεις μήκος, στοιχειώδη επιφάνεια, στοιχειώδη όγκο, αντιστοίχως. Αυτά μας επιτρέπουν να μεταβούμε από τη διαφορική μορφή (differential form) των εξισώσεων Maxwell

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}} \quad \text{νόμος Gauss ηλεκτρισμού (1η)} \quad (2.35\alpha)$$

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0} \quad \text{νόμος Gauss μαγνητισμού (2η)} \quad (2.35\beta)$$

$$\boxed{\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}} \quad \text{νόμος Faraday επαγωγής (3η)} \quad (2.35\gamma)$$

$$\boxed{\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}} \quad \text{νόμος Ampère και διόρθωση Maxwell (4η)} \quad (2.35\delta)$$

μετά από πράξεις,

$$\oint_{S=\partial V} \vec{E} \cdot d\vec{a} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{E} dV = \int_V \frac{\rho}{\epsilon_0} dV = \frac{q_{\text{εντός}V}}{\epsilon_0} \Rightarrow \quad (2.36\alpha)$$

$$\oint_{S=\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{a} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{B} dV = 0 \Rightarrow \quad (2.36\beta)$$

$$\oint_{L=\partial S} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = \int_S \vec{\nabla} \times \vec{E} \cdot d\vec{a} = - \int_S \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \cdot d\vec{a} = - \frac{\partial}{\partial t} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{a} \Rightarrow \quad (2.36\gamma)$$

$$\oint_{L=\partial S} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \int_S \vec{\nabla} \times \vec{B} \cdot d\vec{a} = \int_S \left(\mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) \cdot d\vec{a} = \mu_0 \int_S \vec{J} \cdot d\vec{a} + \mu_0 \epsilon_0 \int_S \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \cdot d\vec{a} \Rightarrow \quad (2.36\delta)$$

στην ολοκληρωτική τους μορφή (integral form)

$$\boxed{\Phi_{E,S=\partial V} := \oint_{S=\partial V} \vec{E} \cdot d\vec{a} = \frac{q_{\text{εντός}V}}{\epsilon_0}} \quad \text{νόμος Gauss ηλεκτρισμού (1η)} \quad (2.37\alpha)$$

$$\boxed{\Phi_{B,S=\partial V} := \oint_{S=\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{a} = 0} \quad \text{νόμος Gauss μαγνητισμού (2η)} \quad (2.37\beta)$$

$$\boxed{\mathcal{E}_{\text{HE}\Delta} := \oint_{L=\partial S} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{\partial \Phi_{B,S}}{\partial t}} \quad \text{νόμος Faraday επαγωγής (3η)} \quad (2.37\gamma)$$

$$\boxed{\oint_{L=\partial S} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 I_{\text{διαπερνόν την } S} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \Phi_{E,S}}{\partial t}} \quad \text{νόμος Ampère και διόρθωση Maxwell (4η)} \quad (2.37\delta)$$

Στην 2.37δ, $I_{\text{διαπερνών την } S}$ είναι το ρεύμα το οποίο διαπερνά την επιφάνεια S .

Στο κενό όπου $\rho = 0$ και $\vec{J} = \vec{0}$ οι Εξ. 2.35α-2.35δ γίνονται

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0, \quad (2.38\alpha)$$

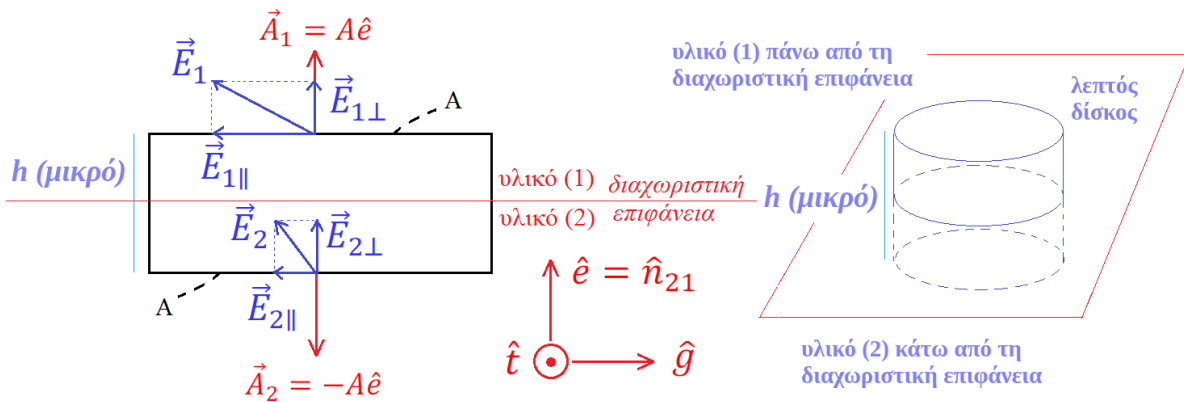
$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.38\beta)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.38\gamma)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (2.38\delta)$$

2.5 Συνοριακές συνθήκες σε διεπιφάνεια

Θα περιγράψουμε τις συνοριακές συνθήκες σε διεπιφάνεια, οι οποίες μπορούν να βρεθούν και σε ένα εγχειρίδιο ηλεκτρομαγνητισμού [13, 14].



Εικόνα 2.7: Συνοριακές συνθήκες για την 1η Εξίσωση Maxwell. Η κατεύθυνση των διανυσμάτων \vec{E}_1 και \vec{E}_2 έχει σχεδιαστεί επίτηδες αυθαίρετως. Ομοίως, για τη 2η Εξίσωση Maxwell, όπου το \vec{E} πρέπει να αντικατασταθεί με \vec{B} .

♣ Ας εφαρμόσουμε στην Εικόνα 2.7, όπου η κατεύθυνση των διανυσμάτων \vec{E}_1 και \vec{E}_2 έχει σχεδιαστεί επίτηδες αυθαίρετως, την 1η Εξίσωση Maxwell 2.37α.

$$\Phi_{E,S=\partial V} := \oint_{S=\partial V} \vec{E} \cdot d\vec{a} = \frac{q_{\text{εντός } V}}{\epsilon_0} \Rightarrow$$

$$\Phi_{E,\text{άνω κύκλου}} + \Phi_{E,\text{κάτω κύκλου}} + \Phi_{E,\text{παράπλευρη}} = \frac{q_{\text{εντός } V}}{\epsilon_0}.$$

$\Phi_{E,\text{άνω κύκλου}} = \vec{E}_1 \cdot \vec{A}_1 = E_{1\perp} A_1$ και $\Phi_{E,\text{κάτω κύκλου}} = \vec{E}_2 \cdot \vec{A}_2 = E_{2\perp} A_2$, όπου τα $E_{1\perp}, E_{2\perp}, A_1, A_2$ είναι αλγεβρικές τιμές. Οπότε,

$$\left. \begin{aligned} AE_{1\perp} - AE_{2\perp} + \int_{A_{\text{παράπλευρη}}} \vec{E} \cdot d\vec{a} &= \frac{\sigma \cdot A}{\epsilon_0} \\ \text{Αλλά όταν } h \rightarrow 0 \Rightarrow A_{\text{παράπλευρη}} &\rightarrow 0 \\ \Rightarrow \int_{A_{\text{παράπλευρη}}} \vec{E} \cdot d\vec{a} &\rightarrow 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} E_{1\perp} - E_{2\perp} &= \frac{\sigma}{\epsilon_0} \\ \text{και} & \\ \text{αν } \sigma = 0 \Rightarrow E_{1\perp} &= E_{2\perp} \end{aligned}$$

Παραπάνω ονομάσαμε $|\vec{A}_1| = |\vec{A}_2| = |\vec{A}| = A$. Οπότε, π.χ. αν έχουμε απλωμένη θετική επιφανειακή πυκνότητα φορτίου σ στη διεπιφάνεια, τότε τα $\vec{E}_{1\perp}$ και $\vec{E}_{2\perp}$ δείχνουν από τη διεπιφάνεια προς τα έξω. Συνοπτικά, εναλλακτικά, μπορούμε να γράψουμε

$$\boxed{E_{1\perp} - E_{2\perp} = \frac{\sigma}{\epsilon_0}} \quad (2.39\alpha)$$

$$\text{ή } \boxed{(\vec{E}_1 - \vec{E}_2) \cdot \hat{e} = \frac{\sigma}{\epsilon_0}} \quad \hat{e} = \hat{n}_{21} \text{ (από 2 προς το 1)} \quad (2.39\beta)$$

$$\text{ή } \boxed{(\vec{E}_1 - \vec{E}_2) \cdot \hat{n}_{21} = \frac{\sigma}{\epsilon_0}} \quad (2.39\gamma)$$

$$\text{ή } \boxed{(\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \cdot \hat{n}_{12} = \frac{\sigma}{\epsilon_0}} \quad \hat{n}_{12} \text{ (από 1 προς το 2)} \quad (2.39\delta)$$

◊ Ας εφαρμόσουμε, ομοίως, αλλάζοντας τα \vec{E} σε \vec{B} , στην Εικόνα 2.7 τη 2η Εξίσωση Maxwell 2.37β.

$$\Phi_{B,S=\partial V} := \oint_{S=\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{a} = 0.$$

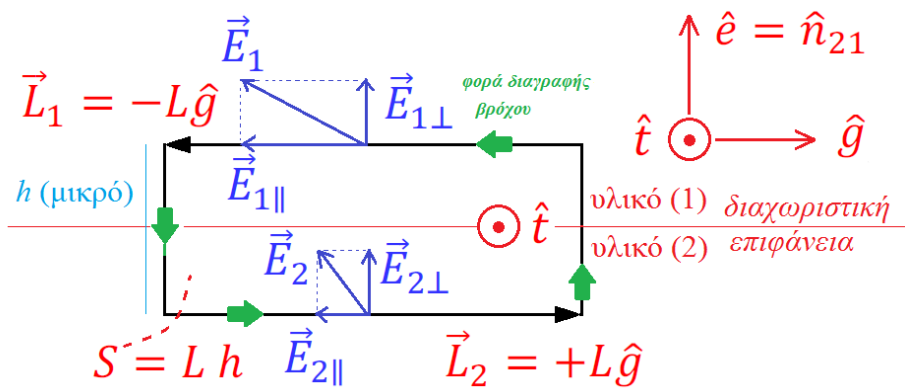
Ομοίως με προηγουμένως, καταλήγουμε στις εναλλακτικές γραφές

$$\boxed{B_{1\perp} = B_{2\perp}} \quad (2.40\alpha)$$

$$\text{ή } \boxed{(\vec{B}_1 - \vec{B}_2) \cdot \hat{e} = 0} \quad \hat{e} = \hat{n}_{21} \text{ (από 2 προς το 1)} \quad (2.40\beta)$$

$$\text{ή } \boxed{(\vec{B}_1 - \vec{B}_2) \cdot \hat{n}_{21} = 0} \quad (2.40\gamma)$$

$$\text{ή } \boxed{(\vec{B}_2 - \vec{B}_1) \cdot \hat{n}_{12} = 0} \quad \hat{n}_{12} \text{ (από 1 προς το 2)} \quad (2.40\delta)$$



Εικόνα 2.8: Συνοριακές συνθήκες για την 3η Εξίσωση Maxwell. Η κατεύθυνση των διανυσμάτων \vec{E}_1 και \vec{E}_2 έχει σχεδιαστεί αυθαίρετως. Εδώ ο βρόχος βρίσκεται στο επίπεδο (\hat{e}, \hat{g}) .

♡ Ας εφαρμόσουμε τώρα στην Εικόνα 2.8 την 3η Εξίσωση Maxwell 2.37γ.

$$\mathcal{E}_{\text{HE}\Delta} := \oint_{L=\partial S} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{\partial \Phi_{B,S}}{\partial t} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{array}{l}
 \vec{E}_1 \cdot \vec{L}_1 + \int_{\text{τιμήμα } h}^{\text{μικρό αριστερό}} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} + \vec{E}_2 \cdot \vec{L}_2 + \int_{\text{τιμήμα } h}^{\text{μικρό δεξιό}} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{\partial}{\partial t} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{a} \\
 \text{αλλά όταν } h \rightarrow 0 \Rightarrow S = hL \rightarrow 0 \Rightarrow \int_S \vec{B} \cdot d\vec{a} \rightarrow 0 \\
 \text{αλλά όταν } h \rightarrow 0 \Rightarrow \int_{\text{τιμήμα } h}^{\text{μικρό αριστερό}} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = 0 = \int_{\text{τιμήμα } h}^{\text{μικρό δεξιό}} \vec{E} \cdot d\vec{\ell}
 \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\vec{E}_1 \cdot \vec{L}_1 + \vec{E}_2 \cdot \vec{L}_2 = 0 \Rightarrow E_{1\parallel} L_1 + E_{2\parallel} L_2 = 0 \Rightarrow -E_{1\parallel} L + E_{2\parallel} L = 0 \Rightarrow E_{1\parallel} = E_{2\parallel}.$$

Παραπάνω ονομάσαμε $|\vec{L}_1| = |\vec{L}_2| = |\vec{L}| = L$, ενώ τα $E_{1\parallel}, E_{2\parallel}, L_1, L_2$ είναι αλγεβρικές τιμές. Επειδή

$$\vec{E}_1 \cdot \vec{L}_1 + \vec{E}_2 \cdot \vec{L}_2 = 0 \Rightarrow (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \cdot \hat{g} = 0.$$

Δηλαδή, όταν ο βρόχος βρίσκεται στο επίπεδο $(\hat{e}, \hat{g}) \Rightarrow$ η διαφορά $(\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \perp \hat{g}$.

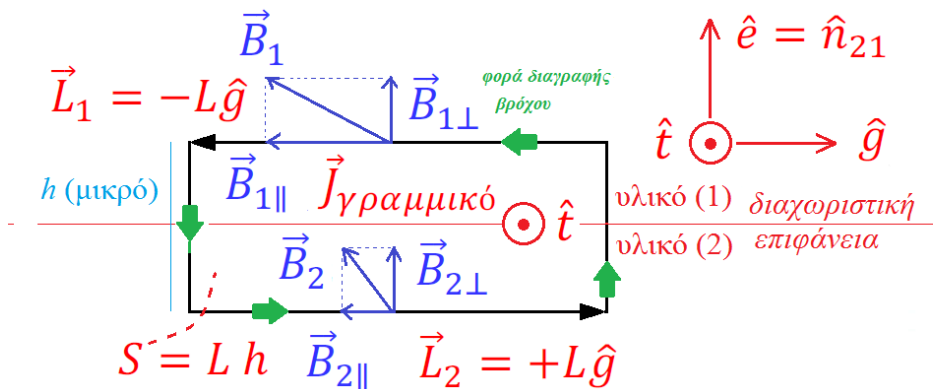
Ομοίως, όταν ο βρόχος βρίσκεται στο επίπεδο $(\hat{e}, \hat{t}) \Rightarrow$ η διαφορά $(\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \perp \hat{t}$.

Δηλαδή η διαφορά $(\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \perp$ διεπιφάνεια
 πράγμα που μπορεί να αποδοθεί ως $(\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \times \hat{e} = \vec{0}$.

Οπότε, συνοπτικά, εναλλακτικά, μπορούμε να γράψουμε

$$\boxed{E_{2\parallel} = E_{1\parallel}} \quad (2.41\alpha)$$

$$\boxed{(\vec{E}_2 - \vec{E}_1) \times \hat{e} = \vec{0}} \quad (2.41\beta)$$



Εικόνα 2.9: Συνοριακές συνθήκες για την 4η Εξίσωση Maxwell. Η κατεύθυνση των διανυσμάτων \vec{B}_1 και \vec{B}_2 έχει σχεδιαστεί αυθαιρέτως.

♣ Ας εφαρμόσουμε τώρα στην Εικόνα 2.9 την 4η Εξίσωση Maxwell 2.37δ.

$$\oint_{L=\partial S} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 I_{\text{διαπερνόν την } S} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \Phi_{E,S}}{\partial t} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned}
 & \vec{B}_1 \cdot \vec{L}_1 + \int_{\text{τιμήμα } h}^{\text{μικρό αριστερό}} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} + \vec{B}_2 \cdot \vec{L}_2 + \int_{\text{τιμήμα } h}^{\text{μικρό δεξιό}} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \\
 & \mu_0 J_{\text{γραμμικό διαπερνόν την } S} L + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \int_{S=Lh} \vec{E} \cdot d\vec{a} \\
 \text{αλλά όταν } h \rightarrow 0 \Rightarrow & \int_{\text{τιμήμα } h}^{\text{μικρό αριστερό}} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = 0 = \int_{\text{τιμήμα } h}^{\text{μικρό δεξιό}} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} \\
 \text{αλλά όταν } h \rightarrow 0 \Rightarrow S = Lh \rightarrow 0 \Rightarrow & \int_{S=Lh} \vec{E} \cdot d\vec{a} \rightarrow 0
 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$-B_{1\parallel} L + B_{2\parallel} L = \mu_0 J_{\text{γραμμικό διαπερνόν την } S} L.$$

Οπότε, συνοπτικά, εναλλακτικά, μπορούμε να γράψουμε

$$\boxed{(\vec{B}_2 - \vec{B}_1) \times \hat{e} = \mu_0 \vec{J}_{\text{γραμμικό διαπερνόν την } S}} \quad (2.42\alpha)$$

$$\boxed{B_{2\parallel} - B_{1\parallel} = \mu_0 J_{\text{γραμμικό διαπερνόν την } S}} \quad (2.42\beta)$$

και αν $J_{\text{γραμμικό διαπερνόν την } S} = 0 \Rightarrow B_{2\parallel} = B_{1\parallel}$. Παραπάνω τα $B_{1\parallel}, B_{2\parallel}$ είναι αλγεβρικές τιμές, ενώ ονομάσαμε $|\vec{L}_1| = |\vec{L}_2| = |\vec{L}| = L$. Οι μονάδες του $J_{\text{γραμμικό διαπερνόν την } S}$ είναι A/m. Δηλαδή στην Εξ. 2.42α ή 2.42β οι μονάδες είναι $T = (N/A^2)(A/m)$.

2.6 Ύπαρξη ΗΜ κυμάτων απουσία πυκνότητας φορτίου και πυκνότητας ρεύματος

Ας δούμε πώς μετατρέπονται οι Εξισώσεις Maxwell όταν $\rho = 0, \vec{J} = \vec{0}$.

$$\left. \begin{aligned}
 \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} & (1\eta) \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 & (2\eta) \\
 \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & (3\eta) \\
 \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & (4\eta)
 \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \\ \\ \xrightarrow[\vec{J}=\vec{0}]{\rho=0} \\ \\ \end{array} \left. \begin{aligned}
 \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= 0 & (1\eta') \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 & (2\eta') \\
 \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & (3\eta') \\
 \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} & (4\eta')
 \end{aligned} \right\} (2.43)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε τώρα την ταυτότητα

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\Delta}) = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\Delta}) - \nabla^2 \vec{\Delta}, \quad (2.44)$$

όπου ∇^2 η Λαπλασιανή (Laplacian), πρώτα για το \vec{E} και μετά για το \vec{B} .

• Για το \vec{E} :

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) - \nabla^2 \vec{E} \quad \begin{array}{l} (1\eta') \\ (3\eta') \end{array} \quad (2.45)$$

$$\vec{\nabla} \times \left(-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = -\nabla^2 \vec{E} \quad \Rightarrow \quad (2.46)$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = -\nabla^2 \vec{E} \quad (4\eta') \quad \Rightarrow \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) = \nabla^2 \vec{E} \quad \Rightarrow \quad (2.48)$$

$$\text{κυματική εξίσωση} \left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \vec{E} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \\ \nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \\ \left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \vec{E} = \vec{0} \\ \square \vec{E} = \vec{0} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} v_\phi = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = c \Rightarrow \\ \text{ή} \\ \text{ή} \end{array} \quad (2.49)$$

όπου \square είναι η λεγόμενη D' Alembertian.

• Για το \vec{B} :

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{B}) - \nabla^2 \vec{B} \quad \begin{array}{l} (2\eta') \\ (4\eta') \end{array} \quad (2.50)$$

$$\vec{\nabla} \times \left(\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) = -\nabla^2 \vec{B} \quad \Rightarrow \quad (2.51)$$

$$\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\vec{\nabla} \times \vec{E}) = -\nabla^2 \vec{B} \quad (3\eta') \quad \Rightarrow \quad (2.52)$$

$$\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \left(-\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \right) = -\nabla^2 \vec{B} \quad \Rightarrow \quad (2.53)$$

$$\text{κυματική εξίσωση} \left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}, \\ \nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} \\ \left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \vec{B} = \vec{0} \\ \square \vec{B} = \vec{0} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} v_\phi = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} = c \Rightarrow \\ \text{ή} \\ \text{ή} \end{array} \quad (2.54)$$

όπου \square είναι η λεγόμενη D' Alembertian.

2.7 Πεδία εντός ιδανικού αγωγού

Ένας καλός αγωγός (good conductor) είναι ένα υλικό το οποίο ανακλά το μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας του ΗΜ κύματος, το οποίο προσπίπτει στην επιφάνειά του [14]. Ορίζουμε ως ιδανικό αγωγό (ideal conductor) ένα υλικό το οποίο ανακλά όλη την ενέργεια του ΗΜ κύματος, το οποίο προσπίπτει στην επιφάνειά

του [14]. Επειδή η πυκνότητα ενέργειας ΗΜ κύματος είναι

$$U = \frac{\epsilon_0}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 = \frac{\epsilon_0}{2} [E^2 + c^2 B^2], \quad (2.55)$$

με μονάδες $[U] = \frac{J}{m^3}$, συνεπώς,

$$\boxed{\text{εντός ιδανικού αγωγού } \vec{E} = \vec{0} \text{ και } \vec{B} = \vec{0}} \quad (2.56)$$

2.8 Πεδία στο σύνορο ιδανικού αγωγού

Ας θυμηθούμε τις συνοριακές συνθήκες στη διεπιφάνεια μεταξύ υλικών και στη συνέχεια ας υποθέσουμε ότι το υλικό (1) είναι ιδανικός αγωγός, ενώ το υλικό (2) είναι κενό ή κατά προσέγγιση αέρας.

$$\left. \begin{aligned} E_{1\perp} - E_{2\perp} &= \frac{\sigma}{\epsilon_0} && \underline{\Gamma\Sigma\Sigma} \\ B_{1\perp} &= B_{2\perp} \\ E_{1\parallel} &= E_{2\parallel} \\ B_{2\parallel} - B_{1\parallel} &= \underbrace{\mu_0 J}_{\text{γραμμικό Διαπερνόν την } S} && \text{μονάδες [A/m]} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \quad (2.57)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{εάν} \\ \text{το υλικό (1) είναι ιδανικός αγωγός } (\vec{B}_1 = \vec{0} \text{ και } \vec{E}_1 = \vec{0}) \\ \text{το υλικό (2) είναι κενό ή αέρας} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \quad (2.58)$$

$$\left. \begin{aligned} -E_{2\perp} &= \frac{\sigma}{\epsilon_0} && \underline{\text{E}\Sigma\Sigma} \\ \boxed{B_{2\perp} = 0} \\ \boxed{E_{2\parallel} = 0} \\ B_{2\parallel} &= \mu_0 J_{\text{γραμμικό Διαπερνόν την } S} \end{aligned} \right\} \quad (2.59)$$

$\underline{\Gamma\Sigma\Sigma}$ σημαίνει γενικές συνοριακές συνθήκες και $\underline{\text{E}\Sigma\Sigma}$ σημαίνει ειδικές συνοριακές συνθήκες. Επίσης, ας ονομάσουμε $\underline{\text{E}\Sigma\Sigma}^*$ το μέρος των $\underline{\text{E}\Sigma\Sigma}$ που θα χρησιμοποιήσουμε περισσότερο.

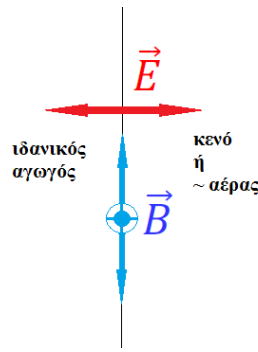
$$\left. \begin{aligned} \boxed{B_{2\perp} = 0} \\ \boxed{E_{2\parallel} = 0} \end{aligned} \right\} \underline{\text{E}\Sigma\Sigma}^* \quad (2.60)$$

2.9 Πεδία σε κοιλότητες

Μάθαμε παραπάνω ότι το μεγαλύτερο μέρος της ενέργειας ενός ΗΜ κύματος, το οποίο προσπίπτει στην επιφάνεια ενός καλού αγωγού ανακλάται, μάλιστα αν ο αγωγός είναι ιδανικός τότε όλη η ενέργεια ανακλάται. Συνεπώς, μπορούμε να αποθηκεύσουμε ΗΜ ενέργεια στη μορφή στάσιμων ΗΜ κυμάτων εντός κοιλότητας με τοιχώματα από ιδανικό (ή κατά προσέγγιση καλό) αγωγό.

Είδαμε επίσης τις $\underline{\text{E}\Sigma\Sigma}$ και εστίασαμε στις $\underline{\text{E}\Sigma\Sigma}^*$

$$\begin{aligned} B_{2\perp} &= 0, \\ E_{2\parallel} &= 0, \end{aligned}$$



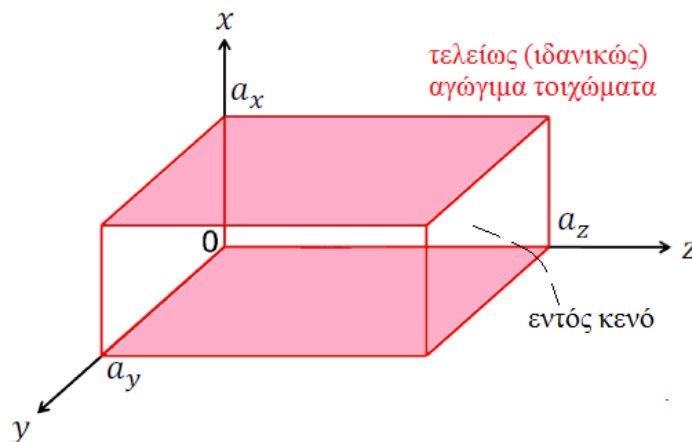
Εικόνα 2.10: Στην επιφάνεια ενός ιδανικού αγωγού, η κάθετη συνιστώσα του \vec{B} και η εφαπτομενική συνιστώσα του \vec{E} μηδενίζονται, οπότε τα πεδία μπορούν να έχουν μόνο κάποιους από τους προσανατολισμούς, οι οποίοι παρουσιάζονται στην παρούσα εικόνα.

δηλαδή, στην επιφάνεια ενός ιδανικού αγωγού, η κάθετη συνιστώσα του \vec{B} και η εφαπτομενική συνιστώσα του \vec{E} μηδενίζονται, όπως επιδεικνύεται στην Εικόνα 2.10.

Συνεπώς, οι δυνατές μορφές και συχνότητες των στασίμων κυμάτων, οι οποίες διατηρούνται στην κοιλότητα καθορίζονται από το σχήμα της κοιλότητας. Αυτό αποδίδεται ως

$$(\text{κανονικοί}) \text{ τρόποι } \left\{ \begin{array}{l} \text{μορφές} \quad \text{patterns} \\ \text{και} \quad \text{and} \\ \text{συχνότητες} \quad \text{frequencies} \end{array} \right\} (\text{normal}) \text{ modes}$$

2.10 Κανονικοί ΗΜ τρόποι εντός ορθογώνιας παραλληλεπίπεδης κοιλότητας



Εικόνα 2.11: Ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα με τελείως (ιδανικώς) αγωγήμα τοιχώματα. Εντός της κοιλότητας υπάρχει κενό ή κατά προσέγγιση αέρας. Για λόγους καθαρότητας του σχήματος, έχει χρωματιστεί μόνο η κάτω έδρα όπου $x = 0$ και η άνω έδρα όπου $x = a_x$, αλλά και οι έξι έδρες αποτελούνται από τελείως (ιδανικώς) αγωγήμα τοιχώματα.

Ας θεωρήσουμε την ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα της Εικόνας 2.11.

Εντός της κοιλότητας $\rho = 0, \vec{J} = \vec{0} \implies$

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad \underline{\text{ΚΕΕ}} \quad (2.61)$$

και

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} \quad \underline{\text{ΚΕΒ}} \quad (2.62)$$

ΚΕΕ σημαίνει κυματική εξίσωση για το \vec{E} και ΚΕΒ σημαίνει κυματική εξίσωση για το \vec{B} . Επειδή τα τοιχώματα της κοιλότητας είναι ιδανικώς αγωγίμα, θα πρέπει σε κάθε τοίχωμα να μηδενίζονται η κάθετη συνιστώσα του μαγνητικού πεδίου και η εφαπτομενική συνιστώσα του ηλεκτρικού πεδίου (συνθήκες ΕΣΣ*), δηλαδή:

$$B_{\perp} = 0 \quad (2.63\alpha)$$

$$E_{\parallel} = 0 \quad (2.63\beta)$$

Τα επίπεδα κύματα ελευθέρου χώρου δεν ικανοποιούν τις συνοριακές συνθήκες. Μπορούμε, όμως, να αναζητήσουμε λύσεις χωρισμού των μεταβλητών \vec{r}, t , δηλαδή της μορφής

$$\vec{E}(x, y, z, t) = \vec{E}_{\vec{r}}(x, y, z) e^{-i\omega t} \quad (2.64)$$

Η ΚΕΕ λόγω της Εξ. 2.64 γίνεται

$$e^{-i\omega t} \nabla^2 \vec{E}_{\vec{r}} = \frac{1}{c^2} (-i\omega)^2 e^{-i\omega t} \vec{E}_{\vec{r}} \implies$$

$$\nabla^2 \vec{E}_{\vec{r}} + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}_{\vec{r}} = \vec{0} \quad (2.65)$$

Στη συνέχεια, χωρίζουμε τις μεταβλητές x, y, z , εντός του \vec{r} . Μετά από αρκετές πράξεις [14] που θα παραλείψουμε εδώ, προκύπτει:

$$E_x = E_{x0} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} \implies \text{μηδενίζεται για } y = 0 \text{ και } z = 0 \quad (2.66)$$

$$E_y = E_{y0} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} \implies \text{μηδενίζεται για } x = 0 \text{ και } z = 0 \quad (2.67)$$

$$E_z = E_{z0} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t} \implies \text{μηδενίζεται για } x = 0 \text{ και } y = 0 \quad (2.68)$$

όπου

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (2.69)$$

Στην Εικόνα 2.11 έχει χρωματιστεί η κάτω έδρα όπου $x = 0$ και η άνω έδρα όπου $x = a_x$, αλλά και οι έξι έδρες αποτελούνται από τελειώς (ιδανικώς) αγωγίμα τοιχώματα. Όπως φαίνεται από τις εξισώσεις 2.66, 2.67, 2.68 στην κάτω έδρα το ηλεκτρικό πεδίο έχει μόνο x -συνιστώσα, δηλαδή είναι κάθετο σε αυτήν. Ομοίως προκύπτει ότι το ηλεκτρικό πεδίο έχει μόνο y -συνιστώσα στην οπίσθια έδρα και μόνο z -συνιστώσα στην αριστερή έδρα, είναι δηλαδή κάθετο και στις έδρες αυτές. Ομοίως θα πρέπει το ηλεκτρικό πεδίο να έχει στην άνω έδρα μόνο

x -συνιστώσα, στην μπροστινή έδρα μόνο y -συνιστώσα και στη δεξιά έδρα μόνο z -συνιστώσα, δηλαδή να είναι κάθετο και στις έδρες αυτές.

Επειδή η E_x πρέπει να μηδενίζεται και για $y = a_y$ και $z = a_z \Rightarrow$

$$\begin{aligned}\sin(k_y a_y) &= 0 \Rightarrow k_y a_y = m_y \pi, \\ \sin(k_z a_z) &= 0 \Rightarrow k_z a_z = m_z \pi.\end{aligned}$$

Επειδή η E_y πρέπει να μηδενίζεται και για $x = a_x$ και $z = a_z \Rightarrow$

$$\begin{aligned}\sin(k_x a_x) &= 0 \Rightarrow k_x a_x = m_x \pi, \\ \sin(k_z a_z) &= 0 \Rightarrow k_z a_z = m_z \pi.\end{aligned}$$

Επειδή η E_z πρέπει να μηδενίζεται και για $x = a_x$ και $y = a_y \Rightarrow$

$$\begin{aligned}\sin(k_x a_x) &= 0 \Rightarrow k_x a_x = m_x \pi, \\ \sin(k_y a_y) &= 0 \Rightarrow k_y a_y = m_y \pi.\end{aligned}$$

Συνοπτικά, στην κάτω και στην άνω έδρα το ηλεκτρικό πεδίο έχει μόνο x -συνιστώσα, δηλαδή είναι κάθετο σε αυτές, στην οπίσθια και στην μπροστινή έδρα το ηλεκτρικό πεδίο έχει μόνο y -συνιστώσα, δηλαδή είναι κάθετο σε αυτές, και στην αριστερή και στη δεξιά έδρα το ηλεκτρικό πεδίο έχει μόνο z -συνιστώσα, δηλαδή είναι κάθετο σε αυτές.

Επίσης, συνολικά προκύπτει

$$k_x = \frac{m_x \pi}{a_x}, \quad k_y = \frac{m_y \pi}{a_y}, \quad k_z = \frac{m_z \pi}{a_z}, \quad (2.70)$$

όπου $m_x, m_y, m_z \in \mathbb{Z}$.

Ακόμα, από την (1η') Εξίσωση Maxwell, $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \Rightarrow$

$$k_x E_{x0} + k_y E_{y0} + k_z E_{z0} = 0, \quad (2.71)$$

ενώ από την (3η') Εξίσωση Maxwell, $\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \Rightarrow$

$$B_x = \frac{i}{\omega} (E_{y0} k_z - E_{z0} k_y) \sin(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t}, \quad (2.72)$$

$$B_y = \frac{i}{\omega} (E_{z0} k_x - E_{x0} k_z) \cos(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t}, \quad (2.73)$$

$$B_z = \frac{i}{\omega} (E_{x0} k_y - E_{y0} k_x) \cos(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t}. \quad (2.74)$$

Αφήνουμε στον αναγνώστη - στην αναγνώστρια να ελέγξει αν το \vec{B} ικανοποιεί την ΕΣΣ* στα τοιχώματα, αλλά και τη (2η') Εξίσωση Maxwell, $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ και την (4η') Εξίσωση Maxwell, $\vec{\nabla} \times \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$.

Από τις Εξ. 2.69 και 2.70 θα μπορούσαμε να γράψουμε

$$\omega_{m_x, m_y, m_z} = c \sqrt{\left(\frac{m_x \pi}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{m_y \pi}{a_y}\right)^2 + \left(\frac{m_z \pi}{a_z}\right)^2}. \quad (2.75)$$

Για ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα,

$$\omega_{m_x, m_y, m_z} = \pi c \sqrt{\left(\frac{m_x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{m_y}{a_y}\right)^2 + \left(\frac{m_z}{a_z}\right)^2}, \quad (2.76)$$

για τετραγωνική παραλληλεπίπεδη κοιλότητα ($a_x = a_y = a'$),

$$\omega_{m_x, m_y, m_z} = \pi c \sqrt{\frac{m_x^2 + m_y^2}{a'^2} + \frac{m_z^2}{a_z}}, \quad (2.77)$$

και για κυβική κοιλότητα ($a_x = a_y = a_z = a$),

$$\omega_{m_x, m_y, m_z} = \frac{\pi c}{a} \sqrt{m_x^2 + m_y^2 + m_z^2}. \quad (2.78)$$

Μπορούμε και να πάρουμε $m_x, m_y, m_z \in \mathbb{N}$ (φυσικούς αριθμούς) απορροφώντας την αλλαγή προσήμου στα E_{x0}, E_{y0}, E_{z0} , δηλαδή, επιτρέποντας στα E_{x0}, E_{y0}, E_{z0} να πάρουν θετικές ή αρνητικές τιμές, τέτοιες που να συμφωνούν με τις συνοριακές συνθήκες. Στον Πίνακα 2.2 φαίνονται μερικά $a\omega/\pi c$, τα οποία προκύπτουν από την Εξ. 2.78 για την κυβική κοιλότητα, για διάφορες τιμές των m_x, m_y, m_z . Επίσης, σημειώνεται στη στήλη «πλάτος» αν προκύπτει μηδενικό ηλεκτρικό πεδίο από τις αντίστοιχες εξισώσεις 2.66, 2.67, 2.68 καθώς και μηδενικό μαγνητικό πεδίο από τις αντίστοιχες εξισώσεις 2.72, 2.73, 2.74.

Πίνακας 2.2: Τα $\frac{a\omega}{\pi c}$ που προκύπτουν από την εξίσωση 2.78 για την περίπτωση της κυβικής κοιλότητας, για διάφορες τιμές των φυσικών αριθμών m_x, m_y, m_z . Στη στήλη «πλάτος» σημειώνεται αν προκύπτει μηδενικό ηλεκτρικό πεδίο από τις αντίστοιχες εξισώσεις 2.66, 2.67, 2.68, καθώς και μηδενικό μαγνητικό πεδίο από τις αντίστοιχες εξισώσεις 2.72, 2.73, 2.74.

m_x	m_y	m_z	$a\omega/\pi c$	«πλάτος»
0	0	0	0	0
0	0	1	1	0
0	1	1	$\sqrt{2}$	$\neq 0$
1	1	1	$\sqrt{3}$	$\neq 0$
2	0	0	2	0
2	1	0	$\sqrt{5}$	$\neq 0$

2.11 Στοιχειώδης αριθμός κανονικών τρόπων ΗΜ πεδίου ανά στοιχειώδες διάστημα συχνότητας

Παρακάτω αποδεικνύουμε ότι

$$g(\nu) = \frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2 V}{c^3} \quad (2.79)$$

dN είναι ο στοιχειώδης αριθμός των τρόπων ταλάντωσης του ΗΜ πεδίου στο στοιχειώδες διάστημα συχνότητας $d\nu$, και V ο όγκος της κοιλότητας, η οποία είναι ένα τριδιάστατο κουτί. Δηλαδή, εδώ μας ενδιαφέρει η ποσότητα

$$g(\nu) = \frac{dN}{d\nu} = \frac{d(\text{αριθμός κανονικών τρόπων})}{d(\text{συχνότητα})}$$

$$[g(\nu)] = \frac{1}{\text{Hz}}$$

Η απόδειξη γίνεται παρακάτω για περιοδικές συνοριακές συνθήκες και για την ορθογώνια κοιλότητα της προηγούμενης Ενότητας 2.10.

2.11.1 1η περίπτωση: Περιοδικές Συνοριακές Συνθήκες

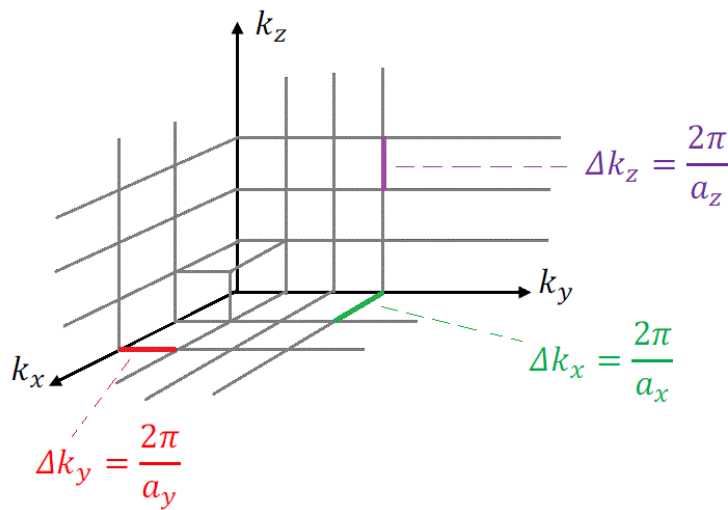
Ας υποθέσουμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο υπακούει σε περιοδικές συνοριακές συνθήκες, δηλαδή ότι

$$\left. \begin{aligned} \vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t + \phi)} \\ \vec{E}(0, t) &= \vec{E}_0 e^{i(-\omega t + \phi)} \\ \vec{E}((a_x, 0, 0), t) &= \vec{E}_0 e^{i(k_x a_x - \omega t + \phi)} \end{aligned} \right\} \Rightarrow e^{ik_x a_x} = 1 \Leftrightarrow k_x a_x = 2\pi n_x, \quad n_x \in \mathbb{Z}.$$

Δηλαδή,

$$\left. \begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi n_x}{a_x}, \quad n_x \in \mathbb{Z} \\ \text{ενώ, ομοίως, } k_y &= \frac{2\pi n_y}{a_y}, \quad n_y \in \mathbb{Z} \\ k_z &= \frac{2\pi n_z}{a_z}, \quad n_z \in \mathbb{Z} \end{aligned} \right\} \quad (2.80)$$

Όπως φαίνεται από την Εξ. 2.80, οι δυνατές τιμές του k είναι διακριτές. Το βήμα που ορίζει τη διακριτότητα στον k -χώρο είναι στον άξονα x το $\Delta k_x = \frac{2\pi}{a_x}$, στον άξονα y το $\Delta k_y = \frac{2\pi}{a_y}$, και στον άξονα z το $\Delta k_z = \frac{2\pi}{a_z}$. Ας ζωγραφίσουμε αυτά τα σημεία στον k -χώρο, στην Εικόνα 2.12. Προσοχή, στην Εικόνα 2.12 φαίνεται μόνο το ένα ογδοημόριο του k -χώρου, αλλά το k καλύπτει και τα 8 ογδοημόρια, δηλαδή όλο τον k -χώρο. Από την



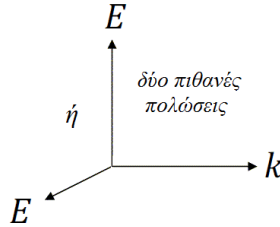
Εικόνα 2.12: Οι δυνατές τιμές του k είναι διακριτές και ο στοιχειώδης k -όγκος είναι $\frac{8\pi^3}{V}$, όπου V ο όγκος της κοιλότητας (Εξ. 2.80). Σε κάθε μία από τις 8 κορυφές του στοιχειώδους αυτού όγκου υπάρχει μία k -κατάσταση, η οποία όμως του ανήκει κατά το $1/8$, επειδή υπάρχουν 8 όμοιοι τέτοιοι στοιχειώδεις όγκοι.

Εξ. 2.80 προκύπτει ότι ο στοιχειώδης k -όγκος είναι $\frac{8\pi^3}{V}$, όπου V ο όγκος της κοιλότητας. Σε κάθε μία από τις 8 κορυφές του στοιχειώδους αυτού όγκου υπάρχει μία k -κατάσταση, η οποία όμως του ανήκει κατά το $1/8$, επειδή υπάρχουν 8 όμοιοι τέτοιοι στοιχειώδεις όγκοι. Ας θεωρήσουμε και τον στοιχειώδη όγκο από k έως $k + dk$, δηλαδή τον σφαιρικό φλοιό ακτίνας k και πάχους dk , ο οποίος είναι $4\pi k^2 dk$, και ας ονομάσουμε dN_k τον αριθμό των k -καταστάσεων στον σφαιρικό αυτό φλοιό. Οπότε,

$$\left. \begin{aligned} \text{σε } k\text{-χώρο } \frac{(2\pi)^3}{a_x a_y a_z} &= \frac{8\pi^3}{V} & \exists 8 \frac{1}{8} &= 1 \text{ } k\text{-κατάσταση} \\ \text{σε } k\text{-χώρο } k \rightarrow k + dk & \text{ δηλαδή } 4\pi k^2 dk & \exists dN_k & \text{ } k\text{-καταστάσεις} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} dN_k &= \frac{4\pi k^2 dk V}{8\pi^3} = \frac{1}{2\pi^2} k^2 dk V \\ c = \lambda\nu &= \frac{2\pi}{k} \nu \Rightarrow k = \frac{2\pi}{c} \nu \Rightarrow dk = \frac{2\pi}{c} d\nu \end{aligned} \right\} \Rightarrow dN_\nu = \frac{1}{2\pi^2} \frac{4\pi^2 \nu^2 2\pi d\nu V}{c^2 c} = \frac{4\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu.$$

Όμως, όπως επιδεικνύεται στην Εικόνα 2.13, υπάρχουν 2 πιθανές πολώσεις του ηλεκτρικού πεδίου κάθετα στο \vec{k} . Άρα, ο αριθμός των καταστάσεων είναι



Εικόνα 2.13: Υπάρχουν 2 πιθανές πολώσεις του ηλεκτρικού πεδίου κάθετα στο \vec{k} .

$$dN = \frac{8\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu, \quad (2.81)$$

οπότε,

$$g(\nu) = \frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi \nu^2 V}{c^3},$$

η οποία είναι η αποδεικτέα Εξ. 2.79.

2.11.2 2η περίπτωση: Ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα

Από την Εξ. 2.66, αν θεωρήσουμε ότι για λόγους συμμετρίας θα πρέπει το ηλεκτρικό πεδίο να δείχνει προς την ίδια μεριά της άνω και της κάτω επιφάνειας, δηλαδή $E_x(x=0) = -E_x(x=a_x)$, συνεπάγεται ότι $1 = -\cos(k_x a_x) \Rightarrow \cos(k_x a_x) = -1 \Rightarrow k_x = \frac{(2m_x+1)\pi}{a_x}$, $m_x \in \mathbb{Z}$. Οπότε, το βήμα, το οποίο ορίζει τη διακριτότητα στον k -χώρο είναι στον άξονα x το $\Delta k_x = \frac{2\pi}{a_x}$. Ομοίως και για τους άξονες y και z , οπότε ο στοιχειώδης k -όγκος είναι $\frac{8\pi^3}{V}$, όπου V ο όγκος της ορθογώνιας παραλληλεπίπεδης κοιλότητας. Οπότε, ομοίως με την προηγούμενη Υποενότητα 2.11.1, προκύπτει η αποδεικτέα Εξ. 2.79.

2.12 Απόδειξη του κλασικού νόμου των Rayleigh-Jeans από το θεώρημα ισοκατανομής ενέργειας και τον στοιχειώδη αριθμό κανονικών τρόπων ΗΜ πεδίου ανά στοιχειώδες διάστημα συχνότητας

Όπως φαίνεται αμέσως παρακάτω, το $\rho(\nu, T)$ είναι πυκνότητα ενέργειας ανά μονάδα όγκου και ανά μονάδα συχνότητας, ενώ το $\frac{g(\nu)}{V}$ είναι πυκνότητα κανονικών τρόπων ανά μονάδα όγκου και ανά μονάδα συχνότητας. Οπότε, αν έχουμε το $\frac{g(\nu)}{V}$, για να βρούμε το $\rho(\nu, T)$ θα πρέπει να πολλαπλασιάσουμε με τη μέση ενέργεια κάθε

κανονικού τρόπου \bar{E} .

$$\begin{aligned} g(\nu) &= \frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2 V}{c^3} & [g(\nu)] &= \frac{1}{\text{Hz}} = \text{s} \\ \frac{g(\nu)}{V} &= \frac{8\pi\nu^2}{c^3} & \left[\frac{g(\nu)}{V} \right] &= \frac{1}{\text{Hz m}^3} = \frac{\text{s}}{\text{m}^3} \\ \rho(\nu, T) &= \bar{E} \frac{g(\nu)}{V} & [\rho(\nu, T)] &= \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{Hz}} = \frac{\text{Js}}{\text{m}^3} \end{aligned}$$

Σύμφωνα με το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας (equipartition theorem) της κλασικής θεωρίας [10, 11, 12], σε θερμική ισορροπία αποδίδουμε μέση ενέργεια $\overline{E(T)} = \frac{1}{2}k_B T$ σε κάθε βαθμό ελευθερίας του δομικού λίθου του συστήματος. Οπότε, επί παραδείγματι, σε σύστημα N δομικών λίθων, όπου ο καθένας έχει M βαθμούς ελευθερίας, η ενέργεια είναι $\frac{NM}{2}k_B T$. Η μέση ενέργεια κάθε κανονικού τρόπου είναι

$$\overline{E(T)} = M \frac{1}{2}k_B T. \quad (2.82)$$

Έτσι,

$$\begin{aligned} \text{σε 3}\Delta \text{ ιδανικό αέριο} & \quad \bar{E}_{\text{KIN}} = \frac{3}{2}k_B T \Rightarrow \bar{E} = \frac{3}{2}k_B T \\ \text{σε 1}\Delta \text{ ιδανικό αέριο} & \quad \bar{E}_{\text{KIN}} = \frac{1}{2}k_B T \Rightarrow \bar{E} = \frac{1}{2}k_B T \\ \text{σε 1}\Delta \text{ απλό αρμονικό ταλαντωτή (AAT)} & \quad \bar{E}_{\text{ΔΥΝ}} = \bar{E}_{\text{KIN}} = \frac{1}{2}k_B T \Rightarrow \bar{E} = k_B T \end{aligned}$$

$\bar{E}_{\text{ΔΥΝ}}$ (\bar{E}_{KIN}) είναι η μέση δυναμική (κινητική) ενέργεια. Συνεπώς, θεωρώντας ότι έχουμε συλλογή AAT με $\bar{E} = k_B T$ προκύπτει

$$\boxed{\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T} \quad \text{νόμος Rayleigh-Jeans} \quad (2.83)$$

Επομένως, για $\nu \rightarrow \infty \Rightarrow \rho(\nu, T) \rightarrow \infty$, δηλαδή έχουμε μεγάλο πρόβλημα αυξάνοντας τη συχνότητα, διότι αυτή η συμπεριφορά αντίκειται εμφατικά στα πειραματικά δεδομένα. Ο απειρισμός αντιβαίνει στα πειραματικά δεδομένα, έχουμε «καταστροφική» ασυμφωνία με το πείραμα στις υψηλότερες συχνότητες. Αυτή η συμπεριφορά ονομάστηκε στο παρελθόν «υπεριώδης καταστροφή», διότι πρωτοπαρατηρήθηκε στην υπεριώδη περιοχή. Το θέμα θίχτηκε στην Ενότητα 2.2. Να σημειώσουμε πως, αν δεν υποθέταμε δύο βαθμούς ελευθερίας, ώστε να έχουμε $\bar{E} = \frac{2}{2}k_B T = k_B T$, αλλά M βαθμούς ελευθερίας, τότε το μόνο το οποίο θα άλλαζε θα ήταν μια σταθερά, διότι θα είχαμε $\bar{E} = \frac{M}{2}k_B T$ και θα καταλήγαμε στο $\rho(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{M}{2}k_B T$. Ουδόλως θα άλλαζε η εξόχως προβληματική συμπεριφορά ν^2 , η οποία, αυξάνοντας το ν , οδηγεί σε απειρισμό της $\rho(\nu, T)$.

2.13 Απόδειξη του νόμου Planck όπως περίπου την έκανε ο Planck

Θα ακολουθήσουμε εδώ τις υποθέσεις, τις οποίες αναγκάστηκε να κάνει ο Planck το 1900 προκειμένου να αποδείξει την εξίσωση, η οποία είναι σήμερα γνωστή ως «νόμος του Planck» [15] και η οποία συμφωνεί με τα πειραματικά δεδομένα για την ακτινοβολία μέλανος σώματος. Το πρόβλημα της ακτινοβολίας μέλανος σώματος είχε τεθεί τουλάχιστον ήδη από το 1859 από τον Kirchhoff. Ο Planck ασχολήθηκε με το πρόβλημα της ακτινοβολίας μέλανος σώματος ήδη από το 1894. Από το 1896 είχε διατυπωθεί ο νόμος του Wien, ο οποίος

παρέχει μια εξίσωση, η οποία απλώς τυχαίνει να ταιριάζει με τα πειραματικά δεδομένα σε υψηλές συχνότητες. Ο νόμος των Rayleigh-Jeans, ο οποίος προκύπτει από την κλασική φυσική, μπορεί να περιγράψει την ακτινοβολία μέλανος σώματος μόνο σε πάρα πολύ χαμηλές συχνότητες, βασικά, αποτυγχάνει παταγωδώς, όπως είδαμε μόλις προηγουμένως. Έλειπε, λοιπόν, μια συνεπής θεωρητική εξήγηση, η οποία να ισχύει για όλες τις συχνότητες.

Μετά από αρκετές αποτυχημένες προσπάθειες, ο Planck πρότεινε το 1900 μια απόδειξη, στην οποία υπέθεσε ότι η ΗΜ ενέργεια μπορεί να είναι **μόνο διακριτό** («κβαντισμένο») **πολλαπλάσιο της ποσότητας** $h\nu$, όπου h είναι αυτό που λέμε σήμερα «σταθερά του Planck» και ν είναι η συχνότητα της ακτινοβολίας. Περαιτέρω, χρησιμοποίησε τη **στατιστική κατανομή Boltzmann**. Για τις υποθέσεις αυτές δεν ήταν και πολύ χαρούμενος, αλλά του τις επέβαλε η ανάγκη να εξηγηθούν τα πειραματικά δεδομένα. Λίγο αργότερα, το 1905, ο Einstein [16] εξήγησε το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο υποθέτοντας ότι υπάρχουν αυτά τα κβάντα φωτός, ενώ η λέξη «φωτόνιο» πρωτογράφηκε μόλις το 1926 από τον G. N. Lewis [17].

Ο Planck αναγκάστηκε ουσιαστικά να εισαγάγει την έννοια του **resonator** («αντηχείο» ή «ταλαντωτής»), ο οποίος διαθέτει διακεκριμένες, δηλαδή όχι συνεχείς, αλλά εξαρτώμενες από έναν φυσικό αριθμό, n , με άλλα λόγια «κβαντισμένες», επιτρεπόμενες τιμές της ενέργειας του, E_n , για δεδομένη συχνότητα, ν . Κατόπιν, χρειάστηκε να υποθέσει πως η ενέργεια, η αντιστοιχούσα σε δεδομένη συχνότητα, ν , και θερμοκρασία, T , είναι στην πραγματικότητα μια μέση τιμή, $\overline{E}(\nu, T)$, των ενεργειών ενός μεγάλου αριθμού ταυτοσήμων resonators («αντηχείων» ή «ταλαντωτών»), ο καθένας εκ των οποίων βρίσκεται σε διαφορετική στάθμη, E_n , ενώ η πιθανότητα καταλήψεως των σταθμών, p_n , δίνεται από τη στατιστική Boltzmann.

Θα υποθέσουμε λοιπόν ότι η ΗΜ ενέργεια ενός resonator συχνότητας ν εντός της κοιλότητας μέλανος σώματος μπορεί να πάρει μόνο διακεκριμένες τιμές, είναι δηλαδή «κβαντισμένη» και μάλιστα ότι έχει τη μορφή

$$E_n = h\nu n, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.84)$$

Να τονιστεί ότι αν, αντί αυτής της σχέσης, θέσουμε $E_n = h\nu(n + \frac{1}{2})$, όπως γνωρίζουμε σήμερα για τον κβαντικό απλό αρμονικό ταλαντωτή, δεν προκύπτει ο νόμος του Planck... Να σημειωθεί ότι κλασικά, σύμφωνα με το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας, σε θερμική ισορροπία αποδίδουμε μέση ενέργεια $\overline{E}(T) = \frac{1}{2}k_B T$ σε κάθε βαθμό ελευθερίας του δομικού λίθου του συστήματος. Οπότε, επί παραδείγματι, σε σύστημα N δομικών λίθων, όπου ο καθένας έχει M βαθμούς ελευθερίας, η ενέργεια είναι $\frac{NM}{2}k_B T$. Αντιθέτως, εδώ θα υποθέσουμε ότι η μέση τιμή της ενέργειας κανονικού τρόπου εξαρτάται από τη θερμοκρασία αλλά και από τη συχνότητα

$$\overline{E}(\nu, T) = \sum_n E_n p_n, \quad (2.85)$$

όπου ας υποθέσουμε ότι η πιθανότητα να βρίσκεται ο δομικός λίθος στην ενέργεια E_n είναι p_n και αυτή δίνεται από τη στατιστική κατανομή Boltzmann, δηλαδή,

$$p_n = \frac{e^{-\frac{E_n}{k_B T}}}{Z}, \quad (2.86)$$

$$Z = \sum_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}}. \quad (2.87)$$

Z είναι η λεγόμενη «συνάρτηση επιμερισμού» (“partition function”). Ας ορίσουμε

$$x := \frac{h\nu}{k_B T}. \quad (2.88)$$

Από τις Εξ. 2.84, 2.85, 2.86, 2.87, 2.88 συνεπάγεται

$$\overline{E}(\nu, T) = \sum_n n x k_B T \frac{e^{-nx}}{Z} = \frac{k_B T x}{Z} \underbrace{\sum_n n e^{-nx}}_{\mathcal{A}}, \quad (2.89)$$

$$Z = \sum_n e^{-nx} = \frac{1}{1 - e^{-x}}, \quad (2.90)$$

διότι πρόκειται για το άθροισμα απείρων όρων της γεωμετρικής προόδου $a_n = e^{-nx}$ με αρχικό όρο $a_0 = e^{-0x} = 1$ και λόγο $\lambda = \frac{a_{n+1}}{a_n} = e^{-x} < 1$. [Χρησιμοποιήσαμε εδώ το αρχαϊκό γράμμα του ελληνικού αλφαβήτου σάμπι (σαν-πι από το σχήμα του πλαγίου π).] Ας προσπαθήσουμε τώρα να εκφράσουμε και το \mathcal{A} συναρτήσει του x . Από την Εξ. 2.90 προκύπτει

$$\frac{\partial Z}{\partial x} = - \sum_n n e^{-nx} = - \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2} \Rightarrow \quad (2.91)$$

$$\mathcal{A} = \frac{e^{-x}}{(1 - e^{-x})^2}. \quad (2.92)$$

Συνεπώς, από τις Εξ. 2.89, 2.90, 2.92 προκύπτει

$$\overline{E(\nu, T)} = k_B T x \frac{e^{-x}}{1 - e^{-x}} = k_B T x \frac{1}{e^x - 1}. \quad (2.93)$$

Κι αν θυμηθούμε πώς ορίστηκε το x (Εξ. 2.88), καταλήγουμε

$$\overline{E(\nu, T)} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}. \quad (2.94)$$

Κατ' αναλογίαν με ό,τι κάναμε στην Ενότητα 2.12,

$$\begin{aligned} g(\nu) &= \frac{dN}{d\nu} = \frac{8\pi\nu^2 V}{c^3} & [g(\nu)] &= \frac{1}{\text{Hz}} = \text{s} \\ \frac{g(\nu)}{V} &= \frac{8\pi\nu^2}{c^3} & \left[\frac{g(\nu)}{V} \right] &= \frac{1}{\text{Hz m}^3} = \frac{\text{s}}{\text{m}^3} \\ \rho(\nu, T) &= \overline{E(\nu, T)} \frac{g(\nu)}{V} & [\rho(\nu, T)] &= \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{Hz}} = \frac{\text{Js}}{\text{m}^3} \end{aligned}$$

Τώρα το $\overline{E(\nu, T)}$ εξαρτάται όχι μόνο από τη θερμοκρασία T αλλά και από τη συχνότητα ν . Μάλιστα, δίνεται από την Εξ. 2.94, άρα,

$$\rho(\nu, T) = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} \frac{8\pi\nu^2}{c^3}. \quad (2.95)$$

Επομένως, η πυκνότητα ενέργειας ανά μονάδα συχνότητας ΗΜ ακτινοβολίας μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία $\rho(\nu, T)$, με μονάδες $\frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{Hz}}$, είναι

$$\boxed{\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}} \quad (2.96)$$

Δηλαδή, καταλήξαμε στον νόμο του Planck (Εξ. 2.7).

2.14 Απόδειξη του νόμου μετατοπίσεως του Wien

Για τον νόμο του Planck στη μορφή $\rho(\nu, T)$, ο οποίος αποδείχθηκε προηγουμένως, θα βρούμε τη –συναρτήσει της θερμοκρασίας– συχνότητα, $\nu_0(T)$, στην οποία έχουμε μέγιστο της $\rho(\nu, T)$, δηλαδή την Εξ. 2.98 παρακάτω. Ας θυμηθούμε τη μορφή του νόμου του Planck μετά την αλλαγή μεταβλητής (Εξ. 2.8), δηλαδή θέτο- ντας

$$x = \frac{h\nu}{k_B T} \Rightarrow \nu = \frac{k_B T}{h} x \Rightarrow d\nu = \frac{k_B T}{h} dx.$$

Τότε προκύπτει η Εξ. 2.12,

$$\rho(x) = \rho_0 \frac{x^3}{e^x - 1},$$

όπου κατά την Εξ. 2.13,

$$\rho_0 = \frac{8\pi}{h^2} \left(\frac{k_B T}{c} \right)^3$$

με μονάδες

$$[\rho_0] = \frac{\text{Js}}{\text{m}^3} = \frac{\text{J}}{\text{m}^3 \text{Hz}}.$$

Εννοείται ότι στο πεδίο ορισμού της συναρτήσεως με προτασιακό τύπο $\rho(x)$ δεν ανήκει το $x = 0$, δηλαδή, δεν μιλάμε για μηδενική συχνότητα ή άπειρη θερμοκρασία. Επομένως,

$$\frac{d\rho}{dx} = \rho_0 \frac{3x^2(e^x - 1) - x^3 e^x}{(e^x - 1)^2} = \rho_0 x^2 \frac{3(e^x - 1) - x e^x}{(e^x - 1)^2}. \quad (2.97)$$

Αν ψάχνουμε ακρότατα, θα πρέπει να μηδενίζεται η παράγωγος $\frac{d\rho}{dx}$, οπότε,

$$\frac{d\rho}{dx} = 0 \Rightarrow 3(e^x - 1) - x e^x = 0 \Rightarrow (\text{επειδή } x \neq 0) \quad x_0 \sim 3.$$

x_0 συμβολίζουμε τη ζητούμενη ρίζα και ν_0 την αντίστοιχη συχνότητα, δηλαδή $x_0 = \frac{h\nu_0}{k_B T}$. Ακριβέστερα, με γραφική ή αριθμητική λύση, προκύπτει $x_0 \approx 2.821439$. Η γραφική λύση απεικονίζεται στην Εικόνα 2.14. Επομένως,

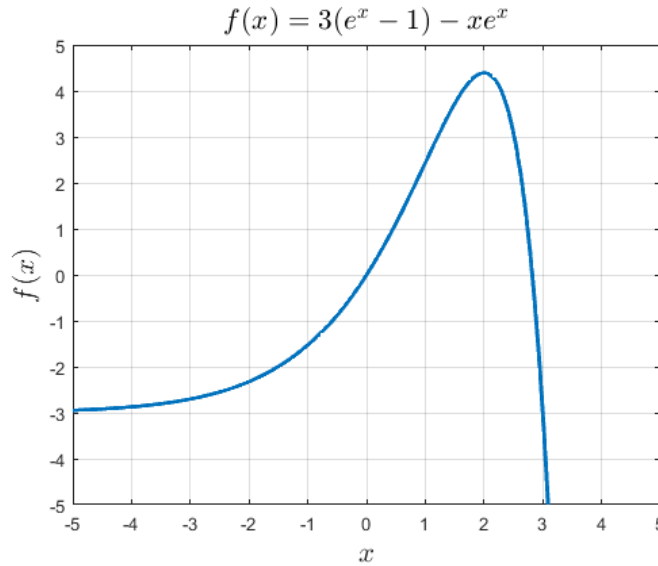
$$\nu_0 = \frac{k_B T x_0}{h} \approx \frac{k_B T \cdot 2.821439}{h} \approx (58.789 \text{ GHz/K}) T \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{\nu_0}{T} \approx 58.789 \text{ GHz/K}} \quad (2.98)$$

Η Εξ. 2.98 δείχνει πώς μετατοπίζεται η συχνότητα όπου έχουμε μέγιστο της $\rho(\nu, T)$ συναρτήσεως της θερμοκρασίας T , είναι δηλαδή ένας «νόμος μετατοπίσεως», μόνο που αναφέρεται σε συχνότητα και όχι σε μήκος κύματος, όπως ο συνήθης «νόμος μετατοπίσεως του Wien» της Εξ. 2.101, τον οποίο αποδεικνύουμε παρακάτω.

Στη συνέχεια, χρησιμοποιώντας τον νόμο του Planck συναρτήσεως του μήκους κύματος, $\rho(\lambda, T)$, στη μορφή της Εξ. 2.21, θα βρούμε το –συναρτήσει της θερμοκρασίας– μήκος κύματος, $\lambda_0(T)$, όπου έχουμε μέγιστο της $\rho(\lambda, T)$, δηλαδή την Εξ. 2.101 παρακάτω. Παραγωγίζοντας την Εξ. 2.21, έχουμε

$$\frac{d\rho}{d\psi} = \rho'_0 \frac{5\psi^4(e^\psi - 1) - \psi^5 e^\psi}{(e^\psi - 1)^2} = \rho'_0 \psi^4 \frac{5(e^\psi - 1) - \psi e^\psi}{(e^\psi - 1)^2}. \quad (2.99)$$



Εικόνα 2.14: Η γραφική λύση της εξίσωσης $3(e^x - 1) - xe^x = 0$. Η μία ρίζα είναι $x_0 = 0$, η οποία όμως δεν ανήκει στο πεδίο ορισμού της $\rho(x)$. Η άλλη ρίζα είναι $x_0 \approx 2.821439$.

Αν ψάχνουμε ακρότατα, θα πρέπει να μηδενίζεται η παράγωγος $\frac{d\rho}{d\psi}$, οπότε,

$$\frac{d\rho}{d\psi} = 0 \Rightarrow 5(e^\psi - 1) - \psi e^\psi = 0 \Rightarrow (\text{αφού } \psi \neq 0) \quad \psi_0 \sim 5.$$

ψ_0 συμβολίζουμε τη ζητούμενη ρίζα και λ_0 το αντίστοιχο μήκος κύματος, δηλαδή $\psi_0 = \frac{hc}{\lambda_0 k_B T}$. Ακριβέστερα, με γραφική ή αριθμητική λύση προκύπτει, $\psi_0 \approx 4.965114$. Η γραφική λύση απεικονίζεται στην Εικόνα 2.15. Επομένως,

$$\lambda_0 = \frac{hc}{\psi_0 k_B T} \approx \frac{hc}{4.965114 k_B T} \Rightarrow \quad (2.100)$$

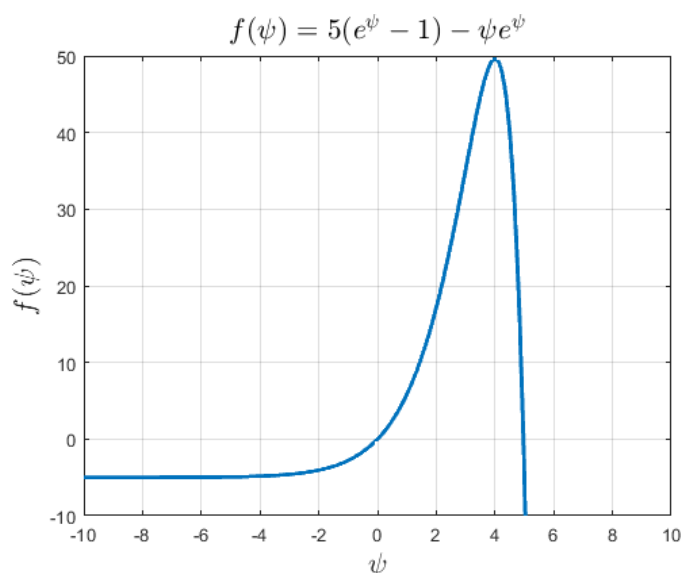
$$\boxed{\lambda_0 T \approx 2.897772 \times 10^{-3} \text{ mK}} \quad (2.101)$$

Η Εξ. 2.101 δείχνει πώς μετατοπίζεται το μήκος κύματος όπου έχουμε μέγιστο της $\rho(\lambda, T)$ συναρτήσει της θερμοκρασίας T , είναι δηλαδή ένας «νόμος μετατοπίσεως», ο λεγόμενος «νόμος μετατοπίσεως του Wien». Αυτή είναι η «σύγχρονη μορφή» του νόμου μετατοπίσεως του Wien (Wien displacement law). Ο νόμος παρήχθη από τον W. Wien το 1893 με τη διατύπωση ότι η ακτινοβολία μέλανος σώματος για διαφορετικές θερμοκρασίες του κορυφώνεται σε μήκος κύματος αντιστρόφως ανάλογο της απόλυτου θερμοκρασίας του, ήτοι:

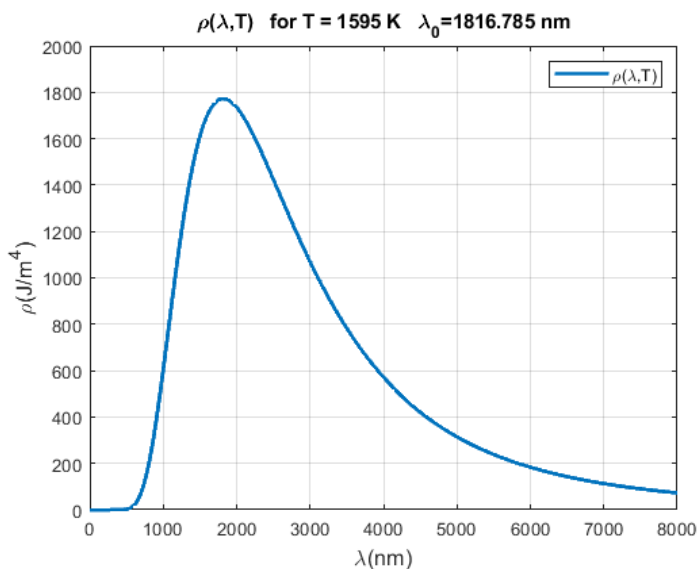
$$\lambda_0 T = \text{σταθερά}. \quad (2.102)$$

Παρόλο που αυτό μπορεί να αποδειχθεί από τον νόμο του Planck, όπως είδαμε παραπάνω, καταλήγοντας στην Εξ. 2.101, η συμπεριφορά αυτή ανακαλύφθηκε από τον W. Wien μερικά χρόνια πριν ο M. Planck αποδείξει τον νόμο του (Εξ. 2.12 ή Εξ. 2.18). Ο νόμος του Planck στη μορφή $\rho(\lambda, T)$ για $T = 1595 \text{ K}$, αλλά και το λ_0 του νόμου μετατοπίσεως του Wien φαίνονται στην Εικόνα 2.16. Εκλέξαμε αυτήν τη θερμοκρασία ως αναφορά στην Εικόνα 2 του ιστορικού άρθρου του W. W. Coblentz [18], η οποία περιέχει πειραματικά δεδομένα και σύγκριση με τον νόμο του Planck σε αυτήν τη θερμοκρασία.

Ο νόμος του Planck, $\rho(\lambda, T)$, για κάποιες θερμοκρασίες μέλανος σώματος φαίνεται στην Εικόνα 2.17. Παρατηρούμε τη μετατόπιση του φάσματος προς μικρότερα μήκη κύματος, καθώς αυξάνεται η απόλυτη θερμοκρασία του μέλανος σώματος T , πράγμα που εκφράζει ο νόμος μετατοπίσεως του Wien. Για τις θερμοκρασίες αυτές σημειώνονται και τα λ_0 όπου έχουμε κάθε φορά μέγιστο της $\rho(\lambda, T)$. Επιπλέον, φαίνεται και το

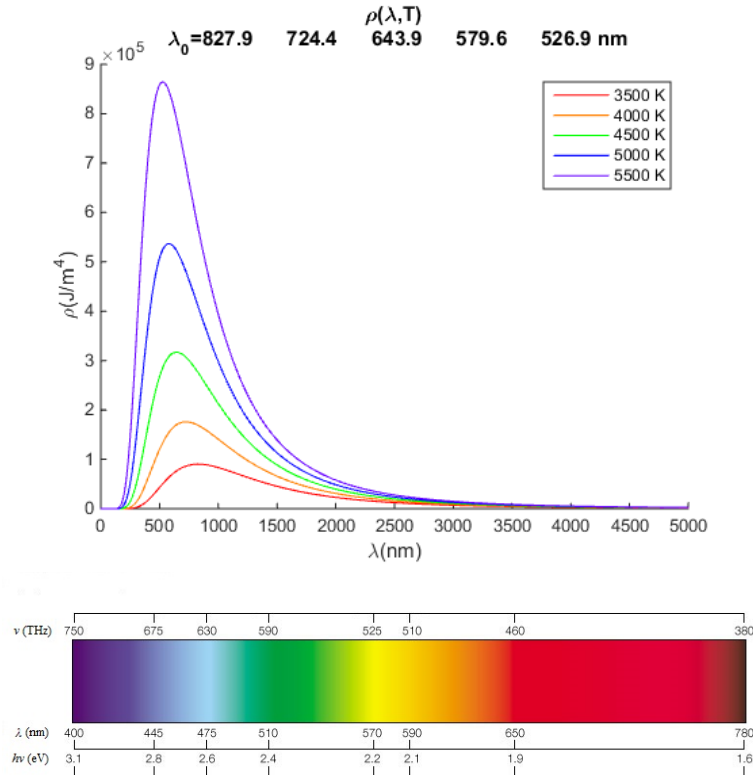


Εικόνα 2.15: Η γραφική λύση της εξισώσεως $5(e^\psi - 1) - \psi e^\psi = 0$. Η μία ρίζα είναι $\psi_0 = 0$, η οποία όμως δεν ανήκει στο πεδίο ορισμού της $\rho(\psi)$. Η άλλη ρίζα είναι $\psi_0 \approx 4.965114$.

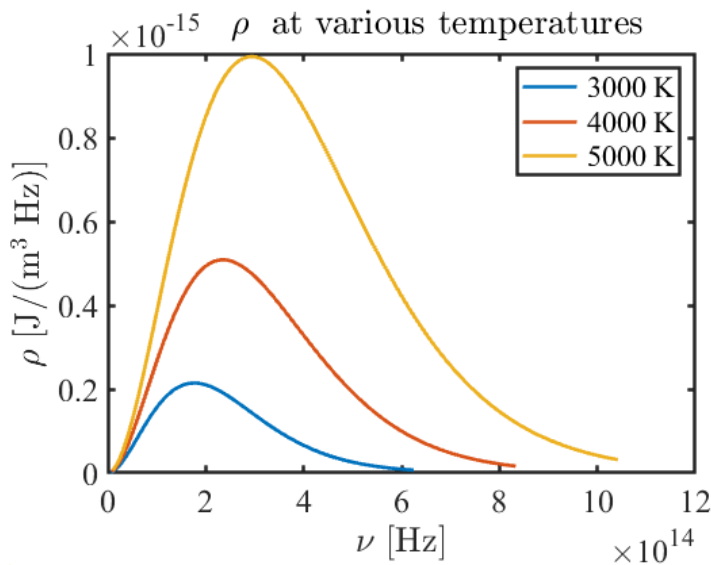


Εικόνα 2.16: Ο νόμος του Planck στη μορφή $\rho(\lambda, T)$ για $T = 1595 \text{ K}$, αλλά και το λ_0 του νόμου μετατοπίσεως του Wien. Η θερμοκρασία εκλέχτηκε ως αναφορά στο ιστορικό άρθρο του W. W. Coblentz [18].

ορατό ΗΜ φάσμα, το οποίο θα χρειαστεί σε κάποιες ασκήσεις με σώματα που εκπέμπουν ΗΜ ακτινοβολία, όπου υποθέτουμε ότι αυτά μπορούν να προσεγγιστούν με μέλανα σώματα κάποιας «ενεργού θερμοκρασίας». Ενεργός θερμοκρασία (effective temperature) ενός σώματος είναι η θερμοκρασία ενός μέλανος σώματος, το οποίο θα εξέπεμπε το ίδιο συνολικό ποσό ΗΜ ακτινοβολίας. Όμως, δεν εξυπακούεται ότι η κατανομή αυτής της ακτινοβολίας συναρτήσει του μήκους κύματος ή της συχνότητας θα ακολουθεί τον νόμο του Planck. Ο νόμος του Planck, $\rho(\nu, T)$, για κάποιες θερμοκρασίες μέλανος σώματος παρουσιάζεται στην Εικόνα 2.18. Παρατηρούμε τη μετατόπιση του φάσματος προς μεγαλύτερες συχνότητες, καθώς αυξάνεται η απόλυτη θερμοκρασία του μέλανος σώματος, T , πράγμα που εκφράζει ο νόμος μετατοπίσεως του Wien. Επίσης, παρατηρούμε πως γενικώς όλη η κατανομή $\rho(\nu, T)$ αυξάνεται, καθώς αυξάνουμε τη θερμοκρασία T .



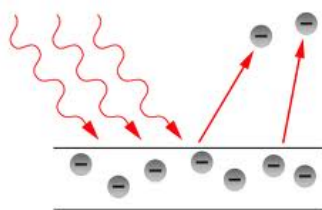
Εικόνα 2.17: [Άνω Εικόνα] Ο νόμος του Planck $\rho(\lambda, T)$ για κάποιες θερμοκρασίες μέλανος σώματος. Παρατηρούμε τη μετατόπιση του φάσματος προς μικρότερα μήκη κύματος, καθώς αυξάνεται η απόλυτη θερμοκρασία του μέλανος σώματος, T , πράγμα που εκφράζει ο νόμος μετατοπίσεως του Wien. Σημειώνονται και τα λ_0 όπου έχουμε κάθε φορά μέγιστο της $\rho(\lambda, T)$. Παρατηρούμε πως γενικώς όλη η κατανομή $\rho(\lambda, T)$ αυξάνεται, καθώς αυξάνουμε τη θερμοκρασία T . [Κάτω Εικόνα] Το ΗΜ ορατό φάσμα.



Εικόνα 2.18: Ο νόμος του Planck, $\rho(\nu, T)$, για κάποιες χαρακτηριστικές θερμοκρασίες μέλανος σώματος. Παρατηρούμε τη μετατόπιση του φάσματος προς μεγαλύτερες συχνότητες, καθώς αυξάνεται η απόλυτη θερμοκρασία του μέλανος σώματος, T , πράγμα που εκφράζει ο νόμος μετατοπίσεως του Wien. Επίσης, παρατηρούμε πως γενικώς όλη η κατανομή $\rho(\nu, T)$ αυξάνεται, καθώς αυξάνουμε τη θερμοκρασία T .

2.15 Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (ΦΗΦ) [photoelectric effect (PEE)] είναι η εκπομπή ηλεκτρονίων από κάποιο υλικό λόγω απορροφήσεως ενέργειας, την οποία μεταφέρει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, συνήθως στην περιοχή του ορατού ή του υπεριώδους. Τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια λέγονται και φωτοηλεκτρόνια. Παρατηρήθηκε από τον H. Hertz [19] το 1887, ο οποίος έδειξε μάλιστα ότι δημιουργούνται ευκολότερα ηλεκτρικοί σπινθήρες όταν τα ηλεκτρόδια φωτιστούν με υπεριώδες φως. Για να συμβεί το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο απαιτούνται φωτόνια με ενέργειες της τάξεως του 1 eV έως και 1 MeV (για στοιχεία υψηλού ατομικού αριθμού). Η μελέτη του φωτοηλεκτρικού φαινομένου οδήγησε σε αποδοχή της κβαντικής φύσεως του φωτός και του κυματοσωματιδιακού дуΐσμου (wave-particle duality). Το 1905, ο A. Einstein εξήγησε το ΦΗΦ υποθέτοντας ότι το φως αποτελείται από διακριτά κομμάτια (quanta) αντί για συνεχή κύματα [16]. Τα διακριτά αυτά κομμάτια ονομάζονται τώρα φωτόνια (photons), ένας όρος αποδιδόμενος στον G. N. Lewis [17], χρησιμοποιηθείς ευρέως πολύ αργότερα.



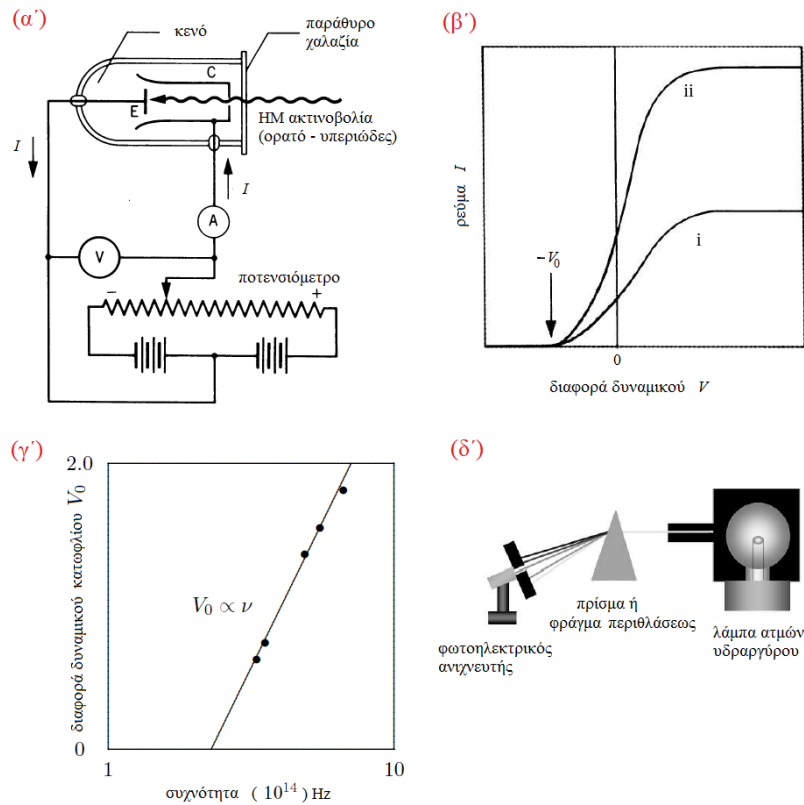
Εικόνα 2.19: Σχηματικά, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο.

Ο Einstein βασίστηκε στη θεωρία του Planck για την ακτινοβολία μέλανος σώματος και θεώρησε ότι η ενέργεια κάθε φωτονίου, E , είναι ανάλογη της συχνότητάς του, ν , με σταθερά αναλογίας τη μετέπειτα ονομασθείσα «σταθερά του Planck», h , δηλαδή ότι $E = h\nu$. Έτσι, εξήγησε το ΦΗΦ: ένα φωτόνιο με συχνότητα μεγαλύτερη κάποιας συχνότητας κατωφλίου (threshold frequency) διαθέτει την απαιτούμενη ενέργεια για να εκβάλει ένα ηλεκτρόνιο από το υλικό. Για την εξήγηση του ΦΗΦ, η οποία οδήγησε στην κβαντική επανάσταση, ο Einstein τιμήθηκε με το βραβείο Nobel Φυσικής το 1921. Πρότεινε λοιπόν ότι, υπό ορισμένες συνθήκες, το φως ισοδυναμεί με ροή σωματιδίων (κομμάτια φωτός ή αλλιώς κβάντα φωτός, τα οποία σήμερα ονομάζουμε φωτόνια). Ανακάλυψε αυτό το αποτέλεσμα αναλύοντας τη θερμοδυναμική της ΗΜ ακτινοβολίας μέλανος σώματος στην περιοχή Wien. Μεταξύ των συνεπειών της προτάσεώς του αυτής ήταν και η εξήγηση διαφόρων αινιγματικών χαρακτηριστικών του φωτοηλεκτρικού φαινομένου.

Όταν λοιπόν ορατή ή υπεριώδης ΗΜ ακτινοβολία προσπέσει σε μια μεταλλική επιφάνεια, εκτινάσσονται ηλεκτρόνια, εφ' όσον όμως η συχνότητα της ΗΜ ακτινοβολίας είναι αρκετά υψηλή. Για παράδειγμα, όταν μονοχρωματικό φως προσπέσει στην κάθοδο ενός σωλήνα εκκενώσεως, δημιουργείται ρεύμα μεταξύ καθόδου και ανόδου, λόγω της μετατοπίσεως των εκτινασόμενων από την κάθοδο ηλεκτρονίων προς την άνοδο. Στη διάταξη της Εικόνας 2.20, η διαφορά δυναμικού μεταξύ ανόδου και καθόδου μπορεί να γίνει θετική ή αρνητική. Όταν είναι θετική τα ηλεκτρόνια επιταχύνονται, οπότε το ρεύμα αυξάνεται, ενώ όταν είναι αρνητική επιβραδύνονται και το ρεύμα μειώνεται. Σε κάποια ικανά αρνητική διαφορά δυναμικού $-V_0$, το ρεύμα μηδενίζεται. Η V_0 ονομάζεται διαφορά δυναμικού ή τάση κατωφλίου.

Μία από τις αινιγματικές πλευρές του ΦΗΦ ήταν ότι ανεξαρτήτως της εντάσεως της προσπίπτουσας μονοχρωματικής ακτινοβολίας η διαφορά δυναμικού κατωφλίου είναι πάντοτε η ίδια. Η ύπαρξη μιας διαφοράς δυναμικού, η οποία καταφέρει να σταματά το ηλεκτρικό ρεύμα, υποδηλώνει ότι υπάρχει μια μέγιστη κινητική ενέργεια που μπορούν να αποκτήσουν τα εκτινασόμενα από την κάθοδο ηλεκτρόνια. Η διαφορά δυναμικού κατωφλίου V_0 επί το στοιχειώδες φορτίο e είναι ίση με τη μέγιστη αυτή κινητική ενέργεια. Δηλαδή

$$\frac{m_e u^2}{2} \Big|_{max} = eV_0. \quad (2.103)$$



Εικόνα 2.20: (α') Η διάταξη, η οποία χρειάζεται για τη μελέτη των ενεργειών των ηλεκτρονίων, τα οποία εκπέμπονται κατά το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (ΦΗΦ). (β') Η μορφή της χαρακτηριστικής καμπύλης ρεύματος τάσεως $I(V)$ για δύο διαφορετικές εντάσεις προσπίπτουσας ΗΜ ακτινοβολίας. Στην περίπτωση ii, η ένταση της ΗΜ ακτινοβολίας είναι μεγαλύτερη από την περίπτωση i. Παρατηρούμε ότι υπάρχει κάποια τιμή της τάσεως, $-V_0$, για την οποία το ρεύμα, I , μηδενίζεται και στις δύο περιπτώσεις, δηλαδή η V_0 είναι ανεξάρτητη της εντάσεως της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. (γ') Η σχέση $V_0(\nu)$. (δ') Η διάταξη, η οποία χρησιμοποιείται για την επίδειξη της συχνοτικής εξαρτήσεως στο ΦΗΦ.

Με άλλα λόγια, η κινητική ενέργεια, την οποία αποκτούν τα ηλεκτρόνια καθώς εκτινάσσονται από την επιφάνεια του μετάλλου έχει μια μέγιστη τιμή, η οποία είναι πάντοτε η ίδια, ανεξαρτήτως της εντάσεως της μονοχρωματικής ΗΜ ακτινοβολίας. Κάθε μέταλλο έχει ένα έργο εξαγωγής W_0 που σημαίνει ότι ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται εντός του μετάλλου πρέπει να πάρει τουλάχιστον ενέργεια W_0 για να ελευθερωθεί. Αν πάρει ακριβώς W_0 τότε «βγαίνει» με μηδενική ταχύτητα, ενώ, αν πάρει ενέργεια $E > W_0$ χρησιμοποιεί το επιπλέον ποσό ως κινητική ενέργεια. Δηλαδή,

$$E = W_0 + \frac{m_e u^2}{2}. \quad (2.104)$$

Ο Einstein [16], λοιπόν, υπέθεσε ότι το φως αποτελείται από «κομμάτια» ή αλλιώς «σωμάτια» ή αλλιώς «κβάντα» και πως το κάθε ένα κουβαλάει ενέργεια $h\nu$, οπότε αν υποθέσουμε ότι ένα ηλεκτρόνιο απορροφά την ενέργεια ενός φωτονίου, η προηγούμενη εξίσωση μπορεί να γραφτεί

$$h\nu = W_0 + \frac{m_e u^2}{2}. \quad (2.105)$$

Οπότε, εφαρμόζοντας την προηγούμενη σχέση για τη μέγιστη κινητική ενέργεια, θα έχουμε

$$h\nu = W_0 + eV_0. \quad (2.106)$$

Άρα,

$$V_0 = \frac{h}{e}\nu - \frac{W_0}{e}. \quad (2.107)$$

Συνεπώς, αν ζωγραφίσουμε τη διαφορά δυναμικού κατωφλίου, V_0 , συναρτήσει της συχνότητας, ν , θα πάρουμε μια ευθεία, δείτε την Εικόνα 2.20(γ'). Κατά τον Einstein, αύξηση της εντάσεως της μονοχρωματικής ΗΜ ακτινοβολίας σημαίνει αύξηση του αριθμού των ηλεκτρονίων με κινητική ενέργεια $\frac{m_e u^2}{2}$, αλλά όχι αύξηση της κινητικής αυτής ενέργειας. Στην Εικόνα 2.20(δ') παρουσιάζεται η διάταξη, η οποία χρησιμοποιείται για την επίδειξη της συχνοτικής εξαρτήσεως στο ΦΗΦ. Πηγή φωτός είναι μια λάμπα ατμών υδραργύρου, η οποία εκπέμπει 5 ισχυρές γραμμές από το κίτρινο έως το υπεριώδες, όπως φαίνεται στον Πίνακα 2.3.

Πίνακας 2.3: Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο με πηγή μια λάμπα ατμών υδραργύρου.

Γραμμή Εκπομπής	Συχνότητα ν ($\times 10^{14}$ Hz)	Διαφορά δυναμικού κατωφλίου V_0 (V)
υπεριώδης 2	8.22	1.807
υπεριώδης 1	7.41	1.546
γαλανή	6.88	1.359
πράσινη	5.49	0.738
κίτρινη	5.19	0.624

Η διάταξη εξασφαλίζει τον διαχωρισμό των γραμμών εκπομπής και ένας φωτοηλεκτρικός ανιχνευτής μετρά τις ενέργειες των εκτινασσομένων ηλεκτρονίων. Ο Πίνακας 2.3 δείχνει τα αποτελέσματα ενός τυπικού πειράματος, τα οποία ζωγραφίζονται στην Εικόνα 2.20(γ'). Σύμφωνα με την Εξ. 2.107, η κλίση της ευθείας είναι $\frac{h}{e}$. Σύμφωνα, λοιπόν, με τα προαναφερθέντα δεδομένα, έχουμε $\frac{h}{e} = (0.400 \pm 0.016) \times 10^{-14}$ Js/C, ενώ σήμερα γνωρίζουμε πως ο λόγος αυτός ισούται περίπου με $\frac{h}{e} = 0.414 \times 10^{-14}$ Js/C. Οι προβλέψεις της θεωρίας του Einstein επιβεβαιώθηκαν αργότερα, με σημαντικότερο σταθμό τα πειράματα του R. Millikan [20, 21]. Το δεύτερο [21] είναι πολύ πιο αναλυτικό.

Βιβλιογραφία

- [1] R. Loudon. *The Quantum Theory of Light*. 3rd edition. Oxford: Oxford University Press, 2000. ISBN: 0198501765.
- [2] R. Siegel και J. R. Howell. *Thermal Radiation Heat Transfer*. 4th edition. New York, London: Taylor και Francis, 2002. ISBN: 1560328398.
- [3] R. Van Zee και J. P. Looney. *Cavity-Enhanced Spectroscopies, Volume 40 (Experimental Methods in the Physical Sciences)*. Amsterdam: Academic Press, 2003. ISBN: 0124759874.
- [4] O. Lummer και F. Kurlbaum. “Der electrisch geglühte ‘absolut schwarze’ Körper und seine Temperaturmessung”. Στο: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gessellschaft* 17 (1898), σσ. 106–111.
- [5] O. Lummer και F. Kurlbaum. “Der elektrisch geglühte ‘schwarze’ Körper”. Στο: *Annalen der Physik* 310 (1901), σσ. 829–836. DOI: [10.1002/andp.19013100809](https://doi.org/10.1002/andp.19013100809).
- [6] K. Mizuno, J. Ishii, H. Kishida, Y. Hayamizu, S. Yasuda, D. N. Futaba, M. Yumura και K. Hata. “A black body absorber from vertically aligned single-walled carbon nanotubes”. Στο: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 106 (2009), σσ. 6044–6047. DOI: [10.1073/pnas.0900155106](https://doi.org/10.1073/pnas.0900155106).
- [7] Z.-P. Yang, L. Ci, J. A. Bur, S.-Y. Lin και P. M. Ajayan. “Experimental Observation of an Extremely Dark Material Made By a Low-Density Nanotube Array”. Στο: *Nano Letters* 8 (2008), σσ. 446–451. DOI: [10.1021/nl072369t](https://doi.org/10.1021/nl072369t).
- [8] J. J. Jackson, A. A. Puretzky, K. L. More, C. M. Rouleau, G. Eres και D. B. Geohegan. “Pulsed Growth of Vertically Aligned Nanotube Arrays with Variable Density”. Στο: *ACS Nano* 4 (2010), σσ. 7573–7581. DOI: [10.1021/nn102029y](https://doi.org/10.1021/nn102029y).
- [9] K. Cui και B. L. Wardle. “Breakdown of Native Oxide Enables Multifunctional, Free-Form Carbon Nanotube–Metal Hierarchical Architectures”. Στο: *ACS Applied Materials and Interfaces* 11 (2019), σσ. 35212–35220. DOI: [10.1021/acsami.9b08290](https://doi.org/10.1021/acsami.9b08290).
- [10] A. N. Matveev. *Molecular Physics*. Moscow: Mir Publishers, 1985. URL: <https://archive.org/details/MatveevMolecularPhysics>.
- [11] A. Kikoin και I. Kikoin. *Molecular Physics*. Moscow: Mir Publishers, 1978.
- [12] X. Τρικαλινός. *Μοριακή Φυσική Θερμοδυναμική*. Αθήνα: Ιδιωτική Έκδοση, 2009.
- [13] J. D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. 3rd edition. New York: Wiley, 1988. ISBN: 9780471309321.
- [14] A. Wolski. *Theory of electromagnetic fields*. 2014. arXiv: [1111.4354 \[physics.acc-ph\]](https://arxiv.org/abs/1111.4354).
- [15] M. Planck. “Zur Theorie des Gesetzes der Energieverteilung im Normalspektrum”. Στο: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft* 2 (1900), σσ. 237–245.
- [16] A. Einstein. “Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt”. Στο: *Annalen der Physik* 17 (1905), σσ. 132–148. DOI: [10.1002/andp.19053220607](https://doi.org/10.1002/andp.19053220607).
- [17] G. N. Lewis. “The conservation of photons”. Στο: *Nature* 118 (1926), σσ. 874–875. DOI: [10.1038/118874a0](https://doi.org/10.1038/118874a0).
- [18] W. W. Coblentz. “Constants of spectral radiation of a uniformly heated enclosure or so-called black body. II”. Στο: *Bulletin of the Bureau of Standards* 13 (1916), σσ. 459–477. URL: <https://archive.org/details/con134594771916284284unse>.
- [19] H. Hertz. “Ueber den Einfluss des ultravioletten Lichtes auf die electrische Entladung”. Στο: *Annalen der Physik* 267 (1887), σσ. 983–1000. DOI: [10.1002/andp.18872670827](https://doi.org/10.1002/andp.18872670827).

- [20] R. Millikan. “A Direct Determination of ‘h’”. Στο: *Physical Review* 4 (1914), σσ. 73–75. DOI: [10.1103/PhysRev.4.73.2](https://doi.org/10.1103/PhysRev.4.73.2).
- [21] R. Millikan. “A Direct Photoelectric Determination of Planck’s ‘h’”. Στο: *Physical Review* 7 (1916), σσ. 355–388. DOI: [10.1103/PhysRev.7.355](https://doi.org/10.1103/PhysRev.7.355).

ΔΙΕΡΓΑΣΙΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΣ ΦΩΤΟΝΙΟΥ - ΔΙΣΤΑΘΜΙΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ

Σύνοψη

Περιγράφονται οι μηχανισμοί (ή αλλιώς οι διεργασίες) αλληλεπίδρασης φωτονίου - δισταθμικού συστήματος (ΔΣ). Συνηθίζεται να λέγονται μηχανισμοί (ή διεργασίες) Einstein: αυθόρμητη εκπομπή, εξαναγκασμένη ή διεγερμένη εκπομπή, (εξαναγκασμένη ή διεγερμένη) απορρόφηση. Έτσι εισάγουμε και τους αντιστοίχους συντελεστές Einstein A και B . Από αυτούς τους μηχανισμούς, βεβαίως, ήταν η εξαναγκασμένη ή διεγερμένη εκπομπή, η οποία εισήχθη από τον Einstein. Οι άλλες διεργασίες ήταν γνωστές, αλλά κανείς έως τότε δεν τις είχε δει ως ολότητα, αν δεν κάνω λάθος. Εδώ αποδεικνύουμε τον νόμο του Planck, με μία απόδειξη περίπου όπως την έκανε ο ίδιος ο Einstein, με τη βοήθεια των διεργασιών αυτών και της στατιστικής Boltzmann. Ακολουθεί μία σύγκριση των στατιστικών Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac και Bose-Einstein, τις οποίες ακολουθούν κλασικά σωματίδια, φερμιόνια και μποζόνια, αντιστοίχως. Επίσης, συγκρίνουμε την αυθόρμητη με την εξαναγκασμένη εκπομπή, αλλά και τις διεγερμένες ή εξαναγκασμένες διεργασίες μεταξύ τους.

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Φυσικής και Μαθηματικών, καθώς και Στατιστικής Φυσικής.

3.1 Διεργασίες αλληλεπίδρασης φωτονίου - δισταθμικού συστήματος: (Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση, Αυθόρμητη Εκπομπή, Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή. Συντελεστές Einstein A και B

LASER είναι ένα ακρωνύμιο, το οποίο σημαίνει Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation, δηλαδή Ενίσχυση Φωτός μέσω Εξαναγκασμένης ή αλλιώς Διεγερμένης Εκπομπής Ακτινοβολίας. Την περίοδο 1916-1917 ο Einstein έβαλε τα θεωρητικά θεμέλια για το LASER μέσω επανεξαγωγής του νόμου του Planck για την ακτινοβολία μέλανος σώματος. Η επανεξαγωγή αυτή, δηλαδή η επαναπόδειξη, βασίζεται στις λεγόμενες σήμερα «διεργασίες» ή αλλιώς «μηχανισμούς» Einstein που περιγράφουν τις πιθανότητες (Εξαναγκασμένης ή αλλιώς Διεγερμένης) Απορροφήσεως, Αυθόρμητης Εκπομπής και Εξαναγκασμένης ή αλλιώς Διεγερμένης Εκπομπής. Αυτές είναι οι υπεισερχόμενες διεργασίες στην αλληλεπίδραση ΗΜ ακτινο-

βολίας - ύλης ή ακριβέστερα φωτονίου - δισταθμικού συστήματος ($\Delta\Sigma$), π.χ. εντός ατόμου, μορίου, κβαντικής τελείας, κέντρου χρώματος, νανοσωματιδίου κ.ο.κ..

Θα ασχοληθούμε λοιπόν με την αλληλεπίδραση ΗΜ ακτινοβολίας ή καλύτερα κβάντων φωτός (φωτονίων) με ένα δισταθμικό σύστημα, επί παραδείγματι, εστιάζοντας σε δύο ενεργειακές στάθμες ενός ατόμου, E_1 και $E_2 > E_1$. Θα θεωρήσουμε ότι το δισταθμικό αυτό σύστημα έχει ένα και μοναδικό ηλεκτρόνιο. Σε αυτήν την αλληλεπίδραση, κατά τον Einstein [1, 2], υπεισέρχονται τρεις διεργασίες: η Αυθόρμητη Εκπομπή (Spontaneous Emission), η Εξαναγκασμένη ή αλλιώς Διεγερμένη Απορρόφηση (Stimulated Absorption) και τέλος η Εξαναγκασμένη ή αλλιώς Διεγερμένη Εκπομπή (Stimulated Emission). Η τελευταία εισήχθη από τον Einstein [1, 2]. «Εξαναγκασμένη» ή αλλιώς «Διεγερμένη» χαρακτηρίζεται μία διεργασία, η οποία για να γίνει απαιτεί την επίδραση της ΗΜ ακτινοβολίας, δηλαδή ουσιαστικά φωτονίων, στο $\Delta\Sigma$, δηλαδή εξαναγκασμό ή αλλιώς διέγερση. «Αυθόρμητη» χαρακτηρίζεται μία διεργασία, η οποία δεν χρειάζεται την παρουσία της ΗΜ ακτινοβολίας, δηλαδή ουσιαστικά φωτονίων, στον χώρο όπου βρίσκεται το $\Delta\Sigma$. Στον όρο Εξαναγκασμένη ή αλλιώς Διεγερμένη Απορρόφηση το «Εξαναγκασμένη» ή αλλιώς «Διεγερμένη» συχνά παραλείπεται διότι εννοείται, δηλαδή, κάθε απορρόφηση είναι «εξαναγκασμένη» ή αλλιώς «διεγερμένη», αφού γίνεται μόνο παρουσία ΗΜ ακτινοβολίας. Θα εξετάσουμε παρακάτω αναλυτικά τι είναι η Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή, καθώς και οι άλλες δύο εμπλεκόμενες διεργασίες, δηλαδή η Αυθόρμητη Εκπομπή και η (Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση. Οι μηχανισμοί ή διεργασίες της αλληλεπίδρασης ΗΜ ακτινοβολίας - δισταθμικού συστήματος αναλύονται στα άρθρα [1, 2], τα οποία δημοσιεύτηκαν την περίοδο 1916-1917. Στα ίδια άρθρα, εκτός από τον ορισμό των διεργασιών, γίνεται και επανεξαγωγή του νόμου του Planck με βάση τις ανωτέρω διεργασίες. Συνοπτικά λοιπόν:

Stimulated Emission	Εξαναγκασμένη ή αλλιώς Διεγερμένη Εκπομπή	οφείλεται στο $\rho(\nu, T)$
Stimulated Absorption	Εξαναγκασμένη ή αλλιώς Διεγερμένη Απορρόφηση	οφείλεται στο $\rho(\nu, T)$
Spontaneous Emission	Αυθόρμητη Εκπομπή	

Ο Α. Einstein είχε ήδη (1905) εξηγήσει το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο [3], υποθέτοντας ότι υπάρχουν κβάντα φωτός με ενέργεια $E = h\nu$, τα οποία αργότερα ονομάστηκαν φωτόνια. [Μάλλον το 1926 πρωτοεισήχθη [4] η λέξη από τον G. N. Lewis.] Αξίζει να σημειωθεί εδώ ότι μόνο πολλές δεκαετίες μετά – με έμφαση στις δεκαετίες 1950-1960 – και κατόπιν διεθνών προσπαθειών πολλών επιφανών και μη φυσικών, έγινε δυνατόν να κατασκευαστούν τα πρώτα MASER (το «M» σημαίνει Microwaves, Μικροκύματα) και LASER. Το 1964 οι Charles Townes, Nikolay Basov και Aleksandr Prokhorov μοιράστηκαν το Βραβείο Νόμπελ Φυσικής «για θεμελιώδες έργο στο πεδίο της κβαντικής ηλεκτρονικής, έργο που οδήγησε στην κατασκευή ταλαντωτών και ενισχυτών βασισμένων στην αρχή λειτουργίας των MASER-LASER».

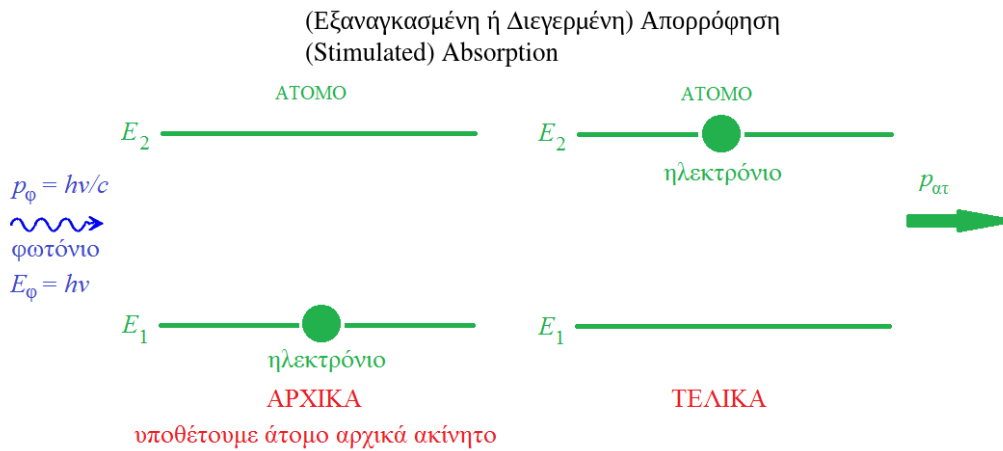
Υποθέτουμε ότι βρισκόμαστε εντός μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία. Οι μηχανισμοί ή διεργασίες αλληλεπίδρασης φωτονίων με δισταθμικό σύστημα εξηγούνται παρακάτω. Όπως θα φανεί στη συνέχεια, για τους λεγόμενους συντελεστές Einstein A_{21} , B_{12} , B_{21} , χρησιμοποιούμε το A στην αυθόρμητη διεργασία και το B σε εξαναγκασμένες διεργασίες. Στις ενότητες 3.1.1, 3.1.2, 3.1.3, ως παράδειγμα δισταθμικού συστήματος, εστιάζουμε σε δύο ενεργειακές στάθμες, E_1 και E_2 , ενός ατόμου.

3.1.1 (Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση

Η (Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση [(Stimulated) Absorption] ενός φωτονίου με ενέργεια E_ϕ και ορμή p_ϕ , μεταξύ δύο ενεργειακών σταθμών E_1 και E_2 ενός ατόμου, στις οποίες εστιάζουμε, παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.1. Ας υποθέσουμε πως αρχικώς το άτομο είναι ακίνητο. Επιπλέον, ας υποθέσουμε ότι η πιθανότητα, $dW_{\text{απορ}}^{\text{εξ}}$, να απορροφήσει το άτομο ένα φωτόνιο σε χρόνο dt δίνεται από τη σχέση

$$dW_{\text{απορ}}^{\text{εξ}} = B_{12}\rho(\nu, T)dt \quad (3.1)$$

δηλαδή, είναι ανάλογη του χρόνου dt και της πυκνότητας ενέργειας της ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, $\rho(\nu, T)$, με συντελεστή αναλογίας B_{12} , όπου ο δείκτης 12 σημαίνει ότι με την απορρόφηση το ηλεκτρόνιο θα μεταβεί από τη στάθμη 1 στη στάθμη 2.



Εικόνα 3.1: Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Απορρόφηση (Stimulated Absorption) ενός φωτονίου με ενέργεια E_ϕ και ορμή p_ϕ , συνοδευόμενη από μετάβαση ηλεκτρονίου μεταξύ δύο ενεργειακών σταθμών E_1 και E_2 ενός ατόμου.

Ας εφαρμόσουμε τη Διατήρηση της Ενέργειας και της Ορμής.

υποθέτουμε αμελητέο

Διατήρηση Ενέργειας $E_1 + h\nu = E_2 + \frac{p_{at}^2}{2m_{at}} \Rightarrow E_2 - E_1 = h\nu$

Διατήρηση Ορμής $p_\phi = p_{at} \Rightarrow p_{at} = \frac{h\nu}{c} = \frac{hc}{\lambda c} = \frac{h}{\lambda} = \frac{h2\pi}{2\pi\lambda} = \hbar k \Rightarrow p_{at} = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$

Ας ελέγξουμε τώρα αν πράγματι η κινητική ενέργεια του ατόμου μετά την απορρόφηση, $\frac{p_{at}^2}{2m_{at}}$, είναι αμελητέα σε σχέση με την ενέργεια του φωτονίου E_ϕ , υπολογίζοντας τον λόγο τους Λ .

$$\Lambda = \frac{\frac{p_{at}^2}{2m_{at}}}{E_\phi} = \frac{h^2}{\lambda^2 2m_{at} hc} = \frac{h}{2\lambda cm_{at}}$$

Για να μεγαλώσει το Λ θα πρέπει το m_{at} να μικρύνει. Οπότε, ας θέσουμε στο m_{at} τη μάζα του μικρότερου δυνατού ατόμου, δηλαδή του υδρογόνου.

$$\left. \begin{aligned} m_{at} &\approx m_p + m_e \\ m_p &\approx 1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \\ m_e &\approx 9.109 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \end{aligned} \right\} \Rightarrow m_{at} \approx 1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

Γράψαμε $m_{at} \approx m_p + m_e$ και όχι $m_{at} = m_p + m_e$, διότι υπάρχει κι ένα (μικρό) «έλλειμμα μάζας», δηλαδή η ενέργεια συνδέσεως του ηλεκτρονίου και του πρωτονίου στο άτομο του υδρογόνου. Ας πάρουμε ένα τυπικό πράσινο φωτόνιο με $\lambda \approx 500 \text{ nm}$. Τότε,

$$\Lambda = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot \text{s}}{2 \cdot 500 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot 1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}} \approx 1.320 \cdot 10^{-9}$$

Στο παράδειγμα, η κινητική ενέργεια του ατόμου είναι πράγματι αμελητέα σε σχέση με την ενέργεια του φωτονίου.

Ερώτηση: Για ποιο μήκος κύματος λ , στο άτομο του υδρογόνου, θα μπορούσε ο λόγος Λ να γίνει ίσος με 0.05;
 Απάντηση:

$$\Lambda = \frac{h}{2\lambda cm_{\text{ατ}}} = 0.05 \Rightarrow$$

$$\lambda = \frac{h}{2cm_{\text{ατ}}\Lambda} = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \text{Js} \cdot \text{s}}{2 \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m} \cdot 1.673 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot 0.05} \approx 13.2 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 13.2 \text{ fm}.$$

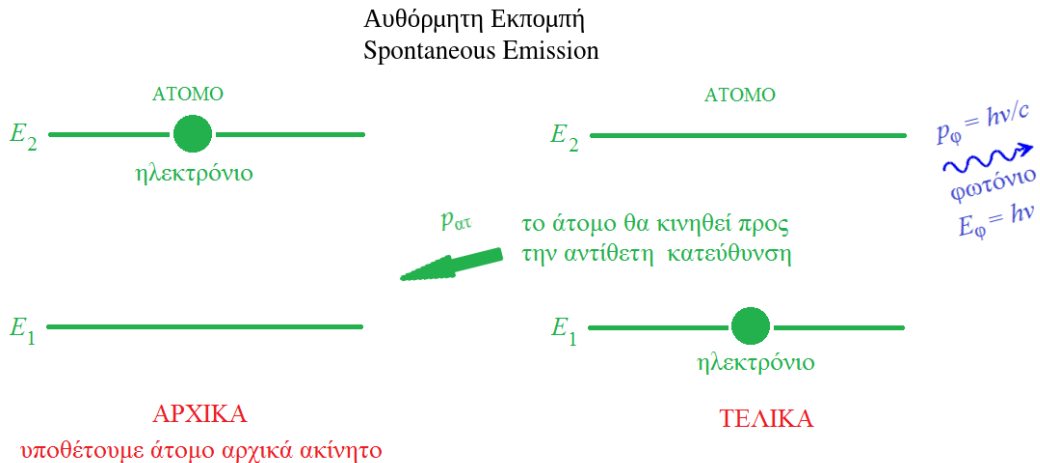
Αυτό είναι ένα εξαιρετικά λιλιπούτειο μήκος κύματος. Ακόμα και οι ακτίνες γ έχουν τυπικά μήκη κύματος κάτω από 10 pm ($10 \times 10^{-12} \text{ m}$), αλλά εδώ μιλάμε για fm, δηλαδή για 10^{-15} m . Ακόμα κι η διάμετρος του πυρήνα των ατόμων κυμαίνεται από $1.75 \text{ fm} = 1.75 \times 10^{-15} \text{ m}$ για το υδρογόνο (διάμετρος ενός πρωτονίου) έως $\approx 15 \text{ fm}$ για τα μαζικότερα άτομα, όπως το ουράνιο. Άρα, η υπόθεσή μας να θεωρήσουμε αμελητέα την κινητική ενέργεια του ατόμου σε σχέση με την ενέργεια του φωτονίου είναι σωστή σε όλο σχεδόν το ΗΜ φάσμα.

3.1.2 Αυθόρμητη Εκπομπή

Η Αυθόρμητη Εκπομπή παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.2. Ας υποθέσουμε ότι η πιθανότητα, $dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}}$, το άτομο να εκπέμψει φωτόνιο αυθορμήτως σε χρόνο dt δίνεται από

$$dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}} = A_{21} dt \tag{3.2}$$

δηλαδή είναι ανάλογη του χρόνου, dt , με συντελεστή αναλογίας A_{21} , όπου ο δείκτης 21 σημαίνει ότι με την εκπομπή του φωτονίου, το ηλεκτρόνιο θα μεταβεί από τη στάθμη 2 στη στάθμη 1. Σημειώνουμε ότι, αφού η



Εικόνα 3.2: Αυθόρμητη Εκπομπή (Spontaneous Emission) ενός φωτονίου με ενέργεια E_{ϕ} και ορμή p_{ϕ} , συνοδευόμενη από μετάβαση ηλεκτρονίου μεταξύ δύο ενεργειακών σταθμών E_2 και E_1 ενός ατόμου.

διεργασία αυτή είναι αυθόρμητη, η $dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}}$ δεν εξαρτάται από την πυκνότητα ενέργειας της ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, $\rho(\nu, T)$. Μπορούμε να ορίσουμε τον χρόνο ζωής (lifetime) της στάθμης 2 ως τον χρόνο, ο οποίος απαιτείται ώστε να εκπνευθεί αυθορμήτως το φωτόνιο με βεβαιότητα (οπότε το ηλεκτρόνιο μεταβαίνει από τη στάθμη 2 στη στάθμη 1). Ας τον ονομάσουμε $\tau_2 = \tau$. Τότε, από την Εξ. (3.2), προκύπτει $1 = A_{21}\tau$, συνεπώς

$$\tau_2 = \tau = \frac{1}{A_{21}}. \tag{3.3}$$

Ας εφαρμόσουμε τώρα τους νόμους Διατηρήσεως της Ενέργειας και της Ορμής. Ας υποθέσουμε ότι αρχικώς

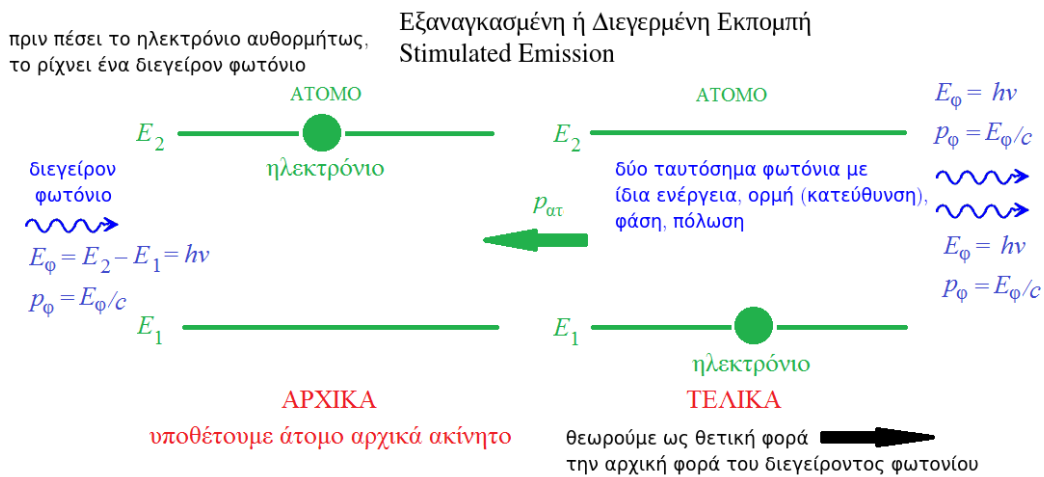
το άτομο ήταν ακίνητο. Άρα, με την εκπομπή φωτονίου, το άτομο θα κινηθεί προς την αντίθετη κατεύθυνση.

$$\begin{aligned} \text{Διατήρηση Ενέργειας} \quad E_2 &= E_1 + E_\phi + \frac{p_{\alpha\tau}^2}{2m_{\alpha\tau}} \\ \text{Διατήρηση Ορμής} \quad p_{\alpha\tau} + p_\phi &= 0 \end{aligned}$$

Επειδή η διαδικασία είναι αυθόρμητη, τα φωτόνια εκπέμπονται προς τυχαία κατεύθυνση, δηλαδή χωρίς κατευθυντικότητα (without directionality) και με τυχαία φάση, δηλαδή χωρίς συνοχή (incoherence), με άλλα λόγια πρόκειται για μη συνεκτικά φωτόνια (incoherent photons). **Κατευθυντικότητα (directionality)** σημαίνει ότι η ΗΜ ακτινοβολία εκπέμπεται προς συγκεκριμένη κατεύθυνση. **Συνοχή (coherence)** είναι μια σταθερή σχέση μεταξύ των φάσεων κυμάτων ίδιας συχνότητας. Επί παραδείγματι, δύο δέσμες φωτός είναι **συνεκτικές (coherent)** όταν η διαφορά φάσεως μεταξύ τους είναι σταθερή, ενώ είναι **μη συνεκτικές (incoherent)** εάν υπάρχει τυχαία ή μεταβαλλόμενη διαφορά φάσεως μεταξύ τους. **Σταθερές μορφές συμβολής** σχηματίζονται μόνο από **συνεκτικές δέσμες**, συνήθως μάλιστα δέσμες που προέρχονται από μία δέσμη, η οποία διαχωρίζεται σε δύο ή περισσότερες δέσμες. Ένα LASER, σε αντίθεση με μία φωτεινή πηγή πυρακτώσεως (incandescent light source), παράγει φωτεινή δέσμη, της οποίας οι συνιστώσες έχουν σταθερή σχέση φάσεως μεταξύ τους. Ομοίως, δύο φωτόνια που έχουν σταθερή σχέση φάσεων είναι συνεκτικά.

3.1.3 Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή

Η Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.3. Κατά τη διεργασία αυτή, πριν



Εικόνα 3.3: Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή (Stimulated Emission) ενός φωτονίου με ενέργεια E_ϕ και ορμή p_ϕ , συνοδευόμενη από μετάβαση ηλεκτρονίου μεταξύ δύο ενεργειακών σταθμών E_2 και E_1 ενός ατόμου. Ένα αρχικό διεγείρον φωτόνιο προκαλεί τη δημιουργία ενός ακόμα φωτονίου ιδίων χαρακτηριστικών (ενέργεια, ορμή, φάση, πόλωση).

πέσει το ηλεκτρόνιο αυθόρμητως από τη στάθμη 2 στη στάθμη 1, το ρίχνει ένα διεγείρον φωτόνιο. Ας υποθέσουμε ότι αρχικώς το άτομο είναι ακίνητο. Ας θεωρήσουμε θετική φορά την αρχική φορά του διεγείροντος φωτονίου. Επιπλέον, ας υποθέσουμε ότι η πιθανότητα, $dW_{εκπ}^{εξ}$, να εκπέμψει με αυτόν τον τρόπο το άτομο φωτόνιο σε χρόνο dt δίνεται από τη σχέση

$$dW_{εκπ}^{εξ} = B_{21}\rho(\nu, T)dt \tag{3.4}$$

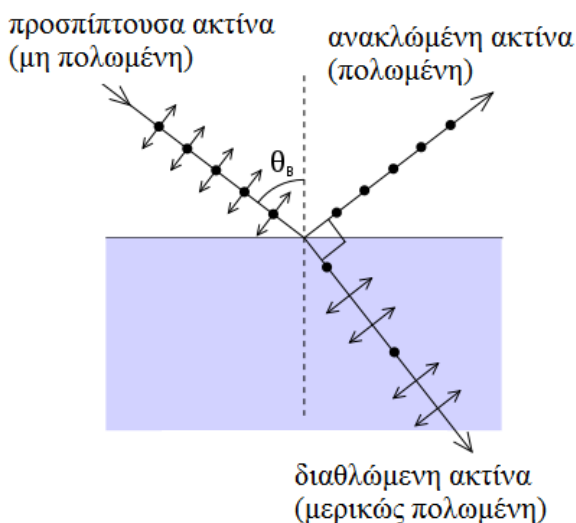
δηλαδή είναι ανάλογη του χρόνου dt και της πυκνότητας ενέργειας της ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, $\rho(\nu, T)$, με συντελεστή αναλογίας B_{21} , όπου ο δείκτης 21 σημαίνει ότι με την εκπομπή του φωτονίου, το ηλεκτρόνιο θα μεταβεί από τη στάθμη 2 στη στάθμη 1.

Τα δύο φωτόνια, δηλαδή το αρχικό διεγείρον φωτόνιο και το φωτόνιο, το οποίο εκπέμπεται από το άτομο, είναι ολόγρια, ταυτόσημα, δηλαδή, τα δύο φωτόνια έχουν ίδια ενέργεια (\rightarrow μονοχρωματικότητα), ορμή άρα και κατεύθυνση (\rightarrow κατευθυντικότητα), φάση (\rightarrow συνοχή), πόλωση (\rightarrow πολωμένο φως).

μονοχρωματικότητα	}	ιδιότητες που έχει το LASER
κατευθυντικότητα		
συνοχή		
πόλωση		

Παρόλο που τα δύο φωτόνια, τα οποία εμπλέκονται στη διεργασία της Εξαναγκασμένης ή Διεγερμένης Εκπομπής, έχουν την ίδια πόλωση, δηλαδή το ηλεκτρικό πεδίο των φωτονίων αυτών βρίσκεται στην ίδια διεύθυνση, στο ενεργό μέσο μίας διατάξεως LASER συμβαίνουν και οι άλλες δύο διεργασίες, η Αυθόρμητη Εκπομπή και η (Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση. Στην Αυθόρμητη Εκπομπή, όμως, τα εκπεμπόμενα φωτόνια έχουν τυχαία κατεύθυνση, φάση και πόλωση (ενώ η ενέργειά τους σε ένα αυστηρά δισταθμικό σύστημα είναι ίδια). Επομένως, συνολικά, τα φωτόνια, τα κυκλοφορούντα στο ενεργό μέσο μίας διατάξεως LASER, δεν έχουν συγκεκριμένη πόλωση. Βεβαίως, το φως, το οποίο εξέρχεται από μία διάταξη LASER, μπορεί να πολωθεί, επί παραδείγματι, με την τοποθέτηση ενός πολωτή (υλικό επιτρέπον μόνο φως ορισμένης πολώσεως να περάσει) ή και ενός «παραθύρου Brewster» στην έξοδο της διατάξεως LASER.

Όταν δέσμη φωτός συναντήσει τη διαχωριστική επιφάνεια δύο μέσων, το ανακλώμενο μέρος και το διερχόμενο (ή αλλιώς διαθλώμενο) μέρος της δέσμης περιγράφονται από τις Εξισώσεις Fresnel και εξαρτώνται από την πόλωση του προσπίπτοντος φωτός και τη γωνία προσπτώσεως. Έτσι, φως με p -πόλωση (ηλεκτρικό πεδίο πολωμένο στο επίπεδο, το οποίο ορίζουν η προσπίπτουσα ακτίνα και η κάθετη στη διεπιφάνεια) δεν θα ανακλαστεί εάν η γωνία προσπτώσεως είναι $\theta_B = \arctan(n_2/n_1)$, όπου n_1, n_2 οι δείκτες διαθλάσεως του αρχικού και του άλλου μέσου. Η εξίσωση αυτή είναι γνωστή ως νόμος του Brewster και η γωνία θ_B ως γωνία Brewster. Αναφερόμαστε αναλυτικά στις Εξισώσεις Fresnel και στη γωνία Brewster στην Ενότητα 12.1



Εικόνα 3.4: Η γωνία Brewster.

και στην εκπομπή πολωμένης δέσμης στην Ενότητα 12.3. Στην πράξη, το φως κάποιων διατάξεων LASER είναι σε μεγάλο βαθμό πολωμένο (π.χ. LASER αερίου), ενώ το φως κάποιων άλλων διατάξεων LASER (π.χ. LASER διόδου) είναι σε μικρότερο βαθμό πολωμένο. Οι διατάξεις LASER έχουν κάποια κοιλότητα, περιορίζουσα το ενεργό μέσο, πράγμα που δημιουργεί ανταγωνισμό μεταξύ των ΗΜ τρόπων ταλαντώσεως αλλά και των πολώσεων. Εν τέλει, ο τρόπος και η πόλωση με τις μικρότερες απώλειες υπερισχύουν. Αλλά, υπάρχουν και LASER πολλών τρόπων ή πολώσεων.

Ας σημειωθεί ότι:

- Τα περί ίδιας φάσεως, πολώσεως δεν υπάρχουν στα άρθρα του Einstein [1, 2] ούτε παίζουν ρόλο στην εκεί εξαγωγή του νόμου του Planck, την οποία δείχνουμε και στη συνέχεια.
- Τα φωτόνια είναι μποζόνια, άρα δύο ή περισσότερα φωτόνια μπορούν να έχουν ίδια ενέργεια, ορμή (άρα και κατεύθυνση), φάση.
- Χρειάζεται η υπόθεση ότι το αρχικό διεγείρον φωτόνιο, ενέργειας $E_\phi = E_2 - E_1 = h\nu$, δεν παθαίνει τίποτε κατά τη διάρκεια της Εξαναγκασμένης ή Διεγερμένης Εκπομπής.
- Θα μπορούσαμε να πούμε ότι το αρχικό διεγείρον φωτόνιο καθορίζει τη φάση και την πόλωση του εκπεμπομένου φωτονίου, όπως σε μία εξαναγκασμένη ή διεγερμένη ταλάντωση ο διεγέρτης καθορίζει τη φάση και την πόλωση της εξαναγκασμένης ή διεγερμένης ταλαντώσεως.

Ας εφαρμόσουμε τώρα τη Διατήρηση της Ενέργειας και της Ορμής. Ας υποθέσουμε ότι αρχικώς το άτομο ήταν ακίνητο. Σύμφωνα με τα όσα είπαμε έως τώρα

$$\begin{aligned} \text{Διατήρηση Ενέργειας} \quad E_2 + E_\phi &= 2E_\phi + E_1 + \frac{p_{\alpha\tau}^2}{2m_{\alpha\tau}} \quad \swarrow \text{μικρό} \\ \text{Διατήρηση Ορμής} \quad \vec{p}_\phi &= 2\vec{p}_\phi + \vec{p}_{\alpha\tau} \end{aligned}$$

Μπορούμε, βεβαίως, να θεωρήσουμε δοκιμαστικά ότι τα δύο φωτόνια ίσως είχαν διαφορετική ενέργεια και ορμή, δηλαδή να γράψουμε κάτι σαν

$$\begin{aligned} \text{Διατήρηση Ενέργειας} \quad E_2 + \cancel{E_\phi} &= E_1 + \cancel{E_\phi} + E'_\phi + \frac{p_{\alpha\tau}^2}{2m_{\alpha\tau}} \Rightarrow \\ E'_\phi &= E_2 - E_1 = E_\phi \\ \text{τα φωτόνια έχουν ίδια ενέργεια} \end{aligned}$$

Ας θεωρήσουμε θετική την αρχική φορά του διεγείροντος φωτονίου, οπότε $p_\phi > 0$.

$$\text{Διατήρηση Ορμής} \quad \vec{p}_\phi = \cancel{\vec{p}_\phi} + \vec{p}'_\phi + \vec{p}_{\alpha\tau} \Rightarrow \vec{p}'_\phi = -\vec{p}_{\alpha\tau}$$

Αν υποθέσουμε ότι το διεγείρον φωτόνιο καθορίζει κατεύθυνση του νέου φωτονίου, τότε

$$p'_\phi > 0 \quad p'_\phi = \frac{E'_\phi}{c} = \frac{E_\phi}{c} = p_\phi \Rightarrow \text{τα φωτόνια έχουν ίδια ορμή.}$$

Συνοπτικά, επειδή τα φωτόνια έχουν ίδια ενέργεια, το εξερχόμενο φως θα έχει μονοχρωματικότητα, και επειδή τα φωτόνια έχουν ίδιας κατευθύνσεως ορμή, το φως θα έχει κατευθυντικότητα.

3.2 Εξαγωγή του νόμου του Planck από τις διεργασίες εκπομπής και απορροφήσεως και τη στατιστική Boltzmann. Σχέση συντελεστών Einstein A και B

Ας θεωρήσουμε την αλληλεπίδραση ΗΜ πεδίου και ύλης σε θερμοδυναμική ισορροπία, οπότε η θερμοκρασία $T =$ σταθερή. Ας ονομάσουμε N_i τον πληθυσμό της στάθμης i , δηλαδή τον μέσο αριθμό ατόμων με το ηλεκτρόνιο στη στάθμη i , ο οποίος θα υποθέσουμε ότι υπακούει στην κατανομή Boltzmann, η οποία είναι

- (1) με ίδια στατιστικά βάρη (απλούστερη μορφή) (2) με διαφορετικά στατιστικά βάρη (γενικότερη μορφή)

$$N_i = N_{\text{ολ}} \underbrace{e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}_{p_i} \quad N_i = N_{\text{ολ}} \underbrace{g_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}_{p_i}$$

ή

$$Z = \sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \quad Z = \sum_i g_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$$

Εδώ p_i είναι η πιθανότητα καταλήψεως της στάθμης i . Αυτή ορίζεται με τη βοήθεια της **συναρτήσεως επιμερισμού** (partition function), Z , η οποία παίζει κεντρικό ρόλο στην περιγραφή των στατιστικών ιδιοτήτων ενός συστήματος σε θερμοδυναμική ισορροπία (δείτε ένα σύγγραμμα στατιστικής φυσικής, π.χ. το [5]). Αφού υποθέσαμε θερμοδυναμική ισορροπία, θα έχουμε ίσες μεταβολές του πληθυσμού των σταθμών σε χρόνο dt , δηλαδή ο αριθμός των ατόμων στα οποία τα ηλεκτρόνια μεταβαίνουν από την 1 στη 2 θα ισούται με τον αριθμό των ατόμων στα οποία τα ηλεκτρόνια μεταβαίνουν από τη 2 στην 1, δηλαδή,

$$dN_{1 \rightarrow 2} = dN_{2 \rightarrow 1}. \quad (3.5)$$

Ο $dN_{1 \rightarrow 2}$ θα ισούται με τον πληθυσμό N_1 επί την πιθανότητα μεταβάσεως από την 1 στη 2 στον χρόνο dt , πιθανότητα η οποία αφορά την (Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη) Απορρόφηση και δίνεται από την Εξ. 3.1. Ο $dN_{2 \rightarrow 1}$ θα ισούται με τον πληθυσμό N_2 επί την πιθανότητα μεταβάσεως από τη 2 στην 1 στον χρόνο dt , πιθανότητα η οποία αφορά την Αυθόρμητη Εκπομπή, η οποία δίνεται από την Εξ. 3.2 και την Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή, η οποία δίνεται από την Εξ. 3.4. Δηλαδή,

$$N_1 dW_{\text{απορ}}^{\text{εξ}} = N_2 (dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}} + dW_{\text{εκπ}}^{\text{εξ}}). \quad (3.6)$$

(1) Αρχικά, ας κάνουμε πράξεις με ίδια στατιστικά βάρη. Λόγω των Εξ. 3.1, 3.2, 3.4, η Εξ. 3.6 γίνεται

$$N_{\text{ολ}} \frac{e^{-\frac{E_1}{k_B T}}}{Z} B_{12} \rho(\nu, T) dt = N_{\text{ολ}} \frac{e^{-\frac{E_2}{k_B T}}}{Z} (A_{21} dt + B_{21} \rho(\nu, T) dt) \Rightarrow$$

$$B_{12} e^{-\frac{E_1}{k_B T}} \rho(\nu, T) - B_{21} e^{-\frac{E_2}{k_B T}} \rho(\nu, T) = A_{21} e^{-\frac{E_2}{k_B T}} \Rightarrow$$

$$\rho(\nu, T) = \frac{A_{21} e^{-\frac{E_2}{k_B T}}}{B_{12} e^{-\frac{E_1}{k_B T}} - B_{21} e^{-\frac{E_2}{k_B T}}}.$$

Γνωρίζουμε, όμως, δείτε π.χ. την Εικόνα 2.18, πως

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \rho(\nu, T) = \infty \Rightarrow$$

$$\frac{A_{21}}{B_{12} - B_{21}} = \infty \Rightarrow B_{12} = B_{21} := B$$

$$A_{21} := A.$$

Άρα,

$$\rho(\nu, T) = \frac{\frac{A}{B}}{e^{\frac{(E_2 - E_1)}{k_B T}} - 1}.$$

Συγκρίνοντας με τον νόμο του Planck (ή και διαστατικά με τον νόμο του Wien) έχουμε

$$\text{έως τώρα: } \rho(\nu, T) = \frac{\frac{A}{B}}{e^{\frac{E_2-E_1}{k_B T}} - 1} \quad \text{νόμος Planck: } \rho(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Άρα,

$$\frac{A}{B} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \quad (3.7)$$

$$E_2 - E_1 = h\nu \quad (3.8)$$

(2) Τώρα ας κάνουμε πράξεις με διαφορετικά στατιστικά βάρη. Λόγω των Εξ. 3.1, 3.2, 3.4, η Εξ. 3.6 γίνεται

$$\begin{aligned} N_{\text{ολ}} \frac{g_1 e^{-\frac{E_1}{k_B T}}}{Z} B_{12} \rho(\nu, T) dt &= N_{\text{ολ}} \frac{g_2 e^{-\frac{E_2}{k_B T}}}{Z} \left(A_{21} dt + B_{21} \rho(\nu, T) dt \right) \Rightarrow \\ \left(g_1 e^{-\frac{E_1}{k_B T}} B_{12} - g_2 e^{-\frac{E_2}{k_B T}} B_{21} \right) \rho(\nu, T) &= g_2 e^{-\frac{E_2}{k_B T}} A_{21} \Rightarrow \\ \rho(\nu, T) &= \frac{g_2 A_{21} e^{-\frac{E_2}{k_B T}}}{g_1 B_{12} e^{-\frac{E_1}{k_B T}} - g_2 B_{21} e^{-\frac{E_2}{k_B T}}} \end{aligned}$$

Γνωρίζουμε, όμως, πως

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow \infty} \rho(\nu, T) &= \infty \Rightarrow \\ \frac{g_2 A_{21}}{g_1 B_{12} - g_2 B_{21}} &= \infty \Rightarrow \\ g_1 B_{12} &= g_2 B_{21} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Οπότε, συγκρίνοντας με τον νόμο του Planck

$$\text{έως τώρα } \rho(\nu, T) = \frac{\frac{A_{21}}{B_{21}}}{e^{\frac{E_2-E_1}{k_B T}} - 1} \quad \text{νόμος του Planck } \rho(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Άρα,

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \quad (3.10)$$

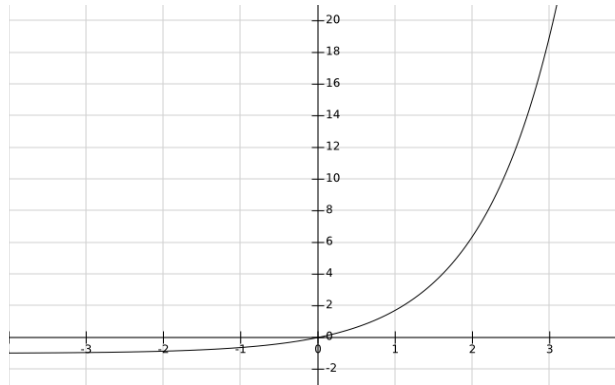
$$E_2 - E_1 = h\nu \quad (3.11)$$

3.3 Σύγκριση εκπομπών

Ας συγκρίνουμε την Αυθόρμητη Εκπομπή με την Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή.

$$\frac{\text{μη συνεκτική διεργασία } dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}}}{\text{συνεκτική διεργασία } dW_{\text{εκπ}}^{\text{εξ}}} = \frac{A_{21} dt}{B_{21} \rho(\nu, T) dt} = \frac{\frac{8\pi h \nu^3}{c^3}}{\frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}} = e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1$$

Εφ' όσον η Αυθόρμητη Εκπομπή είναι **μη συνεκτική διεργασία**, δηλαδή τα φωτόνια τα οποία παράγονται δεν έχουν συνοχή (σταθερή σχέση φάσεων), ενώ η Εξαναγκασμένη ή Διεγερμένη Εκπομπή είναι **συνεκτική διεργασία**, δηλαδή τα φωτόνια τα οποία παράγονται έχουν συνοχή (ίδια φάση), άρα, αν θέλουμε ΣΥΝΟΧΗ, συνάγεται πως θέλουμε όσο το δυνατόν (1) μεγαλύτερο T , (2) μικρότερο ν (μεγαλύτερο λ). [Δείτε την Εικόνα 3.5, όπου απεικονίζεται η $f(x) = e^x - 1$. Εδώ $x = h\nu/k_B T$.] Οπότε, από αυτήν την άποψη, φαίνεται ευκολό-



Εικόνα 3.5: Η γραφική παράσταση της $f(x) = e^x - 1$, εδώ $x = h\nu/k_B T$.

τερη η δημιουργία συνεκτικής δέσμης, π.χ. στα μικροκύματα παρά στο ορατό. Για τον λόγο αυτό, ίσως, μερικές από τις πρώτες προσπάθειες δημιουργίας μίας διατάξεως παράγουσας συνεκτικά ΗΜ κύματα εστιαστήκαν στα μικροκύματα (microwaves) και οδήγησαν στην κατασκευή του MASER (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) ως προπομπού του LASER (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Σήμερα βέβαια το ακρωνύμιο LASER χρησιμοποιείται ακόμα και για μη ορατό τμήμα του ΗΜ φάσματος, λέμε, επί παραδείγματι, infrared laser, ultraviolet laser, X-ray laser και ούτω καθ' εξής. Σήμερα υπάρχει ακόμα και η ονομασία atom-laser για μία διάταξη παράγουσα συνεκτικές δέσμες ατόμων, τα οποία είναι μποζόνια, όπως το $^{87}_{37}\text{Rb}$ [6]. Επειδή το MASER αναπτύχθηκε πριν από το LASER, οι διατάξεις αυτού του είδους, οι λειτουργούσες στα μικροκύματα και στα ραδιοκύματα, συνηθίζεται να ονομάζονται ακόμα και σήμερα MASERS αντί για microwave lasers ή radio lasers. Το πρώτο MASER φτιάχτηκε το 1953 από τους Charles Townes, James Gordon, Herbert Zeiger. Αυτό αποτυπώνεται σχηματικά:

MASER ($\lambda \sim 1 \text{ cm}$)

ευκολότερη συνοχή

LASER ($\lambda \sim 500 \text{ nm}$)

δυσκολότερη συνοχή

Έστω, επί παραδείγματι, ότι θέλουμε ο λόγος $\frac{dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}}}{dW_{\text{εκπ}}^{\text{εξ}}}$ = 1. Ας εξετάσουμε σε τι θερμοκρασία είναι αυτό εφικτό (α') στο ερυθρό, π.χ. με $\lambda \sim 700 \text{ nm}$ και (β') στα μικροκύματα, π.χ. με $\lambda \sim 1 \text{ cm}$. Λοιπόν,

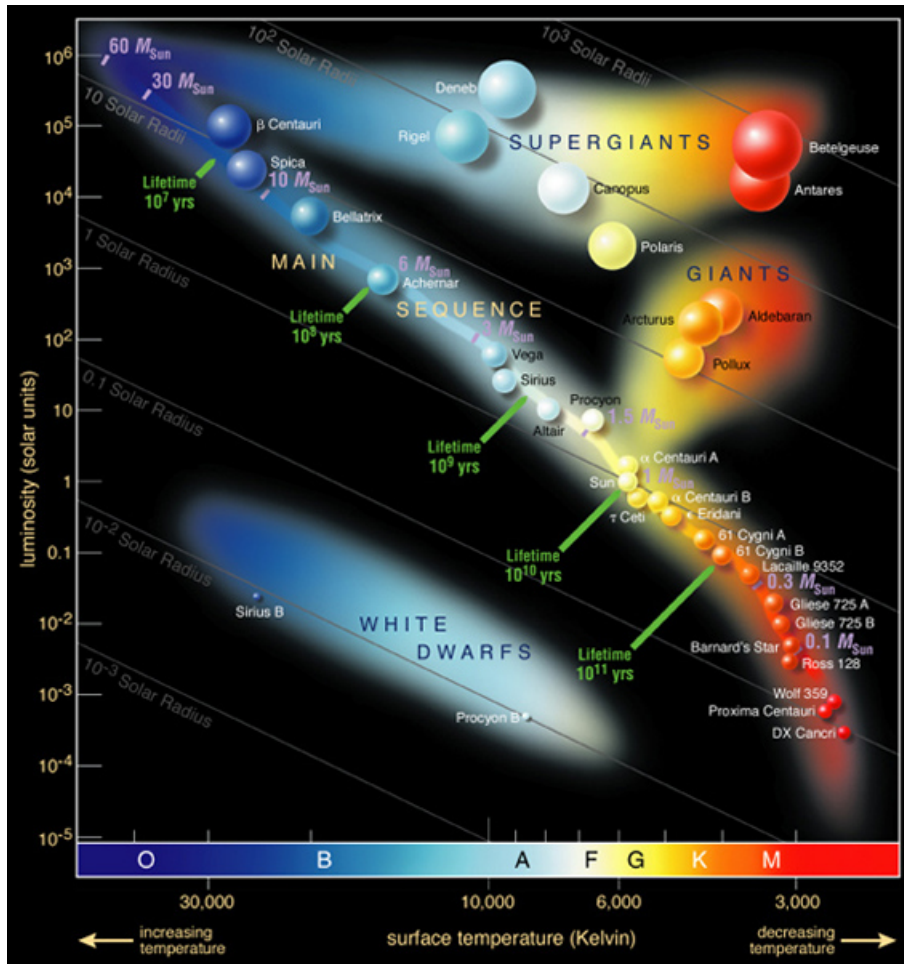
$$\frac{dW_{\text{εκπ}}^{\text{αυθ}}}{dW_{\text{εκπ}}^{\text{εξ}}} = 1 \Rightarrow e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1 = 1 \Rightarrow e^{\frac{h\nu}{k_B T}} = 2 \Rightarrow \frac{h\nu}{k_B T} = \ln 2 \Rightarrow$$

$$\boxed{T = \frac{h\nu}{k_B \ln 2}} \quad \text{ή} \quad \boxed{T = \frac{hc}{\lambda k_B \ln 2}}$$

(α') $\lambda = 700 \text{ nm}$ (ερυθρό φως).

$$T = \frac{6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ mK}}{700 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ Js} \cdot \ln 2} \simeq \frac{6.626 \cdot 3 \cdot 10^{-34+30+8} \text{ K}}{7 \cdot 1.38 \cdot \ln 2} \simeq 29687 \text{ K.}$$

Οπότε, σε θερμοδυναμική ισορροπία αυτό είναι πρακτικώς ανέφικτο. Για παράδειγμα, η φωτόσφαιρα του Ηλίου έχει ενεργό θερμοκρασία $\sim 6000 \text{ K}$, ενώ θερμοκρασία $\sim 30000 \text{ K}$ εμφανίζεται μόνο στην επιφάνεια



Εικόνα 3.6: Το διάγραμμα Hertzsprung-Russell, η κατανομή της φωτεινότητας έναντι της επιφανειακής θερμοκρασίας των αστέρων [7].

αστέρων με 20πλάσια μάζα από αυτήν του Ηλίου (Εικόνα 3.6). Το ανέφικτο αυτό ώθησε τους ερευνητές να αναζητήσουν λύσεις εκτός θερμοδυναμικής ισορροπίας, ήτοι, στην Αναστροφή Πληθυσμού (population inversion) μέσω Αντλήσεως (pumping). Αυτά όμως θα τα δούμε στο Κεφάλαιο 11.

(β') $\lambda = 1 \text{ cm}$ (μικροκύματα).

Ομοίως, βρίσκουμε $T \sim 2.078 \text{ K}$, δηλαδή, αν και χαμηλή, μία πειραματικώς εφικτή θερμοκρασία.

3.4 Σύγκριση διεγερμένων ή εξαναγκασμένων διεργασιών

Ας συγκρίνουμε τις εξαναγκασμένες ή διεγερμένες διεργασίες.

$$\frac{dW_{\text{απορ}}^{\text{εξ}}}{dW_{\text{εκπ}}^{\text{εξ}}} = \frac{B_{12}\rho(\nu, T)d\nu}{B_{21}\rho(\nu, T)d\nu} = 1,$$

αν μιλάμε για σύστημα με ίδια στατιστικά βάρη ($g_1 = g_2$).

$$\left. \begin{aligned} \text{Αλλά σε Θερμοδυναμική Ισορροπία } N_2 \ll N_1 \\ dN_{2 \rightarrow 1}^{\text{εξ}} = N_2 \cdot dW_{\text{εκπ}}^{\text{εξ}} \\ dN_{1 \rightarrow 2}^{\text{εξ}} = N_1 \cdot dW_{\text{απορ}}^{\text{εξ}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow dN_{2 \rightarrow 1}^{\text{εξ}} \ll dN_{1 \rightarrow 2}^{\text{εξ}}.$$

Άρα, μέσω των εξαναγκασμένων ή διεγερμένων διεργασιών αυξάνεται ο πληθυσμός της στάθμης 2 και άρα μειώνεται η πυκνότητα ΗΜ ακτινοβολίας. Στη συνέχεια, η Αυθόρμητη Εκπομπή, η οποία συνοδεύεται από τη μετάβαση του ηλεκτρονίου από τη στάθμη 2 στη στάθμη 1, ενισχύει τη μη συνεκτική ΗΜ ακτινοβολία. Το πρόβλημα αυτό (οφειλόμενο στο $N_2 \ll N_1$ σε θερμοδυναμική ισορροπία) επιλύεται με την αναστροφή πληθυσμού μέσω αντλήσεως, την οποία θα δούμε στο Κεφάλαιο 11. Υπάρχουν πολλά είδη αντλήσεως. Αντλώ σημαίνει πως με κάποιο τρόπο ανεβάζω ηλεκτρόνια στη στάθμη 2 ούτως ώστε $N_2 > N_1$.

Ας δούμε όμως και ποσοτικά γιατί σε θερμοδυναμική ισορροπία ισχύει $N_2 \ll N_1$ μέσω ενός παραδείγματος (δείτε και Άσκηση 5 του παρόντος Κεφαλαίου στο Παράρτημα Α). Θεωρούμε συλλογή ατόμων υδρογόνου σε θερμοδυναμική ισορροπία. Οι ιδιοενέργειες κάθε ατόμου δίνονται από τη γνωστή σχέση Bohr, $E_n \approx -Ry/n^2$, όπου $Ry \approx -13.6$ eV είναι η ενέργεια Rydberg. Θα εξετάσουμε τον λόγο του πληθυσμού των δύο πρώτων σταθμών. Δεδομένου πως

$$N_i = \frac{N_{\text{ολ}} e^{-\beta E_i}}{Z}, \quad (3.12)$$

η αναλογία αυτή θα είναι

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{e^{-\beta E_2}}{e^{-\beta E_1}} = e^{\beta(E_1 - E_2)}. \quad (3.13)$$

Για θερμοκρασία δωματίου ($T = 300$ K), ο λόγος αυτός προκύπτει $e^{-394.5} \approx 4.7 \cdot 10^{-172}$. Είναι εμφανές, λοιπόν, πως σε κατάσταση θερμοδυναμικής ισορροπίας, ο πληθυσμός της επόμενης στάθμης είναι συντριπτικά μικρότερος από τον πληθυσμό της προηγούμενης.

3.5 Σύγκριση στατιστικών Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac, Bose-Einstein

Προηγουμένως, στην Ενότητα 3.2, εξαγάγαμε τον νόμο του Planck από τις διεργασίες εκπομπής και απορροφήσεως, θεωρώντας πως οι πληθυσμοί των ηλεκτρονιακών σταθμών υπακούουν στη στατιστική Maxwell-Boltzmann. Μία εύλογη απορία θα ήταν γιατί χρησιμοποιήθηκε αυτή η στατιστική έναντι της Fermi-Dirac, δεδομένου ότι τα ηλεκτρόνια είναι φερμιόνια. Λοιπόν, αυτό συνέβη διότι το 1916-1917, οπότε ο Einstein διατύπωσε τη θεωρία του για τις διεργασίες αλληλεπίδρασης ΗΜ ακτινοβολίας με δισταθμικό σύστημα, η κατανομή Fermi-Dirac δεν ήταν γνωστή, αλλά εισήχθη μόλις το 1926. Επιπλέον, όπως θα δούμε αμέσως παρακάτω, σε υψηλές θερμοκρασίες ή σε χαμηλές συγκεντρώσεις, η κατανομή Fermi-Dirac συγκλίνει στην κατανομή Maxwell-Boltzmann. Υπενθυμίζουμε πως στο υπό εξέταση δισταθμικό σύστημα έχουμε μόλις ένα ηλεκτρόνιο. Ας συγκρίνουμε όμως, κάπως πιο λεπτομερώς [8], τις κατανομές Maxwell-Boltzmann [9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21], Fermi-Dirac [22, 23, 24] και Bose-Einstein [25, 26, 27], τις οποίες ακολουθούν κλασικά σωματίδια, φερμιόνια και μποζόνια, αντιστοίχως.

Στα επόμενα, συμβολίζουμε με \bar{n}_i τον μέσο αριθμό των ευρισκομένων στην κατάσταση i , με ενέργεια E_i , σωματιδίων, ενώ με N συμβολίζουμε τον συνολικό αριθμό των σωματιδίων. Υποθέτουμε πως $\#i \gg N$, δηλαδή, ο αριθμός των ενεργειακών σταθμών είναι πολύ μεγαλύτερος από τον συνολικό αριθμό των σωματιδίων. Ακόμα, μ είναι το χημικό δυναμικό, ενώ $\beta = 1/k_B T$.

- Η στατιστική Maxwell-Boltzmann (MB) αφορά κλασικά σωματίδια για τα οποία θεωρούμε πως δεν υπάρχουν κβαντισμένα ενεργειακά επίπεδα, σωματίδια όπως, επί παραδείγματι, οι δομικοί λίθοι του κλασικού ιδανικού αερίου. Η κατανομή MB έχει τη μορφή

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)}}. \quad (3.14)$$

Σημειώνεται πως το μ καθορίζεται από τη σχέση

$$\sum_i \bar{n}_i = N. \quad (3.15)$$

Οπότε,

$$\sum_i e^{-\beta E_i} e^{\beta \mu} = N \Rightarrow e^{\beta \mu} = \frac{N}{\sum_i e^{-\beta E_i}}. \quad (3.16)$$

Άρα,

$$\bar{n}_i = \frac{N e^{-\beta E_i}}{\sum_i e^{-\beta E_i}}. \quad (3.17)$$

- Η στατιστική Fermi-Dirac (FD) αφορά κβαντικά σωματίδια υπακούοντα στην απαγορευτική αρχή του Pauli πως μία κβαντική κατάσταση δεν μπορεί να καταληφθεί από άνω του ενός σωματίδια. Τα σωματίδια αυτά λέγονται φερμιόνια (fermions) και έχουν σπιν ημιακέραιο (ημιφυσικό) πολλαπλάσιο ($1/2, 3/2, 5/2, \dots$) της ποσότητας \hbar . Τέτοια σωματίδια είναι, επί παραδείγματι, τα ηλεκτρόνια, τα πρωτόνια και τα νετρόνια. Για τη στατιστική FD ισχύει

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)} + 1}. \quad (3.18)$$

- Η στατιστική Bose-Einstein (BE) αφορά κβαντικά σωματίδια με την ιδιότητα πως μία κβαντική κατάσταση μπορεί να καταλαμβάνεται από οσαδήποτε σωματίδια. Τα σωματίδια αυτά λέγονται μποζόνια (bosons) και έχουν σπιν ακέραιο (φυσικό) πολλαπλάσιο ($0, 1, 2, \dots$) της ποσότητας \hbar . Τέτοια είναι, επί παραδείγματι, τα φωτόνια, τα άτομα ${}^4\text{He}$ και οι πυρήνες των ατόμων ${}^4\text{He}$. Για τη στατιστική BE ισχύει

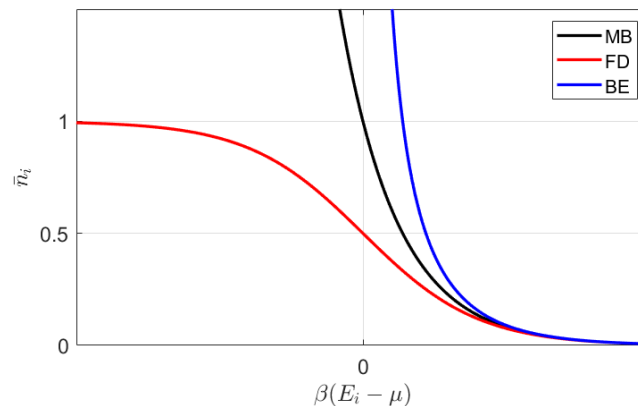
$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)} - 1}. \quad (3.19)$$

Στα συστήματα FD και BE με σταθερό N , το μ καθορίζεται και πάλι από την απαίτηση της Εξ. 3.15. Συνοπτικώς, λοιπόν, μπορούμε να γράψουμε

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)} \pm 1} \quad \text{και η σχέση} \quad \sum_i \bar{n}_i = N \quad \text{καθορίζει το} \quad \mu. \quad (3.20)$$

+1 (FD)
-1 (BE)
ή 0 (MB)

Οι κατανομές MB, FD και BE απεικονίζονται στην Εικόνα 3.7.



Εικόνα 3.7: Απεικόνιση των κατανομών Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac και Bose-Einstein.

Οι κατανομές FD και BE συγκλίνουν στην κατανομή MB σε κάθε μία από τις ακόλουθες περιπτώσεις:

(α') Η συγκέντρωση των σωματιδίων n είναι μικρή σε σχέση με τη λεγόμενη κβαντική συγκέντρωση

$$n_Q = \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}, \quad (3.21)$$

δηλαδή, όταν $n < n_Q$. Για παράδειγμα, σε θερμοκρασία δωματίου ($T = 300 \text{ K}$), για τα πρωτόνια $n_Q \approx 1000 \text{ nm}^{-3}$, ενώ για τα ηλεκτρόνια $n_Q \approx 0.015 \text{ nm}^{-3}$. Η σύγκλιση των κατανομών προκύπτει διότι στις χαμηλές συγκεντρώσεις ισχύει

$$N \text{ πολύ μικρός} \Rightarrow \bar{n}_i \ll 1, \forall i \Rightarrow e^{\beta(E_i - \mu)} \gg 1, \forall i.$$

(β') Οι θερμοκρασίες είναι αρκούντως υψηλές, διότι τότε η κατανομή καλύπτει ευρύτερη ενεργειακή περιοχή με μικρότερες πιθανότητες καταλήψεως, οπότε και πάλι $e^{\beta(E_i - \mu)} \gg 1, \forall i$. Πολλές στάθμες υψηλότερης ενέργειας, ακόμα και με $E_i > \mu$, είναι εν μέρει κατειλημμένες.

Σε αμφότερες τις περιπτώσεις, επειδή

$$e^{\beta(E_i - \mu)} \gg 1, \forall i, \quad (3.22)$$

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)} \pm 1} \approx \frac{1}{e^{\beta(E_i - \mu)}}, \quad (3.23)$$

δηλαδή, οι κατανομές FD και BE συγκλίνουν στην κατανομή MB.

Βιβλιογραφία

- [1] A. Einstein. “Zur Quantentheorie der Strahlung”. Στο: *Mitteilungen der Physikalischen Gesellschaft* 16 (1916), σσ. 47–62.
- [2] A. Einstein. “Zur Quantentheorie der Strahlung”. Στο: *Physikalische Zeitschrift* 18 (1917), σσ. 121–128.
- [3] A. Einstein. “Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt”. Στο: *Annalen der Physik* 17 (1905), σσ. 132–148. DOI: [10.1002/andp.19053220607](https://doi.org/10.1002/andp.19053220607).
- [4] G. N. Lewis. “The conservation of photons”. Στο: *Nature* 118 (1926), σσ. 874–875. DOI: [10.1038/118874a0](https://doi.org/10.1038/118874a0).
- [5] F. Mandl. *Στατιστική Φυσική*. Μετάφραση: Α. Αγγελάκη - Γ. Θεοδώρου. Αθήνα: Γ. Α. Πνευματικός, 2013. ISBN: 9789607258564.
- [6] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman και E. A. Cornell. “Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor”. Στο: *Science* 269 (1995), σσ. 198–201. DOI: [10.1126/science.269.5221.198](https://doi.org/10.1126/science.269.5221.198).
- [7] [Hertzsprung-Russel Diagram identifying many well known stars in the Milky Way galaxy](https://www.eso.org/en/observing/eso-images/eso-images-gallery/eso-images-gallery-2021/hertzsprung-russell-diagram-identifying-many-well-known-stars-in-the-milky-way-galaxy). ESO - Hertzsprung-Russell Diagram. This photograph was produced by European Southern Observatory (ESO). Their website states: “All ESO still and motion pictures, with the exception of the ESO Logo, are released under the Creative Commons Attribution 4.0 International License, unless the credit byline indicates otherwise.” 2021.
- [8] Κ. Σιμπερίδης. *Σημειώσεις του μαθήματος Κβαντική Οπτική και Lasers*. Αθήνα: Τμήμα Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2021. URL: <https://eclass.uoa.gr/courses/PHYS107/>.
- [9] J. C. Maxwell. “Illustrations of the Dynamical Theory of Gases. I. On the motions and collisions of perfectly elastic spheres”. Στο: *Philosophical Magazine* 19 (1860), 19-32 and 21–37. DOI: [10.1080/14786446008642818](https://doi.org/10.1080/14786446008642818).
- [10] J. C. Maxwell. “II. Illustrations of the Dynamical Theory of Gases”. Στο: *Philosophical Magazine* 20 (1860), σσ. 21–37. DOI: [10.1080/14786446008642902](https://doi.org/10.1080/14786446008642902).
- [11] J. C. Maxwell. “On the dynamical theory of gases”. Στο: *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 157 (1867), σσ. 49–88. DOI: [10.1098/rstl.1867.0004](https://doi.org/10.1098/rstl.1867.0004).
- [12] J. C. Maxwell. “On Boltzmann’s theorem on the average distribution of energy in a system of material points”. Στο: *Transactions of the Cambridge Philosophical Society* 12 (1879), σσ. 547–570.
- [13] L. Boltzmann. “Über die Mechanische Bedeutung des Zweiten Hauptsatzes der Wärmetheorie”. Στο: *Wiener Berichte* 53 (1866), σσ. 195–220.
- [14] L. Boltzmann. “Studien über das Gleichgewicht der lebendigen Kraft zwischen bewegten materiellen Punkten”. Στο: *Wiener Berichte* 58 (1868), σσ. 517–560.
- [15] L. Boltzmann. “Über das Wärmegleichgewicht zwischen mehratomigen Gasmolekülen”. Στο: *Wiener Berichte* 63 (1871), σσ. 397–418.
- [16] L. Boltzmann. “Einige allgemeine Sätze über Wärmegleichgewicht”. Στο: *Wiener Berichte* 63 (1871), σσ. 679–711.
- [17] L. Boltzmann. “Analytischer Beweis des zweiten Hauptsatzes der mechanischen Wärmetheorie aus den Sätzen über das Gleichgewicht der lebendigen Kraft”. Στο: *Wiener Berichte* 63 (1871), σσ. 712–732.

- [18] L. Boltzmann. “Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen”. Στο: *Wiener Berichte* 66 (1872), σσ. 275–370.
- [19] L. Boltzmann. “Bermerkungen über einige Probleme der mechanische Wärmetheorie”. Στο: *Wiener Berichte* 75 (1877), σσ. 62–100.
- [20] L. Boltzmann. “Über die beziehung dem zweiten Hauptsatze der mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung respektive den Sätzen über das Wärmegleichgewicht”. Στο: *Wiener Berichte* 76 (1877), σσ. 373–435.
- [21] L. Boltzmann. “Referat über die Abhandlung von J.C. Maxwell: “Über Boltzmann’s Theorem betreffend die mittlere verteilung der lebendige Kraft in einem System materieller Punkte””. Στο: *Wied. Ann. Beiblätter* 5 (1881), σσ. 403–417.
- [22] E. Fermi. “Sulla quantizzazione del gas perfetto monoatomico”. Στο: *Rendiconti Lincei* 3 (1926), σσ. 145–149.
- [23] E. Fermi. “Zur Quantelung des idealen einatomigen Gases”. Στο: *Zeitschrift fuer Physik* 36 (1926), σσ. 902–912. DOI: [10.1007/BF01400221](https://doi.org/10.1007/BF01400221).
- [24] P. A. M. Dirac. “On the Theory of Quantum Mechanics”. Στο: *Proceedings of the Royal Society London A* 112 (1926), σσ. 661–677. DOI: [10.1098/rspa.1926.0133](https://doi.org/10.1098/rspa.1926.0133).
- [25] S. N. Bose. “Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese”. Στο: *Zeitschrift fuer Physik* 26 (1924), σσ. 178–181. DOI: [10.1007/BF01327326](https://doi.org/10.1007/BF01327326).
- [26] A. Einstein. “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”. Στο: *Verlag der Königlich-Preussischen Akademie der Wissenschaften* (1924), σσ. 261–267. URL: <http://echo.mpiwg-berlin.mpg.de/MPIWG:DRQK5WYB>.
- [27] A. Einstein. “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”. Στο: *Zweite Abhandlung, Verlag der Königlich-Preussischen Akademie der Wissenschaften* (1925), σσ. 3–14. URL: <http://echo.mpiwg-berlin.mpg.de/MPIWG:BF6V8AT8>.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

ΣΥΝΕΧΕΣ ΚΑΙ ΔΙΑΚΡΙΤΟ ΦΑΣΜΑ

Σύνοψη

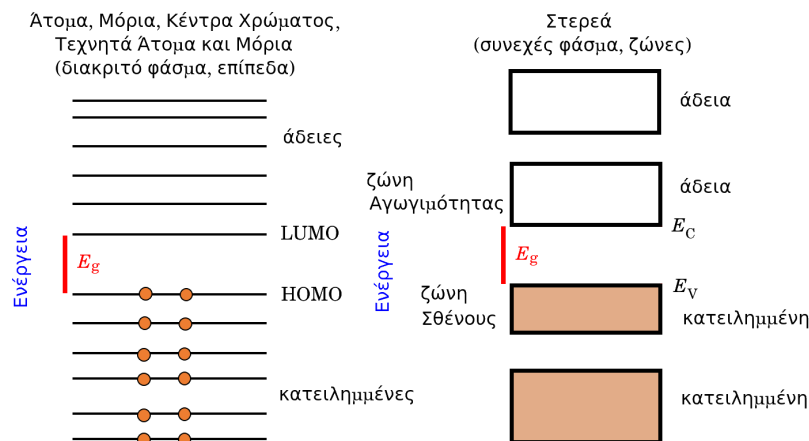
Πραγματευόμαστε το συνεχές και το διακριτό ενεργειακό φάσμα. Το διακριτό φάσμα αφορά, χονδρικώς, άτομα, μόρια, κβαντικές τελείες (οι οποίες είναι, τρόπον τινά, τεχνητά άτομα και μόρια), κέντρα χρώματος και παρόμοια συστήματα, το διακριτό-συνεχές φάσμα αφορά κβαντικά σύρματα και φρέατα και, τέλος, το συνεχές φάσμα αφορά στερεά. Εστιάζουμε στα κέντρα χρώματος και χρησιμοποιούμε ένα απλοϊκό πρότυπο τριδιαστάτου απειρόβαθου κβαντικού φρέατος για να τα περιγράψουμε, οπότε, παρουσιάζουμε και μία πλήρη επίλυση του απειρόβαθου κβαντικού φρέατος. Αναφερόμαστε στις κβαντικές τελείες και χρησιμοποιούμε, ως παράδειγμα, ένα απλό πρότυπο τριδιαστάτου πεπερασμένου τετραγωνικού κβαντικού φρέατος για να τις περιγράψουμε, οπότε, κάνουμε και μία πλήρη επίλυση του πεπερασμένου τετραγωνικού κβαντικού φρέατος. Ακόμα, περιγράφουμε τη μετάβαση από απομονωμένα μονοσταθμικά συστήματα σε ένα δισταθμικό ή τρισταθμικό ή τετρασταθμικό σύστημα, με τρεις διαβαθμισμένες παραλλαγές της μεθόδου Ισχυρής Δεσμεύσεως.

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Κβαντικής Φυσικής και Μαθηματικών.

4.1 Συνεχές φάσμα: στερεά, Διακριτό φάσμα: άτομα και μόρια, κέντρα χρώματος, τεχνητά άτομα και μόρια

Τα άτομα και τα μόρια έχουν διακριτό ενεργειακό φάσμα. Μ' άλλα λόγια, υπάρχουν μόνο κάποιες επιτρεπόμενες ενεργειακές στάθμες, διαχωριζόμενες από ενεργειακά χάσματα, όπου απαγορεύεται να βρίσκονται τα ηλεκτρόνια. Αντιθέτως, στα στερεά έχουμε συνεχές ενεργειακό φάσμα με επιτρεπόμενες ζώνες, διαχωριζόμενες από ενεργειακά χάσματα, όπου απαγορεύεται να βρίσκονται τα ηλεκτρόνια. Αυτά απεικονίζονται απλοϊκά στην Εικόνα 4.1. Σε ένα διακριτό, για παράδειγμα μοριακό, σύστημα, η υψηλότερη κατειλημμένη στάθμη ονομάζεται **HOMO** (Highest Occupied Molecular Orbital), ενώ η χαμηλότερη άδεια στάθμη ονομάζεται **LUMO** (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). Σε ένα συνεχές, για παράδειγμα στερεό, σύστημα, τα αντίστοιχα είναι η **κορυφή της ζώνης σθένους** (top of valence band, E_V) και ο **πυθμένος της ζώνης αγωγιμότητας** (bottom of conduction band, E_C). Η διαφορά $E_C - E_V := E_g$ ορίζει το **θεμελιώδες ενεργειακό**

χάσμα (fundamental band gap). Τα υλικά για τα οποία ισχύει $E_g = 0$ είναι μέταλλα. Για σχετικά μικρές τιμές του E_g έχουμε τους ημιαγωγούς, ενώ για μεγάλες τιμές του E_g τους μονωτές.



Εικόνα 4.1: Απλοϊκή αναπαράσταση της ενεργειακής δομής. [Αριστερά] Διακριτό Φάσμα. [Δεξιά] Συνεχές φάσμα.

Θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε πως μία προσέγγιση ενός δισταθμικού συστήματος θα ήταν **ένα απλό άτομο** (και τι απλούστερο από το άτομο του υδρογόνου), όπου θα περιοριστούμε, επί παραδείγματι, στις κατώτερες δύο στάθμες. Υπάρχουν όμως και περιπτώσεις, όπου μπορούμε να έχουμε διακριτό ενεργειακό φάσμα εντός στερεών. Αυτό συμβαίνει όταν υπάρχουν διαταραχές στην τάξη ενός στερεού (στην περιοδικότητα εφ' όσον πρόκειται για περιοδικό κρύσταλλο) είτε λόγω προσμείξεων, ατελειών και λοιπών αποκλίσεων από την τάξη, είτε οικειοθελώς, εκ κατασκευής, όπως για παράδειγμα στις ετεροδομές. Ετεροδομές (heterostructures) είναι δομές αποτελούμενες από διαφορετικά υλικά, οπότε υπάρχει μόνο κατά τμήματα τάξη ή εφ' όσον πρόκειται για περιοδικούς κρυστάλλους, περιοδικότητα. Αυτές οι αλλαγές στην τάξη ή περιοδικότητα αναφέρονται συνήθως σε τάξη μεγέθους, πολύ χονδρικής, 1 nm - 1000 nm. Χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι για την πρώτη περίπτωση τα **κέντρα χρώματος** (color centers) και για τη δεύτερη περίπτωση οι **κβαντικές τελείες** (quantum dots), οι οποίες πολλές φορές αναφέρονται και ως **νανοσωματίδια** (nanoparticles), αφού είναι σωματίδια μεγέθους της τάξεως των μερικών νανομέτρων. Επομένως, θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε ως μία προσέγγιση δισταθμικού συστήματος **ένα κέντρο χρώματος** ή **μία κβαντική τελεία**, όπου θα περιοριστούμε, επί παραδείγματι, στις κατώτερες δύο στάθμες.

Στο υποκεφάλαιο 4.2 συζητάμε, κάπως απλουστευτικά, τα κέντρα χρώματος. Σε αυτήν μας τη συζήτηση, χρήσιμη είναι η γνώση της πλήρους επιλύσεως του τετραγωνικού απειρόβαθου φρέατος, για αυτόν τον λόγο την παραθέτουμε στην § 4.2.1. Αντιστοίχως, στο υποκεφάλαιο 4.3 συζητάμε τις κβαντικές τελείες. Σε αυτήν μας τη συζήτηση, χρήσιμη είναι η γνώση της πλήρους επιλύσεως του τετραγωνικού πεπερασμένου φρέατος, για αυτόν τον λόγο την παραθέτουμε στην § 4.3.1.

4.2 Κέντρα χρώματος

Ένας ιδανικός κρύσταλλος εκτείνεται επί άπειρον. [Εδώ όταν γράφουμε κρύσταλλος εννοούμε περιοδικός κρύσταλλος. Υπάρχουν και οιονεί κρύσταλλοι, μορφοκλάσματα, καθώς και άλλες απεριοδικές δομές.] Κατά τα γνωστά, όπως στερεό = πλέγμα + βάση, έτσι και κρύσταλλος = κρυσταλλικό πλέγμα + βάση. Το κρυσταλλικό πλέγμα, ένα σύνολο μαθηματικών σημείων με περιοδικότητα στον χώρο, δημιουργείται παίρνοντας σε γραμμικό συνδυασμό, ακέραιες φορές, τα θεμελιώδη ανύσματα του πλέγματος. Τοποθετώντας σε κάθε προκύπτον κρυσταλλικό πλεγματοειδές σημείο τη βάση (ένα σύνολο ατόμων, μορίων, ιόντων κ.λπ. με ορισμένο προσανατολισμό), έχουμε τον κρύσταλλο. Ένας **μονοκρύσταλλος** είναι η καλύτερη πραγματική προσέγγιση ενός ιδανικού κρυστάλλου: διαφέρει από αυτόν στο ότι η περιοδικότητα τερματίζεται μοιραία στις επιφάνειες του κρυστάλλου.

λου. Αλλά ακόμα και σε έναν τέτοιο κρύσταλλο, υπάρχουν αποκλίσεις από την περιοδικότητα. Κάθε απόκλιση από την τέλεια περιοδική δομή είναι μία **ατέλεια** (defect). Συννηθισμένες ατέλειες είναι οι προσμείξεις, οι κενές θέσεις, τα επιπλέον άτομα σε μεσοπλεγματικές θέσεις και λοιπά. Στην περίπτωση ξένων ατόμων αυτά ονομάζονται **προσμείξεις** (impurities) και ο κρύσταλλος, μέσα στον οποίο βρίσκονται, **φιλοξενών κρύσταλλος** (host crystal). Οι ιδιότητες του υλικού εξαρτώνται από τον φιλοξενούντα κρύσταλλο και από τις ατέλειες.

Εδώ θα ασχοληθούμε με ένα είδος ατέλειας, **το κέντρο χρώματος ή χρωματικό κέντρο** [color-center, F-center (από τη γερμανική λέξη Farbe = χρώμα)], μία ατέλεια απορροφούσα φως. Οι ατέλειες αυτές έχουν πάρει το όνομά τους από τον χαρακτηριστικό χρωματισμό, τον οποίο δίδουν στους κρυστάλλους των αλογονούχων αλκαλίων (alkaline halides). Κάθε ανωμαλία της κρυσταλλικής δομής, σχετιζόμενη με την «παγίδευση» ενός ηλεκτρονίου, μπορεί να χαρακτηριστεί ως χρωματικό κέντρο, αν απορροφά περίπου στην περιοχή του ορατού φάσματος. Τα χρωματικά κέντρα μπορούν να σχηματιστούν εύκολα σε ιοντικούς κρυστάλλους αλογονούχων αλκαλίων (π.χ. KCl) με τη βοήθεια ιονίζουσας ακτινοβολίας, σαν τις ακτίνες X [π.χ. από ένα περιθλασίμετρο σκόνης (powder diffractometer) ή ένα σύγχροτρον (synchrotron)]. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί κι ένα πηνίο Τέσλα (Tesla coil). Κατάλληλη πηγή ιονίζουσας ακτινοβολίας θα μπορούσε να είναι και μία ισχυρή πηγή ακτίνων γ , όπως π.χ. το ^{60}Co . Η ιονίζουσα ακτινοβολία προκαλεί απελευθέρωση ηλεκτρονίων από κάποια ανιόντα αλογόνου (π.χ. Cl^-). Το «ελεύθερο» πια ηλεκτρόνιο περιπλανάται στον κρύσταλλο και τελικά παγιδεύεται σε μία θέση, όπου λείπει κάποιο ανιόν αλογόνου, όπου υπάρχει δηλαδή ένα **κενό** (vacancy) ανιόντος. Σε έναν κρύσταλλο KCl ένα κενό Cl^- έχει 6 κατιόντα K^+ ως πρώτους γείτονες (Εικόνα 4.2 αριστερά). Σε πολύ απλοϊκή προσέγγιση, η δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου στο κέντρο του χρωματικού κέντρου είναι $\approx -\frac{6e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} < 0$, $r = a/2$ είναι η απόσταση ανιόντος - γειτονικού κατιόντος, a η **πλεγματική σταθερά** (lattice constant) ή **πλεγματική παράμετρος** (lattice parameter) και ϵ η διηλεκτρική σταθερά. Ένα απλό πρότυπο για αυτήν την κατάσταση είναι ένα σωματίδιο σε τριδιάστατο φρέαρ δυναμικής ενέργειας, επειδή υπάρχει παγίδευση και στις τρεις διαστάσεις. Μία επίπεδη αναπαράσταση ενός χρωματικού κέντρου σε κρύσταλλο KCl φαίνεται στην Εικόνα 4.2 δεξιά. Εκτός από τα κέντρα περίσσειας ηλεκτρονίου (electron center), μπορεί να έχουμε κέντρα οπών (hole centers), κέντρα προσμείξεων (impurity centers) και άλλα.

Το χρώμα εξαρτάται από το μέγεθος του κενού, δηλαδή, εν τέλει, από το είδος του ατόμου του αλογόνου που λείπει, διότι, όσο στενότερο είναι το φρέαρ τόσο περισσότερα απέχουν οι επιτρεπόμενες εντός του καταστάσεις, όσο φαρδύτερο είναι το φρέαρ τόσο αυτές πλησιάζουν. Σε μία πολύ αδρή προσέγγιση για το κέντρο χρώματος, ας θυμηθούμε το απειρόβαθο φρέαρ. Σε ένα μονοδιάστατο -κατά μήκος του άξονα x - απειρόβαθο πηγάδι δυναμικής ενέργειας, εύρους L , με δυναμική ενέργεια

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{αλλού} \end{cases} \quad (4.1)$$

το διακριτό του ενεργειακό φάσμα είναι

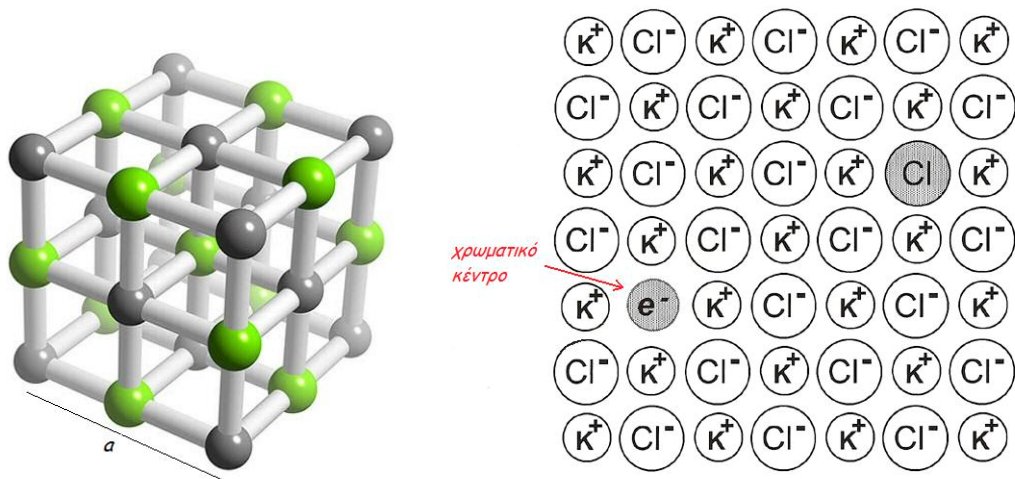
$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}, \quad (4.2)$$

όπου $n = 1, 2, 3, \dots$ και m είναι η μάζα του σωματιδίου, εν προκειμένω του ηλεκτρονίου. Επειδή η κίνηση του ηλεκτρονίου δεν γίνεται στον ελεύθερο χώρο, αλλά εντός κάποιου κρυστάλλου, η μάζα m θα πρέπει να αντικατασταθεί με τη λεγόμενη **ενεργό μάζα** m^* . Η ενεργός μάζα αποτελεί μία χρήσιμη προσέγγιση σχετική με τη σχέση διασποράς των ηλεκτρονίων εντός ενός κρυστάλλου, π.χ. κοντά στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητάς του. Σχηματικά,

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{ελεύθερα ηλεκτρόνια}), \quad (4.3)$$

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{ηλεκτρόνια εντός κρυστάλλου}), \quad (4.4)$$

όπου k είναι ο κυματαριθμός. Η προσέγγιση αυτή βασίζεται στο ότι, για μικρά k (π.χ. κοντά στον πυθμένα της ζώνης αγωγιμότητας, όπου έχουμε ελάχιστο), η σχέση διασποράς των ηλεκτρονίων εντός του κρυστάλλου



Εικόνα 4.2: [Αριστερά] Κρύσταλλος χλωριούχου καλίου (KCl). Η δομή μπορεί να περιγραφεί με ένα εδροκεντρωμένο κυβικό πλέγμα [fcc, face-centered cubic] με διατομική βάση (ζεύγος κατιόντος - ανιόντος). Επί παραδείγματι, σε κάθε πλεγματοεικό σημείο τοποθετείται (i) ένα κατιόν ακριβώς στο πλεγματοεικό σημείο και (ii) ένα ανιόν σε σημείο απέχον απόσταση $(a/2)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$, όπου a είναι η πλεγματοεική σταθερά. Για παράδειγμα, στο πλεγματοεικό σημείο στην αρχή των αξόνων $[(0, 0, 0)]$ έχουμε ένα κατιόν και το αντίστοιχο ανιόν βρίσκεται στο κέντρο της συμβατικής κυβικής κυψελίδας. Οπότε, κάθε τυχόν κενό ανιόντος χλωρίου έχει 6 κατιόντα καλίου ως πρώτους γείτονες. [Δεξιά] Επίπεδη αναπαράσταση. Χρωματικό κέντρο με παγιδευμένο ηλεκτρόνιο σε ένα κενό Cl^- . Το ηλεκτρόνιο έχει φύγει από ένα ανιόν Cl^- , π.χ. λόγω ακτινοβολήσεως. Η κατανομή της κυματοσυναρτήσεως του ηλεκτρονίου καθορίζεται από τη μορφή του δημιουργηθέντος στην άδεια θέση τριδιαστάτου κβαντικού φρέατος.

λου μπορεί να προσεγγιστεί από την παραβολική μορφή, την οποία έχει η σχέση διασποράς των ελεύθερων ηλεκτρονίων, καθώς

$$E(k) = E(0) + \underbrace{E'(0)}_{=0} k + E''(0) \frac{k^2}{2} + \dots \quad (4.5)$$

Οπότε, εκλέγοντας τους άξονες ώστε $E(0) = 0$ και αγνοώντας τους όρους ανωτέρας τάξεως,

$$E(k) \approx \frac{E''(0)}{2} k^2 := \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \Rightarrow m^* = \frac{\hbar^2}{E''(0)}. \quad (4.6)$$

Συνεπώς, επανερχόμενοι στην περίπτωση του πηγαδιού δυναμικού, έχουμε

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m^* L^2}. \quad (4.7)$$

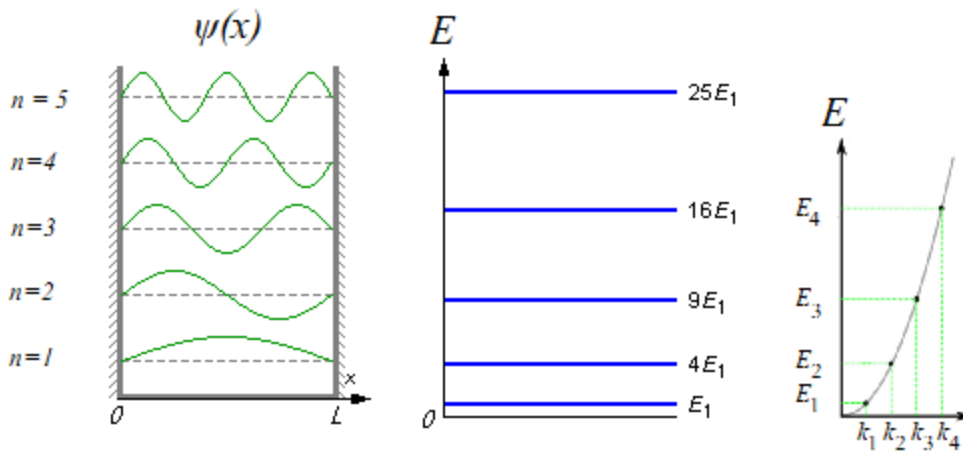
Αρα, η απόσταση μεταξύ διαδοχικών σταθμών είναι

$$E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} (2n + 1) \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.8)$$

δηλαδή αντιστρόφως ανάλογη του τετραγώνου του εύρους του φρέατος.

Ας θυμηθούμε ακόμη ότι η κυματοσυνάρτηση για τη στάθμη n είναι

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & 0 < x < L \\ 0, & \text{αλλού} \end{cases} \quad (4.9)$$



Εικόνα 4.3: Ιδιοσυναρτήσεις, ιδιοενέργειες και ενεργειακή διασπορά ($k_n = n\pi/L, n = 1, 2, 3, \dots$) του σωματιδίου στο απλοϊκό πρότυπο απειρόβαθου φρέατος. Στην εικόνα της ενεργειακής διασποράς, η γκριζα συνεχής γραμμή αντιπροσωπεύει ένα σωματίδιο που κινείται ελεύθερα μέσα στον κρύσταλλο. Στο δεσμευμένο σωματίδιο, όμως, επιτρέπονται μόνο συγκεκριμένες ενέργειες (διακριτές ενεργειακές καταστάσεις).

και επομένως η αντίστοιχη πυκνότητα πιθανότητας να βρεθεί το σωματίδιο στη θέση x είναι

$$P_n(x) = \begin{cases} \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & 0 < x < L \\ 0, & \text{αλλού} \end{cases} \quad (4.10)$$

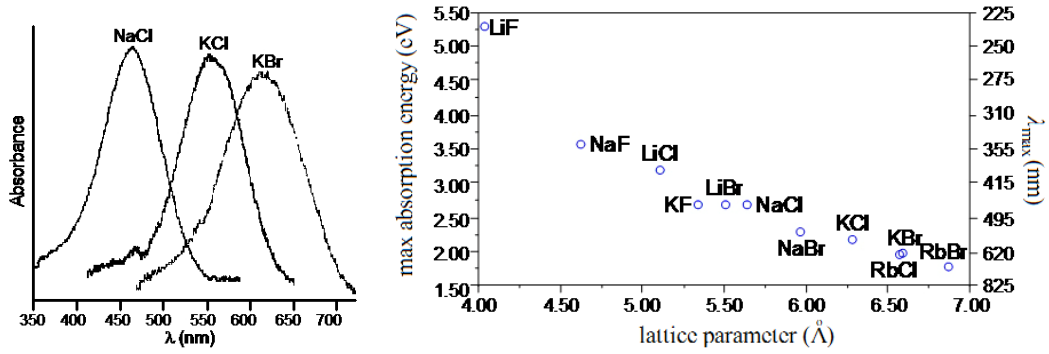
Στα κέντρα χρώματος, ο χρωματισμός οφείλεται στην **απορρόφηση** (absorption) ενός φωτονίου από το παγιδευμένο ηλεκτρόνιο και στη συνακόλουθη **διέγερσή** του (excitation) από τη **θεμελιώδη κατάσταση** (ground state) σε μία **διεγερμένη κατάσταση** (excited state). Αυτές οι ενεργειακές διαφορές δίνονται από την Εξ. 4.8. Συνεπώς, με τη βοήθεια αυτού του απλοϊκού 1Δ προτύπου προβλέπουμε ότι **αύξηση (μείωση) του L** οδηγεί σε απορρόφηση φωτονίων μικρότερης (μεγαλύτερης) ενέργειας. Δηλαδή, **το φάσμα μετατοπίζεται προς το ερυθρό (μπλε)** [redshift (blueshift)].

Σε τρεις διαστάσεις το πρόβλημα είναι κάπως πολύπλοκότερο. Όμως, αύξηση της πλεγματικής σταθεράς a αυξάνει τον χώρο γύρω από το κενό, όπου δημιουργείται το κέντρο χρώματος. Αν θεωρήσουμε, εύλογα, ότι $L \propto a$, τότε, όπως φαίνεται από τις παραπάνω εξισώσεις, το φάσμα απορροφήσεως μετατοπίζεται σε χαμηλότερες ενέργειες, δηλαδή σε μεγαλύτερα μήκη κύματος. Για παράδειγμα, επειδή $a_{\text{NaCl}} < a_{\text{KCl}} < a_{\text{KBr}}$, τα φάσματα απορροφήσεώς τους έχουν τη σειρά που φαίνεται στην Εικόνα 4.4 αριστερά. Στην Εικόνα 4.4 δεξιά παρουσιάζεται η εξάρτηση της κορυφής του φάσματος απορροφήσεως από την πλεγματική παράμετρο ή πλεγματική σταθερά, a , σε κρυστάλλους αλογονούχων αλκαλίων.

Έχουν προταθεί αρκετά θεωρητικά πρότυπα για να ερμηνευθούν οι οπτικές ιδιότητες των χρωματικών κέντρων [2]. Όλα θεωρούν πως στην περιοχή του κενού η δυναμική ενέργεια μπορεί να αναπαρασταθεί με ένα τριών διαστάσεων φρέαρ, υπεύθυνο για τη δέσμευση του ηλεκτρονίου, οδηγώντας έτσι σε σημαντικές αλλαγές στις οπτικές ιδιότητες, επί παραδείγματι, στην απορρόφηση ή στην εκπομπή. Παρακάτω θα περιγράψουμε ένα απλοϊκό **πρότυπο τριδιαστάτου απειρόβαθου φρέατος**. Θεωρούμε, πως το χρωματικό κέντρο σε έναν κρύσταλλο αλογονούχου αλκαλίου είναι ένα τριδιάστατο απειρόβαθο φρέαρ δυναμικής ενέργειας κατά τους άξονες x, y, z , αντιστοίχως, $U_1(x), U_2(y), U_3(z)$, ούτως ώστε

$$U(\vec{r}) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z), \quad (4.11)$$

όπου όλα τα U_i είναι φρέατα απείρου βάθους. Θεωρούμε ακόμη πως το πλάτος του φρέατος σε κάθε άξονα L_i πρέπει να είναι της τάξεως της πλεγματικής σταθεράς a . Ας εξετάσουμε την ενέργεια των φωτονίων, των αντιστοιχούντων στη μετάβαση από τη θεμελιώδη κατάσταση στην 1η διεγερμένη κατάσταση, π.χ. για τους



Εικόνα 4.4: [Αριστερά] Φάσματα απορροφήσεως χρωματικών κέντρων, ληφθέντα στον αέρα, σε 298 K, στο υπεριώδες - ορατό, από κρυστάλλους NaCl, KCl, KBr, ακτινοβοληθέντες με πηνίο Tesla [1]. Το χρώμα εξαρτάται από το μέγεθος του χώρου τον οποίο αφήνει η ατέλεια, άρα από την πλεγματική παράμετρο ή πλεγματική σταθερά, a . Η κορυφή του φάσματος απορροφήσεως είναι έτσι μετατοπισμένη επειδή $a_{\text{NaCl}} < a_{\text{KCl}} < a_{\text{KBr}}$. [Δεξιά] Εξάρτηση της κορυφής του φάσματος απορροφήσεως από την a σε κρυστάλλους αλογονούχων αλκαλίων [1]. Αύξηση της a δημιουργεί μεγαλύτερα κενά, όταν λείπει κάποιο ιόν, επομένως ευρύτερο φρέαρ δυναμικής ενέργειας και άρα μικραίνει η ενεργειακή απόσταση θεμελιώδους - 1ης διεγερμένης στάθμης και επομένως μικραίνει η ενέργεια (αυξάνεται το μήκος κύματος) του φωτονίου του αντιστοιχούντος στη μετάβαση.

κρυστάλλους LiF, NaCl. Λόγω της μορφής της δυναμικής ενέργειας, οι μεταβλητές χωρίζονται και τελικώς το ενεργειακό φάσμα ενός τέτοιου απειροβάθου φρέατος είναι

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n_1^2}{2m_1^* L_x^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 n_2^2}{2m_2^* L_y^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2 n_3^2}{2m_3^* L_z^2} \quad (4.12)$$

και αν υποθέσουμε ότι $L_x = L_y = L_z = L$ και $m_1^* = m_2^* = m_3^* = m^*$, τότε

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (4.13)$$

Άρα, η θεμελιώδης στάθμη ($\Theta\Sigma$, $n_1 = n_2 = n_3 = 1$) και η 1η διεγερμένη στάθμη ($1\eta\Delta\Sigma$, ένα εκ των n_i ίσο με 2 και τα άλλα δύο ίσα με 1) έχουν, αντιστοίχως, ιδιοενέργεια

$$E_{\Theta\Sigma} = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}, \quad (4.14)$$

$$E_{1\eta\Delta\Sigma} = \frac{6\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}.$$

Άρα, η ενέργεια ενός φωτονίου, απορροφούμενου ώστε το ηλεκτρόνιο να ανέβει από τη $\Theta\Sigma$ στην $1\eta\Delta\Sigma$, είναι

$$h\nu = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2}. \quad (4.15)$$

Αν τώρα θεωρήσουμε ότι $L = \frac{a}{2}$,

$$h\nu = \frac{6\hbar^2 \pi^2}{m^* a^2}. \quad (4.16)$$

Στο NaCl, όπου $a \approx 0.565$ nm και $m^* \approx 1.13 m_e$, προκύπτει $h\nu \approx 12.498$ eV. Ενώ, αν χρησιμοποιούσαμε $L = a$ θα βρίσκαμε

$$h\nu = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}, \quad (4.17)$$

οπότε προκύπτει $h\nu \approx 3.1245$ eV. Η πειραματική τιμή για το μέγιστο της απορροφήσεως στο NaCl είναι $h\nu_{\text{πειρ}} \approx 2.7$ eV, δηλαδή, η απόκλιση από την πειραματική τιμή της προβλέψεως του απλοϊκού μας προτύπου είναι $\approx 16\%$, δηλαδή, όχι και πολύ μακριά. Τα 2.7 eV αντιστοιχούν σε $\lambda \approx 460$ nm, δηλαδή στο μπλε. Είναι προφανές ότι όλα αυτά είναι πολύ προσεγγιστικά. Αλλά παρά τους αριθμητικούς παράγοντες, προκύπτει

$$h\nu \propto \frac{1}{a^2}, \quad (4.18)$$

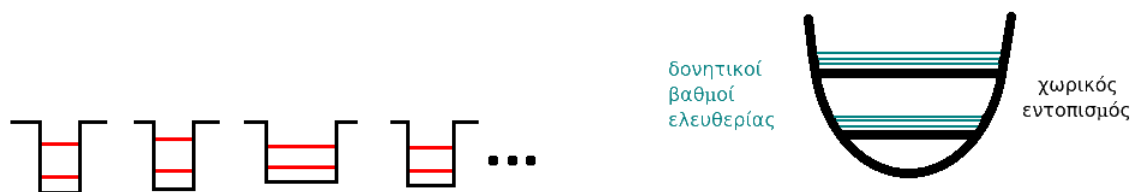
οπότε το $h\nu$ μικραίνει όταν το a αυξάνεται. Δηλαδή, εξηγείται ποιοτικώς η συμπεριφορά της Εικόνας 4.4. Για το LiF, η ενεργός μάζα μπορεί να θεωρηθεί ότι είναι, σε μία ιδιαίτερη προσέγγιση (Εξίσωση 2.72 της αναφοράς [2]), $m^* \approx 1.5 m_e$. Οπότε, από την Εξ. 4.17, για το LiF έχουμε $h\nu \approx 4.62$ eV, τιμή αποκλίνουσα από την πειραματική τιμή μόνο κατά 12%. Από την άλλη, βέβαια, η τιμή της ενεργού μάζας μπορεί να είναι κάπως διαφορετική, π.χ. κατά την αναφορά [3] στο LiF $m^* \approx m_e$. Δεν έχει νόημα να προσπαθούμε να ταιριάξουμε ακριβώς το απλοϊκό μας θεωρητικό πρότυπο με το πείραμα, παίζοντας με την τιμή της ενεργού μάζας. Θα αρκεστούμε στο ότι κάτι τόσο απλό μπορεί να έρθει σχετικά κοντά στο πείραμα, προβλέποντας μάλιστα την εξάρτηση περίπου από το a^{-2} . Αυτό το πρότυπο, το οποίο αβίαστα μαντέψαμε εδώ, έχει περίπου σε αυτήν τη μορφή πράγματι χρησιμοποιηθεί για τα χρωματικά κέντρα [2] με ικανοποιητικά αποτελέσματα. Συγκεκριμένα, στη μορφή

$$h\nu \approx \frac{0.97}{(a \text{ σε nm})^{1.772}} \text{ eV} \quad (4.19)$$

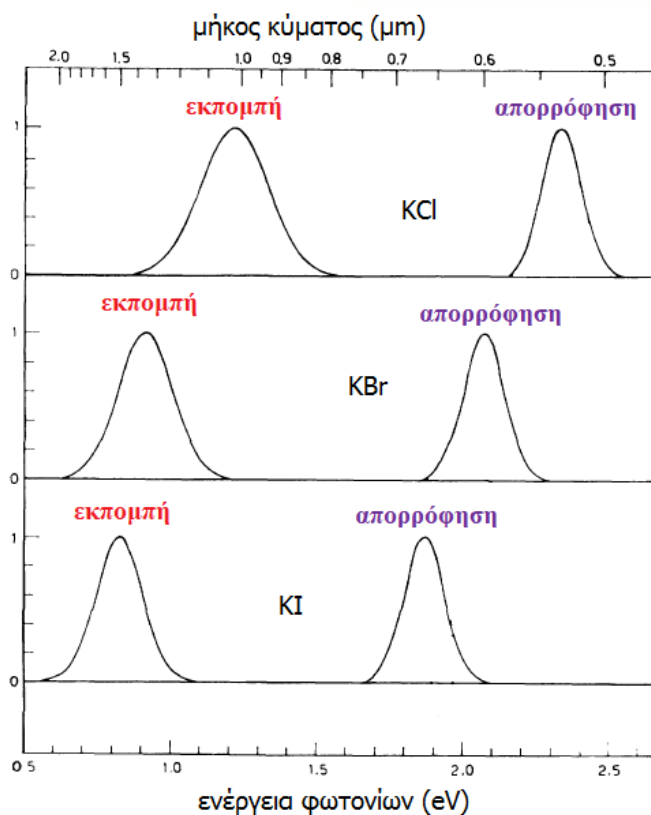
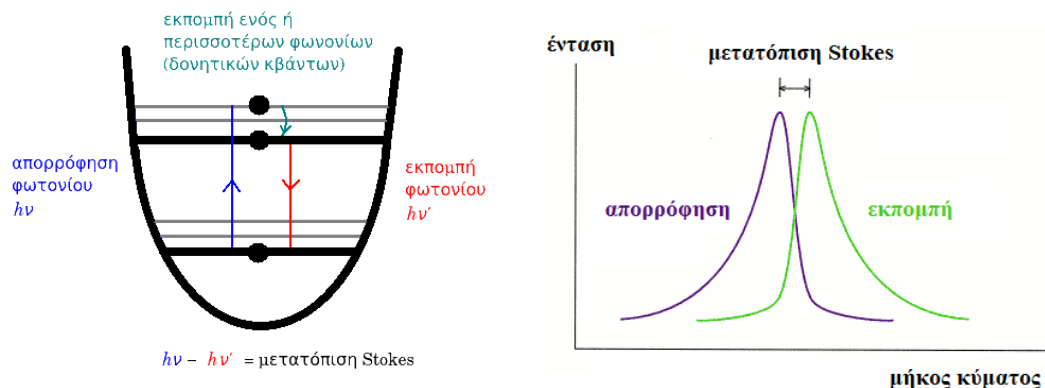
μπορούμε να ταιριάξουμε ικανοποιητικά όλα τα πειραματικά δεδομένα των αλογονούχων αλκαλίων [2] (δείτε την Εικόνα 4.4).

Ίσως ένας προσεκτικός οφθαλμός θα έχει ήδη παρατηρήσει πως ενώ μιλάμε για μεταβάσεις μεταξύ διακριτών σταθμών, **τα φάσματα της Εικόνας 4.4 δεν είναι συναρτησεις δέλτα αλλά, αντιθέτως, έχουν αρκετά μεγάλο εύρος.** Ο λόγος είναι ότι μέχρι στιγμής λάβαμε υπ' όψιν μόνο τις διακριτές στάθμες τις προερχόμενες από τον χωρικό εντοπισμό. Γενικώς, η διεύρυνση διακρίνεται σε **ομογενή διεύρυνση** (homogeneous broadening) και **ανομογενή διεύρυνση** (inhomogeneous broadening). Εάν το φυσικό αίτιο το προκαλόν τη διεύρυνση είναι το ίδιο για κάθε απορροφητή ή εκπομπό (εν προκειμένω για κάθε δισταθμικό σύστημα) τότε αυτή καλείται ομογενής διεύρυνση, ενώ εάν είναι διαφορετικό τότε αυτή καλείται ανομογενής διεύρυνση. Ένα παράδειγμα ομογενούς διευρύνσεως είναι η σχετιζόμενη με τον χρόνο ζωής της ενεργειακής στάθμης (lifetime broadening). Συγκεκριμένα, ο χρόνος ζωής, τ , μιας διεγερμένης καταστάσεως, ο σχετιζόμενος με την Αυθόρμητη Εκπομπή προς κάποια κατώτερη στάθμη, σχετίζεται με την αβεβαιότητα στην ενέργεια της διεγερμένης καταστάσεως, ΔE , δηλαδή, $\tau \Delta E \propto \hbar$. [Υπενθυμίζεται ο ορισμός του χρόνου ζωής, για την Αυθόρμητη Εκπομπή από τη στάθμη 2 στη στάθμη 1, σύμφωνα με τη σχέση 3.2, $dW_{\text{em}}^{\text{sp}} = A_{21} dt \Rightarrow 1 = A_{21} \tau$, για αραιό αέριο ιδίων ατόμων.] Μικρός χρόνος ζωής σημαίνει μεγάλη αβεβαιότητα στην ενέργεια και άρα ευρεία εκπομπή (broad emission). Αυτού του είδους η διεύρυνση δίνει Λορεντζιανή μορφή στο φάσμα (Lorentzian profile). Συνήθως, στη φυσική συμπεκνωμένης ύλης, έχουμε μία μεγάλη συλλογή απορροφητών ή εκπομπών και η διακύμανση ΔE είναι διαφορετική για κάθε απορροφητή ή εκπομπό. Ο λόγος είναι πως σε ένα μεγάλο σύστημα, όπως π.χ. σε έναν κρύσταλλο, το περιβάλλον κάθε απορροφητή ή εκπομπού σπανίως είναι ταυτόσημο λόγω τυχαίας παρουσίας προσμείξεων, ατελειών και λοιπών αποκλίσεων από την τάξη. Με άλλα λόγια, τα κβαντικά φρέατα δεν είναι ολόδια (Εικόνα 4.5, αριστερά). Η ανομογενής διεύρυνση συνήθως έχει Γκαουσιανή μορφή (Gaussian profile). Να σημειωθεί ακόμα πως η διεύρυνση μπορεί να οφείλεται σε πολλά αίτια, οπότε και η μορφή της ποικίλλει. Υπάρχουν κι άλλες πηγές διαμορφώνουσες το ενεργειακό φάσμα, όπως οι δονητικοί βαθμοί ελευθερίας (Εικόνα 4.5, δεξιά). Άρα, τα φάσματα, αντικατοπτρίζοντας την κατάσταση αυτή, θα είναι ευρέα. Επίσης, όλα αυτά βρίσκονται εντός κάποιου στερεού, οπότε υπάρχει όλο το υπόβαθρό του.

Στην πράξη (δείτε άνω τμήμα της Εικόνας 4.6), με απορρόφηση φωτονίου, το ηλεκτρόνιο μπορεί, για παράδειγμα, να μεταβεί από τη θεμελιώδη στάθμη σε κάπως υψηλότερη από την πρώτη διεγερμένη στάθμη (π.χ. σε ανώτερη δονητική στάθμη) και μετά να αφησυχάσει στην πρώτη διεγερμένη στάθμη εκπέμποντας ένα ή περισσότερα φωνόνια (κβάντα δονήσεων πλέγματος) και στη συνέχεια να κατέβει στη θεμελιώδη στάθμη



Εικόνα 4.5: [Αριστερά] Σε ένα μεγάλο σύστημα, όπως π.χ. σε έναν κρύσταλλο, το περιβάλλον κάθε απορροφητή ή εκπομπού σπανίως είναι ταυτόσημο, με άλλα λόγια, τα κβαντικά φρέατα δεν είναι ολόγρια. [Δεξιά] Δονητικά και χωρικά επίπεδα. Τα φάσματα, αντικατοπτρίζοντας την κατάσταση αυτή, θα είναι ευρέα.



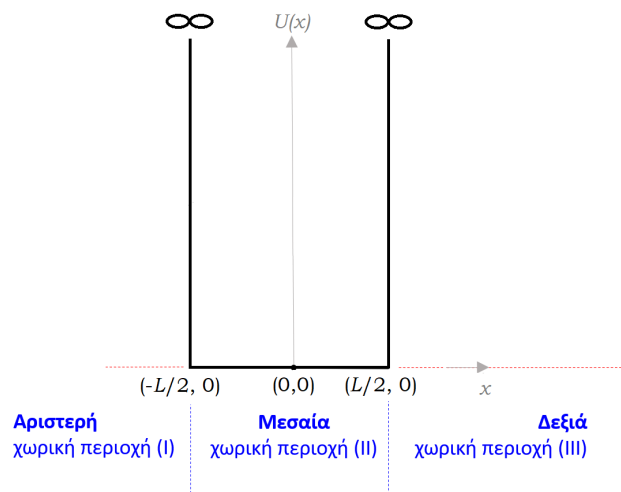
Εικόνα 4.6: [Ανω] Εξήγηση της μετατόπισης Stokes μεταξύ απορροφήσεως και εκπομπής. [Κάτω] Μετατοπίσεις Stokes χρωματικών κέντρων KCl, KBr, KI, εικόνα προσαρμοσμένη από την αναφορά [4]. Σε συμφωνία με την αναφορά [5], στο KCl η μετατόπιση Stokes είναι ≈ 1.1 eV.

εκπέμποντας αυτήν τη φορά φωτόνιο ενέργειας ελαφρώς μικρότερης από την ενέργεια του αρχικώς απορροφημένου φωτονίου, κατά το ποσό της ενέργειας των φωνονίων του αφηρηχασμού. **Μετατόπιση Stokes** (Stokes shift) είναι η διαφορά μήκους κύματος ή συχνότητας ή ενέργειας μεταξύ των θέσεων των μεγίστων των φασμάτων απορροφήσεως και εκπομπής. Εάν το εκπεμπόμενο φωτόνιο έχει μικρότερη ενέργεια από το απορροφημένο φωτόνιο, αυτή η ενεργειακή διαφορά λέγεται μετατόπιση Stokes (Εικόνα 4.6). Εάν το εκπεμπόμενο φωτόνιο έχει μεγαλύτερη ενέργεια, αυτή η ενεργειακή διαφορά λέγεται **μετατόπιση anti-Stokes** (anti-Stokes shift). Οι διαφορές αυτές συνήθως οφείλονται στις πλεγματικές δονήσεις (φωνόνια) [6].

4.2.1 Πλήρης επίλυση του τετραγωνικού απειρόβαθου φρέατος

Θα προσπαθήσουμε να δώσουμε μία λεπτομερή επίλυση του τετραγωνικού απειρόβαθου φρέατος. Έστω λοιπόν το απειρόβαθο τετραγωνικό φρέαρ δυναμικής ενέργειας της Εικόνας 4.7. Το μονοδιάστατο -κατά μήκος του άξονα x - απειρόβαθο πηγάδι, εύρους L , εκτείνεται συμμετρικά από $-L/2$ έως $L/2$. Διακρίνουμε τις χωρικές περιοχές I (αριστερή), II (μεσαία) και III (δεξιά). Η δυναμική του ενέργεια είναι

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < -L/2 & \text{περιοχή I} \\ 0, & -L/2 \leq x \leq L/2 & \text{περιοχή II} \\ \infty, & x > L/2 & \text{περιοχή III} \end{cases} \quad (4.20)$$



Εικόνα 4.7: Σχηματική απεικόνιση ενός πεπερασμένου τετραγωνικού κβαντικού φρέατος δυναμικής ενέργειας.

Στις περιοχές I και III, δεν μπορεί να βρίσκεται το σωματίδιο, επειδή η δυναμική ενέργεια είναι άπειρη, οπότε η κυματοσυνάρτησή του θα είναι $\psi(x) = 0$. Στην περιοχή II, η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger θα είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x). \quad (4.21)$$

Ας δοκιμάσουμε λύσεις της μορφής

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k \geq 0. \quad (4.22)$$

Όμως, για $k = 0$, λαμβάνουμε $\psi(x) = A + B$. Λόγω της απαιτήσεως συνέχειας της κυματοσυναρτήσεως στα σημεία $x = -L/2$ και $x = L/2$, επειδή $\psi(-L/2) = 0 = \psi(L/2)$, έπεται πως $A + B = 0$, οπότε $\psi(x) = 0$ παντού, δηλαδή δεν υπάρχει πουθενά το σωματίδιο. Επομένως, θα υποθέσουμε παρακάτω πως $k > 0$. Άρα,

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k > 0. \quad (4.23)$$

Άρα, από τις εξισώσεις (4.21) και (4.23), προκύπτει

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[Aikike^{ikx} + B(-ik)(-ik)e^{-ikx}] = E[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}], \quad (4.24)$$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m}[Ae^{ikx}] + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}[Be^{-ikx}] = EAe^{ikx} + EBe^{-ikx}, \quad (4.25)$$

$$\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right] Ae^{ikx} + \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E \right] Be^{-ikx} = 0. \quad (4.26)$$

Συνεπώς, αφού αυτό ισχύει $\forall x$, θα πρέπει

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.27)$$

Ας εφαρμόσουμε τώρα τις συνοριακές συνθήκες.

$$\psi(-L/2) = 0 \Rightarrow Ae^{-ikL/2} + Be^{ikL/2} = 0 \Rightarrow -\frac{A}{B} = e^{ikL}, \quad (4.28)$$

$$\psi(L/2) = 0 \Rightarrow Ae^{ikL/2} + Be^{-ikL/2} = 0 \Rightarrow -\frac{A}{B} = -e^{ikL}. \quad (4.29)$$

Συνεπώς,

$$e^{ikL} = -e^{ikL} \Rightarrow e^{2ikL} = 1 = e^{i2\pi n}, \quad n \in \mathcal{Z}. \quad (4.30)$$

Οπότε,

$$k = \frac{\pi n}{L}, \quad n \in \mathcal{Z}. \quad (4.31)$$

Αλλά, $k > 0$, όπως είπαμε παραπάνω, οπότε

$$\boxed{k = \frac{\pi n}{L}, \quad n \in \mathcal{N}^*} \quad (4.32)$$

Ακόμα, λόγω της Εξ. (4.27), προκύπτει

$$\boxed{E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}} \quad (4.33)$$

Τώρα, λόγω της Εξ. (4.32) κι επειδή

$$-\frac{A}{B} = e^{ikL}, \quad (4.34)$$

$$-\frac{A}{B} = -e^{ikL}, \quad (4.35)$$

οδηγούμαστε στην

$$-\frac{A}{B} = e^{i\pi n} = e^{-i\pi n}. \quad (4.36)$$

Τότε, όμως,

$$\frac{A}{B} = -1, \quad \text{αν } n \text{ άρτιο}, \quad (4.37)$$

$$\frac{A}{B} = +1, \quad \text{αν } n \text{ περιττό}. \quad (4.38)$$

Έτσι λοιπόν,

$$\psi_n(x) = Ae^{\frac{i\pi nx}{L}} + Ae^{-\frac{i\pi nx}{L}} = 2A \cos\left(\frac{\pi nx}{L}\right), \quad \text{αν } n \text{ περιττό,} \quad (4.39)$$

$$\psi_n(x) = Ae^{\frac{i\pi nx}{L}} - Ae^{-\frac{i\pi nx}{L}} = 2Ai \sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right), \quad \text{αν } n \text{ άρτιο.} \quad (4.40)$$

Ας προχωρήσουμε τώρα στην κανονικοποίηση

$$\int_{-L/2}^{L/2} 4|A|^2 \cos^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right) dx = 1, \quad \text{αν } n \text{ περιττό,} \quad (4.41)$$

$$\int_{-L/2}^{L/2} 4|A|^2 \sin^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right) dx = 1, \quad \text{αν } n \text{ άρτιο.} \quad (4.42)$$

Όμως, ισχύει

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos(mz) \cos(\ell z) dz = \frac{\pi}{2} \delta_{m\ell}, \quad (4.43)$$

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \sin(mz) \sin(\ell z) dz = \frac{\pi}{2} \delta_{m\ell}. \quad (4.44)$$

Οπότε, με αλλαγή μεταβλητής, $z = \frac{\pi x}{L}$, θα πρέπει να ισχύει

$$|A|^2 = \frac{1}{2L}. \quad (4.45)$$

Μπορούμε, επομένως, να εκλέξουμε,

$$A = \frac{1}{\sqrt{2L}}, \quad \text{αν } n \text{ περιττό,} \quad (4.46)$$

$$A = \frac{-i}{\sqrt{2L}}, \quad \text{αν } n \text{ άρτιο.} \quad (4.47)$$

Μετά από όλα αυτά, λαμβάνουμε

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi nx}{L}\right)} \quad \text{αν } n \text{ περιττό,} \quad (4.48)$$

$$\boxed{\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right)} \quad \text{αν } n \text{ άρτιο.} \quad (4.49)$$

Οι τέσσερις πρώτες ιδιοσυναρτήσεις ενός απειρόβαθου τετραγωνικού φρέατος παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.8.

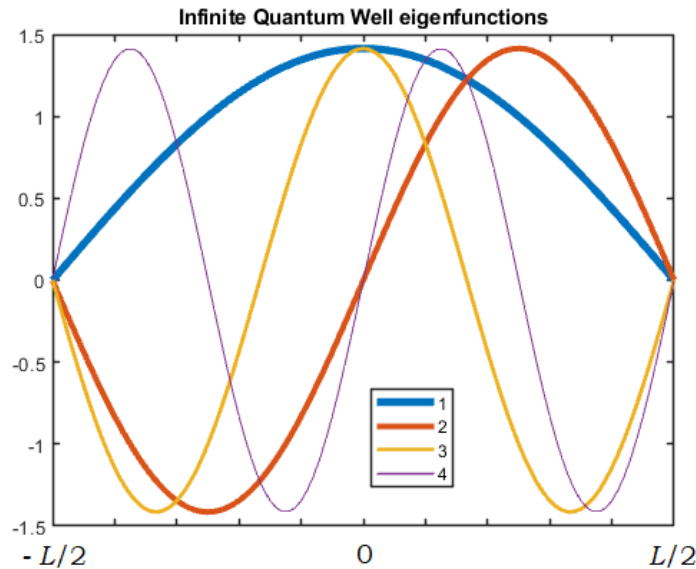
Ενώ, αν θεωρήσουμε το φρέαρ στο διάστημα $x \in [0, L]$, οι συνοριακές συνθήκες θα ήταν

$$0 = \psi(0) = A + B \Rightarrow B = -A, \quad (4.50)$$

$$0 = \psi(L) = Ae^{ikL} - Ae^{-ikL}. \quad (4.51)$$

Οπότε,

$$e^{2ikL} = 1 = e^{i2\pi n} \Rightarrow k = \frac{\pi n}{L}, n \in \mathcal{N}. \quad (4.52)$$



Εικόνα 4.8: Οι τέσσερις πρώτες ιδιοσυναρτήσεις, $\psi_n(x)$, ενός απειρόβαθου τετραγωνικού φρέατος. Ο αριθμός των κόμβων είναι $n - 1$.

Επομένως,

$$\psi_n(x) = Ae^{\frac{i\pi nx}{L}} - Ae^{-\frac{i\pi nx}{L}} = 2Ai \sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right). \quad (4.53)$$

Όμως, παρομοίως, ισχύει

$$\int_0^\pi \cos(mz) \cos(\ell z) dz = \frac{\pi}{2} \delta_{m\ell}, \quad (4.54)$$

$$\int_0^\pi \sin(mz) \sin(\ell z) dz = \frac{\pi}{2} \delta_{m\ell}. \quad (4.55)$$

Κανονικοποιώντας και πάλι, θα πρέπει

$$\int_0^L 4|A|^2 \sin^2\left(\frac{\pi nx}{L}\right) dx = 1. \quad (4.56)$$

Σύμφωνα με το παραπάνω, με αλλαγή μεταβλητής $z = \frac{\pi x}{L}$, θα πρέπει να ισχύει

$$|A|^2 = \frac{1}{2L}. \quad (4.57)$$

Μπορούμε, επομένως, να εκλέξουμε,

$$A = \frac{-i}{\sqrt{2L}}. \quad (4.58)$$

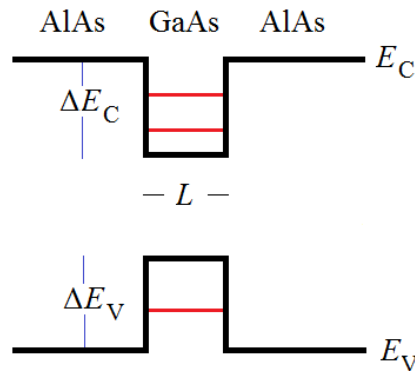
Οπότε,

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi nx}{L}\right) \quad (4.59)$$

Δηλαδή λαμβάνουμε την Εξ. (4.9). Να σημειωθεί πως μετακινώντας τη μεταβλητή κατά $L/2$ και χρησιμοποιώντας τριγωνομετρικές ταυτότητες, μπορούμε, φυσικά, να μεταβούμε από την Εξ. (4.59) στις Εξ. (4.48)-(4.49) και αντιστρόφως. Σημειώνεται πως για $\mu \neq 0$, $\hat{A}\vec{v} = a\vec{v} \Leftrightarrow \hat{A}(\mu\vec{v}) = a(\mu\vec{v})$, και ειδικότερα, φυσικά ισχύει για $\mu \pm 1$.

4.3 Κβαντικές τελείες

Ένα τυπικό τετραγωνικό, μη απειρόβαθο κβαντικό φρέαρ, σχηματιζόμενο σε μία ετεροδομή ημιαγωγών, παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.9. Φαίνεται το εύρος του φρέατος L , το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας E_C , το μέγιστο της ζώνης σθένους E_V , η ασυνέχεια μεταξύ των ζωνών αγωγιμότητας των δύο υλικών ΔE_C και η ασυνέχεια μεταξύ των ζωνών σθένους των δύο υλικών ΔE_V . Ανάλογα με τα υλικά, τα απαρτίζοντα την ετεροδομή, το κβαντικό φρέαρ έχει συνήθως ΔE_C και ΔE_V της τάξεως των 0.01-10 eV και L συνήθως της τάξεως των 0.1-100 nm.



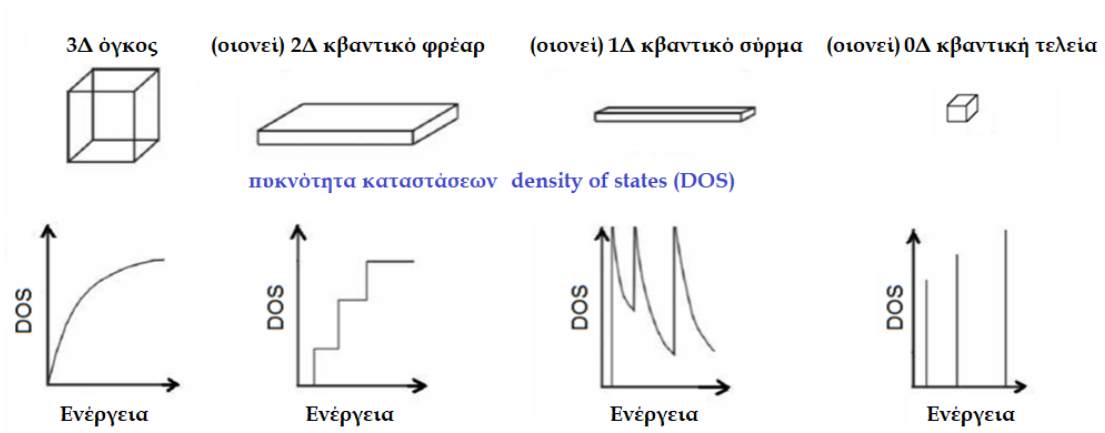
Εικόνα 4.9: Ένα τετραγωνικό, μη απειρόβαθο κβαντικό φρέαρ, επί παραδείγματι σε μία ετεροδομή AlAs/GaAs/AlAs. Φαίνεται το εύρος του φρέατος (well width) L , το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας (bottom of conduction band) E_C , το μέγιστο της ζώνης σθένους (top of valence band) E_V , η ασυνέχεια μεταξύ των ζωνών αγωγιμότητας των δύο υλικών (conduction band offset) ΔE_C και η ασυνέχεια μεταξύ των ζωνών σθένους των δύο υλικών (valence band offset) ΔE_V . Τα φρέατα έχουν ζωγραφιστεί, πολύ σχηματικά, ως τετραγωνικά, αλλά το σχήμα τους εξαρτάται από πολλούς παράγοντες, παράγοντες αρκετά πέρα από τον σκοπό του συγγράμματος.

Μπορούμε να έχουμε κβαντικό περιορισμό σε 1 διάσταση (1Δ), οπότε χρησιμοποιούμε την έκφραση **quantum well** (κβαντικό φρέαρ ή πηγάδι), σε 2 διαστάσεις (2Δ), οπότε χρησιμοποιούμε την έκφραση **quantum wire** (κβαντικό σύρμα ή νήμα), σε 3 διαστάσεις (3Δ), οπότε χρησιμοποιούμε την έκφραση **quantum dot** (κβαντική τελεία ή κουκίδα). Δείτε και την Εικόνα 4.10, όπου στην περίπτωση των κβαντικών τελειών το προφίλ της **πυκνότητας καταστάσεων** (density of states, DOS) γίνεται διακριτό. Οι κβαντικές τελείες ονομάζονται καμιά φορά και **τεχνητά άτομα** (artificial atoms), όταν είναι απλές ή **τεχνητά μόρια** (artificial molecules) εφ' όσον είναι συζευγμένες.

Ένα τετραγωνικό μη απειρόβαθο 1Δ κβαντικό φρέαρ έχει τουλάχιστον μία δέσμια στάθμη [7]. Στην Εικόνα 4.9 έχουμε υποθέσει ότι το φρέαρ της ζώνης αγωγιμότητας έχει δύο στάθμες, ενώ το φρέαρ της ζώνης σθένους μία. Ένα κβαντικό φρέαρ εύρους L περιέχει [7]

$$n = 1 + \text{Int} \left[\sqrt{\frac{2m^*U_bL^2}{\pi^2\hbar^2}} \right] \quad (4.60)$$

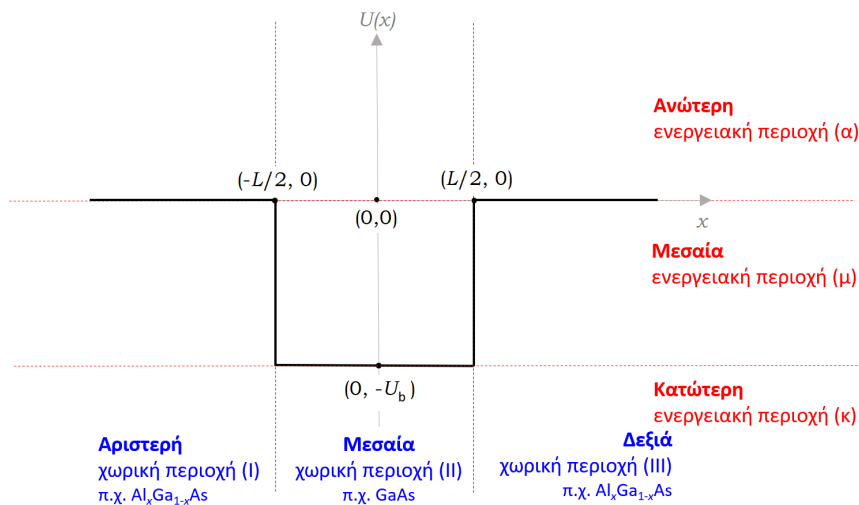
δέσμιες ενεργειακές καταστάσεις ή «στάθμες». $\text{Int}(\xi)$ είναι το ακέραιο μέρος του ξ , U_b είναι η ασυνέχεια της ζώνης αγωγιμότητας (ΔE_C) ή σθένους (ΔE_V) μεταξύ των δύο υλικών και m^* η ενεργός μάζα του ηλεκτρονίου ή της οπής. Οπότε, σε μία κβαντική τελεία μπορούμε να εκλέξουμε ως δισταθμικό σύστημα είτε μία στάθμη της ζώνης αγωγιμότητας και μία στάθμη της ζώνης σθένους, είτε δύο στάθμες της ζώνης αγωγιμότητας, είτε δύο στάθμες της ζώνης σθένους. Στις τελευταίες δύο περιπτώσεις, εννοείται, υπάρχει ο περιορισμός της Εξ. 4.60, δηλαδή ενδέχεται να υπάρχει μόνο μία στάθμη στη ζώνη αγωγιμότητας ή στη ζώνη σθένους. Στη συνέχεια θα αποδείξουμε την Εξ. 4.60 επιλύοντας πλήρως το πρόβλημα του τετραγωνικού πεπερασμένου φρέατος.



Εικόνα 4.10: Κβαντικός περιορισμός σε 0D, 1D, 2D και 3D (άνω) και οι αντίστοιχες πυκνότητες καταστάσεων (κάτω).

4.3.1 Πλήρης επίλυση του τετραγωνικού πεπερασμένου φρέατος

Θα προσπαθήσουμε να δώσουμε μία λεπτομερή επίλυση του τετραγωνικού πεπερασμένου φρέατος [8]. Έστω το πεπερασμένο τετραγωνικό φρέαρ δυναμικής ενέργειας της Εικόνας 4.11.



Εικόνα 4.11: Σχηματική απεικόνιση ενός πεπερασμένου τετραγωνικού κβαντικού φρέατος δυναμικής ενέργειας.

☐ Ας εξετάσουμε τις περιοχές με $E < 0$ [περιοχές (μ) και (κ)], όπου πιθανόν υπάρχουν δέσμιες καταστάσεις.

- Χωρικές περιοχές I και III. Στις περιοχές αυτές η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) = E\Psi(x) \iff \Psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x) = 0. \quad (4.61)$$

Εφόσον $E < 0$, μπορούμε να θέσουμε $\frac{2mE}{\hbar^2} := -q^2$, και έστω $q > 0$. Συνεπώς, η παραπάνω εξίσωση παίρνει τη μορφή

$$\Psi''(x) - q^2\Psi(x) = 0. \quad (4.62)$$

Τώρα δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής

$$\Psi(x) = Ae^{-qx} + Be^{qx} \implies \quad (4.63)$$

$$\Psi'(x) = -Aqe^{-qx} + Bqe^{qx} \implies \quad (4.64)$$

$$\Psi''(x) = Aq^2e^{-qx} + Bq^2e^{qx}, \quad (4.65)$$

οι οποίες, όπως εύκολα μπορεί να επαληθευθεί, ικανοποιούν την εξίσωση Schrödinger. Όμως, επειδή οι $\Psi(x)$ θα πρέπει να είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμες, θα πρέπει να ισχύει

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \Psi(x) = 0 \Rightarrow \Psi_{\text{III}}(x) = Ae^{-qx}, \quad (4.66)$$

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \Psi(x) = 0 \Rightarrow \Psi_{\text{I}}(x) = Be^{qx}. \quad (4.67)$$

Συνεπώς,

$$\boxed{\Psi_{\text{I}}(x) = Be^{qx}} \quad (4.68)$$

$$\boxed{\Psi_{\text{III}}(x) = Ae^{-qx}} \quad (4.69)$$

- **Χωρική περιοχή II.** Διακρίνουμε δύο υποπεριπτώσεις.

- **Ενεργειακή περιοχή κ.** Στην περιοχή αυτή η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) - U_b\Psi(x) = E\Psi(x) \Leftrightarrow \Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E + U_b)\Psi(x) = 0. \quad (4.70)$$

Εφόσον $E < -U_b \Leftrightarrow E + U_b < 0$, μπορούμε να θέσουμε $\frac{2m(E+U_b)}{\hbar^2} := -Q^2$, και έστω $Q > 0$. Συνεπώς, η παραπάνω εξίσωση παίρνει τη μορφή

$$\Psi''(x) - Q^2\Psi(x) = 0. \quad (4.71)$$

Δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής

$$\Psi(x) = \Gamma e^{-Qx} + \Delta e^{Qx} \Rightarrow \quad (4.72)$$

$$\Psi'(x) = -\Gamma Q e^{-Qx} + \Delta Q e^{Qx} \Rightarrow \quad (4.73)$$

$$\Psi''(x) = \Gamma Q^2 e^{-Qx} + \Delta Q^2 e^{Qx}, \quad (4.74)$$

οι οποίες, όπως εύκολα μπορεί να επαληθευθεί, ικανοποιούν την εξίσωση Schrödinger. Συνεπώς,

$$\boxed{\Psi_{\text{II}}(x) = \Gamma e^{-Qx} + \Delta e^{Qx}} \quad (4.75)$$

- **Ενεργειακή περιοχή μ.** Στην περιοχή αυτή η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) - U_b\Psi(x) = E\Psi(x) \Leftrightarrow \Psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E + U_b)\Psi(x) = 0. \quad (4.76)$$

Εφόσον $0 > E > -U_b \Leftrightarrow E + U_b > 0$, μπορούμε να θέσουμε $\frac{2m(E+U_b)}{\hbar^2} := k^2$, και έστω $k > 0$. Συνεπώς, η παραπάνω εξίσωση παίρνει τη μορφή

$$\Psi''(x) + k^2\Psi(x) = 0. \quad (4.77)$$

Δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής

$$\Psi(x) = \Gamma e^{ikx} + \Delta e^{-ikx} \Rightarrow \quad (4.78)$$

$$\Psi'(x) = ik\Gamma e^{ikx} - ik\Delta e^{-ikx} \Rightarrow \quad (4.79)$$

$$\Psi''(x) = -k^2\Gamma e^{ikx} - k^2\Delta e^{-ikx}, \quad (4.80)$$

είτε της μορφής

$$\Psi(x) = \Gamma \cos(kx) + \Delta \sin(kx) \Rightarrow \quad (4.81)$$

$$\Psi'(x) = -\Gamma k \sin(kx) + \Delta k \cos(kx) \Rightarrow \quad (4.82)$$

$$\Psi''(x) = -k^2 \Gamma \cos(kx) - k^2 \Delta \sin(kx), \quad (4.83)$$

οι οποίες, όπως εύκολα μπορεί να επαληθευθεί, ικανοποιούν αμφότερες την εξίσωση Schrödinger. Συνεπώς, μπορούμε να εκλέξουμε είτε

$$\boxed{\Psi_{\text{II}}(x) = \Gamma e^{ikx} + \Delta e^{-ikx}} \quad (4.84)$$

είτε

$$\boxed{\Psi_{\text{II}}(x) = \Gamma \cos(kx) + \Delta \sin(kx)} \quad (4.85)$$

Συνοψίζοντας, στη **χωρική περιοχή II** έχουμε δύο διαφορετικές λύσεις: την Εξ. 4.84 ή την Εξ. 4.85 για την **ενεργειακή περιοχή μ** και την Εξ. 4.75 για την **ενεργειακή περιοχή κ**.

© Για να βρούμε τη συνολική λύση, θα πρέπει, κατά τα γνωστά, να εξισώσουμε τις κυματοσυναρτήσεις και τις πρώτες τους παραγώγους στα όρια των χωρικών περιοχών, δηλαδή για $x = \pm \frac{L}{2}$.

© Ας προσπαθήσουμε να εξισώσουμε τις λύσεις των Εξ. 4.68, 4.69, και 4.75, δηλαδή στην **ενεργειακή περιοχή κ**, για $x = \pm \frac{L}{2}$.

* Για $x = -\frac{L}{2}$, έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\text{I}}\left(-\frac{L}{2}\right) &= Be^{-q\frac{L}{2}} \\ \Psi_{\text{II}}\left(-\frac{L}{2}\right) &= \Gamma e^{Q\frac{L}{2}} + \Delta e^{-Q\frac{L}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow Be^{-q\frac{L}{2}} = \Gamma e^{Q\frac{L}{2}} + \Delta e^{-Q\frac{L}{2}} \quad (4.86)$$

και

$$\left. \begin{aligned} \Psi'_{\text{I}}\left(-\frac{L}{2}\right) &= Bqe^{-q\frac{L}{2}} \\ \Psi'_{\text{II}}\left(-\frac{L}{2}\right) &= -\Gamma Qe^{Q\frac{L}{2}} + \Delta Qe^{-Q\frac{L}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow Bqe^{-q\frac{L}{2}} = -\Gamma Qe^{Q\frac{L}{2}} + \Delta Qe^{-Q\frac{L}{2}}. \quad (4.87)$$

Διαιρώντας κατά μέλη τις παραπάνω σχέσεις, προκύπτει

$$\begin{aligned} q &= \frac{-\Gamma Qe^{Q\frac{L}{2}} + \Delta Qe^{-Q\frac{L}{2}}}{\Gamma e^{Q\frac{L}{2}} + \Delta e^{-Q\frac{L}{2}}} \Rightarrow \\ \Gamma qe^{Q\frac{L}{2}} + \Delta qe^{-Q\frac{L}{2}} &= -\Gamma Qe^{Q\frac{L}{2}} + \Delta Qe^{-Q\frac{L}{2}} \Rightarrow \\ \Gamma(q + Q)e^{Q\frac{L}{2}} &= \Delta(Q - q)e^{-Q\frac{L}{2}} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\frac{\Gamma}{\Delta} = \frac{Q - q}{Q + q} e^{-QL}} \quad (4.88)$$

* Για $x = \frac{L}{2}$, έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\text{III}}\left(\frac{L}{2}\right) &= Ae^{-q\frac{L}{2}} \\ \Psi_{\text{II}}\left(\frac{L}{2}\right) &= \Gamma e^{-Q\frac{L}{2}} + \Delta e^{Q\frac{L}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow Ae^{-q\frac{L}{2}} = \Gamma e^{-Q\frac{L}{2}} + \Delta e^{Q\frac{L}{2}} \quad (4.89)$$

και

$$\left. \begin{aligned} \Psi'_{\text{III}}\left(\frac{L}{2}\right) &= -Aqe^{-q\frac{L}{2}} \\ \Psi'_{\text{II}}\left(\frac{L}{2}\right) &= -\Gamma Qe^{-Q\frac{L}{2}} + \Delta Qe^{Q\frac{L}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow -Aqe^{-q\frac{L}{2}} = -\Gamma Qe^{-Q\frac{L}{2}} + \Delta Qe^{Q\frac{L}{2}}. \quad (4.90)$$

Διαιρώντας κατά μέλη τις παραπάνω σχέσεις, προκύπτει

$$\begin{aligned} -q &= \frac{-\Gamma Qe^{-Q\frac{L}{2}} + \Delta Qe^{Q\frac{L}{2}}}{\Gamma e^{-Q\frac{L}{2}} + \Delta e^{Q\frac{L}{2}}} \Rightarrow \\ -\Gamma qe^{-Q\frac{L}{2}} - \Delta qe^{Q\frac{L}{2}} &= -\Gamma Qe^{-Q\frac{L}{2}} + \Delta Qe^{Q\frac{L}{2}} \Rightarrow \\ \Gamma(Q - q)e^{-Q\frac{L}{2}} &= \Delta(Q + q)e^{Q\frac{L}{2}} \Rightarrow \\ \boxed{\frac{\Gamma}{\Delta} = \frac{Q + q}{Q - q} e^{QL}} & \quad (4.91) \end{aligned}$$

Συνδυάζοντας τις Εξ. 4.88 και 4.91, προκύπτει ότι

$$\boxed{e^{-2QL} = \frac{(Q + q)^2}{(Q - q)^2}} \quad (4.92)$$

πράγμα το οποίο είναι **άτοπο**, καθώς για $Q, q > 0$, ισχύει ότι $e^{-2QL} < 1$, ενώ $\frac{(Q+q)^2}{(Q-q)^2} > 1$. Με άλλα λόγια, δεν υπάρχει λύση στην **κατώτερη ενεργειακή περιοχή κ**.

© Ας προσπαθήσουμε τώρα να εξισώσουμε τις λύσεις των Εξ. 4.68, 4.69, και 4.84, δηλαδή στην **ενεργειακή περιοχή μ**, για $x = \pm \frac{L}{2}$.

* Για $x = -\frac{L}{2}$, έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\text{I}}\left(-\frac{L}{2}\right) &= Be^{-q\frac{L}{2}} \\ \Psi_{\text{II}}\left(-\frac{L}{2}\right) &= \Gamma e^{-ik\frac{L}{2}} + \Delta e^{ik\frac{L}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow Be^{-q\frac{L}{2}} = \Gamma e^{-ik\frac{L}{2}} + \Delta e^{ik\frac{L}{2}} \quad (4.93)$$

και

$$\left. \begin{aligned} \Psi'_{\text{I}}\left(-\frac{L}{2}\right) &= Bqe^{-q\frac{L}{2}} \\ \Psi'_{\text{II}}\left(-\frac{L}{2}\right) &= \Gamma ike^{-ik\frac{L}{2}} - \Delta ike^{ik\frac{L}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow Bqe^{-q\frac{L}{2}} = \Gamma ike^{-ik\frac{L}{2}} - \Delta ike^{ik\frac{L}{2}}. \quad (4.94)$$

Διαιρώντας κατά μέλη τις παραπάνω σχέσεις, προκύπτει

$$\begin{aligned} q &= \frac{\Gamma ike^{-ik\frac{L}{2}} - \Delta ike^{ik\frac{L}{2}}}{\Gamma e^{-ik\frac{L}{2}} + \Delta e^{ik\frac{L}{2}}} \Rightarrow \\ \Gamma qe^{-ik\frac{L}{2}} + \Delta qe^{ik\frac{L}{2}} &= \Gamma ike^{-ik\frac{L}{2}} - \Delta ike^{ik\frac{L}{2}} \Rightarrow \\ \Delta(ik + q)e^{ik\frac{L}{2}} &= \Gamma(ik - q)e^{-ik\frac{L}{2}} \Rightarrow \\ \boxed{\frac{\Delta}{\Gamma} = \frac{ik - q}{ik + q} e^{-ikL}} & \quad (4.95) \end{aligned}$$

* Για $x = \frac{L}{2}$, έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \Psi_{\text{III}}\left(\frac{L}{2}\right) &= Ae^{-q\frac{L}{2}} \\ \Psi_{\text{II}}\left(\frac{L}{2}\right) &= \Gamma e^{ik\frac{L}{2}} + \Delta e^{-ik\frac{L}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow Ae^{-q\frac{L}{2}} = \Gamma e^{ik\frac{L}{2}} + \Delta e^{-ik\frac{L}{2}} \quad (4.96)$$

και

$$\left. \begin{aligned} \Psi'_{\text{III}}\left(\frac{L}{2}\right) &= -Aqe^{-q\frac{L}{2}} \\ \Psi'_{\text{II}}\left(\frac{L}{2}\right) &= \Gamma ike^{ik\frac{L}{2}} - \Delta ike^{-ik\frac{L}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow -Aqe^{-q\frac{L}{2}} = \Gamma ike^{ik\frac{L}{2}} - \Delta ike^{-ik\frac{L}{2}}. \quad (4.97)$$

Διαιρώντας κατά μέλη τις παραπάνω σχέσεις, προκύπτει

$$\begin{aligned} -q &= \frac{\Gamma ike^{ik\frac{L}{2}} - \Delta ike^{-ik\frac{L}{2}}}{\Gamma e^{ik\frac{L}{2}} + \Delta e^{-ik\frac{L}{2}}} \Rightarrow \\ -\Gamma qe^{ik\frac{L}{2}} - \Delta qe^{-ik\frac{L}{2}} &= \Gamma ike^{ik\frac{L}{2}} - \Delta ike^{-ik\frac{L}{2}} \Rightarrow \\ \Delta(ik - q)e^{-ik\frac{L}{2}} &= \Gamma(ik + q)e^{ik\frac{L}{2}} \Rightarrow \\ \boxed{\frac{\Delta}{\Gamma} = \frac{ik + q}{ik - q} e^{ikL}} & \quad (4.98) \end{aligned}$$

Συνδυάζοντας τις Εξ. 4.95 και 4.98, προκύπτει ότι

$$\boxed{e^{2ikL} = \frac{(ik - q)^2}{(ik + q)^2} = \frac{-k^2 + q^2 - 2ikq}{-k^2 + q^2 + 2ikq}} \quad (4.99)$$

Σε αυτό το σημείο, είναι χρήσιμο να ορίσουμε τις αδιάστατες ποσότητες

$$\boxed{\xi = \frac{kL}{2}} \quad \text{και} \quad \boxed{\eta = \frac{qL}{2}} \quad (4.100)$$

καθώς και την ποσότητα

$$\boxed{\alpha^2 := \xi^2 + \eta^2} \quad (4.101)$$

Άρα,

$$\alpha^2 = \frac{L^2}{4}(k^2 + q^2) = \frac{L^2}{4} \left[\frac{2m}{\hbar^2}(E + U_b) - \frac{2m}{\hbar^2}E \right] \Rightarrow$$

$$\boxed{\alpha^2 = \frac{mU_bL^2}{2\hbar^2}} \quad (4.102)$$

Έτσι, η α είναι σταθερά, δηλαδή ανεξάρτητη της ενέργειας E , κι εκφράζει την αποτελεσματικότητα του κβα-ντικού φρέατος. Είναι ανάλογη της μάζας m ή της ενεργού μάζας m^* του σωματιδίου, του βάθους του φρέατος U_b και του πλάτους του φρέατος στο τετράγωνο L^2 . Με άλλα λόγια, η ποσότητα α εκφράζει τη στέρωση της ελευθερίας του σωματιδίου, καθώς, όταν αυξάνεται η μάζα του ή το βάθος του πηγαδιού ή το πλάτος του πηγαδιού, το σωματίδιο καθίσταται περισσότερο δέσιμο.

Ορίζοντας επίσης την ποσότητα

$$\boxed{\beta^2 := -\xi^2 + \eta^2} \quad (4.103)$$

η Εξ. 4.99 γίνεται

$$e^{i4\xi} = \frac{-\xi^2 + \eta^2 - 2i\xi\eta}{-\xi^2 + \eta^2 + 2i\xi\eta} = \frac{\beta^2 - 2i\xi\eta}{\beta^2 + 2i\xi\eta} = \frac{(\beta^2 - 2i\xi\eta)^2}{(\beta^2 + 2i\xi\eta)(\beta^2 - 2i\xi\eta)} = \frac{\beta^4 - 4i\xi\eta\beta^2 - 4\xi^2\eta^2}{\beta^4 + 4\xi^2\eta^2} \Rightarrow$$

$$e^{i4\xi}(\beta^4 + 4\xi^2\eta^2) = \beta^4 - 4i\xi\eta\beta^2 - 4\xi^2\eta^2. \quad (4.104)$$

Όμως, από τον ορισμό των ποσοτήτων β^2 και α^2 , έχουμε

$$\beta^4 + 4\xi^2\eta^2 = \xi^4 + \eta^4 - 2\xi^2\eta^2 + 4\xi^2\eta^2 = (\xi^2 + \eta^2)^2 = \alpha^4 \quad (4.105)$$

και

$$\beta^4 - 4\xi^2\eta^2 = \beta^4 + 4\xi^2\eta^2 - 8\xi^2\eta^2 = \alpha^4 - 8\xi^2\eta^2. \quad (4.106)$$

Οπότε, η Εξ. 4.104 γίνεται

$$\alpha^4 e^{i4\xi} = \alpha^4 - 8\xi^2\eta^2 - 4i\xi\eta\beta^2 \Rightarrow$$

$$\alpha^4 \cos(4\xi) + i\alpha^4 \sin(4\xi) = (\alpha^4 - 8\xi^2\eta^2) + i(-4\xi\eta\beta^2) \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha^4 \cos(4\xi) &= \alpha^4 - 8\xi^2\eta^2 \\ \alpha^4 \sin(4\xi) &= -4\xi\eta\beta^2 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \tan(4\xi) = \frac{-4\xi\eta\beta^2}{\alpha^4 - 8\xi^2\eta^2}, \quad (4.107)$$

η οποία φαίνεται αρκετά περίπλοκη. Μπορεί να απλοποιηθεί κάπως, αν παρατηρήσουμε πως, προσθέτοντας κατά μέλη τις Εξ. 4.105 και 4.106, προκύπτει

$$2\beta^2 = 2\alpha^4 - 8\xi^2\eta^2 \Rightarrow \xi^2\eta^2 = \frac{\alpha^4 - \beta^4}{4} \Rightarrow \xi\eta = \frac{\sqrt{\alpha^4 - \beta^4}}{2}. \quad (4.108)$$

Η συνθήκη $\alpha^4 - \beta^4 > 0$ επαληθεύεται, καθώς, κάνοντας τις αντικαταστάσεις, ανάγεται στη συνθήκη $E + U_b > 0$, η οποία ισχύει, δεδομένου ότι βρισκόμαστε στην **ενεργειακή περιοχή μ**. Αντικαθιστώντας την παραπάνω σχέση στην Εξ. 4.107, καταλήγουμε στο ότι οι δέσμιες καταστάσεις στην ενεργειακή περιοχή μ δίνονται από τη συνθήκη

$$\boxed{\tan(4\xi) = \frac{2\sqrt{\alpha^4 - \beta^4}\beta^2}{\alpha^4 - 2\beta^4}} \quad (4.109)$$

Ας εξετάσουμε αν μπορούμε να καταλήξουμε σε απλούστερες μορφές από αυτήν της Εξ. 4.109, εξισώνοντας αυτήν τη φορά τις Εξ. 4.68, 4.69 και 4.85 (δηλαδή την εναλλακτική μορφή των λύσεων στη **χωρική περιοχή II**) για την **ενεργειακή περιοχή μ**, για $x = \pm \frac{L}{2}$. Θα εκμεταλλευτούμε το γεγονός ότι γνωρίζουμε πως εφόσον η **δυναμική ενέργεια** του συστήματος είναι **άρτια**, οι **ιδιοσυναρτήσεις** του θα είναι **εναλλάξ άρτιες και περιττές**.

- Για **άρτιες** κυματοσυναρτήσεις, $[\Psi(-x) = \Psi(x)]$:

- Στις **χωρικές περιοχές I και III** θα έχουμε

$$\Psi_I(x) = \Psi_{III}(-x) \Rightarrow Be^{qx} = Ae^{qx} \Rightarrow B = A. \quad (4.110)$$

- Στη **χωρική περιοχή II** θα έχουμε

$$\Psi_{II}(x) = \Psi_{II}(-x) \Rightarrow \Gamma \cos(kx) + \Delta \sin(kx) = \Gamma \cos(kx) - \Delta \sin(kx) \Rightarrow \Delta = 0. \quad (4.111)$$

Οπότε, συνοψίζοντας,

$$\Psi_{\text{I}}(x) = Ae^{qx}, \quad \Psi'_{\text{I}}(x) = Aqe^{qx}, \quad (4.112)$$

$$\Psi_{\text{II}}(x) = \Gamma \cos(kx), \quad \Psi'_{\text{II}}(x) = -\Gamma k \sin(kx), \quad (4.113)$$

$$\Psi_{\text{III}}(x) = Ae^{-qx}, \quad \Psi'_{\text{III}}(x) = -Aqe^{-qx}. \quad (4.114)$$

Απαιτώντας τη συνέχεια των $\Psi(x)$ και $\Psi'(x)$ στο σημείο $x = -\frac{L}{2}$, προκύπτει

$$\Psi_{\text{I}}(-\frac{L}{2}) = \Psi_{\text{II}}(-\frac{L}{2}) \Rightarrow Ae^{-q\frac{L}{2}} = \Gamma \cos\left(\frac{kL}{2}\right), \quad (4.115)$$

$$\Psi'_{\text{I}}(-\frac{L}{2}) = \Psi'_{\text{II}}(-\frac{L}{2}) \Rightarrow Aqe^{-q\frac{L}{2}} = \Gamma k \sin\left(\frac{kL}{2}\right). \quad (4.116)$$

Διαιρώντας κατά μέλη τις παραπάνω σχέσεις, προκύπτει

$$\boxed{\tan\left(\frac{kL}{2}\right) = \frac{q}{k}} \quad (4.117)$$

ή, εναλλακτικά,

$$\tan(\xi) = \frac{\eta}{\xi} \Rightarrow \boxed{\tan(\xi) = \frac{\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}}{\xi}} \quad (4.118)$$

Μπορεί εύκολα να επαληθευθεί ότι η απαίτηση για συνέχεια των $\Psi(x)$ και $\Psi'(x)$ στο σημείο $x = \frac{L}{2}$ οδηγεί στην ίδια ακριβώς έκφραση.

- Για **περιττές** κυματοσυναρτήσεις, [$\Psi(-x) = -\Psi(x)$]:

- Στις χωρικές περιοχές I και III θα έχουμε

$$-\Psi_{\text{I}}(x) = \Psi_{\text{III}}(-x) \Rightarrow -Be^{qx} = Ae^{qx} \Rightarrow B = -A. \quad (4.119)$$

- Στη χωρική περιοχή II θα έχουμε

$$-\Psi_{\text{II}}(x) = \Psi_{\text{II}}(-x) \Rightarrow -\Gamma \cos(kx) - \Delta \sin(kx) = \Gamma \cos(kx) - \Delta \sin(kx) \Rightarrow \Gamma = 0. \quad (4.120)$$

Οπότε, συνοψίζοντας,

$$\Psi_{\text{I}}(x) = -Ae^{qx}, \quad \Psi'_{\text{I}}(x) = -Aqe^{qx}, \quad (4.121)$$

$$\Psi_{\text{II}}(x) = \Delta \sin(kx), \quad \Psi'_{\text{II}}(x) = \Delta k \cos(kx), \quad (4.122)$$

$$\Psi_{\text{III}}(x) = Ae^{-qx}, \quad \Psi'_{\text{III}}(x) = -Aqe^{-qx}. \quad (4.123)$$

Απαιτώντας τη συνέχεια των $\Psi(x)$ και $\Psi'(x)$ στο σημείο $x = -\frac{L}{2}$, προκύπτει

$$\Psi_{\text{I}}(-\frac{L}{2}) = \Psi_{\text{II}}(-\frac{L}{2}) \Rightarrow -Ae^{-q\frac{L}{2}} = -\Delta \sin\left(\frac{kL}{2}\right), \quad (4.124)$$

$$\Psi'_{\text{I}}(-\frac{L}{2}) = \Psi'_{\text{II}}(-\frac{L}{2}) \Rightarrow -Aqe^{-q\frac{L}{2}} = \Delta k \cos\left(\frac{kL}{2}\right). \quad (4.125)$$

Διαιρώντας κατά μέλη τις παραπάνω σχέσεις, προκύπτει

$$\tan\left(\frac{kL}{2}\right) = -\frac{k}{q} \quad (4.126)$$

ή, εναλλακτικά,

$$\tan(\xi) = -\frac{\xi}{\eta} \Rightarrow \tan(\xi) = -\frac{\xi}{\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}} \quad (4.127)$$

Μπορεί εύκολα να επαληθευθεί ότι η απαίτηση για συνέχεια των $\Psi(x)$ και $\Psi'(x)$ στο σημείο $x = \frac{L}{2}$ οδηγεί στην ίδια ακριβώς έκφραση.

Συνοψίζοντας, χρησιμοποιώντας τις Εξ. 4.68, 4.69 και 4.85 κι εφαρμόζοντας τις συνοριακές συνθήκες (απαίτηση για συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και της πρώτης της παραγώγου στα όρια του φρέατος), καταλήγουμε ότι στην **ενεργειακή περιοχή** μ έχουμε δέσμιες καταστάσεις, περιγραφόμενες από το ζεύγος λύσεων

$$\tan(\xi) = \frac{\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}}{\xi} \quad \text{άρτιες} \quad \text{και} \quad \tan(\xi) = -\frac{\xi}{\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}} \quad \text{περιττές} \quad (4.128)$$

Υπενθυμίζεται ότι $k > 0 \iff \xi > 0$, ενώ η συνάρτηση $\tan(\xi)$ δεν ορίζεται για $\xi = (2\ell + 1)\frac{\pi}{2}$, $\forall \ell \in \mathbb{N}^*$. Οι Εξ. 4.128 μπορούν να επιλυθούν γραφικά. Για τον σκοπό αυτό, ορίζουμε τη συνάρτηση

$$f(\xi) := \frac{\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}}{\xi}, \quad (4.129)$$

με πεδίο ορισμού το διάστημα $(0, \alpha]$, και $f(\alpha) = 0$, $\lim_{\xi \rightarrow 0^+} f(\xi) = +\infty$, καθώς και τη συνάρτηση

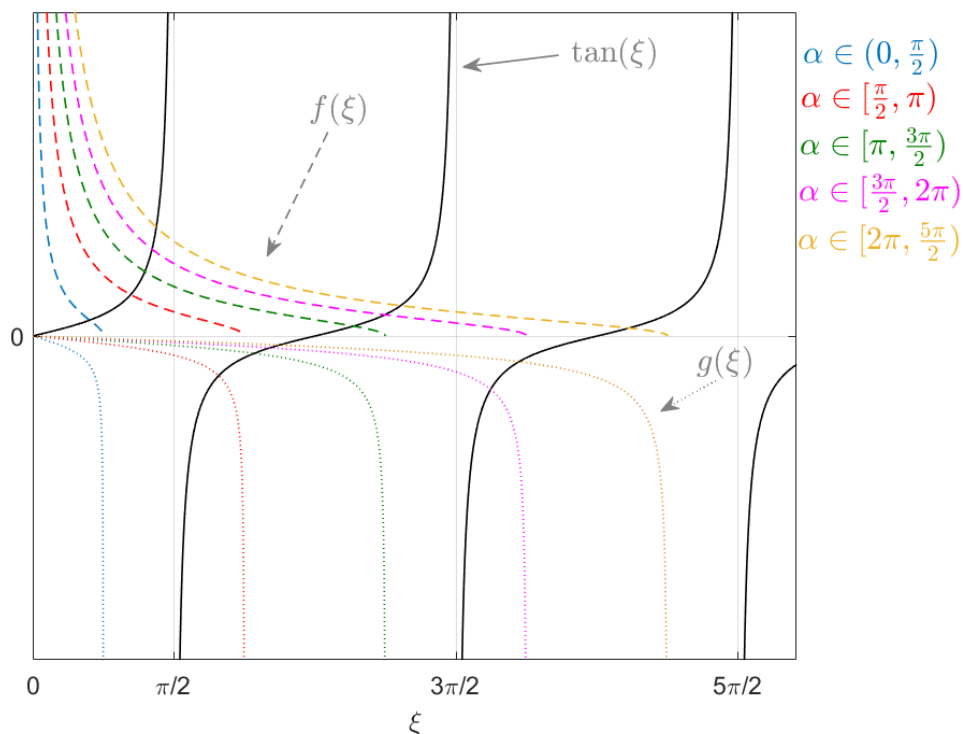
$$g(\xi) := -\frac{\xi}{\sqrt{\alpha^2 - \xi^2}}, \quad (4.130)$$

με πεδίο ορισμού το διάστημα $[0, \alpha)$ και $g(0) = 0$, $\lim_{\xi \rightarrow \alpha^-} g(\xi) = -\infty$. Η γραφική επίλυση των Εξ. 4.128 παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.12, για διάφορες τιμές της παραμέτρου α . Παρατηρούμε ότι

- για $\alpha \in (0, \pi/2)$ \exists 1 σημείο τομής των $\tan(\xi)$ και $f(\xi)$ και \nexists κανένα σημείο τομής των $\tan(\xi)$ και $g(\xi)$
- για $\alpha \in [\pi/2, \pi)$ \exists 1 σημείο τομής των $\tan(\xi)$ και $f(\xi)$ και \exists 1 σημείο τομής των $\tan(\xi)$ και $g(\xi)$
- για $\alpha \in [\pi, 3\pi/2)$ \exists 2 σημεία τομής των $\tan(\xi)$ και $f(\xi)$ και \exists 1 σημείο τομής των $\tan(\xi)$ και $g(\xi)$
- για $\alpha \in [3\pi/2, 2\pi)$ \exists 2 σημεία τομής των $\tan(\xi)$ και $f(\xi)$ και \exists 2 σημεία τομής των $\tan(\xi)$ και $g(\xi)$
- για $\alpha \in [2\pi, 5\pi/2)$ \exists 3 σημεία τομής των $\tan(\xi)$ και $f(\xi)$ και \exists 2 σημεία τομής των $\tan(\xi)$ και $g(\xi)$
- κ.ο.κ.

Συνεπώς, έχουμε πάντοτε **τουλάχιστον** μία λύση, ενώ κάθε φορά που η παράμετρος α αυξάνεται κατά $\frac{\pi}{2}$ προστίθεται μία επιπλέον λύση. Συνεπώς, ο αριθμός των λύσεων (δέσμιων καταστάσεων) θα είναι

$$n = 1 + \text{Int}\left[\frac{\alpha}{\frac{\pi}{2}}\right] = 1 + \text{Int}\left[\frac{\sqrt{\frac{mU_b L^2}{2\hbar^2}}}{\frac{\pi}{2}}\right] \Rightarrow$$



Εικόνα 4.12: Γραφική επίλυση των εξισώσεων $\tan(\xi) = f(\xi)$ (δείτε την Εξ. 4.129, διακεκομμένες γραμμές) και $\tan(\xi) = g(\xi)$ (δείτε την Εξ. 4.130, στικτές γραμμές), για διάφορες τιμές της παραμέτρου α , η οποία εκφράζει την αποτελεσματικότητα του κβαντικού φρέατος εντός των διαστημάτων που παρατίθενται δεξιά.

$$n = 1 + \text{Int} \left[\sqrt{\frac{2m^* U_b L^2}{\pi^2 \hbar^2}} \right] \quad (4.131)$$

η οποία είναι η αποδεικτέα Εξ 4.60.

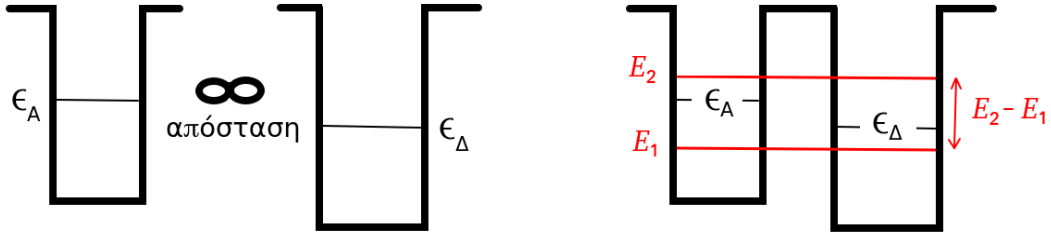
4.4 Από απομονωμένα μονοσταθμικά συστήματα σε δισταθμικό, τρισταθμικό, τετρασταθμικό σύστημα

Ορίζουμε τις συντομογραφίες: μονοσταθμικό σύστημα (ΜΣ), δισταθμικό σύστημα (ΔΣ), τρισταθμικό σύστημα (ΤΣ), πολυσταθμικό σύστημα (ΠΣ). Θα δούμε, αναλυτικά, πώς από δύο απομονωμένα ΜΣ καταλήγουμε σε ένα ΔΣ, καθώς τα ΜΣ πλησιάζουν. Ακολουθείται η περιγραφόμενη στο σύγγραμμα [9] πορεία. Σχετικά με τη μέθοδο Ισχυρής Δεσμεύσεως, οι αναγνώστες - αναγνώστριες μπορούν να συμβουλευτούν και τα βιβλία [10, 11, 12]. Θα ορίσουμε όλα τα σχετικά ολοκληρώματα: κανονικοποίηση, επιτόπιες ενέργειες, δυναμικές ενέργειες αλληλεπιδράσεως του ενός ΜΣ με το άλλο ΜΣ, ολοκληρώματα επικαλύψεως, ολοκληρώματα μεταβιβάσεως ή αλληλεπιδράσεως. Θα προσεγγίσουμε και θα επιλύσουμε το πρόβλημα σε τρία διαφορετικά προσεγγιστικά επίπεδα. Θα συζητηθούν επίσης το δεσμικό και το αντιδεσμικό τροχιακό του ΔΣ ως προς τις ιδιοτιμές και τα ιδιοανύσματα του. Ακόμα, θα αναλύσουμε με παρόμοιο τρόπο τρισταθμικό σύστημα (ΤΣ) εκ τριών ΜΣ και το τετρασταθμικό σύστημα εκ τεσσάρων ΜΣ.

4.4.1 Δισταθμικό Σύστημα

Ας δούμε, στο πλαίσιο της Ισχυρής Δεσμεύσεως, πώς φτιάχνεται ένα ΔΣ από δύο ΜΣ, τα οποία πλησιάζουμε. Ας υποθέσουμε πως τα απομονωμένα ΜΣ έχουν ιδιοενέργειες ϵ_A (το αριστερό) και ϵ_B (το δεξιά). Αυτό ισχύει

όσο είναι απομονωμένα. Όταν όμως τα φέρουμε πλησιέστερα και σχηματιστεί το ενιαίο σύστημα, δηλαδή το $\Delta\Sigma$, αυτό θα έχει άλλες ιδιοενέργειες, ας τις ονομάσουμε E_1 και E_2 . Αυτά εξιστορεί με τον τρόπο της η Εικόνα 4.13.



Εικόνα 4.13: Από δύο μονοσταθμικά συστήματα (ΜΣ), τα οποία βρίσκονται σε άπειρη απόσταση, το ένα αριστερά (Α) με ιδιοενέργεια ϵ_A και το άλλο δεξιά (Δ) με ιδιοενέργεια ϵ_Δ , στο ενιαίο δισταθμικό σύστημα ($\Delta\Sigma$), το οποίο έχει ιδιοενέργειες E_1 και E_2 , διαφορετικές από τις ϵ_A και ϵ_Δ .

Έστω δύο απομονωμένα μονοσταθμικά συστήματα (ΜΣ) σε άπειρη απόσταση. Το ένα απομονωμένο σύστημα αριστερά (Α) έχει χαμιλτονιανή $\hat{H}_A = \hat{T} + \hat{U}_A$, όπου \hat{T} είναι το κινητικό της μέρος και \hat{U}_A είναι το δυναμικό της μέρος. Αν η ιδιοκατάσταση του Α είναι $|\psi_A\rangle$ και η ιδιοενέργειά του είναι $\epsilon_A = \langle \psi_A | \hat{H}_A | \psi_A \rangle$, τότε

$$\hat{H}_A |\psi_A\rangle = \epsilon_A |\psi_A\rangle. \quad (4.132)$$

Το δεύτερο απομονωμένο σύστημα δεξιά (Δ) βρίσκεται σε άπειρη απόσταση από το πρώτο, με χαμιλτονιανή $\hat{H}_\Delta = \hat{T} + \hat{U}_\Delta$, ιδιοκατάσταση $|\psi_\Delta\rangle$ και ιδιοενέργεια $\epsilon_\Delta = \langle \psi_\Delta | \hat{H}_\Delta | \psi_\Delta \rangle$. Οπότε,

$$\hat{H}_\Delta |\psi_\Delta\rangle = \epsilon_\Delta |\psi_\Delta\rangle. \quad (4.133)$$

Αν έπειτα γίνει η υπόθεση πως τα συστήματα αυτά πλησιάζουν και είναι πλέον συζευγμένα, θα πρόκειται για ένα δισταθμικό σύστημα ($\Delta\Sigma$). Έστω πως οι ιδιοκαταστάσεις του δισταθμικού συστήματος μπορούν να γραφούν ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοκαταστάσεων των μονοσταθμικών συστημάτων, δηλαδή

$$|\psi\rangle = c_A |\psi_A\rangle + c_\Delta |\psi_\Delta\rangle. \quad (4.134)$$

Η χαμιλτονιανή του δισταθμικού συστήματος θα είναι

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta. \quad (4.135)$$

Οπότε, αντικαθιστώντας στη σχέση

$$\hat{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (4.136)$$

τις Εξ. (4.134) και (4.135), προκύπτει

$$(\hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta)(c_A |\psi_A\rangle + c_\Delta |\psi_\Delta\rangle) = E(c_A |\psi_A\rangle + c_\Delta |\psi_\Delta\rangle). \quad (4.137)$$

Πολλαπλασιάζοντας με $\langle \psi_A |$ την Εξ. (4.137), έχουμε

$$c_A \langle \psi_A | \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta | \psi_A \rangle + c_\Delta \langle \psi_A | \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta | \psi_\Delta \rangle = c_A E \langle \psi_A | \psi_A \rangle + c_\Delta E \langle \psi_A | \psi_\Delta \rangle. \quad (4.138)$$

Ονομάζουμε **επιτόπια ενέργεια** (on-site energy) του Α ΜΣ τον όρο

$$\epsilon_A := \langle \psi_A | \hat{T} + \hat{U}_A | \psi_A \rangle, \quad (4.139)$$

ενώ, το ολοκλήρωμα της δυναμικής ενέργειας του Δ ΜΣ στο Α ΜΣ είναι

$$U_{\Delta\Delta} := \langle \psi_A | \hat{U}_\Delta | \psi_A \rangle. \quad (4.140)$$

Ονομάζουμε **ολοκλήρωμα μεταβιβάσεως ή αλληλεπιδράσεως** (transfer or interaction integral) μεταξύ Α και Δ τον όρο

$$t_{\Delta\Delta} := \langle \psi_A | \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta | \psi_\Delta \rangle. \quad (4.141)$$

Τέλος, ονομάζουμε **ολοκλήρωμα επικαλύψεως** (overlap integral) μεταξύ Α και Δ τον όρο

$$S_{\Delta\Delta} := \langle \psi_A | \psi_\Delta \rangle. \quad (4.142)$$

Δεδομένου ότι οι ιδιοσυναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες,

$$\langle \psi_A | \psi_A \rangle = \langle \psi_\Delta | \psi_\Delta \rangle = 1. \quad (4.143)$$

Συνεπώς, η Εξ. (4.138) μπορεί να γραφεί ως

$$\boxed{c_A \epsilon_A + c_A U_{\Delta\Delta} + c_\Delta t_{\Delta\Delta} = c_A E + c_\Delta E S_{\Delta\Delta}} \quad (4.144)$$

Δεδομένου ότι το ολοκλήρωμα $U_{\Delta\Delta}$ είναι πολύ μικρό, αν το αγνοήσουμε, τότε η Εξ. (4.144) φτάνει στην απλούστερη μορφή

$$\boxed{c_A \epsilon_A + c_\Delta t_{\Delta\Delta} = c_A E + c_\Delta E S_{\Delta\Delta}} \quad (4.145)$$

Η θεώρηση πως το $U_{\Delta\Delta}$ είναι αμελητέο είναι η ουσία της μεθόδου, η οποία καλείται *Ισχυρή Δέσμευση* (*Tight Binding*). Σημαίνει πως μπορούμε προσεγγιστικά να αγνοήσουμε τη δυναμική ενέργεια των άλλων θέσεων κοντά σε μία συγκεκριμένη θέση, οπότε,

$$\langle \psi_A | \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta | \psi_A \rangle \approx \langle \psi_A | \hat{T} + \hat{U}_A | \psi_A \rangle = \epsilon_A \quad (4.146)$$

ή γράφοντάς το αλλιώς,

$$\langle \psi_A | \hat{H} | \psi_A \rangle \approx \langle \psi_A | \hat{H}_A | \psi_A \rangle = \epsilon_A. \quad (4.147)$$

Επιπλέον, δεδομένου ότι το ολοκλήρωμα επικαλύψεως $S_{\Delta\Delta}$ είναι κάπως μικρό, αν αγνοηθεί κι αυτό, τότε η Εξ. (4.145) φτάνει στην ακόμη απλούστερη μορφή

$$\boxed{c_A \epsilon_A + c_\Delta t_{\Delta\Delta} = c_A E} \quad (4.148)$$

Αντίστοιχα, αν, εκκινώντας από την Εξ. (4.137), πολλαπλασιάσουμε με $\langle \psi_\Delta |$, έχουμε

$$c_A \langle \psi_\Delta | \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta | \psi_A \rangle + c_\Delta \langle \psi_\Delta | \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta | \psi_\Delta \rangle = c_A E \langle \psi_\Delta | \psi_A \rangle + c_\Delta E \langle \psi_\Delta | \psi_\Delta \rangle. \quad (4.149)$$

Ορίζοντας με τον ίδιο τρόπο τα ολοκληρώματα, έχουμε

$$\epsilon_\Delta := \langle \psi_\Delta | \hat{T} + \hat{U}_\Delta | \psi_\Delta \rangle, \quad (4.150)$$

$$U_{\Delta\Delta} := \langle \psi_\Delta | \hat{U}_A | \psi_\Delta \rangle, \quad (4.151)$$

$$t_{\Delta\Delta} := \langle \psi_\Delta | \hat{T} + \hat{U}_A + \hat{U}_\Delta | \psi_A \rangle, \quad (4.152)$$

$$S_{\Delta\Delta} := \langle \psi_\Delta | \psi_A \rangle. \quad (4.153)$$

Συνεπώς, η Εξ. (4.149) γράφεται

$$\boxed{c_A t_{\Delta\Delta} + c_\Delta \epsilon_\Delta + c_\Delta U_{\Delta\Delta} = c_A E S_{\Delta\Delta} + c_\Delta E} \quad (4.154)$$

Αν αγνοήσουμε το ολοκλήρωμα $U_{\Delta A \Delta}$, εφαρμόζοντας *Ισχυρή Δέσμευση*, τότε η Εξ. (4.154) γράφεται απλούστερα

$$\boxed{c_A t_{\Delta A} + c_\Delta \epsilon_\Delta = c_A E S_{\Delta A} + c_\Delta E} \quad (4.155)$$

ενώ, αν αγνοηθεί και το ολοκλήρωμα $S_{\Delta A}$, τότε η Εξ. (4.155) γράφεται ακόμη απλούστερα

$$\boxed{c_A t_{\Delta A} + c_\Delta \epsilon_\Delta = c_\Delta E} \quad (4.156)$$

Συνεπώς, ανάλογα με το προσεγγιστικό επίπεδο που επιλέγεται, πρέπει να επιλυθεί το σύστημα των Εξ. (4.144) και (4.154) ή των Εξ. (4.145) και (4.155) ή των Εξ. (4.148) και (4.156).

4.4.1.1 Πρώτο προσεγγιστικό επίπεδο

Αν δεν αγνοήσουμε κάποιο από τα ολοκληρώματα $U_{A \Delta A}$, $U_{\Delta A \Delta}$ και $S_{A \Delta}$, $S_{\Delta A}$, τότε πρέπει να επιλύσουμε το σύστημα των Εξ. (4.144) και (4.154). Επειδή όλα τα ολοκληρώματα είναι πραγματικά και λόγω ερμιτιανότητας, μπορούμε να ορίσουμε

$$t = t_{A \Delta} = t_{\Delta A}^* = t_{\Delta A} \in \mathcal{R}, \quad (4.157)$$

$$S = S_{A \Delta} = S_{\Delta A}^* = S_{\Delta A} \in \mathcal{R}. \quad (4.158)$$

Ακόμα, ας υποθέσουμε, χάριν απλότητας,

$$U = U_{A \Delta A} = U_{\Delta A \Delta}^* = U_{\Delta A \Delta} \in \mathcal{R}. \quad (4.159)$$

Επομένως, το σύστημα των εξισώσεων μπορεί να γραφτεί σε μορφή πινάκων

$$\begin{bmatrix} \epsilon_A + U & t \\ t & \epsilon_\Delta + U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E & ES \\ ES & E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} \quad (4.160)$$

ή

$$\begin{bmatrix} \epsilon_A + U - E & t - ES \\ t - ES & \epsilon_\Delta + U - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.161)$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της ορίζουσάς του,

$$\begin{aligned} (\epsilon_A + U - E)(\epsilon_\Delta + U - E) - (t - ES)^2 &= 0 \Rightarrow \\ E^2 - (\epsilon_A + \epsilon_\Delta + 2U)E + (\epsilon_A + U)(\epsilon_\Delta + U) - t^2 - E^2 S^2 + 2StE &= 0 \Rightarrow \\ (1 - S^2)E^2 - (\epsilon_A + \epsilon_\Delta + 2U - 2St)E + (\epsilon_A + U)(\epsilon_\Delta + U) - t^2 &= 0. \end{aligned}$$

Καταλήγουμε, λοιπόν, σε μία δευτεροβάθμια εξίσωση ως προς την ενέργεια E . Η διακρίνουσα είναι

$$\Delta = (\epsilon_A + \epsilon_\Delta + 2U - 2St)^2 - 4(1 - S^2)[(\epsilon_A + U)(\epsilon_\Delta + U) - t^2].$$

Συνεπώς, οι ιδιοτιμές είναι

$$E_{1,2} = \frac{(\epsilon_A + \epsilon_\Delta + 2U - 2St) \pm \sqrt{(\epsilon_A + \epsilon_\Delta + 2U - 2St)^2 - 4(1 - S^2)[(\epsilon_A + U)(\epsilon_\Delta + U) - t^2]}}{2(1 - S^2)}. \quad (4.162)$$

Αν υποθέσουμε ότι τα δύο ΜΣ είναι **ταυτόσημα**, τότε $\epsilon_A = \epsilon_\Delta := \epsilon$ και οι υπολογισμοί απλοποιούνται. Πράγματι, ο πίνακας γίνεται

$$\begin{bmatrix} \epsilon + U - E & t - ES \\ t - ES & \epsilon + U - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.163)$$

και από τη συνθήκη μηδενισμού της ορίζουσας, έχουμε

$$\begin{aligned} (\epsilon + U - E)^2 - (t - ES)^2 &= 0 \Rightarrow \\ (\epsilon + U - E + t - ES)(\epsilon + U - E - t + ES) &= 0 \Rightarrow \\ E &= \frac{\epsilon + U \pm t}{1 \pm S}. \end{aligned} \quad (4.164)$$

Ας θεωρήσουμε $\epsilon + U > 0$, λαμβάνοντας κατάλληλα το επίπεδο αναφοράς. Επίσης, συνήθως το $|t|$ είναι μικρό σχετικά με το $|\epsilon + U|$. Εάν θεωρήσουμε $t < 0$ και $S > 0$, τότε $E_1 = \frac{\epsilon + U + t}{1 + S} < E_2 = \frac{\epsilon + U - t}{1 - S}$. Αυτό τεκμηριώνεται από τους κόμβους των ιδιοανυσμάτων, όπως θα φανεί αμέσως παρακάτω. Σύμφωνα με το θεώρημα των κόμβων, ο αριθμός των κόμβων (ριζών) αυξάνεται κατά μία μονάδα καθώς προχωράμε από τη βασική κατάσταση (κανένας κόμβος) στις ανώτερες. Συνεπώς, η πρώτη διεγερμένη κατάσταση είναι εκείνη, η οποία θα εμφανίζει έναν κόμβο. Για τον υπολογισμό των ιδιοανυσμάτων χρησιμοποιούνται οι σχέσεις

$$\left. \begin{aligned} (\epsilon + U - E)c_A + (t - ES)c_\Delta &= 0 \\ (t - ES)c_A + (\epsilon + U - E)c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\}. \quad (4.165)$$

Για το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή $E_1 = \frac{\epsilon + U + t}{1 + S}$ ιδιοάνυσμα, αντικαθιστώντας την ιδιοτιμή E_1 στην Εξ. (4.165), έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \left(\epsilon + U - \frac{\epsilon + U + t}{1 + S} \right) c_A + \left(t - \frac{\epsilon + U + t}{1 + S} S \right) c_\Delta &= 0 \\ \left(t - \frac{\epsilon + U + t}{1 + S} S \right) c_A + \left(\epsilon + U - \frac{\epsilon + U + t}{1 + S} \right) c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\epsilon + U + \epsilon S + US - \epsilon - U - t}{1 + S} \right) c_A + \left(\frac{t + tS - \epsilon S - US - tS}{1 + S} \right) c_\Delta &= 0 \\ \left(\frac{t + tS - \epsilon S - US - tS}{1 + S} \right) c_A + \left(\frac{\epsilon + U + \epsilon S + US - \epsilon - U - t}{1 + S} \right) c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} (\epsilon S + US - t)c_A + (t - \epsilon S - US)c_\Delta &= 0 \\ (t - \epsilon S - US)c_A + (\epsilon S + US - t)c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\}.$$

Συνεπώς,

$$c_A = c_\Delta = c. \quad (4.166)$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_1 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix}.$$

Για να είναι κανονικοποιημένο, πρέπει

$$|\vec{v}_1|^2 = 1 \Rightarrow 2|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = 1/\sqrt{2}.$$

Άρα, επί παραδείγματι, μία βολική εκλογή είναι

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.167)$$

Για το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή $E_2 = \frac{\epsilon+U-t}{1-S}$ ιδιοάνυσμα, αντικαθιστώντας την ιδιοτιμή E_2 στην Εξ. (4.165), έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \left(\epsilon + U - \frac{\epsilon + U - t}{1 - S} \right) c_A + \left(t - \frac{\epsilon + U - t}{1 - S} S \right) c_\Delta = 0 \\ \left(t - \frac{\epsilon + U - t}{1 - S} S \right) c_A + \left(\epsilon + U - \frac{\epsilon + U - t}{1 - S} \right) c_\Delta = 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\epsilon + U - \epsilon S - US - \epsilon - U + t}{1 - S} \right) c_A + \left(\frac{t - tS - \epsilon S - US + tS}{1 - S} \right) c_\Delta = 0 \\ \left(\frac{t - tS - \epsilon S - US + tS}{1 - S} \right) c_A + \left(\frac{\epsilon + U - \epsilon S - US - \epsilon - U + t}{1 - S} \right) c_\Delta = 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} (t - \epsilon S - US)c_A + (t - \epsilon S - US)c_\Delta = 0 \\ (t - \epsilon S - US)c_A + (t - \epsilon S - US)c_\Delta = 0 \end{aligned} \right\}.$$

Συνεπώς,

$$c_A = -c_\Delta = c. \quad (4.168)$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_2 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_2 = \begin{bmatrix} c \\ -c \end{bmatrix}.$$

Για να είναι κανονικοποιημένο, πρέπει

$$|\vec{v}_2|^2 = 1 \Rightarrow 2|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = 1/\sqrt{2}.$$

Αρα, επί παραδείγματι, μία βολική εκλογή είναι

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.169)$$

Όπως φαίνεται, το ιδιοάνυσμα \vec{v}_1 της στάθμης E_1 δεν έχει κόμβο, ενώ το ιδιοάνυσμα \vec{v}_2 της στάθμης E_2 έχει έναν κόμβο. Συνεπώς, η στάθμη $E_1 = \frac{\epsilon+U+t}{1+S}$ με ιδιοάνυσμα \vec{v}_1 είναι η βασική, ενώ η $E_2 = \frac{\epsilon+U-t}{1-S}$ με ιδιοάνυσμα \vec{v}_2 είναι η πρώτη διεγερμένη. Για να ισχύει $E_1 = \frac{\epsilon+U+t}{1+S} < E_2 = \frac{\epsilon+U-t}{1-S}$, θα πρέπει να ισχύουν $S > 0$ και $t < 0$ και οι αριθμητές να είναι θετικοί. Οι κυματοσυναρτήσεις της θεμελιώδους και της πρώτης διεγερμένης στάθμης του ενιαίου κβαντικού φρέατος (δηλαδή του $\Delta\Sigma$) απεικονίζονται στην Εικόνα 4.14.

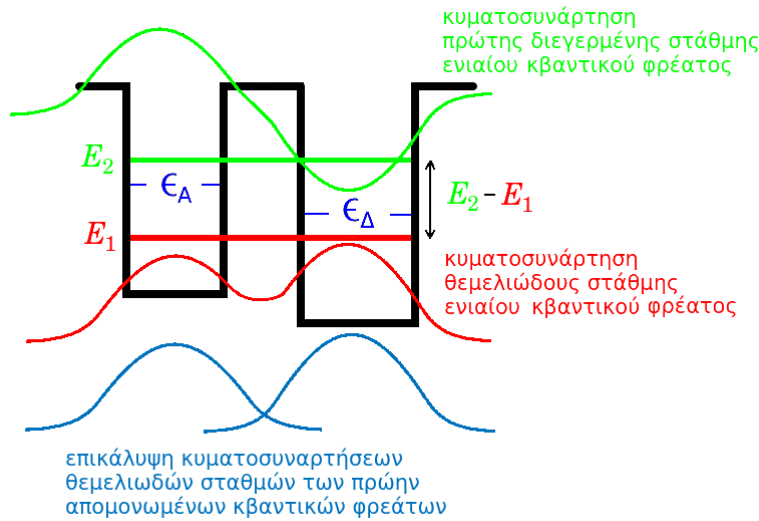
4.4.1.2 Δεύτερο προσεγγιστικό επίπεδο

Αν αγνοηθούν τα ολοκληρώματα $U_{\Delta\Delta\Delta} = U_{\Delta\Delta\Delta} = U$, αλλά δεν αγνοηθούν τα $S_{\Delta\Delta} = S_{\Delta\Delta} = S$, τότε το προς επίλυση σύστημα είναι αυτό των Εξ. (4.145) και (4.155), δυνάμενο να γραφεί σε μορφή πινάκων ως

$$\begin{bmatrix} \epsilon_A & t \\ t & \epsilon_\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E & ES \\ ES & E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} \quad (4.170)$$

ή

$$\begin{bmatrix} \epsilon_A - E & t - ES \\ t - ES & \epsilon_\Delta - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.171)$$



Εικόνα 4.14: Οι κυματοσυναρτήσεις της θεμελιώδους και της πρώτης διεγερμένης στάθμης του ενιαίου κβαντικού φρέατος (δηλαδή του $\Delta\Sigma$), οι οποίες παράγονται από την κανονικοποιημένη πρόσθεση (όπως δείχνει το ιδιοάνυσμα \vec{v}_1) και από την κανονικοποιημένη αφαίρεση (όπως δείχνει το ιδιοάνυσμα \vec{v}_2) των κυματοσυναρτήσεων των θεμελιωδών σταθμών των δύο πρώην απομονωμένων κβαντικών φρεάτων (των δύο ΜΣ δηλαδή).

Οι ιδιοτιμές του πίνακα προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της ορίζουσάς του, δηλαδή

$$\begin{aligned} (\epsilon_A - E)(\epsilon_\Delta - E) - (t - ES)^2 &= 0 \Rightarrow \\ E^2 - (\epsilon_A + \epsilon_\Delta)E + \epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2 - E^2S^2 + 2StE &= 0 \Rightarrow \\ (1 - S^2)E^2 - (\epsilon_A + \epsilon_\Delta - 2St)E + \epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2 &= 0. \end{aligned}$$

Καταλήγουμε, λοιπόν, σε μία δευτεροβάθμια εξίσωση ως προς την ενέργεια E . Η διακρίνουσα είναι

$$\Delta = (\epsilon_A + \epsilon_\Delta - 2St)^2 - 4(1 - S^2)(\epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2). \quad (4.172)$$

Συνεπώς, οι ιδιοτιμές είναι

$$E_{1,2} = \frac{(\epsilon_A + \epsilon_\Delta - 2St) \pm \sqrt{(\epsilon_A + \epsilon_\Delta - 2St)^2 - 4(1 - S^2)(\epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2)}}{2(1 - S^2)}. \quad (4.173)$$

Αν υποθέσουμε ότι τα δύο ΜΣ είναι **ταυτόσημα**, τότε $\epsilon_A = \epsilon_\Delta := \epsilon$ και οι υπολογισμοί απλοποιούνται. Πράγματι, το σύστημα εξισώσεων σε μορφή πινάκων γίνεται

$$\begin{bmatrix} \epsilon - E & t - ES \\ t - ES & \epsilon - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.174)$$

και από τη συνθήκη μηδενισμού της ορίζουσας, έχουμε

$$\begin{aligned} (\epsilon - E)^2 - (t - ES)^2 &= 0 \Rightarrow \\ (\epsilon - E + t - ES)(\epsilon - E - t + ES) &= 0 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$E = \frac{\epsilon \pm t}{1 \pm S}. \quad (4.175)$$

Ας θεωρήσουμε $\epsilon > 0$, λαμβάνοντας κατάλληλα το επίπεδο αναφοράς. Επίσης, συνήθως το $|t|$ είναι μικρό σχετικά με το $|\epsilon|$. Εάν $t < 0$ (ως έλξη των δύο ΜΣ) και $S > 0$ (ως ολοκλήρωση επικάλυψης των ιδιοσυναρτήσεων των δύο θεμελιωδών σταθμών των ΜΣ), τότε $E_1 = \frac{\epsilon+t}{1+S} < E_2 = \frac{\epsilon-t}{1-S}$. Αυτό τεκμηριώνεται

από τους κόμβους (nodes) των ιδιοανυσμάτων, όπως θα συνειδητοποιήσουμε λίγο παρακάτω. Σύμφωνα με το θεώρημα των κόμβων, ο αριθμός των κόμβων (ριζών) αυξάνεται κατά 1 όπως μετακινούμαστε από τη θεμελιώδη στάθμη (χωρίς κόμβους) προς υψηλότερες στάθμες. Έτσι, η πρώτη διεγερμένη στάθμη είναι αυτή που έχει έναν κόμβο. Για τον υπολογισμό των ιδιοανυσμάτων χρησιμοποιούνται οι σχέσεις

$$\left. \begin{aligned} (\epsilon - E)c_A + (t - ES)c_\Delta &= 0 \\ (t - ES)c_A + (\epsilon - E)c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (4.176)$$

Για το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή $E_1 = \frac{\epsilon+t}{1+S}$ ιδιοάνυσμα, αντικαθιστώντας την στην Εξ. (4.176), έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \left(\epsilon - \frac{\epsilon+t}{1+S} \right) c_A + \left(t - \frac{\epsilon+t}{1+S} S \right) c_\Delta &= 0 \\ \left(t - \frac{\epsilon+t}{1+S} S \right) c_A + \left(\epsilon - \frac{\epsilon+t}{1+S} \right) c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\epsilon + \epsilon S - \epsilon - t}{1+S} \right) c_A + \left(\frac{t + tS - \epsilon S - tS}{1+S} \right) c_\Delta &= 0 \\ \left(\frac{t + tS - \epsilon S - tS}{1+S} \right) c_A + \left(\frac{\epsilon + \epsilon S - \epsilon - t}{1+S} \right) c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} (\epsilon S - t)c_A + (t - \epsilon S)c_\Delta &= 0 \\ (t - \epsilon S)c_A + (\epsilon S - t)c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\}.$$

Συνεπώς,

$$c_A = c_\Delta = c. \quad (4.177)$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_1 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} c \\ c \end{bmatrix}.$$

Για να είναι κανονικοποιημένο,

$$|\vec{v}_1|^2 = 1 \Rightarrow 2|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = 1/\sqrt{2}.$$

Άρα, μία βολική εκλογή είναι

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.178)$$

Για το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή $E_2 = \frac{\epsilon-t}{1-S}$ ιδιοάνυσμα, αντικαθιστώντας την στην Εξ. (4.176), έχουμε

$$\left. \begin{aligned} \left(\epsilon - \frac{\epsilon-t}{1-S} \right) c_A + \left(t - \frac{\epsilon-t}{1-S} S \right) c_\Delta &= 0 \\ \left(t - \frac{\epsilon-t}{1-S} S \right) c_A + \left(\epsilon - \frac{\epsilon-t}{1-S} \right) c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\epsilon - \epsilon S - \epsilon + t}{1-S} \right) c_A + \left(\frac{t - tS - \epsilon S + tS}{1-S} \right) c_\Delta &= 0 \\ \left(\frac{t - tS - \epsilon S + tS}{1-S} \right) c_A + \left(\frac{\epsilon - \epsilon S - \epsilon + t}{1-S} \right) c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} (t - \epsilon S)c_A + (t - \epsilon S)c_\Delta &= 0 \\ (t - \epsilon S)c_A + (t - \epsilon S)c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\}.$$

Συνεπώς,

$$c_A = -c_\Delta = c. \quad (4.179)$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_2 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_2 = \begin{bmatrix} c \\ -c \end{bmatrix}.$$

Για να είναι κανονικοποιημένο,

$$|\vec{v}_2|^2 = 1 \Rightarrow 2|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = 1/\sqrt{2}.$$

Άρα, μία βολική εκλογή είναι

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.180)$$

Παρατηρούμε πως το ιδιοάνυσμα \vec{v}_1 της στάθμης με ιδιοενέργεια E_1 δεν έχει κόμβο, ενώ το ιδιοάνυσμα \vec{v}_2 της στάθμης με ιδιοενέργεια E_2 έχει έναν κόμβο. Συνεπώς, η στάθμη με ιδιοενέργεια $E_1 = \frac{\epsilon+t}{1+S}$ και ιδιοάνυσμα \vec{v}_1 είναι η βασική, ενώ η στάθμη με ιδιοενέργεια $E_2 = \frac{\epsilon-t}{1-S}$ και ιδιοάνυσμα \vec{v}_2 είναι η πρώτη διεγερμένη. Για να ισχύει $E_1 = \frac{\epsilon+t}{1+S} < E_2 = \frac{\epsilon-t}{1-S}$, θα πρέπει να ισχύουν $S > 0$ και $t < 0$ και οι αριθμητές να είναι θετικοί.

4.4.1.3 Τρίτο προσεγγιστικό επίπεδο

Αν αγνοηθούν τόσο τα ολοκληρώματα $U_{A\Delta A} = U_{\Delta A \Delta} = U$ όσο και τα $S_{A\Delta} = S_{\Delta A} = S$, τότε το προς επίλυση σύστημα είναι αυτό των Εξ. (4.148) και (4.156), δυνάμενο να γραφεί σε μορφή πινάκων ως

$$\begin{bmatrix} \epsilon_A & t \\ t & \epsilon_\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} \quad (4.181)$$

ή

$$\begin{bmatrix} \epsilon_A - E & t \\ t & \epsilon_\Delta - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_A \\ c_\Delta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.182)$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της ορίζουσάς του, δηλαδή

$$\begin{aligned} (\epsilon_A - E)(\epsilon_\Delta - E) - t^2 &= 0 \Rightarrow \\ E^2 - (\epsilon_A + \epsilon_\Delta)E + \epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2 &= 0. \end{aligned}$$

Καταλήγουμε, λοιπόν, σε μία δευτεροβάθμια εξίσωση ως προς την ενέργεια E . Η διακρίνουσα είναι

$$\Delta = (\epsilon_A + \epsilon_\Delta)^2 - 4(\epsilon_A\epsilon_\Delta - t^2) = (\epsilon_A - \epsilon_\Delta)^2 + 4t^2. \quad (4.183)$$

Συνεπώς, οι ιδιοτιμές είναι

$$E_{1,2} = \frac{\epsilon_A + \epsilon_\Delta \pm \sqrt{(\epsilon_A - \epsilon_\Delta)^2 + 4t^2}}{2} = \frac{\epsilon_A + \epsilon_\Delta}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\epsilon_A - \epsilon_\Delta}{2}\right)^2 + t^2}. \quad (4.184)$$

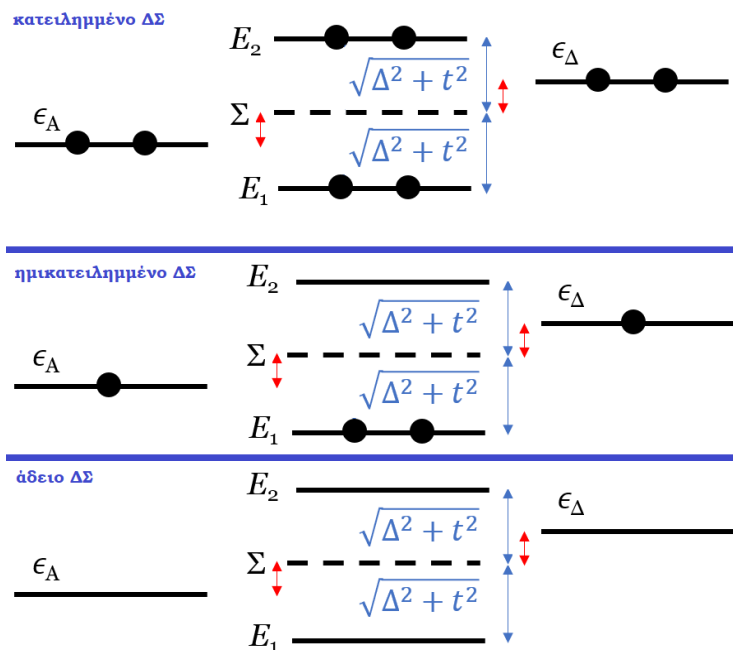
Ορίζοντας το ημίαθροισμα και την ημιδιαφορά των επιτόπιων ενεργειών ως

$$\Sigma = \frac{\epsilon_A + \epsilon_\Delta}{2}, \quad \Delta = \frac{\epsilon_A - \epsilon_\Delta}{2}, \quad (4.185)$$

οι ιδιοτιμές φτάνουν στη μορφή

$$E_{1,2} = \Sigma \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2}. \quad (4.186)$$

Όπως φαίνεται, οι δύο ιδιοτιμές απέχουν κατά $\sqrt{\Delta^2 + t^2}$ από το ημίθροισμα, Σ , των επιτόπιων ενεργειών. Το χάσμα μεταξύ των δύο σταθμών είναι $|E_2 - E_1| = 2\sqrt{\Delta^2 + t^2}$. Αν επρόκειτο, λοιπόν, για κατειλημμένες ενεργειακές στάθμες (με δύο ηλεκτρόνια η κάθε μία) δύο απομονωμένων ΜΣ με επιτόπιες ενέργειες ϵ_A και ϵ_Δ , τότε, όταν τα ΜΣ πλησιάσουν μεταξύ τους, τα τέσσερα ηλεκτρόνια θα τοποθετηθούν καταλαμβάνοντας πρώτα τη χαμηλότερη ενεργειακά σταθμη με ιδιοενέργεια $E_1 = \Sigma - \sqrt{\Delta^2 + t^2}$ κι έπειτα την υψηλότερη ενεργειακά στάθμη με ιδιοενέργεια $E_2 = \Sigma + \sqrt{\Delta^2 + t^2}$ (δείτε το άνω τμήμα της Εικόνας 4.15). Αν επρόκειτο για ημικατειλημμένες ενεργειακές στάθμες (με ένα ηλεκτρόνιο η κάθε μία), τότε, όταν τα απομονωμένα ΜΣ πλησιάσουν μεταξύ τους, τα δύο ηλεκτρόνια θα τοποθετηθούν καταλαμβάνοντας τη χαμηλότερη ενεργειακά στάθμη του $\Delta\Sigma$, με ιδιοενέργεια $E_1 = \Sigma - \sqrt{\Delta^2 + t^2}$, ενώ η υψηλότερη ενεργειακά στάθμη, με ιδιοενέργεια $E_2 = \Sigma + \sqrt{\Delta^2 + t^2}$, θα μένει κενή (δείτε το μεσαίο τμήμα της Εικόνας 4.15). Τέλος, αν επρόκειτο για άδειες στάθμες, η κατάσταση θα είναι όπως στο κάτω τμήμα της Εικόνας 4.15.



Εικόνα 4.15: Κατειλημμένο, ημικατειλημμένο και άδειο δισταθμικό σύστημα.

Αν υποθέσουμε πως τα δύο ΜΣ είναι **ταυτόσημα**, τότε $\epsilon_A = \epsilon_\Delta := \epsilon$. Επομένως, $\Sigma = \epsilon$ και $\Delta = 0$. Οι υπολογισμοί απλοποιούνται. Οι ιδιοτιμές λαμβάνουν την απλή μορφή

$$E_{1,2} = \epsilon \mp |t|. \quad (4.187)$$

Οπότε, το ενεργειακό εύρος του συστήματος θα είναι

$$E_2 - E_1 = 2 |t|. \quad (4.188)$$

Για τον υπολογισμό των ιδιοανυσμάτων χρησιμοποιούνται οι σχέσεις

$$(\epsilon - E)c_A + tc_\Delta = 0 \quad (4.189)$$

$$tc_A + (\epsilon - E)c_\Delta = 0. \quad (4.190)$$

Για το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή $E_1 = \epsilon - |t|$ ιδιοάνυσμα, δηλαδή για τη χαμηλότερη ενεργειακά στάθμη, αντικαθιστώντας την ιδιοτιμή E_1 στην Εξ. (4.189), έχουμε

$$\left. \begin{aligned} |t|c_A + tc_\Delta &= 0 \\ tc_A + |t|c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow c_\Delta = -\frac{|t|}{t}c_A.$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_1 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_1 = c_A \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{|t|}{t} \end{bmatrix}.$$

Για να είναι κανονικοποιημένο

$$|c_A|^2 + |c_\Delta|^2 = 1 \Rightarrow |c_A|^2 = 1/2 \Rightarrow |c_A| = 1/\sqrt{2}.$$

Άρα, μία βολική εκλογή είναι

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{|t|}{t} \end{bmatrix} \Rightarrow \vec{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{bmatrix} \text{ για } t \leq 0. \quad (4.191)$$

Συνοπτικά, η ιδιοτιμή $E_1 = \epsilon - |t|$ αντιστοιχεί στη βασική κατάσταση του συστήματος κι αφού $t < 0$, δεν υπάρχει κόμβος. Κάτι τέτοιο είναι λογικό, καθώς το ολοκλήρωμα μεταβιβάσεως t εκφράζει την έλξη των δύο απομονωμένων ΜΣ, τα οποία δημιουργούν το ΔΣ.

Για το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή $E_2 = \epsilon + |t|$ ιδιοάνυσμα, αντικαθιστώντας την ιδιοτιμή E_2 στην Εξ. (4.189), έχουμε

$$\left. \begin{aligned} -|t|c_A + tc_\Delta &= 0 \\ tc_A - |t|c_\Delta &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow c_\Delta = \frac{|t|}{t}c_A.$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_2 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_2 = c_A \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{|t|}{t} \end{bmatrix}.$$

Για να είναι κανονικοποιημένο

$$|c_A|^2 + |c_\Delta|^2 = 1 \Rightarrow |c_A|^2 = 1/2 \Rightarrow |c_A| = 1/\sqrt{2}.$$

Άρα, μία βολική εκλογή είναι

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{|t|}{t} \end{bmatrix} \Rightarrow \vec{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ \mp 1 \end{bmatrix} \text{ για } t \leq 0. \quad (4.192)$$

Συνοπτικά, η ιδιοτιμή $E_2 = \epsilon + |t|$ αντιστοιχεί στη διεγερμένη κατάσταση του συστήματος κι αφού $t < 0$, υπάρχει ένας κόμβος.

4.4.2 Τρισταθμικό Σύστημα

Έστω ένα τρισταθμικό σύστημα (ΤΣ) αποτελούμενο από τρία μονοσταθμικά συστήματα (ΜΣ). Με εντελώς ανάλογο τρόπο με όσα αναφέρθηκαν για το ΔΣ στην Υποενότητα 4.4.1, στην περίπτωση κατά την οποία

αγνοηθούν τα ολοκληρώματα U και S (τρίτο προσεγγιστικό επίπεδο) και θεωρήσουμε ότι τα $M\Sigma$ είναι ταυ-τόσημα (άρα έχουμε ίδιες επιτόπιες ενέργειες $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon$ και ίδια ολοκληρώματα μεταπηδήσεως t), το προς επίλυση σύστημα είναι

$$\begin{bmatrix} \epsilon & t & 0 \\ t & \epsilon & t \\ 0 & t & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} \quad (4.193)$$

ή

$$\begin{bmatrix} \epsilon - E & t & 0 \\ t & \epsilon - E & t \\ 0 & t & \epsilon - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.194)$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της ορίζουσάς του

$$\begin{aligned} (\epsilon - E)[(\epsilon - E)^2 - t^2] - t^2(\epsilon - E) &= 0 \Rightarrow \\ (\epsilon - E)^3 - 2t^2(\epsilon - E) &= 0 \Rightarrow \\ (E - \epsilon)[(\epsilon - E)^2 - 2t^2] &= 0 \Rightarrow \\ E = \epsilon \text{ ή } E = \epsilon \pm \sqrt{2}|t|. & \end{aligned} \quad (4.195)$$

Άρα, για $t < 0$, οι ιδιοτιμές του συστήματος θα είναι

$$E_1 = \epsilon + \sqrt{2}t, \quad E_2 = \epsilon, \quad E_3 = \epsilon - \sqrt{2}t. \quad (4.196)$$

Οπότε, το ενεργειακό εύρος του συστήματος θα είναι

$$E_3 - E_1 = 2\sqrt{2}|t| \approx 2.83 |t|. \quad (4.197)$$

Αντικαθιστώντας τις ιδιοτιμές E_1, E_2 και E_3 στο σύστημα εξισώσεων

$$\left. \begin{aligned} (\epsilon - E)c_1 + tc_2 &= 0 \\ tc_1 + (\epsilon - E)c_2 + tc_3 &= 0 \\ tc_2 + (\epsilon - E)c_3 &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (4.198)$$

προκύπτουν τα ιδιοανύσματα του συστήματος.

Για την ιδιοτιμή $E_1 = \epsilon + \sqrt{2}t$, έχουμε

$$\left. \begin{aligned} -\sqrt{2}c_1 + c_2 &= 0 \\ c_1 - \sqrt{2}c_2 + c_3 &= 0 \\ c_2 - \sqrt{2}c_3 &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow c_1 = c_3 = \frac{c_2}{\sqrt{2}} := c. \quad (4.199)$$

Από τη συνθήκη κανονικοποίησης,

$$|c|^2 + |\sqrt{2}c|^2 + |c|^2 = 1 \Rightarrow 4|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = 1/2.$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_1 ιδιοάνυσμα έχει, φερ' ειπείν, τη μορφή

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.200)$$

Για την ιδιοτιμή $E_2 = \epsilon$, έχουμε

$$\left. \begin{array}{l} tc_2 = 0 \\ tc_1 + tc_3 = 0 \\ tc_2 = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow c_2 = 0, c_1 = -c_3 := c. \quad (4.201)$$

Από τη συνθήκη κανονικοποίησης,

$$|c|^2 + 0 + |c|^2 = 1 \Rightarrow 2|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = 1/\sqrt{2}.$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_2 ιδιοάνυσμα έχει, φερ' ειπείν, τη μορφή

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.202)$$

Για την ιδιοτιμή $E_3 = \epsilon - \sqrt{2} t$, έχουμε

$$\left. \begin{array}{l} \sqrt{2}c_1 + c_2 = 0 \\ c_1 + \sqrt{2}c_2 + c_3 = 0 \\ c_2 + \sqrt{2}c_3 = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow c_1 = c_3 = -\frac{c_2}{\sqrt{2}} := c \quad (4.203)$$

Από τη συνθήκη κανονικοποίησης,

$$|c|^2 + |\sqrt{2}c|^2 + |c|^2 = 1 \Rightarrow 4|c|^2 = 1 \Rightarrow |c| = 1/2.$$

Επομένως, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_3 ιδιοάνυσμα έχει, φερ' ειπείν, τη μορφή

$$\vec{v}_3 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.204)$$

4.4.3 Τετρασταθμικό Σύστημα

Έστω ένα τετρασταθμικό σύστημα αποτελούμενο από τέσσερα μονοσταθμικά συστήματα (ΜΣ). Με εντελώς ανάλογο τρόπο με όσα αναφέρθηκαν στην Υποενότητα 4.4.1 για το $\Delta\Sigma$, στην περίπτωση κατά την οποία αγνοηθούν τα ολοκληρώματα U και S (τρίτο προσεγγιστικό επίπεδο) και θεωρήσουμε ότι τα ΜΣ είναι ταυτόσημα (άρα έχουμε ίδιες επιτόπιες ενέργειες $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = \epsilon$ και ίδια ολοκληρώματα μεταπηδήσεως t), το προς επίλυση σύστημα είναι

$$\begin{bmatrix} \epsilon & t & 0 & 0 \\ t & \epsilon & t & 0 \\ 0 & t & \epsilon & t \\ 0 & 0 & t & \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} \quad (4.205)$$

ή

$$\begin{bmatrix} \epsilon - E & t & 0 & 0 \\ t & \epsilon - E & t & 0 \\ 0 & t & \epsilon - E & t \\ 0 & 0 & t & \epsilon - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (4.206)$$

Οι ιδιοτιμές του πίνακα προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της ορίζουσάς του

$$\begin{aligned} (\epsilon - E)^2 [(\epsilon - E)^2 - t^2] - (\epsilon - E)^2 t^2 - t^2 [(\epsilon - E)^2 - t^2] &= 0 \Rightarrow \\ (\epsilon - E)^2 [(\epsilon - E)^2 - t^2] - (\epsilon - E)^2 t^2 - (\epsilon - E)^2 t^2 + t^4 &= 0 \Rightarrow \\ (\epsilon - E)^4 - 3(\epsilon - E)^2 t^2 + t^4 &= 0 \end{aligned}$$

Θέτοντας $y = (\epsilon - E)^2$ προκύπτει η δευτεροβάθμια εξίσωση

$$y^2 - 3yt^2 + t^4 = 0$$

με διακρίνουσα $\Delta = 9t^4 - 4t^4 = 5t^4$. Συνεπώς,

$$\begin{aligned} y &= \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2} t^2 \Rightarrow \\ E &= \epsilon \pm \sqrt{\frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}} |t|. \end{aligned} \quad (4.207)$$

Άρα, για $t < 0$, οι ιδιοτιμές του συστήματος θα είναι

$$E_1 = \epsilon + \sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2}} t, \quad E_2 = \epsilon + \sqrt{\frac{3 - \sqrt{5}}{2}} t, \quad E_3 = \epsilon - \sqrt{\frac{3 - \sqrt{5}}{2}} t, \quad E_4 = \epsilon - \sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2}} t. \quad (4.208)$$

Οπότε, το ενεργειακό εύρος του συστήματος θα είναι

$$E_4 - E_1 = 2\sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2}} |t| \approx 3.24 |t|. \quad (4.209)$$

Αντικαθιστώντας τις ιδιοτιμές E_1, E_2, E_3 και E_4 στο σύστημα εξισώσεων

$$\left. \begin{aligned} (\epsilon - E)c_1 + tc_2 &= 0, \\ tc_1 + (\epsilon - E)c_2 + tc_3 &= 0, \\ tc_2 + (\epsilon - E)c_3 + tc_4 &= 0, \\ tc_3 + (\epsilon - E)c_4 &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (4.210)$$

προκύπτουν τα ιδιοανύσματα του συστήματος.

Για την ιδιοτιμή $E_1 = \epsilon + \sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2}} t$, αν ονομάσουμε

$$\Gamma := \sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2}} = \frac{\sqrt{5} + 1}{2}, \quad (4.211)$$

λαμβάνουμε

$$\left. \begin{aligned} c_2 &= \Gamma c_1, \\ c_1 - \Gamma c_2 + c_3 &= 0, \\ c_2 - \Gamma c_3 + c_4 &= 0, \\ c_3 &= \Gamma c_4. \end{aligned} \right\} \quad (4.212)$$

Χρησιμοποιώντας τις ακραίες εξισώσεις στις μεσαίες, λαμβάνουμε

$$\left. \begin{aligned} c_1 - \Gamma^2 c_1 + \Gamma c_4 &= 0, \\ \Gamma c_1 - \Gamma^2 c_4 + c_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} (1 - \Gamma^2)c_1 + \Gamma c_4 &= 0, \\ \Gamma c_1 + (1 - \Gamma^2)c_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.213)$$

Από όπου προκύπτει

$$\left. \begin{aligned} c_4 &= \frac{\Gamma^2 - 1}{\Gamma} c_1, \\ c_4 &= \frac{\Gamma}{\Gamma^2 - 1} c_1. \end{aligned} \right\} \quad (4.214)$$

Φαίνεται από την Εξ. (4.214), η οποία είναι εντάξει, εφ' όσον $\Gamma \neq 0, \pm 1$, πως $\frac{\Gamma^2 - 1}{\Gamma} = \pm 1$. Αν γίνουν οι πράξεις αναλυτικότερα, προκύπτει

$$\frac{\Gamma^2 - 1}{\Gamma} = \frac{\Gamma}{\Gamma^2 - 1} = 1. \quad (4.215)$$

Συνεπώς θα ισχύει

$$c_1 = c_4 := c, \quad c_2 = c_3 = \Gamma c. \quad (4.216)$$

Επομένως,

$$\vec{v}_1 = c \begin{bmatrix} 1 \\ \Gamma \\ \Gamma \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.217)$$

Κανονικοποιώντας, λαμβάνουμε $|c|^2(2 + 2\Gamma^2) = 1 \Rightarrow |c|^2 = \frac{1}{2(1+\Gamma^2)}$, δηλαδή

$$|c|^2 = \frac{1}{5 + \sqrt{5}}. \quad (4.218)$$

Άρα, μπορούμε να εκλέξουμε

$$c = \frac{1}{\sqrt{5 + \sqrt{5}}}. \quad (4.219)$$

Οπότε, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_1 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{5 + \sqrt{5}}} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{5}+1}{2} \\ \frac{\sqrt{5}+1}{2} \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.220)$$

Για την ιδιοτιμή $E_2 = \epsilon + \sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} t$, αν ονομάσουμε

$$\Gamma := \sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} = \frac{\sqrt{5}-1}{2}, \quad (4.221)$$

λαμβάνουμε

$$\left. \begin{aligned} c_2 &= \Gamma c_1, \\ c_1 - \Gamma c_2 + c_3 &= 0, \\ c_2 - \Gamma c_3 + c_4 &= 0, \\ c_3 &= \Gamma c_4. \end{aligned} \right\} \quad (4.222)$$

Χρησιμοποιώντας τις ακραίες εξισώσεις στις μεσαίες, λαμβάνουμε

$$\left. \begin{aligned} c_1 - \Gamma^2 c_1 + \Gamma c_4 &= 0, \\ \Gamma c_1 - \Gamma^2 c_4 + c_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} (1 - \Gamma^2)c_1 + \Gamma c_4 &= 0, \\ \Gamma c_1 + (1 - \Gamma^2)c_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.223)$$

Από όπου προκύπτει

$$\left. \begin{aligned} c_4 &= \frac{\Gamma^2 - 1}{\Gamma} c_1, \\ c_4 &= \frac{\Gamma}{\Gamma^2 - 1} c_1. \end{aligned} \right\} \quad (4.224)$$

Φαίνεται από την Εξ. (4.224), η οποία είναι εντάξει, εφ' όσον $\Gamma \neq 0, \pm 1$, πως $\frac{\Gamma^2 - 1}{\Gamma} = \pm 1$. Αν γίνουν οι πράξεις αναλυτικότερα, προκύπτει

$$\frac{\Gamma^2 - 1}{\Gamma} = \frac{\Gamma}{\Gamma^2 - 1} = -1. \quad (4.225)$$

Συνεπώς θα ισχύει

$$c_1 := c, \quad c_2 = \Gamma c, \quad c_3 = -\Gamma c, \quad c_4 = -c. \quad (4.226)$$

Επομένως,

$$\vec{v}_2 = c \begin{bmatrix} 1 \\ \Gamma \\ -\Gamma \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.227)$$

Κανονικοποιώντας, λαμβάνουμε $|c|^2(2 + 2\Gamma^2) = 1 \Rightarrow |c|^2 = \frac{1}{2(1+\Gamma^2)}$, δηλαδή

$$|c|^2 = \frac{1}{5 - \sqrt{5}}. \quad (4.228)$$

Άρα, μπορούμε να εκλέξουμε

$$c = \frac{1}{\sqrt{5 - \sqrt{5}}}. \quad (4.229)$$

Οπότε, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_2 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{5 - \sqrt{5}}} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\sqrt{5}-1}{2} \\ \frac{2}{\sqrt{5}-1} \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.230)$$

Για την ιδιοτιμή $E_3 = \epsilon - \sqrt{\frac{3-\sqrt{5}}{2}} t$, αν ονομάσουμε

$$\Gamma := \sqrt{\frac{3 - \sqrt{5}}{2}} = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}, \quad (4.231)$$

λαμβάνουμε

$$\left. \begin{aligned} c_2 &= -\Gamma c_1, \\ c_1 + \Gamma c_2 + c_3 &= 0, \\ c_2 + \Gamma c_3 + c_4 &= 0, \\ c_3 &= -\Gamma c_4. \end{aligned} \right\} \quad (4.232)$$

Χρησιμοποιώντας τις ακραίες εξισώσεις στις μεσαίες, λαμβάνουμε

$$\left. \begin{aligned} c_1 - \Gamma^2 c_1 - \Gamma c_4 &= 0, \\ -\Gamma c_1 - \Gamma^2 c_4 + c_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} (1 - \Gamma^2)c_1 - \Gamma c_4 &= 0, \\ -\Gamma c_1 + (1 - \Gamma^2)c_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.233)$$

Από όπου προκύπτει

$$\left. \begin{aligned} c_4 &= \frac{1-\Gamma^2}{\Gamma} c_1, \\ c_4 &= \frac{\Gamma}{1-\Gamma^2} c_1. \end{aligned} \right\} \quad (4.234)$$

Φαίνεται από την Εξ. (4.234), η οποία είναι εντάξει, εφ' όσον $\Gamma \neq 0, \pm 1$, πως $\frac{1-\Gamma^2}{\Gamma} = \pm 1$. Αν γίνουν οι πράξεις αναλυτικότερα, προκύπτει

$$\frac{1-\Gamma^2}{\Gamma} = \frac{\Gamma}{1-\Gamma^2} = 1. \quad (4.235)$$

Συνεπώς θα ισχύει

$$c_4 = c_1 := c, \quad c_2 = -\Gamma c, \quad c_3 = -\Gamma c. \quad (4.236)$$

Επομένως,

$$\vec{v}_3 = c \begin{bmatrix} 1 \\ -\Gamma \\ -\Gamma \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.237)$$

Κανονικοποιώντας, λαμβάνουμε $|c|^2(2 + 2\Gamma^2) = 1 \Rightarrow |c|^2 = \frac{1}{2(1+\Gamma^2)}$, δηλαδή

$$|c|^2 = \frac{1}{5 - \sqrt{5}}. \quad (4.238)$$

Άρα, μπορούμε να εκλέξουμε

$$c = \frac{1}{\sqrt{5 - \sqrt{5}}}. \quad (4.239)$$

Οπότε, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_3 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_3 = \frac{1}{\sqrt{5 - \sqrt{5}}} \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{\sqrt{5}-1}{2} \\ -\frac{\sqrt{5}-1}{2} \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.240)$$

Για την ιδιοτιμή $E_4 = \epsilon - \sqrt{\frac{3+\sqrt{5}}{2}} t$, αν ονομάσουμε

$$\Gamma := \sqrt{\frac{3 + \sqrt{5}}{2}} = \frac{\sqrt{5} + 1}{2}, \quad (4.241)$$

λαμβάνουμε

$$\left. \begin{aligned} c_2 &= -\Gamma c_1, \\ c_1 + \Gamma c_2 + c_3 &= 0, \\ c_2 + \Gamma c_3 + c_4 &= 0, \\ c_3 &= -\Gamma c_4. \end{aligned} \right\} \quad (4.242)$$

Χρησιμοποιώντας τις ακραίες εξισώσεις στις μεσαίες, λαμβάνουμε

$$\left. \begin{aligned} c_1 - \Gamma^2 c_1 - \Gamma c_4 &= 0, \\ -\Gamma c_1 - \Gamma^2 c_4 + c_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} (1 - \Gamma^2)c_1 - \Gamma c_4 &= 0, \\ -\Gamma c_1 + (1 - \Gamma^2)c_4 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (4.243)$$

Από όπου προκύπτει

$$\left. \begin{aligned} c_4 &= \frac{1-\Gamma^2}{\Gamma} c_1, \\ c_4 &= \frac{\Gamma}{1-\Gamma^2} c_1. \end{aligned} \right\} \quad (4.244)$$

Φαίνεται από την Εξ. (4.244), η οποία είναι εντάξει, εφ' όσον $\Gamma \neq 0, \pm 1$, πως $\frac{1-\Gamma^2}{\Gamma} = \pm 1$. Αν γίνουν οι πράξεις αναλυτικότερα, προκύπτει

$$\frac{1 - \Gamma^2}{\Gamma} = \frac{\Gamma}{1 - \Gamma^2} = -1. \quad (4.245)$$

Συνεπώς θα ισχύει

$$c_1 := c, \quad c_2 = -\Gamma c, \quad c_3 = \Gamma c, \quad c_4 = -c. \quad (4.246)$$

Επομένως,

$$\vec{v}_4 = c \begin{bmatrix} 1 \\ -\Gamma \\ \Gamma \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.247)$$

Κανονικοποιώντας, λαμβάνουμε $|c|^2(2 + 2\Gamma^2) = 1 \Rightarrow |c|^2 = \frac{1}{2(1+\Gamma^2)}$, δηλαδή

$$|c|^2 = \frac{1}{5 + \sqrt{5}}. \quad (4.248)$$

Άρα, μπορούμε να εκλέξουμε

$$c = \frac{1}{\sqrt{5 + \sqrt{5}}}. \quad (4.249)$$

Οπότε, το αντιστοιχούν στην ιδιοτιμή E_4 ιδιοάνυσμα έχει τη μορφή

$$\vec{v}_4 = \frac{1}{\sqrt{5 + \sqrt{5}}} \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{1+\sqrt{5}}{2} \\ \frac{1+\sqrt{5}}{2} \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (4.250)$$

4.5 Διακριτό - συνεχές ενεργειακό φάσμα, υποζώνες

Πρόκειται για περιπτώσεις όπου έχουμε ελεύθερη κίνηση σε 2 (ή 1) διαστάσεις και δέσμιες καταστάσεις σε 1 (ή 2) διαστάσεις, αντιστοίχως, οπότε μιλάμε για κβαντικά φρέατα (ή κβαντικά σύρματα). Στις περιπτώσεις αυτές, από την ελεύθερη κίνηση έχουμε συνεχές ενεργειακό φάσμα [δηλαδή ζώνες, μόνο που επειδή αυτές αφορούν λιγότερες από 3 διαστάσεις τις χαρακτηρίζουμε υποζώνες (subbands)], ενώ από τη δέσμια κατάσταση έχουμε διακριτό φάσμα, δηλαδή στάθμες. Η περιγραφή μας παρακάτω βασίζεται στο θεώρημα Slater [13], την Προσέγγιση Περιβάλλουσας Συναρτήσεως (Envelope Function Approximation) και την Προσέγγιση Ενεργού Μάζας (Effective Mass Approximation).

4.6 Θεώρημα Slater και συνέπειες

Με τη βοήθεια του θεωρήματος Slater [13], ανάγουμε το πρόβλημα της κινήσεως ηλεκτρονίου σε περιοδικό κρυσταλλικό πλέγμα συν διαταράσσοντα δυναμικά, σε ένα πρόβλημα όμοιο με την κίνηση ηλεκτρονίου μόνο στα διαταράσσοντα δυναμικά, απλοποιούμε δηλαδή σημαντικά τη διαδικασία επίλυσης. Προαπαιτούμενα είναι τα άρθρα του Bloch [14] και του Wannier [15]. Η θεωρία των άρθρων [14, 15] αναπτύσσεται εκτενώς, π.χ. στο βιβλίο [16].

4.6.1 Αδιατάρακτο πρόβλημα

Η Χαμιλτονιανή του αδιατάρακτου προβλήματος είναι

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U_L(\vec{r}). \quad (4.251)$$

Ο πρώτος όρος παριστάνει την κινητική ενέργεια και ο δεύτερος όρος την περιοδική δυναμική ενέργεια του τελείου κρυστάλλου. Η λύση του αδιατάρακτου προβλήματος

$$\hat{H}_0 \psi_0(\vec{p}, \vec{r}) = E_0(\vec{p}) \psi_0(\vec{p}, \vec{r}), \quad (4.252)$$

όπου $E_0(\vec{p})$ ή $E_0(\vec{k})$ είναι τα ενεργειακά διαγράμματα ζωνών, τα οποία συνήθως ζωγραφίζουμε, και $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ είναι η κρυσταλλική ορμή, δόθηκε από τον Wannier [15], βελτιώνοντας τη θεωρία του Bloch [14].

Ας πούμε πως έχουμε μονοατομική βάση στον περιοδικό μας κρύσταλλο. Ας υποθέσουμε, λοιπόν, πως ισχύουν: (α) τα πλεγματικά σημεία περιγράφονται από τα διανύσματα θέσεως $\vec{R} = m_1\vec{a}_1 + m_2\vec{a}_2 + m_3\vec{a}_3 := \vec{R}_m$, όπου $m = \{m_1, m_2, m_3\}$, $m_i \in \mathcal{Z}$ παριστάνει συλλογικό δείκτη των πλεγματικών σημείων και $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3\}$ είναι τα θεμελιώδη ανύσματα μετατοπίσεως (ΘΑΜ) του ορθού κρυσταλλικού πλέγματος, και (β) η αρχή των αξόνων αναφοράς συμπίπτει με κάποιο πλεγματικό σημείο. Τότε [15],

$$\psi_0(\vec{p}, \vec{r}) = \sum_m \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{R}_m} \alpha(\vec{r} - \vec{R}_m) \quad (4.253)$$

Μπορούμε και να τα γράψουμε ως προς \vec{k} , δηλαδή

$$\hat{H}_0 \psi_0(\vec{k}, \vec{r}) = E_0(\vec{k}) \psi_0(\vec{k}, \vec{r}), \quad (4.254)$$

$$\psi_0(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_m \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_m} \alpha(\vec{r} - \vec{R}_m). \quad (4.255)$$

Φυσικά, έχουμε περιοδική δυναμική ενέργεια, $U_L(\vec{r})$, στο περιοδικό κρυσταλλικό μας πλέγμα, δηλαδή

$$U_L(\vec{r} + \vec{R}_m) = U_L(\vec{r}). \quad (4.256)$$

Το L σημαίνει lattice. Οι συναρτήσεις Wannier ορίζονται ως

$$\alpha(\vec{r} - \vec{R}_m) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{p}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{R}_m} \psi_0(\vec{p}, \vec{r}) \quad (4.257)$$

Επειδή ισχύει η ιδιότητα

$$\sum_m e^{i(\vec{p}' - \vec{p})\cdot\vec{R}_m} = \begin{cases} 0, & \vec{p}' \neq \vec{p} \\ N, & \vec{p}' = \vec{p} \end{cases} = N\delta(\vec{p}' - \vec{p}), \quad (4.258)$$

όπου N είναι ο συνολικός αριθμός (πολύ μεγάλος...) των πλεγματικών σημείων στον κρύσταλλο, συνεπάγεται

$$\sum_m e^{i\vec{p}' \cdot \vec{R}_m} \alpha(\vec{r} - \vec{R}_m) = \sum_m \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{p}} e^{i(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{R}_m} \psi_0(\vec{p}, \vec{r}) = \quad (4.259)$$

$$\sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{N}} \psi_0(\vec{p}, \vec{r}) \sum_m e^{i(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{R}_m} = \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{N}} \psi_0(\vec{p}, \vec{r}) N \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \quad (4.260)$$

$$= \sqrt{N} \psi_0(\vec{p}', \vec{r}). \quad (4.261)$$

Άρα, αλλάζοντας το σύμβολο \vec{p}' στο σύμβολο \vec{p} , έχουμε

$$\psi_0(\vec{p}, \vec{r}) = \sum_m \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{R}_m} \alpha(\vec{r} - \vec{R}_m) \quad (4.262)$$

η οποία είναι η Εξ. (4.253).

4.6.2 Διαταραγμένο πρόβλημα

Θέλουμε τώρα να βρούμε συναρτήσεις, $\psi_i(\vec{r})$, οι οποίες να ικανοποιούν την εξίσωση

$$\hat{H} \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}), \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (4.263)$$

όπου i είναι κάποιος κβαντικός αριθμός και \hat{H}_1 είναι η συμπεριλαμβάνουσα όλες τις διαταράσσουσες δυναμικές ενέργειες Χαμιλτονιανή. Υποθέτουμε πως η \hat{H}_1 είναι αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση του \vec{r} . Προσπαθούμε να εκφράσουμε τα $\psi_i(\vec{r})$ στη μορφή

$$\psi_i(\vec{r}) = \sum_m \varphi_i(\vec{R}_m) \alpha(\vec{r} - \vec{R}_m) \quad (4.264)$$

Δηλαδή, προσπαθούμε να βρούμε συναρτήσεις, $\varphi_i(\vec{R}_m)$, οι οποίες να τροποποιούν τις ατομικές συναρτήσεις Wannier, $\alpha(\vec{r} - \vec{R}_m)$, ώστε να εκφράσουμε τη λύση του διαταραγμένου προβλήματος, αντικαθιστώντας τις εκθετικές συναρτήσεις, $\frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{p} \cdot \vec{R}_m}$, οι οποίες τροποποιούσαν τις ατομικές συναρτήσεις Wannier, $\alpha(\vec{r} - \vec{R}_m)$, στο αδιατάρακτο πρόβλημα. Το θεώρημα Slater λέει πως οι περιβάλλουσες συναρτήσεις, $\varphi_i(\vec{r})$, ικανοποιούν τη διαφορική εξίσωση

$$[E_0(-i\hbar\nabla) + \hat{H}_1(\vec{r})] \varphi_i(\vec{r}) = E_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (4.265)$$

Στην Εξ. (4.265) αλλάξαμε το σύμβολο \vec{R}_m σε \vec{r} , το οποίο είναι τώρα πια ένα χοντροκομμένο (coarse grained) \vec{r} . Η Εξ. (4.265) ονομάζεται Εξίσωση Περιβάλλουσας Συναρτήσεως (Envelope Function Equation, EFE). Για να ισχύει όμως το θεώρημα Slater και η Εξίσωση Περιβάλλουσας Συναρτήσεως, πρέπει να υποθεθεί πως η $\hat{H}_1(\vec{r})$ είναι αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση της χοντροκομμένης πια θέσεως \vec{r} . Η εξίσωση (4.265) είναι μία μορφής Schrödinger εξίσωση για τις $\varphi_i(\vec{r})$, στην οποία η διαταράσσουσα δυναμική ενέργεια \hat{H}_1 εμφανίζεται σαν τη δυναμική ενέργεια, ενώ, σαν τελεστής κινητικής ενέργειας εμφανίζεται το $E_0(\vec{p})$ του αδιατάρακτου προβλήματος, αντικαθιστώντας όμως το \vec{p} με τον διαφορικό τελεστή $-i\hbar\nabla$.

4.7 Από την εξίσωση Schrödinger, μέσω της Εξισώσεως Περιβάλλουσας Συναρτήσεως, μέσω της Προσεγγίσεως Ενεργού Μάζας, στην Εξίσωση Ενεργού Μάζας

Στη μονοηλεκτρονική εξίσωση Schrödinger

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (4.266)$$

η Χαμιλτονιανή γράφεται

$$\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} + U(\vec{r}) \quad \text{χωρίς εξωτερικό μαγνητικό πεδίο,} \quad (4.267)$$

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}} - q\vec{A})^2}{2m_e} + U(\vec{r}) \quad \text{υπό εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, } \vec{A} \text{ το διανυσματικό δυναμικό,} \quad (4.268)$$

όπου $U(\vec{r})$ είναι η συνολική δυναμική ενέργεια, η οποία αναλύεται, ως εξής:

$$U(\vec{r}) = U_L(\vec{r}) + U_S(\vec{r}) + U_E(\vec{r}) + U_{xc}(\vec{r}) + U_M(\vec{r}). \quad (4.269)$$

$U_L(\vec{r})$, L σημαίνει Lattice, είναι η δυναμική ενέργεια του τέλειου περιοδικού κρυσταλλικού πλέγματος. $U_S(\vec{r})$, S σημαίνει Scattering, είναι η δυναμική ενέργεια σκεδάσεως, λόγω ατελειών, προσμείξεων, φωνονίων και λοιπών. $U_E(\vec{r})$, E σημαίνει External, είναι η δυναμική ενέργεια λόγω εξωτερικά εφαρμοσμένων ηλεκτρικών πεδίων και μακροσκοπικών φορτίων χώρου, $U_{xc}(\vec{r})$, xc σημαίνει exchange and correlation, είναι η δυναμική ενέργεια ανταλλαγής και συσχετισμού, η οποία περιγράφει την επίδραση των υπολοίπων ηλεκτρονίων. Ο τελευταίος προσθετός, $U_M(\vec{r})$, M σημαίνει magnetic, είναι η μαγνητική δυναμική ενέργεια, επί παραδείγματι, $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ ή $-\sum_i \vec{\mu}_i \cdot \vec{B}$, όπου το i διατρέχει τους μαγνητικούς δομικούς λίθους του συστήματος.

Εφαρμόζοντας το θεώρημα Slater [13], Εξ. (4.265), δείτε την Ενότητα 4.6, καταλήγουμε στην Εξίσωση Περιβάλλουσας Συναρτήσεως (Envelope Function Equation, EFE)

$$E_0(-i\hbar\nabla)\varphi(\vec{r}) + [U_S(\vec{r}) + U_E(\vec{r}) + U_{xc}(\vec{r}) + U_M(\vec{r})]\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (4.270)$$

Εδώ $\varphi(\vec{r})$ είναι η περιβάλλουσα συνάρτηση (envelope function), η οποία περιγράφει χοντροκομμένα τη διαμόρφωση της κυματοσυναρτήσεως από πλεγματικό σημείο σε πλεγματικό σημείο, δείτε την Ενότητα 4.6. Ο τελεστής $-i\hbar\nabla$ αντικαθιστά την κρυσταλλική ορμή, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, στα ενεργειακά διαγράμματα ζωνών, $E_0(\vec{p})$, δηλαδή, το $-i\nabla$ αντικαθιστά το \vec{k} ,

$$\vec{k} = (k_x, k_y, k_z) \leftrightarrow -i\vec{\nabla} = -i\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right). \quad (4.271)$$

Η σχέση διασποράς ελεύθερου ηλεκτρονίου είναι παραβολική με συντελεστή $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_e}$, δηλαδή

$$E_0(\vec{k}) = \frac{\vec{p}^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m_e} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m_e}. \quad (4.272)$$

Κοντά στο ελάχιστο κάποιας ζώνης, π.χ. της ζώνης αγωγιμότητας, μπορούμε, κατ' αναλογία, να γράψουμε

$$E_0(\vec{k}) = E_{c0} + \frac{\vec{p}^2}{2m^*} = E_{c0} + \frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m^*} = E_{c0} - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*}, \quad (4.273)$$

όπου η m^* ονομάζεται ενεργός μάζα (effective mass) και είναι, γενικώς, τανυστής. Σε συμμετρικότερες περιπτώσεις θα μπορούσαμε να γράψουμε

$$E_0(\vec{k}) = E_{c0} + \frac{\hbar^2k_x^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2k_y^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2k_z^2}{2m_z^*} \quad (4.274)$$

και στην απλούστερη περίπτωση

$$E_0(\vec{k}) = E_{c0} + \frac{\hbar^2k^2}{2m^*} = E_{c0} - \frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*}. \quad (4.275)$$

Δηλαδή, η ενεργός μάζα καθορίζει τον συντελεστή της παραβολής $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m^*}$, κατ' αναλογία με την περίπτωση του ελεύθερου ηλεκτρονίου, όπου ο συντελεστής είναι $\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_e}$. Με άλλα λόγια, η ενεργός μάζα, m^* , εκφράζει το πόσο απότομη είναι η καμπυλότητα κοντά στο ακρότατο της ζώνης. Δείτε την Εικόνα 4.16, όπου παριστάνεται η περίπτωση $m^* < m_e$. Μικρές ενεργές μάζες έχουν δημοφιλείς ημιαγωγοί, όπως συμβαίνει π.χ. στο GaAs, όπου $m^* \approx 0.067m_e$.

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m^*} \quad E_0(\vec{k}) = E_{c0} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*}$$

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_e} \quad E_0(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e}$$

Εικόνα 4.16: Το πόσο απότομη είναι η καμπυλότητα κοντά στο ακρότατο της ζώνης εκφράζεται από την ενεργό μάζα, m^* . Εδώ φαίνεται η περίπτωση $m^* < m_e$.

Αν περιοριστούμε στην τελευταία, απλούστερη περίπτωση, τότε η Εξ. (4.270) γίνεται η λεγόμενη Εξίσωση Ενεργού Μάζας (Effective Mass Equation, EME)

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} \varphi(\vec{r}) + [E_{c0} + U_E(\vec{r}) + U_{xc}(\vec{r}) + U_M(\vec{r})] \varphi(\vec{r}) + U_S(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}). \quad (4.276)$$

Ας περιοριστούμε σε περιπτώσεις χωρίς $U_M(\vec{r})$. Το $E_{c0} + U_E(\vec{r}) + U_{xc}(\vec{r})$ είναι αυτό, το οποίο ζωγραφίζουμε συνήθως όταν σχεδιάζουμε διαγράμματα ζώνης (band diagrams) για ετεροδομές. Συνήθως, λύνουμε την Εξ. (4.276) υποθέτοντας $U_S(\vec{r}) = 0$ και εκτιμούμε την επίδραση της $U_S(\vec{r})$ με βάση τη θεωρία σκεδάσεως και μεταφοράς (π.χ. λύνοντας την εξίσωση μεταφοράς Boltzmann) [17].

Έστω τώρα πως εξετάζουμε την περίπτωση κατά την οποία συνορεύουν δύο διαφορετικά υλικά, επί παραδείγματι, GaAs και $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Σε αυτήν την περίπτωση, το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας, E_{c0} , βρίσκεται υψηλότερα στο τριμερές από ότι στο διμερές. Δείτε την Εικόνα 4.17. Σχηματίζεται ένα φρέαρ (πηγάδι). Εφ' όσον το εύρος του φρέατος, δηλαδή το πάχος του μεσαίου στρώματος, είναι μικρότερο από τη μέση ελεύθερη διαδρομή του ηλεκτρονίου, χρειαζόμαστε κβαντική περιγραφή. Έχουμε τότε ένα κβαντικό φρέαρ (quantum well).

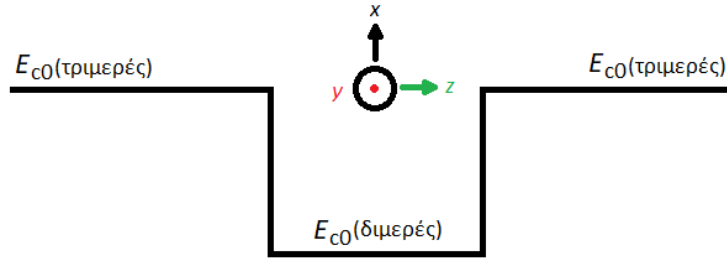
Αν η m^* είναι σταθερό βαθμωτό μέγεθος σε κάθε υλικό, αλλά έχει διαφορετική τιμή σε κάθε υλικό, τότε

$$E_0(\vec{k}) = E_{c0}(z) + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*(z)} \quad (4.277)$$

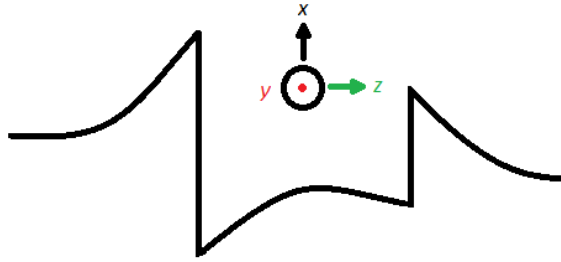
και αν ακόμα υποθέσουμε $U_S(\vec{r}) = 0$, τότε προκύπτει

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial^2 \varphi(\vec{r})}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2 \vec{k}_{xy}^2}{2m^*(z)} \varphi(\vec{r}) + [E_{c0} + U_E(\vec{r}) + U_{xc}(\vec{r})] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}), \quad (4.278)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \frac{\partial^2 \varphi(\vec{r})}{\partial z^2} + -\frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \varphi(\vec{r}) + [E_{c0} + U_E(\vec{r}) + U_{xc}(\vec{r})] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}), \quad (4.279)$$



Εικόνα 4.17: Συνορεύουν δύο διαφορετικά υλικά, επί παραδείγματι, GaAs και $Al_xGa_{1-x}As$ ώστε το ελάχιστο της ζώνης αγωγιμότητας, E_{c0} , βρίσκεται υψηλότερα στο τριμερές από ότι στο διμερές. Σχηματίζεται ένα φρέαρ (well).



Εικόνα 4.18: Ένα κβαντικό πηγάδι μεταξύ τριών στρωμάτων υλικών με καμπύλωση ζωνών.

και οι μεταβλητές δεν χωρίζονται, λόγω της παρουσίας του $m^*(z)$ στον δεύτερο προσθετέο, ακόμα κι αν $U_E(\vec{r}) = U_E(\vec{z})$ και $U_{xc}(\vec{r}) = U_{xc}(\vec{z})$. Αντιθέτως, αν η m^* είναι σταθερή, βαθμωτή, τότε οι μεταβλητές χωρίζονται. Μία τέτοια παραδοχή δεν είναι και τόσο παράλογη, διότι τα ηλεκτρόνια βρίσκονται κυρίως στο GaAs. Η υπόθεση αυτή είναι λιγότερο ρεαλιστική, όταν μειώνεται το εύρος του φρέατος, διότι τότε αυξάνεται η διαπέραση των περιβαλλουσών συναρτήσεων στο φράγμα $Al_xGa_{1-x}As$ [17].

4.8 Ιδιοκαταστάσεις ηλεκτρονίου σε κβαντικό φρέαρ με σταθερή ενεργό μάζα

Η εξίσωση (4.276), για $U_S(\vec{r}) = 0$, γράφεται

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi(\vec{r}) + \underbrace{[E_{c0} + U_E(\vec{r}) + U_{xc}(\vec{r})]}_{U(\vec{r})} \varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}). \quad (4.280)$$

Έχουμε ονομάσει $U(\vec{r}) := E_{c0} + U_E(\vec{r}) + U_{xc}(\vec{r})$. Έστω, λοιπόν, η m^* σταθερή, βαθμωτή και $U(\vec{r}) = U(z)$, όπως δείχνουμε, ποιοτικά, στην Εικόνα 4.18. Από μόνη της, η παρουσία τριών διαφορετικών στρωμάτων, δηλαδή διαφορετικών E_{c0} , οδηγεί σε τετραγωνισμένο πηγάδι, χωρίς καμπυλώσεις. Όμως, ο όρος της Χαμιλτονιανής $U_E(\vec{r})$ και μάλιστα το κομμάτι του, το οφειλόμενο σε φορτία χώρου (κομμάτι το οποίο προκύπτει από τη λύση της εξίσωσης Poisson), αλλά και σε μικρότερο βαθμό ο όρος της Χαμιλτονιανής $U_{xc}(\vec{r})$, οδηγούν σε παραμόρφωση των ζωνών, η οποία λέγεται καμπύλωση ζωνών (band bending) [17].

Μπορούμε να δοκιμάσουμε λύση χωριζόμενων μεταβλητών για την Εξ. (4.280), της μορφής

$$\varphi(\vec{r}) = X(x) Y(y) Z(z). \quad (4.281)$$

Τότε,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \varphi(\vec{r}) + U(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r}), \quad (4.282)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) X Y Z + U(\vec{r}) X Y Z = E X Y Z, \quad (4.283)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} Y Z \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m^*} X Z \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m^*} X Y \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + U(z) X Y Z = E X Y Z, \quad (4.284)$$

$$\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2}}_{f_1(x)} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}}_{f_2(y)} \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}}_{f_3(z)} + U(z) = E. \quad (4.285)$$

Υπάρχουν τρεις προσθετέοι στο αριστερό μέλος της Εξ. (4.285), ο πρώτος, $f_1(x)$, είναι συνάρτηση μόνο του x , ο δεύτερος, $f_2(y)$, είναι συνάρτηση μόνο του y , και ο τρίτος, $f_3(z)$, είναι συνάρτηση μόνο του z . Στο δεξιό μέλος έχουμε το E και η εξίσωση πρέπει να ισχύει $\forall x, y, z$. Επομένως, το E είναι ανεξάρτητο των x, y, z και η εξίσωση διαιρείται σε τρία κομμάτια, ήτοι

$$E = E_x + E_y + E_z. \quad (4.286)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = E_x, \quad (4.287)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} = E_y, \quad (4.288)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + U(z) = E_z. \quad (4.289)$$

- Για την πρώτη εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} = E_x X(x), \quad (4.290)$$

δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής

$$X(x) = A e^{ik_x x} \quad (\text{ιδιοσυναρτήσεις}) \quad (4.291)$$

και προκύπτει

$$\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} X(x) = E_x X(x), \quad (4.292)$$

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \quad (\text{ιδιοενέργειες}). \quad (4.293)$$

Παρατηρούμε πως οι ιδιοενέργειες και οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές είναι χαρακτηριστικές ελεύθερου μονοδιαστάτου σωματιδίου, κινούμενου στη διεύθυνση x . Η κανονικοποίηση γίνεται σε όλο το μήκος της ετεροδομής κατά τον άξονα x , δηλαδή

$$\int_{-L_x/2}^{+L_x/2} dx |X(x)|^2 = 1 \Rightarrow |A|^2 L_x = 1, \quad \text{οπότε, μία βολική εκλογή είναι} \quad A = \frac{1}{\sqrt{L_x}}. \quad (4.294)$$

- Για τη δεύτερη εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} = E_y Y(y), \quad (4.295)$$

δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής

$$Y(y) = B e^{ik_y y} \quad (\text{ιδιοσυναρτήσεις}) \quad (4.296)$$

και προκύπτει

$$\frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} Y(y) = E_y Y(y), \quad (4.297)$$

$$E_y = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad (\text{ιδιοενέργειες}). \quad (4.298)$$

Παρατηρούμε πως οι ιδιοενέργειες και οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές είναι χαρακτηριστικές ελεύθερου μονοδιαστάτου σωματιδίου, κινούμενου στη διεύθυνση y . Η κανονικοποίηση γίνεται σε όλο το μήκος της ετεροδομής κατά τον άξονα y , δηλαδή

$$\int_{-L_y/2}^{+L_y/2} dy |Y(y)|^2 = 1 \Rightarrow |B|^2 L_y = 1, \quad \text{οπότε, μία βολική εκλογή είναι} \quad B = \frac{1}{\sqrt{L_y}}. \quad (4.299)$$

- Για την τρίτη εξίσωση

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 Z(z)}{\partial z^2} + U(z) Z(z) = E_z Z(z). \quad (4.300)$$

Γενικώς, θα έχουμε κάποιες ιδιοενέργειες E_i και ιδιοσυναρτήσεις $\zeta_i(z)$, αντιστοιχούσες σε δέσμιες καταστάσεις (δεν ξεετάζουμε εδώ ενέργειες μεγαλύτερες από τα χείλη του φρέατος). Ας τις υποθέσουμε κανονικοποιημένες, ώστε

$$\int_{-L_z/2}^{+L_z/2} dz |\zeta_i(z)|^2 = 1. \quad (4.301)$$

Οπότε, εν συνόλω, αποκτούμε τις ιδιοενέργειες

$$E_i(k_x, k_y) = E_i + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad (4.302)$$

και τις (περιβάλλουσες) ιδιοσυναρτήσεις

$$\varphi_{i,k_x,k_y}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \zeta_i(z) e^{ik_x x} e^{ik_y y}, \quad (4.303)$$

όπου $S = L_x L_y$ είναι η διατομή της ετεροδομής στο επίπεδο xy . Δηλαδή, κατά μήκος των αξόνων x και y το ηλεκτρόνιο είναι ελεύθερο, ενώ κατά μήκος του άξονα z δέσμιο (τουλάχιστον για ενέργειες κάτω από τα χείλη του φρέατος). Ο δείκτης i είναι διακριτός και οι δείκτες k_x, k_y «συνεχείς». Αυτά τα στοιχεία συναποτελούν τον οιονεί διδιάστατο χαρακτήρα (quasi two-dimensional character) τέτοιων ηλεκτρονίων.

4.9 Πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων οιονεί διδιάστατου ηλεκτρονικού αερίου

Η πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων ορίζεται ως

$$g(\varepsilon) := \sum_{\mu} \delta(\varepsilon - E_{\mu}) = 2 \sum_{\lambda} \delta(\varepsilon - E_{\lambda}), \quad (4.304)$$

όπου το πρώτο (δεύτερο) άθροισμα στα μ (λ) δηλώνει όλες τις ιδιοκαταστάσεις (ενεργειακές ιδιοκαταστάσεις), δηλαδή ο παράγων 2 οφείλεται στο σπιν. Το άθροισμα πραγματοποιείται σε όλους τους «συνεχείς» και διακριτούς δείκτες. Στην προκειμένη περίπτωση, σε όλους τους κβαντικούς αριθμούς, «συνεχείς» (k_x, k_y) και διακριτό (i). Δηλαδή,

$$g(\varepsilon) = 2 \sum_{i,k_x,k_y} \delta\left(\varepsilon - E_i - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}\right). \quad (4.305)$$

Ας θεωρήσουμε τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες στις διευθύνσεις x και y , δηλαδή

$$e^{ik_x\left(-\frac{L_x}{2}\right)} = e^{ik_x\left(\frac{L_x}{2}\right)} \Rightarrow e^{ik_x L_x} = 1 = e^{i2\pi n_x}, n_x \in \mathcal{Z} \Rightarrow k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}. \quad (4.306)$$

$$e^{ik_y\left(-\frac{L_y}{2}\right)} = e^{ik_y\left(\frac{L_y}{2}\right)} \Rightarrow e^{ik_y L_y} = 1 = e^{i2\pi n_y}, n_y \in \mathcal{Z} \Rightarrow k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}. \quad (4.307)$$

Οπότε,

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x} \Rightarrow \Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x} \Delta n_x, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y} \Rightarrow \Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y} \Delta n_y. \quad (4.308)$$

$$g(\varepsilon) = 2 \sum_{i, k_x, k_y} \delta\left(\varepsilon - E_i - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}\right) \Delta n_x \Delta n_y, \quad \text{όπου } \Delta n_x = \Delta n_y = 1. \quad (4.309)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (4.308) προκύπτει

$$g(\varepsilon) = 2 \sum_{i, k_x, k_y} \delta\left(\varepsilon - E_i - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}\right) \frac{L_x}{2\pi} \Delta k_x \frac{L_y}{2\pi} \Delta k_y. \quad (4.310)$$

Κι επειδή $S = L_x L_y$ είναι η διατομή της ετεροδομής στο επίπεδο xy , μπορούμε να γράψουμε

$$g(\varepsilon) = 2 \frac{S}{(2\pi)^2} \sum_{i, k_x, k_y} \delta\left(\varepsilon - E_i - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}\right) \Delta k_x \Delta k_y. \quad (4.311)$$

Τώρα, ας υποθέσουμε πως

$$\Delta k_x \rightarrow dk_x \quad \text{με τη λογική} \quad L_x \rightarrow \infty \text{ ή καλύτερα επειδή } \gg L_z, \quad (4.312)$$

$$\Delta k_y \rightarrow dk_y \quad \text{με τη λογική} \quad L_y \rightarrow \infty \text{ ή καλύτερα επειδή } \gg L_z. \quad (4.313)$$

Οπότε, με αυτήν την «ποιοτική» απόδειξη καταλήγουμε στο

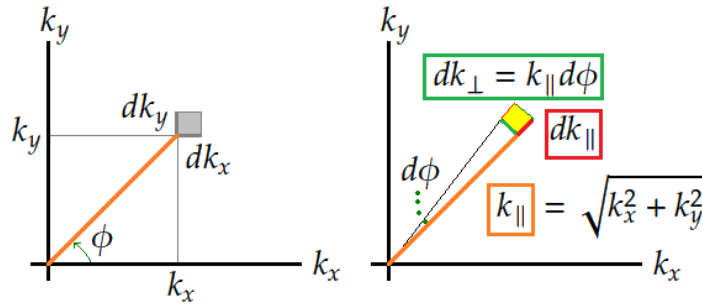
$$g(\varepsilon) = 2 \frac{S}{(2\pi)^2} \int_{k_x} dk_x \int_{k_y} dk_y \sum_i \delta\left(\varepsilon - E_i - \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}\right), \quad (4.314)$$

το οποίο, εξ άλλου, συνάγεται και κατευθείαν από γνωστό θεώρημα.

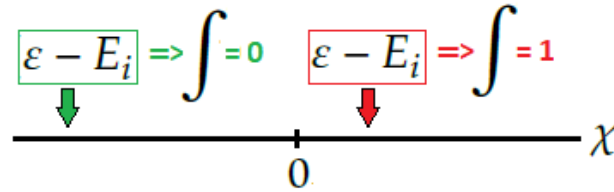
Ας αλλάξουμε τώρα συντεταγμένες στο επίπεδο $k_x k_y$, από καρτεσιανές σε πολικές. Όπως βλέπουμε και στην Εικόνα 4.19, το μέτρο, $|\vec{k}|$, του διδιαστάτου κυματανύσματος, $\vec{k} = (k_x, k_y)$, στο επίπεδο $k_x k_y$, είναι $|\vec{k}| := k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, η στοιχειώδης μεταβολή του στην ακτινική διεύθυνση συμβολίζεται dk_{\parallel} και η στοιχειώδης μεταβολή του στην πολική διεύθυνση, δηλαδή, καθέτως προς την ακτινική, είναι $dk_{\perp} = k_{\parallel} d\phi$, όπου ϕ η πολική γωνία στο επίπεδο $k_x k_y$. Συνεπώς, μπορούμε να γράψουμε

$$g(\varepsilon) = 2 \frac{S}{(2\pi)^2} \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} dk_{\parallel} k_{\parallel} d\phi \sum_i \delta\left(\varepsilon - E_i - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}\right), \quad (4.315)$$

$$g(\varepsilon) = \frac{S}{\pi} \sum_i \int_0^{\infty} dk_{\parallel} k_{\parallel} \delta\left(\varepsilon - E_i - \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}\right). \quad (4.316)$$



Εικόνα 4.19: Από τις καρτεσιανές στις πολικές συντεταγμένες στο επίπεδο $k_x k_y$.



Εικόνα 4.20: Όταν το $\varepsilon - E_i$ είναι εντός του διαστήματος $(0, \infty)$, δηλαδή, $\varepsilon > E_i$, τότε το ολοκλήρωμα ισούται με 1, αλλιώς ισούται με 0.

Κάνοντας τώρα την αλλαγή μεταβλητής

$$\chi = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \Rightarrow d\chi = \frac{\hbar^2}{m^*} k_{\parallel} dk_{\parallel}, \tag{4.317}$$

προκύπτει

$$g(\varepsilon) = \frac{Sm^*}{\pi\hbar^2} \sum_i \int_0^{\infty} d\chi \delta(\varepsilon - E_i - \chi). \tag{4.318}$$

Όπως βλέπουμε στην Εικόνα 4.20, όταν το $\varepsilon - E_i$ είναι εντός του διαστήματος $(0, \infty)$, δηλαδή, $\varepsilon > E_i$, τότε το ολοκλήρωμα ισούται με 1, αλλιώς ισούται με 0. Αυτό μπορεί να εκφραστεί ως εξής:

$$g(\varepsilon) = \frac{m^* S}{\pi\hbar^2} \sum_i \Theta(\varepsilon - E_i) \tag{4.319}$$

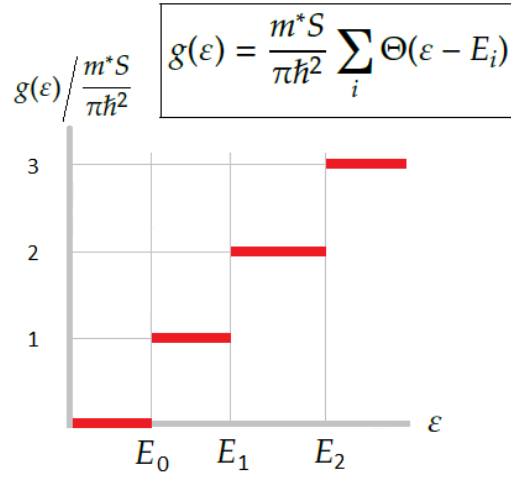
Η πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων, με τη χαρακτηριστική κλιμακωτή μορφή, παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.21.

4.10 Χωρική πυκνότητα κατειλημμένων καταστάσεων, δηλαδή ηλεκτρονιακή πυκνότητα

Η χωρική πυκνότητα κατειλημμένων καταστάσεων, δηλαδή η ηλεκτρονιακή πυκνότητα ή αλλιώς χωρική πυκνότητα ηλεκτρονίων, είναι

$$n(\vec{r}) := \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) f_0(\varepsilon) \left| \varphi_{i,k_x,k_y}(\vec{r}) \right|^2, \tag{4.320}$$

όπου $g(\varepsilon)$ είναι η πυκνότητα καταστάσεων, $f_0(\varepsilon)$ είναι η συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac και $\varphi_{i,k_x,k_y}(\vec{r})$ είναι η κανονικοποιημένη περιβάλλουσα συνάρτηση της στάθμης i . Προσοχή, εντός της $g(\varepsilon)$, υπάρχει ήδη άθροισμα στα i . Αντικαθιστώντας, τις Εξ. (4.319), (4.303) και τον ορισμό της συναρτήσεως κατανομής



Εικόνα 4.21: Πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων οιονεί διδιαστάτου ηλεκτρονικού αερίου, χαρακτηριστικά κλιμακωτή.

Fermi-Dirac, αποκτούμε

$$n(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{m^*S}{\pi\hbar^2} \sum_i \Theta(\varepsilon - E_i) \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T}\right)} \frac{1}{S} |\zeta_i(z)|^2, \quad (4.321)$$

$$n(\vec{r}) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \Theta(\varepsilon - E_i) \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T}\right)}, \quad (4.322)$$

$$n(\vec{r}) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \int_{E_i}^{+\infty} d\varepsilon \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_B T}\right)}. \quad (4.323)$$

Κάνουμε τώρα την αλλαγή μεταβλητής $\chi(T) := \frac{\varepsilon}{k_B T}$, ονομάζουμε $\kappa(T) := \frac{\mu(T)}{k_B T}$ [και για απλότητα μπορεί να γράφουμε απλώς χ και κ παρακάτω], οπότε προκύπτει

$$n(\vec{r}) = \frac{m^*k_B T}{\pi\hbar^2} \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \int_{\frac{E_i}{k_B T}}^{+\infty} d\chi \frac{1}{1 + \exp(\chi - \kappa)}, \quad (4.324)$$

κι επειδή $(\ln(1 + e^{-x}))' = \frac{-e^{-x}}{1+e^{-x}} = \frac{-1}{1+e^x}$, μπορούμε να γράψουμε

$$n(\vec{r}) = \frac{m^*k_B T}{\pi\hbar^2} \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \left[-\ln(1 + \exp(\kappa - \chi)) \right]_{\frac{E_i}{k_B T}}^{+\infty}. \quad (4.325)$$

Αλλά,

$$\left[-\ln(1 + \exp(\kappa - \chi)) \right]_{\frac{E_i}{k_B T}}^{+\infty} = 0 + \ln\left(1 + \exp\left(\kappa - \frac{E_i}{k_B T}\right)\right), \quad (4.326)$$

οπότε,

$$n(\vec{r}) = \frac{m^*k_B T}{\pi\hbar^2} \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \ln\left(1 + \exp\left(\frac{\mu(T) - E_i}{k_B T}\right)\right) = n(z) \quad (4.327)$$

Για $T = 0$,

$$f_0(\varepsilon) = \begin{cases} 1, & \varepsilon \leq E_F \\ 0, & \varepsilon > E_F \end{cases} = \Theta(E_F - \varepsilon), \quad (4.328)$$

όπου E_F είναι η λεγόμενη ενέργεια Fermi, δηλαδή, το χημικό δυναμικό σε θερμοκρασία $T = 0$ [$E_F := \mu(0)$]. Αντικαθιστώντας στον ορισμό (4.320), λαμβάνουμε

$$n(\vec{r}) = \int_{-\infty}^{E_F} d\varepsilon \frac{m^* S}{\pi \hbar^2} \sum_i \Theta(\varepsilon - E_i) \frac{1}{S} |\zeta_i(z)|^2, \quad (4.329)$$

$$n(\vec{r}) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \int_{-\infty}^{E_F} d\varepsilon \Theta(\varepsilon - E_i), \quad (4.330)$$

$$n(\vec{r}) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_{\substack{i \\ \text{κατειλημμένες}}} |\zeta_i(z)|^2 \int_{E_i}^{E_F} d\varepsilon. \quad (4.331)$$

Μόνο οι κατειλημμένες στάθμες συνεισφέρουν τώρα. Εν κατακλείδι, αποκτούμε

$$n(\vec{r}) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_{\substack{i \\ \text{κατειλημμένες}}} |\zeta_i(z)|^2 (E_F - E_i) = n(z) \quad (4.332)$$

4.11 Χωρική πυκνότητα ηλεκτρονίων, ενεργειακή πυκνότητα ηλεκτρονίων, συνολικός αριθμός ηλεκτρονίων

Όπως είδαμε στην προηγούμενη Ενότητα 4.10, Εξ. (4.320), η χωρική πυκνότητα ηλεκτρονίων ορίζεται ως

$$n(\vec{r}) := \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon g(\varepsilon) f_0(\varepsilon) |\varphi_{i,k_x,k_y}(\vec{r})|^2. \quad (4.333)$$

Παρομοίως, ορίζεται η ενεργειακή πυκνότητα ηλεκτρονίων ως

$$n(\varepsilon) := \int_{\text{παντού}} d^3r g(\varepsilon) f_0(\varepsilon) |\varphi_{i,k_x,k_y}(\vec{r})|^2, \quad (4.334)$$

ενώ, ο συνολικός αριθμός ηλεκτρονίων είναι

$$N := \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \int_{\text{παντού}} d^3r g(\varepsilon) f_0(\varepsilon) |\varphi_{i,k_x,k_y}(\vec{r})|^2, \quad (4.335)$$

αφού

$$N := \int_{\text{παντού}} d^3r n(\vec{r}). \quad (4.336)$$

Στην ορολογία των ηλεκτρονικών διατάξεων χρησιμοποιείται συνήθως η επιφανειακή πυκνότητα ηλεκτρονίων [sheet (or surface) electron density],

$$N_s := \frac{N}{S}. \quad (4.337)$$

Αν χρησιμοποιήσουμε την Εξ. 4.327, ισχύουσα για οιαδήποτε θερμοκρασία, T , λαμβάνουμε

$$N := \int_{\text{παντού}} d^3r \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_i |\zeta_i(z)|^2 \ln \left(1 + \exp \left(\frac{\mu(T) - E_i}{k_B T} \right) \right) \Rightarrow \quad (4.338)$$

$$N = \frac{m^* S k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_i \ln \left(1 + \exp \left(\frac{\mu(T) - E_i}{k_B T} \right) \right), \quad (4.339)$$

ενώ αν χρησιμοποιήσουμε την Εξ. 4.332, ισχύουσα για $T = 0$, αποκτούμε

$$N := \int_{\text{παντού}} d^3r \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \sum_i |\zeta_i(z)|^2 (E_F - E_i) \Rightarrow \quad (4.340)$$

$$N = \frac{m^* S}{\pi \hbar^2} \sum_i (E_F - E_i). \quad (4.341)$$

Ας δώσουμε κι ένα παράδειγμα, ώστε να καταλάβουμε τις περιγραφόμενες τάξεις μεγέθους. Ας υποθέσουμε πως $S = 1 \text{ cm}^2$, $m^* = 0.067 m_e$ (GaAs) κι έστω πως έχουμε μία μόνο κατειλημμένη στάθμη με $E_F - E_i = 30 \text{ meV}$. Τότε $N \approx \frac{0.067 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-4}}{\pi \cdot 1.054^2 \cdot 10^{-68}} \cdot 30 \cdot 10^{-3} \cdot 1.602 \cdot 10^{-19} \approx 0.9 \cdot 10^{12}$, οπότε η επιφανειακή πυκνότητα ηλεκτρονίων είναι $N_s \approx 0.9 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

4.12 Πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων οιονεί μονοδιαστάτου ηλεκτρονιακού αερίου

Αφήνεται ως άσκηση να αποδειχτεί πως στην περίπτωση οιονεί μονοδιαστάτου ηλεκτρονιακού αερίου, με καταστάσεις ελεύθερες στη διεύθυνση x και δέσμιες στις διευθύνσεις y, z , οι περιβάλλουσες ιδιοσυναρτήσεις δίνονται από την έκφραση

$$\varphi_{i,j,k_x}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} v_j(y) \zeta_i(z) \quad (4.342)$$

και οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες από την έκφραση

$$E_{i,j,k_x} = E_i + E_j + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}, \quad (4.343)$$

όπου ο k_x είναι «συνεχής» και οι i, j είναι διακριτοί δείκτες.

Από τον ορισμό της πυκνότητας ιδιοκαταστάσεων, Εξ. (4.304), χρησιμοποιώντας την Εξ. (4.343), κά-
νουμε το άθροισμα σε όλους τους «συνεχείς» και διακριτούς δείκτες. Στην προκειμένη περίπτωση, «συνεχής» είναι ο k_x και διακριτοί οι i, j . Δηλαδή,

$$g(\varepsilon) = 2 \sum_{i,j,k_x} \delta \left(\varepsilon - E_i - E_j - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \right). \quad (4.344)$$

Θεωρώντας περιοδικές συνοριακές συνθήκες για τον άξονα x , έχουμε

$$e^{ik_x \left(-\frac{L_x}{2} \right)} = e^{ik_x \left(\frac{L_x}{2} \right)} \Rightarrow e^{ik_x L_x} = 1 = e^{i2\pi n_x}, n_x \in \mathcal{Z} \Rightarrow k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x} \Rightarrow \Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x} \Delta n_x, \quad (4.345)$$

όπου $\Delta n_x = 1$, οπότε, η Εξ. (4.344), γίνεται

$$g(\varepsilon) = 2 \sum_{i,j,k_x} \delta \left(\varepsilon - E_i - E_j - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \right) \Delta n_x = 2 \frac{L_x}{2\pi} \sum_{i,j,k_x} \delta \left(\varepsilon - E_i - E_j - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \right) \Delta k_x. \quad (4.346)$$

Τώρα, ας υποθέσουμε πως

$$\Delta k_x \rightarrow dk_x \quad \text{με τη λογική} \quad L_x \rightarrow \infty \text{ ή καλύτερα επειδή } \gg L_y, L_z. \quad (4.347)$$

Αρα,

$$g(\varepsilon) = \frac{L_x}{\pi} \sum_{ij} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \delta\left(\varepsilon - E_i - E_j - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}\right) = 2 \frac{L_x}{\pi} \sum_{ij} \int_0^{\infty} dk_x \delta\left(\varepsilon - E_i - E_j - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}\right). \quad (4.348)$$

Κάνοντας τώρα την αλλαγή μεταβλητής

$$\chi = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} \Rightarrow d\chi = \frac{\hbar^2}{m^*} k_x dk_x \Rightarrow dk_x = \frac{\sqrt{m^*}}{\hbar\sqrt{2}} \frac{d\chi}{\sqrt{\chi}}. \quad (4.349)$$

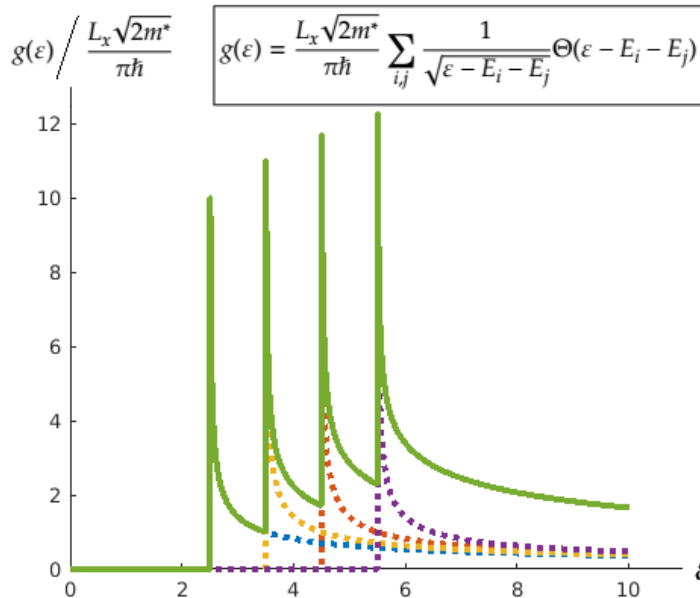
Αρα,

$$g(\varepsilon) = 2 \frac{L_x}{\pi} \frac{\sqrt{m^*}}{\hbar\sqrt{2}} \sum_{ij} \int_0^{\infty} d\chi \frac{1}{\sqrt{\chi}} \delta(\varepsilon - E_i - E_j - \chi). \quad (4.350)$$

Συνεπώς,

$$g(\varepsilon) = \frac{L_x \sqrt{2m^*}}{\pi \hbar} \sum_{ij} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - E_i - E_j}} \Theta(\varepsilon - E_i - E_j) \quad (4.351)$$

Η πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων, με τη χαρακτηριστική πριονωτή μορφή και τα λεγόμενα ιδιάζοντα σημεία van Hove, όπου έχουμε απειρισμούς πλησιάζοντας από άνω, παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.22.



Εικόνα 4.22: Πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων οιονεί μονοδιαστάτου ηλεκτρονικού αερίου, με τη χαρακτηριστική πριονωτή μορφή και τα ιδιάζοντα σημεία van Hove. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα έχουμε θέσει $E_{i=0} = 0.5$, $E_{i=1} = 1.5$, $E_{j=0} = 2$, $E_{j=1} = 4$, σε αυθαίρετες μονάδες, απλώς για να κάνουμε τη ζωγραφιά.

4.13 Πυκνότητα ιδιοκαταστάσεων τριδιαστάτου ηλεκτρονιακού αερίου

Αφήνεται ως άσκηση να αποδειχτεί πως στην περίπτωση τριδιαστάτου ηλεκτρονιακού αερίου, με καταστάσεις ελεύθερες σε όλες τις διευθύνσεις x, y, z , οι περιβάλλουσες ιδιοσυναρτήσεις δίνονται από την έκφραση

$$\varphi_{i,j,k_x}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}, \quad (4.352)$$

όπου $V = L_x L_y L_z$, και οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες από την έκφραση

$$E_{k_x, k_y, k_z} = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (4.353)$$

όπου οι k_x, k_y, k_z είναι «συνεχείς» δείκτες.

Από τον ορισμό της πυκνότητας ιδιοκαταστάσεων, Εξ. (4.304), χρησιμοποιώντας την Εξ. (4.353), κά-
νουμε το άθροισμα σε όλους τους «συνεχείς» δείκτες. Δηλαδή,

$$g(\varepsilon) = 2 \sum_{k_x, k_y, k_z} \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right). \quad (4.354)$$

Θεωρώντας περιοδικές συνοριακές συνθήκες για τον άξονα x , έχουμε

$$e^{ik_x(-\frac{L_x}{2})} = e^{ik_x(\frac{L_x}{2})} \Rightarrow e^{ik_x L_x} = 1 = e^{i2\pi n_x}, n_x \in \mathcal{Z} \Rightarrow k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x} \Rightarrow \Delta k_x = \frac{2\pi}{L_x} \Delta n_x, \quad (4.355)$$

όπου $\Delta n_x = 1$. Ομοίως,

$$\Delta k_y = \frac{2\pi}{L_y} \Delta n_y, \quad \Delta k_z = \frac{2\pi}{L_z} \Delta n_z, \quad (4.356)$$

όπου $\Delta n_y = \Delta n_z = 1$. Συνεπώς, η Εξ. (4.354) γίνεται

$$g(\varepsilon) = 2 \sum_{k_x, k_y, k_z} \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = \frac{2V}{(2\pi)^3} \sum_{k_x, k_y, k_z} \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right) \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z. \quad (4.357)$$

Τώρα, ας υποθέσουμε πως

$$\Delta k_x \rightarrow dk_x \quad \text{με τη λογική} \quad L_x \rightarrow \infty, \quad (4.358)$$

$$\Delta k_y \rightarrow dk_y \quad \text{με τη λογική} \quad L_y \rightarrow \infty, \quad (4.359)$$

$$\Delta k_z \rightarrow dk_z \quad \text{με τη λογική} \quad L_z \rightarrow \infty. \quad (4.360)$$

Οπότε, με αυτήν την «ποιοτική» απόδειξη καταλήγουμε στο

$$g(\varepsilon) = \frac{2V}{(8\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x \int_{-\infty}^{\infty} dk_y \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right), \quad (4.361)$$

το οποίο, εξ άλλου, συνάγεται και κατευθείαν από γνωστό θεώρημα. Αλλάζοντας σε σφαιρικές συντεταγμένες, η παραπάνω σχέση γίνεται

$$g(\varepsilon) = \frac{V}{4\pi^3} \int_0^{\infty} 4\pi k^2 dk \delta\left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right). \quad (4.362)$$

Κάνοντας τώρα την αλλαγή μεταβλητής

$$\chi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \Rightarrow d\chi = \frac{\hbar^2}{m^*} k dk \Rightarrow dk = \frac{\sqrt{m^*}}{\hbar\sqrt{2}} \frac{d\chi}{\sqrt{\chi}}. \quad (4.363)$$

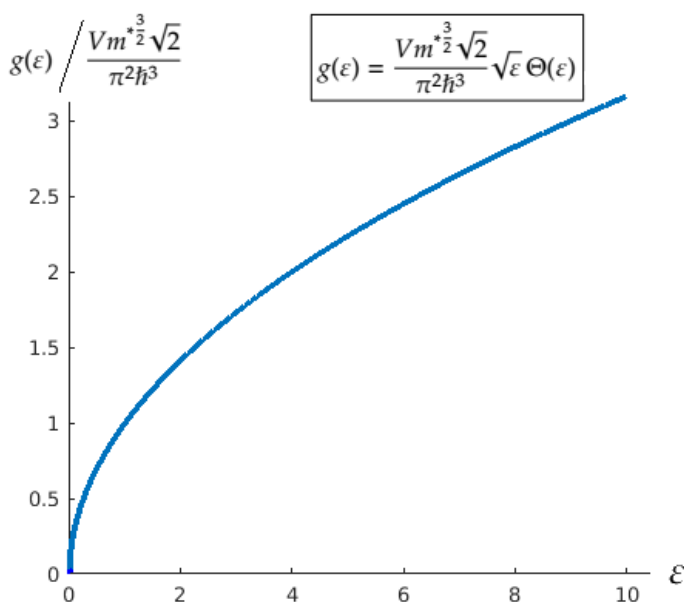
Άρα,

$$g(\varepsilon) = \frac{Vm^{*\frac{3}{2}}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty d\chi \frac{\chi}{\sqrt{\chi}} \delta(\varepsilon - \chi). \quad (4.364)$$

Συνεπώς,

$$g(\varepsilon) = \frac{Vm^{*\frac{3}{2}}\sqrt{2}}{\pi^2\hbar^3} \sqrt{\varepsilon} \Theta(\varepsilon) \quad (4.365)$$

Η πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων, η οποία, σε αντίθεση με τις προηγούμενες περιπτώσεις, αυξάνεται με συνεχή τρόπο συναρτήσει της ενέργειας, παρουσιάζεται στην Εικόνα 4.23.



Εικόνα 4.23: Πυκνότητα (ιδιο)καταστάσεων τριδιαστάτου ηλεκτρονικού αερίου.

Περισσότερα για συνεχές φάσμα στα στερεά, ενεργειακές ζώνες κ.ο.κ. μπορούν να βρεθούν σε κλασικά βιβλία φυσικής στερεάς καταστάσεως, επί παραδείγματι στα [16], [18], [19], [20].

4.14 Βαθμοί ελευθερίας: μετατοπιστικοί, δονητικοί, περιστροφικοί

Με απλά λόγια, βαθμοί ελευθερίας ενός φυσικού συστήματος είναι ο αριθμός των ανεξαρτήτων τρόπων κατά τους οποίους μπορεί να κινηθεί. Αυτοί είναι μετατοπιστικοί (translational), δονητικοί (vibrational) ή περιστροφικοί (rotational). Εναλλακτικώς, ο ελάχιστος αριθμός ανεξαρτήτων μεταβλητών, απαραίτητων για να περιγραφεί επαρκώς η κατάσταση του συστήματος. Κλασικώς, ένα μόριο με N άτομα έχει $3N$ βαθμούς ελευθερίας. Το κέντρο μάζας του μπορεί να κινηθεί σε 3 διευθύνσεις, x, y, z , επομένως, έχει 3 μετατοπιστικούς βαθμούς ελευθερίας. Άρα, απομένουν $3N - 3$ δονητικοί και περιστροφικοί βαθμοί ελευθερίας.

Θα δώσουμε ένα παράδειγμα ενός διατομικού μορίου Α-Β. Το μόριο μπορεί να δονηθεί κατά μήκος της συνδέουσας τα δύο άτομα γραμμής. [Ας υποθέσουμε πως αυτή η γραμμή κείται στον άξονα x .] Συνεπώς, έχει

έναν δονητικό βαθμό ελευθερίας. Μπορεί ακόμα να περιστραφεί γύρω από τις κάθετες στη συνδέουσα τα δύο άτομα διευθύνσεις, δηλαδή, εδώ τους άξονες y και z . Άρα, έχει 2 περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας.

Γενικώς, εάν ένα μόριο είναι γραμμικό, έχει 2 περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας, άρα, απομένουν $3N - 5$ δονητικοί βαθμοί ελευθερίας. Εάν ένα μόριο δεν είναι γραμμικό, έχει 3 περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας, άρα, απομένουν $3N - 6$ δονητικοί βαθμοί ελευθερίας. Στον κβαντικό κόσμο, αυτές οι κινήσεις αντιστοιχούν σε διαφορετικούς κβαντικούς αριθμούς. Για περισσότερα, δείτε ένα βιβλίο Φυσικοχημείας, π.χ. το [21].

Βιβλιογραφία

- [1] A. B. Ellis, M. J. Geselbracht, B. J. Johnson, G. C. Lisensky και W. R. Robinson. *Teaching General Chemistry: A Materials Science Companion*. Washington D.C.: American Chemical Society Books, 1993. ISBN: 084122725X.
- [2] B. Henderson και G. F. Imbusch. *Optical Spectroscopy of Inorganic Solids*. Oxford Science Publications, 2006. ISBN: 9780521804844.
- [3] V. V. Tirskaa και E. F. Martynovich. “Intraband radioluminescence of LiF crystals”. Στο: *Optics and Spectroscopy* 88 (2000). Translated from *Optika i Spektroskopiya* 88 (2000) 593-597. Original Russian Text Copyright 2000 by Tirskaa, Martynovich, σσ. 533–537. DOI: [10.1134/1.626833](https://doi.org/10.1134/1.626833).
- [4] G. Baldacchini, U. M. Grassano και A. Tanga. “Magnetic circular dichroic effects in the luminescence of F centers in KI, KBr, and KCl”. Στο: *Physical Review B* 16 (1977), σσ. 5570–5584. DOI: [10.1103/PhysRevB.16.5570](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.16.5570).
- [5] R. Rodríguez-Mijangos, R. Pérez-Salas, E. Muñoz-Sandoval και M. Barboza-Flores. “Stokes shift of the F center electronic transitions in mixed ionic crystals”. Στο: *Radiation Effects and Defects in Solids* 138 (1996), σσ. 153–158. DOI: [10.1080/10420159608211517](https://doi.org/10.1080/10420159608211517).
- [6] B. Henderson και K. P. O’Donnell. “Laser spectroscopy of color centers”. Στο: *Laser Spectroscopy of Solids II (Topics in Applied Physics)*. Επιμέλεια υπό W. M. Yen. Τόμ. 65. Berlin, Heidelberg: Springer, 1989. Κεφ. 4, σσ. 123–166. DOI: [10.1007/3540501541_4](https://doi.org/10.1007/3540501541_4).
- [7] G. Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. EDP Sciences, 1992. ISBN: 9780470217085.
- [8] Κ. Σιμσερίδης. *Σημειώσεις του μαθήματος Κβαντική Οπτική και Lasers*. Αθήνα: Τμήμα Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2021. URL: <https://eclass.uoa.gr/courses/PHYS107/>.
- [9] Κ. Σιμσερίδης. *Ισχυρή Δέσμευση σε Μόρια, Πολυμερή, Στερεά*. Αθήνα: Κάλλιπος, 2023. DOI: [10.57713/kallipos-165](https://doi.org/10.57713/kallipos-165). URL: <http://dx.doi.org/10.57713/kallipos-165>.
- [10] W. A. Harrison. *Electronic Structure and the Properties of Solids: the Physics of the Chemical Bond*. 2nd ed. New York: Dover, 1989. ISBN: 9780486660219.
- [11] W. A. Harrison. *Elementary Electronic Structure*. revised. River Edge, NJ: World Scientific, 2004. ISBN: 9789813102200. DOI: [10.1142/5432](https://doi.org/10.1142/5432). eprint: <https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/5432>. URL: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/5432>.
- [12] Ε. Ν. Οικονόμου. *Φυσική Στερεάς Κατάστασης: Τόμος Ι: Μέταλλα, Ημιαγωγοί, Μονωτές*. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2013. ISBN: 9605240394.
- [13] J. C. Slater. “Electrons in Perturbed Periodic Lattices”. Στο: *Physical Review* 76 (1949), σσ. 1592–1601. DOI: [10.1103/PhysRev.76.1592](https://doi.org/10.1103/PhysRev.76.1592).
- [14] F. Bloch. “Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern”. Στο: *Zeitschrift für Physik* 52 (1929), σσ. 555–600. DOI: [10.1007/BF01339455](https://doi.org/10.1007/BF01339455).
- [15] G. H. Wannier. “The structure of electronic excitation levels in insulating crystals”. Στο: *Physical Review* 52 (1937), σσ. 191–197. DOI: [10.1103/PhysRev.52.191](https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.191).
- [16] N. W. Ashcroft και N. D. Mermin. *Solid State Physics*. New York: Saunders College Publishing, 1976. ISBN: 9780030839931.

- [17] Κ. Σιμσερίδης. “Ηλεκτρονιακές καταστάσεις και ευκινησία επιλεκτικά εμπλουτισμένων ετεροδομών $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ”. Διδακτορική Διατριβή. Αθήνα: Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, Σχολή Θετικών Επιστημών, Τμήμα Φυσικής, 1996. DOI: [10.12681/eadd/7439](https://doi.org/10.12681/eadd/7439). URL: <http://hdl.handle.net/10442/hedi/7439>.
- [18] W. D. Callister και D. G. Rethwisch. *Materials Science and Engineering: an Introduction*. New York: Wiley, 2010. ISBN: 9780470419977.
- [19] Π. Βαρώτσος και Κ. Αλεξόπουλος. *Φυσική Στερεάς Κατάστασης*. Αθήνα: Σαββάλας, 1995. ISBN: 960734362X.
- [20] Γ. Τριμπέρης. *Φυσική Ημιαγωγών*. Αθήνα: Liberal Books, 2013. ISBN: 9786185012076.
- [21] Κ. W. Kolasinski. *Physical Chemistry: How Chemistry Works*. 1st edition. [Στα ελληνικά, εκδόσεις Κριτική, Επιμέλεια: Π. Γιαννακουδάκης, Κ. Σιμσερίδης, 2020, ISBN 9789605863463.] New York: Wiley, 2016. ISBN: 9781118751121.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

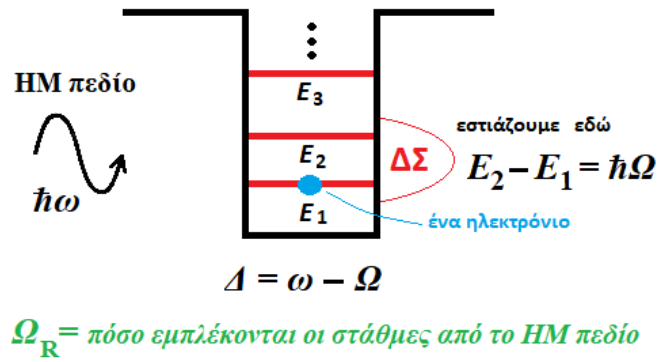
ΗΜΙΚΛΑΣΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ I

Σύνοψη

Συζητάμε την ημικλασική προσέγγιση της αλληλεπιδράσεως ηλεκτρομαγνητικού (ΗΜ) πεδίου – δισταθμικού, τρισταθμικού, πολυσταθμικού συστήματος (ΔΣ, ΤΣ, ΠΣ). Αντιμετωπίζουμε το ΗΜ πεδίο κλασικά, ενώ τα ΔΣ, ΤΣ, ΠΣ κβαντικά, δηλαδή ως ένα σύνολο ιδιοκαταστάσεων. Εισάγουμε την προσέγγιση διπόλου, αφού πούμε μερικά πράγματα για την ηλεκτρική διπολική ροπή και τις αναλογίες της με τη μαγνητική διπολική ροπή. Αδιατάρακτο σύστημα είναι το σύστημα χωρίς ΗΜ πεδίο. Το διαταραγμένο σύστημα, υπό ΗΜ πεδίο δηλαδή, αντιμετωπίζεται με χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών. Καταλήγουμε σε ένα γραμμικό σύστημα διαφορικών εξισώσεων. Συζητάμε τα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής. Παραθέτουμε αναλυτικές λύσεις για ΔΣ, ΤΣ, ΠΣ με την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (ΠΠΚ) [rotating wave approximation (RWA)]. Συναντάμε για πρώτη φορά τις ταλαντώσεις Rabi, δηλαδή, τις χρονικώς μεταβαλλόμενες πιθανότητες να βρούμε το ηλεκτρόνιο στις στάθμες. Εισάγουμε τη συχνότητα Rabi, η οποία εκφράζει το μέγεθος και την αποτελεσματικότητα της διαταραχής, δηλαδή, της εμπλοκής με το ΗΜ πεδίο. Για τη λύση των διαφορικών εξισώσεων χρησιμοποιούμε τη μέθοδο ιδιοτιμών, η οποία είναι πιο γενική, αλλά και άλλες εναλλακτικές. Υπολογίζουμε προσεγγιστικά τους συντελεστές Einstein. Για το ΤΣ χρησιμοποιούμε μια βρατή, επιλύσιμη αναλυτικώς, παραλλαγή, με ισαπέχουσες στάθμες στη μία διάσταση, υπόθεση που κρατάμε και για το πολυσταθμικό σύστημα, το οποίο επιλύουμε τελικώς. Σχετικές βοηθητικές αναφορές είναι οι [1, 2, 3, 4, 5, 6].

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Ηλεκτρομαγνητισμού, Κβαντικής Φυσικής και Μαθηματικών.

As υπενθυμίσουμε μερικές απαραίτητες συντομογραφίες: ΜΣ = μονοσταθμικό σύστημα (single-level system), ΔΣ = δισταθμικό σύστημα (two-level system), ΤΣ = τρισταθμικό σύστημα (three-level system), ΠΣ = πολυσταθμικό σύστημα (multi-level system). Επί παραδείγματι, ΔΣ μπορεί να είναι δύο διαδοχικές στάθμες ενός ατόμου, μορίου, κβαντικής τελείας ή αλλιώς νανοσωματιδίου. Σχηματικά αυτό απεικονίζεται στην Εικόνα 5.1, μαζί με τα σχετικά μεγέθη: ιδιοενέργειες των δύο σταθμών, E_2 και E_1 , κυκλική συχνότητα του ΗΜ πεδίου, ω , ενεργειακή απόσταση των δύο σταθμών, $\hbar\Omega$, συχνότητα Rabi, η οποία μας λέει κατά πόσο εμπλέκονται οι στάθμες από το ΗΜ πεδίο, Ω_R , και αποσυντονισμός (detuning), $\Delta = \omega - \Omega$.



Εικόνα 5.1: Σχηματικά, ένα δισταθμικό σύστημα ($\Delta\Sigma$) και τα σχετικά μεγέθη: ιδιοενέργειες των δύο σταθμών, E_2 και E_1 , κυκλική συχνότητα του HM πεδίου, ω , ενεργειακή απόσταση των δύο σταθμών, $\hbar\Omega$, συχνότητα Rabi, η οποία μας λέει κατά πόσο εμπλέκονται οι στάθμες από το HM πεδίο, Ω_R , και αποσυντονισμός, $\Delta = \omega - \Omega$.

5.1 Ημικλασική αντιμετώπιση. HM πεδίο: κλασικά, Δισταθμικό σύστημα: κβαντικά

Ημικλασική αντιμετώπιση σημαίνει ότι ενώ το δισταθμικό σύστημα (π.χ. άτομο, κβαντική τελεία, νανοσωματίδιο, κέντρο χρώματος κ.ά.) αντιμετωπίζεται κβαντικά ως ένα σύστημα ιδιοκαταστάσεων, αντιμετωπίζουμε κλασικά το HM πεδίο. Το HM πεδίο θεωρείται ως μια εξωτερική, χρονικώς μεταβαλλόμενη διαταραχή. Ακόμα, θεωρούμε το HM πεδίο αρκετά πυκνό, ούτως ώστε η απορρόφηση ή η εκπομπή ενός φωτονίου από το υπό μελέτη δισταθμικό σύστημα να μην μπορεί να επηρεάσει αισθητά τα πλάτη του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου. Αν μας ενδιαφέρει η διακύμανση της πυκνότητας του HM πεδίου, θα πρέπει να εγκαταλείψουμε την ημικλασική προσέγγιση. Αυτό θα γίνει στο Κεφάλαιο 8 όταν το σύνολο $\Delta\Sigma$ - HM πεδίο μελετηθεί στην πλήρη κβαντική του μορφή, δηλαδή, στο Κεφάλαιο 8 θα αντιμετωπίσουμε κβαντικά και το HM πεδίο.

5.2 Αδιατάρακτο σύστημα, δηλαδή, χωρίς HM πεδίο

Ας θεωρήσουμε τη Χαμιλτονιανή του ηλεκτρονίου στο αδιατάρακτο δισταθμικό σύστημα,

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_e} + U(\vec{r}) . \quad (5.1)$$

Επί παραδείγματι, στο άτομο του υδρογόνου, η δυναμική ενέργεια (Coulomb),

$$U(\vec{r}) = (-e) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{r} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} , \quad (5.2)$$

όπου e το στοιχειώδες φορτίο. Σε πολυηλεκτρονικό άτομο με ατομικό αριθμό Z η δυναμική ενέργεια (Coulomb),

$$U(\vec{r}) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} . \quad (5.3)$$

Εναλλακτικά, μπορούμε να θεωρήσουμε τη θωρακισμένη (screened) μορφή της δυναμικής ενέργειας,

$$U_S(\vec{r}) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-k_0 r} . \quad (5.4)$$

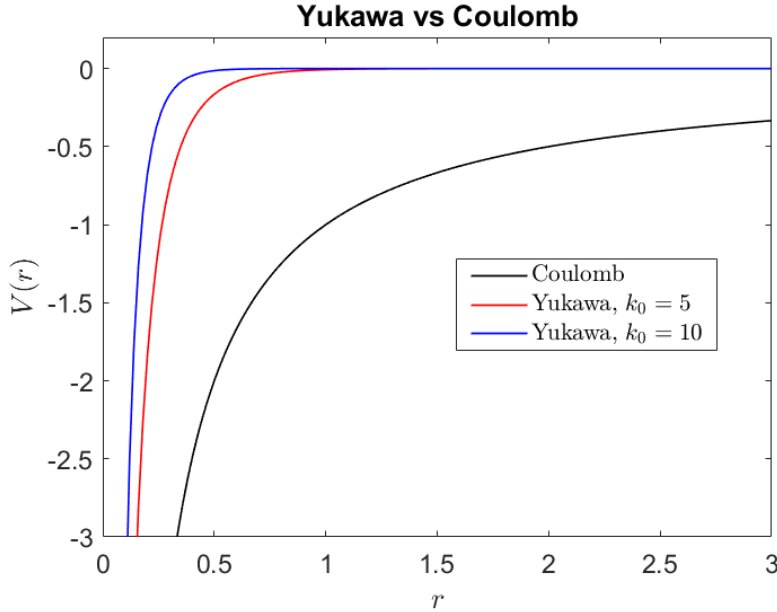
Γενικότερα, το δυναμικό Coulomb έχει τη μορφή

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{Ze}{r} , \quad (5.5)$$

όπου ε είναι η σχετική διηλεκτρική σταθερά, ενώ το θωρακισμένο δυναμικό Coulomb (screened Coulomb potential) έχει τη μορφή

$$V_S(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} \frac{Ze}{r} e^{-k_0 r}, \quad (5.6)$$

όπου k_0 είναι η ισχύς του παράγοντα αποσβέσεως (strength of the damping factor) ή αλλιώς κυματόνυσμα (wave vector) Thomas-Fermi. Το θωρακισμένο δυναμικό $V_S(\vec{r})$ ονομάζεται και Thomas-Fermi δυναμικό ή Yukawa δυναμικό. Τα παραπάνω δυναμικά και δυναμικές ενέργειες εξαρτώνται τελικά από το r και όχι από το \vec{r} , είναι, δηλαδή, κεντρικά δυναμικά και κεντρικές δυναμικές ενέργειες. Λόγω του παράγοντα $e^{-k_0 r}$, το δυναμικό Yukawa πέφτει πιο απότομα από το δυναμικό Coulomb, πράγμα που απεικονίζεται στην Εικόνα 5.2.



Εικόνα 5.2: Σύγκριση των δυναμικών ενεργειών Yukawa και Coulomb, οι οποίες χάρin απλότητας θεωρούνται εδώ ως $V_{\text{Yukawa}}(r) = -\frac{1}{r} e^{-k_0 r}$ και $V_{\text{Coulomb}}(r) = -\frac{1}{r}$ και τα r, k_0 αδιάστατα (θετικά). Η δυναμική ενέργεια Coulomb επιδρά σε μεγαλύτερες αποστάσεις, ενώ η δυναμική ενέργεια Yukawa αποσβένεται γρηγορότερα, λόγω του παράγοντα $e^{-k_0 r}$.

Ας θεωρήσουμε τη χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi(\vec{r}, t), \quad (5.7)$$

όπου $\Psi(\vec{r}, t)$ είναι η κυματοσυνάρτηση του αδιατάρακτου συστήματος. Ακόμα, ας υποθέσουμε χωρισμό μεταβλητών

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) T(t). \quad (5.8)$$

Από τις Εξ. 5.7 και 5.8 προκύπτει

$$\Phi(\vec{r}) i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = T(t) \hat{H}_0 \Phi(\vec{r}) \Rightarrow \frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{\hat{H}_0 \Phi(\vec{r})}{\Phi(\vec{r})}, \quad (5.9)$$

για $T(t) \neq 0 \neq \Phi(\vec{r})$. [Αν $T(t) = 0$ ή $\Phi(\vec{r}) = 0$, η Εξ. 5.7 ικανοποιείται τετριμμένα.] Αλλά, για να ικανοποιείται η τελευταία εξίσωση $\forall t$ και $\forall \vec{r}$, θα πρέπει

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{\hat{H}_0 \Phi(\vec{r})}{\Phi(\vec{r})} = \text{ΣΤΑΘΕΡΑ} := E, \quad (5.10)$$

αφού το ένα κομμάτι είναι συνάρτηση μόνο του t και το άλλο μόνο του \vec{r} . Συνεπώς,

1. Λαμβάνουμε την εξίσωση ιδιοανυσμάτων - ιδιοτιμών $\hat{H}_0\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r})$, άρα E είναι οι ιδιοτιμές της ενέργειας, εν γένει διακριτές, οι οποίες θα χαρακτηρίζονται από κάποιον «συλλογικό κβαντικό αριθμό» k , δηλαδή,

$$\hat{H}_0\Phi_k(\vec{r}) = E_k\Phi_k(\vec{r}). \quad (5.11)$$

2. Λαμβάνουμε $\frac{dT}{T} = \frac{Edt}{i\hbar} \Rightarrow \ln T = -\frac{iEt}{\hbar} + c \Rightarrow T(t) = e^c e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Rightarrow$

$$T(t) = \mathcal{N} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (5.12)$$

Επομένως, συνοψίζοντας

$$\Psi_k(\vec{r}, t) = \mathcal{N} e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \Phi_k(\vec{r}), \quad (5.13)$$

όπου \mathcal{N} είναι μια σταθερά κανονικοποίησης. Όπως είπαμε, οι ιδιοκαταστάσεις του ΑΔΙΑΤΑΡΑΚΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ περιγράφονται από την

$$\hat{H}_0\Phi_k(\vec{r}) = E_k\Phi_k(\vec{r}), \quad (5.14)$$

όπου E_k είναι οι ιδιοενέργειες και $\Phi_k(\vec{r})$ οι ορθοκανονικές ιδιοσυναρτήσεις. Ακόμα, ορίζουμε

$$E_k := \hbar\Omega_k. \quad (5.15)$$

Ας απαιτήσουμε

$$\int dV |\Psi_k(\vec{r}, t)|^2 = 1 \Leftrightarrow |\mathcal{N}|^2 \int dV |\Phi_k(\vec{r})|^2 = 1. \quad (5.16)$$

Για αυτό είπαμε την \mathcal{N} σταθερά κανονικοποίησης και υποθέσαμε τις $\Phi_k(\vec{r})$ ορθοκανονικές. Φυσικά, $dV = d^3r$ είναι ο στοιχειώδης όγκος και k ένας συλλογικός κβαντικός αριθμός. Επί παραδείγματι, στο άτομο του υδρογόνου, $k = \{n, \ell, m_\ell\}$, δηλαδή, μια τριάδα κβαντικών αριθμών. Στο άτομο του υδρογόνου, απουσία μαγνητικού πεδίου, στην ιδιοσυνάρτηση $\Phi_k(r, \theta, \phi)$ αντιστοιχεί η ιδιοενέργεια

$$E_k = \frac{-R_E}{n^2} = E_n, \quad (5.17)$$

όπου

$$R_E = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \approx 13.6 \text{ eV} \quad (5.18)$$

είναι η ενέργεια Rydberg. Περισσότερα για το άτομο του υδρογόνου συζητούνται στο Κεφάλαιο 7.

5.3 Διαταραγμένο σύστημα (δηλαδή εντός ΗΜ πεδίου). Χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών, Διπολική Ροπή, Προσέγγιση Διπόλου

5.3.1 Πώς καταλήγουμε σε Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων

Ας θεωρήσουμε τη Χαμιλτονιανή του ηλεκτρονίου στο διαταραγμένο ΔΣ, δηλαδή, παρουσία ΗΜ πεδίου

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \quad (5.19)$$

και ας υποθέσουμε ότι η δυναμική ενέργεια της διαταραχής, $U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$, είναι **μικρή** σε σχέση με την \hat{H}_0 . Θέλουμε να λύσουμε το πρόβλημα

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(\vec{r}, t) \quad (5.20)$$

με αρχική συνθήκη

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \Phi(\vec{r}) = \gamma \text{γνωστή.} \quad (5.21)$$

Υποθέτουμε ότι μπορούμε να αναπτύξουμε τόσο την $\Psi(\vec{r}, 0) = \Phi(\vec{r})$, όσο και την $\Psi(\vec{r}, t)$ συναρτήσει των ιδιοσυναρτήσεων του αδιατάρακτου προβλήματος $\Phi_k(\vec{r})$. Δηλαδή, γράφουμε

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_k f_k \Phi_k(\vec{r}), \quad (5.22)$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}), \quad (5.23)$$

οπότε,

$$C_k(0) = f_k. \quad (5.24)$$

Από τις Εξισώσεις 5.19, 5.20, 5.23 προκύπτει

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) \right] = [\hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)] \left[\sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) \right]. \quad (5.25)$$

Ας υπολογίσουμε τα δύο μέλη της Εξ. 5.25. Για το αριστερό μέλος, έστω A' , έχουμε:

$$A' = i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) + i\hbar \sum_k C_k(t) (-i\Omega_k) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}).$$

Οπότε, λόγω της Εξ. 5.15 προκύπτει

$$A' = i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) + \sum_k C_k(t) E_k e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}). \quad (5.26)$$

Για το δεξιό μέλος, έστω B' , έχουμε:

$$B' = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} E_k \Phi_k(\vec{r}) + \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}). \quad (5.27)$$

Άρα, απλοποιώντας τον 2ο όρο του A' μέλους με τον 1ο όρο του B' μέλους, προκύπτει

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}). \quad (5.28)$$

Τώρα εκμεταλλευόμαστε το γεγονός ότι οι $\Phi_k(\vec{r})$ είναι ορθοκανονικές. Πολλαπλασιάζουμε την Εξ. (5.28) με $\Phi_{k'}^*(\vec{r})$ και ολοκληρώνουμε στον χώρο, δηλαδή

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-i\Omega_k t} \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}). \quad (5.29)$$

Όμως, αφού οι $\Phi_k(\vec{r})$ είναι ορθοκανονικές,

$$\int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) = \delta_{k'k},$$

και η παραπάνω εξίσωση γίνεται,

$$i\hbar \dot{C}_{k'}(t) e^{-i\Omega_{k'} t} = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} U_{\mathcal{E}k'k}(t), \quad (5.30)$$

όπου

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) = \langle \Phi_{k'} | U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) | \Phi_k \rangle \quad (5.31)$$

είναι τα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής. Γενικότερα, για οιοδήποτε φυσικό μέγεθος, M , ορίζουμε τα στοιχεία πίνακά του ως

$$M_{k'k} := \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \hat{M}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \Phi_k(\vec{r}) = \langle \Phi_{k'} | \hat{M} | \Phi_k \rangle \quad (5.32)$$

Περαιτέρω στο Παράρτημα B.6, όπου εξηγούνται αναλυτικά οι δύο φορμαλισμοί.

Εν τέλει, λοιπόν, καταλήγουμε στην

$$\dot{C}_{k'}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k C_k(t) e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k)t} U_{\mathcal{E}k'k}(t) \quad (5.33)$$

Δηλαδή, καταλήγουμε σε ένα Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 1^{ης} Τάξεως. Αν λύσουμε το Σύστημα 5.33, ουσιαστικά λύνουμε το πρόβλημα 5.19, 5.20.

Η άνωθεν διαδικασία συνιστά τη λεγόμενη χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών. Θα την εφαρμόσουμε σε δισταθμικό σύστημα υπό την επίδραση μονοχρωματικού και πολωμένου ηλεκτρικού κύματος, δηλαδή η διαταραχή μας θα έχει αυτά τα χαρακτηριστικά. Στη συνέχεια, θα την εφαρμόσουμε και σε τρισταθμικό σύστημα.

Να σημειωθεί ότι επειδή $\int dV |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = 1 \Leftrightarrow \int dV \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = 1$,

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \int dV \sum_{k'} C_{k'}^*(t) e^{i\Omega_{k'}t} \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) = 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sum_{k'} \sum_k C_{k'}^*(t) C_k(t) e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k)t} \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) = 1 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\sum_k |C_k(t)|^2 = 1} \Rightarrow \sum_k |C_k(0)|^2 = 1 \Rightarrow \boxed{\sum_k |f_k|^2 = 1} \quad (5.34)$$

5.3.2 Διπολικές Ροπές

Έστω ηλεκτρικό δίπολο ΘΑ (Θ: θετικό, Α: αρνητικό) με φορτίο $q > 0$ στο Θ και $-q < 0$ στο Α. Η ηλεκτρική διπολική ροπή ορίζεται ως

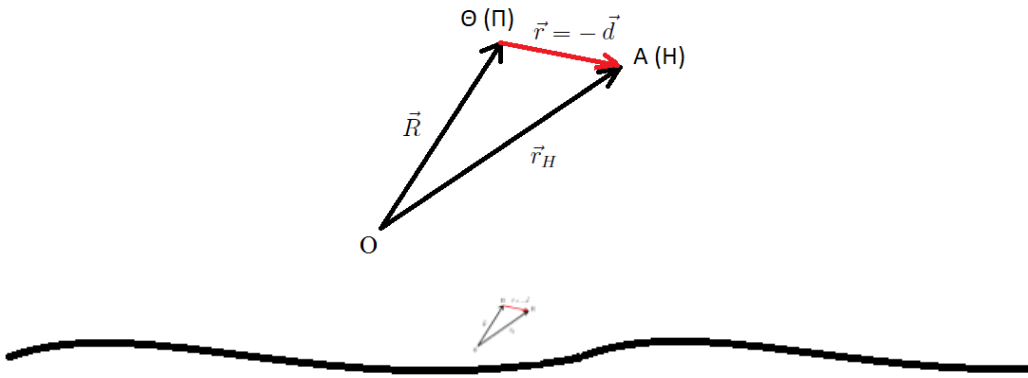
$$\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d}, \quad (5.35)$$

όπου $\vec{d} = A\vec{\Theta}$. Στην Εικόνα 5.3 θεωρούμε το άτομο του υδρογόνου, οπότε το ηλεκτρικό φορτίο στον πυρήνα $\Pi \equiv \Theta$ είναι $q = e > 0$, ενώ στη θέση του ηλεκτρονίου $H \equiv A$ είναι $-q = -e < 0$. Επίσης, $\vec{d} = A\vec{\Theta} = H\vec{\Pi}$. Αν Ο είναι η αρχή του συστήματος συντεταγμένων, ονομάζουμε \vec{r}_H το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς Ο, \vec{R} το διάνυσμα θέσεως του πυρήνα ως προς Ο, ενώ $\vec{r} = \vec{\Pi H} = \vec{\Theta A}$ είναι το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα. Άρα, $\vec{d} = -\vec{r}$, οπότε,

$$\vec{\mathcal{P}} = q\vec{d} = e(-\vec{r}) = -e\vec{r}. \quad (5.36)$$

Περιοριζόμαστε τώρα σε δυνάμεις που προέρχονται από το ηλεκτρικό πεδίο οδεύοντος μονοχρωματικού και πολωμένου ΗΜ κύματος

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_a \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r}_H - \omega t + \phi)]$$



Εικόνα 5.3: (Ανω) Η αρχή των αξόνων O , το θετικό φορτίο Θ , το οποίο μπορεί να αντιπροσωπεύει ο πυρήνας Π ενός ατόμου, το αρνητικό φορτίο A , το οποίο μπορεί να αντιπροσωπεύει ένα ηλεκτρόνιο H κινούμενο γύρω από τον πυρήνα. Ορίζουμε $\vec{d} := \vec{A}\Theta$. Συνήθως, όταν μελετάμε ένα άτομο, θεωρούμε το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα $\vec{r} = \vec{O}H = -\vec{d}$. Η ηλεκτρική διπολική ροπή ορίζεται ως $\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d}$, πράγμα που μπορούμε επομένως να γράψουμε $\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r}$, αν αναφερόμαστε π.χ. στο άτομο του υδρογόνου. Για αυτήν την τελευταία περίπτωση σημειώνονται ακόμα τα διανύσματα $\vec{O}\Pi := \vec{R}$ και $\vec{O}H := \vec{r}_H$. (Κάτω) Πολύ σχηματικά: Στις παρούσες συνθήκες, το μήκος κύματος είναι πολύ μεγαλύτερο από τη χωρική έκταση του συστήματος, κάτι σαν $\lambda \gg \alpha$, οπότε το ηλεκτρικό πεδίο είναι πρακτικά ομογενές. Επί παραδείγματι, για οπτικά μήκη κύματος, $\lambda \sim 500 \text{ nm}$, και για το άτομο του υδρογόνου $\alpha \sim \alpha_0$ (ακτίνα Bohr), οπότε $\lambda/\alpha_0 \sim 10^4$. Το τρίγωνο $O\Theta A$ ($O\Pi H$), το οποίο απεικονίζεται στην επάνω εικόνα, απεικονίζεται στην κάτω εικόνα μικρότερο, αλλά στην πραγματικότητα είναι πολύ ($\sim 10^4$ φορές) μικρότερο.

όπου το $\vec{\mathcal{E}}_a$ καθορίζει την πόλωση του κύματος και $\omega = 2\pi\nu$ είναι η κυκλική συχνότητα (ν είναι η συχνότητα). \vec{k} είναι το κυματόνισμα με μέτρο $k = 2\pi/\lambda$, όπου λ είναι το μήκος κύματος. ϕ είναι κάποια αυθαίρετη φάση. Όμως θα θεωρήσουμε ότι η θέση του ηλεκτρονίου \vec{r}_H δεν διαφέρει σημαντικά από τη θέση του πυρήνα \vec{R} για την κλίμακα μεγέθους που μας αφορά εδώ. Δηλαδή, $\vec{r}_H \approx \vec{R}$. Ο λόγος που το κάνουμε αυτό είναι ότι θεωρούμε οπτικά μήκη κύματος. Αν π.χ. $\lambda = 500 \text{ nm}$, τότε, δεδομένου ότι το μέγεθος της «τροχιάς» του ηλεκτρονίου είναι της τάξεως της ακτίνας Bohr, $a_0 \approx 0.529 \text{ \AA} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \approx 0.5 \cdot 10^{-1} \text{ nm}$, προκύπτει

$$\frac{\lambda}{a_0} = \frac{500 \text{ nm}}{0.5 \cdot 10^{-1} \text{ nm}} = \frac{5 \cdot 10^2}{5 \cdot 10^{-2}} = 10^4 \Rightarrow \lambda \gg a_0 \sim |\vec{r}|.$$

Δηλαδή, το ηλεκτρικό πεδίο είναι πρακτικά ομογενές. Δεν έχει πρακτικά χωρική εξάρτηση. Συνεπώς,

$$\vec{\mathcal{E}} \approx \vec{\mathcal{E}}_a \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t + \phi)] = \underbrace{\vec{\mathcal{E}}_0}_{\vec{\mathcal{E}}_0} \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{R} + \phi)] \exp(-i\omega t),$$

οπότε,

$$\boxed{\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp(-i\omega t) = \vec{\mathcal{E}}(t)} \quad (5.37)$$

Δηλαδή, συμπεριλάβαμε το $\exp[i(\vec{k} \cdot \vec{R} + \phi)]$ στο πλάτος θεωρώντας ότι το ηλεκτρικό πεδίο έχει πρακτικά ΜΟΝΟ ΧΡΟΝΙΚΗ εξάρτηση.

Περαιτέρω, ας χρησιμοποιήσουμε το σύμβολο V για το δυναμικό και το σύμβολο U για τη δυναμική ενέργεια. Μπορούμε να γράψουμε

$$\left. \begin{aligned} \vec{\mathcal{E}} &= -\vec{\nabla} V \\ dV &= \frac{\partial V}{\partial x} dx + \frac{\partial V}{\partial y} dy + \frac{\partial V}{\partial z} dz = \vec{\nabla} V \cdot d\vec{r} \end{aligned} \right\} \Rightarrow dV = -\vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{r} \Rightarrow$$

$$V(\vec{r}, t) - V(\vec{\theta}, t) = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} \quad \text{θέτουμε } 0$$

Εννοείται ότι για να γίνει αυτό κατά την ολοκλήρωση υποθέσαμε ότι το $\vec{\mathcal{E}}$ είναι ανεξάρτητο της θέσεως. Αν πολλαπλασιάσουμε με $(-e)$ βρίσκουμε τη δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου λόγω της διαταραχής

$$U(\vec{r}, t) - U(\vec{\theta}, t) = e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}, \quad \text{θέσαμε } 0$$

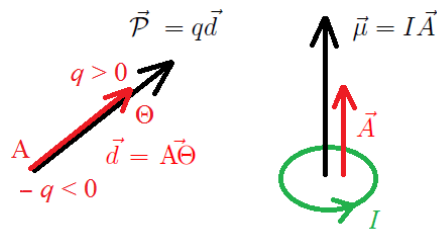
οπότε, εκ της Εξ. 5.36 προκύπτει

$$\boxed{U(\vec{r}, t) = e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t)} \quad (5.38)$$

Το σύνολο των άνωθι υποθέσεων, οι οποίες οδήγησαν στη δυναμική ενέργεια διαταραχής της Εξ. 5.38, ονομάζεται **προσέγγιση διπόλου** (dipole approximation).

Ακολουθεί υπενθύμιση κάποιων αναλογιών μεταξύ ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου σχετικά με την ηλεκτρική διπολική ροπή (electric dipole moment) και τη μαγνητική διπολική ροπή (magnetic dipole moment), την ηλεκτρική και μαγνητική δυναμική ενέργεια διπόλου εντός πεδίου, καθώς και τη (μηχανική) ροπή (torque). \vec{L} είναι η τροχιακή στροφορμή, \vec{S} η ιδιοστροφορμή και g ένας αδιάστατος παράγων.

Υπενθύμιση Αναλογιών



Εικόνα 5.4: Ηλεκτρικό και μαγνητικό δίπολο.

$\vec{\mathcal{E}}$ (Ηλεκτρικό Πεδίο)	\vec{B} (Μαγνητικό Πεδίο)
$\vec{\mathcal{P}} = q\vec{d}$ ηλεκτρική διπολική ροπή	$\vec{\mu} = IA\vec{A}$ μαγνητική διπολική ροπή
	[ή $\vec{\mu} = \frac{q}{2m}(\vec{L} + g\vec{S})$ όπου m η μάζα του σωματιδίου]
$U_{\mathcal{E}} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}}$ δυναμική ενέργεια	$U_B = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ δυναμική ενέργεια
$\vec{\tau} = \vec{\mathcal{P}} \times \vec{\mathcal{E}}$ (μηχανική) ροπή	$\vec{\tau} = \vec{\mu} \times \vec{B}$ (μηχανική) ροπή
$[\vec{\mathcal{P}}] = \text{Cm}$	$[\vec{\mu}] = \text{Am}^2$
$[U_{\mathcal{E}}] = \text{Cm} \frac{\text{N}}{\text{C}} = \text{Nm} = \text{J}$	$[U_B] = \text{Am}^2 \frac{\text{N}}{\text{Am}} = \text{Nm} = \text{J}$
$[\vec{\tau}] = \text{Cm} \frac{\text{N}}{\text{C}} = \text{Nm}$	$[\vec{\tau}] = \text{Am}^2 \frac{\text{N}}{\text{Am}} = \text{Nm}$

Σύμφωνα με την Εικόνα 5.3

$$\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d} = e(-\vec{r}) \Rightarrow \boxed{\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r}} \quad (5.39)$$

$$\vec{\mathcal{P}} \cdot \hat{z} = (-e)\vec{r} \cdot \hat{z} \Rightarrow \boxed{\mathcal{P}_z = -ez} \quad (5.40)$$

Δείξαμε ότι για οπτικά μήκη κύματος μπορούμε να γράψουμε (Εξ. 5.37)

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp(-i\omega t) = \vec{\mathcal{E}}(t)$$

Θεωρώντας ότι η πόλωση είναι στην κατεύθυνση \hat{z} και παίρνοντας το πραγματικό μέρος της Εξ. 5.37 έχουμε

$$\vec{\mathcal{E}}(t) = \mathcal{E}_0 \hat{z} \cos \omega t$$

Άρα,

$$U_{\mathcal{E}} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}} = -(-e)\vec{r} \cdot \mathcal{E}_0 \hat{z} \cos \omega t \Rightarrow$$

$$U_{\mathcal{E}} = e\mathcal{E}_0 z \cos \omega t \quad (5.41)$$

5.3.3 Στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής

Ας εστιάσουμε τώρα στα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) = \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}) e\mathcal{E}_0 \cos \omega t \Rightarrow$$

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos \omega t \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}) \quad (5.42)$$

Ας ονομάσουμε και τα στοιχεία πίνακα της συντεταγμένης z

$$z_{k'k} := \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}), \quad (5.43)$$

τα οποία έχουν τις ιδιότητες

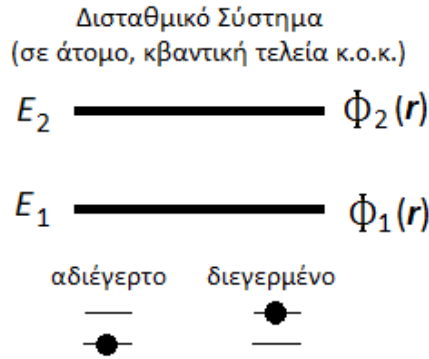
$$\begin{aligned} z_{k'k}^* &= z_{kk'} \\ z_{kk} &= \int dV \underbrace{|\Phi_k(\vec{r})|^2}_{\text{άρτια}} \underbrace{z}_{\text{περιττή}} = 0. \end{aligned} \quad (5.44)$$

Δηλαδή, τα μη διαγώνια στοιχεία είναι μιγαδικά συζυγή (για πραγματικές ιδιοσυναρτήσεις του αδιατάρακτου προβλήματος είναι συμμετρικά), ενώ τα διαγώνια στοιχεία μηδενίζονται. Η δεύτερη ιδιότητα οφείλεται στο ότι αν η δυναμική ενέργεια του αδιατάρακτου προβλήματος είναι άρτια, τότε οι ιδιοσυναρτήσεις του μπορούν να εκλεγούν άρτιες ή περιττές (σε συστήματα όπως τα άτομα, τα συμμετρικά κβαντικά φρέατα και ούτω καθ' εξής). Οπότε, το τετράγωνο του μέτρου τους είναι άρτια συνάρτηση και άρα, η ολοκληρωτέα ποσότητα, $|\Phi_k(\vec{r})|^2 z$ είναι περιττή και το ολοκλήρωμα γίνεται σε όλο τον χώρο.

Εν τέλει, τα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής μπορούν να γραφούν ως

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{k'k} \quad (5.45)$$

Στην Εικόνα 5.5 παριστάνεται ένα δισταθμικό σύστημα. Αυτό μπορεί να αποτελείται από τις κατώτερες δύο στάθμες ενός ατόμου ή μιας κβαντικής τελείας και ούτω καθ' εξής. Συνήθως διαλέγουμε τα φωτόνια του ΗΜ πεδίου να ταιριάζουν αρκετά ενεργειακά με την ενεργειακή διαφορά των δύο σταθμών, δηλαδή $\hbar\omega = \hbar\nu \sim E_2 - E_1$, χωρίς να είναι υποχρεωτικό να ταυτίζονται ακριβώς. Αυτή η υπόθεση θα μας χρειαστεί αργότερα στη Rotating Wave Approximation (Προσέγγιση Περιστροφόμενου Κύματος). Στο δισταθμικό σύστημα ($k =$



Εικόνα 5.5: Δισταθμικό σύστημα. Όταν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην κάτω στάθμη E_1 το σύστημα χαρακτηρίζεται αδιέγερτο, ενώ όταν βρίσκεται στην άνω στάθμη E_2 διεγερμένο.

1 ή $k = 2$), μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned}
 U_{\mathcal{E}12}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{12} & U_{\mathcal{E}12}(t) &= -\mathcal{P}_{z12} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\
 U_{\mathcal{E}21}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{21} & \text{ή} & U_{\mathcal{E}21}(t) &= -\mathcal{P}_{z21} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\
 U_{\mathcal{E}kk}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{kk} = 0 & & U_{\mathcal{E}kk}(t) &= 0.
 \end{aligned}$$

Η 2η στήλη εξάγεται από την 1η επειδή $\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r} \Rightarrow \mathcal{P}_z = -ez$, οπότε τα αντίστοιχα στοιχεία πίνακα είναι $\mathcal{P}_{zk'k} = -ez_{k'k}$. Άρα, η Εξ. 5.45 γίνεται

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = -\mathcal{P}_{zk'k} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \quad (5.46)$$

Εάν οι ιδιοσυναρτήσεις μας είναι πραγματικές, τότε στο δισταθμικό μας σύστημα

$$\mathcal{P}_{z12} = -ez_{12} = -ez_{21} = \mathcal{P}_{z21} := \mathcal{P}_z := \mathcal{P} \quad (5.47)$$

και αυτό το \mathcal{P} χρησιμοποιούμε στην επόμενη Ενότητα. Οπότε,

$$\begin{aligned}
 U_{\mathcal{E}12}(t) &= -\mathcal{P} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\
 U_{\mathcal{E}21}(t) &= -\mathcal{P} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\
 U_{\mathcal{E}kk}(t) &= 0, \quad k = 1 \text{ ή } k = 2.
 \end{aligned}$$

Οπότε, η Εξ. 5.46 γίνεται

$$\begin{aligned}
 U_{\mathcal{E}k'k}(t) &= -\mathcal{P} \mathcal{E}_0 \cos \omega t & k \neq k' \\
 U_{\mathcal{E}k'k}(t) &= 0 & k = k'
 \end{aligned} \quad (5.48)$$

δηλαδή το μέγεθος της διαταραχής είναι ανάλογο του $\mathcal{P}\mathcal{E}_0$, πράγμα που εκφράζεται από τη **συχνότητα Rabi** $\Omega_R := \frac{\mathcal{P}\mathcal{E}_0}{\hbar}$. Ο αποσυντονισμός (detuning) (δείτε την Εξ. 5.54) και η συχνότητα Rabi (δείτε την Εξ. 5.55) καθορίζουν το πλάτος και την περίοδο των ταλαντώσεων του δισταθμικού συστήματος, όπως θα φανεί παρακάτω.

5.4 Εξισώσεις περιγράφουσες τη χρονική εξέλιξη δισταθμικού συστήματος. Συχνότητα Rabi. Προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (RWA, Rotating Wave Approximation)

Είχαμε καταλήξει σε ένα Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 1^{ης} Τάξεως (Εξ. 5.33), το οποίο αν λύσουμε, ουσιαστικά λύνουμε το πρόβλημα (5.19), (5.20). Η Εξ. 5.33 ήταν

$$\dot{C}_{k'}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_k C_k(t) e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k)t} U_{\mathcal{E}k'k}(t)$$

Τώρα θα τη λύσουμε σε ένα δισταθμικό σύστημα. Ορίζουμε

$$\Omega := \Omega_2 - \Omega_1 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \quad (5.49)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. 5.15. Θα χρησιμοποιήσουμε και την ταυτότητα $\cos \omega t = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}$.

$$\begin{aligned} \boxed{k' = 1} \quad \dot{C}_1(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_1(t) e^{i(\Omega_1 - \Omega_1)t} \overset{1}{U_{\mathcal{E}11}(t)} \overset{0}{-} - \frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{i(\Omega_1 - \Omega_2)t} U_{\mathcal{E}12}(t) \\ \dot{C}_1(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{-i\Omega t} (-\mathcal{E}_0) \mathcal{P} \cos \omega t = \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar} C_2(t) e^{-i\Omega t} \left\{ \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right\} \\ \boxed{\dot{C}_1(t)} &= \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{i(\omega - \Omega)t} + e^{-i(\omega + \Omega)t} \right] C_2(t) \end{aligned} \quad (5.50)$$

$$\begin{aligned} \boxed{k' = 2} \quad \dot{C}_2(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_1(t) e^{i(\Omega_2 - \Omega_1)t} U_{\mathcal{E}21}(t) - \frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{i(\Omega_2 - \Omega_2)t} \overset{1}{U_{\mathcal{E}22}(t)} \overset{0}{-} \\ \dot{C}_2(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_1(t) e^{i\Omega t} (-\mathcal{E}_0) \mathcal{P} \cos \omega t = \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar} C_1(t) e^{i\Omega t} \left\{ \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right\} \\ \boxed{\dot{C}_2(t)} &= \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{i(\omega + \Omega)t} + e^{-i(\omega - \Omega)t} \right] C_1(t) \end{aligned} \quad (5.51)$$

Δηλαδή, έχουμε τις ακόλουθες δύο εξισώσεις, οι οποίες περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη του δισταθμικού συστήματος

$$\begin{aligned} \boxed{\dot{C}_1(t)} &= C_2(t) \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{i(\omega - \Omega)t} + \overset{(0 \text{ RWA})}{e^{-i(\omega + \Omega)t}} \right] \\ \boxed{\dot{C}_2(t)} &= C_1(t) \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[\overset{(0 \text{ RWA})}{e^{i(\omega + \Omega)t}} + e^{-i(\omega - \Omega)t} \right] \end{aligned} \quad (5.52)$$

Υπό την προϋπόθεση ότι η κυκλική συχνότητα του ΗΜ πεδίου ταιριάζει αρκετά ενεργειακά με την ενεργειακή διαφορά των δύο σταθμών, χωρίς να είναι υποχρεωτικό να ταυτίζονται ακριβώς, δηλαδή $\hbar\omega \sim E_2 - E_1$ συνεπάγεται ότι $\omega \sim \Omega_2 - \Omega_1 = \Omega$. Επομένως, οι όροι με $(\omega - \Omega)$ μεταβάλλονται αργά, ενώ οι όροι με $(\omega + \Omega)$ μεταβάλλονται γρήγορα. Άρα, σε οιαδήποτε αξιοσημείωτη χρονική κλίμακα, αυτές οι γρήγορες ταλαντώσεις θα έχουν κατά μέσο όρο μηδενική ή ως πούμε περίπου μηδενική επίδραση στο αποτέλεσμα. Η προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (ΠΠΚ) [rotating wave approximation (RWA)] είναι ο ισχυρισμός ότι μπορούμε να αγνοήσουμε αυτούς τους γρήγορους όρους. Μια σύγκριση της ΠΠΚ με την πλήρη αριθμητική λύση, χωρίς

δηλαδή να αγνοήσουμε τους γρήγορους όρους, φαίνεται στην Εικόνα 1.7. Επίσης, στο Κεφάλαιο 6, μαζί με άλλες προσεγγιστικές λύσεις παρουσιάζεται η πλήρης αριθμητική λύση σε διάφορες περιπτώσεις. Συνοπτικώς, μετά την RWA οι Εξισώσεις 5.52 γίνονται

$$\begin{aligned} \dot{C}_1(t) &= C_2(t) \frac{i}{2} \underbrace{\frac{\Omega_R \mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar}} e^{i \underbrace{(\omega - \Omega)}_{\Delta} t} \\ \dot{C}_2(t) &= C_1(t) \frac{i}{2} \underbrace{\frac{\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar}}_{\Omega_R} e^{-i \underbrace{(\omega - \Omega)}_{\Delta} t} \end{aligned} \quad (5.53)$$

Ορίσαμε τον αποσυντονισμό (detuning) ως

$$\Delta := \omega - \Omega \quad (5.54)$$

και την (κυκλική) συχνότητα Rabi¹ ως

$$\Omega_R := \frac{\mathcal{P} \mathcal{E}_0}{\hbar} \quad (5.55)$$

Η (κυκλική) συχνότητα Rabi ορίζεται πάντοτε θετική, δηλαδή, στην προηγούμενη εξίσωση, υποτίθεται πως $\mathcal{P} > 0$. Αν $\mathcal{P} < 0$, τότε η (κυκλική) συχνότητα Rabi ορίζεται ως $\Omega_R := \frac{-\mathcal{P} \mathcal{E}_0}{\hbar}$, χωρίς αυτό να επηρεάζει την παρακάτω ανάλυση. Από τον ορισμό της Ω_R , φαίνεται πως αυτή εκφράζει το πόσο ισχυρό είναι το πεδίο, δηλαδή το «πλάτος» του πεδίου (μέσω του \mathcal{E}_0), αλλά και το κατά πόσο το πεδίο εμπλέκει τις δύο στάθμες (μέσω του \mathcal{P}). Πιο συνοπτικά οι Εξ. 5.53 γράφονται ως

$$\begin{aligned} \dot{C}_1(t) &= C_2(t) \frac{i\Omega_R}{2} e^{i\Delta t} \\ \dot{C}_2(t) &= C_1(t) \frac{i\Omega_R}{2} e^{-i\Delta t} \end{aligned} \quad (5.56)$$

ή σε μορφή πινάκων ως

$$\begin{bmatrix} \dot{C}_1(t) \\ \dot{C}_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{i\Omega_R}{2} e^{i\Delta t} \\ \frac{i\Omega_R}{2} e^{-i\Delta t} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} \quad (5.57)$$

Παρατηρούμε πως ο συνδέων τα $\dot{C}_i(t)$ με τα $C_i(t)$ πίνακας έχει χρονικώς εξαρτημένα στοιχεία.

Το σύστημα των εξισώσεων 5.53 ή 5.56 ή 5.57 μπορεί να λυθεί με διάφορους τρόπους, όπως (α') ο συνδυασμός ενός καταλλήλου μετασχηματισμού με τη μέθοδο ιδιοανυσμάτων - ιδιοτιμών ή (β') με τη μέθοδο της επιπλέον παραγωγίσεως και των χαρακτηριστικών πολυωνύμων. Η μέθοδος (α') ακολουθείται αμέσως παρακάτω, ενώ η μέθοδος (β') ακολουθείται στην Ενότητα 5.6. Τέλος, (γ') η απλοϊκή επαναληπτική μέθοδος Newton εξηγείται στην Ενότητα 5.5.

Εν συνεχεία, θα κάνουμε έναν μετασχηματισμό για να πάρουμε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων με χρονικά ανεξάρτητους συντελεστές. Δηλαδή,

$$\begin{aligned} C_1(t) &= \mathbf{C}_1(t) e^{\frac{i\Delta t}{2}}, \\ C_2(t) &= \mathbf{C}_2(t) e^{-\frac{i\Delta t}{2}}, \end{aligned} \quad (5.58)$$

¹Από τον Isidor Isaak Rabi (1898-1988).

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{C}}_1(t) &= \dot{\mathbf{C}}_1(t) e^{\frac{i\Delta t}{2}} + \mathbf{C}_1(t) \left(\frac{i\Delta}{2}\right) e^{\frac{i\Delta t}{2}}, \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) &= \dot{\mathbf{C}}_2(t) e^{-\frac{i\Delta t}{2}} + \mathbf{C}_2(t) \left(\frac{-i\Delta}{2}\right) e^{-\frac{i\Delta t}{2}},\end{aligned}$$

οπότε η Εξ. 5.53 γίνεται

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{C}}_1(t) e^{\frac{i\Delta t}{2}} + \mathbf{C}_1(t) \left(\frac{i\Delta}{2}\right) e^{\frac{i\Delta t}{2}} = \mathbf{C}_2(t) e^{-\frac{i\Delta t}{2}} \frac{i\Omega_R}{2} e^{i\Delta t}, \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) e^{-\frac{i\Delta t}{2}} + \mathbf{C}_2(t) \left(\frac{-i\Delta}{2}\right) e^{-\frac{i\Delta t}{2}} = \mathbf{C}_1(t) e^{\frac{i\Delta t}{2}} \frac{i\Omega_R}{2} e^{-i\Delta t}. \end{cases}$$

Δηλαδή, έχοντας ορίσει $\Delta := \omega - \Omega$ (Εξ. 5.54) και $\Omega_R := \frac{\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar}$ (Εξ. 5.55), παίρνουμε

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{C}}_1(t) = -\frac{i\Delta}{2} \mathbf{C}_1(t) + \frac{i\Omega_R}{2} \mathbf{C}_2(t), \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) = +\frac{i\Omega_R}{2} \mathbf{C}_1(t) + \frac{i\Delta}{2} \mathbf{C}_2(t), \end{cases}$$

οπότε καταλήγουμε σε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων με χρονικώς ανεξάρτητους συντελεστές

$$\boxed{\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{C}}_1(t) \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{i\Delta}{2} & \frac{i\Omega_R}{2} \\ \frac{i\Omega_R}{2} & \frac{i\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{C}_1(t) \\ \mathbf{C}_2(t) \end{bmatrix}} \quad (5.59)$$

Το άνω δεξιά στοιχείο μήτρας θα ήταν $\frac{i\Omega_R^*}{2}$, εάν οι ιδιοσυναρτήσεις μας δεν ήταν πραγματικές, οπότε τότε π.χ. θα ορίζαμε $\mathcal{P}_{z21} = -ez_{21} := \mathcal{P}$, οπότε $\mathcal{P}_{z12} = -ez_{12} = \mathcal{P}^*_{z21} = \mathcal{P}^*$.

Για να λύσουμε το σύστημα της Εξ. 5.59 εισάγουμε το διάνυσμα

$$\vec{x}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_1(t) \\ \mathbf{C}_2(t) \end{bmatrix} \quad (5.60)$$

οπότε,

$$\dot{\vec{x}}(t) = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{C}}_1(t) \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) \end{bmatrix} \quad (5.61)$$

και ονομάζοντας

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{i\Delta}{2} & \frac{i\Omega_R}{2} \\ \frac{i\Omega_R}{2} & \frac{i\Delta}{2} \end{bmatrix} := -i\mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix} \quad (5.62)$$

το σύστημα της Εξ. 5.59 γράφεται

$$\boxed{\dot{\vec{x}}(t) = \tilde{\mathbf{A}} \vec{x}(t)} \quad (5.63)$$

Ας δοκιμάσουμε λύσεις της μορφής

$$\boxed{\vec{x}(t) = \vec{v} e^{\tilde{\mathbf{A}}t}} \quad (5.64)$$

δηλαδή, βάζοντας τον διανυσματικό χαρακτήρα στο \vec{v} και τη χρονική εξάρτηση στο εκθετικό. Τότε,

$$\vec{v} \tilde{\lambda} e^{\tilde{\lambda} t} = \tilde{A} \vec{v} e^{\tilde{\lambda} t} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \tilde{A} \vec{v} = \tilde{\lambda} \vec{v} \\ \tilde{\lambda} := -i\lambda \end{array} \right\} \Rightarrow -iA\vec{v} = -i\lambda\vec{v} \Rightarrow A\vec{v} = \lambda\vec{v}.$$

Δηλαδή, ουσιαστικά το όλο θέμα ανάγεται στο πρόβλημα ιδιοανυσμάτων - ιδιοτιμών

$$\boxed{A\vec{v} = \lambda\vec{v}} \quad (5.65)$$

από το οποίο θα προκύψουν τα ιδιοανύσματα \vec{v}_1, \vec{v}_2 , τα οποία αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές λ_1, λ_2 . Κάθε ένα από τα $\vec{v}_k e^{-i\lambda_k t}$ αποτελεί μερική λύση. Έχοντας ελέγξει ότι τα ιδιοανύσματα \vec{v}_1, \vec{v}_2 , τα οποία αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές λ_1, λ_2 είναι γραμμικώς ανεξάρτητα, η γενική λύση του προβλήματός μας είναι

$$\boxed{\vec{x}(t) = \sum_{k=1}^2 c_k \vec{v}_k e^{-i\lambda_k t}} \quad (5.66)$$

Από τις αρχικές συνθήκες βρίσκουμε τα c_k . Πρώτα πρώτα, όμως, ας βρούμε τις ιδιοτιμές.

$$A\vec{v} = \lambda\vec{v} \Rightarrow A\vec{v} - \lambda I\vec{v} = 0 \Rightarrow (A - \lambda I)\vec{v} = 0,$$

όπου I ο μοναδιαίος 2×2 πίνακας. Οπότε,

$$\det(A - \lambda I) = 0 \Rightarrow \begin{vmatrix} \frac{\Delta}{2} - \lambda & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Άρα, στη γενική περίπτωση,

$$\lambda_{2,1} = \pm \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}, \quad (5.67)$$

ενώ στην περίπτωση συντονισμού ($\Delta = 0$)

$$\lambda_{2,1} = \pm \frac{\Omega_R}{2}. \quad (5.68)$$

Στις επόμενες σελίδες θα βρούμε και τα ιδιοανύσματα, καθώς και τη λύση του συστήματος 5.59, χρησιμοποιώντας διάφορες αρχικές συνθήκες.

• **ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$**

Αν $\Delta = 0$, τότε, από την 5.62 προκύπτει $A = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \end{bmatrix}$ και οι ιδιοτιμές είναι $\lambda_{2,1} = \pm \frac{\Omega_R}{2}$. Ας βρούμε τα ιδιοανύσματα.

Για $\lambda_1 = -\frac{\Omega_R}{2}$

$$\left[\begin{array}{cc} 0 & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \end{array} \right] \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} = -\frac{\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} -\frac{\Omega_R}{2} v_{21} = -\frac{\Omega_R}{2} v_{11} \\ -\frac{\Omega_R}{2} v_{11} = -\frac{\Omega_R}{2} v_{21} \end{array} \right\} \Rightarrow v_{21} = v_{11}.$$

Οπότε, π.χ. μπορούμε να εκλέξουμε το κανονικοποιημένο $\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$.

$$\text{Για } \lambda_2 = \frac{\Omega_R}{2}$$

$$\left[\begin{array}{cc} 0 & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \end{array} \right] \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} = \frac{\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} -\frac{\Omega_R}{2} v_{22} = \frac{\Omega_R}{2} v_{12} \\ -\frac{\Omega_R}{2} v_{12} = \frac{\Omega_R}{2} v_{22} \end{array} \right\} \Rightarrow v_{22} = -v_{12}.$$

Οπότε, π.χ. μπορούμε να εκλέξουμε το κανονικοποιημένο $\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$.

Άρα,

$$\vec{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = c_1 \vec{v}_1 e^{-i\lambda_1 t} + c_2 \vec{v}_2 e^{-i\lambda_2 t} = c_1 \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 1 \end{bmatrix} e^{i\frac{\Omega_R}{2} t} + c_2 \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -1 \end{bmatrix} e^{-i\frac{\Omega_R}{2} t}.$$

Ας θυμηθούμε τώρα τον μετασχηματισμό 5.58. Οπότε,

$$\begin{bmatrix} C_1(t) e^{-i\frac{\Delta}{2} t} \\ C_2(t) e^{i\frac{\Delta}{2} t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{c_1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2} t} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2} t} \\ \frac{c_1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2} t} - \frac{c_2}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2} t} \end{bmatrix}.$$

Όμως υποθέσαμε $\Delta = 0$. Επομένως,

$$\begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{c_1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2} t} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2} t} \\ \frac{c_1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2} t} - \frac{c_2}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2} t} \end{bmatrix}. \quad (5.69)$$

✓ Έστωσαν αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 1$ και $C_2(0) = 0$. Άρα, η Εξ. 5.69 δίνει

$$\left. \begin{array}{l} 1 = \frac{c_1}{\sqrt{2}} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 + c_2 = \sqrt{2} \\ 0 = \frac{c_1}{\sqrt{2}} - \frac{c_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 = c_2 \end{array} \right\} \Rightarrow c_1 = c_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}.$$

Οπότε, η Εξ. 5.69 γίνεται

$$\begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} e^{i\frac{\Omega_R}{2} t} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{\Omega_R}{2} t} \\ \frac{1}{2} e^{i\frac{\Omega_R}{2} t} - \frac{1}{2} e^{-i\frac{\Omega_R}{2} t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2} t\right) \\ i \sin\left(\frac{\Omega_R}{2} t\right) \end{bmatrix}.$$

Άρα,

$$\begin{aligned} C_1(t) &= \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \\ C_2(t) &= i \sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \end{aligned} \quad (5.70)$$

και συνεπώς,

$$\begin{aligned} |C_1(t)|^2 &= \cos^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(\Omega_R t) \\ |C_2(t)|^2 &= \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(\Omega_R t) \end{aligned} \quad (5.71)$$

επειδή $\cos^2 x = \frac{1+\cos 2x}{2}$ και $\sin^2 x = \frac{1-\cos 2x}{2}$. Φυσικά, $|C_k(t)|^2 := P_k(t)$ είναι η πιθανότητα να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο στη στάθμη k τη χρονική στιγμή t . Δηλαδή, παρατηρούμε ταλαντώσεις της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες. Οι ταλαντώσεις αυτές ονομάζονται ταλαντώσεις Rabi. Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι

$$T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R} \quad (5.72)$$

Ας ονομάσουμε \mathcal{A} το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης (maximum transfer percentage), δηλαδή, π.χ. τη μέγιστη πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στη στάθμη 2, έχοντάς το τοποθετήσει αρχικά στη στάθμη 1. Σύμφωνα με αυτόν τον ορισμό, το πλάτος της ταλαντώσεως είναι $\mathcal{A}/2$. Οπότε, παρατηρούμε πως στον συντονισμό ($\Delta = 0$), έχουμε

$$\mathcal{A} = 1 \quad (5.73)$$

Λόγω της Εξ. 5.71, οι μέσες (χρονικά) τιμές της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στις δύο στάθμες είναι

$$\begin{aligned} \langle |C_1(t)|^2 \rangle &= \frac{1}{2} \\ \langle |C_2(t)|^2 \rangle &= \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (5.74)$$

Στη γενικότερη περίπτωση, $\Delta \neq 0$, το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης αλλά και η περίοδος εξαρτώνται και από τον αποσυντονισμό (detuning) Δ , όπως θα δούμε στις επόμενες σελίδες. Στην Εικόνα 5.6 παρουσιάζονται οι ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό.

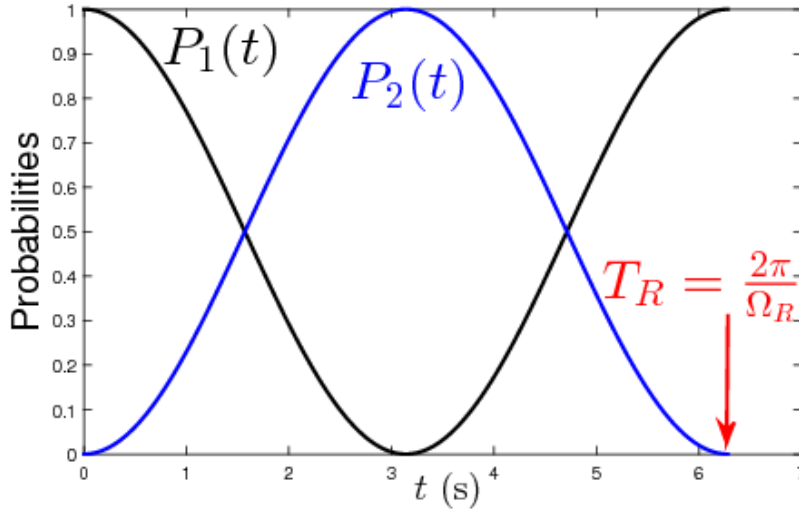
Μπορούμε, επίσης, να ορίσουμε τον μέγιστο ρυθμό μεταβίβασης (maximum transfer rate) ως τον λόγο του μέγιστου ποσοστού μεταβίβασης προς την περίοδο της ταλαντώσεως, δηλαδή ως $\frac{\mathcal{A}}{T_R}$. Στην περίπτωση του δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό, ο μέγιστος ρυθμός μεταβίβασης θα είναι

$$\frac{\mathcal{A}}{T_R} = \frac{1}{\frac{2\pi}{\Omega_R}} = \frac{\Omega_R}{2\pi}. \quad (5.75)$$

Τέλος, μπορούμε να ορίσουμε τον μέσο ρυθμό μεταβίβασης (mean transfer rate) ως

$$k = \frac{\langle |C_2(t)|^2 \rangle}{t_{2\text{mean}}} \quad (5.76)$$

όπου $\langle |C_2(t)|^2 \rangle$ είναι η μέση (χρονικά) τιμή της πιθανότητας ευρέσεως του ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη και $t_{2\text{mean}}$ το χρονικό διάστημα που απαιτείται, ώστε η πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη



Εικόνα 5.6: Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό, $\omega = \Omega$ ($\Delta = 0$). Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$, ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως, $\mathcal{A} = 1$. Τυπικά, χωρίς να έχουμε στο μυαλό μας κάποιο συγκεκριμένο σύστημα, θέσαμε $\Omega_R = 1 \text{ s}^{-1}$.

να γίνει, για πρώτη φορά, ίση με τη μέση της τιμή, δεδομένου πως στην αρχή των χρόνων το ηλεκτρόνιο τοποθετείται στην κάτω στάθμη. Το k εκφράζει το μέσο μεταβιβαζόμενο ποσοστό, αλλά και τη χρονική κλίμακα του φαινομένου. Στην περίπτωση $\Delta\Sigma$ σε συντονισμό, δείτε την Εξ. 5.74, έχουμε $\langle |C_2(t)|^2 \rangle = \frac{1}{2}$ και για τον χρόνο $t_{2\text{mean}}$ ισχύει

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(\Omega_R t_{2\text{mean}}) \Rightarrow \cos(\Omega_R t_{2\text{mean}}) = 0 \Rightarrow \Omega_R t_{2\text{mean}} = \frac{\pi}{2}.$$

Άρα,

$$t_{2\text{mean}} = \frac{\pi}{2\Omega_R}. \quad (5.77)$$

Συνεπώς,

$$k = \frac{\Omega_R}{\pi}. \quad (5.78)$$

Παρατηρούμε ότι ο λόγος του μέσου προς τον μέγιστο ρυθμό μεταβιβάσεως είναι, στην περίπτωσή μας, ίσος με 2, συνεπώς οι δύο ρυθμοί συνδέονται μέσω της σχέσεως

$$k = 2 \frac{\mathcal{A}}{T_R}. \quad (5.79)$$

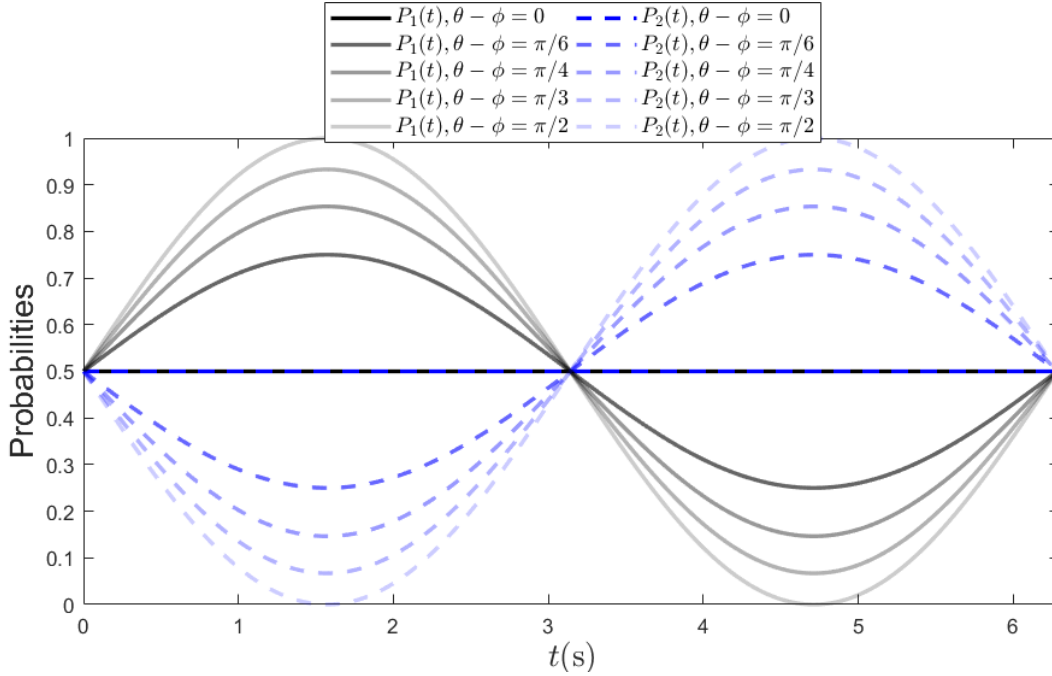
✓ Έστωσαν αρχικές συνθήκες $C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta}$, $C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi}$. Με άλλα λόγια, υποθέτουμε ότι αρχικά το ηλεκτρόνιο βρίσκεται εξ ημισείας στην άνω και στην κάτω στάθμη (με πιθανότητες $|C_1(0)|^2 = |C_2(0)|^2 = \frac{1}{2}$), αλλά υποθέτουμε μια αυθαίρετη διαφορά φάσεως. Άρα, η Εξ. 5.69 δίνει

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 + c_2 = e^{i\theta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} - \frac{c_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 - c_2 = e^{i\phi} \end{aligned} \right\}.$$

Αν προσθέσουμε και αφαιρέσουμε κατά μέλη τις δύο παραπάνω εξισώσεις, καταλήγουμε ότι

$$\left. \begin{aligned} 2c_1 &= e^{i\theta} + e^{i\phi} \Rightarrow c_1 = \frac{e^{i\theta} + e^{i\phi}}{2} \\ 2c_2 &= e^{i\theta} - e^{i\phi} \Rightarrow c_2 = \frac{e^{i\theta} - e^{i\phi}}{2} \end{aligned} \right\}.$$

Οπότε, η Εξ. 5.69 γίνεται



Εικόνα 5.7: Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό, $\omega = \Omega$ ($\Delta = 0$), για αρχικές συνθήκες $C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$, $C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi}$ και διάφορες τιμές της διαφοράς φάσεως $\theta - \phi$. Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$, ενώ το πλάτος τους εξαρτάται από τη διαφορά φάσεως $\theta - \phi$. Τυπικά, χωρίς να έχουμε στο μυαλό μας κάποιο συγκεκριμένο σύστημα, θέσαμε $\Omega_R = 1 \text{ s}^{-1}$.

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{e^{i\theta} + e^{i\phi}}{2\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} + \frac{e^{i\theta} - e^{i\phi}}{2\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \\ \frac{e^{i\theta} + e^{i\phi}}{2\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} - \frac{e^{i\theta} - e^{i\phi}}{2\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} e^{i\theta} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + e^{i\phi} i \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ e^{i\theta} i \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + e^{i\phi} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{bmatrix} \Rightarrow \\ \begin{bmatrix} |C_1(t)|^2 \\ |C_2(t)|^2 \end{bmatrix} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \cos^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + \sin^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + e^{i\theta} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) e^{-i\phi} (-i) \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + e^{i\phi} i \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) e^{-i\theta} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ \cos^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + \sin^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + e^{i\theta} i \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) e^{-i\phi} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + e^{i\phi} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) e^{-i\theta} (-i) \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + i \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) (e^{i(\phi-\theta)} - e^{i(\theta-\phi)}) \\ 1 + i \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) (e^{i(\theta-\phi)} - e^{i(\phi-\theta)}) \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Συνεπώς, αν εκμεταλλευθούμε και την ταυτότητα $e^{i\psi} - e^{-i\psi} = 2i \sin \psi$, καταλήγουμε ότι

$$\begin{aligned} P_1(t) &= |C_1(t)|^2 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sin(\Omega_R t) \sin(\theta - \phi) \\ P_2(t) &= |C_2(t)|^2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin(\Omega_R t) \sin(\theta - \phi) \end{aligned} \quad (5.80)$$

Από τις Εξ. 5.80, προκύπτει ότι στη γενική περίπτωση υπάρχει ταλάντωση γύρω από την τιμή $\frac{1}{2}$, δηλαδή την επιβληθείσα από τις αρχικές συνθήκες πιθανότητα. Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι πάντοτε ίδια, $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$, αλλά το πλάτος τους εξαρτάται από τη διαφορά φάσεως, $\theta - \phi$. Σε περίπτωση κατά την οποία οι συντελεστές $C_1(0), C_2(0)$ βρίσκονται **εν φάσει** ($\theta = \phi$), η χρονική εξάρτηση των πιθανοτήτων απαλείφεται και ισχύει $P_1(t) = P_2(t) = \frac{1}{2}, \forall t$. Στην Εικόνα 5.7 παρουσιάζονται ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό για αυτές τις αρχικές συνθήκες, για διάφορες τιμές της διαφοράς φάσεως.

✓ Έστωσαν αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 0$ και $C_2(0) = 1$. Άρα, η Εξ. 5.69 δίνει

$$\left. \begin{aligned} 0 &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 = -c_2 \\ 1 &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} - \frac{c_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 - c_2 = \sqrt{2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow c_1 = -c_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

Οπότε, η Εξ. 5.69 γίνεται

$$\begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} - \frac{1}{2} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \\ \frac{1}{2} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{bmatrix}$$

Άρα,

$$\begin{aligned} C_1(t) &= i \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ C_2(t) &= \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{aligned} \quad (5.81)$$

και, συνεπώς,

$$\begin{aligned} |C_1(t)|^2 &= \sin^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ |C_2(t)|^2 &= \cos^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{aligned} \quad (5.82)$$

Συγκρίνοντας με τις Εξισώσεις 5.71, παρατηρούμε ότι η κατάσταση είναι εντελώς ανάλογη με τις αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 0$ και $C_2(0) = 1$. Συνεπώς, η περίοδος της ταλαντώσεως, το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως, καθώς και ο μέγιστος και ο μέσος ρυθμός μεταβιβάσεως θα είναι τα ίδια, με μοναδική διαφορά πως εδώ αφορούν τη μετάπτωση από την άνω στάθμη προς την κάτω.

• ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$

Αν $\Delta \neq 0$, τότε, από την 5.62 έχουμε $A = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix}$ και οι ιδιοτιμές είναι $\lambda_{2,1} = \pm \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}$. Ας

βρούμε τα ιδιοανύσματα.

$$\text{Για } \lambda_1 = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} := -\lambda < 0$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta}{2}v_{11} - \frac{\Omega_R}{2}v_{21} = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}v_{11} \Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \right) v_{11} = \frac{\Omega_R}{2}v_{21} \quad (1\eta)$$

$$-\frac{\Omega_R}{2}v_{11} - \frac{\Delta}{2}v_{21} = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}v_{21} \Rightarrow -\frac{\Omega_R}{2}v_{11} = \left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \right) v_{21} \quad (2\eta)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \right) v_{11} = \frac{\Omega_R}{2} \frac{-\frac{\Omega_R}{2}v_{11}}{\left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \right)} \quad * (\text{εάν } v_{11} \neq 0) \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta^2}{4} - \frac{\Omega_R^2}{4} - \frac{\Delta^2}{4} = -\frac{\Omega_R^2}{4},$$

που ισχύει. Αρκεί δηλαδή $v_{11} \neq 0$, οπότε π.χ. από την (1η) συνάγεται

$$v_{21} = \frac{\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}}{\frac{\Omega_R}{2}} v_{11} \quad \text{ή} \quad v_{21} = \alpha v_{11} \quad \text{άρα} \quad \vec{v}_1 = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha\beta \end{bmatrix}.$$

Για να είναι κανονικοποιημένο θα πρέπει $\beta^2 + \alpha^2\beta^2 = 1$, π.χ. $\beta = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \Rightarrow \vec{v}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \\ \frac{\alpha}{\sqrt{1 + \alpha^2}} \end{bmatrix}$

$$\text{Για } \lambda_2 = +\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} := +\lambda > 0$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta}{2}v_{12} - \frac{\Omega_R}{2}v_{22} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}v_{12} \Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \right) v_{12} = \frac{\Omega_R}{2}v_{22} \quad (1\eta)$$

$$-\frac{\Omega_R}{2}v_{12} - \frac{\Delta}{2}v_{22} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}v_{22} \Rightarrow -\frac{\Omega_R}{2}v_{12} = \left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \right) v_{22} \quad (2\eta)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \right) v_{12} = \frac{\Omega_R}{2} \frac{-\frac{\Omega_R}{2}v_{12}}{\left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \right)} \quad * (\text{εάν } v_{12} \neq 0) \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta^2}{4} - \frac{\Omega_R^2}{4} - \frac{\Delta^2}{4} = -\frac{\Omega_R^2}{4},$$

που ισχύει. Αρκεί δηλαδή $v_{12} \neq 0$, οπότε, π.χ. από την (1η) συνάγεται

$$\Rightarrow v_{22} = \frac{\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}}{\frac{\Omega_R}{2}} v_{12} \quad \text{ή} \quad v_{22} = \alpha' v_{12} \quad \text{άρα} \quad \vec{v}_2 = \begin{bmatrix} \beta' \\ \alpha' \beta' \end{bmatrix}.$$

Για να είναι κανονικοποιημένο θα πρέπει $\beta'^2 + \alpha'^2 \beta'^2 = 1$ π.χ. $\beta' = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} \Rightarrow \vec{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} \\ \frac{\alpha'}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} \end{bmatrix}$

Άρα,

$$\vec{x}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_1(t) \\ \mathbf{C}_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1(t) e^{-i\frac{\Delta}{2}t} \\ C_2(t) e^{i\frac{\Delta}{2}t} \end{bmatrix} = c_1 \vec{v}_1 e^{-i\lambda_1 t} + c_2 \vec{v}_2 e^{-i\lambda_2 t} = \begin{bmatrix} \frac{c_1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} e^{-i\lambda_1 t} + \frac{c_2}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} e^{-i\lambda_2 t} \\ \frac{c_1 \alpha}{\sqrt{1 + \alpha^2}} e^{-i\lambda_1 t} + \frac{c_2 \alpha'}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} e^{-i\lambda_2 t} \end{bmatrix}. \quad (5.83)$$

✓ Έστωσαν αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$. Επομένως,

$$\begin{cases} 1 = \frac{c_1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} + \frac{c_2}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} \\ 0 = \frac{c_1 \alpha}{\sqrt{1 + \alpha^2}} + \frac{c_2 \alpha'}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} \Rightarrow c_2 = -\frac{\alpha \sqrt{1 + \alpha'^2}}{\alpha' \sqrt{1 + \alpha^2}} c_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 = \frac{c_1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} - \frac{\alpha \sqrt{1 + \alpha'^2}}{\alpha' \sqrt{1 + \alpha^2}} \frac{c_1}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} = c_1 \frac{\alpha' - \alpha}{\alpha' \sqrt{1 + \alpha^2}} \Rightarrow c_1 = \frac{\alpha' \sqrt{1 + \alpha^2}}{\alpha' - \alpha} \\ c_2 = -\frac{\alpha \sqrt{1 + \alpha'^2}}{\alpha' \sqrt{1 + \alpha^2}} \frac{\alpha' \sqrt{1 + \alpha^2}}{\alpha' - \alpha} \Rightarrow c_2 = -\frac{\alpha \sqrt{1 + \alpha'^2}}{\alpha' - \alpha} \end{cases}$$

Επομένως,

$$\begin{bmatrix} C_1(t) e^{-i\frac{\Delta}{2}t} \\ C_2(t) e^{i\frac{\Delta}{2}t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\alpha'}{\alpha' - \alpha} e^{-i\lambda_1 t} - \frac{\alpha}{\alpha' - \alpha} e^{-i\lambda_2 t} \\ \frac{\alpha\alpha'}{\alpha' - \alpha} e^{-i\lambda_1 t} - \frac{\alpha\alpha'}{\alpha' - \alpha} e^{-i\lambda_2 t} \end{bmatrix}. \quad (5.84)$$

Ας υπολογίσουμε τους συντελεστές που εμφανίζονται στην άνω εξίσωση της 5.84.

$$\begin{aligned} \alpha' - \alpha &= \frac{\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}}{\frac{\Omega_R}{2}} - \frac{\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}}{\frac{\Omega_R}{2}} = -\frac{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{\Omega_R} \\ \frac{\alpha'}{\alpha' - \alpha} &= -\frac{\cancel{\Omega_R}}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} \frac{\Delta - \sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{\cancel{\Omega_R}} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} - \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} \\ \frac{\alpha}{\alpha' - \alpha} &= -\frac{\cancel{\Omega_R}}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} \frac{\Delta + \sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{\cancel{\Omega_R}} = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} + \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}. \end{aligned}$$

Οπότε, η άνω εξίσωση της 5.84 γίνεται

$$\begin{aligned} C_1(t) e^{-i\frac{\Delta}{2}t} &= \underbrace{\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} - \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}}_{k_1} e^{i\lambda t} + \underbrace{\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} + \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}}_{k_2} e^{-i\lambda t} \Rightarrow \\ C_1(t) &= (k_1 e^{i\lambda t} + k_2 e^{-i\lambda t}) e^{i\frac{\Delta}{2}t} \Rightarrow \\ |C_1(t)|^2 &= k_1^2 + k_2^2 + k_1 k_2 e^{2i\lambda t} + k_1 k_2 e^{-2i\lambda t} = k_1^2 + k_2^2 + 2k_1 k_2 \cos(2\lambda t) \Rightarrow \\ |C_1(t)|^2 &= \frac{\Omega_R^2 + \Delta^2 + \Delta^2 - 2\Delta\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} + \frac{\Omega_R^2 + \Delta^2 + \Delta^2 + 2\Delta\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \\ &\quad + 2\frac{\Omega_R^2 + \Delta^2 - \Delta^2}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \cos(2\lambda t) \Rightarrow \\ |C_1(t)|^2 &= \frac{2(\Omega_R^2 + 2\Delta^2)}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} + \frac{2\Omega_R^2}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \cos(2\lambda t) = \frac{\Omega_R^2 + 2\Delta^2 + \Omega_R^2 \cos(2\lambda t)}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{P_1(t) = |C_1(t)|^2 = 1 - \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \sin^2(\lambda t) = \frac{\Omega_R^2 + 2\Delta^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} + \frac{\Omega_R^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \cos(2\lambda t)} \quad (5.85)$$

όπου $\lambda = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}$

Η μέγιστη τιμή του $|C_1(t)|^2$ είναι 1, ενώ η ελάχιστη τιμή του είναι $1 - \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$ και το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως στη στάθμη 2 θα είναι

$$\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \quad (5.86)$$

Για $\Delta = 0$, $\Rightarrow |C_1(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$, όπως αναμενόταν (Εξ. 5.71).

Ας υπολογίσουμε τον συντελεστή που εμφανίζεται στην κάτω εξίσωση της 5.84.

$$\frac{\alpha\alpha'}{\alpha' - \alpha} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} + \Delta}{\Omega_R} \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} - \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} = \frac{\Omega_R^2 + \Delta^2 - \Delta^2}{2\Omega_R\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} = \frac{\Omega_R}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}},$$

$$\text{οπότε, } C_2(t)e^{i\frac{\Delta}{2}t} = \frac{\Omega_R}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}e^{+i\lambda t} - \frac{\Omega_R}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}e^{-i\lambda t} = \frac{\Omega_R}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}i \sin(\lambda t) \Rightarrow$$

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \sin^2(\lambda t) = \frac{\Omega_R^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} - \frac{\Omega_R^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \cos(2\lambda t) \quad (5.87)$$

$$\text{όπου } \lambda = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}$$

Η μέγιστη τιμή του $|C_2(t)|^2$ είναι $\frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$ και η ελάχιστη 0, άρα το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως είναι

$$\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$$

σε συμφωνία με την Εξ. 5.86. Για $\Delta = 0$, $|C_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$, όπως αναμενόταν (Εξ. 5.71).

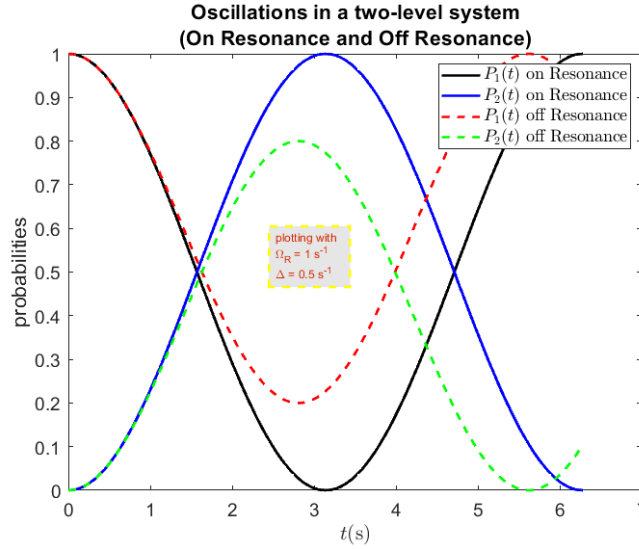
Στις εξισώσεις 5.85 και 5.87 θυμηθήκαμε ότι $P_k(t) = |C_k(t)|^2$, $k = 1, 2$ είναι η πιθανότητα παρουσίας του ηλεκτρονίου στη στάθμη k . Όπως φαίνεται από τις Εξ. 5.85 και 5.87 η περίοδος των ταλαντώσεων είναι

$$T_R = \frac{2\pi}{2\lambda} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} \quad (5.88)$$

και για $\Delta = 0$ προκύπτει $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$ σε συμφωνία με την Εξ. 5.72. Επίσης, το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως που δίνεται από την Εξ. 5.86, για $\Delta = 0$ συμπίπτει με την Εξ. 5.73. Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό και εκτός συντονισμού παρουσιάζονται στην Εικόνα 5.8. Από τις Εξ. 5.88 και 5.86 είναι φανερό ότι καθώς απομακρυνόμαστε από τον συντονισμό, δηλαδή καθώς αυξάνεται το $|\Delta|$, η περίοδος και το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως των ταλαντώσεων μικραίνουν, πράγμα που απεικονίζεται στην Εικόνα 5.8.

Ο μέγιστος ρυθμός μεταβιβάσεως θα είναι

$$\frac{\mathcal{A}}{T_R} = \frac{\Omega_R^2 \sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2\pi(\Omega_R^2 + \Delta^2)} = \frac{\Omega_R^2}{2\pi\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}. \quad (5.89)$$



Εικόνα 5.8: Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό ($\Delta = 0$, συνεχείς γραμμές) και εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$, διακεκομμένες γραμμές). Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = \frac{2\pi}{2\lambda} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}$, ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης είναι $\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$. Τυπικά, χωρίς να αναφερόμαστε σε συγκεκριμένο σύστημα, θέσαμε $\Omega_R = 1 \text{ s}^{-1}$ και $\Delta = 0.5 \text{ s}^{-1}$. Παρατηρούμε τις αλλαγές στην περίοδο και στο μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης, όταν το δισταθμικό σύστημα βρίσκεται εκτός συντονισμού. Στο Παράρτημα Γ υπάρχει το πρόγραμμα matlab *Oscillations.m*, το οποίο δημιουργεί την παρούσα εικόνα.

Οι μέσες πιθανότητες παρουσίας του ηλεκτρονίου σε κάθε στάθμη θα είναι, όπως εύκολα προκύπτει από τις εξισώσεις 5.85 και 5.87 αν ολοκληρώσουμε σε μία περίοδο,

$$\langle |C_1(t)|^2 \rangle = \frac{\Omega_R^2 + 2\Delta^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)}, \quad (5.90)$$

$$\langle |C_2(t)|^2 \rangle = \frac{\Omega_R^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)}, \quad (5.91)$$

ενώ ο χρόνος $t_{2\text{mean}}$ που απαιτείται ώστε η πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη να γίνει, για πρώτη φορά, ίση με τη μέση της τιμή, βρίσκεται μέσω της σχέσεως

$$\begin{aligned} \frac{\Omega_R^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} &= \frac{\Omega_R^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} - \frac{\Omega_R^2}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \cos(2\lambda t_{2\text{mean}}) \Rightarrow \\ \cos(2\lambda t_{2\text{mean}}) &= 0 \Rightarrow 2\lambda t_{2\text{mean}} = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \\ \sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} t_{2\text{mean}} &= \frac{\pi}{2} \Rightarrow t_{2\text{mean}} = \frac{\pi}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}. \end{aligned}$$

Συνεπώς, ο μέσος ρυθμός μεταβίβασης στην άνω στάθμη είναι

$$k = \frac{\langle |C_2(t)|^2 \rangle}{t_{2\text{mean}}} = \frac{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} \Omega_R^2}{2\pi(\Omega_R^2 + \Delta^2)} = \frac{\Omega_R^2}{\pi\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}. \quad (5.92)$$

Παρατηρούμε ότι ο λόγος του μέσου προς τον μέγιστο ρυθμό μεταβίβασης είναι, και πάλι, ίσος με 2, συνεπώς οι δύο ρυθμοί συνδέονται μέσω της σχέσεως

$$k = 2 \frac{\mathcal{A}}{T_R}. \quad (5.93)$$

Ας δούμε τώρα τι συμβαίνει όταν μικρύνουμε το μέγεθος της διαταραχής, δηλαδή τη συχνότητα Rabi, Ω_R , σε σχέση με την απόλυτη τιμή του detuning $|\Delta|$, δηλαδή όταν $\Omega_R \ll |\Delta|$. Προκύπτει

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \sin^2\left(\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}t\right) \quad (5.94)$$

$$\approx \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{|\Delta|t}{2}\right), \quad \Omega_R \ll |\Delta|$$

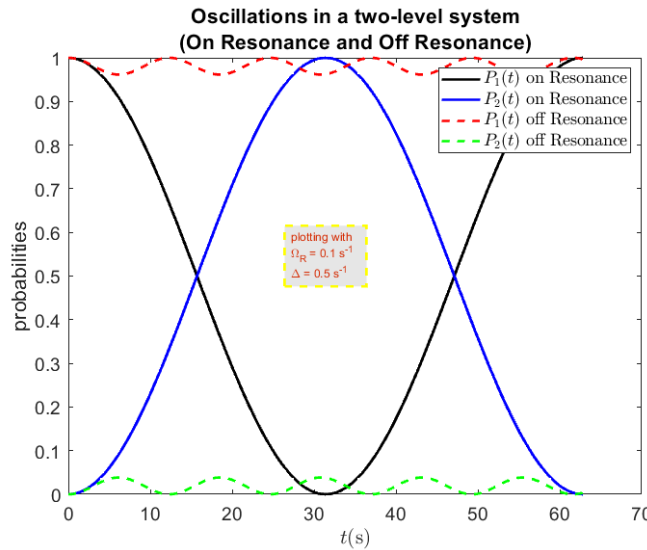
Οπότε, η περίοδος γίνεται $T_R = 2\pi/|\Delta|$. Η Εξ. 5.94 ταυτίζεται με την Εξ. 5.98 της Ενότητας 5.5, η οποία προκύπτει με την παραδοχή ότι μιλάμε για πολύ μικρούς χρόνους, ώστε η λύση να μην απέχει πολύ από τις αρχικές συνθήκες. Αυτή η ταύτιση οφείλεται στο ότι για πολύ μικρό Ω_R προκύπτει πολύ μεγάλη περίοδος T_R , πράγμα το οποίο σημαίνει αργή χρονική εξέλιξη.

Περαιτέρω ας δούμε τι συμβαίνει στο όριο απειροελάχιστης διαταραχής.

$$\lim_{\Omega_R \rightarrow 0} T_R = \lim_{\Omega_R \rightarrow 0} \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} = \frac{2\pi}{|\Delta|} \quad (5.95)$$

$$\lim_{\Omega_R \rightarrow 0} \mathcal{A} = \lim_{\Omega_R \rightarrow 0} \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} = 0 \quad (5.96)$$

Δηλαδή, στο όριο απειροελάχιστης διαταραχής το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης των ταλαντώσεων μηδενίζεται, ενώ η περίοδος τους τείνει στο $\frac{2\pi}{|\Delta|}$, δηλαδή εξαρτάται μόνο από το detuning. Για να πάρουμε μια ιδέα του τι συμβαίνει για μικρά Ω_R , παραθέτουμε την Εικόνα 5.9.



Εικόνα 5.9: Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό ($\Delta = 0$, συνεχείς γραμμές) και εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$, διακεκομμένες γραμμές). Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι $T_R = \frac{2\pi}{2\lambda} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}$, ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης $\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$. Εντελώς τυπικά θέσαμε στην εικόνα $\Omega_R = 0.1 \text{ s}^{-1}$ και $\Delta = 0.5 \text{ s}^{-1}$, δηλαδή σχετικά μικρό Ω_R . Στο Παράρτημα Γ υπάρχει το πρόγραμμα matlab *Oscillations.m* που δημιουργεί την παρούσα εικόνα.

5.5 Λύση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων, οι οποίες προκύπτουν μετά την RWA, με την απλοϊκή επαναληπτική μέθοδο Newton

Ας θυμηθούμε το σύστημα διαφορικών εξισώσεων που προέκυψε μετά την RWA (Εξ. 5.56), το οποίο λύσαμε ακριβώς στην Ενότητα 5.4:

$$\begin{aligned}\dot{C}_1(t) &= C_2(t) \frac{i\Omega_R}{2} e^{i\Delta t}, \\ \dot{C}_2(t) &= C_1(t) \frac{i\Omega_R}{2} e^{-i\Delta t}.\end{aligned}\quad (5.97)$$

Εδώ θα λύσουμε τις Εξισώσεις 5.56 για αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 1$ και $C_2(0) = 0$, ακολουθώντας την **προσεγγιστική επαναληπτική μέθοδο Newton**, παίρνοντας ως μηδενικής τάξεως προσέγγιση

$$\begin{aligned}C_1^{(0)}(t) &\approx C_1(0) = 1, \\ C_2^{(0)}(t) &\approx C_2(0) = 0,\end{aligned}$$

δηλαδή με την υπόθεση ότι για μικρούς χρόνους η λύση δεν απέχει πολύ από τις αρχικές συνθήκες. Άρα, η πρώτη τάξεως προσέγγιση είναι

$$\begin{aligned}\dot{C}_1^{(1)}(t) &= \cancel{C_2^{(0)}(t)} \frac{i\Omega_R}{2} e^{i\Delta t} = 0 \\ \dot{C}_2^{(1)}(t) &= \cancel{C_1^{(0)}(t)} \frac{i\Omega_R}{2} e^{-i\Delta t} \Rightarrow \int_0^{t'} \frac{dC_2^{(1)}(t)}{dt} dt = \frac{i\Omega_R}{2} \int_0^{t'} e^{-i\Delta t} dt \Rightarrow \\ C_2^{(1)}(t') - \cancel{C_2^{(1)}(0)} &= \frac{i\Omega_R}{2} \frac{1}{-i\Delta} [e^{-i\Delta t}]_0^{t'} = -\frac{\Omega_R}{2\Delta} (e^{-i\Delta t'} - 1) \Rightarrow \\ \left. \begin{aligned} C_2^{(1)}(t) &= -\frac{\Omega_R}{2\Delta} (e^{-i\Delta t} - 1) \\ \star e^{ix} - 1 &= 2i \sin\left(\frac{x}{2}\right) e^{i\frac{x}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow C_2^{(1)}(t) &= -\frac{\Omega_R}{2\Delta} 2i \sin\left(\frac{-\Delta t}{2}\right) e^{-\frac{i\Delta t}{2}} \Rightarrow \\ C_2^{(1)}(t) &= \frac{\Omega_R}{\Delta} i \sin\left(\frac{\Delta t}{2}\right) e^{-\frac{i\Delta t}{2}}.\end{aligned}$$

★ Η απόδειξη στο Παράρτημα B.4. Συνεπώς,

$$\boxed{P_2^{(1)}(t) = |C_2^{(1)}(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)} \quad \eta \quad \boxed{P_2^{(1)}(t) = |C_2^{(1)}(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)}{\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2} t^2} \quad (5.98)$$

Η Εξ. 5.98 ταυτίζεται με την Εξ. 5.94 της Ενότητας 5.4, η οποία ισχύει για πολύ μικρό Ω_R , οπότε προκύπτει πολύ μεγάλη περίοδος T_R , πράγμα το οποίο σημαίνει αργή χρονική εξέλιξη.

5.6 Εναλλακτική λύση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων, οι οποίες προκύπτουν μετά την RWA

Ας επισκεφθούμε για μια ακόμη φορά το σύστημα διαφορικών εξισώσεων που προέκυψε μετά την RWA (Εξ. 5.56), το οποίο λύσαμε ακριβώς στην Ενότητα 5.4:

$$\begin{aligned}\dot{C}_1(t) &= C_2(t) \frac{i\Omega_R}{2} e^{i\Delta t}, \\ \dot{C}_2(t) &= C_1(t) \frac{i\Omega_R}{2} e^{-i\Delta t}.\end{aligned}\quad (5.99)$$

Εδώ θα λύσουμε με έναν εναλλακτικό τρόπο τις Εξισώσεις 5.56, αυτήν τη φορά αποσυζεύγοντάς τις. Ας δοκιμάσουμε να τις παραγωγίσουμε ξανά ως προς τον χρόνο. Για την πρώτη εξίσωση, έχουμε

$$\ddot{C}_1(t) = C_2(t) \frac{i\Omega_R}{2} i\Delta e^{i\Delta t} + \dot{C}_2(t) \frac{i\Omega_R}{2} e^{i\Delta t}.$$

Αντικαθιστώντας τις παραπάνω εκφράσεις για τα $C_2(t)$ και $\dot{C}_2(t)$, λαμβάνουμε

$$\ddot{C}_1(t) - i\Delta\dot{C}_1(t) + \frac{\Omega_R^2}{4} C_1(t) = 0. \quad (5.100)$$

Εντελώς ανάλογα, για τη δεύτερη εξίσωση έχουμε

$$\ddot{C}_2(t) + i\Delta\dot{C}_2(t) + \frac{\Omega_R^2}{4} C_2(t) = 0. \quad (5.101)$$

Με αυτόν τον τρόπο καταλήγουμε στις **ανεξάρτητες** εξισώσεις

$$\boxed{\begin{aligned} \ddot{C}_1(t) - i\Delta\dot{C}_1(t) + \frac{\Omega_R^2}{4} C_1(t) &= 0 \\ \ddot{C}_2(t) + i\Delta\dot{C}_2(t) + \frac{\Omega_R^2}{4} C_2(t) &= 0 \end{aligned}} \quad (5.102)$$

Μπορούμε να δοκιμάσουμε λύσεις της μορφής

$$\begin{aligned} C_k(t) &= u_k e^{i\mu_k t} \Rightarrow \\ \dot{C}_k(t) &= i\mu_k u_k e^{i\mu_k t} \Rightarrow \\ \ddot{C}_k(t) &= -\mu_k^2 u_k e^{i\mu_k t}, \end{aligned}$$

για $k = 1, 2$. Αντικαθιστώντας στις Εξ. 5.102, καταλήγουμε ότι

$$\boxed{\begin{aligned} -\mu_1^2 + \Delta\mu_1 + \frac{\Omega_R^2}{4} &= 0 \\ -\mu_2^2 - \Delta\mu_2 + \frac{\Omega_R^2}{4} &= 0 \end{aligned}} \quad (5.103)$$

Οι παραπάνω δευτεροβάθμιες εξισώσεις καθορίζουν τη χρονική εξέλιξη των συντελεστών C_1 και C_2 και δεν έχουν εξάρτηση από τα u_1 και u_2 . Οι λύσεις τους προκύπτουν εύκολα

$$\begin{aligned} \mu_1 &= \frac{\Delta}{2} \pm \frac{\sqrt{\Delta^2 + \Omega_R^2}}{2} = \frac{\Delta}{2} \pm \lambda \\ \mu_2 &= -\frac{\Delta}{2} \pm \frac{\sqrt{\Delta^2 + \Omega_R^2}}{2} = -\frac{\Delta}{2} \pm \lambda, \end{aligned} \quad (5.104)$$

όπου $\lambda = \frac{\sqrt{\Delta^2 + \Omega_R^2}}{2}$. Συνεπώς, οι λύσεις θα είναι της μορφής

$$\left. \begin{aligned} C_1(t) &= \alpha e^{i\frac{\Delta t}{2}} e^{i\lambda t} + \beta e^{i\frac{\Delta t}{2}} e^{-i\lambda t} \\ C_2(t) &= \gamma e^{-i\frac{\Delta t}{2}} e^{i\lambda t} + \delta e^{-i\frac{\Delta t}{2}} e^{-i\lambda t} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} C_1(t) e^{-i\frac{\Delta t}{2}} &= (\alpha e^{i\lambda t} + \beta e^{-i\lambda t}) \\ C_2(t) e^{i\frac{\Delta t}{2}} &= (\gamma e^{i\lambda t} + \delta e^{-i\lambda t}) \end{aligned} \right\}. \quad (5.105)$$

- Στην περίπτωση όπου υπάρχει αποσυντονισμός ($\Delta \neq 0$), οι λύσεις 5.105 έχουν την ίδια μορφή με αυτές που προκύπτουν από τη γενική λύση του προβλήματος των συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων με τη μέθοδο των ιδιοτιμών (συγκρίνετε με την Εξ. 5.83). Συνεπώς, η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε εδώ παράγει ακριβώς τα ίδια αποτελέσματα που συζητήθηκαν στην Ενότητα 5.4 για την περίπτωση όπου $\Delta \neq 0$.
- Στην περίπτωση συντονισμού ($\Delta = 0$), οι λύσεις 5.105 γίνονται

$$\left. \begin{aligned} C_1(t) &= \alpha e^{i\lambda t} + \beta e^{-i\lambda t} \\ C_2(t) &= \gamma e^{i\lambda t} + \delta e^{-i\lambda t} \end{aligned} \right\} \quad (5.106)$$

Οι λύσεις (5.106) έχουν την ίδια μορφή με αυτές που προκύπτουν από τη γενική λύση του προβλήματος των συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων με τη μέθοδο των ιδιοτιμών (συγκρίνετε με την Εξ. 5.69). Βλέπουμε λοιπόν πως, αναμενόμενα, η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε εδώ παράγει και στην περίπτωση του συντονισμού ($\Delta = 0$) ακριβώς τα ίδια αποτελέσματα που συζητήθηκαν στην Ενότητα 5.4.

5.7 Υπολογισμός των συντελεστών Einstein

Ας λάβουμε ως αφετηρία τις εξισώσεις

$$\boxed{P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)} \quad \eta \quad \boxed{P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)}{\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2} t^2} \quad (5.107)$$

οι οποίες ισχύουν για πολύ μικρό μέγεθος διαταραχής, το οποίο εκφράζει η Ω_R , οπότε προκύπτει πολύ μεγάλη περίοδος $T_R = 2\pi/|\Delta|$, πράγμα το οποίο σημαίνει αργή χρονική εξέλιξη. Όπως είδαμε παραπάνω, τα ίδια ισχύουν και για πολύ μικρούς χρόνους με την απλοϊκή μέθοδο Newton. Δεδομένου ότι στην αρχή το ηλεκτρόνιο βρισκόταν στην 1η στάθμη, η $P_2(t)$ ουσιαστικά περιγράφει την πιθανότητα απορροφήσεως σε δισταθμικό σύστημα για πολωμένο, μονοχρωματικό αλλά και κοντά στο ορατό φως.

Αν όμως μας ενδιαφέρει η πιθανότητα απορροφήσεως σε δισταθμικό σύστημα για πολωμένο αλλά όχι μονοχρωματικό (να προέρχεται από μεγάλη περιοχή κυκλικών συχνοτήτων γύρω από το $\omega_0 = \Omega$) κοντά στο ορατό φως ★ ANTIKATHISTΟΥΜΕ ★

$$\mathcal{E}_0^2 = \int_{\Omega-\text{κάτι}}^{\Omega+\text{κάτι}} d\omega \frac{\rho(\omega)}{\varepsilon_0}.$$

ε_0 είναι η διηλεκτρική σταθερά του κενού με μονάδες $[\varepsilon_0] = \frac{C^2}{Nm^2}$ και ρ η πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή κυκλικής συχνότητας με μονάδες $[\rho] = \frac{Js}{m^3}$. Άρα, οι μονάδες του ολοκληρώματος είναι

$$\left[\int d\omega \frac{\rho(\omega)}{\varepsilon_0} \right] = \frac{(1/s) J Nm^2}{m^3 (1/s) C^2} = \frac{JN}{mC^2} = \frac{N^2 m}{mC^2} = \frac{N^2}{C^2} = \left[\mathcal{E}_0^2 \right].$$

Άρα, από την Εξ. 5.107 καταλήγουμε στην

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\mathcal{P}^2}{4\hbar^2} \int_{\Omega-\text{κάτι}}^{\Omega+\text{κάτι}} d\omega \frac{\rho(\omega)}{\varepsilon_0} \frac{\sin^2\left(\frac{(\omega-\Omega)t}{2}\right)}{\left(\frac{(\omega-\Omega)t}{2}\right)^2} t^2. \quad (5.108)$$

Θέτουμε

$$x := \frac{(\omega - \Omega)t}{2} \Rightarrow \omega = \frac{2x}{t} + \Omega \Rightarrow d\omega = \frac{2}{t} dx. \quad (5.109)$$

Άρα,

$$P_2(t) = \frac{\mathcal{P}^2}{4\hbar^2} \frac{2}{t} \frac{t^2}{\varepsilon_0} \int_{-\kappa\alpha t(t/2)}^{+\kappa\alpha t(t/2)} dx \rho(x) \frac{\sin^2 x}{x^2} \Rightarrow$$

$$P_2(t) = \frac{\mathcal{P}^2 t}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \int_{-\kappa\alpha t(t/2)}^{+\kappa\alpha t(t/2)} dx \rho(x) \frac{\sin^2 x}{x^2} \approx \pi \delta(x) \star$$

★ Για την προσέγγιση της $\delta(x)$ συμβουλευθείτε το Παράρτημα B.3.

$$x = 0 \Rightarrow \frac{\omega - \Omega}{2} t = 0 \left. \begin{array}{l} \Rightarrow \omega = \Omega \\ \text{όμως } t \text{ πεπερασμένος} \end{array} \right\} \Rightarrow P_2(t) = \frac{\mathcal{P}^2 t \pi}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \rho(\Omega) \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{dP_2(t)}{dt} = \frac{\mathcal{P}^2 \pi}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \rho(\Omega)}$$

Η ΗΜ ακτινοβολία που προέρχεται από μέλαν σώμα δεν είναι πολωμένη, εν γένει. Συνεπώς, κατά έναν τρόπο, το $\rho(\Omega)$ μιας πολώσεως θα πρέπει να αντικατασταθεί με το $\frac{\rho(\Omega)}{3}$ σύμφωνα με τη σχέση

$$\langle \mathcal{E}_0^2 \rangle = \langle \mathcal{E}_{0x}^2 + \mathcal{E}_{0y}^2 + \mathcal{E}_{0z}^2 \rangle = 3 \langle \mathcal{E}_{0z}^2 \rangle \Rightarrow \langle \mathcal{E}_{0z}^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle \mathcal{E}_0^2 \rangle.$$

Άρα, θα έπρεπε

$$\boxed{\frac{dP_2(t)}{dt} = \frac{\mathcal{P}^2 \pi}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \frac{\rho(\Omega)}{3}}$$

Αλλά η πιθανότητα απορρόφησης είναι

$$dW_{\text{απορ}}^{\text{έξ.}} = B_{12} \rho(\nu) dt \Rightarrow$$

$$\frac{dW_{\text{απορ}}^{\text{έξ.}}}{dt} = B_{12} \rho(\nu)$$

για $\omega = \Omega$ $\boxed{\frac{dW_{\text{απορ}}^{\text{έξ.}}}{dt} = B_{12} \rho(\Omega)}$

Άρα,

$$\left. \begin{array}{l} \frac{dP_2(t)}{dt} = \frac{\mathcal{P}^2 \pi}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \frac{\rho(\Omega)}{3} \\ \frac{dW_{\text{απορ}}^{\text{έξ.}}}{dt} = B_{12} \rho(\Omega) \end{array} \right\} \Rightarrow \quad (5.110)$$

$$B_{12} = \frac{\mathcal{P}^2 \pi}{6\hbar^2 \varepsilon_0} \quad (5.111)$$

ενώ υπενθυμίζεται ότι είχαμε βρει

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \quad (5.112)$$

και

$$B_{12} = B_{21} \quad (5.113)$$

Παρά τις απλουστεύσεις που χρειάστηκαν για τον υπολογισμό, η ουσία είναι ότι είναι δυνατόν να υπολογιστούν οι συντελεστές Einstein ενός δισταθμικού συστήματος.

5.8 Υπολογισμός των συντελεστών Einstein χρησιμοποιώντας τις λύσεις που προέκυψαν στην Ενότητα 5.4

Ας παραθέσουμε την Εξ. 5.87 της Ενότητας 5.4 και την Εξ. 5.107 της Ενότητας 5.7. Η Εξ. 5.87 μπορεί κι αυτή να γραφεί με ανάλογο τρόπο με την Εξ. 5.107 ήτοι

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \sin^2 \left(\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t \right) \quad \text{ή}$$

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2 \left(\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t \right)}{\left(\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t \right)^2} t^2 \quad (5.114)$$

όπως δηλαδή γράφαμε

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2} \sin^2 \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \quad \text{ή}$$

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2 \left(\frac{\Delta t}{2} \right)}{\left(\frac{\Delta t}{2} \right)^2} t^2 \quad (5.115)$$

Όπως είναι φανερό, υπάρχει αναλογία μεταξύ των δευτέρων εκδοχών των $P_2(t)$. Μπορούμε λοιπόν να ορίσουμε

$$x := \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t, \quad (5.116)$$

όπως είχαμε ορίσει

$$x := \frac{\Delta t}{2} \quad (5.117)$$

στην προηγούμενη Ενότητα 5.7 (Εξ. 5.109). Οπότε, ο υπολογισμός του B_{12} θα γινόταν όπως έγινε και στην προηγούμενη Ενότητα 5.7.

5.9 <<Ιδιοενέργειες>> του διαταραγμένου δισταθμικού συστήματος, δηλαδή υπό ΗΜ πεδίο

Έστω ότι θέλουμε να λύσουμε το πρόβλημα $\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$, υποθέτοντας ότι μπορούμε να αναπτύξουμε την $\Psi(\vec{r})$ συναρτήσει των ιδιοσυναρτήσεων του αδιατάρακτου προβλήματος $\Phi_k(\vec{r})$ με χρονικά ανεξάρτητους συντελεστές g_k . Τότε

$$\left. \begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \\ \hat{H}\Psi(\vec{r}) &= E\Psi(\vec{r}) \\ \Psi(\vec{r}) &= \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} \left[\hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \right] \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) &= E \left[\sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \right] \\ \text{Ας εκμεταλλευτούμε ότι οι } \Phi_k(\vec{r}) &\text{ είναι ορθοκανονικές.} \\ \text{Πολλαπλασιάζουμε με } \Phi_{k'}^*(\vec{r}) &\text{ και ολοκληρώνουμε στον χώρο.} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\sum_k g_k \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \hat{H}_0 \Phi_k(\vec{r}) + \sum_k g_k \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) = E \sum_k g_k \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r})$$

$$\Rightarrow \left. \begin{aligned} \sum_k g_k E_k \delta_{k'k} + \sum_k g_k U_{\mathcal{E}k'k}(t) &= E \sum_k g_k \delta_{k'k} \Rightarrow \boxed{g_{k'} E_{k'} + \sum_k g_k U_{\mathcal{E}k'k}(t) = E g_{k'}} \\ \text{εάν έχουμε προσέγγιση διπόλου } U &= -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}} = +e\vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}}_0 e^{-i\omega t} = U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \\ U_{\mathcal{E}k'k}(t) &= e e^{-i\omega t} \vec{\mathcal{E}}_0 \cdot \vec{r}_{k'k} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\text{αν λάβουμε τη μέση χρονική τιμή σε μια περίοδο } \frac{2\pi}{\omega} \text{ του ΗΜ πεδίου, τότε } \boxed{\langle E \rangle = E_{k'}}$$

Δηλαδή, κατά μέσο όρο δεν επηρεάζονται οι ιδιοενέργειες.

5.10 Επίλυση των εξισώσεων, οι οποίες περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη τρισταθμικού συστήματος με ιδιοκαταστάσεις απλού αρμονικού ταλαντωτή

Μέχρι στιγμής επικεντρωθήκαμε στην περίπτωση της αλληλεπίδρασης οδεύοντος μονοχρωματικού και πολωμένου ηλεκτρικού πεδίου με δισταθμικό σύστημα εντός της προσεγγίσεως διπόλου. Ωστόσο, το Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 1^{ης} Τάξεως (Εξ. 5.33)

$$\boxed{\dot{C}_{k'}(t) = \frac{-i}{\hbar} \sum_k C_k(t) e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k)t} U_{\mathcal{E}k'k}(t)} \quad (5.118)$$

μπορεί να επιλυθεί και σύστημα με τρεις ή περισσότερες στάθμες. Στη συνέχεια, θα το λύσουμε, εντός της RWA, για τρισταθμικό σύστημα με ιδιοκαταστάσεις μονοδιάστατου απλού αρμονικού ταλαντωτή, δηλαδή για σύστημα που περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \Omega^2 z^2. \quad (5.119)$$

Οι ιδιοενέργειες 1Δ απλού αρμονικού ταλαντωτή δίνονται από τη σχέση

$$E_n = \hbar \Omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow E_{n+1} - E_n = \hbar \Omega. \quad (5.120)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις του, οι οποίες αντιστοιχούν στις στάθμες αυτές, έχουν τη μορφή

$$Z_n(z) = (2^n n! a \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} H_n \left(\frac{z}{a} \right) e^{-\frac{z^2}{2a^2}}, \quad (5.121)$$

όπου $H_n(x)$ είναι τα πολυώνυμα Hermite και $a = \sqrt{\hbar/m\Omega}$. Ας υποθέσουμε ότι μπορούμε να περιοριστούμε στις τρεις κατώτερες στάθμες του απλού αρμονικού ταλαντωτή. Οι ιδιοσυναρτήσεις τους, έστω $Z_n(z)$, παρατίθενται στον Πίνακα 5.1. Για διευκόλυνση, κάνουμε την αλλαγή δεικτών $k = n + 1$.

Πίνακας 5.1: Ιδιοσυναρτήσεις των τριών χαμηλότερων ενεργειακά καταστάσεων του μονοδιάστατου απλού αρμονικού ταλαντωτή και η ομοτιμία τους.

n	k	$\Phi_k(\vec{r}) = Z_n(z)$	ομοτιμία
0	1	$(a\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{z^2}{2a^2}}$	άρτια
1	2	$(a\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} 2\frac{z}{a} e^{-\frac{z^2}{2a^2}}$	περιττή
2	3	$(8a\sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} \left(2 - 4\frac{z}{a}\right) e^{-\frac{z^2}{2a^2}}$	άρτια

Έχουμε δει στην Ενότητα 5.3.3 ότι τα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής είναι

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{k'k},$$

όπου

$$z_{k'k} := \int dV \Phi_{k'}(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}),$$

εφόσον εδώ οι ιδιοσυναρτήσεις είναι πραγματικές. Παρατηρώντας την παραπάνω εξίσωση σε συνδυασμό με τον Πίνακα 5.1, παρατηρούμε ότι διαγώνια στοιχεία μηδενίζονται, τα μη διαγώνια στοιχεία είναι συμμετρικά, ενώ τα μη διαγώνια στοιχεία για τα οποία ισχύει $|k - k'| = \text{άρτιος}$ μηδενίζονται επίσης.

Στο τρισταθμικό μας σύστημα ($k = 1, 2, 3$) μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} U_{\mathcal{E}12}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{12} & U_{\mathcal{E}12}(t) &= -\mathcal{P}_{z12} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ U_{\mathcal{E}21}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{21} & U_{\mathcal{E}21}(t) &= -\mathcal{P}_{z21} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ U_{\mathcal{E}13}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{13} = 0 & U_{\mathcal{E}13}(t) &= 0 \\ U_{\mathcal{E}31}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{31} = 0 & \text{ή} & U_{\mathcal{E}31}(t) = 0 \\ U_{\mathcal{E}23}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{23} & U_{\mathcal{E}23}(t) &= -\mathcal{P}_{z23} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ U_{\mathcal{E}32}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{32} & U_{\mathcal{E}32}(t) &= -\mathcal{P}_{z32} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ U_{\mathcal{E}kk}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{kk} = 0 & U_{\mathcal{E}kk}(t) &= 0 \end{aligned}$$

και, λόγω της συμμετρίας των στοιχείων πίνακα $z_{kk'}$,

$$\mathcal{P}_{z12} = \mathcal{P}_{z21} := \mathcal{P} \quad \mathcal{P}_{z23} = \mathcal{P}_{z32} := \mathcal{P}' \quad (5.122)$$

Μπορούμε σε αυτό το σημείο να λύσουμε το Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 1^{ης} Τάξεως (Εξ. 5.33) για τρισταθμικό σύστημα. Θα χρησιμοποιήσουμε και την ταυτότητα $\cos \omega t = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}$. Από την Εξ. 5.120, έχουμε

$$\boxed{\Omega_2 - \Omega_1 = \Omega_3 - \Omega_2 = \Omega}. \quad (5.123)$$

Συνεπώς,

$$\begin{aligned} \boxed{k' = 1} \quad \dot{C}_1(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{i(\Omega_1 - \Omega_2)t} U_{\mathcal{E}12}(t) \\ \dot{C}_1(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{-i\Omega t} (-\mathcal{E}_0) \mathcal{P} \cos \omega t \\ \boxed{\dot{C}_1(t)} &= \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{-i(\Omega - \omega)t} + e^{-i(\Omega + \omega)t} \right] C_2(t) \end{aligned} \quad (5.124)$$

$$\begin{aligned}
 \boxed{k' = 2} \quad \dot{C}_2(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_1(t) e^{i(\Omega_2 - \Omega_1)t} U_{\mathcal{E}21}(t) - \frac{i}{\hbar} C_3(t) e^{i(\Omega_2 - \Omega_3)t} U_{\mathcal{E}23}(t) \\
 \dot{C}_2(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_1(t) e^{i\Omega t} (-\mathcal{E}_0) \mathcal{P} \cos \omega t - \frac{i}{\hbar} C_3(t) e^{-i\Omega t} (-\mathcal{E}_0) \mathcal{P}' \cos \omega t \\
 \boxed{\dot{C}_2(t) = \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{i(\Omega+\omega)t} + e^{i(\Omega-\omega)t} \right] C_1(t) + \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}'}{2\hbar} \left[e^{-i(\Omega+\omega)t} + e^{-i(\Omega-\omega)t} \right] C_3(t)} & \quad (5.125)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \boxed{k' = 3} \quad \dot{C}_3(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{i(\Omega_3 - \Omega_2)t} U_{\mathcal{E}32}(t) \\
 \dot{C}_3(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{i\Omega t} (-\mathcal{E}_0) \mathcal{P}' \cos \omega t \\
 \boxed{\dot{C}_3(t) = \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}'}{2\hbar} \left[e^{i(\Omega-\omega)t} + e^{i(\Omega+\omega)t} \right] C_2(t)} & \quad (5.126)
 \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι η ενδιάμεση στάθμη (2) λειτουργεί ως διαμεσολαβητής μεταξύ των σταθμών 1 και 3. **Στο πλαίσιο της RWA**, θα αγνοήσουμε τους γρήγορα μεταβαλλόμενους όρους με $(\Omega + \omega)$. Επίσης, κατά τα γνωστά από το δισταθμικό σύστημα, θα ορίσουμε τον αποσυντονισμό (detuning) ως

$$\boxed{\Delta := \omega - \Omega}$$

και τις συχνότητες

$$\boxed{\Omega_R := \frac{\mathcal{P}\mathcal{E}_0}{\hbar}, \quad \Omega'_R := \frac{\mathcal{P}'\mathcal{E}_0}{\hbar}} \quad (5.127)$$

Συνεπώς, μετά την RWA, καταλήγουμε στο σύστημα

$$\begin{aligned}
 \boxed{\dot{C}_1(t) = \frac{i\Omega_R}{2} C_2(t) e^{i\Delta t}} \\
 \dot{C}_2(t) &= \frac{i\Omega_R}{2} C_1(t) e^{-i\Delta t} + \frac{i\Omega'_R}{2} C_3(t) e^{i\Delta t} \\
 \dot{C}_3(t) &= \frac{i\Omega'_R}{2} C_2(t) e^{-i\Delta t}
 \end{aligned} \quad (5.128)$$

Εν συνεχεία, θα κάνουμε έναν μετασχηματισμό για να πάρουμε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων με χρονικά ανεξάρτητους συντελεστές. Δηλαδή,

$$\begin{aligned}
 C_1(t) &= \mathbf{C}_1(t) e^{\frac{i\Delta t}{2}}, \\
 C_2(t) &= \mathbf{C}_2(t) e^{-\frac{i\Delta t}{2}}, \\
 C_3(t) &= \mathbf{C}_3(t) e^{-\frac{i3\Delta t}{2}}.
 \end{aligned} \quad (5.129)$$

Εισάγοντας τους μετασχηματισμούς της Εξίσωσης 5.129 στο παραπάνω σύστημα, καταλήγουμε στο σύστημα διαφορικών εξισώσεων

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{C}}_1(t) = -\frac{i\Delta}{2} \mathbf{C}_1(t) + \frac{i\Omega_R}{2} \mathbf{C}_2(t), \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) = +\frac{i\Omega_R}{2} \mathbf{C}_1(t) + \frac{i\Delta}{2} \mathbf{C}_2(t) + \frac{i\Omega'_R}{2} \mathbf{C}_3(t), \\ \dot{\mathbf{C}}_3(t) = \frac{i\Omega'_R}{2} \mathbf{C}_2(t) + \frac{i3\Delta}{2} \mathbf{C}_3(t), \end{cases}$$

το οποίο μπορεί να γραφεί σε μορφή διαφορικής εξίσωσης πινάκων ως

$$\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{C}}_1(t) \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) \\ \dot{\mathbf{C}}_3(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{i\Delta}{2} & \frac{i\Omega_R}{2} & 0 \\ i\Omega_R & i\Delta & i\Omega'_R \\ 0 & \frac{i\Omega'_R}{2} & \frac{i3\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{C}_1(t) \\ \mathbf{C}_2(t) \\ \mathbf{C}_3(t) \end{bmatrix} \quad (5.130)$$

Για να λύσουμε το σύστημα της Εξ. 5.130 εισάγουμε το διάνυσμα

$$\vec{x}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_1(t) \\ \mathbf{C}_2(t) \\ \mathbf{C}_3(t) \end{bmatrix}, \quad (5.131)$$

οπότε,

$$\dot{\vec{x}}(t) = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{C}}_1(t) \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) \\ \dot{\mathbf{C}}_3(t) \end{bmatrix}, \quad (5.132)$$

και ονομάζοντας

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{i\Delta}{2} & \frac{i\Omega_R}{2} & 0 \\ i\Omega_R & i\Delta & i\Omega'_R \\ 0 & \frac{i\Omega'_R}{2} & \frac{i3\Delta}{2} \end{bmatrix} := -i\mathbf{A} \Rightarrow \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ \frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega'_R}{2} \\ 0 & -\frac{\Omega'_R}{2} & -\frac{3\Delta}{2} \end{bmatrix}, \quad (5.133)$$

το σύστημα της Εξ. 5.130 γράφεται

$$\dot{\vec{x}}(t) = \tilde{\mathbf{A}} \vec{x}(t) \quad (5.134)$$

Ας δοκιμάσουμε λύσεις της μορφής

$$\vec{x}(t) = \vec{v} e^{\tilde{\lambda} t} \quad (5.135)$$

οπότε,

$$\vec{v} \tilde{\lambda} e^{\tilde{\lambda} t} = \tilde{\mathbf{A}} \vec{v} e^{\tilde{\lambda} t} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \tilde{\mathbf{A}} \vec{v} = \tilde{\lambda} \vec{v} \\ \tilde{\lambda} := -i\lambda \end{array} \right\} \Rightarrow -i\mathbf{A} \vec{v} = -i\lambda \vec{v} \Rightarrow \mathbf{A} \vec{v} = \lambda \vec{v}$$

πρόβλημα ιδιοτιμών

Δηλαδή, ουσιαστικά το όλο θέμα ανάγεται στο πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\mathbf{A} \vec{v} = \lambda \vec{v} \quad (5.136)$$

από το οποίο θα προκύψουν τα κανονικοποιημένα ιδιοανύσματα $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3$ που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$. Έχοντας ελέγξει ότι τα κανονικοποιημένα ιδιοανύσματα $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3$ που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ είναι γραμμικώς ανεξάρτητα, η λύση του προβλήματός μας είναι

$$\vec{x}(t) = \sum_{k=1}^3 c_k \vec{v}_k e^{-i\lambda_k t}$$

όπου βέβαια $\tilde{\lambda}_k = -i\lambda_k$. Από τις αρχικές συνθήκες βρίσκουμε τα c_k .

- ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$

Παραθέτουμε τη λύση για $\Delta = 0$, δηλαδή στην περίπτωση του συντονισμού. Ο πίνακας A έχει τη μορφή

$$A = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ -\frac{\Omega_R}{2} & 0 & -\frac{\Omega'_R}{2} \\ 0 & -\frac{\Omega'_R}{2} & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.137)$$

Οι ιδιοτιμές του προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της ορίζουσας

$$\det(A - \lambda I),$$

όπου I ο μοναδιαίος 3×3 πίνακας. Συνεπώς,

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) = 0 &\Rightarrow -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & -\frac{\Omega'_R}{2} \\ -\frac{\Omega'_R}{2} & -\lambda \end{vmatrix} + \frac{\Omega_R}{2} \begin{vmatrix} -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ -\frac{\Omega'_R}{2} & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \\ &-\lambda \left(\lambda^2 - \frac{\Omega'^2_R}{4} \right) + \lambda \frac{\Omega^2_R}{4} = 0 \Rightarrow -\lambda \left(\lambda^2 - \frac{\Omega^2_R}{4} - \frac{\Omega'^2_R}{4} \right) = 0 \Rightarrow \\ &\lambda = 0 \text{ ή } \lambda = \pm \frac{\sqrt{\Omega^2_R + \Omega'^2_R}}{2}. \end{aligned}$$

Άρα,

$$\lambda_1 = -\frac{\sqrt{\Omega^2_R + \Omega'^2_R}}{2} := -\Lambda, \quad \lambda_2 = 0, \quad \lambda_3 = \frac{\sqrt{\Omega^2_R + \Omega'^2_R}}{2} := \Lambda \quad (5.138)$$

Ας βρούμε τώρα τα ιδιοανύσματα του A .

$$\text{Για } \lambda_1 = -\frac{\sqrt{\Omega^2_R + \Omega'^2_R}}{2} := -\Lambda$$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \Lambda & -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ -\frac{\Omega_R}{2} & \Lambda & -\frac{\Omega'_R}{2} \\ 0 & -\frac{\Omega'_R}{2} & \Lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \\ v_{31} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \\ \left. \begin{aligned} v_{11} &= \frac{\Omega_R}{2\Lambda} v_{21} \\ -\frac{\Omega_R}{2} v_{11} + \Lambda v_{21} - \frac{\Omega'_R}{2} v_{31} &= 0 \\ v_{31} &= \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} v_{21} \end{aligned} \right\} \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας την πρώτη και την τρίτη σχέση στη δεύτερη, λαμβάνουμε

$$\underbrace{\left(\Lambda - \frac{\sqrt{\Omega^2_R + \Omega'^2_R}}{2} \right)}_{=0} v_{21} = 0.$$

Συνεπώς, η επιλογή του v_{21} είναι αόριστη, πλην του μηδενός, διότι αν $v_{21} = 0$, τότε όλες οι συνιστώσες του ιδιοανύσματος μηδενίζονται. Ας επιλέξουμε $v_{21} = 1$. Συνεπώς,

$$\vec{v}_1 = \beta \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ 1 \\ \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{bmatrix}.$$

Για να είναι το \vec{v}_1 κανονικοποιημένο, θα πρέπει

$$|\vec{v}_1|^2 = 1 \Rightarrow |\beta|^2 \underbrace{\frac{\Omega_R^2 + 4\Lambda^2 + \Omega'^2_R}{4\Lambda^2}}_{=2} = 1 \Rightarrow |\beta|^2 = \frac{1}{2}.$$

Οπότε, π.χ. μπορούμε να εκλέξουμε $\beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$. Άρα,

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ 1 \\ \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{bmatrix}. \quad (5.139)$$

Για $\lambda_2 = 0$

$$\begin{bmatrix} 0 & -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ -\frac{\Omega_R}{2} & 0 & -\frac{\Omega'_R}{2} \\ 0 & -\frac{\Omega'_R}{2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \\ v_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} v_{22} = 0 \\ v_{32} = -\frac{\Omega_R}{\Omega'_R} v_{12} \\ v_{22} = 0 \end{array} \right\}.$$

Συνεπώς,

$$\vec{v}_2 = \beta \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -\frac{\Omega_R}{\Omega'_R} \end{bmatrix}.$$

Για να είναι το \vec{v}_2 κανονικοποιημένο, θα πρέπει

$$|\vec{v}_2|^2 = 1 \Rightarrow |\beta|^2 \left(1 + \frac{\Omega_R^2}{\Omega'^2_R} \right) = 1 \Rightarrow |\beta|^2 = \frac{\Omega'^2_R}{\Omega_R^2 + \Omega'^2_R} = \frac{\Omega'^2_R}{4\Lambda^2}.$$

Οπότε, π.χ. αν εκλέξουμε $\beta = \frac{\Omega'_R}{2\Lambda}$, τότε,

$$\vec{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \\ 0 \\ -\frac{\Omega_R}{2\Lambda} \end{bmatrix}. \quad (5.140)$$

$$\text{Για } \lambda_3 = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Omega'_R{}^2}}{2} := \Lambda$$

$$\begin{bmatrix} -\Lambda & -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\Lambda & -\frac{\Omega'_R}{2} \\ 0 & -\frac{\Omega'_R}{2} & -\Lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{13} \\ v_{23} \\ v_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} v_{13} &= -\frac{\Omega_R}{2\Lambda} v_{23} \\ -\frac{\Omega_R}{2} v_{13} - \Lambda v_{23} - \frac{\Omega'_R}{2} v_{33} &= 0 \\ v_{33} &= -\frac{\Omega'_R}{2\Lambda} v_{23} \end{aligned} \right\}.$$

Αντικαθιστώντας την πρώτη και την τρίτη σχέση στη δεύτερη, λαμβάνουμε

$$\underbrace{\frac{\Omega_R^2 - 4\Lambda^2 + \Omega'_R{}^2}{4\Lambda}}_{=0} v_{23} = 0.$$

Συνεπώς, η επιλογή του v_{23} είναι αόριστη, πλην του μηδενός, διότι αν $v_{23} = 0$, τότε όλες οι συνιστώσες του ιδιοανύσματος μηδενίζονται. Ας επιλέξουμε $v_{23} = 1$. Συνεπώς,

$$\vec{v}_3 = \beta \begin{bmatrix} -\frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ 1 \\ -\frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{bmatrix}.$$

Για να είναι το \vec{v}_3 κανονικοποιημένο, θα πρέπει

$$|\vec{v}_3|^2 = 1 \Rightarrow |\beta|^2 \underbrace{\frac{\Omega_R + 4\Lambda^2 + \Omega'_R}{4\Lambda^2}}_{=2} = 1 \Rightarrow |\beta|^2 = \frac{1}{2}.$$

Οπότε, π.χ. μπορούμε να εκλέξουμε $\beta = -\frac{1}{\sqrt{2}}$. Άρα,

$$\vec{v}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ 1 \\ \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{bmatrix}. \quad (5.141)$$

Τελικά,

$$\begin{aligned}\vec{x}(t) &= \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \\ C_3(t) \end{bmatrix} = c_1 \vec{v}_1 e^{-i\lambda_1 t} + c_2 \vec{v}_2 e^{-i\lambda_2 t} + c_3 \vec{v}_3 e^{-i\lambda_3 t} \\ \begin{bmatrix} C_1(t) e^{-i\frac{\Delta}{2}t} \\ C_2(t) e^{i\frac{\Delta}{2}t} \\ C_3(t) e^{i\frac{3\Delta}{2}t} \end{bmatrix} &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ 1 \\ \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{bmatrix} e^{i\Lambda t} + c_2 \begin{bmatrix} \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \\ 0 \\ -\frac{\Omega_R}{2\Lambda} \end{bmatrix} + \frac{c_3}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ -1 \\ \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{bmatrix} e^{-i\Lambda t} \Rightarrow (\text{υποθέσαμε } \Delta = 0) \Rightarrow \\ \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \\ C_3(t) \end{bmatrix} &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ 1 \\ \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{bmatrix} e^{i\Lambda t} + c_2 \begin{bmatrix} \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \\ 0 \\ -\frac{\Omega_R}{2\Lambda} \end{bmatrix} + \frac{c_3}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ -1 \\ \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{bmatrix} e^{-i\Lambda t}. \quad (5.142)\end{aligned}$$

✓ Έστωσαν αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 1$, $C_2(0) = 0$ και $C_3(0) = 0$. Άρα, για $t = 0$, το σύστημα εξισώσεων 5.142 γίνεται

$$\left. \begin{aligned} 1 &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} + c_2 \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} + \frac{c_3}{\sqrt{2}} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ 0 &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} - \frac{c_3}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 = c_3 := c \\ 0 &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} - c_2 \frac{\Omega_R}{2\Lambda} + \frac{c_3}{\sqrt{2}} \frac{\Omega'_R}{2\Lambda} \end{aligned} \right\}.$$

Αντικαθιστώντας τη συνθήκη που προκύπτει από τη δεύτερη εξίσωση του συστήματος στην τρίτη εξίσωση, λαμβάνουμε

$$c_2 = c\sqrt{2} \frac{\Omega'_R}{\Omega_R}.$$

Αντικαθιστώντας τώρα στην πρώτη εξίσωση του συστήματος, λαμβάνουμε

$$2\Lambda = c \frac{\Omega_R}{\sqrt{2}} + c\sqrt{2} \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R} + c \frac{\Omega_R}{\sqrt{2}} = c \frac{2\Omega_R^2 + 2\Omega_R^2}{\sqrt{2}\Omega_R} \Rightarrow c = \frac{\sqrt{2}\Omega_R\Lambda}{\Omega_R^2 + \Omega_R^2} = \frac{\sqrt{2}\Omega_R}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Omega_R^2}} = \frac{\Omega_R}{2\sqrt{2}\Lambda}.$$

Οπότε, τελικά το σύστημα εξισώσεων 5.142 φτάνει στη μορφή

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \\ C_3(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R^2}{8\Lambda^2} e^{i\Lambda t} + \frac{\Omega_R^2}{4\Lambda^2} + \frac{\Omega_R^2}{8\Lambda^2} e^{-i\Lambda t} \\ \frac{\Omega_R}{4\Lambda} e^{i\Lambda t} - \frac{\Omega_R}{4\Lambda} e^{-i\Lambda t} \\ \frac{\Omega_R\Omega'_R}{8\Lambda^2} e^{i\Lambda t} - \frac{\Omega_R\Omega'_R}{4\Lambda^2} + \frac{\Omega_R\Omega'_R}{8\Lambda^2} e^{-i\Lambda t} \end{bmatrix} \Rightarrow \\ \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \\ C_3(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R^2}{4\Lambda^2} \cos(\Lambda t) + \frac{\Omega_R^2}{4\Lambda^2} \\ i \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \sin(\Lambda t) \\ \frac{\Omega_R\Omega'_R}{4\Lambda^2} \cos(\Lambda t) - \frac{\Omega_R\Omega'_R}{4\Lambda^2} \end{bmatrix}. \quad (5.143)\end{aligned}$$

Αυτές είναι οι εξισώσεις που περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη του τρισταθμικού συστήματος. Η πιθανότητα να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο στη στάθμη k τη χρονική στιγμή t είναι, προφανώς, $P_k(t) := |C_k(t)|^2$.

• Για τη στάθμη 1, από την Εξ. 5.143 έχουμε

$$|C_1(t)|^2 = \frac{\Omega_R^4}{16\Lambda^4} \cos^2(\Lambda t) + \frac{\Omega_R'^4}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \cos(\Lambda t) \Rightarrow$$

$$P_1(t) = |C_1(t)|^2 = \frac{\Omega_R^4}{32\Lambda^4} (\cos(2\Lambda t) + 1) + \frac{\Omega_R'^4}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \cos(\Lambda t) \quad (5.144)$$

Βλέπουμε ότι στην παραπάνω εξίσωση εμπλέκονται δύο περίοδοι, οι $T_1 = \frac{2\pi}{\Lambda}$ και $T_2 = \frac{2\pi}{2\Lambda}$. Εφόσον ο λόγος των δύο περιόδων είναι ρητός αριθμός και συγκεκριμένα $\frac{T_1}{T_2} = 2$, η πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου στη στάθμη 1 θα είναι περιοδική συνάρτηση, με περίοδο

$$T_1 = \frac{2\pi}{\Lambda} = \frac{4\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Omega_R'^2}} = 2T_2 \quad (5.145)$$

Ας διερευνήσουμε περαιτέρω την Εξίσωση 5.144.

* Μετά από μια πλήρη περίοδο, δηλαδή για $t = T_1 = \frac{2\pi}{\Lambda}$,

$$\begin{aligned} \left| C_1\left(\frac{2\pi}{\Lambda}\right) \right|^2 &= \frac{\Omega_R^4}{32\Lambda^4} (\cos(4\pi) + 1) + \frac{\Omega_R'^4}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \cos(2\pi) = \frac{\Omega_R^4}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R'^4}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \\ &= \frac{(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^2}{16\Lambda^4} = 1, \end{aligned}$$

πράγμα αναμενόμενο, καθώς με την εκτέλεση μιας περιόδου, η πιθανότητα θα επανέλθει στην τιμή που θέσαμε αρχικά, ήτοι $|C_1(0)|^2 = 1$.

* Στο ήμισυ της περιόδου, δηλαδή για $t = T_2 = \frac{2\pi}{2\Lambda}$,

$$\begin{aligned} \left| C_1\left(\frac{2\pi}{2\Lambda}\right) \right|^2 &= \frac{\Omega_R^4}{32\Lambda^4} (\cos(2\pi) + 1) + \frac{\Omega_R'^4}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \cos(\pi) = \frac{\Omega_R^4}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R'^4}{16\Lambda^4} - \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \\ &= \frac{(\Omega_R^2 - \Omega_R'^2)^2}{16\Lambda^4} = \frac{(\Omega_R^2 - \Omega_R'^2)^2}{(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^2}. \end{aligned}$$

* Η πρώτη παράγωγος της $|C_1(t)|^2$ είναι

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |C_1(t)|^2 &= -\frac{\Omega_R^4}{16\Lambda^3} \sin(2\Lambda t) - \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^3} \sin(\Lambda t) = -\frac{\Omega_R^4}{8\Lambda^3} \sin(\Lambda t) \cos(\Lambda t) - \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^3} \sin(\Lambda t) \\ &= -\frac{\Omega_R^2}{8\Lambda^3} \sin(\Lambda t) (\Omega_R^2 \cos(\Lambda t) + \Omega_R'^2). \end{aligned} \quad (5.146)$$

Η δεύτερη παράγωγος της $|C_1(t)|^2$ είναι

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} |C_1(t)|^2 &= -\frac{\Omega_R^2}{8\Lambda^2} \cos(\Lambda t) (\Omega_R^2 \cos(\Lambda t) + \Omega_R'^2) + \frac{\Omega_R^4}{8\Lambda^2} \sin^2(\Lambda t) \\ &= \frac{\Omega_R^4}{8\Lambda^2} (\sin^2(\Lambda t) - \cos^2(\Lambda t)) - \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^2} \cos(\Lambda t). \end{aligned} \quad (5.147)$$

Από την Εξίσωση 5.146 προκύπτει ότι υπάρχουν δύο ενδεχόμενα να έχουμε ακρότατο:

1. Όταν $\cos(\Lambda t) = -\frac{\Omega_R'^2}{\Omega_R^2}$. Προσοχή: στην περίπτωση αυτή, θα πρέπει $\Omega_R'^2 \leq \Omega_R^2$. Τότε η Εξίσωση 5.147 γίνεται

$$\frac{d^2}{dt^2}|C_1(t)|^2 = \frac{\Omega_R'^4}{8\Lambda^2} \left(\sin^2(\Lambda t) - \frac{\Omega_R'^4}{\Omega_R^4} \right) + \frac{\Omega_R'^4}{8\Lambda^2} = \frac{\Omega_R'^4}{8\Lambda^2} \sin^2(\Lambda t) > 0.$$

Πρόκειται δηλαδή για ελάχιστο. Μάλιστα αντικαθιστώντας την τιμή $\cos(\Lambda t) = -\frac{\Omega_R'^2}{\Omega_R^2}$ στην Εξίσωση 5.144, μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε ότι τότε $|C_1| = 0$. Επιπλέον, σε μια περίοδο $T_1 = \frac{2\pi}{\Lambda}$, θα υπάρχουν δύο φορές στις οποίες θα έχουμε $\cos(\Lambda t) = -\frac{\Omega_R'^2}{\Omega_R^2}$, δηλαδή θα έχουμε δύο μηδενισμούς σε μια περίοδο T_1 . Συνεπώς, στην περίπτωση αυτή, το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως από τη στάθμη 1 είναι

$$\boxed{\mathcal{A}_1 = 1} \quad (5.148)$$

2. Όταν $\sin(\Lambda t) = 0$, συνεπώς $\cos(\Lambda t) = \pm 1$. Έχουμε δηλαδή δύο υποπεριπτώσεις:

- (α) $\sin(\Lambda t) = 0$ και $\cos(\Lambda t) = 1$. Συνεπώς, $\Lambda t = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$. Βρισκόμαστε δηλαδή σε ακέραια πολλαπλάσια της περιόδου T_1 . Τότε η Εξίσωση 5.147 γίνεται

$$\frac{d^2}{dt^2}|C_1(t)|^2 = -\frac{\Omega_R'^4}{8\Lambda^2} - \frac{\Omega_R^2\Omega_R'^2}{8\Lambda^2} < 0.$$

Πρόκειται δηλαδή για μέγιστο. Όμως, όπως είδαμε και παραπάνω, μετά από μια πλήρη περίοδο, $|C_1(t)|^2 = 1$. Άρα, έχουμε ολικό μέγιστο.

- (β) $\sin(\Lambda t) = 0$ και $\cos(\Lambda t) = -1$. Συνεπώς, $\Lambda t = \pi, 3\pi, 5\pi \dots$. Βρισκόμαστε δηλαδή σε ημιακέραια πολλαπλάσια της περιόδου T_1 . Τότε η Εξίσωση 5.147 γίνεται

$$\frac{d^2}{dt^2}|C_1(t)|^2 = -\frac{\Omega_R'^4}{8\Lambda^2} + \frac{\Omega_R^2\Omega_R'^2}{8\Lambda^2} = \frac{\Omega_R^2}{8\Lambda^2}(\Omega_R'^2 - \Omega_R^2) > 0.$$

Πρόκειται δηλαδή για ελάχιστο. Όπως είδαμε και παραπάνω, μετά από το ήμισυ μιας περιόδου, $|C_1(t)|^2 = \frac{(\Omega_R^2 - \Omega_R'^2)^2}{(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^2}$. Συνεπώς, στην περίπτωση αυτή, το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως από τη στάθμη 1 είναι

$$\boxed{\mathcal{A}_1 = 1 - \frac{(\Omega_R^2 - \Omega_R'^2)^2}{(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^2} = \frac{4\Omega_R^2\Omega_R'^2}{(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^2}} \quad (5.149)$$

- * Στην περίπτωση όπου $\Omega_R = \Omega_R'$, έχουμε $\Lambda = \frac{\sqrt{2}\Omega_R}{2}$ και

$$\boxed{T_1 = \sqrt{2} \frac{2\pi}{\Omega_R}} \quad (5.150)$$

Δηλαδή, η περίοδος της ταλαντώσεως είναι ίση με $\sqrt{2}$ φορές την περίοδο του αντίστοιχου δισταθμικού συστήματος (βλ. Εξίσωση 5.72). Επιπλέον, τότε, οι παραπάνω περιπτώσεις 1. και 2. ταυτίζονται και το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως από τη στάθμη 1 είναι $\mathcal{A}_1 = 1$. Επίσης, η έκφραση για τη χρονική

εξέλιξη της πιθανότητας $|C_1(t)|^2$ φτάνει στην απλούστερη μορφή

$$\begin{aligned} |C_1(t)|^2 &= \frac{1}{8} \left(\cos(\sqrt{2}\Omega_R t) + 1 \right) + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R t}{2}\right) \\ &= \frac{1}{4} \cos^2\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R t}{2}\right) + \frac{1}{4} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R t}{2}\right) = \left(\frac{1}{2} \cos\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R t}{2}\right) + \frac{1}{2} \right)^2 \\ |C_1(t)|^2 &= \cos^4\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R t}{4}\right). \end{aligned} \quad (5.151)$$

• Για τη στάθμη 2, από την Εξ. 5.143 έχουμε

$$|C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4\Lambda^2} \sin^2(\Lambda t) \Rightarrow$$

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{8\Lambda^2} - \frac{\Omega_R^2}{8\Lambda^2} \cos(2\Lambda t) \quad (5.152)$$

Βλέπουμε ότι στην παραπάνω εξίσωση εμπλέκεται μια περίοδος, η

$$T_2 = \frac{2\pi}{2\Lambda} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Omega_R'^2}}. \quad (5.153)$$

Συνεπώς, η πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου στη στάθμη 2 θα είναι περιοδική συνάρτηση, με περίοδο T_2 . Επίσης, το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως στη στάθμη 2 θα είναι

$$\mathcal{A}_2 = \frac{\Omega_R^2}{4\Lambda^2} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Omega_R'^2} \quad (5.154)$$

Στην περίπτωση όπου $\Omega_R = \Omega'_R$, έχουμε $\Lambda = \frac{\sqrt{2}\Omega_R}{2}$ και $T_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2\pi}{\Omega_R}$. Δηλαδή, η περίοδος της ταλαντώσεως είναι ίση με $1/\sqrt{2}$ φορές την περίοδο του αντίστοιχου δισταθμικού συστήματος (βλ. Εξίσωση 5.72). Επιπλέον, το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως στη στάθμη 2 είναι $\mathcal{A}_2 = \frac{1}{2}$. Επίσης, η έκφραση για τη χρονική εξέλιξη της πιθανότητας $|C_2(t)|^2$ φτάνει στην απλούστερη μορφή

$$\begin{aligned} |C_2(t)|^2 &= \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \cos(\sqrt{2}\Omega_R t) \Rightarrow \\ |C_2(t)|^2 &= \frac{1}{2} \sin^2\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R t}{2}\right). \end{aligned} \quad (5.155)$$

• Για τη στάθμη 3, από την Εξ. 5.143 έχουμε

$$|C_3(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{16\Lambda^4} \cos^2(\Lambda t) + \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{16\Lambda^4} - \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \cos(\Lambda t) \Rightarrow$$

$$P_3(t) = |C_3(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{32\Lambda^4} (\cos(2\Lambda t) + 1) + \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{16\Lambda^4} - \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \cos(\Lambda t) \quad (5.156)$$

Βλέπουμε ότι στην παραπάνω εξίσωση εμπλέκονται δύο περίοδοι, οι $T_1 = \frac{2\pi}{\Lambda}$ και $T_2 = \frac{2\pi}{2\Lambda}$. Εφόσον ο λόγος των δύο περιόδων είναι ρητός αριθμός και συγκεκριμένα $\frac{T_1}{T_2} = 2$, πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου στη στάθμη 3 θα είναι περιοδική συνάρτηση, με περίοδο

$$T_1 = \frac{2\pi}{\Lambda} = \frac{4\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Omega'_R{}^2}} = 2T_2 \quad (5.157)$$

Ας διερευνήσουμε περαιτέρω την Εξίσωση 5.156.

* Μετά από μια πλήρη περίοδο, δηλαδή για $t = T_1 = \frac{2\pi}{\Lambda}$,

$$\begin{aligned} \left| C_3 \left(\frac{2\pi}{\Lambda} \right) \right|^2 &= \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{32\Lambda^4} (\cos(4\pi) + 1) + \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{16\Lambda^4} - \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^4} \cos(2\pi) \\ &= \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{16\Lambda^4} - \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^4} = 0, \end{aligned}$$

πράγμα αναμενόμενο, καθώς με την εκτέλεση μιας περιόδου, η πιθανότητα θα επανέλθει στην τιμή που θέσαμε αρχικά, ήτοι $|C_3(0)|^2 = 0$.

* Στο ήμισυ της περιόδου, δηλαδή για $t = T_2 = \frac{2\pi}{2\Lambda}$,

$$\begin{aligned} \left| C_3 \left(\frac{2\pi}{2\Lambda} \right) \right|^2 &= \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{32\Lambda^4} (\cos(2\pi) + 1) + \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{16\Lambda^4} - \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^4} \cos(\pi) \\ &= \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{16\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^4} = \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{4\Lambda^4} = \frac{4\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{(\Omega_R^2 + \Omega'_R{}^2)^2}. \end{aligned}$$

* Η πρώτη παράγωγος της $|C_3(t)|^2$ είναι

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |C_3(t)|^2 &= -\frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{16\Lambda^3} \sin(2\Lambda t) + \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^3} \sin(\Lambda t) \\ &= -\frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^3} \sin(\Lambda t) \cos(\Lambda t) + \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^3} \sin(\Lambda t) = \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^3} \sin(\Lambda t) (1 - \cos(\Lambda t)). \end{aligned} \quad (5.158)$$

Η δεύτερη παράγωγος της $|C_3(t)|^2$ είναι

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2} |C_3(t)|^2 &= \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^2} \cos(\Lambda t) (1 - \cos(\Lambda t)) + \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^2} \sin^2(\Lambda t) \\ &= \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^2} [\cos(\Lambda t) - \cos^2(\Lambda t) + \sin^2(\Lambda t)] = \frac{\Omega_R^2 \Omega'_R{}^2}{8\Lambda^2} [\cos(\Lambda t) - \cos(2\Lambda t)]. \end{aligned} \quad (5.159)$$

Από την Εξίσωση 5.158 προκύπτει ότι υπάρχουν δύο ενδεχόμενα να έχουμε ακρότατο:

1. $\sin(\Lambda t) = 0$. Αυτό σημαίνει ότι $\cos(\Lambda t) = \pm 1$. Διακρίνονται, δηλαδή, δύο υποπεριπτώσεις:

- (α) $\cos(\Lambda t) = 1$. Συνεπώς, $\Lambda t = 0, 2\pi, 4\pi, \dots$. Βρισκόμαστε δηλαδή σε ακέραια πολλαπλάσια της περιόδου T_1 . Τότε η Εξίσωση 5.159 γίνεται

$$\frac{d^2}{dt^2} |C_3(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^2} [1 - 1] = 0.$$

Συνεπώς, η δεύτερη παράγωγος δεν μας δίνει επιπλέον πληροφορία για το ακρότατο. Ωστόσο, έχουμε ήδη δει ότι μετά από μια πλήρη περίοδο, άρα και στα ακέραια πολλαπλάσιά της, προκύπτει $|C_3(t)|^2 = 0$. Δεδομένου ότι πρόκειται για μια συνάρτηση που περιγράφει πιθανότητα, η τιμή αυτή είναι ολικό ελάχιστο. Ας το επαληθεύσουμε αναπτύσσοντας την πρώτη παράγωγο γύρω από τα όρια $\Lambda t = 0 \pm \epsilon$, όπου ϵ απειροστά μικρή θετική ποσότητα:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} |C_3\left(\frac{\epsilon}{\Lambda}\right)|^2 &\approx \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^3} \epsilon \left[1 - \left(1 - \frac{\epsilon^2}{2} \right) \right] = \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^3} \frac{\epsilon^3}{3} > 0 \\ \frac{d}{dt} |C_3\left(-\frac{\epsilon}{\Lambda}\right)|^2 &\approx \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^3} (-\epsilon) \left[1 - \left(1 - \frac{\epsilon^2}{2} \right) \right] = -\frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^3} \frac{\epsilon^3}{3} < 0. \end{aligned}$$

Άρα, πρόκειται πράγματι για ελάχιστο.

- (β) $\cos(\Lambda t) = -1$. Συνεπώς, $\Lambda t = \pi, 3\pi, 5\pi \dots$. Βρισκόμαστε δηλαδή σε ημιακέραια πολλαπλάσια της περιόδου T_1 . Τότε η Εξίσωση 5.159 γίνεται

$$\frac{d^2}{dt^2} |C_3(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{8\Lambda^2} (-1 - 1) = -\frac{\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{4\Lambda^2} < 0.$$

Άρα, πρόκειται για τοπικό μέγιστο. Όπως είδαμε και παραπάνω, μετά από το ήμισυ μιας περιόδου, $|C_3(t)|^2 = \frac{4\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^2}$. Συνεπώς, στην περίπτωση αυτή, το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως στη στάθμη 3 είναι

$$\mathcal{A}_3 = \frac{4\Omega_R^2 \Omega_R'^2}{(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^2} \quad (5.160)$$

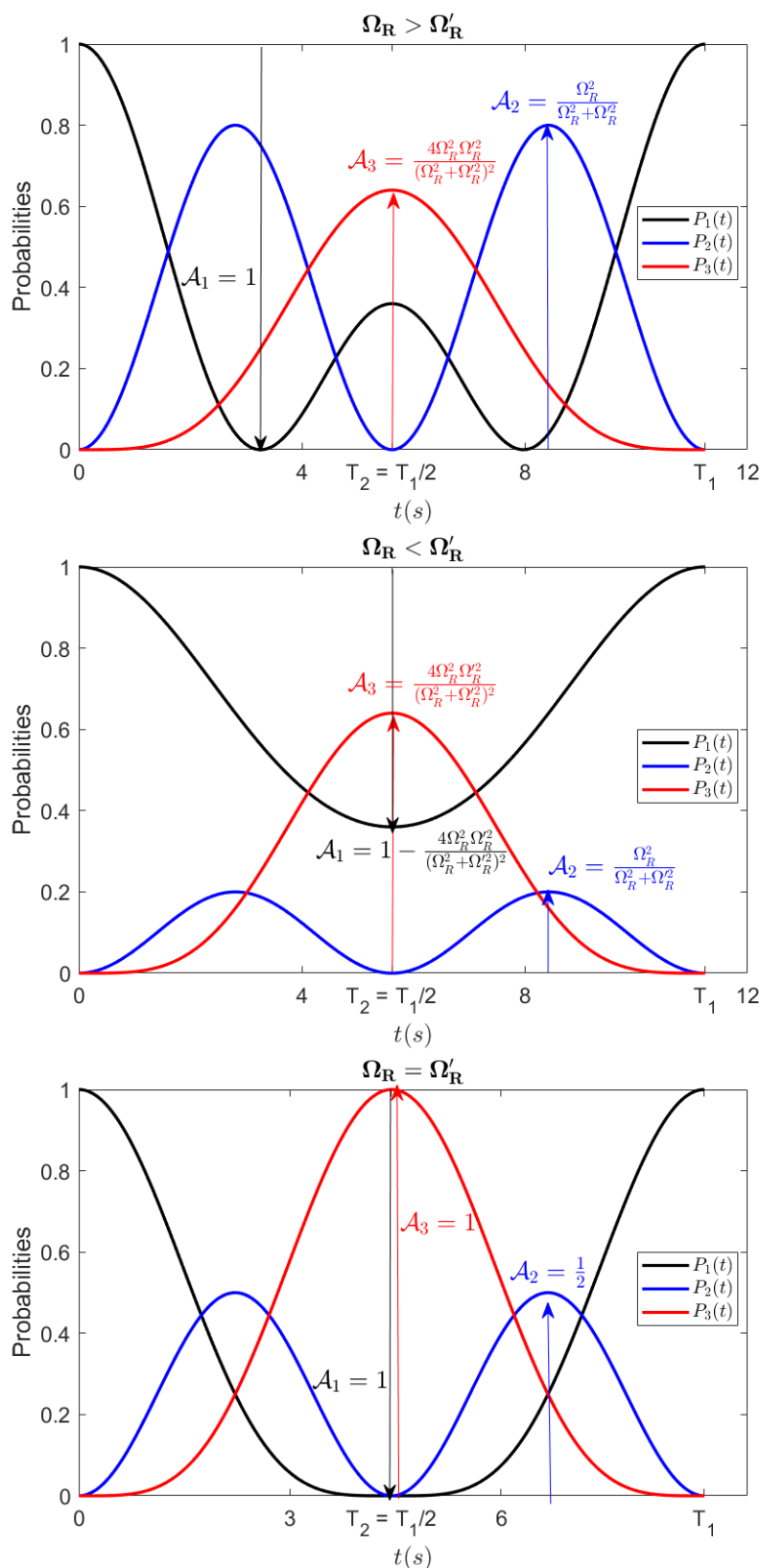
2. $\cos(\Lambda t) = 1$. Συνεπώς, $\sin(\Lambda t) = 0$. Άρα, μεταπίπτουμε στην περίπτωση 1(α).

- * Στην περίπτωση όπου $\Omega_R = \Omega_R'$, έχουμε $\Lambda = \frac{\sqrt{2}\Omega_R}{2}$ και

$$T_1 = \sqrt{2} \frac{2\pi}{\Omega_R} \quad (5.161)$$

Δηλαδή, η περίοδος της ταλαντώσεως είναι ίση με $\sqrt{2}$ φορές την περίοδο του αντίστοιχου δισταθμικού συστήματος (βλ. Εξίσωση 5.72). Επιπλέον, τότε, το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως στη στάθμη 3 είναι $\mathcal{A}_3 = 1$. Επίσης, η έκφραση για τη χρονική εξέλιξη της πιθανότητας $|C_3(t)|^2$ φτάνει στην απλούστερη μορφή

$$\begin{aligned} |C_3(t)|^2 &= \frac{1}{8} \left(\cos(\sqrt{2}\Omega_R t) + 1 \right) + \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R}{2} t\right) \\ &= \frac{1}{4} \cos^2\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R}{2} t\right) + \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R}{2} t\right) = \left(\frac{1}{2} \cos\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R}{2} t\right) - \frac{1}{2} \right)^2 \\ |C_3(t)|^2 &= \sin^4\left(\frac{\sqrt{2}\Omega_R}{4} t\right). \end{aligned} \quad (5.162)$$



Εικόνα 5.10: Ταλαντώσεις τρισταθμικού συστήματος σε συντονισμό, δηλαδή με $\omega = \Omega \Leftrightarrow \Delta = 0$, για $\Omega_R > \Omega'_R$ (άνω), $\Omega_R < \Omega'_R$ (μέση) και $\Omega_R = \Omega'_R$ (κάτω). Τυπικά, χωρίς να έχουμε στο μυαλό μας κάποιο συγκεκριμένο σύστημα, θέσαμε στην άνω εικόνα $\Omega_R = 1 \text{ s}^{-1}$ και $\Omega'_R = 0.5 \text{ s}^{-1}$, στη μεσαία εικόνα $\Omega_R = 0.5 \text{ s}^{-1}$ και $\Omega'_R = 1 \text{ s}^{-1}$ και στην κάτω εικόνα $\Omega_R = \Omega'_R = 1 \text{ s}^{-1}$.

Τα παραπάνω συμπεράσματα συνοψίζονται στην Εικόνα 5.10, όπου παρουσιάζονται οι ταλαντώσεις τρι-σταθμικού συστήματος σε συντονισμό.

Ο μέγιστος ρυθμός μεταβιβάσεως από τη στάθμη 1 στη στάθμη 3 θα είναι

$$\frac{\mathcal{A}_3}{T_1} = \frac{4\Omega_R^2\Omega_R'^2}{(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^2} \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Omega_R'^2}}{4\pi} = \frac{\Omega_R^2\Omega_R'^2}{\pi(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^{\frac{3}{2}}}. \quad (5.163)$$

Η μέση (χρονικά) τιμή της πιθανότητας ευρέσεως του ηλεκτρονίου σε κάθε στάθμη είναι

$$\begin{aligned} \langle |C_1(t)|^2 \rangle &= \frac{\Omega_R^4}{32\Lambda^4} + \frac{\Omega_R'^4}{16\Lambda^4} = \frac{\Omega_R^4 + 2\Omega_R'^4}{32\Lambda^4} \\ \langle |C_2(t)|^2 \rangle &= \frac{\Omega_R^2}{8\Lambda^2} \\ \langle |C_3(t)|^2 \rangle &= \frac{\Omega_R^2\Omega_R'^2}{32\Lambda^4} + \frac{\Omega_R^2\Omega_R'^2}{16\Lambda^4} = \frac{3\Omega_R^2\Omega_R'^2}{32\Lambda^4} \end{aligned} \quad (5.164)$$

Ο χρόνος $t_{3\text{mean}}$, δηλαδή το χρονικό διάστημα που απαιτείται ώστε η πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη να γίνει, για πρώτη φορά, ίση με τη μέση της τιμή, βρίσκεται από τη σχέση

$$\begin{aligned} \frac{3\Omega_R^2\Omega_R'^2}{32\Lambda^4} &= \frac{\Omega_R^2\Omega_R'^2}{32\Lambda^4} (\cos(2\Lambda t_{3\text{mean}}) + 1) + \frac{\Omega_R^2\Omega_R'^2}{16\Lambda^4} - \frac{\Omega_R^2\Omega_R'^2}{8\Lambda^4} \cos(\Lambda t_{3\text{mean}}) \Rightarrow \\ \frac{3}{32} &= \frac{1}{32} (\cos(2\Lambda t_{3\text{mean}}) + 1) + \frac{1}{16} - \frac{1}{8} \cos(\Lambda t_{3\text{mean}}) \Rightarrow \\ \frac{3}{4} &= \frac{1}{4} (\cos(2\Lambda t_{3\text{mean}}) + 1) + \frac{1}{2} - \cos(\Lambda t_{3\text{mean}}) \Rightarrow \\ \frac{3}{4} &= \frac{1}{2} \cos^2(\Lambda t_{3\text{mean}}) + \frac{1}{2} - \cos(\Lambda t_{3\text{mean}}) \Rightarrow \\ \frac{3}{2} &= \cos^2(\Lambda t_{3\text{mean}}) + 1 - 2 \cos(\Lambda t_{3\text{mean}}) \Rightarrow \\ 0 &= \cos^2(\Lambda t_{3\text{mean}}) - 2 \cos(\Lambda t_{3\text{mean}}) - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Καταλήξαμε δηλαδή σε μια δευτεροβάθμια εξίσωση ως προς τη μεταβλητή $\cos(\Lambda t_{3\text{mean}})$. Οι ρίζες της είναι

$$\cos(\Lambda t_{3\text{mean}}) = 1 \pm \sqrt{\frac{3}{2}}. \quad (5.165)$$

Η ρίζα $1 + \sqrt{\frac{3}{2}} > 1$ απορρίπτεται. Συνεπώς,

$$\begin{aligned} \cos(\Lambda t_{3\text{mean}}) &= 1 - \sqrt{\frac{3}{2}} \Rightarrow \Lambda t_{3\text{mean}} = \arccos\left(1 - \sqrt{\frac{3}{2}}\right) = 1.797478 \Rightarrow \\ t_{3\text{mean}} &\cong \frac{1.797478}{\Lambda}. \end{aligned} \quad (5.166)$$

Οπότε, ο μέσος ρυθμός μεταβιβάσεως από τη στάθμη 1 στη στάθμη 3, θα είναι

$$k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle |C_3(t)|^2 \rangle}{t_{3\text{mean}}} = \frac{3\Omega_R^2\Omega_R'^2}{32\Lambda^3 \times 1.797478} = \frac{3\Omega_R^2\Omega_R'^2}{4(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^{\frac{3}{2}} \times 1.797478}. \quad (5.167)$$

Τέλος, ο λόγος του μέσου προς τον μέγιστο ρυθμό μεταβιβάσεως είναι

$$\frac{k}{\frac{\mathcal{A}_3}{T_1}} = \frac{3\Omega_R^2\Omega_R'^2}{4(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^{\frac{3}{2}} \times 1.797478} \frac{\pi(\Omega_R^2 + \Omega_R'^2)^{\frac{3}{2}}}{\Omega_R^2\Omega_R'^2} = \frac{3\pi}{4 \times 1.797478}. \quad (5.168)$$

Συνεπώς, οι δύο ρυθμοί συνδέονται μέσω της σχέσεως

$$k \approx 1.31083 \frac{\mathcal{A}_3}{T_1}. \quad (5.169)$$

✓ Έστωσαν αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 0$, $C_2(0) = 0$ και $C_3(0) = 1$. Άρα, για $t = 0$, το σύστημα εξισώσεων 5.142 γίνεται

$$\left. \begin{aligned} 0 &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} + c_2 \frac{\Omega_R'}{2\Lambda} + \frac{c_3}{\sqrt{2}} \frac{\Omega_R}{2\Lambda} \\ 0 &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} - \frac{c_3}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 = c_3 := c \\ 1 &= \frac{c_1}{\sqrt{2}} \frac{\Omega_R'}{2\Lambda} - c_2 \frac{\Omega_R}{2\Lambda} + \frac{c_3}{\sqrt{2}} \frac{\Omega_R'}{2\Lambda} \end{aligned} \right\}$$

Αντικαθιστώντας τη συνθήκη που προκύπτει από τη δεύτερη εξίσωση του συστήματος στην πρώτη εξίσωση, λαμβάνουμε

$$c_2 = -c\sqrt{2} \frac{\Omega_R}{\Omega_R'}.$$

Αντικαθιστώντας τώρα στην τρίτη εξίσωση του συστήματος, λαμβάνουμε

$$2\Lambda = c \frac{\Omega_R'}{\sqrt{2}} + c\sqrt{2} \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R'} + c \frac{\Omega_R'}{\sqrt{2}} = c \frac{2\Omega_R^2 + 2\Omega_R'^2}{\sqrt{2}\Omega_R'} \Rightarrow c = \frac{\sqrt{2}\Omega_R'\Lambda}{\Omega_R^2 + \Omega_R'^2} = \frac{\sqrt{2}\Omega_R'}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Omega_R'^2}} = \frac{\Omega_R'}{2\sqrt{2}\Lambda}.$$

Οπότε, τελικά το σύστημα εξισώσεων 5.142 φτάνει στη μορφή

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \\ C_3(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R\Omega_R'}{8\Lambda^2} e^{i\Lambda t} - \frac{\Omega_R\Omega_R'}{4\Lambda^2} + \frac{\Omega_R\Omega_R'}{8\Lambda^2} e^{-i\Lambda t} \\ \frac{\Omega_R'}{4\Lambda} e^{i\Lambda t} - \frac{\Omega_R'}{4\Lambda} e^{-i\Lambda t} \\ \frac{\Omega_R'^2}{8\Lambda^2} e^{i\Lambda t} + \frac{\Omega_R^2}{4\Lambda^2} + \frac{\Omega_R'^2}{8\Lambda^2} e^{-i\Lambda t} \end{bmatrix} \Rightarrow \\ \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \\ C_3(t) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{\Omega_R\Omega_R'}{4\Lambda^2} \cos(\Lambda t) - \frac{\Omega_R\Omega_R'}{4\Lambda^2} \\ i \frac{\Omega_R'}{2\Lambda} \sin(\Lambda t) \\ \frac{\Omega_R^2}{4\Lambda^2} \cos(\Lambda t) + \frac{\Omega_R^2}{4\Lambda^2} \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.170)$$

Συγκρίνοντας την Εξίσωση 5.170 με την 5.143, η οποία προέκυψε για αρχική συνθήκη τοποθέτησης του ηλεκτρονίου στην κάτω στάθμη, παρατηρούμε ότι ο μετασχηματισμός $C(t) \leftrightarrow C_3(t)$, $\Omega_R \leftrightarrow \Omega_R'$ οδηγεί στο ίδιο ακριβώς σύστημα εξισώσεων. Συνεπώς, η παραπάνω συζήτηση θα ισχύει και για αυτήν την αρχική συνθήκη, αν θεωρήσουμε τον προαναφερθέντα μετασχηματισμό.

• ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$

Στην περίπτωση του αποσυντονισμού, ο πίνακας A έχει τη μορφή

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega'_R}{2} \\ 0 & -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{3\Delta}{2} \end{bmatrix} \quad (5.171)$$

Για τη διευκόλυνση των υπολογισμών, θα λύσουμε το πρόβλημα στην ειδική περίπτωση

$$\Omega_R = \Omega'_R = \Delta := 2\beta.$$

Έτσι, στην περίπτωση αυτή έχουμε τον πίνακα

$$A = \beta \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -3 \end{bmatrix}. \quad (5.172)$$

Οι ιδιοτιμές του προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της ορίζουσας

$$\det(A - \lambda I),$$

όπου I ο μοναδιαίος 3×3 πίνακας. Συνεπώς,

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) = 0 &\Rightarrow (\beta - \lambda) \begin{vmatrix} -\beta - \lambda & -\beta \\ -\beta & -3\beta - \lambda \end{vmatrix} + \beta \begin{vmatrix} -\beta & 0 \\ -\beta & -3\beta - \lambda \end{vmatrix} = 0 \\ &\Rightarrow (\beta - \lambda) [(\beta + \lambda)(3\beta + \lambda) - \beta^2] + \beta^2(3\beta + \lambda) = 0 \\ &\Rightarrow -\lambda^3 - 3\beta\lambda^2 + 3\beta\lambda^2 + 5\beta^3 = 0. \end{aligned}$$

Μπορούμε να επαληθεύσουμε ότι η τιμή $\lambda = -\beta$ ικανοποιεί την παραπάνω σχέση. Συνεπώς, οι υπόλοιπες ιδιοτιμές προκύπτουν από το πηλίκο της διαίρεσης του πολωνύμου του αριστερού μέλους της παραπάνω σχέσης με $\lambda + \beta$, ήτοι

$$\begin{array}{r} \ominus \begin{array}{cccc|c} -\lambda^3 & -3\beta\lambda^2 & +3\beta\lambda^2 & +5\beta^3 & \lambda + \beta \\ \hline -\lambda^3 & -\beta\lambda^2 & & & -\lambda^2 - 2\beta\lambda + 5\beta^2 \\ \hline & -2\beta\lambda^2 & +3\beta^2\lambda & +5\beta^3 & \\ \ominus & \hline & -2\beta\lambda^2 & -2\beta^2\lambda & & \\ \hline & & 5\beta\lambda^2 & +5\beta^3 & \\ \ominus & & \hline & 5\beta\lambda^2 & +5\beta^3 & & \\ \hline & & & & 0 & \end{array} \end{array}$$

Οπότε, η συνθήκη μηδενισμού της ορίζουσας γίνεται

$$(\lambda + \beta)(\lambda^2 + 2\beta\lambda - 5\beta^2) = 0$$

και οι ιδιοτιμές προκύπτουν

$$\boxed{\lambda_1 = -\beta(1 + \sqrt{6}), \quad \lambda_2 = -\beta(1 - \sqrt{6}), \quad \lambda_3 = -\beta}. \quad (5.173)$$

Ας βρούμε τώρα τα ιδιοανύσματα του A.

Για $\lambda_1 = -\beta(1 + \sqrt{6})$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \\ v_{31} \end{bmatrix} = -(1 + \sqrt{6}) \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \\ v_{31} \end{bmatrix} &\Rightarrow \left. \begin{aligned} v_{11} - v_{21} &= -(1 + \sqrt{6})v_{11} \\ -v_{11} - v_{21} - v_{31} &= -(1 + \sqrt{6})v_{21} \\ -v_{21} - 3v_{31} &= -(1 + \sqrt{6})v_{31} \end{aligned} \right\} \\ \Rightarrow \left. \begin{aligned} v_{21} &= (2 + \sqrt{6})v_{11} \\ v_{11} + v_{31} &= \sqrt{6}v_{21} \\ v_{21} &= -(2 - \sqrt{6})v_{31} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} v_{31} &= -\frac{2 + \sqrt{6}}{2 - \sqrt{6}}v_{11} \\ v_{21} &= (2 + \sqrt{6})v_{11} \end{aligned} \right\}. \end{aligned}$$

Συνεπώς,

$$\vec{v}_1 = v_{11} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 + \sqrt{6} \\ -\frac{2 + \sqrt{6}}{2 - \sqrt{6}} \end{bmatrix}.$$

Για να είναι το \vec{v}_1 κανονικοποιημένο, θα πρέπει

$$|\vec{v}_1|^2 = 1.$$

Οπότε, π.χ. $v_{11} = \frac{2 - \sqrt{6}}{2\sqrt{6}}$. Άρα,

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 - \sqrt{6} \\ -2 \\ -(2 + \sqrt{6}) \end{bmatrix}. \quad (5.174)$$

Για $\lambda_2 = -\beta(1 - \sqrt{6})$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \\ v_{32} \end{bmatrix} = -(1 - \sqrt{6}) \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \\ v_{32} \end{bmatrix} &\Rightarrow \left. \begin{aligned} v_{12} - v_{22} &= -(1 - \sqrt{6})v_{12} \\ -v_{12} - v_{22} - v_{32} &= -(1 - \sqrt{6})v_{22} \\ -v_{22} - 3v_{32} &= -(1 - \sqrt{6})v_{32} \end{aligned} \right\} \\ \Rightarrow \left. \begin{aligned} v_{22} &= (2 - \sqrt{6})v_{12} \\ v_{12} + v_{32} &= -\sqrt{6}v_{22} \\ v_{22} &= -(2 + \sqrt{6})v_{32} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} v_{32} &= -\frac{2 - \sqrt{6}}{2 + \sqrt{6}}v_{12} \\ v_{22} &= (2 - \sqrt{6})v_{12} \end{aligned} \right\}. \end{aligned}$$

Συνεπώς,

$$\vec{v}_2 = v_{12} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 - \sqrt{6} \\ -\frac{2 - \sqrt{6}}{2 + \sqrt{6}} \end{bmatrix}.$$

Για να είναι το \vec{v}_2 κανονικοποιημένο, θα πρέπει

$$|\vec{v}_2|^2 = 1.$$

Οπότε, π.χ. $v_{12} = \frac{2+\sqrt{6}}{2\sqrt{6}}$. Άρα,

$$\vec{v}_2 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 + \sqrt{6} \\ -2 \\ -(2 - \sqrt{6}) \end{bmatrix}. \quad (5.175)$$

Για $\lambda_3 = -\beta$

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{13} \\ v_{23} \\ v_{33} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} v_{13} \\ v_{23} \\ v_{33} \end{bmatrix} &\Rightarrow \begin{cases} v_{13} - v_{23} = -v_{13} \\ -v_{13} - v_{23} - v_{33} = -v_{23} \\ -v_{23} - 3v_{33} = -v_{33} \end{cases} \\ \Rightarrow \begin{cases} v_{23} = 2v_{13} \\ v_{33} = -v_{13}v_{23} = -2v_{33} \end{cases} & \end{aligned}$$

Συνεπώς,

$$\vec{v}_3 = v_{13} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Για να είναι το \vec{v}_3 κανονικοποιημένο, θα πρέπει

$$|\vec{v}_3|^2 = 1.$$

Οπότε, π.χ. $v_{13} = \frac{1}{\sqrt{6}}$. Άρα,

$$\vec{v}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} \quad (5.176)$$

Οπότε, η γενική λύση θα είναι

$$\begin{aligned} \vec{x}(t) &= \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \\ C_3(t) \end{bmatrix} = c_1 \vec{v}_1 e^{-i\lambda_1 t} + c_2 \vec{v}_2 e^{-i\lambda_2 t} + c_3 \vec{v}_3 e^{-i\lambda_3 t} \\ \begin{bmatrix} C_1(t) e^{-i\beta t} \\ C_2(t) e^{i\beta t} \\ C_3(t) e^{i3\beta t} \end{bmatrix} &= \frac{c_1}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 - \sqrt{6} \\ -2 \\ 2 + \sqrt{6} \end{bmatrix} e^{i\beta(1+\sqrt{6})t} + \frac{c_2}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2 + \sqrt{6} \\ -2 \\ 2 - \sqrt{6} \end{bmatrix} e^{i\beta(1-\sqrt{6})t} + \frac{c_3}{2\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} e^{i\beta t}. \quad (5.177) \end{aligned}$$

Όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις που εξετάσαμε, η επιβολή αρχικών συνθηκών καθορίζει τις τιμές των συντελεστών c_1, c_2, c_3 και συνεπώς τη χρονική εξέλιξη της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου σε κάθε στάθμη.

5.11 Πολυσταθμικό σύστημα με ισαπέχουσες στάθμες εντός της προσεγγίσεως περιστρεφόμενου κύματος

Σε αυτό το σημείο, θα λύσουμε το πρόβλημα του πολυσταθμικού συστήματος, δηλαδή με N στάθμες, στο πλαίσιο της RWA. Προκειμένου να απλουστευθεί το πρόβλημα και να είναι εφικτή η επίλυσή του, θα θεωρήσουμε ότι οι στάθμες του συστήματος είναι ισαπέχουσες. Το ίδιο κάναμε και στην προηγούμενη ενότητα,

όπου θεωρήσαμε σύστημα με ιδιοκαταστάσεις απλού αρμονικού ταλαντωτή, του οποίου οι ενεργειακές στάθμες ισαπέχουν. Από την Εξ. (5.33) έχουμε

$$\dot{C}_{k'}(t) = \frac{-i}{\hbar} \sum_k C_k(t) e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k)t} U_{\mathcal{E}k'k}(t) \quad (5.178)$$

όπου

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e^{\mathcal{E}_0 t} \cos \omega t \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}) \quad (5.179)$$

Η συντεταγμένη z έχει στοιχεία πίνακα

$$z_{k'k} := \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}). \quad (5.180)$$

Σημειώνουμε ότι, για $k = 1, 3, 5, \dots$, οι Φ_k είναι άρτιες, ενώ, για $k' = 2, 4, 6, \dots$, είναι περιττές. Επομένως, με αυτό ως δεδομένο και γνωρίζοντας ότι η συντεταγμένη z είναι μια περιττή συνάρτηση, ισχύουν τα παρακάτω:

- Για $k = k'$, $z_{k,k} = 0$ διότι

$$z_{k,k} = \int dV \underbrace{|\Phi_k(\vec{r})|^2}_{\text{Άρτια}} \underbrace{z}_{\text{Περιττή}} = 0. \quad (5.181)$$

- Για $k \neq k'$,

- * Αν π.χ. $k' = k - 1$, τότε $z_{k-1,k} \neq 0$. Αυτό συμβαίνει διότι, από τη σχέση

$$z_{k-1,k} = \int dV \Phi_{k-1}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}), \quad (5.182)$$

παρατηρούμε ότι αν $\Phi_{k-1}^*(\vec{r}) \rightarrow \text{ΑΡΤΙΑ}$, τότε $\Phi_k(\vec{r}) \rightarrow \text{ΠΕΡΙΤΤΗ}$, ενώ, αντίθετα, αν $\Phi_{k-1}^*(\vec{r}) \rightarrow \text{ΠΕΡΙΤΤΗ}$, τότε $\Phi_k(\vec{r}) \rightarrow \text{ΑΡΤΙΑ}$. Έτσι, είτε στη μία είτε στην άλλη περίπτωση, το αποτέλεσμα θα είναι ΑΡΤΙΟ \cdot ΠΕΡΙΤΤΟ \cdot ΠΕΡΙΤΤΟ ή ΠΕΡΙΤΤΟ \cdot ΠΕΡΙΤΤΟ \cdot ΑΡΤΙΟ και άρα διάφορο του μηδενός.

- * Με τον ίδιο τρόπο αποδεικνύεται ότι για $k' = k - 2$, $z_{k-2,k} = 0$ κ.ο.κ.

Άρα, συνοψίζοντας,

$$\begin{aligned} z_{k-1,k} &= z_{k,k-1} \neq 0 \\ z_{k-2,k} &= z_{k,k-2} = 0 \\ z_{k-3,k} &= z_{k,k-3} \neq 0 \\ z_{k-4,k} &= z_{k,k-4} = 0 \\ &\vdots \\ z_{k-(N-1),k} &= z_{k,k-(N-1)} \begin{cases} \neq 0, & \text{για } N = \text{άρτιο}, \\ = 0, & \text{για } N = \text{περιττό}. \end{cases} \end{aligned}$$

Δεδομένου ότι τα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής μπορούν να γραφούν ως (βλ. Εξ. 5.46)

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = -\mathcal{P}_{z_{k'k}} \mathcal{E}_0 \cos \omega t = -\mathcal{P}_{z_{k'k}} \mathcal{E}_0 \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}, \quad (5.183)$$

η Εξ. (5.178) γίνεται

$$\dot{C}_{k'}(t) = \frac{i}{2\hbar} \sum_k \mathcal{E}_0 \mathcal{P}_{zk'k} C_k(t) \left(e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k + \omega)t} + e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k - \omega)t} \right).$$

Θεωρώντας ότι οι στάθμες είναι ισαπέχουσες, έχουμε $\Omega_{k'} - \Omega_k = (k' - k)\Omega$. Άρα,

$$\begin{aligned} \dot{C}_{k'}(t) &= \frac{i\mathcal{E}_0}{2\hbar} \sum_{k=1}^{k'} \mathcal{P}_{zk'k} C_k(t) \left(e^{i[(k'-k)\Omega + \omega]t} + e^{i[(k'-k)\Omega - \omega]t} \right) + \\ &\quad \frac{i\mathcal{E}_0}{2\hbar} \sum_{k=k'+1}^N \mathcal{P}_{zk'k} C_k(t) \left(e^{i[(k'-k)\Omega + \omega]t} + e^{i[(k'-k)\Omega - \omega]t} \right). \end{aligned}$$

Οι συντελεστές $k' - k$ εμφανίζονται στον Πίνακα.

$k \setminus k'$	1	2	3	4	...	N
1	0	1	2	3	...	$N - 1$
2	-1	0	1	2	...	$N - 2$
3	-2	-1	0	1	...	$N - 3$
4	-3	-2	-1	0	...	$N - 4$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
N	$-(N - 1)$	$-(N - 2)$	$-(N - 3)$	$-(N - 4)$...	0

Οι όροι που αντιστοιχούν σε αργές μεταβολές είναι, για $k' - k = -1$, το εκθετικό $e^{i[(k'-k)\Omega + \omega]t}$ και για $k' - k = 1$ το εκθετικό $e^{i[(k'-k)\Omega - \omega]t}$. Σε όλες τις άλλες περιπτώσεις, οι μεταβολές είναι γρήγορες, επομένως και μπορούμε να τις απαλείψουμε στο πλαίσιο της RWA. Έτσι, από τις N εξισώσεις που προκύπτουν, έχουμε για $k' = 1, k' = 2, 3, \dots, N - 1$ και $k' = N$, αντίστοιχα,

$$\begin{aligned} \dot{C}_1(t) &= \frac{i\mathcal{P}_{1,2}\mathcal{E}_0}{2\hbar} C_2(t) e^{i\Delta t} \\ \dot{C}_{k'}(t) &= \frac{i\mathcal{P}_{k',k'-1}\mathcal{E}_0}{2\hbar} C_{k'-1}(t) e^{-i\Delta t} + \frac{i\mathcal{P}_{k',k'+1}\mathcal{E}_0}{2\hbar} C_{k'+1}(t) e^{i\Delta t} \\ \dot{C}_N(t) &= \frac{i\mathcal{P}_{N,N-1}\mathcal{E}_0}{2\hbar} C_{N-1}(t) e^{-i\Delta t}, \end{aligned}$$

όπου $\Delta = \omega - \Omega$ είναι ο αποσυντονισμός (detuning). Εναλλακτικά, θέτοντας $\Omega_{Rk'k} = \frac{\mathcal{P}_{k'k}\mathcal{E}_0}{\hbar}$, οι παραπάνω εξισώσεις μπορούν να γραφούν ως

$$\dot{C}_1(t) = \frac{i\Omega_{R1,2}}{2} C_2(t) e^{i\Delta t}, \quad (5.184)$$

$$\dot{C}_{k'}(t) = \frac{i\Omega_{Rk',k'-1}}{2} C_{k'-1}(t) e^{-i\Delta t} + \frac{i\Omega_{Rk',k'+1}}{2} C_{k'+1}(t) e^{i\Delta t}, \quad (5.185)$$

$$\dot{C}_N(t) = \frac{i\Omega_{RN,N-1}}{2} C_{N-1}(t) e^{-i\Delta t}. \quad (5.186)$$

Οι εξισώσεις αυτές μπορούν να επιλυθούν με τη βοήθεια των παρακάτω μετασχηματισμών:

- Για άρτιο N ,

$$\begin{aligned} C_{k'}(t) &= \mathbf{C}_{k'}(t) e^{i((N+1)-2k')\frac{\Delta}{2}t} \Rightarrow \\ \dot{C}_{k'}(t) &= \dot{\mathbf{C}}_{k'}(t) e^{i((N+1)-2k')\frac{\Delta}{2}t} + i((N+1) - 2k')\frac{\Delta}{2} \mathbf{C}_{k'}(t) e^{i((N+1)-2k')\frac{\Delta}{2}t}. \end{aligned}$$

- Για περιττό N ,

$$\begin{aligned} C_{k'}(t) &= C_{k'}(t)e^{i(N-2k')\frac{\Delta}{2}t} \Rightarrow \\ \dot{C}_{k'}(t) &= \dot{C}_{k'}(t)e^{i(N-2k')\frac{\Delta}{2}t} + i(N-2k')\frac{\Delta}{2}C_{k'}(t)e^{i(N-2k')\frac{\Delta}{2}t}. \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τους μετασχηματισμούς, έχουμε

- Για άρτιο N ,

- * για $k' = 1$,

$$\dot{C}_1(t)e^{i(N-1)\frac{\Delta}{2}t} + i(N-1)\frac{\Delta}{2}C_1(t)e^{i(N-1)\frac{\Delta}{2}t} = \frac{i\Omega_{R1,2}}{2}C_2(t)e^{i(N-3)\frac{\Delta}{2}t}e^{i\Delta t} \Rightarrow$$

$$\boxed{\dot{C}_1(t) = -i(N-1)\frac{\Delta}{2}C_1(t) + \frac{i\Omega_{R1,2}}{2}C_2(t)} \quad (5.187)$$

- * για $k' = 2, 3, \dots, N-1$,

$$\begin{aligned} \dot{C}_{k'}(t)e^{i[(N+1)-2k']\frac{\Delta}{2}t} + i(N+1-2k')\frac{\Delta}{2}C_{k'}(t)e^{i[(N+1)-2k']\frac{\Delta}{2}t} &= \\ = \frac{i\Omega_{Rk',k'-1}}{2}C_{k'-1}(t)e^{i[(N+1)-2(k'-1)]\frac{\Delta}{2}t}e^{-i\Delta t} + \frac{i\Omega_{Rk',k'+1}}{2}C_{k'+1}(t)e^{i[(N+1)-2(k'+1)]\frac{\Delta}{2}t}e^{i\Delta t} &\Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\dot{C}_{k'}(t) = \frac{i\Omega_{Rk',k'-1}}{2}C_{k'-1}(t) - i(N+1-2k')\frac{\Delta}{2}C_{k'}(t) + \frac{i\Omega_{Rk',k'+1}}{2}C_{k'+1}(t)} \quad (5.188)$$

- * για $k' = N$,

$$\dot{C}_N(t)e^{i(1-N)\frac{\Delta}{2}t} + i(1-N)\frac{\Delta}{2}C_N(t)e^{i(1-N)\frac{\Delta}{2}t} = \frac{i\Omega_{RN,N-1}}{2}C_{N-1}(t)e^{i[(N+1)-2(N-1)]\frac{\Delta}{2}t}e^{-i\Delta t} \Rightarrow$$

$$\boxed{\dot{C}_N(t) = i(N-1)\frac{\Delta}{2}C_N(t) + \frac{i\Omega_{RN,N-1}}{2}C_{N-1}(t)} \quad (5.189)$$

- Για περιττό N ,

- * για $k' = 1$,

$$\dot{C}_1(t)e^{i(N-2)\frac{\Delta}{2}t} + i(N-2)\frac{\Delta}{2}C_1(t)e^{i(N-2)\frac{\Delta}{2}t} = \frac{i\Omega_{R1,2}}{2}C_2(t)e^{i(N-4)\frac{\Delta}{2}t}e^{i\Delta t} \Rightarrow$$

$$\boxed{\dot{C}_1(t) = -i(N-2)\frac{\Delta}{2}C_1(t) + \frac{i\Omega_{R1,2}}{2}C_2(t)} \quad (5.190)$$

- * για $k' = 2, 3, \dots, N-1$,

$$\begin{aligned} \dot{C}_{k'}(t)e^{i(N-2k')\frac{\Delta}{2}t} + i(N-2k')\frac{\Delta}{2}C_{k'}(t)e^{i(N-2k')\frac{\Delta}{2}t} &= \\ = \frac{i\Omega_{Rk',k'-1}}{2}C_{k'-1}(t)e^{i[N-2(k'-1)]\frac{\Delta}{2}t}e^{-i\Delta t} + \frac{i\Omega_{Rk',k'+1}}{2}C_{k'+1}(t)e^{i[N-2(k'+1)]\frac{\Delta}{2}t}e^{i\Delta t} &\Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\dot{C}_{k'}(t) = \frac{i\Omega_{Rk',k'-1}}{2}C_{k'-1}(t) - i(N-2k')\frac{\Delta}{2}C_{k'}(t) + \frac{i\Omega_{Rk',k'+1}}{2}C_{k'+1}(t)} \quad (5.191)$$

* για $k' = N$,

$$\dot{\mathbf{C}}_N(t)e^{-iN\frac{\Delta}{2}t} - iN\frac{\Delta}{2}\mathbf{C}_N(t)e^{-iN\frac{\Delta}{2}t} = \frac{i\Omega_{RN,N-1}}{2}\mathbf{C}_{N-1}(t)e^{i(N-2(N-1))\frac{\Delta}{2}t}e^{-i\Delta t} \Rightarrow$$

$$\boxed{\dot{\mathbf{C}}_N(t) = +iN\frac{\Delta}{2}\mathbf{C}_N(t) + \frac{i\Omega_{RN,N-1}}{2}\mathbf{C}_{N-1}(t)} \quad (5.192)$$

Συνεπώς, προκύπτουν τρεις διαφορετικές μορφές για κάθε περίπτωση (δηλαδή τρεις μορφές για άρτιο N και τρεις μορφές για περιττό N). Παρατηρούμε ότι σε αμφότερες τις περιπτώσεις έχουμε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης της μορφής

$$\begin{bmatrix} \dot{\mathbf{C}}_1(t) \\ \dot{\mathbf{C}}_2(t) \\ \dot{\mathbf{C}}_3(t) \\ \vdots \\ \dot{\mathbf{C}}_N(t) \end{bmatrix} = \tilde{A} \begin{bmatrix} \mathbf{C}_1(t) \\ \mathbf{C}_2(t) \\ \mathbf{C}_3(t) \\ \vdots \\ \mathbf{C}_N(t) \end{bmatrix}, \quad (5.193)$$

όπου

• για άρτιο N ,

$$\tilde{A} = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} -(N-1)\Delta & \Omega_{R1,2} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \Omega_{R1,2} & -(N-3)\Delta & \Omega_{R2,3} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \Omega_{Rk'-1,k'} & -(N+1-2k')\Delta & \Omega_{Rk',k'+1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & (N-1)\Delta \end{bmatrix},$$

• για περιττό N ,

$$\tilde{A} = \frac{i}{2} \begin{bmatrix} -(N-2)\Delta & \Omega_{R1,2} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \Omega_{R1,2} & -(N-4)\Delta & \Omega_{R2,3} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots & \vdots \\ \vdots & \dots & \Omega_{Rk'-1,k'} & -(N-2k')\Delta & \Omega_{Rk',k'+1} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & N\Delta \end{bmatrix}.$$

Με άλλα λόγια, σε αμφότερες τις περιπτώσεις έχουμε να λύσουμε ένα πρόβλημα της μορφής

$$\dot{\vec{x}}(t) = \tilde{A}\vec{x}(t) := -iA\vec{x}(t). \quad (5.194)$$

Δοκιμάζουμε λύσεις της μορφής $\vec{x}(t) = \vec{u}e^{\tilde{\lambda}t}$, με $\tilde{\lambda} = -i\lambda$. Άρα, καταλήγουμε ότι

$$\tilde{\lambda}\vec{u}e^{\tilde{\lambda}t} = \tilde{A}\vec{u}e^{\tilde{\lambda}t} \Rightarrow -i\lambda\vec{u} = -iA\vec{u} \Rightarrow$$

$$\boxed{A\vec{u} = \lambda\vec{u}}$$

Οπότε, για δεδομένο N , καταλήγουμε σε ένα πρόβλημα ιδιοτιμών - ιδιοδιανυσμάτων, η επίλυση του οποίου είναι εφικτή με τη μέθοδο που περιγράφηκε στις προηγούμενες ενότητες.

Βιβλιογραφία

- [1] Κ. Σιμσερίδης. *Κβαντική Οπτική και Lasers*. Αθήνα: Κάλλιπος, 2015. ISBN: 9789606030734. URL: <http://hdl.handle.net/11419/2108>.
- [2] Κ. Σιμσερίδης. *Σημειώσεις του μαθήματος Κβαντική Οπτική και Lasers*. Αθήνα: Τμήμα Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2021. URL: <https://eclass.uoa.gr/courses/PHYS107/>.
- [3] Λ. Χαλκοπιάδης. *Ταλαντώσεις Rabi σε δισταθμικό και πολυσταθμικό σύστημα με και χωρίς προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος*. Πτυχιακή Διπλωματική Εργασία. Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών. Επιβλέπων: Κ. Σιμσερίδης. 2021. URL: <https://pergamos.lib.uoa.gr/uoa/dl/object/2946058>.
- [4] C. Simserides. “A systematic study of electron or hole transfer along DNA dimers, trimers and polymers”. Στο: *Chemical Physics* 440 (2014), σσ. 31–41. DOI: [10.1016/j.chemphys.2014.05.024](https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2014.05.024).
- [5] P. Howard. *Solving ODE in MATLAB*. 2007.
- [6] Κ. Lambropoulos, Κ. Kaklamanis, G. Georgiadis και C. Simserides. “THz and above THz electron or hole oscillations in DNA dimers and trimers”. Στο: *Annalen der Physik (Berlin)* 526 (2014), σσ. 249–258. DOI: [10.1002/andp.201400067](https://doi.org/10.1002/andp.201400067).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

ΗΜΙΚΛΑΣΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ II

Σύνοψη

Συνεχίζουμε τη μελέτη των ταλαντώσεων Rabi με την ημικλασική προσέγγιση. Εδώ όμως εστιάζουμε σε αριθμητικές λύσεις. Επίσης, συγκρίνουμε τα αριθμητικά μας αποτελέσματα με προσεγγιστικές μεθόδους, όπως είναι η Προσέγγιση Περιστρεφόμενου Κύματος (ΠΠΚ), την οποία είδαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, και η Μέθοδος Επανισώσεως, 1ης και 2ης τάξεως. Επιλύουμε για διάφορες αρχικές συνθήκες είτε σε συντονισμό είτε σε αποσυντονισμό. Σχετικές αναφορές για περαιτέρω διάβασμα είναι οι: [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10].

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Κβαντικής Φυσικής και Μαθηματικών.

Σκοπός του κεφαλαίου είναι να λύσουμε το Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 1^{ης} Τάξεως (Εξ. 5.33) πέρα από την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (rotating wave approximation, RWA). Οι μέθοδοι, οι οποίες θα χρησιμοποιηθούν για να επιτευχθεί ο σκοπός αυτός, είναι η αριθμητική επίλυση (no RWA, NRWA) και η μέθοδος επανισώσεως (averaging method, AM). Το γραμμικό σύστημα θα λυθεί με δύο ενεργειακές στάθμες (ΔΣ) για τις περιπτώσεις του αποσυντονισμού και συντονισμού, με αρχικές συνθήκες:

1. $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$, τοποθετώντας στην αρχή του χρόνου το ηλεκτρόνιο στην κάτω στάθμη,
2. $C_1(0) = 0, C_2(0) = 1$, τοποθετώντας στην αρχή του χρόνου το ηλεκτρόνιο στην άνω στάθμη,
3. $C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}, C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi}$, στην αρχή του χρόνου το ηλεκτρόνιο μπορεί να βρίσκεται και στις δύο στάθμες με πιθανότητα $|C_1(0)|^2 = |C_2(0)|^2 = \frac{1}{2}$.

Το γραμμικό σύστημα των διαφορικών εξισώσεων 1^{ης} Τάξεως για το ΔΣ, σύμφωνα με την Εξ. 5.52, είναι

$$\begin{cases} \dot{C}_1(t) = C_2(t) \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{i(\omega-\Omega)t} + e^{-i(\omega+\Omega)t} \right] \\ \dot{C}_2(t) = C_1(t) \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{i(\omega+\Omega)t} + e^{-i(\omega-\Omega)t} \right] \end{cases} \quad (6.1)$$

6.1 Ταλαντώσεις Rabi σε δισταθμικό σύστημα πέραν της προσεγγίσεως περιστρεφόμενου κύματος

Η σημασία της πλήρους αριθμητικής επίλυσης του συστήματος (NRWA) έγκειται στο γεγονός ότι είναι η ακριβέστερη προσέγγιση της πραγματικής λύσης του προβλήματος. Επομένως, η αριθμητική λύση μας δίνει τη δυνατότητα να τη συγκρίνουμε με τις προσεγγιστικές λύσεις (προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος - RWA, μέθοδος επανισώσεως - AM), ώστε να έχουμε ένα κριτήριο ως προς το σε ποιο εύρος τιμών μπορούμε να χρησιμοποιούμε την καθεμιά.

Το ΔΣ λύνεται αριθμητικά, χρησιμοποιώντας το *matlab* και συγκεκριμένα αλγόριθμο που βασίζεται στη μέθοδο τραπεζίου και Runge-Kutta (4,5) (*ode45*). Ο αλγόριθμος *ode45* επιλέγει μια συγκεκριμένη διαμέριση του διαστήματος που έχουμε ορίσει, στη συγκεκριμένη περίπτωση για τον χρόνο t , δίνοντάς μας ως αποτέλεσμα για κάθε χρονικό σημείο έναν πίνακα-στήλη με στοιχεία τα $C_k(t)$, με $k = 1, 2$. Είναι σημαντικό να αναφερθεί ότι αυτή η διαμέριση μπορεί να ελεγχθεί. Δύο σημαντικές επιλογές του αλγορίθμου είναι η σχετική και απόλυτη ανοχή (relative and absolute tolerance). Σε κάθε βήμα του αλγορίθμου *ode45*, προσδιορίζεται ένα σφάλμα. Αν y_k είναι η προσέγγιση του $y(x_k)$ στο βήμα k και e_k είναι το προσεγγιστικό σφάλμα του βήματος, τότε το *matlab* επιλέγει η διαμέρισή του να εξασφαλίζει ότι

$$e_k \leq \max(\text{RelTol} \cdot y_k, \text{AbsTol}).$$

Οι προεπιλεγμένες τιμές για τα *RelTol* και *AbsTol* είναι 0.001 και 0.000001, αντίστοιχα. Στη συνέχεια επιλέγουμε $\text{RelTol} = 10^{-10}$ και $\text{AbsTol} = 10^{-10}$, διότι με δοκιμές παρατηρούμε ότι σε αυτές τις τιμές έχουμε το βέλτιστο αποτέλεσμα.

6.2 Η μέθοδος επανισώσεως

Η μέθοδος επανισώσεως (Averaging Method - AM) των μη γραμμικών δυναμικών συστημάτων είναι μια ασυμπτωτική μέθοδος. Η απλούστερη μορφή επανισώσεως είναι η *περιοδική επανίσωση*, η οποία αντιμετωπίζει προβλήματα διαταραχών της μορφής

$$\dot{\mathbf{x}} = \epsilon f(\mathbf{x}, t) + \epsilon^2 g(\mathbf{x}, t) + \dots, \quad (6.2)$$

όπου $\epsilon \ll 1$ και $f(\mathbf{x}, t)$, $g(\mathbf{x}, t)$ περιοδικές συναρτήσεις με περίοδο T . Γράφουμε τη συνάρτηση f ως

$$f(\mathbf{x}, t) := \bar{f}(\mathbf{x}) + \tilde{f}(\mathbf{x}, t), \quad (6.3)$$

όπου $\bar{f}(\mathbf{x})$ είναι μια ιδιότυπη μέση τιμή της f στο χρονικό διάστημα $[0, T]$: Λαμβάνουμε τη μέση τιμή ως προς τον χρόνο t , θεωρώντας ότι το $\mathbf{x}(t)$ παραμένει σταθερό, υποθέτοντας ότι είναι μια αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση ως προς τον χρόνο. Η ίδια υπόθεση εφαρμόζεται για τις συναρτήσεις $\mathbf{y}(t)$ και $\mathbf{z}(t)$, οι οποίες ορίζονται στις εξισώσεις (6.7) και (6.22), αντίστοιχα. Επομένως, για την $\bar{f}(\mathbf{x})$ έχουμε

$$\bar{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \int_0^T f(\mathbf{x}, t) dt. \quad (6.4)$$

Παρομοίως με την $f(\mathbf{x}, t)$, αντιμετωπίζουμε την $g(\mathbf{x}, t) \dots$ Παρακάτω, χρησιμοποιούμε όμοιο διαχωρισμό των συναρτήσεων $f, g, h \dots$ σε $\bar{f}, \bar{g}, \bar{h} \dots$ και $\tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h} \dots$

6.2.1 Μέθοδος επανισώσεως πρώτης και δεύτερης τάξεως

Σύμφωνα με τα παραπάνω, γράφουμε την περιοδική συνάρτηση $f(\mathbf{x}, t)$ ως

$$f(\mathbf{x}, t) := \bar{f}(\mathbf{x}) + \tilde{f}(\mathbf{x}, t), \quad (6.5)$$

όπου

$$\bar{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \int_0^T f(\mathbf{x}, t) dt. \quad (6.6)$$

Επιπλέον, ορίζουμε

$$\mathbf{x}(t) = \mathbf{y}(t) + \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{y}(t), t), \quad (6.7)$$

όπου \mathbf{w} μια συνάρτηση του $\mathbf{y}(t)$ και του t , η οποία ορίζεται παρακάτω, στην Εξ. (6.17). Το διαφορικό της $\mathbf{x}(t)$ είναι

$$d\mathbf{x}(t) = d\mathbf{y}(t) + \epsilon d\mathbf{w}(\mathbf{y}(t), t), \quad (6.8)$$

$$d\mathbf{w}(\mathbf{y}, t) = \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} d\mathbf{y} + \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} dt. \quad (6.9)$$

$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t}$ είναι η παράγωγος του \mathbf{w} ως προς t , κρατώντας σταθερό το $\mathbf{y}(t)$ και υποθέτοντας ότι το $\mathbf{y}(t)$ είναι μια αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση. Επομένως,

$$\dot{\mathbf{x}} = \dot{\mathbf{y}} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} \dot{\mathbf{y}} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t}. \quad (6.10)$$

Η Εξ. (6.3), με τον μετασχηματισμό της Εξ. (6.7), γίνεται

$$f(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}, t) = \bar{f}(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}) + \tilde{f}(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}, t). \quad (6.11)$$

Επομένως, η Εξ. (6.2), με τις Εξ. (6.7), (6.10), (6.11), γίνεται

$$\dot{\mathbf{y}} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} \dot{\mathbf{y}} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \epsilon (\bar{f}(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}) + \tilde{f}(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}, t)) + \epsilon^2 g(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}, t). \quad (6.12)$$

Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor ως προς \mathbf{y} , έχουμε

$$\bar{f}(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}) = \bar{f}(\mathbf{y}) + \epsilon \frac{\partial \bar{f}(\mathbf{y})}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + \mathcal{O}(\epsilon^2 \mathbf{w}^2), \quad (6.13)$$

$$\tilde{f}(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}, t) = \tilde{f}(\mathbf{y}, t) + \epsilon \frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{y}, t)}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + \mathcal{O}(\epsilon^2 \mathbf{w}^2), \quad (6.14)$$

$$g(\mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}, t) = g(\mathbf{y}, t) + \epsilon \frac{\partial g(\mathbf{y}, t)}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + \mathcal{O}(\epsilon^2 \mathbf{w}^2). \quad (6.15)$$

Συνεπώς, η Εξ. (6.12), με τις Εξ. (6.13), (6.14), (6.15), γίνεται

$$\dot{\mathbf{y}} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} \dot{\mathbf{y}} + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \epsilon (\bar{f}(\mathbf{y}) + \tilde{f}(\mathbf{y}, t)) + \epsilon^2 \left(\frac{\partial \bar{f}(\mathbf{y})}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + \frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{y}, t)}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + g(\mathbf{y}, t) \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3).$$

Αναδιατάσσοντας, έχουμε

$$\left(I + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} \right) \dot{\mathbf{y}} = \epsilon \left(\bar{f}(\mathbf{y}) + \tilde{f}(\mathbf{y}, t) - \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} \right) + \epsilon^2 \left(\frac{\partial f(\mathbf{y}, t)}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + g(\mathbf{y}, t) \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (6.16)$$

όπου I η μονάδα που αντιστοιχεί στη φύση του \mathbf{y} . Αν η \mathbf{y} είναι μια συνάρτηση του t , τότε $I = 1$. Αν η \mathbf{y} είναι ένας πίνακας-στήλη, όπως στην περίπτωση μας, τότε $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$. Ορίζουμε τη συνάρτηση \mathbf{w} μέσω της σχέσης

$$\tilde{f}(\mathbf{y}, t) = \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t}, \quad (6.17)$$

προκειμένου να απλοποιηθεί η Εξ. (6.16). Επομένως,

$$\dot{\mathbf{y}} = \left(I + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} \right)^{-1} \left[\epsilon \bar{f}(\mathbf{y}) + \epsilon^2 \left(\frac{\partial f(\mathbf{y}, t)}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + g(\mathbf{y}, t) \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3) \right] \Rightarrow$$

$$\left(I + \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} \right)^{-1} = I - \epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} + \mathcal{O}(\epsilon^2)$$

$$\boxed{\dot{\mathbf{y}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{y}) + \epsilon^2 \left(\frac{\partial f(\mathbf{y}, t)}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + g(\mathbf{y}, t) - \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} \bar{f}(\mathbf{y}) \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3)} \quad (6.18)$$

Η Εξ. (6.18), αν αγνοήσουμε τους όρους από ϵ^2 και άνω, περιγράφει την **πρώτης τάξεως προσέγγιση** του προβλήματος Εξ. (6.2), δηλαδή

$$\boxed{\dot{\mathbf{y}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{y})} \quad (6.19)$$

Αξιοσημείωτη παρατήρηση είναι ότι προκύπτει ένα πρόβλημα με συναρτήσεις ανεξάρτητες από τον χρόνο, με αποτέλεσμα το πρόβλημα να είναι πιο εύκολα επιλύσιμο από το αρχικό πρόβλημα της Εξ. (6.2).

Συνεχίζοντας στη δεύτερη τάξεως μέθοδο επανισώσεως, από την Εξ. (6.18), έχουμε

$$\dot{\mathbf{y}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{y}) + \epsilon^2 \underbrace{\left(\frac{\partial f(\mathbf{y}, t)}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + g(\mathbf{y}, t) - \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial \mathbf{y}} \bar{f}(\mathbf{y}) \right)}_{h(\mathbf{y}, t)} + \mathcal{O}(\epsilon^3) \Rightarrow$$

$$\dot{\mathbf{y}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{y}) + \epsilon^2 h(\mathbf{y}, t) + \mathcal{O}(\epsilon^3). \quad (6.20)$$

Όπως και προηγουμένως, με τη συνάρτηση $f(\mathbf{x}, t)$ της Εξ. (6.3), γράφουμε τη συνάρτηση $h(\mathbf{y}, t)$ ως

$$h(\mathbf{y}, t) = \bar{h}(\mathbf{y}) + \tilde{h}(\mathbf{y}, t), \quad (6.21)$$

και ορίζουμε

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{z}(t) + \epsilon^2 \mathbf{u}(\mathbf{z}(t), t), \quad (6.22)$$

όπου \mathbf{u} μια συνάρτηση του $\mathbf{z}(t)$ και του t , η οποία ορίζεται παρακάτω, στην Εξ. (6.33). Το διαφορικό της $\mathbf{y}(t)$ είναι

$$d\mathbf{y}(t) = d\mathbf{z}(t) + \epsilon^2 d\mathbf{u}[\mathbf{z}(t), t], \quad (6.23)$$

$$d\mathbf{u}[\mathbf{z}(t), t] = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} d\mathbf{z} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} dt. \quad (6.24)$$

$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}$ είναι η παράγωγος του \mathbf{u} ως προς t , κρατώντας σταθερό το $\mathbf{z}(t)$ και υποθέτοντας ότι το $\mathbf{z}(t)$ είναι μια αργά μεταβαλλόμενη συνάρτηση. Επομένως,

$$\dot{\mathbf{y}} = \dot{\mathbf{z}} + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}. \quad (6.25)$$

Η Εξ. (6.21), με τον μετασχηματισμό της Εξ. (6.22), γίνεται

$$h(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}, t) = \bar{h}(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}) + \tilde{h}(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}, t). \quad (6.26)$$

Επομένως, η Εξ. (6.20), με τις Εξ. (6.22), (6.25), (6.26), γίνεται

$$\dot{\mathbf{z}} + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}) + \epsilon^2 \left(\bar{h}(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}) + \tilde{h}(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}, t) \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3). \quad (6.27)$$

Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα Taylor ως προς \mathbf{z} , έχουμε

$$\bar{f}(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}) = \bar{f}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 \frac{\partial \bar{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{u} + \mathcal{O}(\epsilon^4 \mathbf{u}^2), \quad (6.28)$$

$$\bar{h}(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}) = \bar{h}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 \frac{\partial \bar{h}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{u} + \mathcal{O}(\epsilon^4 \mathbf{u}^2), \quad (6.29)$$

$$\tilde{h}(\mathbf{z} + \epsilon^2 \mathbf{u}, t) = \tilde{h}(\mathbf{z}, t) + \epsilon^2 \frac{\partial \tilde{h}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{u} + \mathcal{O}(\epsilon^4 \mathbf{u}^2). \quad (6.30)$$

Συνεπώς, η Εξ. (6.27), με τις Εξ. (6.28), (6.29), (6.29), γίνεται

$$\dot{\mathbf{z}} + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 (\bar{h}(\mathbf{z}) + \tilde{h}(\mathbf{z}, t)) + \mathcal{O}(\epsilon^3). \quad (6.31)$$

Αναδιατάσσοντας, έχουμε

$$\left(I + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} \right) \dot{\mathbf{z}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 \left(\bar{h}(\mathbf{z}) + \tilde{h}(\mathbf{z}, t) - \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^3), \quad (6.32)$$

όπου I η μονάδα που αντιστοιχεί στη φύση του \mathbf{z} . Αν η \mathbf{z} είναι μια συνάρτηση του t , τότε $I = 1$. Αν η \mathbf{z} είναι ένας πίνακας-στήλη, όπως στην περίπτωση μας, τότε $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$. Ορίζουμε τη συνάρτηση \mathbf{u} μέσω της σχέσης

$$\tilde{h}(\mathbf{z}, t) = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t}, \quad (6.33)$$

προκειμένου να απλοποιηθεί η Εξ. (6.32). Επομένως,

$$\dot{\mathbf{z}} = \left(I + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} \right)^{-1} \left[\epsilon \bar{f}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 \bar{h}(\mathbf{z}) + \mathcal{O}(\epsilon^3) \right] \left\{ \begin{array}{l} \Rightarrow \\ \left(I + \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} \right)^{-1} = I - \epsilon^2 \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{z}} + \mathcal{O}(\epsilon^4) \end{array} \right. \Rightarrow$$

$$\boxed{\dot{\mathbf{z}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 \bar{h}(\mathbf{z}) + \mathcal{O}(\epsilon^3)} \quad (6.34)$$

Η Εξ. (6.34), αν αγνοήσουμε τους όρους από ϵ^2 και άνω, περιγράφει τη **δεύτερης τάξεως προσέγγιση** του προβλήματος Εξ. (6.2), δηλαδή

$$\boxed{\dot{\mathbf{z}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 \bar{h}(\mathbf{z})} \quad (6.35)$$

Παρατηρείται και εδώ το γεγονός ότι προκύπτει ένα πρόβλημα με συναρτήσεις ανεξάρτητες από τον χρόνο, με αποτέλεσμα το πρόβλημα να είναι κι εδώ πιο εύκολα επιλύσιμο από το αρχικό πρόβλημα της Εξ. (6.2).

6.2.2 Ταλαντώσεις Rabi σε Δισταθμικό Σύστημα με τη μέθοδο επανισώσεως

Οι ταλαντώσεις Rabi των ηλεκτρονιακών πιθανοτήτων ενός $\Delta\Sigma$ που αλληλεπιδρά με ένα ΗΜ πεδίο δίνονται από τις Εξ. (6.1)

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{C}_1(t) &= C_2(t) \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{i(\omega-\Omega)t} + e^{-i(\omega+\Omega)t} \right] \\ \dot{C}_2(t) &= C_1(t) \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[e^{i(\omega+\Omega)t} + e^{-i(\omega-\Omega)t} \right] \end{aligned}} \quad (6.36)$$

όπου έχουμε ήδη ορίσει τον αποσυντονισμό (detuning), στην Εξ. (5.54), ως

$$\Delta := \omega - \Omega \quad (6.37)$$

καθώς και την (κυκλική) συχνότητα Rabi¹, στην Εξ. (5.55), ως

$$\Omega_R := \frac{\mathcal{P}\mathcal{E}_0}{\hbar} \quad (6.38)$$

Σκοπός σε αυτό το σημείο είναι να εφαρμόσουμε τη μέθοδο επανισώσεως στις Εξ. (6.1). Πριν προχωρήσουμε, είναι σημαντικό να υπενθυμίσουμε τη διαδικασία επίλυσης των προαναφερθεισών εξισώσεων με την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος, όπου θεωρήσαμε ότι οι όροι με $(\omega - \Omega)$ μεταβάλλονται αργά, ενώ οι όροι με $(\omega + \Omega)$ μεταβάλλονται γρήγορα. Άρα, σε οιαδήποτε αξιοσημείωτη χρονική κλίμακα, αυτοί οι γρήγοροι όροι θα έχουν περίπου αμελητέα επίδραση στο αποτέλεσμα. Η προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (rotating wave approximation, RWA) είναι ο ισχυρισμός ότι μπορούμε να αγνοήσουμε αυτούς τους γρήγορους όρους. Έπειτα, με τη χρήση του μετασχηματισμού Εξ. (5.58) καταφέραμε να φτάσουμε σε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων με χρονοανεξάρτητους συντελεστές, δηλαδή μια εύκολα επιλύσιμη περίπτωση διαφορικών εξισώσεων. Η μέθοδος επανισώσεως επιτυγχάνει αυτό το αποτέλεσμα (διαφορικές εξισώσεις με χρονοανεξάρτητους συντελεστές) με έναν διαφορετικό τρόπο. Αν επιπλέον ορίσουμε το άθροισμα των κυκλικών συχνοτήτων ως

$$\Sigma := \omega + \Omega \quad (6.39)$$

μπορούμε να γράψουμε τις Εξ. (6.1) σε μορφή πινάκων ως

$$\begin{bmatrix} \dot{C}_1(t) \\ \dot{C}_2(t) \end{bmatrix} = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & e^{+i\Delta t} + e^{-i\Sigma t} \\ e^{-i\Delta t} + e^{+i\Sigma t} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix}. \quad (6.40)$$

• ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$

Γράφουμε την Εξ. (6.40) ως

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \underbrace{\frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & e^{+i\Delta t} + e^{-i\Sigma t} \\ e^{-i\Delta t} + e^{+i\Sigma t} & 0 \end{bmatrix}}_{\epsilon f(\mathbf{x}, t)} \mathbf{x}(t), \quad (6.41)$$

όπου $\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix}$, θέτουμε $\epsilon f(\mathbf{x}, t)$ το δεξί μέλος της Εξ. (6.40) και

$$g(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (6.42)$$

Για να μπορέσουμε να χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο επανισώσεως, θα πρέπει η συνάρτηση f να είναι περιοδική. Παρατηρούμε ότι έχουμε δύο περιοδικά κομμάτια, με περιόδους $T_1 = \frac{2\pi}{\Delta}$, $T_2 = \frac{2\pi}{\Sigma}$. Αν ο λόγος των περιόδων, $\frac{T_1}{T_2}$, είναι ρητός, τότε το παραπάνω σύστημα είναι όντως περιοδικό, με μια κοινή περίοδο, η οποία θα είναι το ελάχιστο κοινό πολλαπλάσιο των δύο περιόδων T_1 και T_2 . Με άλλα λόγια,

$$\left. \begin{array}{l} \frac{T_1}{T_2} = \frac{\Sigma}{\Delta} = N, \text{ όπου: } N = \text{ρητός} \\ N = \frac{\alpha}{\beta}, \text{ όπου: } \alpha, \beta = \text{ακέραιοι} \end{array} \right\} \Rightarrow T = \alpha T_2 = \beta T_1.$$

¹Από τον Isidor Isaac Rabi (1898-1988).

Αντίθετα, αν ο λόγος των περιόδων $\frac{T_1}{T_2}$ δεν είναι ρητός, τότε διαλέγουμε κάποιον κοντινό ρητό και λύνουμε το πρόβλημα κατά προσέγγιση. Σημειώνουμε ότι στον υπολογιστή όλοι οι αριθμοί είναι ρητοί, αφού αναπαρίστανται με κάποιον πεπερασμένο αριθμό δεκαδικών ψηφίων. Έτσι, για παράδειγμα, αν το κλάσμα των περιόδων είναι $\sqrt{2}$, δηλαδή αν

$$\frac{T_1}{T_2} = \sqrt{2},$$

τότε στον υπολογιστή θα ήταν $\sqrt{2} = 1.41\dots$ με κάποιον πεπερασμένο αριθμό δεκαδικών ψηφίων. Άρα, σε αυτήν την περίπτωση, θα μπορούσαμε να πάρουμε για παράδειγμα $\sqrt{2} = 1.41 = \frac{141}{100}$.

Η μέση τιμή της $f(\mathbf{x}, t)$ είναι

$$\epsilon \bar{f}(\mathbf{x}) := \frac{1}{T} \int_0^T \epsilon f(\mathbf{x}, t) dt = \frac{1}{T} \begin{bmatrix} 0 & \int_0^T (e^{+i\Delta t} + e^{-i\Sigma t}) dt \\ \int_0^T (e^{-i\Delta t} + e^{+i\Sigma t}) dt & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t),$$

καθώς

$$\begin{aligned} \int_0^T e^{\pm i\Sigma t} dt &= \pm \frac{1}{i\Sigma} (e^{\pm i\Sigma T} - 1) = 0, \text{ διότι} \\ e^{\pm i\Sigma T} &= e^{\pm i\Sigma \alpha \frac{2\pi}{\Sigma}} = e^{\pm i2\pi\alpha} = (e^{i2\pi})^{\pm\alpha} = 1^{\pm\alpha} = 1, \text{ και} \\ \int_0^T e^{\pm i\Delta t} dt &= \pm \frac{1}{i\Delta} (e^{\pm i\Delta T} - 1) = 0, \text{ διότι} \\ e^{\pm i\Delta T} &= e^{\pm i\Delta \beta \frac{2\pi}{\Delta}} = e^{\pm i2\pi\beta} = (e^{i2\pi})^{\pm\beta} = 1^{\pm\beta} = 1. \end{aligned}$$

Άρα,

$$\boxed{\bar{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}} \quad (6.43)$$

Επομένως, από την Εξ. (6.3), έχουμε

$$f(\mathbf{x}, t) = \overset{0}{\bar{f}(\mathbf{x})} + \tilde{f}(\mathbf{x}, t) \Rightarrow$$

$$\boxed{\epsilon \tilde{f}(\mathbf{x}, t) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & e^{+i\Delta t} + e^{-i\Sigma t} \\ e^{-i\Delta t} + e^{+i\Sigma t} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t)} \quad (6.44)$$

Για την πρώτη τάξεως μέθοδο επανισώσεως, από την Εξ. (6.19), έχουμε

$$\dot{\mathbf{y}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{y}). \quad (6.45)$$

Όμως, στην περίπτωσή μας $\bar{f}(\mathbf{y}) = 0$, επομένως

$$\dot{\mathbf{y}} = 0. \quad (6.46)$$

Δηλαδή, το \mathbf{y} είναι ένας σταθερός πίνακας της μορφής

$$\boxed{\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{bmatrix}} \quad (6.47)$$

Οι άγνωστοι συντελεστές y_{10}, y_{20} υπολογίζονται με τη βοήθεια των αρχικών συνθηκών. Επιπλέον, υπολογίζουμε την \mathbf{w} από την Εξ. (6.17) ως εξής:

$$\epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \epsilon \tilde{f}(\mathbf{y}, t) \Rightarrow$$

$$\epsilon \mathbf{w}(\mathbf{y}, t) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & \frac{e^{+i\Delta t}}{i\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{i\Sigma} \\ -\frac{e^{-i\Delta t}}{i\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{i\Sigma} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{y}(t) \quad (6.48)$$

Για τη δεύτερης τάξεως μέθοδο επανισώσεως, από την Εξ. (6.35), έχουμε

$$\dot{\mathbf{z}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 \bar{h}(\mathbf{z}). \quad (6.49)$$

Στην περίπτωσή μας, έχουμε $\bar{f}(\mathbf{z}) = 0$. Από την Εξ. (6.20) όπου είχαμε ορίσει τη συνάρτηση $h(\mathbf{y}, t)$, έχουμε

$$h(\mathbf{z}, t) = \frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t). \quad (6.50)$$

Χρησιμοποιώντας την Εξ. (6.50), η Εξ. (6.35) γίνεται

$$\dot{\mathbf{z}} = \epsilon^2 \overline{\frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t)}. \quad (6.51)$$

Αντικαθιστώντας τις Εξ. (6.44) και (6.48), η Εξ. (6.50) γίνεται

$$\begin{aligned} \epsilon^2 h(\mathbf{z}(t), t) &= i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{\Sigma} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \mathbf{z}(t) \\ &+ i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} -e^{-i(\Delta+\Sigma)t} & 0 \\ 0 & e^{i(\Delta+\Sigma)t} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) + i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{\Sigma} \begin{bmatrix} e^{i(\Delta+\Sigma)t} & 0 \\ 0 & -e^{-i(\Delta+\Sigma)t} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t). \end{aligned} \quad (6.52)$$

Η μέση τιμή της Εξ. (6.52) είναι

$$\epsilon^2 \bar{h}(\mathbf{z}) = \epsilon^2 \overline{\left[\frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) \right]} = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{\Sigma} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} + \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \mathbf{z}(t). \quad (6.53)$$

Από τις Εξ. (6.21), (6.52), (6.53) και δεδομένου ότι $\Delta + \Sigma = 2\omega$, έχουμε

$$\epsilon^2 \bar{h}(\mathbf{z}, t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} -e^{-i2\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i2\omega t} \end{bmatrix} + \frac{1}{\Sigma} \begin{bmatrix} e^{i2\omega t} & 0 \\ 0 & -e^{-i2\omega t} \end{bmatrix} \right) \mathbf{z}(t). \quad (6.54)$$

Επομένως, η Εξ. (6.51) γίνεται

$$\dot{\mathbf{z}} = iA \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t), \quad (6.55)$$

όπου

$$A = \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{2\Omega}{\omega^2 - \Omega^2}. \quad (6.56)$$

Η λύση της Εξ. (6.55) είναι

$$\mathbf{z}(t) = \begin{bmatrix} z_1(t) \\ z_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_{10}e^{-iAt} \\ z_{20}e^{iAt} \end{bmatrix} \quad (6.57)$$

Οι άγνωστοι συντελεστές z_{10}, z_{20} υπολογίζονται με τη βοήθεια των αρχικών συνθηκών. Επιπλέον, υπολογίζουμε την \mathbf{u} από την Εξ. (6.33), η οποία προκύπτει

$$\epsilon^2 \mathbf{u}(\mathbf{z}, t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \begin{bmatrix} \frac{e^{-i2\omega t}}{i2\omega\Delta} + \frac{e^{i2\omega t}}{i2\omega\Sigma} & 0 \\ 0 & \frac{e^{i2\omega t}}{i2\omega\Delta} + \frac{e^{-i2\omega t}}{i2\omega\Sigma} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) \quad (6.58)$$

Ανακεφαλαιώνοντας, παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα της πρώτης και της δεύτερης τάξεως της μεθόδου επανισώσεως.

- Πρώτη τάξη:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}(t) = \mathbf{y} + \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{y}, t) \\ \mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{bmatrix} \\ \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{y}, t) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & \frac{e^{+i\Delta t}}{i\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{i\Sigma} \\ -\frac{e^{-i\Delta t}}{i\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{i\Sigma} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{y} \end{array} \right\}. \quad (6.59)$$

- Δεύτερη τάξη:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{x}(t) = \mathbf{z}(t) + \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{z}(t), t) + \epsilon^2 \mathbf{u}(\mathbf{z}(t), t) \\ \mathbf{z}(t) = \begin{bmatrix} z_{10}e^{-iAt} \\ z_{20}e^{iAt} \end{bmatrix} \\ \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{z}(t), t) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & \frac{e^{+i\Delta t}}{i\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{i\Sigma} \\ -\frac{e^{-i\Delta t}}{i\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{i\Sigma} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) \\ \epsilon^2 \mathbf{u}(\mathbf{z}(t), t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \left[\frac{1}{i2\omega\Delta} \begin{bmatrix} e^{-i2\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i2\omega t} \end{bmatrix} + \frac{1}{i2\omega\Sigma} \begin{bmatrix} e^{i2\omega t} & 0 \\ 0 & e^{-i2\omega t} \end{bmatrix} \right] \mathbf{z}(t) \end{array} \right\}. \quad (6.60)$$

Παρατηρούμε πως στις Εξ. (6.59) και (6.60) εμφανίζονται τρία διαφορετικά ϵ , τα $\frac{\Omega_R}{\Delta}$, $\frac{\Omega_R}{\Sigma}$, $\frac{\Omega_R}{\omega}$. Τα τρία αυτά διαφορετικά, μικρά ϵ δείχνουν το σχετικό μέγεθος της ισχύος της διαταραχής, την οποία περιγράφει η συχνότητα Rabi ως προς τον αποσυντονισμό $\Delta = \omega - \Omega$, το άθροισμα των συχνοτήτων $\Sigma = \omega + \Omega$ και τη συχνότητα ω . Αυτή η διαφορετική θεώρηση θα μας επιτρέψει να αντιμετωπίσουμε αριθμητικά διαφορετικές περιπτώσεις.

• ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$

Η ανάγκη να προχωρήσουμε σε μία διαφορετική λύση για $\Delta = 0$ προκύπτει από το γεγονός ότι από τα τρία διαφορετικά ϵ , το $\frac{\Omega_R}{\Delta}$, όταν πλησιάζουμε στην περίπτωση του συντονισμού (δηλαδή $\Delta \rightarrow 0$), αναπόφευκτα τείνει στο άπειρο. Επομένως, είναι ανάγκη να ξεκινήσουμε ξανά από το αρχικό σύστημα, δηλαδή την Εξ. (6.40), και να θέσουμε από την αρχή $\Delta = 0$. Δηλαδή,

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \underbrace{\frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 + e^{-i2\omega t} \\ 1 + e^{+i2\omega t} & 0 \end{bmatrix}}_{\epsilon f(\mathbf{x}, t)} \mathbf{x}(t), \quad (6.61)$$

όπου $\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix}$, θέτουμε $\epsilon f(\mathbf{x}, t)$ το δεξιό μέλος της Εξ. (6.40) και

$$g(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (6.62)$$

Για να μπορέσουμε να χρησιμοποιήσουμε τη μέθοδο επανισώσεως, θα πρέπει η συνάρτηση f να είναι περιοδική. Πράγματι, η $\epsilon f(\mathbf{x}, t)$ έχει περίοδο $T = \frac{\pi}{\omega}$.

Η μέση τιμή της $f(\mathbf{x}, t)$ είναι

$$\epsilon \bar{f}(\mathbf{x}) = \frac{1}{T} \int_0^T \epsilon f(\mathbf{x}, t) dt = \frac{1}{T} \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & T \\ T & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t).$$

Άρα,

$$\epsilon \bar{f}(\mathbf{x}) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t) \quad (6.63)$$

Επομένως, από την Εξ. (6.3) θα έχουμε

$$f(\mathbf{x}, t) = \bar{f}(\mathbf{x}) + \tilde{f}(\mathbf{x}, t) \Rightarrow$$

$$\epsilon \tilde{f}(\mathbf{x}, t) = \epsilon f(\mathbf{x}, t) - \epsilon \bar{f}(\mathbf{x}) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 + e^{-i2\omega t} \\ 1 + e^{+i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t) - \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t) \Rightarrow$$

$$\epsilon \tilde{f}(\mathbf{x}, t) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & e^{-i2\omega t} \\ e^{+i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}(t) \quad (6.64)$$

Για την πρώτη τάξεως μέθοδο επανισώσεως, από την Εξ. (6.19) έχουμε

$$\dot{\mathbf{y}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{y}). \quad (6.65)$$

Στην περίπτωσή μας, λόγω της Εξ. (6.63),

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{y}(t) \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \dot{y}_1(t) = \frac{i\Omega_R}{2} y_2(t) \\ \dot{y}_2(t) = \frac{i\Omega_R}{2} y_1(t) \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \ddot{y}_1(t) + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 y_1(t) = 0 \\ \ddot{y}_2(t) + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 y_2(t) = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} y_1(t) = A_{11} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + B_{11} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ y_2(t) = A_{21} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + B_{21} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{cases} \quad (6.66)$$

με

$$\begin{cases} y_1(0) = A_{11} \\ y_2(0) = A_{21} \end{cases} \text{ και } \begin{cases} \dot{y}_1(0) = \frac{\Omega_R}{2} B_{11} = i \frac{\Omega_R}{2} y_2(0) \\ \dot{y}_2(0) = \frac{\Omega_R}{2} B_{21} = i \frac{\Omega_R}{2} y_1(0) \end{cases}. \quad (6.67)$$

Οι άγνωστοι συντελεστές A_{11} , B_{11} , A_{21} , B_{21} υπολογίζονται με τη βοήθεια των αρχικών συνθηκών. Επιπλέον, υπολογίζουμε την \mathbf{w} από την Εξ. (6.17)

$$\epsilon \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} = \epsilon \tilde{f}(\mathbf{y}, t) \Rightarrow$$

$$\epsilon \mathbf{w}(\mathbf{y}, t) = \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{y}(t) \quad (6.68)$$

Για τη δεύτερης τάξεως μέθοδο επανισώσεως, από την Εξ. (6.35) έχουμε

$$\dot{\mathbf{z}} = \epsilon \bar{f}(\mathbf{z}) + \epsilon^2 \bar{h}(\mathbf{z}). \quad (6.69)$$

Από την Εξ. (6.20) όπου είχαμε ορίσει τη συνάρτηση $h(\mathbf{y}, t)$, έχουμε

$$h(\mathbf{z}, t) = \frac{\partial \bar{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) + \frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) + g(\mathbf{z}, t) - \frac{\partial \mathbf{w}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \bar{f}(\mathbf{z}). \quad (6.70)$$

Θέλουμε τη μέση τιμή της συνάρτησης $h(\mathbf{z}, t)$, επομένως

$$\bar{h}(\mathbf{z}) = \overline{\left(\frac{\partial \bar{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) + \frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) + g(\mathbf{z}, t) - \frac{\partial \mathbf{w}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \bar{f}(\mathbf{z}) \right)}. \quad (6.71)$$

Θα υπολογίσουμε έναν προς έναν τους παραπάνω όρους.

$$1^{\text{ος}}: \frac{\partial \bar{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) = \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} e^{i2\omega t} & 0 \\ 0 & -e^{-i2\omega t} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t),$$

$$2^{\text{ος}}: \frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) = + \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t),$$

$$3^{\text{ος}}: g(\mathbf{z}, t) = 0,$$

$$4^{\text{ος}}: \frac{\partial \mathbf{w}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \bar{f}(\mathbf{z}) = \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} -e^{-i2\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i2\omega t} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t).$$

Δηλαδή, συνολικά η συνάρτηση $h(\mathbf{z}, t)$ στην περίπτωση μας είναι

$$\begin{aligned} h(\mathbf{z}, t) = & i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} e^{i2\omega t} & 0 \\ 0 & -e^{-i2\omega t} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) + i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) \\ & - i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} -e^{-i2\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i2\omega t} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) \end{aligned} \quad (6.72)$$

Συνεπώς, οι μέσες τιμές των όρων είναι

$$\begin{aligned} 1^{\text{ος}} \text{ όρος: } & \overline{\left(\frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) \right)} = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ 2^{\text{ος}} \text{ όρος: } & \overline{\left(\frac{\partial \tilde{f}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \mathbf{w}(\mathbf{z}, t) \right)} = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t), \\ 3^{\text{ος}} \text{ όρος: } & \bar{g}(\mathbf{z}, t) = 0, \\ 4^{\text{ος}} \text{ όρος: } & \overline{\left(\frac{\partial \mathbf{w}(\mathbf{z}, t)}{\partial \mathbf{z}} \tilde{f}(\mathbf{z}) \right)} = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Τελικά, προκύπτει ότι

$$\boxed{\bar{h}(\mathbf{z}) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t)} \quad (6.73)$$

Η $\tilde{h}(\mathbf{z}, t)$ προκύπτει από τις Εξ. (6.21), (6.72), (6.73):

$$\boxed{\tilde{h}(\mathbf{z}, t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} e^{i2\omega t} & 0 \\ 0 & -e^{-i2\omega t} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) - i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} -e^{-i2\omega t} & 0 \\ 0 & e^{i2\omega t} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t)} \quad (6.74)$$

Χρησιμοποιώντας τις Εξ. (6.63), (6.73), η Εξ. (6.35) γίνεται

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{z}}(t) &= \frac{i\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) + i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) \Rightarrow \\ & \boxed{\dot{\mathbf{z}}(t) = i \begin{bmatrix} \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} & \frac{\Omega_R}{2} \\ \frac{\Omega_R}{2} & -\left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \end{bmatrix} \mathbf{z}(t)} \quad (6.75) \end{aligned}$$

Θέτοντας $\alpha := \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega}$ και $\beta := \frac{\Omega_R}{2}$, το σύστημα διαφορικών εξισώσεων της Εξ. (6.75) γίνεται

$$\begin{aligned} \left. \begin{aligned} \dot{z}_1(t) &= \alpha z_1(t) + i\beta z_2(t) \\ \dot{z}_2(t) &= i\beta z_1(t) - \alpha z_2(t) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} \dot{z}_1(t) &= \alpha z_1(t) + i\beta z_2(t) \\ \dot{z}_2(t) &= i\beta z_1(t) - \alpha z_2(t) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \\ \left\{ \begin{aligned} \ddot{z}_1(t) &= \alpha(\alpha z_1(t) + i\beta z_2(t)) + i\beta(i\beta z_1(t) - \alpha z_2(t)) \\ \ddot{z}_2(t) &= i\beta(\alpha z_1(t) + i\beta z_2(t)) - \alpha(i\beta z_1(t) - \alpha z_2(t)) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \ddot{z}_1(t) + B^2 z_1(t) &= 0 \\ \ddot{z}_2(t) + B^2 z_2(t) &= 0 \end{aligned}} \quad (6.76)$$

όπου $B^2 := \alpha^2 + \beta^2$. Οι λύσεις των παραπάνω εξισώσεων είναι γνωστές:

$$\left\{ \begin{aligned} z_1(t) &= A_{12} \cos(Bt) + B_{12} \sin(Bt) \\ z_2(t) &= A_{22} \cos(Bt) + B_{22} \sin(Bt) \end{aligned} \right\} \quad (6.77)$$

με

$$\left\{ \begin{aligned} z_1(0) &= A_{12} \\ z_2(0) &= A_{22} \end{aligned} \right\} \text{ και } \left\{ \begin{aligned} \dot{z}_1(0) &= B \cdot B_{12} = \alpha z_1(0) + i\beta z_2(0) \\ \dot{z}_2(0) &= B \cdot B_{22} = i\beta z_1(0) - \alpha z_2(0) \end{aligned} \right\} \quad (6.78)$$

Οι άγνωστοι συντελεστές $A_{12}, B_{12}, A_{22}, B_{22}$ υπολογίζονται με τη βοήθεια των αρχικών συνθηκών. Επιπλέον, υπολογίζουμε την \mathbf{u} από την Εξ. (6.33)

$$\epsilon^2 \mathbf{u}(\mathbf{z}, t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t). \quad (6.79)$$

Ανακεφαλαιώνοντας, παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα της πρώτης και της δεύτερης τάξεως μεθόδου επανισώσεως.

- Πρώτη τάξη:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{x}(t) = \mathbf{y}(t) + \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{y}(t), t) \\ \mathbf{y}(t) = \begin{bmatrix} A_{11} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + B_{11} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ A_{21} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + B_{21} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{bmatrix} \\ \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{y}, t) = \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{y}(t) \end{array} \right\}. \quad (6.80)$$

- Δεύτερη τάξη:

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{x}(t) = \mathbf{z}(t) + \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{z}(t), t) + \epsilon^2 \mathbf{u}(\mathbf{z}(t), t) \\ \mathbf{z}(t) = \begin{bmatrix} A_{12} \cos(Bt) + B_{12} \sin(Bt) \\ A_{22} \cos(Bt) + B_{22} \sin(Bt) \end{bmatrix} \\ \epsilon \mathbf{w}(\mathbf{z}(t), t) = \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) \\ \epsilon^2 \mathbf{u}(\mathbf{z}(t), t) = i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{z}(t) \end{array} \right\}. \quad (6.81)$$

Παρατηρούμε πως στις εξισώσεις (6.80) και (6.81) τα τρία διαφορετικά ϵ εκφυλίζονται σε ένα, το $\frac{\Omega_R}{\omega}$. Έτσι, στην περίπτωση του συντονισμού ($\Delta = 0$), το ϵ αυτό δείχνει το σχετικό μέγεθος της διαταραχής, την οποία περιγράφει η συχνότητα Rabi ως προς τη συχνότητα ω . Αυτή η διαφορετική θεώρηση θα μας επιτρέψει να αντιμετωπίσουμε αριθμητικά διαφορετικές περιπτώσεις.

6.2.3 Λύσεις για διάφορες περιπτώσεις αρχικών συνθηκών

Για να φτάσουμε σε κάποιες τελικές εξισώσεις, ώστε να παρατηρήσουμε τη συμπεριφορά των ταλαντώσεων Rabi στο δισταθμικό σύστημα, μένει ένα τελευταίο βήμα· να θέσουμε αρχικές συνθήκες. Με άλλα λόγια, να υποθέσουμε σε ποια στάθμη βρίσκεται το ηλεκτρόνιο στην αρχή του χρόνου και με ποια πιθανότητα. Αυτή η υπόθεση μας επιτρέπει να υπολογίσουμε τους άγνωστους συντελεστές που προέκυψαν στις διάφορες περιπτώσεις της μεθόδου επανισώσεως και να καταλήξουμε στις τελικές εξισώσεις της εκάστοτε περίπτωσης. Οι αρχικές συνθήκες που θα χρησιμοποιήσουμε είναι τρεις:

1. $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$, δηλαδή αρχική τοποθέτηση του ηλεκτρονίου στην κάτω στάθμη,
2. $C_1(0) = 0, C_2(0) = 1$, δηλαδή αρχική τοποθέτηση του ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη και
3. $C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}, C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi}$, δηλαδή αρχική τοποθέτηση του ηλεκτρονίου και στις δύο στάθμες με πιθανότητα $|C_1(0)|^2 = |C_2(0)|^2 = \frac{1}{2}$.

✓ **1. Αρχικές συνθήκες** $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$.

ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$, 1^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.59) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \\ \frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 1 = y_{10} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \right) y_{20} \\ 0 = y_{20} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} \right) y_{10} \end{cases} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} 1 = y_{10} + \frac{2A}{\Omega_R} y_{20} \\ 0 = y_{20} - \frac{2A}{\Omega_R} y_{10} \Rightarrow y_{20} = \frac{2A}{\Omega_R} y_{10} \end{cases} \Rightarrow 1 = y_{10} + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 y_{10} \Rightarrow$$

$$y_{10} = \frac{1}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2}, \quad y_{20} = \frac{\frac{2A}{\Omega_R}}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \quad (6.82)$$

όπου

$$A = \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{2\Omega}{\omega^2 - \Omega^2}. \quad (6.83)$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{i\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{+i\Delta t}}{i\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{i\Sigma} \right) \\ \frac{i\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{i\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{i\Sigma} \right) & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \\ \frac{\frac{2A}{\Omega_R}}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
 C_1(t) &= \frac{1}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R}\right)^2} \left[1 + A \left(\frac{e^{+i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \right] \\
 C_2(t) &= \frac{1}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R}\right)^2} \left[\frac{2A}{\Omega_R} + \frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \right]
 \end{aligned}
 \tag{6.84}$$

όπου $|C_1(t)|^2$ είναι η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρίσκεται στη κάτω στάθμη και $|C_2(t)|^2$ είναι η πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρίσκεται στη άνω στάθμη για κάθε χρονική στιγμή.

ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$, 2^{ας} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.60) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\begin{aligned}
 \mathbf{x}(0) &= \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{2} \left\{ \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \\ \frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} & 0 \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} + i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \left\{ \frac{1}{i2\omega\Delta} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{i2\omega\Sigma} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} \Rightarrow \\
 &\left\{ \begin{aligned} 1 &= z_{10} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \right) z_{20} + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{\Sigma} \right) z_{10} \Rightarrow 1 = \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{10} + \frac{2A}{\Omega_R} z_{20} \\ 0 &= z_{20} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} \right) z_{10} + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{\Sigma} \right) z_{20} \Rightarrow \frac{2A}{\Omega_R} z_{10} = \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{20} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \\
 &\left\{ \begin{aligned} 1 &= \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{10} + \frac{\left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2}{\left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right)} z_{10} \\ z_{20} &= \frac{\frac{2A}{\Omega_R}}{\left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right)} z_{10} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{aligned} z_{10} &= \frac{1 + \frac{A}{2\Omega}}{\left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right)^2 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \\ z_{20} &= \frac{\frac{2A}{\Omega_R}}{\left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right)^2 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \end{aligned} \right\}.
 \end{aligned}$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{-i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{i2\omega t}}{\Sigma} \right) & \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \\ \frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{\Sigma} \right) & 1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{-i2\omega t}}{\Sigma} \right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{10} e^{-iAt} \\ z_{20} e^{iAt} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
 C_1(t) &= \left[1 + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{-i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{i2\omega t}}{\Sigma} \right) \right] z_{10} e^{-iAt} + \left[\frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \right] z_{20} e^{iAt} \\
 C_2(t) &= \left[\frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \right] z_{10} e^{-iAt} + \left[1 + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{-i2\omega t}}{\Sigma} \right) \right] z_{20} e^{iAt}
 \end{aligned}
 \tag{6.85}$$

ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$, 1^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.80) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{bmatrix} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 1 = A_{11} - \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{21} \\ 0 = A_{21} + \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{11} \Rightarrow A_{21} = -\frac{\Omega_R}{4\omega} A_{11} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 = A_{11} + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2 A_{11} \\ A_{21} = -\frac{\Omega_R}{4\omega} A_{11} \end{array} \right\} \Rightarrow \boxed{A_{11} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}, \quad A_{21} = \frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}}$$

Επιπλέον, μέσω της Εξ. (6.67), γνωρίζουμε ότι

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1(0) = \frac{\Omega_R}{2} B_{11} = i \frac{\Omega_R}{2} y_2(0) \\ y_2(0) = \frac{\Omega_R}{2} B_{21} = i \frac{\Omega_R}{2} y_1(0) \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} B_{11} = i A_{21} = \frac{-i \frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} \\ B_{21} = i A_{11} = \frac{i}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} \end{array} \right\}$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\boxed{\begin{array}{l} C_1(t) = A_{11} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + i A_{21} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) - \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{-i2\omega t} \left[A_{21} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + i A_{11} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \right] \\ C_2(t) = A_{21} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + i A_{11} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i2\omega t} \left[A_{11} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + i A_{21} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \right] \end{array}} \quad (6.86)$$

ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$, 2^{ας} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.81) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 1 = A_{12} - \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{22} \\ 0 = A_{22} + \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{12} \Rightarrow A_{22} = -\frac{\Omega_R}{4\omega} A_{12} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 = A_{12} + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2 A_{12} \\ A_{22} = -\frac{\Omega_R}{4\omega} A_{12} \end{array} \right\} \Rightarrow \boxed{A_{12} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}, \quad A_{22} = \frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}}$$

Επιπλέον, μέσω της Εξ. (6.78), γνωρίζουμε ότι

$$\begin{cases} \dot{z}_1(0) = B \cdot B_{12} = i\alpha z_1(0) + i\beta z_2(0) \\ \dot{z}_2(0) = B \cdot B_{22} = i\beta z_1(0) - i\alpha z_2(0) \end{cases} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{12} = \frac{i\alpha A_{12} + i\beta A_{22}}{B} = i \frac{\left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \frac{1}{1+\left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} + \frac{\Omega_R}{2} \frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega}}{1+\left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}}{B} = 0 \\ B_{22} = \frac{i\beta A_{12} - i\alpha A_{22}}{B} = i \frac{\frac{\Omega_R}{2} \frac{1+\left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}{1+\left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}}{B} = \frac{i\Omega_R}{2B} \end{array} \right.$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + i\left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) & \frac{\Omega_R}{4\omega} (-e^{-i2\omega t}) \\ \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i2\omega t} & 1 - i\left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1(t) \\ z_2(t) \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} C_1(t) = \left[1 + i\left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \right] z_1(t) - \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{-i2\omega t} z_2(t) \\ C_2(t) = \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i2\omega t} z_1(t) + \left[1 - i\left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \right] z_2(t) \end{cases} \quad (6.87)$$

με

$$\begin{cases} z_1(t) = A_{12} \cos(Bt) + B_{12} \sin(Bt) \\ z_2(t) = A_{22} \cos(Bt) + B_{22} \sin(Bt) \end{cases} \text{ και } \left\{ \begin{array}{l} A_{12} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} \\ A_{22} = \frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} \\ B_{12} = 0 \\ B_{22} = \frac{i\Omega_R}{2B} \end{array} \right.$$

✓ 2. Αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 0, C_2(0) = 1$.

ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$, 1^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.59) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \\ \frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} 0 = y_{10} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \right) y_{20} \\ 1 = y_{20} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} \right) y_{10} \end{cases} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} 0 = y_{10} + \frac{2A}{\Omega_R} y_{20} \Rightarrow y_{10} = -\frac{2A}{\Omega_R} y_{20} \\ 1 = y_{20} - \frac{2A}{\Omega_R} y_{10} \end{cases} \Rightarrow 1 = y_{20} + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 y_{20} \Rightarrow$$

$$\boxed{y_{20} = \frac{1}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2}, \quad y_{10} = \frac{-\frac{2A}{\Omega_R}}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2}} \quad (6.88)$$

όπου

$$A = \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{2\Omega}{\omega^2 - \Omega^2}. \quad (6.89)$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{i\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{+i\Delta t}}{i\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{i\Sigma} \right) \\ \frac{i\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{i\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{i\Sigma} \right) & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{-\frac{2A}{\Omega_R}}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \\ \frac{1}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\boxed{\begin{aligned} C_1(t) &= \frac{1}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \left[-\frac{2A}{\Omega_R} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \right] \\ C_2(t) &= \frac{1}{1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2} \left[1 - A \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \right] \end{aligned}} \quad (6.90)$$

ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$, 2^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.60) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{2} \left\{ \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \\ \frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} & 0 \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} + i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \left\{ \frac{1}{i2\omega\Delta} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{i2\omega\Sigma} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} 0 = z_{10} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \right) z_{20} + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{\Sigma} \right) z_{10} \Rightarrow -\frac{2A}{\Omega_R} z_{20} = \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{10} \\ 1 = z_{20} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} \right) z_{10} + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{\Sigma} \right) z_{20} \Rightarrow 1 = \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{20} - \frac{2A}{\Omega_R} z_{10} \end{cases} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} z_{10} = \frac{-\frac{2A}{\Omega_R}}{\left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right)} z_{20} \\ 1 = \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right) z_{20} + \frac{\left(\frac{2A}{\Omega_R}\right)^2}{\left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right)} z_{20} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} z_{10} = \frac{-\frac{2A}{\Omega_R}}{\left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right)^2 + \left(\frac{2A}{\Omega_R}\right)^2} \\ z_{20} = \frac{1 + \frac{A}{2\Omega}}{\left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right)^2 + \left(\frac{2A}{\Omega_R}\right)^2} \end{array} \right\}.$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{-i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{i2\omega t}}{\Sigma}\right) & \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma}\right) \\ \frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{\Sigma}\right) & 1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{-i2\omega t}}{\Sigma}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{10} e^{-iAt} \\ z_{20} e^{iAt} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} C_1(t) = \left[1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{-i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{i2\omega t}}{\Sigma}\right)\right] z_{10} e^{-iAt} + \left[\frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma}\right)\right] z_{20} e^{iAt} \\ C_2(t) = \left[\frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{\Sigma}\right)\right] z_{10} e^{-iAt} + \left[1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{-i2\omega t}}{\Sigma}\right)\right] z_{20} e^{iAt} \end{cases} \quad (6.91)$$

ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$, 1^ης τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.80) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{bmatrix} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 0 = A_{11} - \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{21} \Rightarrow A_{11} = \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{21} \\ 1 = A_{21} + \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{11} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{11} = \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{21} \\ 1 = A_{21} + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2 A_{21} \end{array} \right\} \Rightarrow \boxed{A_{11} = \frac{\frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}, \quad A_{21} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}}$$

Επιπλέον, μέσω της Εξ. (6.67), γνωρίζουμε ότι

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{y}_1(0) = \frac{\Omega_R}{2} B_{11} = i \frac{\Omega_R}{2} y_2(0) \\ \dot{y}_2(0) = \frac{\Omega_R}{2} B_{21} = i \frac{\Omega_R}{2} y_1(0) \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} B_{11} = i A_{21} = \frac{i}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} \\ B_{21} = i A_{11} = \frac{i \frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} \end{array} \right\}.$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$x(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} C_1(t) = A_{11} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + iA_{21} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) - \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{-i2\omega t} \left[A_{21} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + iA_{11} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \right] \\ C_2(t) = A_{21} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + iA_{11} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i2\omega t} \left[A_{11} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + iA_{21} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \right] \end{cases} \quad (6.92)$$

ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$, 2^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.81) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 0 = A_{12} - \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{22} \Rightarrow A_{12} = \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{22} \\ 1 = A_{22} + \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{12} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{12} = \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{22} \\ 1 = A_{22} + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2 A_{22} \end{array} \right\} \Rightarrow \boxed{A_{12} = \frac{\frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}, \quad A_{22} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}}$$

Επιπλέον, μέσω της Εξ. (6.78), γνωρίζουμε ότι

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{z}_1(0) = B \cdot B_{12} = i\alpha z_1(0) + i\beta z_2(0) \\ \dot{z}_2(0) = B \cdot B_{22} = i\beta z_1(0) - i\alpha z_2(0) \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{12} = \frac{i\alpha A_{12} + i\beta A_{22}}{B} = i \frac{\frac{\Omega_R}{2} \frac{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}}{B} = \frac{i\Omega_R}{2B} \\ B_{22} = \frac{i\beta A_{12} - i\alpha A_{22}}{B} = i \frac{\frac{\Omega_R}{2} \frac{\frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} - \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \frac{1}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2}}{B} = 0 \end{array} \right\}.$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + i \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) & \frac{\Omega_R}{4\omega} (-e^{-i2\omega t}) \\ \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i2\omega t} & 1 - i \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1(t) \\ z_2(t) \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} C_1(t) = \left[1 + i \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \right] z_1(t) - \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{-i2\omega t} z_2(t) \\ C_2(t) = \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i2\omega t} z_1(t) + \left[1 - i \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \right] z_2(t) \end{cases} \quad (6.93)$$

με

$$\left\{ \begin{array}{l} z_1 = A_{12} \cos(Bt) + B_{12} \sin(Bt) \\ z_2 = A_{22} \cos(Bt) + B_{22} \sin(Bt) \end{array} \right\} \text{ και } \left\{ \begin{array}{l} A_{12} = \frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega}}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} \\ A_{22} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2} \\ B_{12} = \frac{i\Omega_R}{2B} \\ B_{22} = 0 \end{array} \right\}.$$

✓ 3. Αρχικές συνθήκες $C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$, $C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi}$, με πιθανότητα $|C_1(0)|^2 = |C_2(0)|^2 = \frac{1}{2}$.

ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$, 1^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.59) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \\ \frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{10} \\ y_{20} \end{bmatrix} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} = y_{10} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \right) y_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} = y_{20} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} \right) y_{10} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} = y_{10} + \frac{2A}{\Omega_R} y_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} = -\frac{2A}{\Omega_R} y_{10} + y_{20} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} = \frac{2A}{\Omega_R} y_{10} + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 y_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} = -\frac{2A}{\Omega_R} y_{10} + y_{20} \end{array} \right\} \stackrel{(+)}{\Rightarrow}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} = y_{20} + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 y_{20} \Rightarrow y_{20} = \frac{\frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} + e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 \right)}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} = y_{10} + \frac{2A}{\Omega_R} y_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} = -\frac{2A}{\Omega_R} y_{10} + y_{20} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} = y_{10} + \frac{2A}{\Omega_R} y_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{2A}{\Omega_R} \right) e^{i\phi} = \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 y_{10} + \left(-\frac{2A}{\Omega_R} \right) y_{20} \end{array} \right\} \stackrel{(+)}{\Rightarrow}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\phi} = y_{10} + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 y_{10} \Rightarrow y_{10} = \frac{e^{i\theta} - \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 \right)}$$

όπου

$$A = \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{2\Omega}{\omega^2 - \Omega^2}. \quad (6.94)$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{i\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{+i\Delta t}}{i\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{i\Sigma} \right) \\ \frac{i\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{i\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{i\Sigma} \right) & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{e^{i\theta} - \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 \right)} \\ \frac{\frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} + e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 \right)} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} C_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 \right)} \left[\left(e^{i\theta} - \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\phi} \right) + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \left(\frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} + e^{i\phi} \right) \right] \\ C_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 \right)} \left[\frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{i\Sigma t}}{\Sigma} \right) \left(e^{i\theta} - \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\phi} \right) + \left(\frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} + e^{i\phi} \right) \right] \end{cases} \quad (6.95)$$

ΛΥΣΗ για $\Delta \neq 0$, 2^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.60) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{2} \left\{ \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \\ \frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} + i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \left\{ \frac{1}{i2\omega\Delta} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{1}{i2\omega\Sigma} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} z_{10} \\ z_{20} \end{bmatrix} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} &= z_{10} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Delta} - \frac{1}{\Sigma} \right) z_{20} + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{\Sigma} \right) z_{10} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} &= z_{20} + \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{1}{\Sigma} - \frac{1}{\Delta} \right) z_{10} + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{1}{\Delta} + \frac{1}{\Sigma} \right) z_{20} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} &= \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{10} + \frac{2A}{\Omega_R} z_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} &= -\frac{2A}{\Omega_R} z_{10} + \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{20} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} &= \frac{2A}{\Omega_R} \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{10} + \left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 z_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) e^{i\phi} &= -\frac{2A}{\Omega_R} \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) z_{10} + \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right)^2 z_{20} \end{aligned} \right\} \stackrel{(+)}{\Rightarrow}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) e^{i\phi} = \left[\left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 + \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right)^2 \right] z_{20} \Rightarrow$$

$$z_{20} = \frac{\frac{2A}{\Omega_R} e^{i\theta} + \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right) e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left[\left(\frac{2A}{\Omega_R} \right)^2 + \left(1 + \frac{A}{2\Omega} \right)^2 \right]}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} = \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right) z_{10} + \frac{2A}{\Omega_R} z_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} = -\frac{2A}{\Omega_R} z_{10} + \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right) z_{20} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right) e^{i\theta} = \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right)^2 z_{10} + \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right) \frac{2A}{\Omega_R} z_{20} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{2A}{\Omega_R}\right) e^{i\phi} = \left(\frac{2A}{\Omega_R}\right)^2 z_{10} + \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right) \left(-\frac{2A}{\Omega_R}\right) z_{20} \end{array} \right\} \stackrel{(+)}{\Rightarrow}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right) e^{i\theta} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\phi} = \left[\left(\frac{2A}{\Omega_R}\right)^2 + \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right)^2 \right] z_{10} \Rightarrow$$

$$z_{10} = \frac{\left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right) e^{i\theta} - \frac{2A}{\Omega_R} e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left[\left(\frac{2A}{\Omega_R}\right)^2 + \left(1 + \frac{A}{2\Omega}\right)^2 \right]}$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{-i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{i2\omega t}}{\Sigma}\right) & \frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma}\right) \\ \frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{\Sigma}\right) & 1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{-i2\omega t}}{\Sigma}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_{10} e^{-iAt} \\ z_{20} e^{iAt} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{array}{l} C_1(t) = \left[1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{-i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{i2\omega t}}{\Sigma}\right) \right] z_{10} e^{-iAt} + \left[\frac{\Omega_R}{2} \left(\frac{e^{i\Delta t}}{\Delta} - \frac{e^{-i\Sigma t}}{\Sigma}\right) \right] z_{20} e^{iAt} \\ C_2(t) = \left[\frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{e^{-i\Delta t}}{\Delta} + \frac{e^{+i\Sigma t}}{\Sigma}\right) \right] z_{10} e^{-iAt} + \left[1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(\frac{e^{i2\omega t}}{\Delta} + \frac{e^{-i2\omega t}}{\Sigma}\right) \right] z_{20} e^{iAt} \end{array} \quad (6.96)$$

ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$, 1^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.80) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{21} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} = A_{11} - \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{21} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} = A_{21} + \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{11} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} = A_{11} - \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{21} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\phi} = \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{21} + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2 A_{11} \end{array} \right\} \stackrel{(+)}{\Rightarrow}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} + \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\phi} = \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2\right) A_{11} \Rightarrow A_{11} = \frac{e^{i\theta} + \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2\right)}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} = A_{11} - \frac{\Omega_R}{4\omega}A_{21} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} = A_{21} + \frac{\Omega_R}{4\omega}A_{11} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)e^{i\theta} = \left(-\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)A_{11} + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2 A_{21} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} = A_{21} + \frac{\Omega_R}{4\omega}A_{11} \end{array} \right\} \stackrel{(+)}{\Rightarrow}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)e^{i\theta} + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} = \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2\right)A_{21} \Rightarrow A_{21} = \frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega}e^{i\theta} + e^{i\phi}}{\sqrt{2}\left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2\right)}$$

Επιπλέον, μέσω της Εξ. (6.67), γνωρίζουμε ότι

$$\left\{ \begin{array}{l} y_1(0) = \frac{\Omega_R}{2}B_{11} = i\frac{\Omega_R}{2}y_2(0) \\ y_2(0) = \frac{\Omega_R}{2}B_{21} = i\frac{\Omega_R}{2}y_1(0) \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} B_{11} = iA_{21} = i\frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega}e^{i\theta} + e^{i\phi}}{\sqrt{2}\left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2\right)} \\ B_{21} = iA_{11} = i\frac{e^{i\theta} + \frac{\Omega_R}{4\omega}e^{i\phi}}{\sqrt{2}\left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2\right)} \end{array} \right\}.$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i2\omega t} \\ e^{i2\omega t} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} C_1(t) = A_{11} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + iA_{21} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) - \frac{\Omega_R}{4\omega}e^{-i2\omega t} \left[A_{21} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + iA_{11} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \right] \\ C_2(t) = A_{21} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + iA_{11} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + \frac{\Omega_R}{4\omega}e^{i2\omega t} \left[A_{11} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) + iA_{21} \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \right] \end{cases} \quad (6.97)$$

ΛΥΣΗ για $\Delta = 0$, 2^{ης} τάξεως μεθόδου επανισώσεως

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. (6.81) και $\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} \end{bmatrix}$, έχουμε

$$\mathbf{x}(0) = \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \end{bmatrix} + \frac{\Omega_R}{4\omega} \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} = A_{12} - \frac{\Omega_R}{4\omega}A_{22} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi} = A_{22} + \frac{\Omega_R}{4\omega}A_{12} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} = A_{12} - \frac{\Omega_R}{4\omega}A_{22} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\Omega_R}{4\omega}e^{i\phi} = \frac{\Omega_R}{4\omega}A_{22} + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2 A_{12} \end{array} \right\} \stackrel{(+)}{\Rightarrow}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta} + \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{\Omega_R}{4\omega}e^{i\phi} = \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2\right)A_{12} \Rightarrow A_{12} = \frac{e^{i\theta} + \frac{\Omega_R}{4\omega}e^{i\phi}}{\sqrt{2}\left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega}\right)^2\right)}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\theta} = A_{12} - \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{22} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} = A_{22} + \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{12} \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{\Omega_R}{4\omega} \right) e^{i\theta} = \left(-\frac{\Omega_R}{4\omega} \right) A_{12} + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 A_{22} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} = A_{22} + \frac{\Omega_R}{4\omega} A_{12} \end{array} \right\} \stackrel{(+)}{\Rightarrow}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(-\frac{\Omega_R}{4\omega} \right) e^{i\theta} + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi} = \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right) A_{22} \Rightarrow A_{22} = \frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\theta} + e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)}$$

Επιπλέον, μέσω της Εξ. (6.78), γνωρίζουμε ότι

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{z}_1(0) = B \cdot B_{12} = i\alpha z_1(0) + i\beta z_2(0) \\ \dot{z}_2(0) = B \cdot B_{22} = i\beta z_1(0) - i\alpha z_2(0) \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{l} B_{12} = \frac{i\alpha A_{12} + i\beta A_{22}}{B} = i \frac{\left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} (e^{i\theta} + \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\phi}) + \frac{\Omega_R}{2} \left(-\frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\theta} + e^{i\phi} \right)}{\sqrt{2} B \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)} = \\ = i \frac{\left(\left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} - \frac{\Omega_R \Omega_R}{2 \cdot 4\omega} \right) e^{i\theta} + \left(\left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \frac{\Omega_R}{4\omega} + \frac{\Omega_R}{2} \right) e^{i\phi}}{\sqrt{2} B \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)} = i \frac{\frac{\Omega_R}{2} \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right) e^{i\phi}}{\sqrt{2} B \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)} = i \frac{\Omega_R e^{i\phi}}{2\sqrt{2} B} \\ B_{22} = \frac{i\beta A_{12} - i\alpha A_{22}}{B} = i \frac{\frac{\Omega_R}{2} (e^{i\theta} + \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\phi}) - \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \left(-\frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\theta} + e^{i\phi} \right)}{\sqrt{2} B \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)} = \\ = i \frac{\left(\frac{\Omega_R}{2} + \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \frac{\Omega_R}{4\omega} \right) e^{i\theta} + \left(\frac{\Omega_R \Omega_R}{2 \cdot 4\omega} - \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega} \right) e^{i\phi}}{\sqrt{2} B \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)} = i \frac{\frac{\Omega_R}{2} \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right) e^{i\theta}}{\sqrt{2} B \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)} = i \frac{\Omega_R e^{i\theta}}{2\sqrt{2} B} \end{array} \right.$$

Επομένως, η λύση του προβλήματος είναι

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 + i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) & \frac{\Omega_R}{4\omega} (-e^{-i2\omega t}) \\ \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i2\omega t} & 1 - i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1(t) \\ z_2(t) \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{array}{l} C_1(t) = \left[1 + i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \right] z_1(t) - \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{-i2\omega t} z_2(t) \\ C_2(t) = \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i2\omega t} z_1(t) + \left[1 - i \left(\frac{\Omega_R}{2} \right)^2 \frac{1}{2\omega^2} \sin(2\omega t) \right] z_2(t) \end{array} \quad (6.98)$$

με

$$\left\{ \begin{array}{l} z_1 = A_{12} \cos(Bt) + B_{12} \sin(Bt) \\ z_2 = A_{22} \cos(Bt) + B_{22} \sin(Bt) \end{array} \right\} \text{ και } \left\{ \begin{array}{l} A_{12} = \frac{e^{i\theta} + \frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)} \\ A_{22} = \frac{-\frac{\Omega_R}{4\omega} e^{i\theta} + e^{i\phi}}{\sqrt{2} \left(1 + \left(\frac{\Omega_R}{4\omega} \right)^2 \right)} \\ B_{12} = i \frac{\Omega_R e^{i\phi}}{2\sqrt{2}B} \\ B_{22} = i \frac{\Omega_R e^{i\theta}}{2\sqrt{2}B} \end{array} \right\}.$$

6.3 Αποτελέσματα των μεθόδων NRWA, RWA, και AM πρώτης και δεύτερης τάξεως

Σε αυτό το σημείο θα συγκρίνουμε τις μεθόδους που χρησιμοποιήσαμε για να λύσουμε το πρόβλημά μας, καθώς και θα μελετήσουμε το όρια των προσεγγιστικών λύσεων με RWA και AM. Στις εικόνες που ακολουθούν, ο οριζόντιος άξονας αντιστοιχεί στο μέγεθος $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, δηλαδή, στον χρόνο t διαιρούμενο με την περίοδο της RWA, T_{RWA} , ενώ ο κάθετος άξονας αντιστοιχεί στην πιθανότητα το ηλεκτρόνιο να βρίσκεται στην κάτω στάθμη, P_1 . Για την περίπτωση του αποσυντονισμού ($\Delta \neq 0$), έχουμε ορίσει τρεις διαφορετικές μικρές ποσότητες ϵ , δηλαδή τις $\frac{\Omega_R}{\Delta}$, $\frac{\Omega_R}{\Sigma}$, $\frac{\Omega_R}{\omega}$. Για την περίπτωση του συντονισμού ($\Delta = 0$), αναπόφευκτα όταν το Δ γίνεται πολύ μικρό, το $\frac{\Omega_R}{\Delta}$ γίνεται πολύ μεγάλο, με αποτέλεσμα οι λύσεις της περίπτωσης του αποσυντονισμού να μην είναι επιτυχημένες. Έτσι, αντιμετωπίσαμε την περίπτωση του συντονισμού με διαφορετικό τρόπο, ορίζοντας μόνο ένα ϵ , δηλαδή το $\frac{\Omega_R}{\omega}$. Γενικότερα, η ακρίβεια της AM δεύτερης τάξεως έχει ένα εύρος μεταξύ των όρων $\frac{\Omega_R}{\Delta} \cdot \frac{\Omega_R}{\omega} = \frac{\Omega_R^2}{\Delta\omega}$ και $\frac{\Omega_R}{\Sigma} \cdot \frac{\Omega_R}{\omega} = \frac{\Omega_R^2}{\Sigma\omega}$, εξαιτίας του γεγονότος ότι οι όροι αυτοί εμφανίζονται στις τελικές εξισώσεις [Εξ. (6.60)], όντας οι τελευταίοι όροι που δεν αγνοούμε στη μέθοδο. Η AM πρώτης τάξεως συνήθως δεν είναι επιτυχημένη, διότι δεν πλησιάζει την αριθμητική επίλυση. Ο λόγος που την περιλαμβάνουμε στις εικόνες είναι για λόγους πληρότητας και για να φαίνεται ο πραγματικός λόγος που προχωρήσαμε στην AM δεύτερης τάξεως για την επίλυση του προβλήματος.

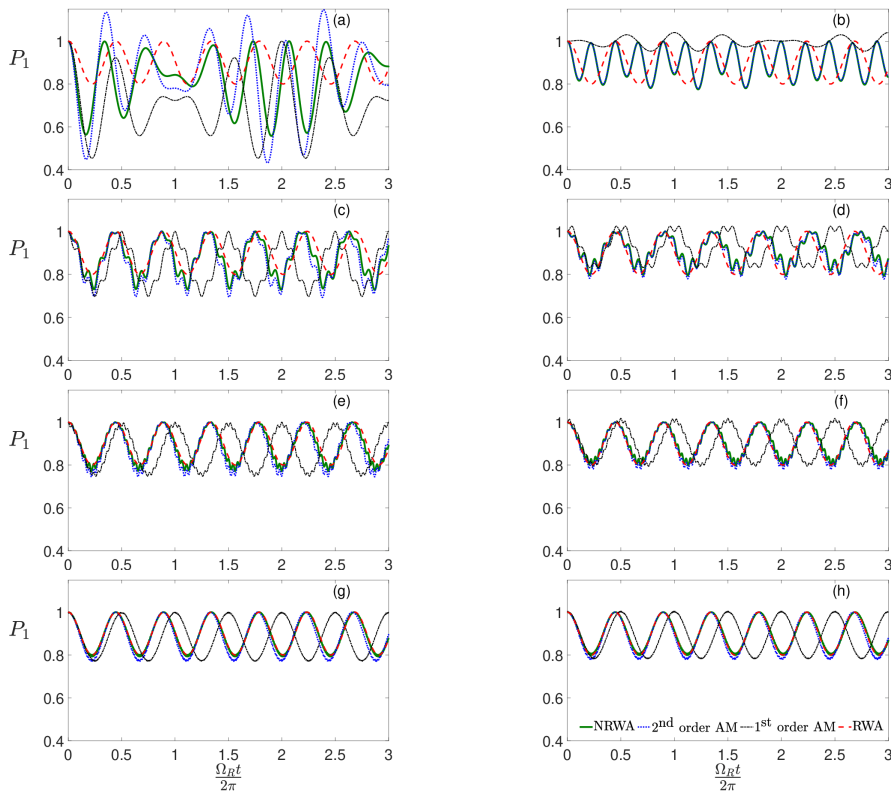
Οι τιμές του ϵ επιλέχθηκαν με σκοπό να παρουσιάσουμε περιπτώσεις που η AM γίνεται επιτυχημένη. Επομένως, οι τιμές επιλέχθηκαν μέχρι την τάξη μεγέθους 0.01. Για μικρότερες τιμές, η AM είναι επιτυχημένη. Επιπλέον, πολύ μικρές τιμές του ϵ σημαίνουν ασήμαντη διαταραχή, είναι δηλαδή τετριμμένες περιπτώσεις.

6.3.1 Αποτελέσματα για ηλεκτρόνιο τοποθετημένο αρχικώς στην κάτω στάθμη

Έστωσαν οι αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 1$, $C_2(0) = 0$. Με άλλα λόγια, τοποθετούμε αρχικά το ηλεκτρόνιο στην κάτω στάθμη.

6.3.1.1 Αποσυντονισμός

Στην Εικόνα 6.1 μεταβάλλουμε το $\epsilon_2 = 1/\Sigma$ και κρατάμε σταθερό το $\epsilon_1 = \Omega_R/\Delta = -0.5$ ($\epsilon_1 = 0.5$) στην αριστερή (δεξιά) στήλη. Για $\epsilon_1 > 0$, όσο το ϵ_2 μικραίνει, η RWA ταυτίζεται με την NRWA. Σε όλες τις περιπτώσεις, η AM δεύτερης τάξεως προσεγγίζει πολύ καλά την NRWA. Για $\epsilon_1 < 0$, όσο το ϵ_2 μικραίνει, η AM δεύτερης τάξεως και η RWA ταυτίζονται με την NRWA. Η διαφορετική συμπεριφορά της AM για την αρνητική και θετική τιμή του ϵ_1 οφείλεται στο $\epsilon_3 = \Omega_R/\omega$, το οποίο είναι διαφορετικό σε κάθε περίπτωση,

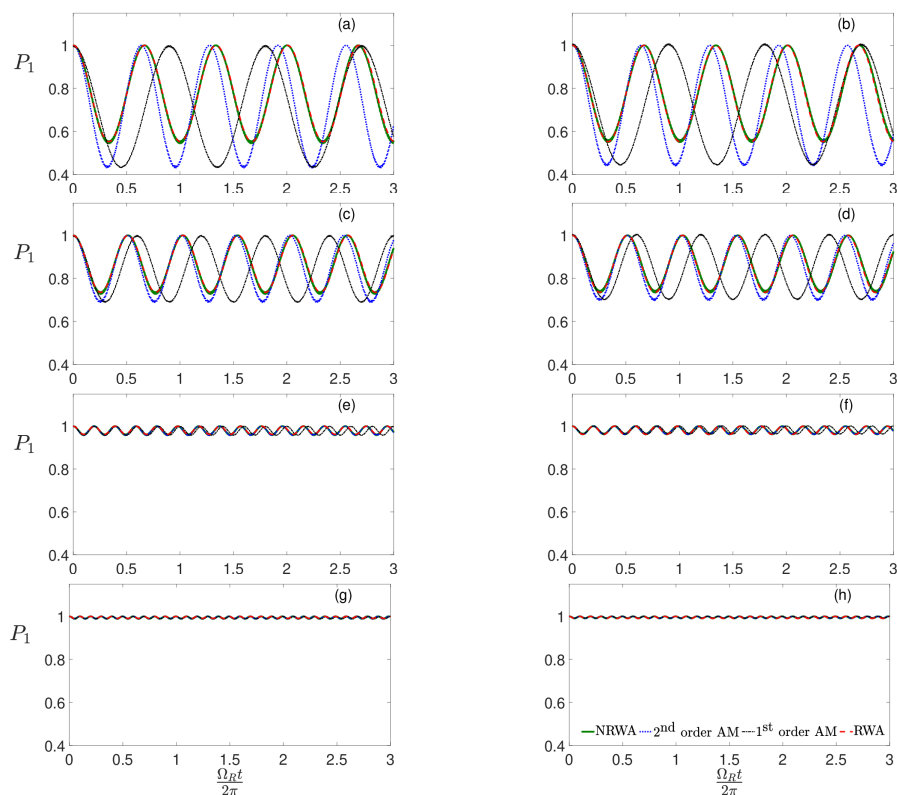


Εικόνα 6.1: $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$ για $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = -0.5$ (αριστερή στήλη) και $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = 0.5$ (δεξιά στήλη), μεταβάλλοντας το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma}$. (a), (b) $\epsilon_2 = 0.4$. (c), (d) $\epsilon_2 = 0.1$. (e), (f) $\epsilon_2 = 0.04$. (g), (h) $\epsilon_2 = 0.01$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη - -), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες \cdots) και τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία \dashdot).

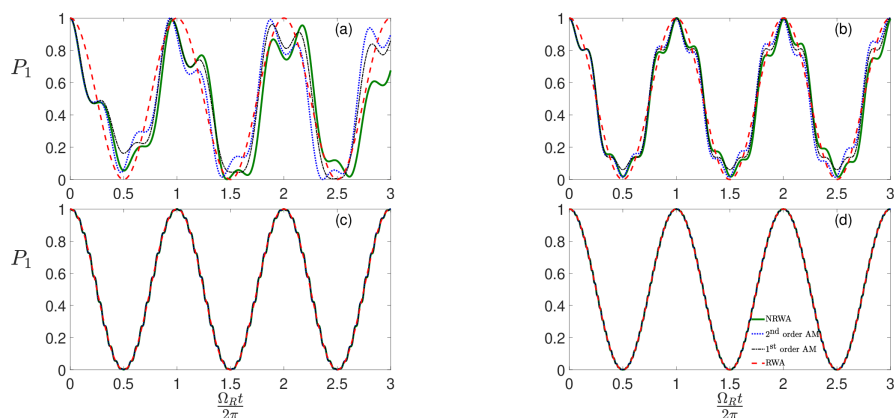
δηλαδή, για $\epsilon_1 > 0$, το ϵ_3 είναι μικρότερο από την περίπτωση που $\epsilon_1 < 0$. Στην Εικόνα 6.2 μεταβάλλουμε το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$ και κρατάμε σταθερό το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$. Στην αριστερή (δεξιά) στήλη παρουσιάζονται οι περιπτώσεις για $\epsilon_1 < 0$ ($\epsilon_1 > 0$). Η RWA ταυτίζεται με την NRWA, αλλά όχι με την AM δεύτερης τάξεως. Όσο το ϵ_1 γίνεται μικρότερο, η AM προσεγγίζει την NRWA. Οι ταλαντώσεις σβήνουν όσο το ϵ_1 μικραίνει. Επιπλέον, οι ταλαντώσεις στην ίδια γραμμή έχουν μικρή διαφορά εξαιτίας της τιμής του ϵ_3 . Στις Εικόνες 6.1, 6.2, τα διαγράμματα τις ίδιας γραμμής φαίνονται πανομοιότυπα εξαιτίας του $\epsilon_3 = \frac{\Omega_R}{\omega}$, το οποίο είναι σχεδόν ίδιο, εκτός από την πρώτη γραμμή της Εικόνας 6.1. Για παράδειγμα, στην Εικόνα 6.1, τα δύο διαγράμματα τις τελευταίας γραμμής έχουν $\epsilon_1 = -0.5$, $\epsilon_2 = 0.01$, $\epsilon_3 = 1/49$ και $\epsilon_1 = 0.5$, $\epsilon_2 = 0.01$, $\epsilon_3 = 1/51$, αντίστοιχα, ενώ τα δύο διαγράμματα της πρώτης γραμμής έχουν $\epsilon_1 = -0.5$, $\epsilon_2 = 0.4$, $\epsilon_3 = 4$ και $\epsilon_1 = 0.5$, $\epsilon_2 = 0.4$, $\epsilon_3 = 4/9$, αντίστοιχα. Επομένως, η AM δεύτερης τάξεως ταυτίζεται με την NRWA όταν τα ϵ_1 , ϵ_2 και ϵ_3 είναι αρκούντως μικρά.

6.3.1.2 Συντονισμός

Στην Εικόνα 6.3 παρουσιάζουμε το P_1 συναρτήσει του $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, μεταβάλλοντας το $\epsilon = \frac{\Omega_R}{\omega}$. Παρατηρούμε ότι όσο το ϵ μικραίνει, η AM ταυτίζεται με την NRWA. Επιπλέον, εφόσον βρισκόμαστε στον συντονισμό, οι ταλαντώσεις είναι ιδιαίτερα ισχυρές, της τάξεως της μονάδας.



Εικόνα 6.2: $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, για $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$, μεταβάλλοντας το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$. (a) $\epsilon_1 = -0.9$. (b) $\epsilon_1 = 0.9$. (c) $\epsilon_1 = -0.6$. (d) $\epsilon_1 = 0.6$. (e) $\epsilon_1 = -0.2$. (f) $\epsilon_1 = 0.2$. (g) $\epsilon_1 = -0.1$. (h) $\epsilon_1 = 0.1$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη --), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες \cdots) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία \dashdot).



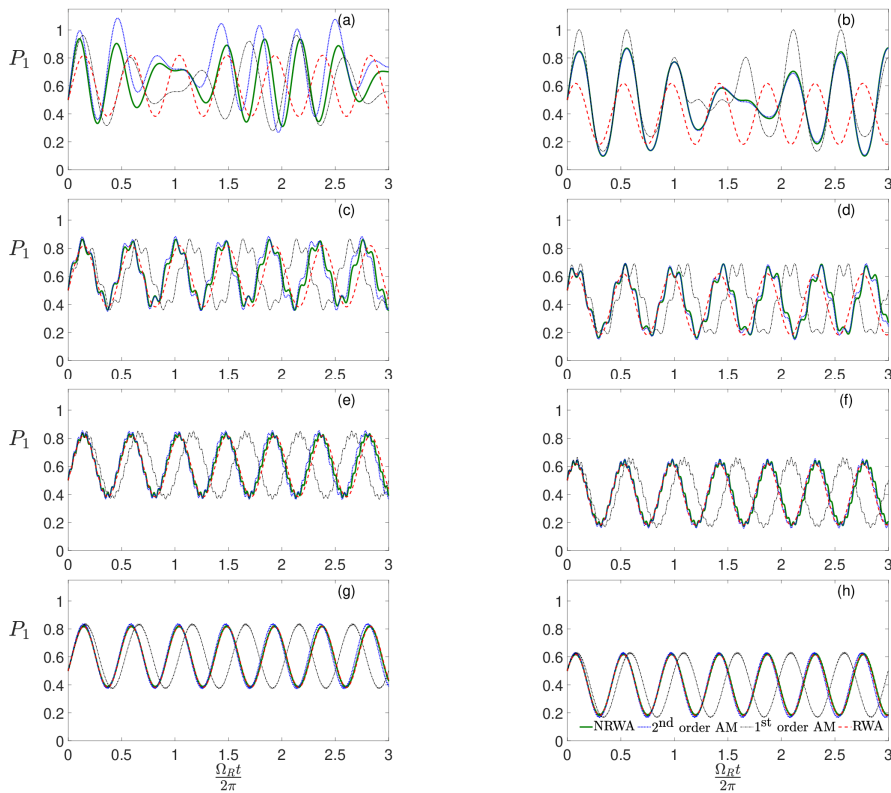
Εικόνα 6.3: $\Delta = 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, μεταβάλλοντας το $\epsilon = \frac{\Omega_R}{\omega}$. (a) $\epsilon = 0.9$. (b) $\epsilon = 0.5$. (c) $\epsilon = 0.1$. (d) $\epsilon = 0.05$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη --), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες \cdots) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία \dashdot).

6.3.2 Αποτελέσματα για ηλεκτρόνιο τοποθετημένο αρχικώς και στις δύο στάθμες με την ίδια πιθανότητα, αλλά με διαφορά φάσεως

Έστωσαν οι αρχικές συνθήκες $C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\theta}$, $C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi}$. Με άλλα λόγια, τοποθετούμε αρχικά το ηλεκτρόνιο και στις δύο στάθμες κατά το ήμισυ, αλλά με μια διαφορά φάσης $\theta - \phi$.

6.3.2.1 Αποσυντονισμός

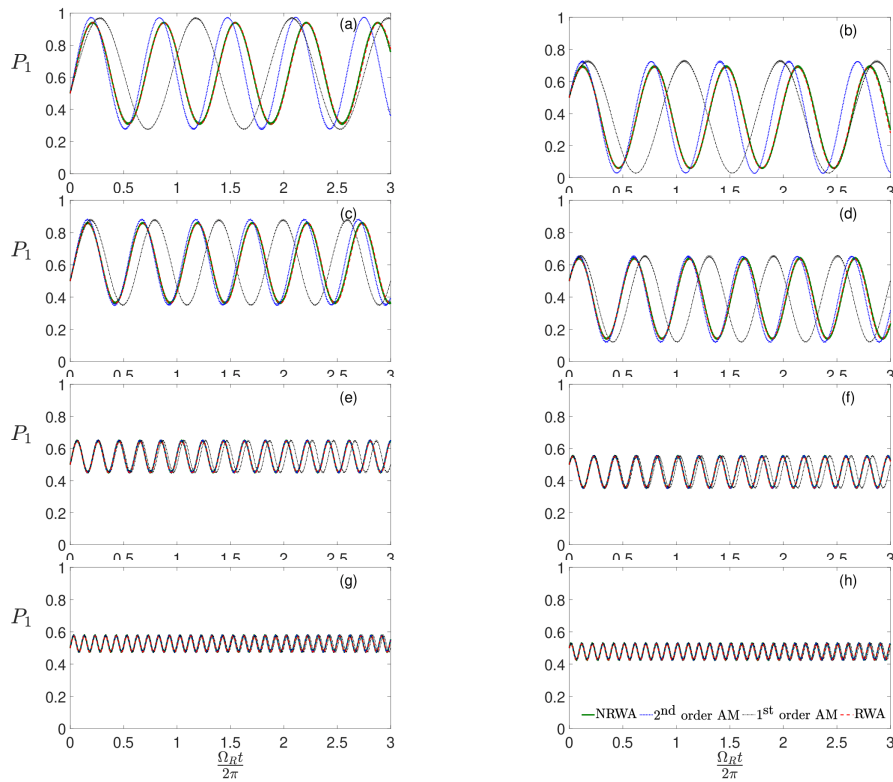
Στην Εικόνα 6.4 μεταβάλλουμε το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma}$, κρατώντας σταθερό το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = -0.5$ ($\epsilon_1 = 0.5$) στην αριστερή (δεξιά) στήλη, με $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. Παρότι οι αρχικές πιθανότητες στις δύο στάθμες είναι ίσες, η διαφορά φάσης των αρχικών κυματοσυναρτήσεων οδηγεί σε ισχυρές ταλαντώσεις. Μειώνοντας το ϵ_2 , η AM δεύτερης τάξεως πλησιάζει την NRWA.



Εικόνα 6.4: $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$ για $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = -0.5$ (αριστερή στήλη) και $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = 0.5$ (δεξιά στήλη), μεταβάλλοντας το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma}$ με $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (a), (b) $\epsilon_2 = 0.4$. (c), (d) $\epsilon_2 = 0.1$. (e), (f) $\epsilon_2 = 0.04$. (g), (h) $\epsilon_2 = 0.01$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη - -), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ···) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-).

Στην Εικόνα 6.5 μεταβάλλουμε το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$, κρατώντας σταθερό το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$ με $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. Παρότι οι αρχικές πιθανότητες είναι ίσες στις δύο στάθμες, η διαφορά φάσεως των αρχικών κυματοσυναρτήσεων οδηγεί σε ισχυρές ταλαντώσεις· ένα καθαρά συνεκτικό φαινόμενο. Μειώνοντας το $|\epsilon_1|$, η AM δεύτερης τάξεως πλησιάζει την NRWA. Τα συμπεράσματα για την επίδραση της τάξης μεγέθους των $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$ ισχύουν κι εδώ.

Στην Εικόνα 6.6 κρατάμε σταθερά τα $\epsilon_1 = 0.5$ και $\epsilon_2 = 0.01$, μεταβάλλοντας την αρχική διαφορά φάσης $\theta - \phi$. Παρατηρούμε εδώ μια ακόμη πτυχή της συνεκτικότητας, μια κατακόρυφη και οριζόντια μετατόπιση των ταλαντώσεων.



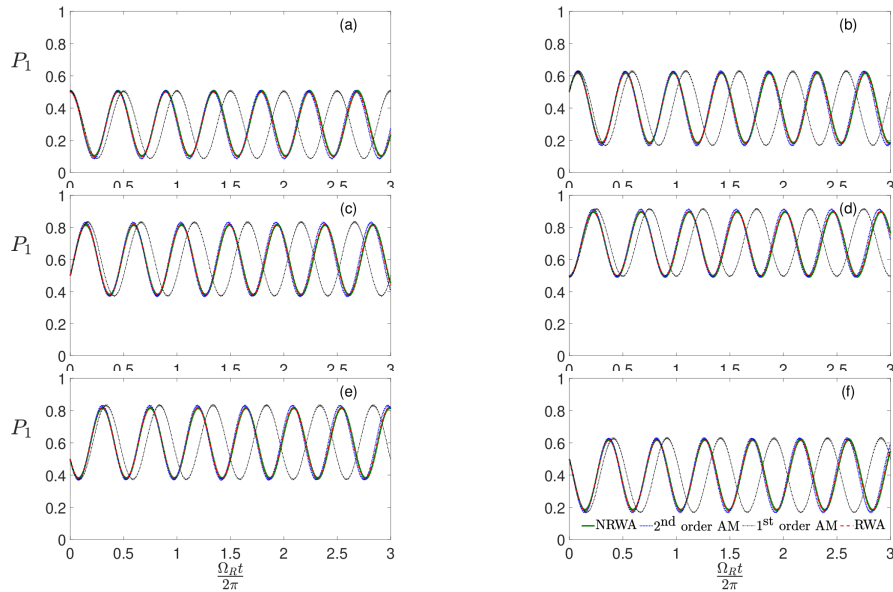
Εικόνα 6.5: $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, για $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$, μεταβάλλοντας το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$ με $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (a) $\epsilon_1 = -0.9$. (b) $\epsilon_1 = 0.9$. (c) $\epsilon_1 = -0.6$. (d) $\epsilon_1 = 0.6$. (e) $\epsilon_1 = -0.2$. (f) $\epsilon_1 = 0.2$. (g) $\epsilon_1 = -0.1$. (h) $\epsilon_1 = 0.1$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη ---), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ···) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-).

6.3.2.2 Συντονισμός

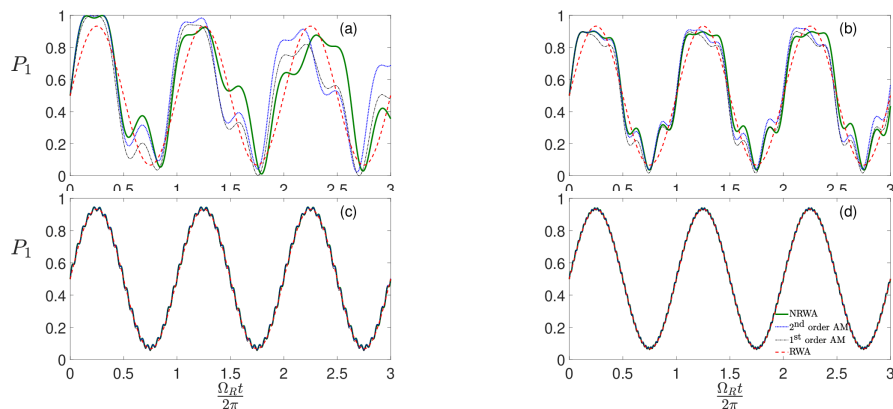
Στην Εικόνα 6.7 μεταβάλλουμε το $\epsilon = \frac{\Omega_R}{\omega}$, με αρχική διαφορά φάσης $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. Παρατηρούμε ότι όσο το ϵ μικραίνει, τόσο η AM ταυτίζεται με την NRWA. Στην Εικόνα 6.8 κρατάμε σταθερό το $\epsilon = 0.1$, μεταβάλλοντας την αρχική διαφορά φάσης, $\theta - \phi$. Παρατηρούμε ότι με αυτόν τον τρόπο μπορούμε να χειραγωγήσουμε το πλάτος των ταλαντώσεων.

6.3.3 Σύγκριση των περιπτώσεων συντονισμού και αποσυντονισμού με τη μέθοδο επανισώσεως

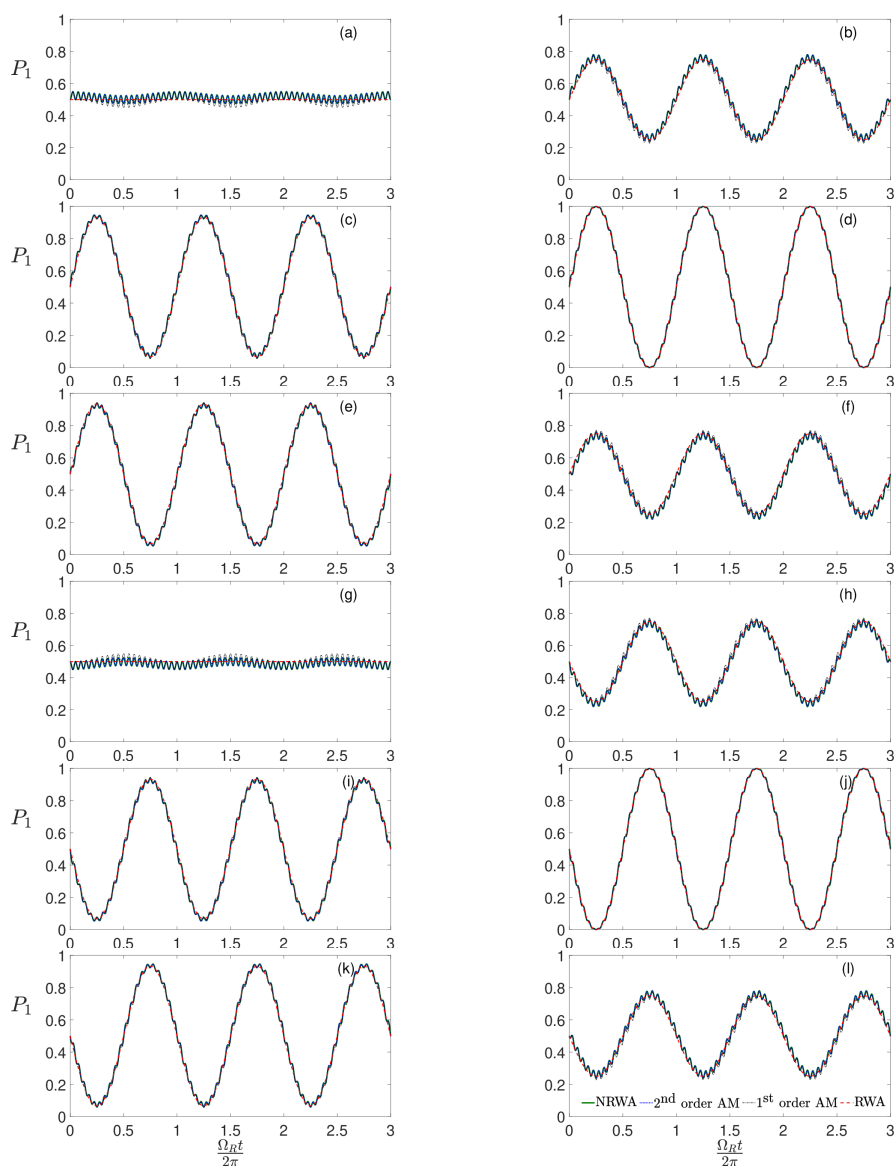
Μια εύλογη απορία του/της αναγνώστη/-στριας είναι το γιατί παρουσιάζουμε δύο διαφορετικές εκδοχές της μεθόδου επανισώσεως, για τον αποσυντονισμό και για τον συντονισμό. Έχουμε ήδη δώσει μια εξήγηση νωρίτερα: Όταν το Δ γίνεται μικρό, το $\frac{\Omega_R}{\Delta}$ γίνεται πολύ μεγάλο, επομένως η AM δεν είναι πλέον ακριβής. Γι' αυτό η AM λύθηκε με διαφορετικό τρόπο στον συντονισμό. Σε αυτό το σημείο θα δώσουμε μερικά παραδείγματα. Στην Εικόνα 6.9, μεταβάλλουμε το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$ και κρατάμε σταθερό το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$. Παρατηρούμε ότι για $\epsilon_1 < 1$, η AM δεύτερης τάξεως για τον αποσυντονισμό είναι πιο κοντά στην αριθμητική λύση (NRWA) από την AM δεύτερης τάξεως για τον συντονισμό. Ωστόσο, για $\epsilon_1 > 1$, το Δ γίνεται τόσο μικρό ώστε η AM δεύτερης τάξεως για τον συντονισμό να πλησιάζει την NRWA περισσότερο από τη δεύτερης τάξεως AM για τον αποσυντονισμό.



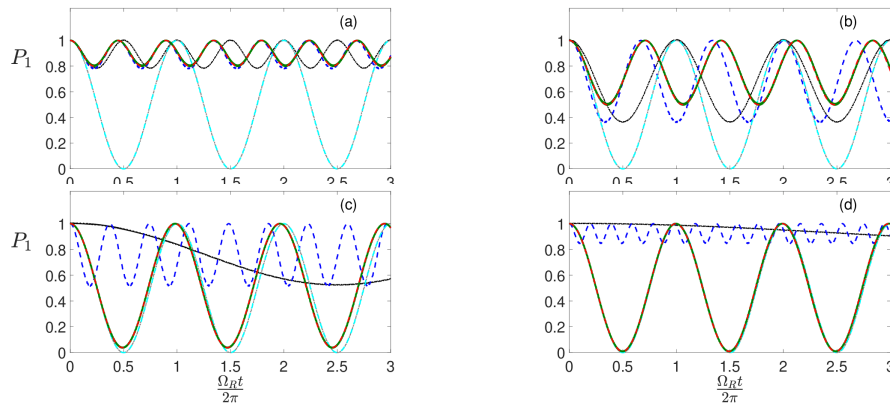
Εικόνα 6.6: $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$ για $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta} = 0.5$ και $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$, μεταβάλλοντας το $\theta - \phi$. (a) $\theta - \phi = 0$. (b) $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (c) $\theta - \phi = \frac{2\pi}{3}$. (d) $\theta - \phi = \pi$. (e) $\theta - \phi = \frac{4\pi}{3}$. (f) $\theta - \phi = \frac{5\pi}{3}$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη - -), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ···) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-).



Εικόνα 6.7: $\Delta = 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, μεταβάλλοντας το $\epsilon = \frac{\Omega_R}{\omega}$ με $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (a) $\epsilon = 0.9$. (b) $\epsilon = 0.5$. (c) $\epsilon = 0.1$. (d) $\epsilon = 0.05$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη - -), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ···) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία -·-).



Εικόνα 6.8: $\Delta = 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, $\epsilon = \frac{\Omega_R}{\omega} = 0.1$, μεταβάλλοντας το $\theta - \phi$. (a) $\theta - \phi = 0$. (b) $\theta - \phi = \frac{\pi}{6}$. (c) $\theta - \phi = \frac{\pi}{3}$. (d) $\theta - \phi = \frac{\pi}{2}$. (e) $\theta - \phi = \frac{2\pi}{3}$. (f) $\theta - \phi = \frac{5\pi}{6}$. (g) $\theta - \phi = \pi$. (h) $\theta - \phi = \frac{7\pi}{6}$. (i) $\theta - \phi = \frac{4\pi}{3}$. (j) $\theta - \phi = \frac{3\pi}{2}$. (k) $\theta - \phi = \frac{5\pi}{3}$. (l) $\theta - \phi = \frac{11\pi}{6}$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη - -), μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως (τελείες ···) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως (διακεκομμένη-τελεία ·-).



Εικόνα 6.9: $\Delta \neq 0$. P_1 vs. $\frac{\Omega_R t}{2\pi}$, κρατώντας σταθερό το $\epsilon_2 = \frac{\Omega_R}{\Sigma} = 0.01$ και μεταβάλλοντας το $\epsilon_1 = \frac{\Omega_R}{\Delta}$. (a) $\epsilon_1 = 0.5$. (b) $\epsilon_1 = 1$. (c) $\epsilon_1 = 5$. (d) $\epsilon_1 = 10$. Οι γραμμές αντιστοιχούν στην NRWA (συνεχής —), την RWA (διακεκομμένη - -), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως στον αποσυντονισμό (διακεκομμένη - -), τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως στον αποσυντονισμό (διακεκομμένη - τελεία ·-), τη μέθοδο επανισώσεως δεύτερης τάξεως στον συντονισμό (διακεκομμένη - -) και τη μέθοδο επανισώσεως πρώτης τάξεως στον συντονισμό (διακεκομμένη - τελεία ·-).

Βιβλιογραφία

- [1] Κ. Σιμσερίδης. *Κβαντική Οπτική και Lasers*. Αθήνα: Κάλλιπος, 2015. ISBN: 9789606030734. URL: <http://hdl.handle.net/11419/2108>.
- [2] Κ. Σιμσερίδης. *Σημειώσεις του μαθήματος Κβαντική Οπτική και Lasers*. Αθήνα: Τμήμα Φυσικής, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2021. URL: <https://eclass.uoa.gr/courses/PHYS107/>.
- [3] Λ. Χαλκοπιιάδης. *Ταλαντώσεις Rabi σε δισταθμικό και πολυσταθμικό σύστημα με και χωρίς προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος*. Πτυχιακή Διπλωματική Εργασία. Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών. Επιβλέπων: Κ. Σιμσερίδης. 2021. URL: <https://pergamos.lib.uoa.gr/uoa/dl/object/2946058>.
- [4] P. Howard. *Solving ODE in MATLAB*. 2007.
- [5] J. Guckenheimer και P. Holmes. *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*. Επιμέλεια υπό J.E. Marsden, L. Sirovich και F. John. in series Applied Mathematical Sciences, Vol. 42. New York: Springer, 1983. ISBN: 9781461270201. DOI: [10.1007/978-1-4612-1140-2](https://doi.org/10.1007/978-1-4612-1140-2).
- [6] J. A. Sanders, F. Verhulst και J. Murdock. *Averaging Methods in Nonlinear Dynamical Systems*. Επιμέλεια υπό S. S. Antman, J. E. Marsden και L. Sirovich. in series Applied Mathematical Sciences, Vol. 59. New York: Springer, 2007. ISBN: 0387489169.
- [7] C. Zhang. *An Introduction to Averaging Method*. Dynamics at the Horsetooth, 2010. Focused Issue: Asymptotics and Perturbations An Introduction to Averaging Method, Chuan Zhang, Department of Mathematics, Colorado State University, Report submitted to Prof. I. Oprea for Math 676, Fall 2010. 2010.
- [8] C. Holmes και P. Holmes. “Second order averaging and bifurcations to subharmonics in Duffing’s equation”. Στο: *Journal of Sound and Vibration* 78 (1981), σσ. 161–174. DOI: [10.1016/S0022-460X\(81\)80030-2](https://doi.org/10.1016/S0022-460X(81)80030-2).
- [9] A. A. Batista, B. Birnir και M. S. Sherwin. “Subharmonic generation in a driven asymmetric quantum well”. Στο: *Physical Review B* 61 (2000), σσ. 15108–15113. DOI: [10.1103/PhysRevB.61.15108](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.15108).
- [10] A. A. Batista. “Rabi oscillations in two-level systems beyond the rotating-wave approximation”. Στο: *arXiv:1507.05124* (2015). DOI: [10.48550/arXiv.1507.05124](https://doi.org/10.48550/arXiv.1507.05124). URL: <https://arxiv.org/abs/1507.05124>.

ΕΠΙΤΡΕΠΟΜΕΝΕΣ ΚΑΙ ΑΠΑΓΟΡΕΥΜΕΝΕΣ ΟΠΤΙΚΕΣ ΜΕΤΑΒΑΣΕΙΣ

Σύνοψη

Συζητάμε τις λεγόμενες επιτρεπόμενες και απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις εντός της προσεγγίσεως διπόλου. Αναφερόμαστε σε ιστορικά ατομικά πρότυπα (Rutherford, Bohr) και εν τέλει στο πρότυπο των ατομικών τροχιακών. Εστιάζουμε στο άτομο του υδρογόνου ως ένα διδακτικό παράδειγμα. Συζητάμε τη μορφή και συμμετρία των ατομικών τροχιακών και υπολογίζουμε τα στοιχεία πίνακα της διπολικής ροπής. Εξηγούμε τις λεγόμενες επιτρεπόμενες και απαγορευμένες μεταβάσεις εντός της προσεγγίσεως διπόλου. Παραθέτουμε τους σχετικούς κανόνες επιλογής.

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Κβαντικής Φυσικής.

7.1 Επιτρεπόμενες και Απαγορευμένες Οπτικές Μεταβάσεις εντός της Προσεγγίσεως Διπόλου

Υπενθυμίζουμε τα έως τώρα βήματα στην προσέγγιση διπόλου, τα οποία αναφέρθηκαν στην Ενότητα 5.3, θεωρώντας ως παράδειγμα το άτομο του Υδρογόνου. \vec{R} είναι η θέση του πυρήνα (Π) και \vec{r}_H είναι η θέση του ηλεκτρονίου (Η) ως προς την αρχή του συστήματος αναφοράς Ο, ενώ \vec{r} είναι η θέση του Η ως προς τον Π, δηλαδή, $\vec{r} = \vec{P}\vec{H}$.

$$\left. \begin{aligned} \vec{\mathcal{E}} &= \vec{\mathcal{E}}_a \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r}_H - \omega t + \phi)] \\ \vec{r}_H &\simeq \vec{R} \end{aligned} \right\} \Rightarrow (\text{έχουμε ομογενές, χρονικώς μεταβαλλόμενο } \vec{\mathcal{E}}) \Rightarrow$$
$$\left. \begin{aligned} \vec{\mathcal{E}} &= \vec{\mathcal{E}}_0 \exp(-i\omega t) = \vec{\mathcal{E}}(t) \\ \vec{\mathcal{E}} &= -\vec{\nabla} V \\ dV &= \vec{\nabla} V \cdot d\vec{r} \end{aligned} \right\} dV = -\vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{r} \dots \Rightarrow \underset{\text{δυναμικό}}{V} = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} \Rightarrow$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{δυναμική ενέργεια} \\ U \\ \text{ηλεκτρονίου} \end{array}} = e \vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}} \quad (\clubsuit)$$

δηλαδή η Εξ. 5.38. Το στοιχείο πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r})$$

λόγω της (\clubsuit) γράφεται

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \underbrace{\int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \vec{\mathcal{P}} \Phi_k(\vec{r})}_{\vec{\mathcal{P}}_{k'k}} = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{\mathcal{P}}_{k'k},$$

όπου $\vec{\mathcal{P}}_{k'k}$ είναι το στοιχείο πίνακα της διπολικής ροπής ή αλλιώς

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e \vec{\mathcal{E}} \cdot \underbrace{\int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \vec{r} \Phi_k(\vec{r})}_{\vec{r}_{k'k}} = e \vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}_{k'k},$$

όπου $\vec{r}_{k'k}$ είναι το στοιχείο πίνακα της θέσεως του αρνητικού φορτίου ως προς το θετικό, π.χ. της θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα. Προφανώς $\vec{\mathcal{P}}_{k'k} = -e \vec{r}_{k'k}$. Όπως βλέπουμε, εν τέλει, όλα ανάγονται στη συμμετρία των ιδιοσυναρτήσεων του αδιατάρακτου προβλήματος, διότι το ποιες από αυτές είναι άρτιες ή περιττές καθορίζει το αν θα μηδενίζεται ή όχι το στοιχείο πίνακα $\vec{r}_{k'k}$, δεδομένου ότι η συνάρτηση \vec{r} είναι προφανώς περιττή.

Αν μηδενίζεται το $\vec{r}_{k'k}$, τότε θα μηδενίζεται και το $U_{\mathcal{E}k'k}(t)$. Αν $U_{\mathcal{E}k'k}(t) = 0$, τότε η διαταραχή δεν συζευγνύει τις καταστάσεις k' και k , οπότε, εάν το ηλεκτρόνιο ήταν στην k δεν θα μεταβεί στην k' , και αντιστρόφως. Οπότε, εάν $\vec{r}_{k'k} = 0 \Leftrightarrow U_{\mathcal{E}k'k}(t) = 0$, λέμε ότι «απαγορεύεται η μετάβαση» $k' \leftrightarrow k$. Προσοχή, αυτά ισχύουν μόνο εντός της προσεγγίσεως διπόλου, όπου το μήκος κύματος είναι πάρα πολύ μεγαλύτερο από τις διαστάσεις του συστήματος. Σε άλλες περιπτώσεις, αυτοί οι κανόνες «απαγορεύσεων ή μη απαγορεύσεων» δεν ισχύουν. Τέλος, μεταξύ των «επιτρεπομένων» μεταβάσεων μεταλύτερη ισχύ έχουν αυτές στις οποίες το $\vec{r}_{k'k}$, άρα και το $U_{\mathcal{E}k'k}(t)$, έχουν μεγαλύτερο μέτρο.

7.2 Ατομικά πρότυπα

Η ανακάλυψη του ηλεκτρονίου το 1897 από τον J. J. Thomson [1] οδήγησε στη συνειδητοποίηση πως τα άτομα αποτελούνται από φορτισμένα σωματίδια. Το 1902 αναπτύχθηκε από τον G. N. Lewis (εκδόθηκε αργότερα [2]) το **πρότυπο κυβικού ατόμου** (cubical atom), σύμφωνα με το οποίο τα ηλεκτρόνια των ατόμων βρίσκονται στις κορυφές ενός κύβου. Το 1904, ο ίδιος ο J. J. Thomson διατύπωσε [3] το **πρότυπο σταφιδόψωμου** (plum pudding model), σύμφωνα με το οποίο τα άτομα αποτελούνται από έναν θετικά φορτισμένο όγκο, μέσα στον οποίο βρίσκονται τα μικροσκοπικά, αρνητικά φορτισμένα ηλεκτρόνια. Την ίδια χρονιά, ο H. Nagaoka [4] πρότεινε ένα εναλλακτικό πρότυπο, το **πρότυπο του Κρόνου** (Saturnian model), στο οποίο τα άτομα αποτελούνται από ένα μεγάλο, θετικά φορτισμένο κέντρο, περιστοιχιζόμενο από έναν αριθμό ηλεκτρονίων, περιστρεφόμενων γύρω του, όπως οι δακτύλιοι του Κρόνου. Το 1911 σήμανε την ανακάλυψη του ατομικού πυρήνα από τον E. Rutherford [5]. Η ανακάλυψη αυτή τον οδήγησε στη διατύπωση ενός επίσης πλανητικού προτύπου, σύμφωνα με το οποίο τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται γύρω από έναν μικρό, πυκνό, θετικά φορτισμένο πυρήνα. Πολλά φαινόμενα, σχετιζόμενα με ηλεκτρόνια ατόμων και στερεών, δεν εξηγούνται με την κλασική θεωρία. Αυτές οι ανυπέβλητες δυσκολίες οδήγησαν στη λεγόμενη παλαιά κβαντική θεωρία (1900-1925) και αργότερα στην κβαντομηχανική (> 1925).

7.2.1 Το πρότυπο του Rutherford

Τα πειράματα του Rutherford [5] οδήγησαν στο συμπέρασμα πως τα ηλεκτρόνια περιστρέφονται γύρω από έναν μικρό, πυκνό, θετικώς φορτισμένο πυρήνα. Το ατομικό πρότυπο Rutherford αποτελεί ένα ιδιότυπο, κλασικό, «ηλιακό» ή «πλανητικό» σύστημα.

Το πρότυπο του Rutherford (1911) βασίζεται στην κλασική φυσική. Το ηλεκτρόνιο βρίσκεται σε κυκλική τροχιά γύρω από τον πυρήνα, όπου κεντρομόλος δύναμη είναι η ηλεκτροστατική έλξη μεταξύ πυρήνα και ηλεκτρονίου. Δηλαδή,

$$F_{\text{ηλεκτρική}} = F_{\text{κεντρομόλος}} \Rightarrow \frac{m_e v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \Rightarrow \quad (7.1)$$

$$v = \sqrt{\frac{Ze^2}{m_e 4\pi\epsilon_0 r}} \xrightarrow{v=2\pi\nu r} v = \sqrt{\frac{Ze^2}{m_e 16\pi^3 \epsilon_0 r^3}}, \quad (7.2)$$

όπου m_e , e , v , ν η μάζα, το φορτίο, η (γραμμική) ταχύτητα και η συχνότητα του ηλεκτρονίου, αντιστοίχως, r η απόστασή του από τον πυρήνα, ενώ Z είναι ο ατομικός αριθμός του πυρήνα. Ας σημειώσουμε πως σήμερα γνωρίζουμε ότι το κέντρο μάζας του ατόμου συμπίπτει βασικά με το κέντρο του πυρήνα, διότι αυτός είναι πολύ μικρότερος (διαστάσεων fm) σε σχέση με το άτομο (διαστάσεων Å), δηλαδή είναι 10^5 φορές μικρότερος, ενώ οι μάζες των σωματιδίων του πυρήνα είναι $m_p \approx 1836m_e$ και $m_n \approx 1839m_e$. p , n , e σημαίνουν πρωτόνιο, νετρόνιο, ηλεκτρόνιο, αντιστοίχως. Η ανηγμένη μάζα στο άτομο του Υδρογόνου είναι $\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$. Συνεπώς, η κινητική ενέργεια του ηλεκτρονίου θα είναι

$$E_K = \frac{1}{2} m_e v^2 = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (7.3)$$

Οπότε, δεδομένου ότι η δυναμική του ενέργεια είναι

$$E_P = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (7.4)$$

η ολική του ενέργεια θα δίνεται από τη σχέση

$$E_T = E_K + E_P = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (7.5)$$

Αντιφάσεις του προτύπου Rutherford

1. Κατά το πρότυπο του Rutherford, εφόσον το ηλεκτρόνιο περιστρέφεται γύρω από τον πυρήνα, θα έχει κεντρομόλο επιτάχυνση. Σύμφωνα με την κλασική ηλεκτροδυναμική, τα επιταχυνόμενα φορτισμένα σωματίδια εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητικά κύματα. Η ισχύς, P , η εκπεμπόμενη από ένα επιταχυνόμενο, μη σχετικιστικό ($v \ll c$) σημειακό φορτίο, δίνεται από την εξίσωση Larmor ως

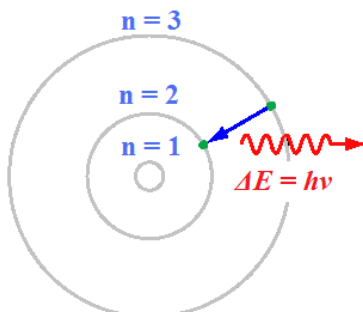
$$P = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}, \quad (7.6)$$

όπου q είναι το φορτίο του σωματιδίου (στην περίπτωση μας, $q = -e$) και a είναι το μέτρο της επιταχύνσεώς του (στην περίπτωση μας, υπάρχει κεντρομόλος επιτάχυνση). [Συμβολίζουμε \downarrow τη μείωση και \uparrow την αύξηση.] Εφόσον, λοιπόν, όσο το ηλεκτρόνιο επιταχύνεται, χάνει ενέργεια, από την Εξ. 7.5 προκύπτει πως

$$E_T \downarrow \Rightarrow |E_T| \uparrow \Rightarrow r \downarrow \Rightarrow v \uparrow \text{ και } \nu \uparrow. \quad (7.7)$$

Δηλαδή, το ηλεκτρόνιο χάνει ενέργεια, καταγράφοντας μια σπειροειδή κίνηση ολοένα και μικρότερης ακτίνας r και μεγαλύτερης ταχύτητας v και συχνότητας ν , καταπίπτοντας μοιραία επάνω στον πυρήνα. Συνεπώς, το πρότυπο του Rutherford είναι ένα καταστροφικό πρότυπο.

2. Σύμφωνα με την Εξ. (7.5), η απόσταση πυρήνα-ηλεκτρονίου και η ταχύτητα (άρα και η συχνότητα) μπορούν να μεταβάλλονται με συνεχή τρόπο. Αυτό δεν μπορεί να συμβιβαστεί με τα πειραματικά δεδομένα τα οποία, ήδη από το τέλος του 19^{ου} αιώνα έδειχναν ότι τα άτομα εκπέμπουν φως σε διακριτές και όχι σε συνεχείς συχνότητες. Δείτε την Εικόνα 7.2 και τον Πίνακα 7.1.



Εικόνα 7.1: Το πρότυπο του Bohr (1913) [6] αποτελεί εξέλιξη του προτύπου του Rutherford (1911) [5] και κατατάσσεται στην παλαιά κβαντική θεωρία. Το ηλεκτρόνιο περιστρέφεται σε ορισμένες μόνο επιτρεπόμενες κυκλικές τροχιές, οι οποίες χαρακτηρίζονται από έναν κβαντικό αριθμό $n = 1, 2, 3, \dots$. Όταν μεταβαίνει από μια αρχική τροχιά σε μια άλλη τελική, εκπέμπει ή απορροφά ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία $h\nu$.

7.2.2 Το πρότυπο του Bohr

Το πρότυπο του Bohr (1913) [6] αποτελεί εξέλιξη του προτύπου του Rutherford (1911) [5] και κατατάσσεται στην παλαιά κβαντική θεωρία. Δείτε την Εικόνα 7.1. Βασίζεται στις παρακάτω υποθέσεις:

1. Το ηλεκτρόνιο κινείται σε κυκλική τροχιά γύρω από τον πυρήνα. Η κεντρομόλος δύναμη προέρχεται από την ηλεκτροστατική έλξη μεταξύ πυρήνα και ηλεκτρονίου. Υπακούει στους νόμους της κλασικής μηχανικής, τους οποίους εκφράζουν οι εξισώσεις (7.1), (7.2), (7.3), (7.4), (7.5), (τις οποίες γράψαμε προηγουμένως σχετικά με το πρότυπο Rutherford) για τα $F_{\text{ηλεκτρική}}, F_{\text{κεντρομόλος}}, E_K, E_P, E_T, v, \nu$.
2. Ωστόσο, αντί για τις άπειρες δυνατές τροχιές στο πλαίσιο της κλασικής μηχανικής, στο πρότυπο του Bohr το ηλεκτρόνιο μπορεί να κινείται μόνο σε κυκλικές τροχιές, για τις οποίες το μέτρο ($|\vec{L}| := L$) της στροφορμής, $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$, είναι φυσικό πολλαπλάσιο της σταθεράς, την οποία ονομάζουμε σήμερα «σταθερά του Planck», δηλαδή ισχύει

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow L = rp = m_e v r = n\hbar, \forall n = 1, 2, 3, \dots$$

Με άλλα λόγια, ο Bohr εισήγαγε την υπόθεση ότι η στροφορμή είναι κβαντισμένη, δηλαδή διακεκριμένη, διακριτή, παίρνει διακριτές τιμές. Ο θετικός φυσικός αριθμός n σήμερα ονομάζεται κύριος κβαντικός αριθμός (principal quantum number).

3. Σε αυτές τις επιτρεπόμενες στάσιμες τροχιές (stationary orbits) το ηλεκτρόνιο δεν ακτινοβολεί, δηλαδή δεν ισχύει η εξίσωση Larmor (7.6). Σε αυτές τις τροχιές, οι οποίες βρίσκονται σε καθορισμένες αποστάσεις από τον πυρήνα, τα ηλεκτρόνια έχουν καθορισμένη, σταθερή ενέργεια.
4. ΗΜ ακτινοβολία εκπέμπεται ή απορροφάται μόνο όταν το ηλεκτρόνιο αλλάζει επιτρεπόμενη τροχιά και η συχνότητα της εκπεμπομένης ή απορροφούμενης ακτινοβολίας υπακούει στη σχέση $h\nu = |E_i - E_f|$, όπου $E_{i(f)}$ είναι η αντιστοιχούσα στην αρχική (τελική) τροχιά ενέργεια [i initial, f final].

Εφόσον η στροφορμή είναι κβαντισμένη, θα ισχύει

$$m_e u r = n \hbar, \quad (7.8)$$

οπότε, από την Εξ. (7.2) συνεπάγεται

$$r = r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{Z m_e e^2} n^2. \quad (7.9)$$

Η ποσότητα $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \cdot 10^{-10}$ m ονομάζεται *ακτίνα Bohr*. Έτσι, στο άτομο του υδρογόνου όπου $Z = 1$, προκύπτουν $r_1 = a_0$, $r_2 = 4a_0$, $r_3 = 9a_0$, κ.ο.κ.

Δεδομένης της Εξ. 7.9, η Εξ. (7.5) για την ολική ενέργεια γίνεται

$$E_T = E_n = -\frac{Z e^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{Z^2 m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (7.10)$$

Η ποσότητα $R_E = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \approx 13.6$ eV ονομάζεται *ενέργεια Rydberg*. Έτσι, στο άτομο του υδρογόνου, όπου $Z = 1$, $E_1 \approx -13.6$ eV, $E_2 \approx -3.4$ eV, $E_3 \approx -1.5$ eV, κ.ο.κ., δηλαδή, στο άτομο του υδρογόνου ισχύει

$$E_n = -\frac{R_E}{n^2} \approx -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}. \quad (7.11)$$

Από τα παραπάνω προκύπτει πως η ενέργεια του φωτονίου είναι

$$h\nu = |E_f - E_i| \Rightarrow h \frac{c}{\lambda} = \left| -\frac{R_E}{n_f} + \frac{R_E}{n_i} \right| \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{R_E}{hc} \left| \frac{1}{n_i} - \frac{1}{n_f} \right|, \quad (7.12)$$

όπου $R := \frac{R_E}{hc} \approx 1.097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ είναι η σταθερά Rydberg. Δηλαδή, προκύπτει ο πειραματικός τύπος του Rydberg! Επιτυχία! Συνοπτικά, το ατομικό πρότυπο του Bohr:

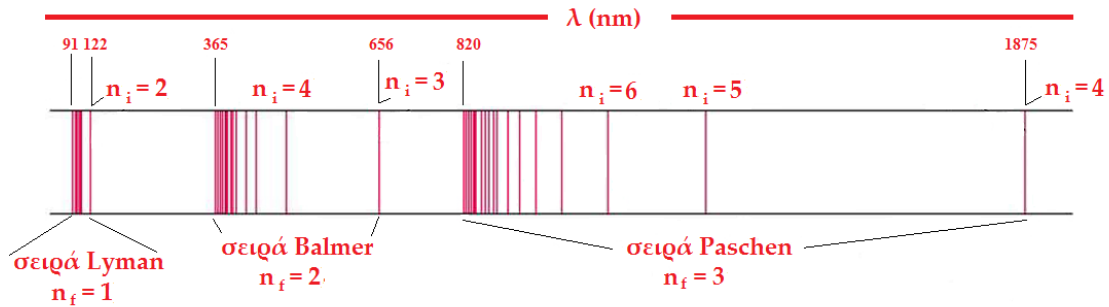
- Κατάφερε να εξηγήσει τον πειραματικό τύπο του Rydberg για το άτομο του υδρογόνου

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right), \quad (7.13)$$

όπου $n_i, n_f \in \mathbb{N}^*$, με $n_f < n_i$. Ο τύπος αυτός προβλέπει τα μήκη κύματος εκπομπής ΗΜ ακτινοβολίας στο άτομο του υδρογόνου. Οι φασματικές γραμμές εκπομπής του υδρογόνου παρουσιάζονται στην Εικόνα 7.2 και ομαδοποιούνται στις ονομαζόμενες σειρές Lyman, Balmer, Paschen, κ.λπ. ανάλογα με τις τιμές των n_f και n_i , οι οποίες παρουσιάζονται στον Πίνακα 7.1.

Πίνακας 7.1: Οι φασματικές σειρές του υδρογόνου.

n_f	n_i	Όνομα φασματικής σειράς	Συγκλίνουν προς
1	$2 \rightarrow \infty$	Lyman	91.13 nm (UV)
2	$3 \rightarrow \infty$	Balmer	364.51 nm (~Ορατό)
3	$4 \rightarrow \infty$	Paschen	820.14 nm (IR)
4	$5 \rightarrow \infty$	Brackett	1458.03 nm (FIR)
5	$6 \rightarrow \infty$	Pfund	2278.17 nm (FIR)
6	$7 \rightarrow \infty$	Humphreys	3280.56 nm (FIR)



Εικόνα 7.2: Φασματικές γραμμές εκπομπής για το άτομο του υδρογόνου.

- Μπορεί ακόμα να εφαρμοστεί σε υδρογονοειδή ιόντα, όπως τα He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} , κ.ο.κ., με τη μορφή

$$\frac{1}{\lambda} = RZ^2 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right). \quad (7.14)$$

- Μπορεί ακόμα να εφαρμοστεί σε μακρινά ηλεκτρόνια πολυηλεκτρονικών ατόμων, όπου το ενεργό πυρηνικό φορτίο μπορεί να θεωρηθεί $\approx e > 0$, αφού όλα τα πυρηνικά φορτία πλην ενός, θωρακίζονται από τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια.

Το πρότυπο του Bohr παρουσιάζει και σοβαρά μειονεκτήματα [7].

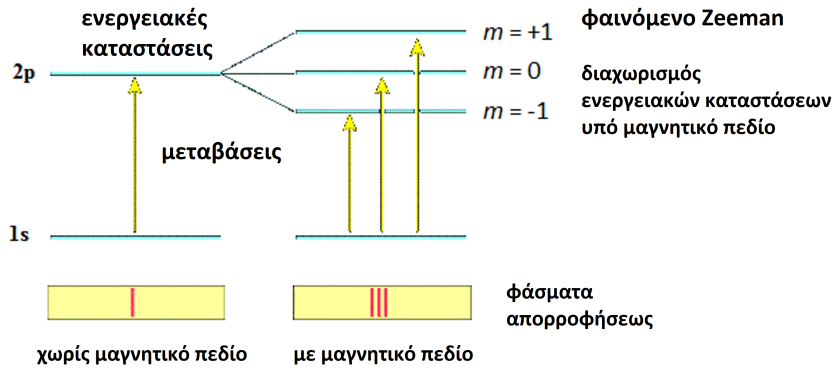
- Εφαρμόζεται μόνο στο H, στα μονοηλεκτρονικά ιόντα He^+ , Li^{+2} , Be^{+3} , ... και στα εξώτατα ηλεκτρόνια. Δεν επαρκεί για να εξηγήσει ούτε τα φάσματα του ατόμου του He.
- Δεν μπορεί να εξηγήσει γιατί κάποιες φασματικές γραμμές είναι πιο έντονες από άλλες, δηλαδή γιατί κάποιες μεταβάσεις μεταξύ ενεργειακών επιπέδων έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να συμβούν από άλλες.
- Δεν μπορεί να εξηγήσει γιατί πολλές φασματικές γραμμές είναι πολλαπλές, δηλαδή αποτελούνται από ξεχωριστές γραμμές, των οποίων τα μήκη κύματος διαφέρουν ελάχιστα, δηλαδή δεν μπορεί να εξηγήσει τη λεπτή υφή (fine structure) των ατομικών φασμάτων.
- Δεν μπορεί να εξηγήσει γιατί εντός μαγνητικού πεδίου οι πολλαπλές γραμμές διαχωρίζονται (φαινόμενο Zeeman). Δείτε την Εικόνα 7.3.
- Δεν μας επιτρέπει να κατανοήσουμε πώς αλληλεπιδρούν τα άτομα ώστε να σχηματίσουν μόρια, στερεά και άλλα συσσωματώματα. Δηλαδή δεν εφαρμόζεται στη Χημεία και στη Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης.

Παρά τις προσπάθειες να βελτιωθεί το πρότυπο του Bohr, π.χ. από τους Wilson [8] και Sommerfeld [9], οι αντιφάσεις δεν μπορούν να λυθούν παρά στο πλαίσιο της σύγχρονης κβαντικής μηχανικής, η οποία αναπτύχθηκε μετά το 1925. Παρακάτω παραθέτουμε το πρότυπο των ατομικών τροχιακών (atomic orbitals model) το οποίο εντάσσεται στη σύγχρονη κβαντική μηχανική.

7.3 Εξίσωση Schrödinger σε σφαιρικές συντεταγμένες

Η εξίσωση Schrödinger σε σφαιρικές συντεταγμένες είναι

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(\vec{r})) \psi = 0, \quad (7.15)$$



Εικόνα 7.3: Φαινόμενο Zeeman: διαχωρισμός των ενεργειακών καταστάσεων ενός υποφλοιού λόγω της επιδράσεως εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.

όπου

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} = \nabla^2 \psi(r, \theta, \phi), \quad (7.16)$$

είναι η Λαπλασιανή (Laplacian) σε σφαιρικές συντεταγμένες. Στο άτομο του υδρογόνου

$$U(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (7.17)$$

Ας προσπαθήσουμε να επιλύσουμε το πρόβλημα με χωρισμό μεταβλητών, δοκιμάζοντας λύσεις της μορφής

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \Theta(\theta) \Phi(\phi). \quad (7.18)$$

Οπότε,

$$\frac{\Theta\Phi}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{R\Phi}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{R\Theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(\vec{r})) R\Theta\Phi = 0. \quad (7.19)$$

Αν $R\Theta\Phi = 0$, η προηγούμενη εξίσωση ικανοποιείται τετριμμένα, αν $R\Theta\Phi \neq 0$, τότε μπορούμε να διαιρέσουμε με $R\Theta\Phi$, οπότε προκύπτει

$$\frac{1}{R} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta} \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(\vec{r})) = 0. \quad (7.20)$$

Πολλαπλασιάζουμε με $r^2 \sin^2 \theta$, οπότε λαμβάνουμε

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + \frac{2mr^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2} (E - U(\vec{r})) = 0. \quad (7.21)$$

Στην προηγούμενη εξίσωση, ο τρίτος προσθετέος είναι συνάρτηση μόνο του ϕ . Τον πάμε στο 2ο μέλος και χρησιμοποιούμε την Εξ. (7.17), οπότε,

$$\frac{\sin^2 \theta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{2mr^2 \sin^2 \theta}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2}. \quad (7.22)$$

Το αριστερό μέλος, A , είναι συνάρτηση μόνο των r και θ , ενώ το δεξιό μέλος, Δ , είναι συνάρτηση μόνο του ϕ . Για να είναι το αριστερό μέλος ίσο με το δεξιό $\forall r, \theta, \phi$ συνεπάγεται πως $A = \Delta = \text{σταθερά}$, την οποία ονομάζουμε, χωρίς να δικαιολογούμε τώρα την ονομασία αυτή m_ℓ^2 , δηλαδή, $A = \Delta := m_\ell^2$.

Άρα, προκύπτει η εξίσωση (μόνο του ϕ)

$$\boxed{-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = m_\ell^2} \quad (7.23)$$

αλλά και η εξίσωση

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right), \quad (7.24)$$

της οποίας το αριστερό μέλος, A' , εξαρτάται μόνο από το r και το δεξιό, Δ' , μόνο από το θ . Για να είναι το αριστερό μέλος, A' , ίσο με το δεξιό μέλος, Δ' , $\forall r, \theta$, συννεπάγεται πως $A' = \Delta' = \text{σταθερά}$, την οποία ονομάζουμε, χωρίς να δικαιολογούμε τώρα την ονομασία αυτή, $\ell(\ell + 1)$, δηλαδή, $A' = \Delta' := \ell(\ell + 1)$. Άρα, περαιτέρω, προκύπτουν η εξίσωση

$$\boxed{\frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta} - \frac{1}{\Theta \sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) = \ell(\ell + 1)} \quad (7.25)$$

η οποία είναι συνάρτηση μόνο του θ και η εξίσωση

$$\boxed{\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = \ell(\ell + 1)} \quad (7.26)$$

η οποία είναι συνάρτηση μόνο του r . Η Εξ. (7.26) είναι η μόνη περιέχουσα τη δυναμική ενέργεια εξίσωση. Θα μας δώσει την E , δηλαδή τις ιδιοτιμές της ενέργειας ή αλλιώς τις «επιτρεπόμενες ενέργειες».

Ας λύσουμε πρώτα την Εξ. (7.23), δοκιμάζοντας λύσεις της μορφής

$$\Phi(\phi) = A e^{im_\ell\phi}, \quad (7.27)$$

οπότε,

$$\Phi'(\phi) = A i m_\ell e^{im_\ell\phi}, \quad (7.28)$$

και

$$\Phi''(\phi) = -A m_\ell^2 e^{im_\ell\phi}, \quad (7.29)$$

οπότε, εύκολα μπορεί να δειχτεί πως ικανοποιείται η Εξ. (7.23). Ακόμα, επειδή θα πρέπει

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \Rightarrow e^{im_\ell(\phi+2\pi)} = e^{im_\ell\phi} \Rightarrow e^{im_\ell 2\pi} = 1 = e^{i2\pi m}, m \in \mathcal{Z} \Rightarrow m_\ell = m \in \mathcal{Z}. \quad (7.30)$$

Συνοπτικά,

$$\Phi_{m_\ell}(\phi) = A e^{im_\ell\phi}, \quad m_\ell \in \mathcal{Z}. \quad (7.31)$$

Ο m_ℓ ονομάζεται μαγνητικός κβαντικός αριθμός (magnetic quantum number) για λόγους που δεν θα εξηγηθούν ακόμα. Ακόμα, κανονικοποιώντας στο διάστημα $[0, 2\pi]$, παίρνουμε

$$\int_0^{2\pi} |A e^{im_\ell\phi}|^2 = 1 \Rightarrow |A|^2 = \frac{1}{2\pi}, \quad (7.32)$$

οπότε, μια βολική εκλογή θα ήταν $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, δηλαδή

$$\boxed{\Phi_{m_\ell}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_\ell\phi}, \quad m_\ell \in \mathcal{Z}} \quad (7.33)$$

Όσον αφορά την Εξ. (7.25), αναφέρουμε (χωρίς να το αποδείξουμε) ότι έχει λύσεις όταν

$$m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell. \quad (7.34)$$

Ο ℓ ονομάζεται δευτερεύον κβαντικός αριθμός (secondary quantum number) ή κβαντικός αριθμός τροχιακής στροφορμής (angular momentum quantum number). Επομένως, μπορούμε να συμβολίσουμε τις λύσεις της Εξ. (7.25) ως $\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)$.

Όσον αφορά την Εξ. (7.26), αναφέρουμε (χωρίς να το αποδείξουμε) ότι έχει λύσεις όταν $E > 0$ ή όταν

$$E_n = -\frac{R_E}{n^2} = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad (7.35)$$

και ταυτόχρονα $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Οι καταστάσεις με $E = E_n$ ονομάζονται δέσμιες καταστάσεις (bound states). Αξιοσημείωτο είναι πως προκύπτουν ίδιες ενέργειες με αυτές του απλοϊκού προτύπου Bohr. Ο n ονομάζεται κύριος κβαντικός αριθμός (principal quantum number). Επομένως, μπορούμε να συμβολίσουμε τις λύσεις της Εξ. (7.26) ως $R_{n\ell}(r)$. Σημειώνεται επίσης ότι μπορούμε να φέρουμε την Εξ. (7.26) στη μορφή

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2} \right) R = 0. \quad (7.36)$$

Ενθυμούμενοι/ες ότι ενέργεια της κινήσεως σωματιδίου σε κεντρικό δυναμικό (όπως είναι το $U(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$) περιλαμβάνει τον περιστροφικό όρο

$$E_{rot} = \frac{L^2}{2mr^2}, \quad (7.37)$$

προκύπτει ότι το μέτρο της τροχιακής στροφορμής L δίνεται από τη σχέση

$$L = \hbar \sqrt{\ell(\ell + 1)}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1. \quad (7.38)$$

Με άλλα λόγια, η στροφορμή είναι κβαντισμένη, εξ ου και η ονομασία του αριθμού ℓ .

Συνοψίζοντας, οι λύσεις τις εξισώσεως Schrödinger για το άτομο του υδρογόνου έχουν τη γενική μορφή

$$\Psi_{n\ell m_\ell} = \mathcal{N} R_{n\ell}(r) \Theta_{\ell m_\ell}(\theta) \Phi_{m_\ell}(\phi), \quad (7.39)$$

ή

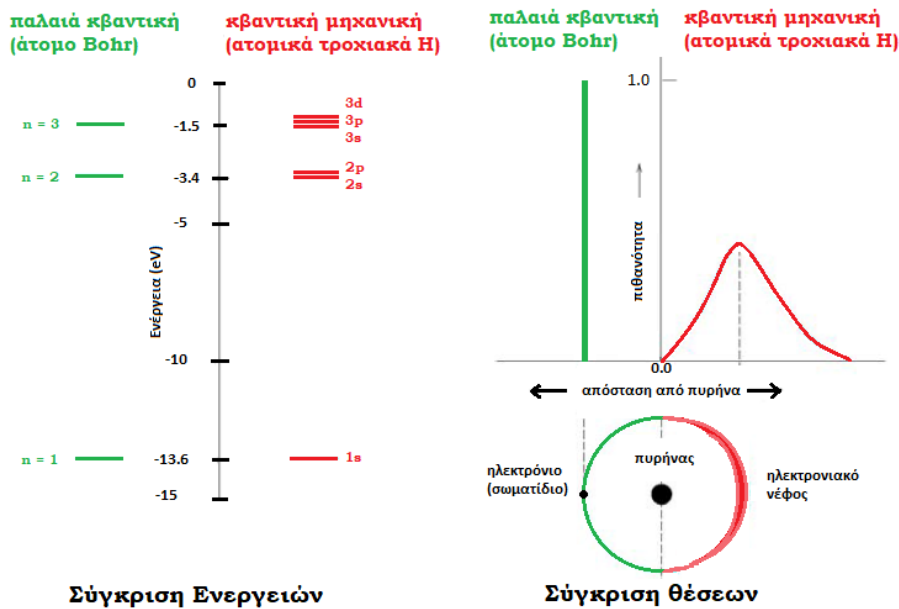
$$\Psi_{n\ell m_\ell} = \mathcal{N} R_{n\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi), \quad (7.40)$$

όπου το γινόμενο $\Theta_{\ell m_\ell} \Phi_{m_\ell}$ αναπαρίσταται από τις σφαιρικές αρμονικές (spherical harmonics) $Y_{\ell m_\ell}$.

7.3.1 Πρότυπο ατομικών τροχιακών

Σύμφωνα με το πρότυπο των ατομικών τροχιακών, η κατάσταση των ηλεκτρονίων ενός ατόμου προκύπτει από την επίλυση της εξισώσεως Schrödinger, από την οποία λαμβάνουμε τις επιτρεπόμενες ενεργειακές του στάθμες, $E_{n\ell m_\ell}$, και τις ιδιοσυναρτήσεις του (ατομικά τροχιακά), $\Psi_{n\ell m_\ell}(\vec{r})$. Για το άτομο του υδρογόνου, η διαδικασία αυτή περιγράφηκε παραπάνω και προκύπτει $E_{n\ell m_\ell} = E_n$. Στα πολυηλεκτρονικά άτομα, $E_{n\ell m_\ell} = E_{n\ell}$. Όμως, όπως θα δούμε στη συνέχεια, παρουσία μαγνητικού πεδίου, ο εκφυλισμός ως προς το m_ℓ αίρεται. Γενικά, οι ηλεκτρονικές καταστάσεις εξαρτώνται από τους εξής κβαντικούς αριθμούς:

- $n = 1, 2, 3, \dots$ είναι ο **κύριος κβαντικός αριθμός**, ο οποίος ορίζει τον φλοιό (shell) και προσδιορίζει τη **μέση απόσταση** του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα (σε αντίθεση με το ατομικό πρότυπο του Bohr, στο οποίο προσδιόριζε την **ακτίνα της κυκλικής τροχιάς**).



Εικόνα 7.4: Σύγκριση ενεργειών και θέσεων, στη θεμελιώδη κατάσταση, μεταξύ του προτύπου Bohr και του προτύπου των Ατομικών Τροχιακών.

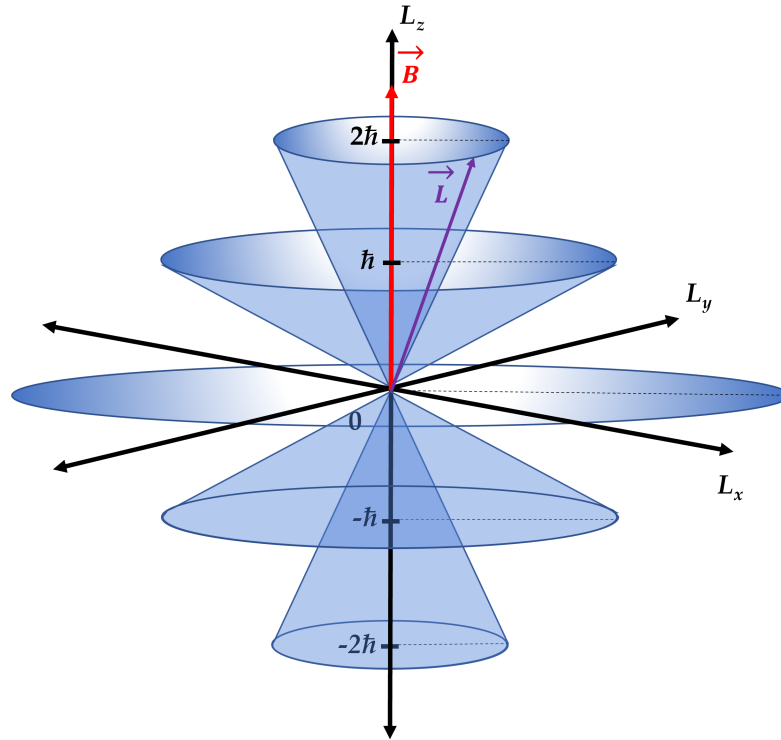
- $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ είναι ο **δευτερεύον κβαντικός αριθμός** ή κβαντικός αριθμός τροχιακής στροφορμής. Ο αριθμός n καθορίζει τον αριθμό των υποφλοιών ενός φλοιού. Για παράδειγμα, για $n = 1$, έχουμε έναν υποφλοιό με $\ell = 0$. Για $n = 2$ έχουμε 2 υποφλοιούς με $\ell = 0, 1$, κ.ο.κ. Ο αριθμός ℓ προσδιορίζει τη μορφή της πυκνότητας πιθανότητας ευρέσεως του ηλεκτρονίου στον χώρο. Οι υποφλοιοί με $\ell = 0$ ονομάζονται *s* τροχιακά, με $\ell = 1$ *p* τροχιακά, με $\ell = 2$ *d* τροχιακά, κ.ο.κ. Τα *s* τροχιακά έχουν σφαιρική συμμετρία, τα *p* τροχιακά είναι κατευθυντικά δίλοβα κ.ο.κ.
- $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$ είναι ο **μαγνητικός κβαντικός αριθμός**. Λαμβάνει $2\ell + 1$ τιμές. Ο αριθμός αυτός είναι ο συνολικός αριθμός των ενεργειακών καταστάσεων ενός υποφλοιού. Για παράδειγμα, για $\ell = 3, m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$. Άρα, σε έναν υποφλοιό f υπάρχουν 7 ενεργειακές καταστάσεις. Απουσία μαγνητικού πεδίου, οι ενεργειακές καταστάσεις ενός υποφλοιού είναι εκφυλισμένες, δηλαδή $E_{n\ell m_\ell} = E_{n\ell}$. Ο εκφυλισμός αυτός όμως αίρεται υπό μαγνητικό πεδίο (φαινόμενο Zeeman, δείτε την Εικόνα 7.3). Έστω ένα μαγνητικό πεδίο, \vec{B} , προσανατολισμένο στη διεύθυνση του άξονα z . Το μέτρο της τροχιακής στροφορμής του ηλεκτρονίου είναι

$$L = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}, \quad (7.41)$$

ενώ η τροχιακή στροφορμή του ηλεκτρονίου κατά τη διεύθυνση z είναι

$$L_z = \hbar m_\ell, \quad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \ell. \quad (7.42)$$

Όμως, εφόσον $|m_\ell| \leq \ell \Rightarrow m_\ell^2 \leq \ell^2 < \ell(\ell + 1) \Rightarrow \hbar^2 m_\ell^2 < \hbar^2 \ell(\ell + 1) \Rightarrow |L_z|^2 < |L|^2$. Αυτό σημαίνει ότι η τροχιακή στροφορμή \vec{L} δεν μπορεί να προσανατολιστεί ακριβώς παράλληλα ή αντιπαράλληλα με το \vec{B} . Οι συνιστώσες L_x, L_y είναι μη καθορισμένες, όμως λόγω συμμετρίας $\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$. Συνεπώς, μπορούμε να φανταστούμε το \vec{L} σαν να περιστρέφεται γύρω από τον άξονα z (μετάπτωση Larmor). Δείτε την Εικόνα 7.5, π.χ. για $\ell = 2, m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$. Σημειώνεται ότι το μαγνητικό πεδίο παρέχει απλώς μια κατεύθυνση καλώς ορισμένη πειραματικώς. Η ανάλυση αυτή ισχύει οποιοδήποτε προσανατολισμό κι αν επιλέξουμε. Συνοψίζοντας, το μέτρο της τροχιακής στροφορμής, $L = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1)}$, και μια συνιστώσα της (όποια επιλέξουμε), π.χ. $L_z = \hbar m_\ell$, είναι κβαντισμένες ποσότητες. Οι υπόλοιπες συνιστώσες δεν είναι καθορισμένες. Αν ήταν καθορισμένες, δηλαδή αν η τροχιακή



Εικόνα 7.5: Οι κώνοι αναπαριστούν τους δυνατούς προσανατολισμούς της τροχιακής στροφορμής, π.χ. για $\ell = 2$ ($m_\ell = -2, -1, 0, 1, 2$). Για μαγνητικό πεδίο κατά τη διεύθυνση z , η τροχιακή στροφορμή δεν μπορεί να προσανατολιστεί ακριβώς παράλληλα ή αντιπαράλληλα με το πεδίο. Οι συνιστώσες x και y της τροχιακής στροφορμής είναι μη καθορισμένες.

στροφορμή ήταν πλήρως καθορισμένη, π.χ. $\vec{L} = L_z \hat{z}$, θα ήταν

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow \vec{r} \cdot \vec{L} = \vec{r} \cdot \vec{r} \times \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{r} \times \vec{r} = \vec{p} \cdot \vec{0} = \vec{0} \Rightarrow \vec{r} \perp \vec{L}. \quad (7.43)$$

Με άλλα λόγια, το \vec{r} θα βρισκόταν πάνω στο επίπεδο xy , πράγμα που σημαίνει ότι η z -συνιστώσα του ηλεκτρονίου θα ήταν καθορισμένη, δηλαδή $\Delta z = 0$. Αυτό είναι **άτοπο**, καθώς αντιβαίνει στην αρχή της απροσδιοριστίας του Heisenberg, σύμφωνα με την οποία $\Delta z \Delta p_z \geq \frac{\hbar}{2}$. Έτσι, επειδή μόνο τα L, L_z είναι καθορισμένα και $|L| < |L_z|$, το ηλεκτρόνιο δεν περιορίζεται ποτέ σε ένα επίπεδο. Παρουσία μαγνητικού πεδίου \vec{B} , στη Χαμιλτονιανή προστίθεται ένας όρος δυναμικής ενέργειας της μορφής

$$U = -\vec{\mu} \vec{B}, \quad (7.44)$$

όπου $\vec{\mu}$ η μαγνητική ροπή του συστήματος. Για μαγνητικό πεδίο προσανατολισμένο στον άξονα z και αγνοώντας το σπιν, θα είναι

$$U = -\frac{-e}{2m_e} \vec{L} \vec{B} = \frac{e}{2m_e} L_z B = \frac{e\hbar}{2m_e} m_\ell B = \mu_B m_\ell B, \quad (7.45)$$

όπου η ποσότητα $\mu_B \approx 9.274 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} \approx 5.788 \cdot 10^{-5} \text{ eV/T}$ ονομάζεται **μαγνητόνη του Bohr**. Συνεπώς, εντός μαγνητικού πεδίου, η ενέργεια εξαρτάται όχι μόνον από τον κβαντικό αριθμό n , αλλά και από τον m_ℓ . Αυτός είναι ο λόγος που ο αριθμός αυτός ονομάζεται μαγνητικός κβαντικός αριθμός. Έτσι, εντός μαγνητικού πεδίου, οι $2\ell + 1$ εκφυλισμένες ενεργειακές καταστάσεις διαχωρίζονται. Συνεπώς, εντός μαγνητικού πεδίου, οι φασματικές γραμμές εκπομπής και απορρόφησης διαχωρίζονται. Αυτό ονομάζεται **ομαλό φαινόμενο Zeeman** (normal Zeeman effect, βλ. Εικόνα 7.3).

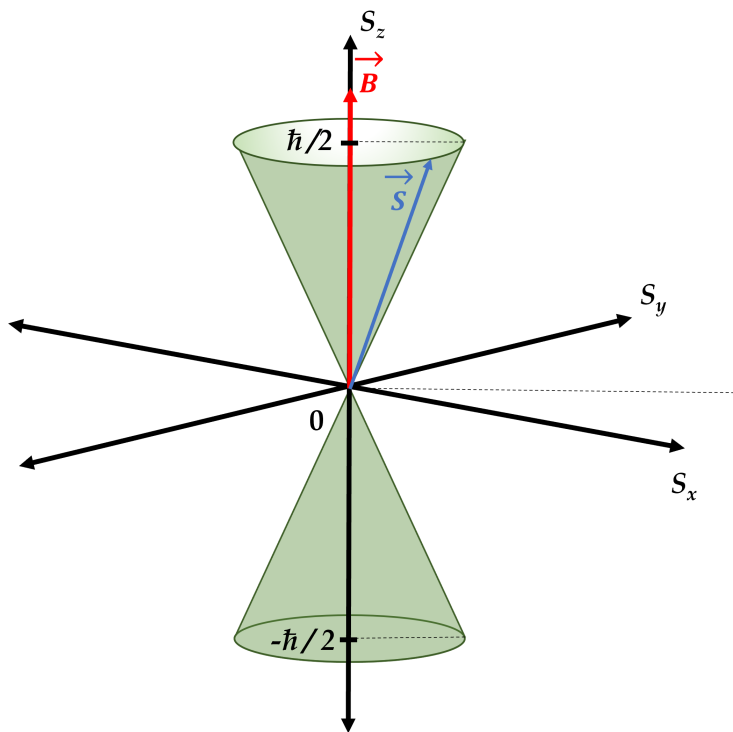
- Υπάρχει επιπλέον και ο **κβαντικός αριθμός σπιν**, m_s , που για τα ηλεκτρόνια λαμβάνει τις τιμές $m_s = \pm 1/2$. Σε αντιστοιχία με την τροχιακή στροφορμή, το μέτρο του σπιν ενός σωματιδίου είναι

$$S = \hbar\sqrt{s(s+1)}, \quad (7.46)$$

ενώ το σπιν κατά τη διεύθυνση z είναι

$$S_z = \hbar m_s, \quad m_s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm s. \quad (7.47)$$

Ο κβαντικός αριθμός s παίρνει θετικές ακέραιες τιμές προκειμένου για μποζόνια, και θετικές ημιακέραιες τιμές προκειμένου για φερμιόνια. Το ηλεκτρόνιο είναι φερμιόνιο με σπιν $s = \frac{1}{2}$ (ημιακέραιο). Συνεπώς, $m_s = \pm 1/2$. Όπως και στην περίπτωση της τροχιακής στροφορμής, για μαγνητικό πεδίο κατά τη διεύθυνση z , το σπιν δεν μπορεί να προσανατολιστεί ακριβώς παράλληλα ή αντιπαράλληλα με το πεδίο. Οι συνιστώσες x και y του σπιν είναι μη καθορισμένες. Συνεπώς, μπορούμε να φανταστούμε το \vec{S} ως αν να περιστρέφεται γύρω από τον άξονα z . Δείτε την Εικόνα 7.6.



Εικόνα 7.6: Οι κώνοι αναπαριστούν τους δυνατούς προσανατολισμούς του ηλεκτρονιακού σπιν. Για μαγνητικό πεδίο κατά τη διεύθυνση z , το σπιν δεν μπορεί να προσανατολιστεί ακριβώς παράλληλα ή αντιπαράλληλα με το πεδίο. Οι συνιστώσες x και y του σπιν είναι μη καθορισμένες.

Παρουσία μαγνητικού πεδίου \vec{B} , στη Χαμιλτονιανή προστίθεται ένας όρος δυναμικής ενέργειας της μορφής

$$U = -\vec{\mu}\vec{B}, \quad (7.48)$$

όπου $\vec{\mu}$ η μαγνητική ροπή του συστήματος. Για μαγνητικό πεδίο προσανατολισμένο στον άξονα z , θα είναι

$$U = -\vec{\mu}\vec{B} = -\frac{-e}{2m_e}(\vec{L} + g\vec{S})\vec{B} = \frac{e}{2m_e}(L_z + gS_z)B = \frac{e\hbar}{2m_e}m_\ell B = \mu_b(m_\ell + gm_s)B, \quad (7.49)$$

όπου η σταθερά $g \approx 2$ ονομάζεται παράγοντας Landé. Συνεπώς, εντός μαγνητικού πεδίου, η ενέργεια εξαρτάται όχι μόνον από τον κβαντικό αριθμό n αλλά και από τους m_ℓ, m_s . Έτσι, εντός μαγνητικού πεδίου, οι $2\ell + 1$ εκφυλισμένες ενεργειακές καταστάσεις τροχιακής στροφορμής και οι 2 εκφυλισμένες καταστάσεις σπιν διαχωρίζονται. Αυτό ονομάζεται **ανώμαλο φαινόμενο Zeeman** (anomalous Zeeman effect). Για εκφυλισμένο σπιν, κάθε κατάσταση ενός υποφλοιού μπορεί να καταλαμβάνεται από μέχρι δύο ηλεκτρόνια (με $m_s = +1/2$ και $m_s = -1/2$), λόγω της απαγορευτικής αρχής Pauli, σύμφωνα με την οποία δύο φερμιόνια δεν μπορούν να καταλαμβάνουν την ίδια κβαντική κατάσταση. Σημειώνεται ότι πέραν του φαινομένου Zeeman, υπάρχουν και άλλες διορθώσεις που υπεισέρχονται στις ιδιοενέργειες του υδρογόνου, όπως η **λεπτή υφή** (fine structure), η οποία απορρέει από τη σχετικιστική διόρθωση της εξίσωσης Schrödinger και η **υπέρλεπτη υφή** (hyperfine structure), η οποία προκύπτει αν συμπεριλάβουμε και αλληλεπιδράσεις με το σπιν του ατομικού πυρήνα. Οι διορθώσεις αυτές είναι αρκετές τάξεις μεγέθους μικρότερες.

Στον Πίνακα 7.2 παρουσιάζεται η δομή των τεσσάρων πρώτων ενεργειακών φλοιών στο πρότυπο ατομικών τροχιακών. Λαμβάνοντας υπόψη την απαγορευτική αρχή Pauli, αφού σε έναν υποφλοιό s ($\ell = 0$) έχουμε 1 κατάσταση ($m_\ell = 0$), αυτός χωράει το πολύ 2 ηλεκτρόνια, το ένα με σπιν άνω ($m_s = +1/2$) και το άλλο με σπιν κάτω ($m_s = -1/2$). Παρομοίως, σε έναν υποφλοιό p ($\ell = 1$) έχουμε 3 καταστάσεις ($m_\ell = 0, \pm 1$), άρα αυτός χωράει το πολύ 6 ηλεκτρόνια. Σε έναν υποφλοιό d ($\ell = 2$) έχουμε 5 καταστάσεις ($m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2$), άρα αυτός χωράει το πολύ 10 ηλεκτρόνια. Σε έναν υποφλοιό f ($\ell = 3$) έχουμε 7 καταστάσεις ($m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$), άρα αυτός χωράει το πολύ 14 ηλεκτρόνια.

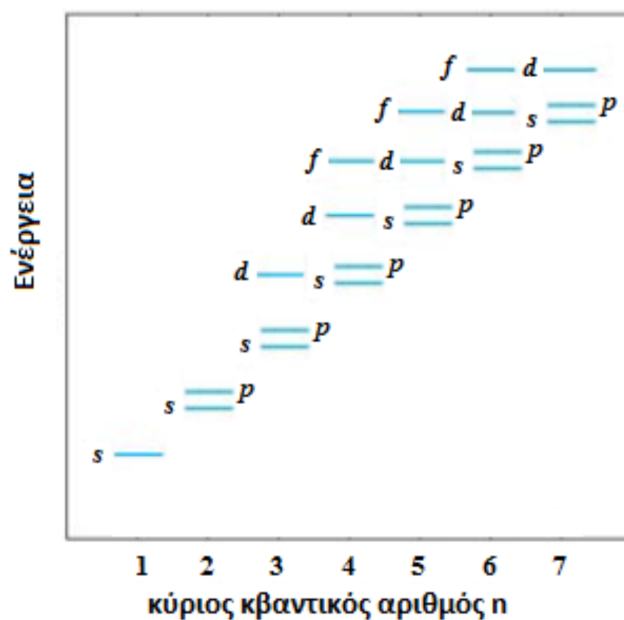
Πίνακας 7.2: Η δομή των τεσσάρων πρώτων ενεργειακών φλοιών στο πρότυπο ατομικών τροχιακών.

Φλοιός (n)	Υποφλοιός (ℓ)	Καταστάσεις (m_ℓ)	Μέγιστος # e^- Φλοιού	Μέγιστος # e^- Υποφλοιού
1 (K)	0 (1s)	0	2	2
2 (L)	0 (2s)	0	2	8
	1 (2p)	0, ±1	6	
3 (M)	0 (3s)	0	2	18
	1 (3p)	0, ±1	6	
	2 (3d)	0, ±1, ±2	10	
4 (N)	0 (4s)	0	2	32
	1 (4p)	0, ±1	6	
	2 (4d)	0, ±1, ±2	10	
	3 (4f)	0, ±1, ±2, ±3	14	

Στην Εικόνα 7.7 φαίνεται μια προσεγγιστική σχηματική απεικόνιση των σχετικών ενεργειών των διαφόρων φλοιών και υποφλοιών. Παρατηρούμε ότι:

- Όσο εσωτερικότερος είναι ο φλοιός, δηλαδή όσο μικρότερος είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός n , τόσο χαμηλότερη είναι η ενέργεια του υποφλοιού της ίδιας μορφής, π.χ. $E_{1s} < E_{2s} < E_{3s} < E_{4s}, \dots, E_{2p} < E_{3p} < E_{4p} \dots$, κ.ο.κ.
- Σε κάθε συγκεκριμένο φλοιό, δηλαδή για δεδομένο n , η ενέργεια του υποφλοιού αυξάνεται με την τιμή του ℓ π.χ. $E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}$.
- Είναι δυνατόν ένας υποφλοιός μικρότερου n («εσωτερικότερου φλοιού») να έχει μεγαλύτερη ενέργεια από έναν υποφλοιό άλλης μορφής μεγαλύτερου n («εξωτερικότερου φλοιού») π.χ. $E_{3d} > E_{4s}$. Με άλλα λόγια, οι φλοιοί μπορεί να επικαλύπτονται. Το φαινόμενο αυτό παρατηρείται ιδιαίτερα για μεγάλα n και ιδίως μεταξύ τροχιακών f και d .

Η απεικόνιση αυτή είναι προσεγγιστική, διότι, π.χ. τα 3d και 4s τροχιακά είναι ενεργειακά πολύ κοντά και η ακριβής τους ενεργειακή διάταξη εξαρτάται:



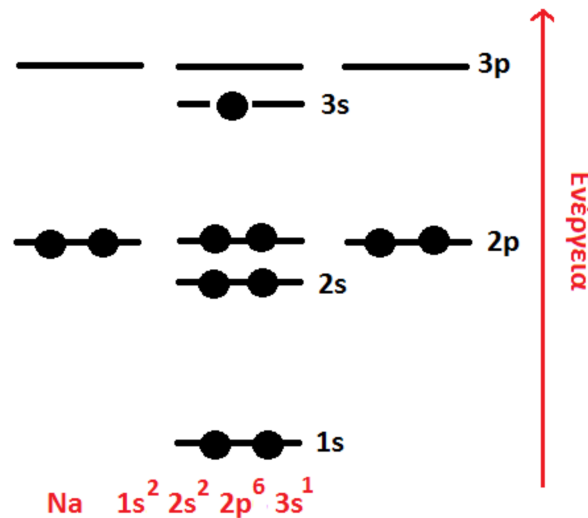
Εικόνα 7.7: Σχηματική προσεγγιστική απεικόνιση των σχετικών ενεργειών των διαφόρων φλοιών και υποφλοιών.

- από το είδος του ατόμου, δηλαδή τον αριθμό πρωτονίων, νετρονίων, ηλεκτρονίων,
- από την άπωση μεταξύ ηλεκτρονίων που καταλαμβάνουν τροχιακά. Για παράδειγμα, είναι ενεργειακά συμφερότερος ο συνδυασμός $3d^1 4s^2$ ή ο $3d^2 4s^1$ αφού τα d και s τροχιακά έχουν διαφορετική κατανομή ηλεκτρονικού νέφους, οπότε η άπωση μεταξύ τους είναι διαφορετική,
- από την απαγορευτική αρχή Pauli κ.ά.

Σε ένα άτομο βέβαια δεν γεμίζουν όλες οι δυνατές ενεργειακές καταστάσεις με ηλεκτρόνια. Ονομάζουμε **ηλεκτρονιακή διαμόρφωση** (electron configuration) τον τρόπο με τον οποίο καταλαμβάνονται από ηλεκτρόνια οι ενεργειακές καταστάσεις του ατόμου. Στα περισσότερα άτομα τα ηλεκτρόνια συμπληρώνουν τις χαμηλότερες ενεργειακά καταστάσεις, με δύο ηλεκτρόνια αντιθέτου σπιν σε κάθε ενεργειακή κατάσταση. Η θεμελιώδης (δηλαδή η χαμηλότερη ενεργειακά) ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του ατόμου του νατρίου παρουσιάζεται σχηματικά στην Εικόνα 7.8. Φυσικά, είναι δυνατή η διέγερση κάθε ατόμου σε ηλεκτρονιακές διαμορφώσεις υψηλότερης ενέργειας με πολλούς τρόπους. Συμβατικά, ο αριθμός των ηλεκτρονίων σε κάθε υποφλοιό καθορίζεται με έναν εκθέτη δίπλα από τα σύμβολα του υποφλοιού. Για παράδειγμα, για το νάτριο γράφουμε: $\text{Na } 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$, που σημαίνει ότι από τα 11 ηλεκτρόνια του 2 βρίσκονται στον υποφλοιό 1s, 2 στον 2s, 6 στον 2p και 1 στον 3s.

Ονομάζουμε **ηλεκτρόνια σθένους** (valence electrons) αυτά που βρίσκονται στον εξωτερικό φλοιό (δηλαδή στον εξώτερο φλοιό που είναι μερικώς ή ολικώς κατειλημμένος). Επί παραδείγματι, στην περίπτωση του Νατρίου υπάρχει ένα ηλεκτρόνιο σθένους, αυτό που βρίσκεται στον φλοιό 3 και ειδικότερα στον υποφλοιό 3s. Αυτά τα ηλεκτρόνια είναι εξαιρετικά σημαντικά διότι λαμβάνουν μέρος στους δεσμούς μεταξύ των ατόμων για να σχηματίσουν ατομικά και μοριακά συσσωματώματα. Επιπλέον, πολλές φυσικές και χημικές ιδιότητες εξαρτώνται κατά κύριο λόγο από τα ηλεκτρόνια σθένους.

Λέμε ότι ένα άτομο έχει **σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση** όταν έχει συμπληρώσει τον s και τον p υποφλοιό του εξωτερικού φλοιού ή μόνο τον s υποφλοιό στην περίπτωση του Ηλίου. Άρα, ο συμπληρωμένος εξωτερικός φλοιός έχει $2 + 6 = 8$ ηλεκτρόνια (ή 2 ηλεκτρόνια στην περίπτωση του Ηλίου). Σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση έχουν λοιπόν τα στοιχεία He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn. Τα στοιχεία αυτά είναι τα λεγόμενα ευγενή ή αδρανή αέρια τα οποία ουσιαστικά δεν αντιδρούν χημικά. Μερικά άτομα στοιχείων που έχουν μη συ-



Εικόνα 7.8: Η θεμελιώδης ηλεκτρονιακή διαμόρφωση του ατόμου του Νατρίου.

μπληρωμένους φλοιούς σθένους, αποκτούν σταθερή ηλεκτρονιακή διαμόρφωση κερδίζοντας ή χάνοντας ηλεκτρόνια σχηματίζοντας φορτισμένα ιόντα ή μοιραζόμενα τα ηλεκτρόνια σθένους τους με άλλα άτομα. Αυτή είναι μια γενική τάση και όχι απόλυτος κανόνας. Εξαιρέσεις αποτελούν π.χ. τα BF_3 και PCl_5 . Η ηλεκτρονιακή διαμόρφωση των ευγενών αερίων παρουσιάζεται στον Πίνακα 7.3.

Πίνακας 7.3: Η ηλεκτρονιακή διαμόρφωση των ευγενών αερίων.

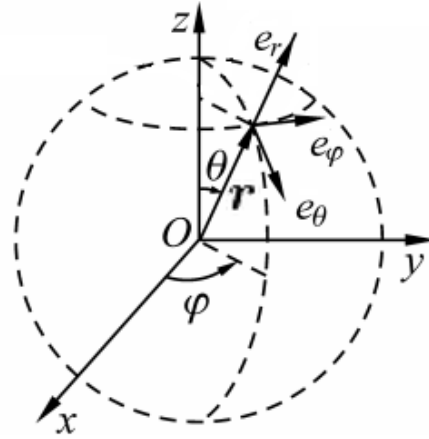
Ευγενές αέριο	Ηλεκτρονιακή διαμόρφωση	Αριθμός ηλεκτρονίων στους φλοιούς
Ήλιο (He)	$1s^2$	2
Νέον (Ne)	$[\text{He}]2s^2 2p^6$	2, 8
Αργόν (Ar)	$[\text{Ne}]3s^2 3p^6$	2, 8, 8
Κρυπτόν (Kr)	$[\text{Ar}]3d^{10} 4s^2 4p^6$	2, 8, 18, 8
Ξένον (Xe)	$[\text{Kr}]5s^2 4d^{10} 5p^6$	2, 8, 18, 18, 8
Ραδόνιο (Rn)	$[\text{Xe}]4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^6$	2, 8, 18, 32, 18, 8

Να σημειωθεί, τέλος, ότι δεν μπορούμε να συμπεράνουμε εκ των προτέρων τη σχέση διατάξεως των ενεργειών των υποφλοιών δύο διαφορετικών ατόμων. Για παράδειγμα, το Na έχει ηλεκτρονιακή διαμόρφωση $[\text{Ne}]3s^1$ με ενέργεια ιονισμού 5.1391 eV, δηλαδή $E_{3s}^{\text{Na}} = -5.1391$ eV, ενώ το Cl έχει ηλεκτρονιακή διαμόρφωση $[\text{Ne}]3s^2 3p^5$ με ενέργεια ιονισμού 12.9676 eV, δηλαδή $E_{3p}^{\text{Cl}} = -12.9676$ eV. Με άλλα λόγια, $E_{3s}^{\text{Na}} > E_{3p}^{\text{Cl}}$. Γι' αυτό άλλωστε το χλώριο χαρακτηρίζεται ηλεκτραρνητικότερο του νατρίου.

7.4 Άτομο Υδρογόνου: Μορφή ατομικών τροχιακών

Στην Εικόνα 7.9 φαίνονται οι σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ) , όπως συνήθως χρησιμοποιούνται στη φυσική: η απόσταση r από την αρχή των αξόνων O , η πολική γωνία θ , η αζιμουθιακή γωνία φ . Σημειώνονται και τα μοναδιαία ανύσματα $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$.

Υπενθυμίζεται ότι τα μοναδιαία ανύσματα $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$ των σφαιρικών συντεταγμένων μετασχηματίζονται σε



Εικόνα 7.9: Οι σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ) : η απόσταση από το κέντρο r , η πολική γωνία θ , η αζιμουθιακή γωνία φ . Σημειώνονται και τα μοναδιαία ανύσματα $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$.

καρτεσιανές συντεταγμένες $(\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z)$ και τούμπαλιν σύμφωνα με τις σχέσεις

$$\begin{bmatrix} \hat{e}_r \\ \hat{e}_\theta \\ \hat{e}_\varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \\ \cos \theta \cos \varphi & \cos \theta \sin \varphi & -\sin \theta \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{e}_x \\ \hat{e}_y \\ \hat{e}_z \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \hat{e}_x \\ \hat{e}_y \\ \hat{e}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sin \theta \cos \varphi & \cos \theta \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi & \cos \theta \sin \varphi & \cos \varphi \\ \cos \theta & -\sin \theta & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{e}_r \\ \hat{e}_\theta \\ \hat{e}_\varphi \end{bmatrix}. \quad (7.50)$$

Οι (κανονικοποιημένες) ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου σε σφαιρικές συντεταγμένες έχουν τη μορφή

$$\Psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)\Phi_{m_\ell}(\varphi).$$

Αυτές είναι δηλαδή τα $\Phi_k(\vec{r})$ του γενικότερου συμβολισμού που χρησιμοποιήσαμε παραπάνω, όπου $k = \{n, \ell, m_\ell\}$ είναι ο συλλογικός κβαντικός αριθμός. Συγκεκριμένα παρατίθενται παρακάτω τα ατομικά τροχιακά $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ [10].

$$\Psi_{100}(r, \theta, \varphi) = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad \Psi_{100} := 1s$$

$$\Psi_{200}(r, \theta, \varphi) = (32 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad \Psi_{200} := 2s$$

$$\Psi_{210}(r, \theta, \varphi) = (32 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad \Psi_{210} := 2p_z$$

$$\Psi_{21\pm 1}(r, \theta, \varphi) = (64 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (\Psi_{21+1} + \Psi_{21-1})/\sqrt{2} := 2p_x$$

$$(\Psi_{21+1} - \Psi_{21-1})/(i\sqrt{2}) := 2p_y$$

$$\Psi_{300}(r, \theta, \varphi) = (19683 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(27 - 18 \frac{r}{a_0} + 2 \frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} \quad \Psi_{300} := 3s$$

$$\Psi_{310}(r, \theta, \varphi) = (6561 \pi a_0^3/2)^{-\frac{1}{2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos \theta \quad \Psi_{310} := 3p_z$$

$$\Psi_{31\pm 1}(r, \theta, \varphi) = (6561 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \quad (\Psi_{31+1} + \Psi_{31-1})/\sqrt{2} := 3p_x$$

$$(\Psi_{31+1} - \Psi_{31-1})/(i\sqrt{2}) := 3p_y$$

$$\Psi_{320}(r, \theta, \varphi) = (39366 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad \Psi_{320} := 3d_{z^2}$$

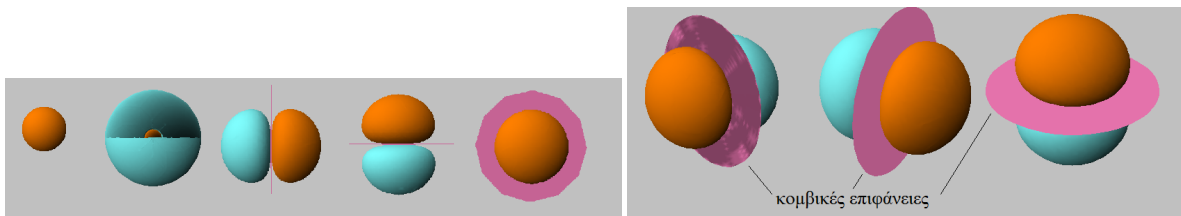
$$\Psi_{32\pm 1}(r, \theta, \varphi) = (6561 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} \quad (\Psi_{32+1} + \Psi_{32-1})/\sqrt{2} := 3d_{xz}$$

$$\quad (\Psi_{32+1} - \Psi_{32-1})/(i\sqrt{2}) := 3d_{yz}$$

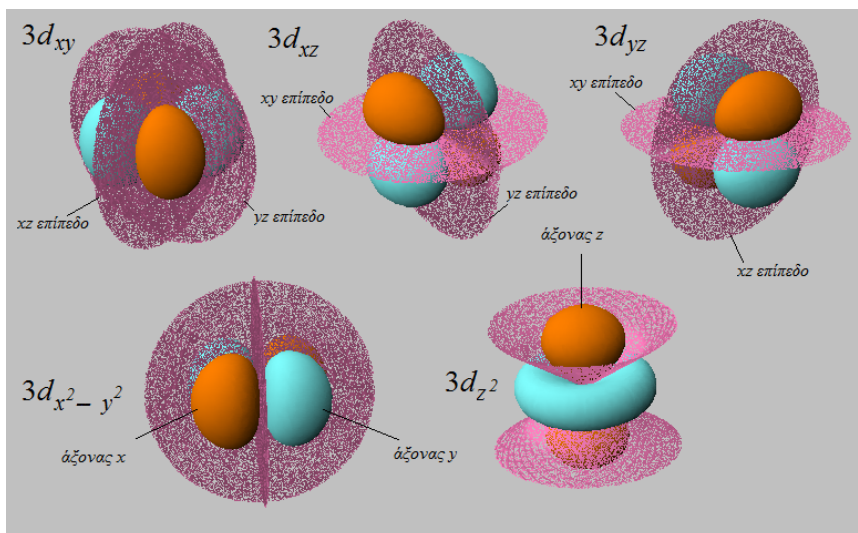
$$\Psi_{32\pm 2}(r, \theta, \varphi) = (26244 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} \quad (\Psi_{32+2} + \Psi_{32-2})/\sqrt{2} := 3d_{x^2-y^2}$$

$$\quad (\Psi_{32+2} - \Psi_{32-2})/(i\sqrt{2}) := 3d_{xy}$$

Εννοείται ότι οι ιδιοσυναρτήσεις μπορούν να πολλαπλασιαστούν με έναν παράγοντα e^{ia} , όπου a μια αυθαίρετη φάση, παραμένοντας ιδιοσυναρτήσεις. Όπως προαναφέρθηκε, οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες είναι $E_k = \hbar\Omega_k = -\frac{R_E}{n^2} = E_n$, δηλαδή υπάρχει εκφυλισμός ως προς ℓ, m . $R_E = 13.6$ eV είναι η ενέργεια Rydberg και a_0 είναι η ακτίνα Bohr. Τα πέντε πρώτα ατομικά τροχιακά $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ απεικονίζονται στην Εικόνα 7.10, τα πέντε ατομικά τροχιακά $3d$ στην Εικόνα 7.11, ενώ όλα τα ατομικά τροχιακά υδρογονοειδών κυματοσυναρτήσεων έως το $7s$ απεικονίζονται στην Εικόνα 7.12.



Εικόνα 7.10: Τα πέντε πρώτα ατομικά τροχιακά $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ [11]. Τα χρώματα (πορτοκαλί, γαλανό) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η πορτοκαλί περιοχή είναι θετική, η γαλανή είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$. Δεξιά φαίνονται οι κομβικές επιφάνειες στα $2p$ με λεπτομέρεια.



Εικόνα 7.11: Τα πέντε ατομικά τροχιακά $3d$ [11]. Τα χρώματα (πορτοκαλί, γαλανό) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η πορτοκαλί περιοχή είναι θετική, η γαλανή είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$.

	s ($l = 0$)	p ($l = 1$)			d ($l = 2$)					f ($l = 3$)						
	$m = 0$	$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = \pm 3$	
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_z(x^2-y^2)$	$f_x(x^2-3y^2)$	$f_y(3x^2-y^2)$
$n = 1$	•															
$n = 2$	•															
$n = 3$	•															
$n = 4$																
$n = 5$									
$n = 6$				
$n = 7$	

Εικόνα 7.12: Όλα τα ατομικά τροχιακά υδρογονοειδών κυματοσυναρτήσεων έως το 7s. Τα χρώματα αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η κόκκινη περιοχή είναι θετική, η μπλε είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα $e^{ia} = 1$. Εικόνα από wikipedia [12].

7.5 Κομβικές επιφάνειες

Από την Εικόνα 7.12 παρατηρούμε ότι, πλην του τροχιακού 1s, τα υπόλοιπα τροχιακά έχουν τουλάχιστον μια **κομβική επιφάνεια**. Κομβική επιφάνεια είναι αυτή επάνω στην οποία η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται, άρα η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο σε αυτήν μηδενίζεται επίσης. Υπάρχουν δύο κατηγορίες κομβικών επιφανειών:

- Οι σφαιρικές κομβικές επιφάνειες, οι οποίες ονομάζονται **ακτινικοί κόμβοι**, καθώς περιγράφονται πλήρως από την ακτίνα τους. Ο αριθμός των ακτινικών κόμβων ενός τροχιακού καθορίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς n και ℓ , και συγκεκριμένα είναι $n - \ell - 1$. Οι ακτινικοί κόμβοι προκύπτουν βρίσκοντας εκείνες τις αποστάσεις r στις οποίες η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται. Έτσι, τα 1s τροχιακά δεν έχουν κανέναν ακτινικό κόμβο, τα 2s έχουν έναν, τα 2p δεν έχουν κανένα, τα 3s έχουν δύο, τα 3p έχουν έναν κ.ο.κ.
- Οι επίπεδες ή κωνικές κομβικές επιφάνειες, οι οποίες ονομάζονται **γωνιακοί κόμβοι**, καθώς περιγράφονται πλήρως από τη γωνία που σχηματίζουν με έναν από τους τρεις άξονες. Ο αριθμός των γωνιακών κόμβων ενός τροχιακού καθορίζεται από τον κβαντικό αριθμό ℓ και είναι ίσος με αυτόν. Οι γωνιακοί κόμβοι προκύπτουν βρίσκοντας εκείνες τις γωνίες θ , ϕ , στις οποίες η κυματοσυνάρτηση μηδενίζεται. Έτσι, τα s τροχιακά δεν έχουν κανέναν γωνιακό κόμβο, τα p έχουν έναν, τα d έχουν δύο, τα f έχουν τρεις κ.ο.κ. Ουσιαστικά οι γωνιακοί κόμβοι είναι αυτοί που καθορίζουν το εξωτερικό σχήμα των τροχιακών.

Με βάση τα παραπάνω, ο συνολικός αριθμός των κομβικών επιφανειών, ακτινικών και γωνιακών, είναι $n - \ell - 1 + \ell = n - 1$.

7.6 Ομοτιμία, επιτρεπόμενες και απαγορευμένες μεταβάσεις, κανόνες επιλογής

Το γεγονός ότι γνωρίζουμε την αναλυτική μορφή των κυματοσυναρτήσεων του υδρογόνου μας επιτρέπει να μελετήσουμε τις επιτρεπόμενες και απαγορευμένες μεταβάσεις του εντός της προσεγγίσεως διπόλου στο πα-

ράδειγμα αυτό. Υπενθυμίζεται ότι, στο πλαίσιο της προσεγγίσεως αυτής, η δυναμική ενέργεια της διαταραχής είναι

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e \vec{\mathcal{E}} \cdot \underbrace{\int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \vec{r} \Phi_k(\vec{r})}_{\vec{r}_{k'k}}.$$

Αν μηδενίζεται το $\vec{r}_{k'k}$, τότε θα μηδενίζεται και το $U_{\mathcal{E}k'k}(t)$, οπότε οι καταστάσεις k' και k δεν συζεύγνυται. Συνεπώς, το ηλεκτρόνιο δεν μπορεί να μεταβεί από την κατάσταση k στην k' , και αντιστρόφως. Όλα λοιπόν ανάγονται στην ομοτιμία των ιδιοσυναρτήσεων του υδρογόνου, δεδομένου ότι η \vec{r} είναι, προφανώς, περιττή. Αν δύο ιδιοσυναρτήσεις $\Phi_k(\vec{r}) = \Psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \phi)$ και $\Phi_{k'}(\vec{r}) = \Psi_{n'\ell' m'_\ell}(r, \theta, \phi)$ έχουν την ίδια ομοτιμία, τότε η ολοκληρωτέα ποσότητα είναι περιττή, οπότε το ολοκλήρωμα σε όλο τον χώρο μηδενίζεται εκ ταυτότητας. Τότε λέμε πως η μετάβαση αυτή «απαγορεύεται». Αντιθέτως, αν οι ιδιοσυναρτήσεις αυτές έχουν διαφορετική ομοτιμία, τότε η ολοκληρωτέα ποσότητα είναι άρτια, οπότε το ολοκλήρωμα σε όλο τον χώρο δεν μηδενίζεται εκ ταυτότητας. Τότε λέμε ότι η μετάβαση αυτή «επιτρέπεται». Εννοείται ότι στην περίπτωση αυτή, η τιμή του ολοκληρώματος είναι διαφορετική για διαφορετικά ζευγάρια $\Psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \phi)$ και $\Psi_{n'\ell' m'_\ell}(r, \theta, \phi)$. Με άλλα λόγια, δεν έχουν όλες οι μεταβάσεις την ίδια ισχύ. Στην περίπτωση του ατόμου του υδρογόνου, από τη συμμετρία των ιδιοσυναρτήσεων προκύπτει ότι «επιτρέπονται» οι μεταβάσεις με $\Delta\ell = \pm 1$, $\Delta m_\ell = 0, \pm 1$. Αυτοί είναι οι λεγόμενοι **κανόνες επιλογής**. Όλα αυτά θα τα δούμε αναλυτικά αμέσως παρακάτω, χρησιμοποιώντας ως παράδειγμα-άσκηση το άτομο του υδρογόνου. Περισσότερες σχετικές ασκήσεις μπορούν να βρεθούν στο Παράρτημα Α.

7.7 Άτομο Υδρογόνου: Υπολογισμός των στοιχείων πίνακα της διπολικής ροπής, Επιτρεπόμενες και απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις, Κανόνες επιλογής

Θεωρήστε τις ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου

$$\Psi_{n\ell m_\ell}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)\Phi_{m_\ell}(\varphi) = \Phi_k(\vec{r}),$$

όπου $k = \{n, \ell, m_\ell\}$ ο συλλογικός κβαντικός αριθμός. Δηλαδή $n = 1, 2, 3, \dots$ είναι ο **κύριος κβαντικός αριθμός**, $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ είναι ο **κβαντικός αριθμός τροχιακής στροφορμής** και $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$ είναι ο **μαγνητικός κβαντικός αριθμός**. Συγκεκριμένα δίνονται οι

$$\Psi_{100}(r, \theta, \varphi) = (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad \Psi_{100} := 1s$$

$$\Psi_{200}(r, \theta, \varphi) = (32 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad \Psi_{200} := 2s$$

$$\Psi_{210}(r, \theta, \varphi) = (32 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad \Psi_{210} := 2p_z$$

$$\Psi_{21\pm 1}(r, \theta, \varphi) = (64 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (\Psi_{21+1} + \Psi_{21-1})/\sqrt{2} := 2p_x$$

$$(\Psi_{21+1} - \Psi_{21-1})/(i\sqrt{2}) := 2p_y$$

$$\Psi_{300}(r, \theta, \varphi) = (19683 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} \quad \Psi_{300} := 3s$$

Οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες είναι $E_k = \hbar\Omega_k = -\frac{R_E}{n^2} = E_n$, δηλαδή υπάρχει εκφυλισμός ως προς ℓ, m . $R_E = 13.6$ eV είναι η ενέργεια Rydberg και a_0 είναι η ακτίνα Bohr.

1. Να ελεγχθεί αν όλες οι παραπάνω δεδομένες κυματοσυναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες.
2. Να ελεγχθεί αν είναι άρτιες ή περιττές.
3. Να αποφανθείτε αν μηδενίζονται ή όχι τα ολοκληρώματα

$$\vec{r}_{k_1 k_2} := \int_{\text{παντού}} dV \Phi_{k_1}^*(\vec{r}) \vec{r} \Phi_{k_2}(\vec{r}),$$

δηλαδή τα στοιχεία πίνακα της θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα. Τα ολοκληρώματα αυτά είναι ανάλογα με τα στοιχεία πίνακα της διπολικής ροπής $\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r}$, δηλαδή τα

$$\vec{\mathcal{P}}_{k_1 k_2} := \int_{\text{παντού}} dV \Phi_{k_1}^*(\vec{r}) (-e)\vec{r} \Phi_{k_2}(\vec{r}).$$

Υπενθυμίζεται ότι, εάν $\vec{r}_{k_1 k_2} = \vec{0}$, «απαγορεύεται» η οπτική μετάβαση $k_1 \leftrightarrow k_2$.

4. Προβλέψτε, λοιπόν, ποιες από τις μεταβάσεις μεταξύ των ιδιοκαταστάσεων που δίνονται επιτρέπονται και ελέγξτε αν ισχύουν οι «κανόνες επιλογής» $\Delta \ell = \pm 1$, $\Delta m = 0, \pm 1$.
5. Ελέγξτε αν οι δεδομένες $\Phi_k(\vec{r})$ είναι ορθογώνιες.
6. Υπολογίστε τα στοιχεία πίνακα της διπολικής ροπής $\vec{\mathcal{P}}_{100\ 210}$ και $\vec{\mathcal{P}}_{100\ 21\pm 1}$.
7. Να συγκριθούν οι ισχείς των οπτικών μεταβάσεων $1s \leftrightarrow 2p_z$ και $1s \leftrightarrow 2p_x$.

Θεωρήστε δεδομένα

A. $\int_0^{\infty} e^{-\gamma r} r^n dr = \gamma^{-(n+1)} n!$, όπου $n = 1, 2, 3, \dots$ και $\gamma > 0$.

B. Σε σφαιρικές συντεταγμένες (r, θ, φ) , η αντιστροφή ως προς την αρχή του συστήματος αναφοράς, δηλαδή η πράξη $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}$, αντιστοιχεί στις αλλαγές $r' = r$, $\theta' = \pi - \theta$, και $\varphi' = \varphi + \pi$.

Γ. Ισχύει η παρακάτω έκφραση για το διάνυσμα θέσεως

$$\vec{r} = \frac{r}{2} \sin \theta [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\varphi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\varphi}] + r \cos \theta \hat{e}_z.$$

Απάντηση

Χρησιμοποιούμε την αλλαγή μεταβλητής $q = \frac{r}{a_0}$ και τις συντομογραφίες:

$$\langle n' \ell' m' | n \ell m \rangle := \int d^3 r \Psi_{n' \ell' m'}^*(\vec{r}) \Psi_{n \ell m}(\vec{r}) \quad \text{και} \quad \langle n' \ell' m' | \vec{r} | n \ell m \rangle := \int d^3 r \Psi_{n' \ell' m'}^*(\vec{r}) \vec{r} \Psi_{n \ell m}(\vec{r}).$$

1. Για την $\Psi_{100}(\vec{r})$ έχουμε:

$$\begin{aligned} \langle 100 | 100 \rangle &:= \int d^3 r \Psi_{100}^*(\vec{r}) \Psi_{100}(\vec{r}) = \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} = \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{\infty} dr r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{a_0^3}{\pi a_0^3} \int_0^{\infty} dq q^2 e^{-2q} [-\cos \theta]_0^{\pi} 2\pi \\ &= 2 \int_0^{\infty} dq q^2 e^{-2q} [-\cos \pi + \cos 0] = 4 \int_0^{\infty} dq q^2 e^{-2q} \stackrel{*}{=} 4 \frac{2!}{2^{2+1}} = 1. \end{aligned}$$

* Χρησιμοποιήσαμε το **δεδομένο Α**, για $\gamma = 2, n = 2$. Δηλαδή η $|100\rangle$ είναι κανονικοποιημένη, όπως αναμενόταν. Ομοίως ελέγχεται η κανονικοποίηση των υπολοίπων, υπολογίζοντας τα $\langle 200|200\rangle, \langle 210|210\rangle, \langle 21 \pm 1|21 \pm 1\rangle, \langle 300|300\rangle$.

2. Ο έλεγχος της ομοτιμίας γίνεται με τη βοήθεια του **δεδομένου Β**. Να σημειωθεί ότι $\sin \theta' = \sin(\pi - \theta) = \sin \theta, \cos \theta' = \cos(\pi - \theta) = -\cos \theta$, ενώ $e^{\pm i\varphi'} = e^{\pm i(\varphi+\pi)} = e^{\pm i\varphi} e^{\pm i\pi} = (-1)e^{\pm i\varphi}$. Οπότε

$$\begin{aligned} \Psi_{100}(-\vec{r}) &= \Psi_{100}(\vec{r}) & * & & \text{άρτια} \\ \Psi_{200}(-\vec{r}) &= \Psi_{200}(\vec{r}) & * & & \text{άρτια} \\ \Psi_{300}(-\vec{r}) &= \Psi_{300}(\vec{r}) & * & & \text{άρτια} \\ \Psi_{210}(-\vec{r}) &= -\Psi_{210}(\vec{r}) & ** & & \text{περιττή} \\ \Psi_{21\pm 1}(-\vec{r}) &= -\Psi_{21\pm 1}(\vec{r}) & *** & & \text{περιττή} \end{aligned}$$

* Διότι εξαρτάται μόνο από το r και αυτό δεν αλλάζει με την πράξη $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}$.

** Επειδή εξαρτάται όχι μόνο από το r που δεν αλλάζει με την πράξη $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}$, αλλά και από το $\cos \theta$ το οποίο θα γίνει $\cos \theta' = \cos(\pi - \theta) = -\cos \theta$.

*** Εξαρτάται από το r που δεν αλλάζει με την πράξη $\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r}$, από το $\sin \theta$ που πάει στο $\sin \theta' = \sin(\pi - \theta) = \sin \theta$, δηλαδή και αυτό δεν αλλάζει, αλλά το $e^{\pm i\varphi'} = e^{\pm i(\varphi+\pi)} = e^{\pm i\varphi} e^{\pm i\pi} = (-1)e^{\pm i\varphi}$, δηλαδή η περιττότητά της οφείλεται στο φ .

Δηλαδή δείξαμε ότι οι $1s, 2s, 3s$ είναι άρτιες, ενώ η $2p_z$ περιττή. Οι $2p_x$ και $2p_y$ είναι και αυτές περιττές αφού προκύπτουν από το άθροισμα ή τη διαφορά των περιττών συναρτήσεων $\Psi_{21\pm 1}$. Όπως άλλωστε γνωρίζουμε «εγκυκλοπαιδικά», οι τύπου s είναι άρτιες και οι τύπου p περιττές.

3.-4. Στον Πίνακα 7.4 περιγράφονται συνοπτικά οι μεταβάσεις μεταξύ των πρώτων δύο φλοιών, δηλαδή για $n = 1, 2$. (Α) σημαίνει άρτια και (Π) περιττή. Παρατηρούμε ότι ισχύει ο **κανόνας επιλογής** $\Delta \ell = \pm 1, \Delta m = 0, \pm 1$, δηλαδή όταν αυτά ισχύουν, η μετάβαση επιτρέπεται.

Πίνακας 7.4: Επιτρεπόμενες (ΕΠΙΤΡ.) και απαγορευμένες (ΑΠΑΓ.) οπτικές μεταβάσεις στο άτομο του Υδρογόνου, μεταξύ των φλοιών 1 και 2, στο πλαίσιο της προσεγγίσεως διπόλου. Το * σημαίνει ότι στο άτομο του υδρογόνου η αρχική και η τελική κατάσταση αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια, είναι δηλαδή εκφυλισμένες, οπότε στην πραγματικότητα δεν υπάρχουν τέτοιες μεταβάσεις. Οι $2p_x$ και $2p_y$ κατασκευάζονται από το άθροισμα ή τη διαφορά των 21 ± 1 .

$k_1 = \{n_1, \ell_1, m_1\}$	$k_2 = \{n_2, \ell_2, m_2\}$	$\Phi_{k_1}^*(\vec{r})$	$\Phi_{k_2}(\vec{r})$	$\Phi_{k_1}^*(\vec{r}) \vec{r} \Phi_{k_2}(\vec{r})$	$\vec{r}_{k_1 k_2}$	$\Delta \ell$	Δm		
100	1s	200	2s	(Α)	(Α)	(Π) ΑΠΑΓ.	0	0	0
100	1s	210	$2p_z$	(Α)	(Π)	(Α) ΕΠΙΤΡ.	$\neq 0$	1	0
100	1s	21 ± 1	$2p_x, 2p_y$	(Α)	(Π)	(Α) ΕΠΙΤΡ.	$\neq 0$	1	± 1
100	1s	300	3s	(Α)	(Α)	(Π) ΑΠΑΓ.	0	0	0
200	2s	210	$2p_z$	(Α)	(Π)	(Α) ΕΠΙΤΡ. *	$\neq 0$	1	0
200	2s	21 ± 1	$2p_x, 2p_y$	(Α)	(Π)	(Α) ΕΠΙΤΡ. *	$\neq 0$	1	± 1
200	2s	300	3s	(Α)	(Α)	(Π) ΑΠΑΓ.	0	0	0
210	$2p_z$	21 ± 1	$2p_x, 2p_y$	(Π)	(Π)	(Π) ΑΠΑΓ.	0	0	± 1
210	$2p_z$	300	3s	(Π)	(Α)	(Α) ΕΠΙΤΡ.	$\neq 0$	-1	0
21 ± 1	$2p_x, 2p_y$	300	3s	(Π)	(Α)	(Α) ΕΠΙΤΡ.	$\neq 0$	-1	∓ 1

5. Ας ελέγξουμε ως προς την ορθογωνιότητα τις Ψ_{100} και Ψ_{200} :

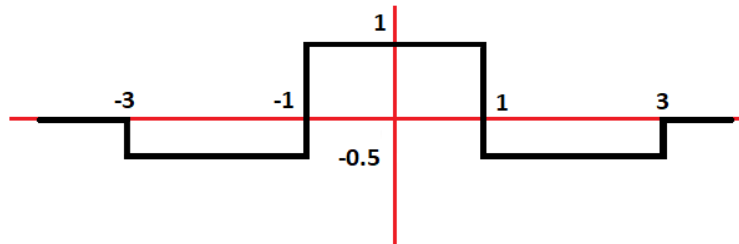
$$\begin{aligned} \langle 100|200 \rangle &:= \int d^3r \Psi_{100}^{(A)*} \Psi_{200}^{(A)} = \frac{1}{\pi a_0^3 \sqrt{32}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} = \\ &= \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} 4\pi \int_0^\infty r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} dr \stackrel{\text{θέτουμε}}{=} \frac{a_0^3}{a_0^3 \sqrt{2}} \int_0^\infty q^2 \cdot e^{-q} (2 - q) e^{-\frac{q}{2}} dq \\ &= \frac{2}{\sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-\frac{3q}{2}} q^2 dq - \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-\frac{3q}{2}} q^3 dq \stackrel{*}{=} \sqrt{2} \frac{2!}{\left(\frac{3}{2}\right)^{2+1}} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{3!}{\left(\frac{3}{2}\right)^{3+1}} = 0. \end{aligned}$$

Χρησιμοποιήσαμε το **δεδομένο Α**, για $\gamma = 3/2$, $n = 2$ και $\gamma = 3/2$, $n = 3$. Δείξαμε δηλαδή ότι $\langle 100|200 \rangle = 0$, άρα οι Ψ_{100} και Ψ_{200} είναι ορθογώνιες, όπως αναμενόταν. Ομοίως υπολογίζονται και τα υπόλοιπα εσωτερικά γινόμενα μεταξύ των διαφορετικών ιδιοσυναρτήσεων, τα οποία πράγματι μηδενίζονται.

Υπενθύμιση: Το ολοκλήρωμα σε όλο τον χώρο μιας άρτιας συναρτήσεως δεν είναι εκ ταυτότητας μηδέν. Αυτό δεν σημαίνει ότι δεν μπορεί να μηδενίζεται, π.χ. δείτε την Εικόνα 7.13. Ενώ, το ολοκλήρωμα σε όλο τον χώρο μιας περιττής συναρτήσεως εκ ταυτότητας μηδενίζεται, διότι π.χ.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) = \int_{-\infty}^0 dx f(x) + \int_0^{+\infty} dx f(x) = -\int_{+\infty}^0 dy f(-y) + \int_0^{+\infty} dx f(x) = -\int_0^{+\infty} dy f(y) + \int_0^{+\infty} dx f(x) = 0.$$

θέτουμε $y = -x$



Εικόνα 7.13: Το ολοκλήρωμα σε όλο τον χώρο μιας άρτιας συναρτήσεως δεν είναι εκ ταυτότητας μηδέν, αλλά μπορεί να μηδενίζεται, όπως π.χ. της εικονιζομένης άρτιας συναρτήσεως.

5. Γνωρίζουμε ότι $\vec{\mathcal{P}}_{k'k} = -e\vec{r}_{k'k}$, οπότε ο υπολογισμός των $\vec{\mathcal{P}}_{100210}$ και $\vec{\mathcal{P}}_{10021\pm 1}$ ανάγεται στον υπολογισμό των \vec{r}_{100210} και $\vec{r}_{10021\pm 1}$, αντιστοίχως. Για το πρώτο:

$$\begin{aligned} \vec{r}_{100210} &= \langle 100|\vec{r}|210 \rangle = \int d^3r \Psi_{100}^* \vec{r} \Psi_{210} \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3 \sqrt{32}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \underbrace{\vec{r}}_{\text{Δεδομένο Γ}} \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta \, dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \left\{ \frac{r}{2} \sin \theta [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\varphi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\varphi}] + r \cos \theta \hat{e}_z \right\} \\
 &\quad \cdot \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}} \\
 &= \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} \underbrace{\int_0^\infty r^2 dr e^{-\frac{r}{a_0}} r \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}}_{I(r)} \left\{ \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta \, d\theta d\varphi \frac{1}{2} [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\varphi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\varphi}] \cos \theta + \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta \, d\theta d\varphi \cos^2 \theta \hat{e}_z \right\}.
 \end{aligned}$$

Χρησιμοποιούμε τώρα το **δεδομένο A**, για $\gamma = \frac{3}{2}$ και $n = 4$.

$$I(r) = a_0^4 \int_0^\infty q^2 dq e^{-q} q q e^{-\frac{q}{2}} = a_0^4 \int_0^\infty q^4 dq e^{-\frac{3q}{2}} = a_0^4 \frac{4!}{\left(\frac{3}{2}\right)^{4+1}} = a_0^4 \frac{2 \cdot 3 \cdot 4}{3^5} 2^5 = a_0^4 \frac{2^8}{3^4}.$$

Επίσης,

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm i\varphi} d\varphi = \left[\frac{e^{\pm i\varphi}}{\pm i} \right]_0^{2\pi} = 0,$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta \, d\theta \hat{e}_z = 2\pi \hat{e}_z \int_1^{-1} \frac{d(\cos^3 \theta)}{3} \cdot (-1) = \frac{2\pi \hat{e}_z}{3} \int_{-1}^1 1^1 dy = \frac{2\pi \hat{e}_z}{3} [y]_{-1}^1 = \frac{4\pi \hat{e}_z}{3},$$

$$\frac{d(\cos^3 \theta)}{3} = 3 \cos^2 \theta (-1) \sin \theta \Rightarrow \frac{d(\cos^3 \theta)}{-3} = \cos^2 \theta \sin \theta d\theta.$$

Άρα,

$$\vec{r}_{100210} = \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} a_0^4 \cdot \frac{2^8}{3^4} \frac{4\pi \hat{e}_z}{3} = a_0 \hat{e}_z \frac{2^{15/2}}{3^5} \Rightarrow \vec{r}_{100210} = 100 \vec{r}_{210} = \frac{2^{15/2}}{3^5} a_0 \hat{e}_z \Rightarrow$$

$$\boxed{\vec{\mathcal{P}}_{100210} = -\frac{2^{15/2}}{3^5} e a_0 \hat{e}_z, \quad |\vec{\mathcal{P}}_{100210}| = \frac{2^{15/2}}{3^5} e a_0}$$

Για το δεύτερο:

$$\begin{aligned}
 \vec{r}_{10021\pm 1} &= \langle 100 | \vec{r} | 21 \pm 1 \rangle = \int d^3 r \Psi_{100}^* \vec{r} \Psi_{21\pm 1} \\
 &= \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} \frac{1}{8(\pi a_0^3)^{1/2}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta \, dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \left\{ \frac{r}{2} \sin \theta [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\varphi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\varphi}] + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + r \cos \theta \hat{e}_z \left. \right\} \frac{r}{a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}} \\
& = \frac{1}{8\pi a_0^3} \int_0^\infty dr r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} r \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta d\theta d\varphi \left\{ \frac{\sin \theta}{2} [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\varphi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\varphi}] + \cos \theta \hat{e}_z \right\} e^{\pm i\varphi} \\
& = \frac{a_0}{8\pi} \int_0^\infty dq q^4 e^{-\frac{3q}{2}} \cdot \text{γωνιακή εξάρτηση} = \frac{a_0}{8\pi} \frac{4!}{\left(\frac{3}{2}\right)^{4+1}} \cdot \text{γωνιακή εξάρτηση} \\
& = \frac{a_0}{\pi} \frac{2^5}{3^4} \cdot \text{γωνιακή εξάρτηση}.
\end{aligned}$$

Αλλά

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm 2i\varphi} d\varphi = \left[\frac{e^{\pm 2i\varphi}}{\pm 2i} \right]_0^{2\pi} = 0 \quad \text{και} \quad \int_0^{2\pi} e^{\pm i\varphi} d\varphi = \left[\frac{e^{\pm i\varphi}}{\pm i} \right]_0^{2\pi} = 0,$$

$$\text{γωνιακή εξάρτηση} = \int_0^\pi d\theta \frac{\sin^3 \theta}{2} [2\pi(\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y)] = \pi [\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y] \int_0^\pi d\theta \sin^3 \theta = \frac{4\pi}{3} [\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y],$$

$$\int_0^\pi d\theta \sin^3 \theta = \left[\frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right]_0^\pi = -\frac{1}{3} + 1 - \frac{1}{3} + 1 = \frac{4}{3},$$

$$\text{διότι} \quad \frac{d}{d\theta} \left(\frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right) = -\cos^2 \theta \cdot \sin \theta + \sin \theta = \sin \theta [1 - \cos^2 \theta] = \sin^3 \theta.$$

Άρα,

$$\begin{aligned}
\vec{r}_{10021\pm 1} &= \frac{a_0}{\pi} \cdot \frac{2^5}{3^4} \frac{4\pi}{3} (\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y) \Rightarrow \vec{r}_{10021\pm 1} = a_0 \frac{2^7}{3^5} (\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y) \\
\vec{\mathcal{P}}_{10021\pm 1} &= -\frac{2^7}{3^5} (\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y) e a_0, \quad |\vec{\mathcal{P}}_{10021\pm 1}| = \frac{2^{15/2}}{3^5} e a_0
\end{aligned}$$

7. Από το προηγούμενο ερώτημα προκύπτει ότι

$$\frac{|\vec{\mathcal{P}}_{100210}|}{|\vec{\mathcal{P}}_{10021\pm 1}|} = 1.$$

Συνεπώς οι δύο μεταβάσεις έχουν την ίδια ισχύ.

Περισσότερες ενδεικτικές πράξεις μπορούν να βρεθούν στο τέλος των ασκήσεων του παρόντος κεφαλαίου, στο Παράρτημα Α.

Βιβλιογραφία

- [1] J. J. Thomson. “Cathode? Rays”. Στο: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. Series 5*. 44 (1897), σσ. 293–316. DOI: [10.1080/14786449708621070](https://doi.org/10.1080/14786449708621070).
- [2] G. N. Lewis. “The atom and the molecule.” Στο: *Journal of the American Chemical Society* 38 (1916), σσ. 762–785. DOI: [10.1021/ja02261a002](https://doi.org/10.1021/ja02261a002).
- [3] J. J. Thomson. “XXIV. On the structure of the atom: an investigation of the stability and periods of oscillation of a number of corpuscles arranged at equal intervals around the circumference of a circle; with application of the results to the theory of atomic structure”. Στο: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 7 (1904), σσ. 237–265. DOI: [10.1080/14786440409463107](https://doi.org/10.1080/14786440409463107).
- [4] H. Nagaoka. “LV. Kinetics of a system of particles illustrating the line and the band spectrum and the phenomena of radioactivity”. Στο: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 7 (1904), σσ. 445–455. DOI: [10.1080/14786440409463141](https://doi.org/10.1080/14786440409463141).
- [5] E. Rutherford. “The scattering of α and β particles by matter and the structure of the atom”. Στο: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. Series 6*. 21 (1911), σσ. 669–688. DOI: [10.1080/14786440508637080](https://doi.org/10.1080/14786440508637080).
- [6] N. Bohr. “I. On the constitution of atoms and molecules”. Στο: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 26 (1913), σσ. 1–25. DOI: [10.1080/14786441308634955](https://doi.org/10.1080/14786441308634955).
- [7] A. Beiser. *Concepts of Modern Physics*. 6th edition. New York: McGraw-Hill Science/Engineering/-Math, 2002. ISBN: 9780072448481.
- [8] W. Wilson. “LXXXIII. The quantum-theory of radiation and line spectra”. Στο: *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 29 (1915), σσ. 795–802. DOI: [10.1080/14786440608635362](https://doi.org/10.1080/14786440608635362).
- [9] A. Sommerfeld. “Zur Quantentheorie der Spektrallinien”. Στο: *Annalen der Physik* 356 (1916), σσ. 1–94. DOI: <https://doi.org/10.1002/andp.19163561702>.
- [10] R. M. Eisberg. *Θεμελιώδης Σύγχρονη Φυσική*. Αθήνα: Γ. Α. Πνευματικός, 1995. ISBN: 9607258142.
- [11] Created in Orbital viewer, free to use (<http://www.orbitals.com/orb/ov.htm>). 2004.
- [12] [Wikipedia Atomic orbital](#). Created in Orbital viewer (<http://www.orbitals.com/orb/ov.htm>). Electron orbital series. Dhatfield - Own work, Public Domain, many files, Uploaded by Dhatfield, Uploaded: September 25, 2008. 2008.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ I

Σύνοψη

Περνάμε στην πλήρη κβαντική αντιμετώπιση της αλληλεπιδράσεως φωτονίων - ΔΣ, ΤΣ, ΠΣ και στην κβάντωση ΗΜ πεδίου, η οποία γίνεται με κάπως ευρετικό τρόπο. Κύριο μέρος εδώ αποτελούν οι ταλαντώσεις Rabi του αριθμού των φωτονίων και της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στις στάθμες ενός ΔΣ, το οποίο αλληλεπιδρά με φωτόνια εντός κοιλότητας. Αρχικώς, εξηγούμε τι είναι η πλήρης κβαντική προσέγγιση έναντι ημικλασικής προσεγγίσεως: τώρα πια κβαντώνουμε και το ηλεκτρομαγνητικό (ΗΜ) πεδίο. Συζητάμε τη σχέση μεταξύ κυματανυσμάτων, κυκλικών συχνοτήτων και φάσεων ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου και το πώς δημιουργείται στάσιμο ΗΜ κύμα εντός κοιλότητας. Στη συνέχεια, περιγράφουμε τη Χαμιλτονιανή ΗΜ πεδίου με τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβιβάσεως και αναβιβάσεως) φωτονίων, τη Χαμιλτονιανή δισταθμικού συστήματος με σπίνορες και τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβιβάσεως και αναβιβάσεως) ηλεκτρονίων, και γενικεύουμε, παρουσιάζοντας τη Χαμιλτονιανή τρισταθμικού και πολυσταθμικού συστήματος με σπίνορες και τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβιβάσεως και αναβιβάσεως) ηλεκτρονίων. Μετά, συζητάμε διεξοδικότερα τη Χαμιλτονιανή αλληλεπιδράσεως δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου και υπολογίζουμε τις μέσες (αναμενόμενες) τιμές διαφόρων μεγεθών για τη Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings, η οποία είναι μια απλοστευμένη ολική Χαμιλτονιανή. Με αυτήν μελετάμε τις ταλαντώσεις Rabi, δηλαδή, τις χρονικά εξαρτημένες πιθανότητες καταλήψεως των δύο σταθμών και του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα, για την απορρόφηση και την εκπομπή φωτονίου.

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Κβαντικής Φυσικής.

8.1 Πλήρης κβαντική προσέγγιση έναντι ημικλασικής προσεγγίσεως

Στα Κεφάλαια 5 και 6 είδαμε τη λεγόμενη Ημικλασική Προσέγγιση (δισταθμικό σύστημα κβαντικά - ΗΜ πεδίο κλασικά). Για το ΗΜ πεδίο χρησιμοποιήσαμε τη γλώσσα των ανυσματικών μεγεθών \vec{E} , \vec{B} . Υποθέσαμε, λοιπόν, ότι το πλάτος του ηλεκτρικού πεδίου είναι σταθερό. Έπρεπε η ΗΜ ακτινοβολία να είναι αρκετά πυκνή, ώστε το πλάτος του ηλεκτρικού πεδίου να μην επηρεάζεται πρακτικά από την απορρόφηση ή την εκπομπή

φωτονίου.

Στο παρόν κεφάλαιο κάνουμε Πλήρη Κβαντική Προσέγγιση, δηλαδή αντιμετωπίζουμε δισταθμικό σύστημα και ΗΜ πεδίο κβαντικά. Θα λέγαμε ότι προσπαθούμε να εκφράσουμε το ΗΜ πεδίο στη γλώσσα του αριθμού των φωτονίων. Θα πρέπει επομένως να βρεθεί μια έκφραση της Χαμιλτονιανής του ΗΜ πεδίου που να επιτρέπει τον μετασχηματισμό της στη γλώσσα του αριθμού των φωτονίων αντί της γλώσσας που χρησιμοποιεί τα ανυσματικά μεγέθη \vec{E}, \vec{B} . Αυτό θα γίνει στο παράδειγμα του στάσιμου ΗΜ κύματος σε κοιλότητα, στην Ενότητα 8.3. Πριν από αυτό, στην Ενότητα 8.2, θα διερευνήσουμε τη σχέση μεταξύ κυματανυσμάτων, κυκλικών συχνοτήτων και αρχικών φάσεων του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου. Στη συνέχεια, στην Ενότητα 8.4 θα θυμηθούμε τους τελεστές καταστροφής και δημιουργίας φωτονίων και θα κβαντωθεί η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το ΗΜ πεδίο, καθώς και το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο, ξεχωριστά, με τη βοήθεια των τελεστών αυτών. Άρα, θα έχουμε μια Χαμιλτονιανή για το ΗΜ πεδίο. Κατόπιν, στην Ενότητα 8.5 θα περιγράψουμε με τη βοήθεια σπινόρων το δισταθμικό σύστημα και ειδικότερα την αναβίβαση και την καταβίβαση ενός ηλεκτρονίου μεταξύ των δύο ενεργειακών σταθμών του. Άρα, θα έχουμε και μια Χαμιλτονιανή για το δισταθμικό σύστημα. Μετά, θα κατασκευάσουμε και τη Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου, στην Ενότητα 8.7. Οπότε, θα είμαστε σε θέση να ορίσουμε μια Ολική Χαμιλτονιανή που να περιγράφει το ΗΜ πεδίο, το δισταθμικό σύστημα, αλλά και τη μεταξύ τους αλληλεπίδραση (Χαμιλτονιανές Rabi και Jaynes-Cummings). Στην Ενότητα 8.8 συνοψίζονται οι Χαμιλτονιανές. Στην Ενότητα 8.9 υπολογίζονται μέσες (αναμενόμενες) τιμές χρήσιμων μεγεθών για τη Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings στην απορρόφηση και στην εκπομπή φωτονίου. Ακολουθούν δύο παραδείγματα εφαρμογής της Χαμιλτονιανής Jaynes-Cummings στην απορρόφηση φωτονίου (Ενότητα 8.10) και στην εκπομπή φωτονίου (Ενότητα 8.11), τα οποία καταλήγουν στην περιγραφή των ταλαντώσεων του πληθυσμού των φωτονίων και της καταλήψεως των ενεργειακών σταθμών.

8.2 Σχέσεις μεταξύ κυματανυσμάτων, κυκλικών συχνοτήτων και φάσεων ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου

Ας θυμηθούμε τις Εξισώσεις Maxwell στη διατύπωση με όρους ολικού φορτίου και ολικού ρεύματος και συγκεκριμένα στη διαφορική μορφή:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad \text{νόμος Gauss ηλεκτρισμού,} \quad (8.1\alpha)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad \text{νόμος Gauss μαγνητισμού,} \quad (8.1\beta)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \text{νόμος Faraday,} \quad (8.1\gamma)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad \text{νόμος Ampère και διόρθωση Maxwell.} \quad (8.1\delta)$$

Στο κενό, όπου $\rho = 0$ και $\vec{J} = \vec{0}$, οι Εξ. 8.1α, 8.1β, 8.1γ, 8.1δ γίνονται

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0, \quad (8.2\alpha)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad (8.2\beta)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (8.2\gamma)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (8.2\delta)$$

Ισχύουν οι ταυτότητες

$$\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\Delta}) = \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{\Delta}) - \nabla^2 \vec{\Delta}, \quad (8.3)$$

$$\nabla^2 \vec{\Delta} := (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) \vec{\Delta}. \quad (8.4)$$

Οπότε, από τις Εξ. 8.2 προκύπτει

$$\nabla^2 \vec{E} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}. \quad (8.5)$$

Δοκιμάζοντας στην Εξ. 8.5 λύσεις της μορφής

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta)}, \quad (8.6)$$

προκύπτει

$$|\vec{k}| := k = \frac{\omega}{c}. \quad (8.7)$$

Ομοίως, από τις Εξ. 8.2 προκύπτει

$$\nabla^2 \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}. \quad (8.8)$$

Δοκιμάζοντας στην Εξ. 8.8 λύσεις της μορφής

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta')}, \quad (8.9)$$

προκύπτει πάλι η εξίσωση Εξ. 8.7. Επειδή $\omega = 2\pi\nu$, $c = \lambda\nu$, από την Εξ. 8.7 προκύπτει $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Σημειωτέον ότι δεδομένου ότι παραγωγίζουμε ως προς x, y, z, t , οι «αρχικές φάσεις» δ, δ' παραμένουν αυθαίρετες, δηλαδή δεν προσδιορίζονται από τις έως τώρα πράξεις.

Για τις λύσεις 8.6 και 8.9, μετά από πράξεις, διαπιστώνουμε ότι ο τελεστής $\vec{\nabla}$ μπορεί να αντικατασταθεί με $i\vec{k}$, δηλαδή σχηματικά

$$\boxed{\vec{\nabla} \rightarrow i\vec{k}} \quad (8.10)$$

διότι αν θεωρήσουμε πεδίο της μορφής

$$\vec{\Delta} = \vec{\Delta}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta)} := (\Delta_{0x}, \Delta_{0y}, \Delta_{0z}) e^{(d)} \quad (8.11)$$

τότε

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{\Delta} &= \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (\Delta_x, \Delta_y, \Delta_z) = \frac{\partial \Delta_x}{\partial x} + \frac{\partial \Delta_y}{\partial y} + \frac{\partial \Delta_z}{\partial z} = \\ &\Delta_{0x} e^{(d)} i k_x + \Delta_{0y} e^{(d)} i k_y + \Delta_{0z} e^{(d)} i k_z = i(k_x, k_y, k_z) \cdot (\Delta_{0x}, \Delta_{0y}, \Delta_{0z}) e^{(d)} = i\vec{k} \cdot \vec{\Delta}, \end{aligned}$$

αλλά και

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{\Delta} &= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ \Delta_{0x} e^{(d)} & \Delta_{0y} e^{(d)} & \Delta_{0z} e^{(d)} \end{vmatrix} \\ &= \hat{i} \left(\frac{\partial \Delta_{0z} e^{(d)}}{\partial y} - \frac{\partial \Delta_{0y} e^{(d)}}{\partial z} \right) - \hat{j} \left(\frac{\partial \Delta_{0z} e^{(d)}}{\partial x} - \frac{\partial \Delta_{0x} e^{(d)}}{\partial z} \right) + \hat{k} \left(\frac{\partial \Delta_{0x} e^{(d)}}{\partial y} - \frac{\partial \Delta_{0y} e^{(d)}}{\partial x} \right) \\ &= \hat{i} (i k_y \Delta_z - i k_z \Delta_y) - \hat{j} (i k_x \Delta_z - i k_z \Delta_x) + \hat{k} (i k_y \Delta_x - i k_x \Delta_y) \\ &= i \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ k_x & k_y & k_z \\ \Delta_x & \Delta_y & \Delta_z \end{vmatrix} = i\vec{k} \times \vec{\Delta}. \end{aligned}$$

Συνεπώς,

$$\text{Εξ. 8.2α, 8.6} \Rightarrow i\vec{k} \cdot \vec{E} = 0 \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{E} = 0, \quad (8.12\alpha)$$

$$\text{Εξ. 8.2β, 8.9} \Rightarrow i\vec{k} \cdot \vec{B} = 0 \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{B} = 0, \quad (8.12\beta)$$

$$\text{Εξ. 8.2γ, 8.6, 8.9} \Rightarrow i\vec{k} \times \vec{E} = i\omega\vec{B} \Rightarrow \vec{k} \times \vec{E} = \omega\vec{B}, \quad (8.12\gamma)$$

$$\text{Εξ. 8.2δ, 8.6, 8.9} \Rightarrow i\vec{k} \times \vec{B} = \mu_0\epsilon_0(-i\omega)\vec{E} \Rightarrow \vec{k} \times \vec{B} = -\mu_0\epsilon_0\omega\vec{E}. \quad (8.12\delta)$$

Από τις Εξ. 8.12α, 8.12β, 8.12γ, 8.12δ, με ένα σύντομο λογικό παιχνίδι, προκύπτει η σχέση των κατευθύνσεων των διανυσμάτων \vec{E} , \vec{B} , \vec{k} , συγκεκριμένα προκύπτει ότι το εξωτερικό γινόμενο του \vec{E} με το \vec{B} είναι ομόρροπο του \vec{k} , δηλαδή

$$\boxed{\vec{E} \times \vec{B} \uparrow\uparrow \vec{k}} \quad (8.13)$$

και μάλιστα τα \vec{E} , \vec{B} , \vec{k} έχουν τη σχέση κατευθύνσεων και καθετοτήτων που αποδίδεται στην Εικόνα 8.1. Η σχέση 8.13 μπορεί να αποδειχθεί και να εξειδικευτεί και με μαθηματικά, χρήση της ταυτότητας

$$\vec{a} \times (\vec{b} \times \vec{c}) = (\vec{a} \cdot \vec{c})\vec{b} - (\vec{a} \cdot \vec{b})\vec{c}. \quad (8.14)$$

Για παράδειγμα, ξεκινώντας από την Εξ. 8.12γ έχουμε $\vec{E} \times (\vec{k} \times \vec{E}) = \omega\vec{E} \times \vec{B} \Rightarrow (\vec{E} \cdot \vec{E})\vec{k} - (\vec{E} \cdot \vec{k})\vec{E} = \omega\vec{E} \times \vec{B}$,

Εικόνα 8.1: $\vec{E} \times \vec{B} \uparrow\uparrow \vec{k}$.

αλλά λόγω της Εξ. 8.12α προκύπτει

$$\boxed{\vec{E} \times \vec{B} = \frac{|\vec{E}|^2}{\omega}\vec{k}} \quad (8.15)$$

Λαμβάνοντας υπ' όψιν τις ήδη αποδεδειγμένες καθετότητες των κατευθύνσεων των \vec{E} , \vec{B} , \vec{k} , από τις Εξ. 8.12γ-8.12δ προκύπτει

$$\boxed{\frac{|\vec{E}|}{|\vec{B}|} = c} \quad (8.16)$$

Ας δοκιμάσουμε τώρα στις Εξ. 8.5 και 8.8, αντί των λύσεων 8.6 και 8.9, λύσεις της μορφής

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k}_e \cdot \vec{r} - \omega_e t + \delta_e)} = \vec{E}_0 e^{\odot}, \quad (8.17)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k}_b \cdot \vec{r} - \omega_b t + \delta_b)} = \vec{B}_0 e^{\ominus}, \quad (8.18)$$

δηλαδή **ας θεωρήσουμε ότι τα $\vec{E}(\vec{r}, t)$ και $\vec{B}(\vec{r}, t)$ δεν έχουν κατ' ανάγκη ίσα κυματανύσματα \vec{k}_e και \vec{k}_b , κυκλικές συχνότητες ω_e και ω_b και «αρχικές φάσεις» δ_e και δ_b . Τότε**

$$\text{Εξ. 8.2α, 8.17} \quad \Rightarrow \quad \vec{k}_e \cdot \vec{E} = 0, \quad (8.19\alpha)$$

$$\text{Εξ. 8.2β, 8.18} \quad \Rightarrow \quad \vec{k}_b \cdot \vec{B} = 0, \quad (8.19\beta)$$

$$\text{Εξ. 8.2γ, 8.17, 8.18} \quad \Rightarrow \quad \vec{k}_e \times \vec{E} = \omega_b \vec{B}, \quad (8.19\gamma)$$

$$\text{Εξ. 8.2δ, 8.17, 8.18} \quad \Rightarrow \quad \vec{k}_b \times \vec{B} = -\mu_0 \epsilon_0 \omega_e \vec{E}. \quad (8.19\delta)$$

και δεν προκύπτει κάποια σχέση μεταξύ των δ_e, δ_b . Από την Εξ. 8.19γ προκύπτει

$$\begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ k_{ex} & k_{ey} & k_{ez} \\ E_{0x} e^{\odot} & E_{0y} e^{\odot} & E_{0z} e^{\odot} \end{vmatrix} = (\omega_b B_{0x} e^{\ominus}, \omega_b B_{0y} e^{\ominus}, \omega_b B_{0z} e^{\ominus}) \Rightarrow \quad (8.20\alpha)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} k_{ey} E_{0z} e^{\odot} - k_{ez} E_{0y} e^{\odot} = \omega_b B_{0x} e^{\ominus} \\ k_{ez} E_{0x} e^{\odot} - k_{ex} E_{0z} e^{\odot} = \omega_b B_{0y} e^{\ominus} \\ k_{ex} E_{0y} e^{\odot} - k_{ey} E_{0x} e^{\odot} = \omega_b B_{0z} e^{\ominus} \end{array} \right\} \Rightarrow \quad (8.20\beta)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{k_{ey} E_{0z} - k_{ez} E_{0y}}{\omega_b B_{0x}} = e^{\ominus} e^{\odot*} = e^{i[(\vec{k}_b - \vec{k}_e) \cdot \vec{r} - (\omega_b - \omega_e)t + (\delta_b - \delta_e)]} \\ \frac{k_{ez} E_{0x} - k_{ex} E_{0z}}{\omega_b B_{0y}} = e^{\ominus} e^{\odot*} = \text{το ίδιο} \\ \frac{k_{ex} E_{0y} - k_{ey} E_{0x}}{\omega_b B_{0z}} = e^{\ominus} e^{\odot*} = \text{το ίδιο} \\ \text{σταθερές} \qquad \qquad \qquad \text{συναρτήσεις των } \vec{r}, t \end{array} \right\}. \quad (8.20\gamma)$$

Αν θεωρήσουμε κάποια συγκεκριμένη χρονική στιγμή t , επειδή τα αριστερά μέρη είναι σταθερά, θα πρέπει και τα δεξιά να είναι, δηλαδή να μην εξαρτώνται από το \vec{r} , άρα

$$\vec{k}_b = \vec{k}_e. \quad (8.21)$$

Αν θεωρήσουμε κάποια συγκεκριμένη θέση \vec{r} , επειδή τα αριστερά μέρη είναι σταθερά, θα πρέπει και τα δεξιά να είναι, δηλαδή να μην εξαρτώνται από το t , άρα

$$\omega_b = \omega_e. \quad (8.22)$$

Τέλος, από τις Εξ. 8.21-8.22 έπεται ότι τα δεξιά μέρη θα ισούνται με $e^{i(\delta_b - \delta_e)} = \cos(\delta_b - \delta_e) + i \sin(\delta_b - \delta_e)$. Αν τα αριστερά μέρη ήταν πραγματικά, τότε $\sin(\delta_b - \delta_e) = 0 \Rightarrow \delta_b - \delta_e = n\pi, n \in \mathcal{Z}$, οπότε υπάρχει μερική λύση $\delta_b = \delta_e$. Τα \vec{E}_0, \vec{B}_0 , όμως, είναι εν γένει μιγαδικά, άρα καταλήγουμε στις σχέσεις

$$\begin{aligned} \frac{k_{ey} E_{0z} - k_{ez} E_{0y}}{\omega_b B_{0x}} &= e^{i(\delta_b - \delta_e)}, \\ \frac{k_{ez} E_{0x} - k_{ex} E_{0z}}{\omega_b B_{0y}} &= e^{i(\delta_b - \delta_e)}, \\ \frac{k_{ex} E_{0y} - k_{ey} E_{0x}}{\omega_b B_{0z}} &= e^{i(\delta_b - \delta_e)}. \end{aligned} \quad (8.23)$$

8.3 Στάσιμο ΗΜ κύμα σε κοιλότητα

Στην Ενότητα αυτή, θα κατασκευάσουμε μια έκφραση της Χαμιλτονιανής του ΗΜ πεδίου που να επιτρέπει τον μετασχηματισμό της στη γλώσσα του αριθμού των φωτονίων αντί της γλώσσας που χρησιμοποιεί τα ανυσηματικά μεγέθη \vec{E}, \vec{B} . Αυτό θα γίνει στο παράδειγμα του στάσιμου ΗΜ κύματος σε κοιλότητα.

Πριν από αυτό, ας θυμηθούμε ότι για τρέχοντα ΗΜ κύματα, με τις προϋποθέσεις της Ενότητας 8.2, έχουμε

$$\nabla^2 \vec{E} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad \vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta)}, \quad (8.24)$$

$$\nabla^2 \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2}, \quad \vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta)}, \quad (8.25)$$

και $\vec{E} \times \vec{B} \uparrow \uparrow \vec{k}$, όπως φαίνεται στην Εικόνα 8.2 αριστερά. Πρόκειται για κυματικές εξισώσεις για το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο, αντιστοίχως, σε 3 διαστάσεις και τις λύσεις τους.

Εικόνα 8.2: [Αριστερά] Για τρέχοντα ΗΜ κύματα έχουμε $\vec{E} \times \vec{B} \uparrow \uparrow \vec{k}$. [Δεξιά] Υποθέτουμε ότι $\vec{E} \times \vec{B} \uparrow \uparrow \vec{k}$ με τον προσανατολισμό σε άξονες που δείχνει το σχήμα.

Αν ο προσανατολισμός σε άξονες είναι αυτός που δείχνει η Εικόνα 8.2 δεξιά, τότε

$$\nabla^2 \vec{E}_x = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}_x}{\partial t^2}, \quad (8.26)$$

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_{x0} e^{i(k_z z - \omega t + \delta)} = \vec{E}_x(z, t), \quad (8.27)$$

$$\nabla^2 \vec{B}_y = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}_y}{\partial t^2}, \quad (8.28)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_{y0} e^{i(k_z z - \omega t + \delta)} = \vec{B}_y(z, t), \quad (8.29)$$

οπότε,

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2}, \quad (8.30)$$

$$\frac{\partial^2 B_y}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 B_y}{\partial t^2}. \quad (8.31)$$

Πρόκειται για κυματικές εξισώσεις για το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο, αντιστοίχως, σε 1 διάσταση. Ας δούμε τώρα αν βγαίνει κάποιο συμπέρασμα από τις εξισώσεις του Maxwell στο κενό.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \quad (\text{Εξ. 8.2α}) \Rightarrow \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \Rightarrow \frac{\partial E_x}{\partial x} + 0 + 0 = 0 \Rightarrow$$

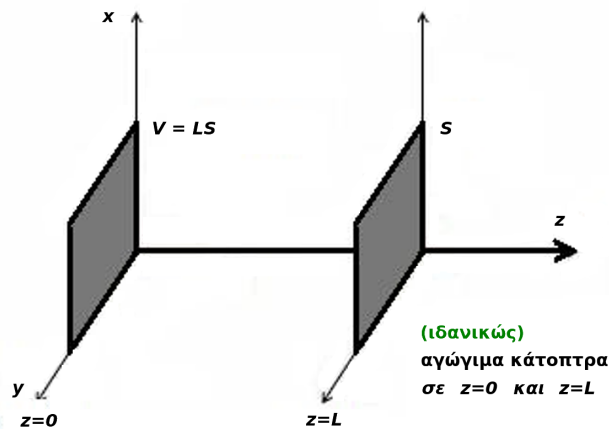
$$\frac{\partial E_x}{\partial x} = 0, \text{ πράγμα αναμενόμενο.} \quad (8.32)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{Εξ. 8.2}\beta) \Rightarrow \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0 \Rightarrow 0 + \frac{\partial B_y}{\partial y} + 0 = 0 \Rightarrow \frac{\partial B_y}{\partial y} = 0, \text{ πράγμα αναμενόμενο.} \quad (8.33)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{Εξ. 8.2}\gamma) \Rightarrow \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ E_x & 0 & 0 \end{vmatrix} = -\hat{j} \frac{\partial B_y}{\partial t} \Rightarrow \hat{j} \frac{\partial E_x}{\partial z} = -\hat{j} \frac{\partial B_y}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial E_x}{\partial z} = -\frac{\partial B_y}{\partial t}. \quad (8.34)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (\text{Εξ. 8.2}\delta) \Rightarrow \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & B_y & 0 \end{vmatrix} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial E_x}{\partial t} \hat{i} \Rightarrow i \left(-\frac{\partial B_y}{\partial z} \right) = i \frac{1}{c^2} \frac{\partial E_x}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial B_y}{\partial z} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial E_x}{\partial t}. \quad (8.35)$$

♣ Τώρα βάζουμε ιδανικώς αγωγήματα **κάτοπτρα** στις θέσεις $z = 0$ και $z = L$ (Εικόνα 8.3). Το προσπίπτον σε κάθε κάτοπτρο κύμα θα συμβάλει με το ανακλώμενο, άρα θα δημιουργηθούν **στάσιμα κύματα**.



Εικόνα 8.3: Στις θέσεις $z = 0$ και $z = L$ τοποθετούνται επίπεδα, ιδανικώς αγωγήματα κάτοπτρα.

Οι Εξ. 8.30 και 8.34, ήτοι

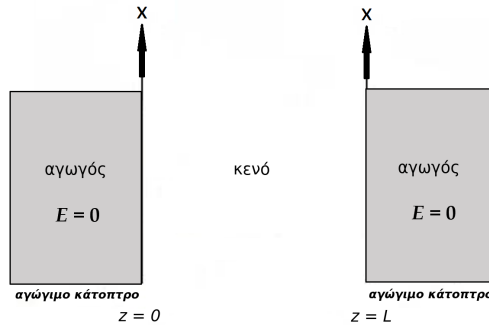
$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E_x}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial E_x}{\partial z} = -\frac{\partial B_y}{\partial t},$$

όπως και οι Εξ. 8.31 και 8.35, ήτοι

$$\frac{\partial^2 B_y}{\partial z^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 B_y}{\partial t^2}, \quad \frac{\partial B_y}{\partial z} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial E_x}{\partial t},$$

εξακολουθούν να ισχύουν για τον γραμμικό συνδυασμό των προσπιπτόντων και ανακλωμένων κυμάτων. Αναζητούμε λύση με μέθοδο των χωριζομένων μεταβλητών, υποθέτοντας ότι

$$E_x(z, t) = \mathcal{N} Z(z) T(t). \quad (8.36)$$



Εικόνα 8.4: Αγωγήματα κάτοπτρα πριν από $z = 0$ και μετά από $z = L$.

Ας θυμηθούμε τις συνοριακές συνθήκες στη διεπιφάνεια ιδανικού αγωγού - κενού ή κατά προσέγγιση αέρα (Εικόνα 2.10). Η εφαπτομενική συνιστώσα του \vec{E} μηδενίζεται στη διεπιφάνεια αυτή. Επειδή το \vec{E} έχει μόνο x συνιστώσα (Εξ. 8.27), και τα επίπεδα, ιδανικώς αγωγήματα κάτοπτρα τοποθετούνται στις θέσεις $z = 0$ και $z = L$ (δείτε και την Εικόνα 8.4), οπότε το \vec{E} είναι παράλληλο σε αυτά, έπεται ότι

$$E_x(0, t) = 0 = E_x(L, t), \forall t. \quad (8.37)$$

Από τις Εξ. 8.30 και 8.36 έπεται ότι

$$\begin{aligned} \mathcal{N} T(t) \frac{d^2 Z}{dz^2} &= \mathcal{N} \frac{1}{c^2} Z(z) \frac{d^2 T}{dt^2} \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \underbrace{\frac{1}{Z(z)} \frac{d^2 Z}{dz^2}}_{f(z)} &= \underbrace{\frac{1}{T(t)} \frac{1}{c^2} \frac{d^2 T}{dt^2}}_{g(t)} \stackrel{\text{άρα}}{=} \text{σταθερά} := -k^2, \\ &\underbrace{\hspace{10em}}_{\forall z, \forall t} \end{aligned}$$

αρκεί $Z(z) \neq 0$ και $T(t) \neq 0$, ενώ για $Z(z) = 0$ και $T(t) = 0$ ισχύει η τετριμμένη λύση. Άρα,

$$\boxed{\frac{d^2 Z}{dz^2} + k^2 Z(z) = 0} \quad (8.38)$$

και

$$\boxed{\frac{d^2 T}{dt^2} + k^2 c^2 T(t) = 0} \quad (8.39)$$

• Ας λύσουμε αρχικά την Εξ. 8.38, δοκιμάζοντας λύσεις της μορφής $e^{\tilde{\lambda}z}$, οπότε προκύπτει το χαρακτηριστικό πολυώνυμο

$$\tilde{\lambda}^2 + k^2 = 0 \Rightarrow \tilde{\lambda}^2 = -k^2 \Rightarrow \tilde{\lambda} = \pm ik, \quad \text{π.χ. ας διαλέξουμε } k \in \mathbb{R}_+$$

Άρα, ουσιαστικά, η λύση θα είναι της μορφής

$$Z(z) = Ae^{ikz} + Be^{-ikz} \quad (8.40)$$

$$Z(0) = 0 \quad \text{συνοριακή συνθήκη 1} \quad (8.41)$$

$$Z(L) = 0 \quad \text{συνοριακή συνθήκη 2} \quad (8.42)$$

όπου λάβαμε υπ' όψιν τις συνοριακές συνθήκες 8.37. Από τις Εξ. 8.40 και 8.41 συνεπάγεται ότι $A + B = 0 \Rightarrow B = -A$, οπότε η Εξ. 8.40 γίνεται

$$Z(z) = Ae^{ikz} - Ae^{-ikz} = 2iA \sin(kz) \quad (8.43)$$

και, εφαρμόζοντας την Εξ. 8.42,

$$\sin(kL) = 0 \Rightarrow kL = m\pi, m \in \mathcal{Z}. \quad (8.44)$$

Δεδομένου, όμως, ότι διαλέξαμε παραπάνω $k \in \mathbb{R}_+$, θα πρέπει $m \in \mathbb{N}$, και για μη μηδενική λύση θα πρέπει $m \in \mathbb{N}^*$, οπότε $k \in \mathcal{R}_+$. Συνοπτικά το k εξαρτάται από έναν φυσικό, μη μηδενικό δείκτη, δηλαδή

$$\boxed{k_m = \frac{m\pi}{L}, m \in \mathbb{N}^*} \quad (8.45)$$

Άρα,

$$Z_m(z) = 2Ai \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right).$$

Ενώ, αν απαιτήσουμε οι Z_m να είναι ορθοκανονικές,

$$\int_0^L dz Z_m^*(z) Z_l(z) = \delta_{ml} \Rightarrow \int_0^L dz 2iA^2 \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \sin\left(\frac{l\pi z}{L}\right) = \delta_{ml}.$$

Ορίζοντας $\psi = \frac{\pi z}{L}$, συνεπώς $d\psi = \frac{\pi}{L} dz$, έχουμε

$$\int_0^\pi \frac{L}{\pi} d\psi 2iA^2 \sin(m\psi) \sin(l\psi) = \delta_{ml} \Rightarrow \frac{L}{\pi} 4A^2 \int_0^\pi d\psi \sin(m\psi) \sin(l\psi) = \delta_{ml}.$$

Αλλά

$$\int_0^\pi d\psi \sin(m\psi) \sin(l\psi) = \frac{\pi}{2} \delta_{ml}, \quad (8.46)$$

ενώ ισχύει, επίσης,

$$\int_0^\pi d\psi \cos(m\psi) \cos(l\psi) = \frac{\pi}{2} \delta_{ml}. \quad (8.47)$$

Επομένως,

$$\frac{L}{\pi} 4A^2 \frac{\pi}{2} \delta_{ml} = \delta_{ml} \Rightarrow A^2 = \frac{1}{2L}.$$

Ας διαλέξουμε κάτι βολικό, π.χ. $A = \frac{1}{\sqrt{2L}}(-i)$. Συνεπώς,

$$\boxed{Z_m(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)} \quad (8.48)$$

• Στη συνέχεια, ας λύσουμε την Εξ. 8.39. Ας ορίσουμε

$$\omega := kc > 0, \quad (8.49)$$

οπότε, $\omega^2 = k^2 c^2$. Χρησιμοποιώντας την Εξ. 8.45

$$\boxed{\omega_m = \frac{m\pi c}{L}, m \in \mathbb{N}^*} \quad (8.50)$$

Δοκιμάζοντας λύσεις της μορφής $e^{\tilde{\lambda}t}$, προκύπτει το χαρακτηριστικό πολυώνυμο

$$\tilde{\lambda}^2 + \omega_m^2 = 0 \Rightarrow \tilde{\lambda} = \pm i\omega_m, \quad \omega_m \in \mathbb{R}_+^*. \quad (8.51)$$

Άρα, ουσιαστικά, η λύση θα είναι της μορφής

$$T(t) = \Gamma e^{i\omega_m t} + \Delta e^{-i\omega_m t}, \quad (8.52)$$

και αν θέσουμε την αρχική συνθήκη

$$T(0) = 0, \quad (8.53)$$

προκύπτει $\Gamma + \Delta = 0 \Rightarrow \Delta = -\Gamma$, οπότε

$$T(t) = \Gamma e^{i\omega_m t} - \Gamma e^{-i\omega_m t} = 2i\Gamma \sin(\omega_m t) \Rightarrow \quad (8.54)$$

$$T_m(t) = 2i\Gamma \sin\left(\frac{m\pi c}{L}t\right). \quad (8.55)$$

Κι αν απαιτήσουμε οι T_m να είναι ορθοκανονικές, σε ένα χρονικό πλαίσιο από τον χρόνο 0 έως κάποιον χρόνο t_κ , δηλαδή

$$\begin{aligned} \int_0^{t_\kappa} dt T_m^*(t) T_l(t) = \delta_{ml} &\Rightarrow \int_0^{t_\kappa} dt 2i\Gamma^2 \sin\left(\frac{m\pi c t}{L}\right) \sin\left(\frac{l\pi c t}{L}\right) = \delta_{ml} \Rightarrow \\ &\Rightarrow 4\Gamma^2 \int_0^{t_\kappa} dt \sin\left(\frac{m\pi c t}{L}\right) \sin\left(\frac{l\pi c t}{L}\right) = \delta_{ml}. \end{aligned}$$

Θέτοντας $\chi = \frac{\pi c t}{L}$, οπότε $d\chi = \frac{\pi c}{L} dt$, καταλήγουμε στη σχέση

$$4\Gamma^2 \frac{L}{\pi c} \int_0^{\frac{\pi c}{L} \cdot t_\kappa} d\chi \sin(m\chi) \sin(l\chi) = \delta_{ml}. \quad (8.56)$$

Άρα, έχοντας υπ' όψιν την Εξ. 8.46, είναι βολικό να θέσουμε $\frac{\pi c}{L} \cdot t_\kappa = \pi \Rightarrow$

$$\boxed{t_\kappa = \frac{L}{c} := \tau} \quad (8.57)$$

Έτσι ορισμένο το τ είναι ο **χρόνος πτήσεως του φωτονίου διαμέσου της κοιλότητας** (time of photon flight through cavity), άρα δεν ήταν παράλογο που το θέσαμε έτσι. Συνεπώς, εν τέλει, η ορθοκανονικοποίηση είναι

$$\int_0^\tau dt T_m^*(t) T_l(t) = \delta_{ml}. \quad (8.58)$$

Τελικά έχουμε

$$4\Gamma^2 \frac{L}{\pi c} \int_0^\pi d\chi \sin(m\chi) \sin(l\chi) = \delta_{ml} \Rightarrow |\Gamma|^2 = \frac{c}{2L},$$

και, αν διαλέξουμε κάτι βολικό π.χ. $\Gamma = (-i)\sqrt{\frac{c}{2L}}$, τελικά έχουμε

$$\boxed{T_m(t) = \sqrt{\frac{2c}{L}} \sin\left(\frac{m\pi c}{L}t\right)} \quad (8.59)$$

Άρα, συνοψίζοντας, με τη βοήθεια των Εξ. 8.36, 8.48, 8.59 καταλήγουμε στην

$$E_x^m(z, t) = \frac{2\sqrt{c}}{L} \mathcal{N} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \quad (8.60)$$

Όσον αφορά τις μονάδες, θα πρέπει $\left[\frac{2\sqrt{c}}{L} \mathcal{N}\right] = \frac{V}{m} = \frac{N}{C} \Rightarrow$

$$[\mathcal{N}] = \frac{V}{\sqrt{m/s}}. \quad (8.61)$$

Για να προσδιορίσουμε το μαγνητικό πεδίο θα χρησιμοποιήσουμε την Εξ. 8.35 σε συνδυασμό με την Εξ. 8.60, οπότε προκύπτει

$$\frac{\partial B_y^m}{\partial z} = -\frac{1}{c^2} \frac{2\sqrt{c}}{L} \mathcal{N} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \frac{m\pi c}{L} \cos\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \Rightarrow \quad (8.62)$$

$$\int_0^{z'} dz \frac{\partial B_y^m}{\partial z} = -\frac{2m\pi}{\sqrt{c}L^2} \mathcal{N} \cos\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \int_0^{z'} dz \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \Rightarrow \quad (8.63)$$

$$B_y^m(z', t) - B_y^m(0, t) = -\frac{2m\pi}{\sqrt{c}L^2} \mathcal{N} \cos\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \frac{L}{m\pi} \left[-\cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right)\right]_0^{z'} \Rightarrow \quad (8.64)$$

$$B_y^m(z', t) - B_y^m(0, t) = \frac{2\mathcal{N}}{\sqrt{c}L} \cos\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \left[\cos\left(\frac{m\pi z'}{L}\right) - \cos 0\right] \quad (8.65)$$

Άρα, ορίζοντας κατάλληλα την τιμή του $B_y^m(0, t)$ και κάνοντας την αλλαγή μεταβλητής $z' \rightarrow z$, προκύπτει

$$B_y^m(z, t) = \frac{2\mathcal{N}}{\sqrt{c}L} \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \cos\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \quad (8.66)$$

Για την πυκνότητα ενέργειας ισχύει

$$U = \frac{\epsilon_0}{2} E^2 + \frac{1}{2\mu_0} B^2 = \frac{\epsilon_0}{2} [E^2 + c^2 B^2]. \quad (8.67)$$

Σημειώνουμε ότι οι μονάδες για την πυκνότητα ενέργειας είναι $[U] = \frac{J}{m^3}$. Για παράδειγμα $\left[\frac{\epsilon_0}{2} E^2\right] = \frac{F}{m} \frac{V^2}{m^2} = \frac{CV^2}{m^3} = \frac{J}{m^3}$ και $\left[\frac{B^2}{2\mu_0}\right] = \frac{T^2 A}{Tm} = \frac{TA}{m} = \frac{N}{m^2} = \frac{Nm}{m^3} = \frac{J}{m^3}$, π.χ. λόγω των γνωστών σχέσεων $B = \mu_0 H$, $F = BIl$ και $c^2 = \frac{1}{\epsilon_0 \mu_0}$. Άρα, από τις Εξ. 8.60, 8.66, 8.67 βρίσκουμε την πυκνότητα ενέργειας του m τρόπου

$$U_m = \frac{\epsilon_0}{2} \frac{4c\mathcal{N}^2}{L^2} \left[\sin^2\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \sin^2\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) + \cos^2\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \cos^2\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \right]. \quad (8.68)$$

Άρα, η ενέργεια του m τρόπου, η οποία υπολογίζεται ολοκληρώνοντας την πυκνότητα ενέργειας του m τρόπου στην κοιλότητα όγκου $V = LS$, είναι

$$E_m = \int_{V=LS} d^3r U_m. \quad (8.69)$$

Συνεπώς,

$$E_m = \frac{2\epsilon_0 c \mathcal{N}^2 S}{L^2} \left[\sin^2\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \int_0^L dz \sin^2\left(\frac{m\pi z}{L}\right) + \cos^2\left(\frac{m\pi ct}{L}\right) \int_0^L dz \cos^2\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \right].$$

Θέτουμε $\psi = \frac{\pi z}{L} \Rightarrow d\psi = \frac{\pi}{L} dz$, άρα με τη βοήθεια των Εξ. 8.46-8.47, τα ολοκληρώματα στο z γίνονται $\frac{L}{\pi} \int_0^\pi d\psi \sin^2(m\psi) = \frac{L}{\pi} \frac{\pi}{2} = \frac{L}{2}$ και $\frac{L}{\pi} \int_0^\pi d\psi \cos^2(m\psi) = \frac{L}{\pi} \frac{\pi}{2} = \frac{L}{2}$. Αντικαθιστούμε στην παραπάνω εξίσωση και τελικά, έχοντας ακολουθήσει αυτήν την κλασική προσέγγιση, έχουμε

$$E_m = \frac{\epsilon_0 c \mathcal{N}^2 S}{L} \left[\sin^2 \left(\frac{m\pi ct}{L} \right) + \cos^2 \left(\frac{m\pi ct}{L} \right) \right] = \frac{\epsilon_0 c \mathcal{N}^2 S}{L} \quad (8.70)$$

Ας δούμε τώρα λίγο αλλιώς την E_m .

$$E_m = \frac{\epsilon_0 c \mathcal{N}^2 S}{L^3} \left[L^2 \sin^2 \left(\frac{m\pi ct}{L} \right) + L^2 \cos^2 \left(\frac{m\pi ct}{L} \right) \right], \quad (8.71)$$

ορίζοντας «γενικευμένη θέση και ταχύτητα». Καλούμε λοιπόν «γενικευμένη θέση»

$$q_m(t) := L \sin \left(\frac{m\pi ct}{L} \right) \quad (8.72)$$

και «γενικευμένη ταχύτητα»

$$\dot{q}_m(t) := m\pi c \cos \left(\frac{m\pi ct}{L} \right) \quad (8.73)$$

ούτως ώστε $[q_m(t)] = m$ και $[\dot{q}_m(t)] = m/s$. Τότε η Εξ. 8.71 γράφεται

$$E_m = \frac{\epsilon_0 c \mathcal{N}^2 S}{L^3} \left\{ [q_m(t)]^2 + \frac{L^2}{m^2 \pi^2 c^2} [\dot{q}_m(t)]^2 \right\}. \quad (8.74)$$

Θα μπορούσαμε εδώ να θεωρήσουμε μια αναλογία της Εξ. 8.74 με Απλό Αρμονικό Ταλαντωτή (ΑΑΤ), του οποίου η ενέργεια θα ήταν

$$E = \frac{K}{2} x^2 + \frac{M}{2} v^2 = \frac{K}{2} \left[x^2 + \frac{M}{K} v^2 \right]. \quad (8.75)$$

Επομένως,

$$\frac{\epsilon_0 c \mathcal{N}^2 S}{L^3} = \frac{K}{2}, \quad (8.76)$$

$$\frac{L^2}{m^2 \pi^2 c^2} = \frac{M}{K}. \quad (8.77)$$

Δηλαδή προκύπτει η «σταθερά ελατηρίου»

$$K = \frac{2\epsilon_0 c \mathcal{N}^2 S}{L^3}, \quad (8.78)$$

και η «μάζα» (η οποία, σημειωτέον, εξαρτάται από το m , είναι δηλαδή διαφορετική για κάθε τρόπο του ΗΜ πεδίου m)

$$M_m = \frac{2\epsilon_0 \mathcal{N}^2 S}{c L m^2 \pi^2}. \quad (8.79)$$

Μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε ότι η M_m έχει διαστάσεις μάζας (θα χρειαστεί και η Εξ. 8.61) και πως ισχύει $K = M_m \omega_m^2$. Άρα, κλασικά, υπάρχει μία τυπική ομοιότητα με ΑΑΤ με κυκλική συχνότητα ω_m (Εξ. 8.50) και «μάζα» M_m (Εξ. 8.79), δηλαδή η Εξ. 8.71 ή 8.74 γράφεται

$$E_m = \frac{M_m \omega_m^2}{2} q_m^2 + \frac{M_m}{2} \dot{q}_m^2 \quad (8.80)$$

Μπορούμε, επομένως, να πούμε ότι το κβαντικό αντίστοιχο, για έναν τρόπο ΗΜ πεδίου m , δηλαδή η Χαμιλτονιανή του ΗΜ πεδίου για τον τρόπο m , θα είναι

$$\hat{H}_{\text{HM}, m} = \frac{M_m \omega_m^2}{2} \hat{q}_m^2 + \frac{M_m}{2} \hat{p}_m^2 \quad (8.81)$$

με ιδιοτιμές ενέργειας

$$E_{m, n_m} = \hbar \omega_m \left(n_m + \frac{1}{2} \right) \quad (8.82)$$

όπου ο δείκτης $m \in \mathbb{N}^*$ αφορά τον τρόπο του ΗΜ πεδίου και ο δείκτης $n_m \in \mathbb{N}$ αφορά τον αριθμό των φωτονίων στον τρόπο m . Συνεπώς, η Χαμιλτονιανή για όλους τους τρόπους του ΗΜ πεδίου θα είναι

$$\hat{H}_{\text{HM}} = \sum_m \hat{H}_{\text{HM}, m} \quad (8.83)$$

Κατόπιν, σημειώνουμε ότι από τις Εξ. 8.60 και 8.72 συνεπάγεται ότι

$$E_x^m(z, t) = \frac{2\sqrt{c}}{L^2} \mathcal{N} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) q_m(t), \quad (8.84)$$

οπότε το κβαντικό ανάλογο είναι

$$\hat{E}_x^m(z, t) = \frac{2\sqrt{c}}{L^2} \mathcal{N} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \hat{q}_m(t). \quad (8.85)$$

Επίσης, από τις Εξ. 8.66 και 8.73 συνεπάγεται ότι

$$B_y^m(z, t) = \frac{2\mathcal{N}}{L\sqrt{c}} \frac{1}{m\pi c} \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \dot{q}_m(t), \quad (8.86)$$

οπότε το κβαντικό ανάλογο είναι

$$\hat{B}_y^m(z, t) = \frac{2\mathcal{N}}{L\sqrt{c}} \frac{1}{m\pi c} \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \hat{\dot{q}}_m(t). \quad (8.87)$$

Από τις Έξ. 8.84, 8.79 και 8.50 προκύπτει

$$E_x^m(z, t) = \left(\frac{2M_m \omega_m^2}{\epsilon_0 V} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) q_m(t) \quad (8.88)$$

οπότε το κβαντικό ανάλογο είναι

$$\hat{E}_x^m(z, t) = \left(\frac{2M_m \omega_m^2}{\epsilon_0 V} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \hat{q}_m(t) \quad (8.89)$$

Από τις Έξ. 8.86, 8.79 και 8.50 προκύπτει

$$B_y^m(z, t) = \frac{1}{c} \left(\frac{2M_m}{\epsilon_0 V} \right)^{1/2} \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \dot{q}_m(t) \quad (8.90)$$

οπότε το κβαντικό ανάλογο είναι

$$\hat{B}_y^m(z, t) = \frac{1}{c} \left(\frac{2M_m}{\epsilon_0 V} \right)^{1/2} \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) \hat{\dot{q}}_m(t) \quad (8.91)$$

Τέλος, από τις παραπάνω εξισώσεις, προκύπτει, όπως αναμενόταν, $\begin{bmatrix} E_x \\ B_y \end{bmatrix} = [c]$.

8.4 Χαμιλτονιανή ΗΜ πεδίου με τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβιβάσεως και αναβιβάσεως) φωτονίων

Ας μιλήσουμε τώρα για τελεστές καταστροφής και δημιουργίας φωτονίων (photon creation and annihilation operators). Είναι τώρα εύκολο να κβαντωθεί η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το ΗΜ πεδίο, αρκεί να εφαρμοστεί η αντιστοιχία τελεστών

$$\hat{q}_m = q_m, \quad (8.92)$$

$$\hat{p}_m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_m}. \quad (8.93)$$

Εισάγουμε τους τελεστές:

$$\hat{a}_m = \frac{1}{\sqrt{2M_m\hbar\omega_m}}(M_m\omega_m\hat{q}_m + i\hat{p}_m) \quad \ll\text{καταστροφής}\gg \quad (8.94)$$

$$\hat{a}_m^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2M_m\hbar\omega_m}}(M_m\omega_m\hat{q}_m - i\hat{p}_m) \quad \ll\text{δημιουργίας}\gg \quad (8.95)$$

Ισχύει η ιδιότητα

$$\underbrace{[\hat{q}_m, \hat{p}_m]}_{\text{μεταθέτης}} = \hat{q}_m\hat{p}_m - \hat{p}_m\hat{q}_m = i\hbar. \quad (8.96)$$

Άρα,

$$\underbrace{[\hat{a}_m, \hat{a}_m^\dagger]}_{\text{μεταθέτης}} = \hat{a}_m\hat{a}_m^\dagger - \hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m = 1. \quad (8.97)$$

Έτσι, οι τελεστές \hat{q}_m, \hat{p}_m μπορούν τώρα να γραφούν

$$\hat{q}_m = \left(\frac{\hbar}{2M_m\omega_m}\right)^{1/2} (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m), \quad (8.98)$$

$$\hat{p}_m = i\left(\frac{M_m\hbar\omega_m}{2}\right)^{1/2} (\hat{a}_m^\dagger - \hat{a}_m). \quad (8.99)$$

Συνεπώς, η Χαμιλτονιανή του ΗΜ πεδίου για τον τρόπο m είναι

$$\hat{H}_{\text{HM}, m} = \hbar\omega_m \left(\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \frac{1}{2} \right) \quad (8.100)$$

Ας συμβολίσουμε με $|n_m\rangle$ την κατάσταση του ΗΜ πεδίου με n_m αριθμό φωτονίων στον ΗΜ τρόπο m . Λέμε ότι είναι μια «κατάσταση φωτονικών αριθμών». Τα $|n_m\rangle$ αποτελούν ένα πλήρες σύστημα, δηλαδή ισχύει $\langle n_m | l_m \rangle = \delta_{nl}$.

Οι τελεστές \hat{a}_m^\dagger και \hat{a}_m έχουν τις ιδιότητες

$$\hat{a}_m^\dagger |n_m\rangle = \sqrt{n_m + 1} |n_m + 1\rangle, \quad (8.101)$$

$$\hat{a}_m |n_m\rangle = \sqrt{n_m} |n_m - 1\rangle, \quad (8.102)$$

$$\hat{a}_m |0\rangle = 0. \quad (8.103)$$

Από τις Εξ. 8.101 και 8.102 προκύπτει

$$\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m |n_m\rangle = n_m |n_m\rangle, \quad (8.104)$$

δηλαδή ο τελεστής $\hat{N}_m = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m$ μετρά τον αριθμό των φωτονίων του ΗΜ τρόπου m , οπότε μπορεί να αποκληθεί τελεστής του αριθμού των φωτονίων στον ΗΜ τρόπο m . Ακόμα, επαγωγικά προκύπτει

$$|n_m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_m!}} (\hat{a}_m^\dagger)^{n_m} |0\rangle. \quad (8.105)$$

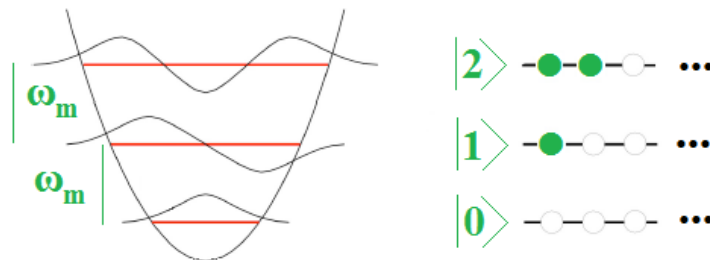
Λόγω των Εξ. 8.100 και 8.104 προκύπτει

$$\hat{H}_{\text{HM}, m} |n_m\rangle = \hbar\omega_m \left(n_m + \frac{1}{2} \right) |n_m\rangle, \quad (8.106)$$

δηλαδή η Χαμιλτονιανή $\hat{H}_{\text{HM}, m}$ δίνει ιδιοτιμές ενέργειας

$$E_{m, n_m} = \hbar\omega_m \left(n_m + \frac{1}{2} \right) \quad (8.107)$$

Η θεμελιώδης κατάσταση του ΑΑΤ, $|0\rangle$, με ιδιοενέργεια $\frac{1}{2}\hbar\omega_m$ αντιστοιχεί στο κενό, δηλαδή χωρίς σωματίο, η 1η διεγερμένη κατάσταση του ΑΑΤ, $|1\rangle$, με ιδιοενέργεια $\frac{3}{2}\hbar\omega_m$ αντιστοιχεί σε ένα σωματίο, η 2η διεγερμένη κατάσταση του ΑΑΤ, $|2\rangle$, με ιδιοενέργεια $\frac{5}{2}\hbar\omega_m$ αντιστοιχεί σε δύο σωματία κ.ο.κ. Αυτά τα σωματία, εν προκειμένω, τα λέμε φωτόνια. Δημιουργούνται και καταστρέφονται με τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής, ξεκινώντας από ένα επίπεδο αναφοράς που εδώ είναι το κενό (βλ. Εικόνα 8.5). Υπακούουν στις μποζονικές σχέσεις μεταθέσεως (δείτε Ενότητα 9.3). Αυτή η αναπαράσταση είναι γνωστή και ως δεύτερη κβάντωση (second quantization).



Εικόνα 8.5: Σωματία (εδώ φωτόνια, απεικονίζονται με πράσινες βούλες) δημιουργούνται και καταστρέφονται μέσω των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής. Υπακούουν στις μποζονικές σχέσεις μεταθέσεως (δείτε Ενότητα 9.3). Αυτή η αναπαράσταση είναι γνωστή και ως δεύτερη κβάντωση (second quantization). Ο αριθμός των φωτονίων είναι ίσος με τον αριθμό των κόμβων της ιδιοσυναρτήσεως.

Η Χαμιλτονιανή του ΗΜ πεδίου για τον τρόπο m είναι

$$\hat{H}_{\text{HM}, m} = \hbar\omega_m \left(\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega_m \left(\hat{N}_m + \frac{1}{2} \right). \quad (8.108)$$

Αγνοώντας τον όρο $\frac{\hbar\omega_m}{2}$, μπορεί να γραφτεί

$$\hat{H}_{\text{HM}, m} = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m = \hbar\omega_m \hat{N}_m. \quad (8.109)$$

Μπορούμε να έχουμε οσαδήποτε φωτόνια στην ενεργειακή κατάσταση $\hbar\omega_m$, διότι είναι μποζόνια. Ο \hat{a}_m^\dagger είναι τελεστής αναβίβασης (raising operator), διότι αναβιβάζει την ενέργεια, δημιουργώντας φωτόνιο με ενέργεια $\hbar\omega_m$, εξ ου και η ονομασία τελεστής δημιουργίας (creation operator). Ο \hat{a}_m είναι τελεστής καταβίβασης (lowering operator), διότι καταβιβάζει την ενέργεια, καταστρέφοντας φωτόνιο με ενέργεια $\hbar\omega_m$, εξ ου και η ονομασία τελεστής καταστροφής (annihilation operator).

Τέλος, ας σημειώσουμε ότι από τις Εξ. 8.89 και 8.98 προκύπτει

$$\hat{E}_x^m(z, t) = \left(\frac{\hbar\omega_m}{\epsilon_0 V} \right)^{1/2} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m) \quad (8.110)$$

ενώ από τις Εξ. 8.91 και 8.99 προκύπτει

$$\hat{B}_y^m(z, t) = \frac{i}{c} \left(\frac{\hbar\omega_m}{\epsilon_0 V} \right)^{1/2} \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) (\hat{a}_m^\dagger - \hat{a}_m) \quad (8.111)$$

8.5 Χαμιλτονιανή δισταθμικού συστήματος με σπίνορες και τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβίβασης και αναβίβασης) ηλεκτρονίων

Ας περιγράψουμε τη Χαμιλτονιανή δισταθμικού συστήματος με σπίνορες και τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβίβασης και αναβίβασης) ηλεκτρονίων. Δηλαδή, ας αναφερθούμε εις την αναβίβαση και την καταβίβαση ενός ηλεκτρονίου μεταξύ των ενεργειακών σταθμών ενός δισταθμικού συστήματος, π.χ. ενός ατόμου, με τη βοήθεια σπινόρων (spinors). Σπίνορας είναι ένα διάνυσμα - στήλη με δύο συνιστώσες. Ας αρχίσουμε με ορισμούς (π.χ. [1]):

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle, \quad |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |2\rangle. \quad (8.112)$$

Το πρώτο παριστά το άδειο δισταθμικό σύστημα. Το δεύτερο δηλώνει το δισταθμικό σύστημα με το ηλεκτρόνιο στην κάτω στάθμη, όπου έχει ενέργεια E_1 . Το τρίτο δηλώνει το δισταθμικό σύστημα με το ηλεκτρόνιο στην άνω στάθμη, όπου έχει ενέργεια E_2 . Ας ορίσουμε τώρα τους τελεστές

$$\hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (8.113)$$

για τους οποίους μάλιστα ισχύει

$$\hat{S}_+^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \hat{S}_-. \quad (8.114)$$

Ας δούμε ποιο είναι το αποτέλεσμα της δράσεώς τους στους σπίνορες που ορίσαμε μόλις προ ολίγου.

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ |0\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle && \text{καμία δράση} \\ \hat{S}_+ |\downarrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle && \text{το ανεβάζει} \\ \hat{S}_+ |\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle && \text{το πετά έξω} \end{aligned} \quad (8.115)$$

$$\begin{aligned}
\hat{S}_- |0\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle && \text{καμία δράση} \\
\hat{S}_- |\downarrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle && \text{το πετά έξω} \\
\hat{S}_- |\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle && \text{το κατεβάζει}
\end{aligned} \tag{8.116}$$

Έτσι, ο \hat{S}_+ ονομάζεται τελεστής αναβίβασης (raising operator), ενώ ο \hat{S}_- ονομάζεται τελεστής καταβίβασης (lowering operator) του ηλεκτρονίου. Ας δούμε μερικές ακόμα ιδιότητες. Ισχύει ότι

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{8.117}$$

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{8.118}$$

Συνεπώς,

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{I}}, \tag{8.119}$$

ο οποίος είναι ο διαγώνιος μοναδιαίος πίνακας. Μπορούμε να το γράψουμε και στη μορφή

$$\{\hat{S}_+, \hat{S}_-\} = \hat{\mathbf{I}}. \tag{8.120}$$

$\{A, B\}$ ή $[A, B]_+$ είναι η αγκύλη Poisson ή αντιμεταθέτης (anticommutator) που ορίζεται ως

$$\{A, B\} = AB + BA, \tag{8.121}$$

ενώ $[A, B]$ ή $[A, B]_-$ είναι ο μεταθέτης (commutator) που ορίζεται ως

$$[A, B] = AB - BA. \tag{8.122}$$

Όταν $\{A, B\} = 0 \Rightarrow AB + BA = 0 \Rightarrow AB = -BA$, δηλαδή οι ποσότητες A, B αντιμετατίθενται, ενώ όταν $[A, B] = 0 \Rightarrow AB - BA = 0 \Rightarrow AB = BA$, δηλαδή οι ποσότητες μετατίθενται, πράγμα που δείχνει την προέλευση των ονομασιών. Όπως θα δούμε παρακάτω, η αγκύλη Poisson ή αντιμεταθέτης χρησιμοποιείται στις σχέσεις αντιμεταθέσεως, τις οποίες ακολουθούν τα ηλεκτρόνια, τα οποία είναι φερμιόνια, ενώ ο μεταθέτης χρησιμοποιείται στις σχέσεις μεταθέσεως, τις οποίες ακολουθούν τα φωτόνια, τα οποία είναι μποζόνια. Συχνά, στα ελληνικά συγγράμματα της δευτεροβάθμιας εκπαίδευσης, πολύ κακώς, εδώ και δεκαετίες ονομάζεται «αντιμεταθετική» η μεταθετική (commutative) ιδιότητα, χαθήκαμε δηλαδή στη μετάφραση...

Ας θυμηθούμε τώρα τους πίνακες Pauli $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ και ας δούμε τη σχέση τους με τους τελεστές αναβίβασης και καταβίβασης ηλεκτρονίων \hat{S}_+ και \hat{S}_- , αντιστοίχως.

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{8.123}$$

Μπορούμε να αποδείξουμε ότι ισχύει η ιδιότητα

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z, \tag{8.124}$$

καθώς και οι κυκλικές εναλλαγές της. Επίσης,

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{I}} \tag{8.125}$$

και

$$\begin{aligned}\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} &= \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \hat{0}, \\ \{\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\} &= \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z + \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = \hat{0}, \\ \{\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x\} &= \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = \hat{0},\end{aligned}\quad (8.126)$$

δηλαδή οι πίνακες Pauli αντιμετατίθενται. Επί παραδείγματι,

$$\begin{aligned}\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} &= \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y + \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{0}.\end{aligned}$$

Ακόμα, μπορούμε εύκολα να αποδείξουμε ότι

$$\begin{aligned}\hat{S}_+ + \hat{S}_- &= \hat{\sigma}_x, \\ \hat{S}_+ - \hat{S}_- &= i\hat{\sigma}_y\end{aligned}$$

και, με χρήση των Εξ. 8.117 και 8.118 ότι

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- - \hat{S}_- \hat{S}_+ = [\hat{S}_+, \hat{S}_-] = \hat{\sigma}_z. \quad (8.127)$$

Η Χαμιλτονιανή του Δισταθμικού Συστήματος $\hat{H}_{\Delta\Sigma}$ είναι η

$$E_2 \hat{S}_+ \hat{S}_- + E_1 \hat{S}_- \hat{S}_+ = E_2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + E_1 \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_2 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix}, \quad (8.128)$$

αφού

$$\begin{pmatrix} E_2 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_2 \\ 0 \end{pmatrix} = E_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (8.129)$$

$$\begin{pmatrix} E_2 & 0 \\ 0 & E_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ E_1 \end{pmatrix} = E_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (8.130)$$

Άρα, συνοπτικά, δείξαμε ότι

$$\boxed{\hat{H}_{\Delta\Sigma} = E_2 \hat{S}_+ \hat{S}_- + E_1 \hat{S}_- \hat{S}_+} \quad (8.131)$$

Αν τώρα θέσουμε $E_1 = 0 \Rightarrow E_2 = \hbar\Omega$ (θυμηθείτε την Εξ. 5.49 και την Εξ. 5.15), οπότε

$$\boxed{\hat{H}_{\Delta\Sigma} = \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_-} \quad (8.132)$$

Ο τελεστής $\hat{S}_+ \hat{S}_-$ μετρά τον αριθμό των ηλεκτρονίων στην άνω στάθμη, αφού

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle \Rightarrow \hat{S}_+ \hat{S}_- |1\rangle = 0 |1\rangle, \quad (8.133)$$

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- |2\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |2\rangle \Rightarrow \hat{S}_+ \hat{S}_- |2\rangle = 1 |2\rangle. \quad (8.134)$$

Ο τελεστής $\hat{S}_- \hat{S}_+$ μετρά τον αριθμό των ηλεκτρονίων στην κάτω στάθμη, αφού

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |1\rangle \Rightarrow \hat{S}_- \hat{S}_+ |1\rangle = 1 |1\rangle, \quad (8.135)$$

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle \Rightarrow \hat{S}_- \hat{S}_+ |2\rangle = 0 |2\rangle. \quad (8.136)$$

Συνοπτικά, για τους τελεστές \hat{S}_+ και \hat{S}_- μπορούμε να αποδείξουμε ότι $(\hat{S}_+)^{\dagger} = \hat{S}_-$ αλλά και ότι

$$\begin{aligned} \{\hat{S}_+, \hat{S}_+^{\dagger}\} &= \{\hat{S}_+, \hat{S}_-\} = \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+ = \hat{\mathbf{I}}, \\ \{\hat{S}_-, \hat{S}_-^{\dagger}\} &= \{\hat{S}_-, \hat{S}_+\} = \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_+ \hat{S}_- = \hat{\mathbf{I}}, \\ \{\hat{S}_+, \hat{S}_+\} &= \{\hat{S}_-^{\dagger}, \hat{S}_-^{\dagger}\} = \hat{S}_+ \hat{S}_+ + \hat{S}_+ \hat{S}_+ = \hat{\mathbf{0}}, \\ \{\hat{S}_-, \hat{S}_-\} &= \{\hat{S}_+^{\dagger}, \hat{S}_+^{\dagger}\} = \hat{S}_- \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_- = \hat{\mathbf{0}}, \end{aligned} \quad (8.137)$$

όπου $\hat{\mathbf{I}}$ είναι ο διαγώνιος μοναδιαίος πίνακας 2×2 και $\hat{\mathbf{0}}$ είναι ο μηδενικός πίνακας 2×2 . Οι Εξ. 8.137 δείχνουν ότι οι τελεστές \hat{S}_+ και \hat{S}_- υπακούουν στις σχέσεις αντιμεταθέσεως φερμιονίων που αναφέρουμε στην Ενότητα 9.3. Ο \hat{S}_+ είναι τελεστής αναβιβάσεως (raising operator), διότι αναβιβάζει την ενέργεια δημιουργώντας ηλεκτρόνιο με ενέργεια $\hbar\Omega$, εξ ου και η ονομασία τελεστής δημιουργίας (creation operator). Ο \hat{S}_- είναι τελεστής καταβιβάσεως (lowering operator), διότι καταβιβάζει την ενέργεια, καταστρέφοντας ηλεκτρόνιο με ενέργεια $\hbar\Omega$, εξ ου και η ονομασία τελεστής καταστροφής (annihilation operator). Μπορούμε να έχουμε μόνο ένα ηλεκτρόνιο με ενέργεια $\hbar\Omega$, διότι τα ηλεκτρόνια είναι φερμιόνια.

Να σημειώσουμε, επίσης, ότι, όπως διαφαίνεται από την Εξ. 8.112, στη βιβλιογραφία μπορούν να βρεθούν εναλλακτικοί τρόποι συμβολισμού των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής ηλεκτρονίων (φερμιονίων), όπως οι παρακάτω

$$\begin{aligned} \hat{S}_- &= |\downarrow\rangle \langle \uparrow| = |1\rangle \langle 2| = \hat{a}_{12} = \hat{c}_2, \\ \hat{S}_+ &= |\uparrow\rangle \langle \downarrow| = |2\rangle \langle 1| = \hat{a}_{12}^{\dagger} = \hat{c}_2^{\dagger}, \end{aligned}$$

οι οποίοι είναι εντελώς ισοδύναμοι. Συνεπώς, διάφορες ισοδύναμες γραφές της Χαμιλτονιανής του δισταθμικού συστήματος (Εξ. 8.132) είναι οι εξής:

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- = \hbar\Omega |\uparrow\rangle \langle \uparrow| = \hbar\Omega |2\rangle \langle 2| = \hbar\Omega \hat{a}_{12}^{\dagger} \hat{a}_{12} = \hbar\Omega \hat{c}_2^{\dagger} \hat{c}_2.$$

8.6 Χαμιλτονιανή τρισταθμικού και πολυσταθμικού συστήματος με σπίνορες και τελεστές καταστροφής και δημιουργίας (ή αλλιώς καταβιβάσεως και αναβιβάσεως) ηλεκτρονίων

Κατ' αντιστοιχία με τα παραπάνω, για τρισταθμικό σύστημα με ιδιοενέργειες $E_1 = 0 < E_2 < E_3$ μπορούμε να ορίσουμε τα ανύσματα-στήλες

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (8.138)$$

Το πρώτο παριστά το άδειο τρισταθμικό σύστημα και τα υπόλοιπα δηλώνουν τρισταθμικό σύστημα με το ηλεκτρόνιο στη στάθμη n που έχει ενέργεια E_n . Για να περιγράψουμε τις στοιχειώδεις διεγέρσεις του από τη

θεμελιώδη κατάσταση, μπορούμε να ορίσουμε τους τελεστές καταστροφής και δημιουργίας

$$\begin{aligned}\hat{a}_{12} &= |1\rangle\langle 2| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{a}_{21}^\dagger, \\ \hat{a}_{21} &= |2\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{a}_{12}^\dagger, \\ \hat{a}_{13} &= |1\rangle\langle 3| = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{a}_{31}^\dagger, \\ \hat{a}_{31} &= |3\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \hat{a}_{13}^\dagger,\end{aligned}$$

με δράση

$$\begin{aligned}\hat{a}_{12} |1\rangle &= \hat{a}_{21}^\dagger |1\rangle = |1\rangle\langle 2|1\rangle = |0\rangle, \\ \hat{a}_{21} |1\rangle &= \hat{a}_{12}^\dagger |1\rangle = |2\rangle\langle 1|1\rangle = |2\rangle, \\ \hat{a}_{13} |1\rangle &= \hat{a}_{31}^\dagger |1\rangle = |1\rangle\langle 3|1\rangle = |0\rangle, \\ \hat{a}_{31} |1\rangle &= \hat{a}_{13}^\dagger |1\rangle = |3\rangle\langle 1|1\rangle = |3\rangle,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_{12} |2\rangle &= \hat{a}_{21}^\dagger |2\rangle = |1\rangle\langle 2|2\rangle = |1\rangle, \\ \hat{a}_{21} |2\rangle &= \hat{a}_{12}^\dagger |2\rangle = |2\rangle\langle 1|2\rangle = |0\rangle, \\ \hat{a}_{13} |2\rangle &= \hat{a}_{31}^\dagger |2\rangle = |1\rangle\langle 3|2\rangle = |0\rangle, \\ \hat{a}_{31} |2\rangle &= \hat{a}_{13}^\dagger |2\rangle = |3\rangle\langle 1|2\rangle = |0\rangle,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{a}_{12} |3\rangle &= \hat{a}_{21}^\dagger |3\rangle = |1\rangle\langle 2|3\rangle = |0\rangle, \\ \hat{a}_{21} |3\rangle &= \hat{a}_{12}^\dagger |3\rangle = |2\rangle\langle 1|3\rangle = |0\rangle, \\ \hat{a}_{13} |3\rangle &= \hat{a}_{31}^\dagger |3\rangle = |1\rangle\langle 3|3\rangle = |1\rangle, \\ \hat{a}_{31} |3\rangle &= \hat{a}_{13}^\dagger |3\rangle = |3\rangle\langle 1|3\rangle = |0\rangle.\end{aligned}$$

Με τη βοήθεια των τελεστών αυτών, η Χαμιλτονιανή που περιγράφει τις θεμελιώδεις διεγέρσεις τρισταθμικού συστήματος από τη θεμελιώδη κατάσταση $|1\rangle$ (με $E_1 = 0$) μπορεί να γραφεί στις ισοδύναμες μορφές

$$\hat{H}_{\text{TS}} = E_2 \hat{a}_{12}^\dagger \hat{a}_{12} + E_3 \hat{a}_{13}^\dagger \hat{a}_{13} = E_2 |2\rangle\langle 2| + E_3 |3\rangle\langle 3| = E_2 \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 + E_3 \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_3. \quad (8.139)$$

Εντελώς ανάλογα, για πολυσταθμικό σύστημα με N στάθμες και ιδιοενέργειες $E_1 = 0 < E_2 < \dots < E_N$ μπορούμε να ορίσουμε $N + 1$ ανύσματα-στήλες, 1 για το κενό και N που να παριστούν την κατάσταση $|n\rangle$ για το ηλεκτρόνιο στη στάθμη n , με ενέργεια E_n . Με τη βοήθεια των τελεστών αυτών, η Χαμιλτονιανή που περιγράφει τις θεμελιώδεις διεγέρσεις πολυσταθμικού συστήματος από τη θεμελιώδη κατάσταση $|1\rangle$ (με $E_1 = 0$) μπορεί να γραφεί στις ισοδύναμες μορφές

$$\hat{H}_{\text{ΠΣ}} = \sum_{n=2}^N E_n \hat{a}_{1n}^\dagger \hat{a}_{1n} = \sum_{n=2}^N E_n |n\rangle\langle n| = \sum_{n=2}^N E_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n. \quad (8.140)$$

8.7 Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασεως δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου

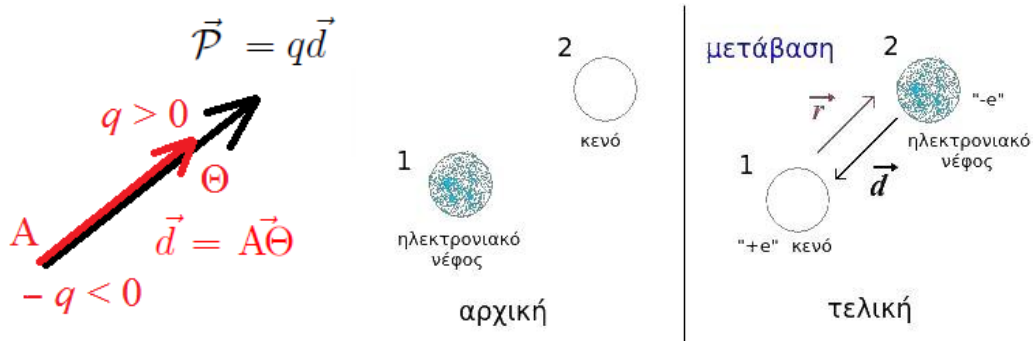
Έστω δύο αντίθετα ηλεκτρικά φορτία, $q > 0$ και $-q < 0$, στα σημεία Θ και A , αντιστοίχως. Αν $\vec{d} = \overrightarrow{A\Theta}$ είναι το διάνυσμα θέσεως του θετικού φορτίου ως προς το αρνητικό, τότε η **ηλεκτρική διπολική ροπή** (electric dipole moment) ορίζεται ως

$$\vec{\mathcal{P}} = q\vec{d}. \quad (8.141)$$

Επί παραδείγματι, για το άτομο του υδρογόνου, αν το Π παριστάνει τον πυρήνα και το H παριστάνει το ηλεκτρόνιο και ως συνήθως ορίσουμε $\vec{r} = \overrightarrow{\Pi H}$, τότε $\vec{\mathcal{P}} = q\vec{d} = e(-\vec{r}) \Rightarrow$

$$\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r}. \quad (8.142)$$

Αυτό αποδίδεται στο άνω τμήμα της Εικόνας 8.6.



Εικόνα 8.6: [Αριστερά] Ηλεκτρική διπολική ροπή (electric dipole moment). [Δεξιά] (Ηλεκτρική) διπολική ροπή μεταβάσεως [transition (electric) dipole moment].

Η **δυναμική ενέργεια** (potential energy) $U_{\mathcal{E}}$ του ηλεκτρικού διπόλου εντός ηλεκτρικού πεδίου $\vec{\mathcal{E}}$ είναι

$$U_{\mathcal{E}} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}}. \quad (8.143)$$

Ανάλογος με τον παραπάνω ορισμό μπορεί να δοθεί και για την περίπτωση της μεταβάσεως ενός τμήματος του ηλεκτρονιακού νέφους από μία αρχική σε μια τελική περιοχή. Έτσι ορίζεται η **(ηλεκτρική) διπολική ροπή μεταβάσεως** [transition (electric) dipole moment].¹ Αυτό αποδίδεται στο κάτω τμήμα της Εικόνας 8.6. Αν το φορτίο που μεταφέρεται είναι $-e$, πάλι $\vec{p} = q\vec{d} = e(-\vec{r}) \Rightarrow \vec{p} = -e\vec{r}$. Δηλαδή, εννοείται ότι για την περιοχή 2 τελική μείον αρχική κατάσταση ισοδυναμεί με μετάβαση φορτίου $-e$, ενώ για την περιοχή 1 τελική μείον αρχική κατάσταση ισοδυναμεί με μετάβαση φορτίου $+e$.

Ο **τελεστής (ηλεκτρικής) διπολικής ροπής μεταβάσεως** [transition (electric) dipole moment operator] σημειώνεται εναλλακτικά με \hat{d} ή \hat{p} . Στη βάση των ιδιοκαταστάσεων της ενέργειας του αδιατάρακτου ατόμου ή συστήματος ορίζεται ως

$$\hat{d} = \hat{p} := \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \vec{d}_{ij} |\Phi_i\rangle \langle \Phi_j|, \quad (8.144)$$

με τους επίσης εναλλακτικούς συμβολισμούς

$$\vec{d}_{ij} = \vec{p}_{ij} := -e \langle \Phi_i | \vec{r} | \Phi_j \rangle \quad (8.145)$$

¹Η λέξη «ηλεκτρική» είναι εντός παρενθέσεως, επειδή, συνήθως, επειδή εννοείται, παραλείπεται.

για το στοιχείο πίνακα της (ηλεκτρικής) διπολικής ροπής μεταβάσεως μεταξύ των καταστάσεων $|\Phi_i\rangle$ και $|\Phi_j\rangle$. Υπενθυμίζεται ότι ο τελεστής θέσεως (position operator) \hat{r} είναι τέτοιος ώστε

$$\hat{r}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle. \quad (8.146)$$

Υπενθυμίζεται ακόμα ότι

$$\begin{aligned} \langle \Phi_i | \hat{r} | \Phi_j \rangle &= \sum_{|\vec{r}'\rangle, |\vec{r}''\rangle} \langle \Phi_i | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{r} | \vec{r}'' \rangle \langle \vec{r}'' | \Phi_j \rangle = \sum_{|\vec{r}'\rangle} \langle \Phi_i | \vec{r}' \rangle \vec{r}' \langle \vec{r}' | \Phi_j \rangle \\ &= \sum_{|\vec{r}\rangle} \langle \Phi_i | \vec{r} \rangle \vec{r} \langle \vec{r} | \Phi_j \rangle = \int dV \Phi_i(\vec{r})^* \vec{r} \Phi_j(\vec{r}), \end{aligned}$$

διότι

$$\langle \vec{r}' | \hat{r} | \vec{r}'' \rangle = \vec{r}'' \langle \vec{r}' | \vec{r}'' \rangle = \vec{r}'' \delta_{\vec{r}', \vec{r}''}. \quad (8.147)$$

Άρα,

$$\vec{d}_{11} = -e \langle \Phi_1 | \hat{r} | \Phi_1 \rangle = -e \int dV \underbrace{\Phi_1(\vec{r})^* \vec{r} \Phi_1(\vec{r})}_{\text{περιττή}} = 0, \quad \star \quad (8.148)$$

$$\vec{d}_{12} = -e \langle \Phi_1 | \hat{r} | \Phi_2 \rangle = -e \int dV \Phi_1(\vec{r})^* \vec{r} \Phi_2(\vec{r}) \neq 0, \quad (8.149)$$

$$\vec{d}_{21} = -e \langle \Phi_2 | \hat{r} | \Phi_1 \rangle = -e \int dV \Phi_2(\vec{r})^* \vec{r} \Phi_1(\vec{r}) \neq 0, \quad (8.150)$$

$$\vec{d}_{22} = -e \langle \Phi_2 | \hat{r} | \Phi_2 \rangle = -e \int dV \underbrace{\Phi_2(\vec{r})^* \vec{r} \Phi_2(\vec{r})}_{\text{περιττή}} = 0. \quad \star \quad (8.151)$$

Δηλαδή, ενώ τα διαγώνια στοιχεία μηδενίζονται, τα \vec{d}_{12} και \vec{d}_{21} δεν είναι («εκ ταυτότητος») μηδέν. Ας δούμε τώρα ποιος είναι ο \hat{p} σε δισταθμικό σύστημα.

$$\begin{aligned} \hat{p} &= \vec{d}_{11} |\Phi_1\rangle \langle \Phi_1| + \vec{d}_{12} |\Phi_1\rangle \langle \Phi_2| + \vec{d}_{21} |\Phi_2\rangle \langle \Phi_1| + \vec{d}_{22} |\Phi_2\rangle \langle \Phi_2| \\ &= \vec{d}_{11} \begin{pmatrix} 0 & \\ & 1 \end{pmatrix} + \vec{d}_{12} \begin{pmatrix} 0 & \\ & 1 \end{pmatrix} + \vec{d}_{21} \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix} + \vec{d}_{22} \begin{pmatrix} 1 & \\ & 0 \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{\vec{d}_{11}}_{\text{διαγώνιο στοιχείο}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \underbrace{\vec{d}_{12}}_{\text{μη διαγώνιο στοιχείο}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &+ \underbrace{\vec{d}_{21}}_{\text{μη διαγώνιο στοιχείο}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \underbrace{\vec{d}_{22}}_{\text{διαγώνιο στοιχείο}} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Από τις Εξ. (8.149)-(8.150) συμπεραίνουμε ότι $\vec{d}_{12} = \vec{d}_{21}$, με την προϋπόθεση ότι οι $\Phi_i(\vec{r})$ είναι πραγματικές, οπότε

$$\hat{p} = \vec{d}_{12} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.152)$$

Ερώτηση: Και τι κάνει ο τελεστής $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$;

Απάντηση:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Δηλαδή, μεταφέρει από τη μία ενεργειακή στάθμη στην άλλη, όπως θα έπρεπε.

Τώρα μπορεί να οριστεί ο **τελεστής δυναμικής ενέργειας** (potential energy operator). Θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου έχει τη μορφή μηχανισμού ηλεκτρικού διπόλου. Αγνοούμε άλλης μορφής αλληλεπιδράσεις, όπως π.χ. ηλεκτρικού τετραπόλου ή μαγνητικού διπόλου. Αφού $U_{\mathcal{E}} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}}$, συνεπάγεται

$$U_{\mathcal{E}}^m = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}}^m, \quad (8.153)$$

όπου ο δείκτης m δηλώνει τον m τρόπο του ΗΜ πεδίου. Ο αντίστοιχος τελεστής μπορεί να οριστεί ως

$$\hat{U}_{\mathcal{E}}^m = -\hat{\vec{p}} \cdot \hat{\vec{\mathcal{E}}}^m. \quad (8.154)$$

Επομένως,

$$\hat{U}_{\mathcal{E}}^m = -\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \vec{d}_{ij} |\Phi_i\rangle \langle \Phi_j| \cdot \hat{E}_x^m(z, t) \hat{i}.$$

\hat{i} είναι το μοναδιαίο άνυσμα του άξονα x , αφού έχουμε υποθέσει αυτόν τον προσανατολισμό για το ηλεκτρικό πεδίο (δείτε Εικόνα 8.2). Η, λόγω της Εξ. 8.152,

$$\hat{U}_{\mathcal{E}}^m = -\vec{d}_{12} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \hat{E}_x^m(z, t) \hat{i}. \quad (8.155)$$

Αλλά

$$\vec{d}_{12} \cdot \hat{i} = -e \int dV \Phi_1(\vec{r})^* (\vec{r} \cdot \hat{i}) \Phi_2(\vec{r}) = -ex_{12} = \mathcal{P}_{x12} := \mathcal{P}. \quad (8.156)$$

Συνεπώς,

$$\hat{U}_{\mathcal{E}}^m = ex_{12} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hat{E}_x^m(z, t). \quad (8.157)$$

Υπενθυμίζονται οι Εξ. 8.110 και 8.111

$$\hat{E}_x^m(z, t) = \left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m),$$

$$\hat{B}_y^m(z, t) = \left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{c} \cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right) i(\hat{a}_m^\dagger - \hat{a}_m),$$

από τις οποίες, όμως, στο πλαίσιο των υποθέσεών μας χρειαζόμαστε τώρα μόνον την πρώτη. Επίσης, υπενθυμίζεται ότι

$$\hat{S}_+ + \hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Άρα, εν τέλει

$$\hat{U}_{\mathcal{E}}^m = ex_{12} \left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right) (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m). \quad (8.158)$$

Εναλλακτικά μπορούμε να γράψουμε

$$\hbar g^m = ex_{12} \left(\frac{\hbar \omega_m}{\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \left(\frac{m\pi z}{L} \right) \quad (8.159)$$

$$\hat{U}_{\mathcal{E}}^m = \hbar g^m (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m) \quad (8.160)$$

Αυτή είναι λοιπόν η Χαμιλτονιανή αλληλεπιδράσεως δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου για τον ΗΜ τρόπο m . Εάν βρισκόμαστε στο πλαίσιο της ατομικής φυσικής, τότε συμβολίζεται και \hat{H}_{AF}^m , όπου οι δείκτες σημαίνουν Atom-Field.

Από την Εξ. 8.159 προκύπτει

$$\hbar |g^m| = |\mathcal{P}| \left| \left(\frac{\hbar \omega_m}{\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \left(\frac{m\pi z}{L} \right) \right|. \quad (8.161)$$

Μπορούμε επίσης να ορίσουμε, για λόγους που θα φανούν παρακάτω, τη συχνότητα Rabi ως

$$\Omega_R^m := 2\sqrt{n}g^m. \quad (8.162)$$

Άρα,

$$\Omega_R^m = \frac{|\mathcal{P}|}{\hbar} \left| \left(\frac{4\hbar \omega_m n}{\varepsilon_0 V} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \left(\frac{m\pi z}{L} \right) \right| := \frac{|\mathcal{P}| E_0^m}{\hbar}, \quad (8.163)$$

όπου όμως το «πλάτος» E_0^m είναι χωρικά διαμορφωμένο, δηλαδή εξαρτάται από τη θέση z του ατόμου στην κοιλότητα. Με άλλα λόγια $E_0^m = E_0^m(z)$. Εάν εννοείται σε ποιον ΗΜ τρόπο m αναφερόμαστε, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε σκέτο το $|g|$ ή το Ω_R . Επίσης, για να μη γράφουμε απόλυτα, μπορούμε σε κάθε θέση να διαλέγουμε τη φάση των κυματοσυναρτήσεων τέτοια ώστε το g να είναι θετικό και πραγματικό [2]. Συνοπτικά,

$$\Omega_R = \frac{g}{2\sqrt{n}} := \frac{|\mathcal{P}| E_0^m}{\hbar} \quad (8.164)$$

Ας δούμε λίγο προσεκτικότερα τη Χαμιλτονιανή αλληλεπιδράσεως δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου (Εξ. 8.160). Για έναν, μοναδικό τρόπο m η Χαμιλτονιανή αυτή αναλύεται σε τέσσερις όρους

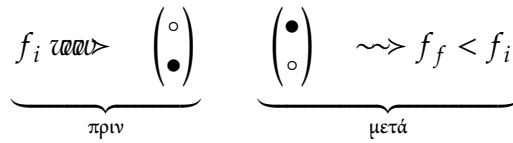
$$\begin{aligned} \hat{U}_{\mathcal{E}}^m &= \hbar g^m (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m) = \\ &= \hbar g^m \{ \underbrace{\hat{S}_+ \hat{a}_m^\dagger}_{1ος} + \underbrace{\hat{S}_+ \hat{a}_m}_{2ος} + \underbrace{\hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger}_{3ος} + \underbrace{\hat{S}_- \hat{a}_m}_{4ος} \}. \end{aligned}$$

- 1ος ΟΡΟΣ. Το ηλεκτρόνιο ανεβαίνει και δημιουργείται/εκπέμπεται φωτόνιο. Άρα, η μεταβολή της ενέργειας $\Delta E > 0$. Επομένως, αυτός ο όρος, μόνος του, δεν διατηρεί την ενέργεια και φαντάζει παράλογος. Σχηματικά:

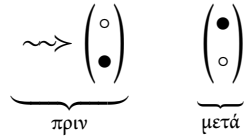
$$\underbrace{\begin{pmatrix} \circ \\ \bullet \end{pmatrix}}_{\text{πριν}} \quad \underbrace{\begin{pmatrix} \bullet \\ \circ \end{pmatrix}}_{\text{μετά}} \rightsquigarrow$$

Πλην όμως, είναι δυνατόν να κρατηθούν τέτοιοι όροι, όταν υποστηρίζονται πολλοί τρόποι (m), άρα πολλές συχνότητες (Εξ. 8.50). Δηλαδή, όταν η Χαμιλτονιανή αλληλεπιδράσεως δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου αποτελείται από άθροισμα όρων, όπως η Εξ. 8.160. Τότε είναι δυνατόν το δισταθ-

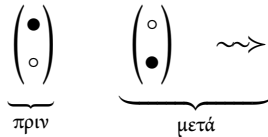
μικό σύστημα να απορροφήσει ένα φωτόνιο υψηλής συχνότητας και το ηλεκτρόνιο να ανεβεί, ενώ παράλληλα δημιουργείται/εκπέμπεται φωτόνιο χαμηλότερης συχνότητας. Σχηματικά:



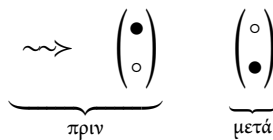
- 2ος ΟΡΟΣ. Το ηλεκτρόνιο ανεβαίνει και καταστρέφεται/απορροφάται φωτόνιο. Αυτός ο όρος, ακόμα κι αν υπάρχει μόνο ένας τρόπος (m), μπορεί να διατηρεί την ενέργεια. Σχηματικά:



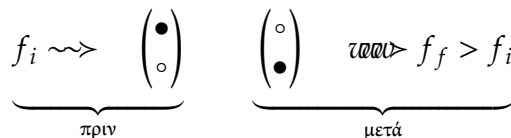
- 3ος ΟΡΟΣ. Το ηλεκτρόνιο κατεβαίνει και δημιουργείται/εκπέμπεται φωτόνιο. Και αυτός ο όρος, ακόμα κι αν υπάρχει μόνο ένας τρόπος (m), μπορεί να διατηρεί την ενέργεια. Σχηματικά:



- 4ος ΟΡΟΣ. Το ηλεκτρόνιο κατεβαίνει και καταστρέφεται/απορροφάται φωτόνιο. Άρα, η μεταβολή της ενέργειας $\Delta E < 0$. Επομένως, και αυτός ο όρος, μόνος του, δεν διατηρεί την ενέργεια και φαντάζει παράλογος. Σχηματικά:



Πλην όμως, είναι δυνατόν να κρατηθούν τέτοιοι όροι, όταν υποστηρίζονται πολλοί τρόποι (m), άρα πολλές συχνότητες (Εξ. 8.50). Δηλαδή, όταν η Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασεως δισταθμικού συστήματος - ΗΜ πεδίου αποτελείται από άθροισμα όρων, όπως η Εξ. 8.160. Τότε είναι δυνατόν το δισταθμικό σύστημα να απορροφήσει ένα φωτόνιο χαμηλής συχνότητας και το ηλεκτρόνιο να κατεβεί, ενώ παράλληλα δημιουργείται/εκπέμπεται φωτόνιο υψηλότερης συχνότητας. Σχηματικά:



Αν αγνοήσουμε τον 1ο και 4ο όρο, που ο καθένας μόνος του δεν διατηρεί την ενέργεια, τότε

$$\hat{U}_{\mathcal{E}}^m = \hbar g^m (\hat{S}_+ \hat{a}_m + \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger). \tag{8.165}$$

Η προσέγγιση είναι κατά κάποιον τρόπο ανάλογη της RWA (Rotating Wave Approximation) του Κεφαλαίου 5. Εκεί, στις εξισώσεις Rabi κρατήσαμε μόνο τους αργούς όρους, όπου ΗΜ πεδίο και το δισταθμικό σύστημα βρίσκονται σε περίπου συντονισμό, δηλαδή $\Omega \simeq \omega$. Δηλαδή, κρατήσαμε τους αργούς όρους $e^{\pm i(\Omega - \omega)t}$ και αγνοήσαμε τους γρήγορους όρους $e^{\pm i(\Omega + \omega)t}$.

8.8 Σύνοψη Χαμιλτονιανών

Ας συνοψίσουμε τι έχουμε κάνει μέχρι στιγμής.

Στην Ενότητα 8.4 είδαμε την Εξ. 8.100, η οποία περιγράφει έναν ΗΜ τρόπο m , δηλαδή την

$$\hat{H}_{\text{HM}, m} = \hbar\omega_m \left(\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \frac{1}{2} \right)$$

η οποία, αγνοώντας τον όρο $\frac{\hbar\omega_m}{2}$, γίνεται η Εξ. 8.109

$$\hat{H}_{\text{HM}, m} = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m = \hbar\omega_m \hat{N}_m$$

Στην Ενότητα 8.5 είδαμε την Εξ. 8.131, η οποία περιγράφει ένα δισταθμικό σύστημα, δηλαδή την

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = E_2 \hat{S}_+ \hat{S}_- + E_1 \hat{S}_- \hat{S}_+$$

η οποία θέτοντας $E_1 = 0 \Rightarrow E_2 = \hbar\Omega$ (θυμηθείτε την Εξ. 5.49 και την Εξ. 5.15) γίνεται η Εξ. 8.132

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_-$$

Η εικόνα συμπληρώνεται στην Ενότητα 8.7, η οποία περιγράφει την αλληλεπίδραση ενός ΗΜ τρόπου m με ένα δισταθμικό σύστημα, δηλαδή την

$$\hat{U}_{\mathcal{E}}^m = \hbar g^m (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m)$$

Άρα, η Χαμιλτονιανή που περιγράφει έναν ΗΜ τρόπο m , ένα δισταθμικό σύστημα και τη μεταξύ τους αλληλεπίδραση (ονομάζεται συχνά Χαμιλτονιανή Rabi) μπορεί να γραφτεί

$$\hat{H}_R^m = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g^m (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) (\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m) \quad (8.166)$$

ενώ οι καταστάσεις (ηλεκτρονίου και ΗΜ τρόπου m , χωρίς τη μεταξύ τους αλληλεπίδραση) είναι

$$|\uparrow, n_m\rangle, \quad (8.167)$$

$$|\downarrow, n_m\rangle. \quad (8.168)$$

Συνοπτικά, ενώ για την ολική Χαμιλτονιανή ενός τρόπου m έχουμε τη λεγόμενη Χαμιλτονιανή Rabi

$$\hat{H}_R^m = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g^m (\hat{S}_+ \hat{a}_m^\dagger + \hat{S}_+ \hat{a}_m + \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger + \hat{S}_- \hat{a}_m), \quad (8.169)$$

σύμφωνα με τη συζήτηση στην Ενότητα 8.7, αγνοούμε σε πρώτη προσέγγιση τους λεγόμενους counter-rotating terms

$$\hat{H}_{\text{counter-rotating}} = \hbar g^m (\hat{S}_+ \hat{a}_m^\dagger + \hat{S}_- \hat{a}_m) \quad (8.170)$$

οπότε λαμβάνουμε τη λεγόμενη Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings [3]

$$\hat{H}_{\text{JC}}^m = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g^m (\hat{S}_+ \hat{a}_m + \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger) \quad (8.171)$$

Ας σημειωθεί ότι στο άρθρο [3] οι συγγραφείς παίρνουν ως μηδενικό επίπεδο αναφοράς το μέσον μεταξύ των δύο ενεργειακών σταθμών, οπότε τότε ο μεσαίος όρος, ο οποίος αρχικά δίνεται από την Εξ. 8.131

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = E_2 \hat{S}_+ \hat{S}_- + E_1 \hat{S}_- \hat{S}_+,$$

αν θέσουμε $E_1 = -\frac{\hbar\Omega}{2}$ και $E_2 = \frac{\hbar\Omega}{2}$, θα γινόταν (βλ. Εξ. 8.127)

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = \frac{\hbar\Omega}{2}\hat{\sigma}_z. \quad (8.172)$$

Εμείς, όμως, θα εξακολουθήσουμε να χρησιμοποιούμε ως μηδενικό επίπεδο αναφοράς την E_1 , οπότε ο μεσαίος όρος μας θα είναι

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = \hbar\Omega\hat{S}_+\hat{S}_-$$

Στην Άσκηση 1 του παρόντος κεφαλαίου παραλείπουμε για απλότητα τον δείκτη m . (Α) Βρίσκουμε τι κάνουν οι όροι $\hat{a}^\dagger\hat{a}$, $\hat{a}\hat{a}^\dagger$, $\hat{S}_+\hat{S}_-$, $\hat{S}_-\hat{S}_+$, $\hat{S}_+\hat{a}^\dagger$, $\hat{S}_+\hat{a}$, $\hat{S}_-\hat{a}^\dagger$, $\hat{S}_-\hat{a}$, στις καταστάσεις $|\downarrow, n\rangle$ και $|\uparrow, n\rangle$. (Β) Υπολογίζουμε τα $\langle\hat{a}^\dagger\hat{a}\rangle$, $\langle\hat{a}\hat{a}^\dagger\rangle$, $\langle\hat{S}_+\hat{S}_-\rangle$, $\langle\hat{S}_-\hat{S}_+\rangle$, $\langle\hat{S}_+\hat{a}^\dagger\rangle$, $\langle\hat{S}_+\hat{a}\rangle$, $\langle\hat{S}_-\hat{a}^\dagger\rangle$, $\langle\hat{S}_-\hat{a}\rangle$, για τις καταστάσεις $|\downarrow, n\rangle$ και $|\uparrow, n\rangle$.

8.9 Μέσες (αναμενόμενες) τιμές μεγεθών για τη Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings

Ας υπολογίσουμε τώρα τις μέσες (δηλαδή τις αναμενόμενες) τιμές των τελεστών που εμφανίζονται στη Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings

$$\hat{H}_{JC}^m = \hbar\omega_m\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m + \hbar\Omega\hat{S}_+\hat{S}_- + \hbar g^m(\hat{S}_+\hat{a}_m + \hat{S}_-\hat{a}_m^\dagger),$$

δηλαδή τα $\langle\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m\rangle$, $\langle\hat{S}_+\hat{S}_-\rangle$, $\langle\hat{S}_+\hat{a}_m\rangle$, $\langle\hat{S}_-\hat{a}_m^\dagger\rangle$ για τις καταστάσεις:

- (Α) $|\Psi_A(t)\rangle = c_1(t)|\downarrow, n\rangle + c_2(t)|\uparrow, n-1\rangle$,
- (Ε) $|\Psi_E(t)\rangle = c_1(t)|\downarrow, n+1\rangle + c_2(t)|\uparrow, n\rangle$.

Περίπτωση (Α)

$$\begin{aligned} \langle\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m\rangle_{(A)} &= \langle\psi_A(t)|\hat{a}_m^\dagger|\psi_A(t)\rangle = \{c_1^*\langle\downarrow, n| + c_2^*\langle\uparrow, n-1|\}\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m\{c_1|\downarrow, n\rangle + c_2|\uparrow, n-1\rangle\} \\ &= |c_1|^2\langle\downarrow, n|\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m|\downarrow, n\rangle + c_1^*c_2\langle\downarrow, n|\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m|\uparrow, n-1\rangle \\ &\quad + c_2^*c_1\langle\uparrow, n-1|\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m|\downarrow, n\rangle + |c_2|^2\langle\uparrow, n-1|\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m|\uparrow, n-1\rangle \\ &= |c_1|^2\sqrt{n}\sqrt{n}\langle\downarrow, n|\downarrow, n\rangle + c_1^*c_2\sqrt{n-1}\sqrt{n-1}\langle\downarrow, n|\uparrow, n-1\rangle \\ &\quad + c_2^*c_1\sqrt{n}\sqrt{n}\langle\uparrow, n-1|\downarrow, n\rangle + |c_2|^2\sqrt{n-1}\sqrt{n-1}\langle\uparrow, n-1|\uparrow, n-1\rangle \\ &= n|c_1|^2 \cdot 1 + c_1^*c_2(n-1) \cdot 0 + c_2^*c_1n \cdot 0 + (n-1)|c_2|^2 \cdot 1 \\ &= n|c_1|^2 + n|c_2|^2 - |c_2|^2 = n(|c_1|^2 + |c_2|^2) - |c_2|^2 = n - |c_2|^2 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_m\rangle_{(A)} = n - |c_2(t)|^2} \quad (8.173)$$

$$\begin{aligned} \langle\hat{S}_+\hat{S}_-\rangle_{(A)} &= \langle\psi_A(t)|\hat{S}_+\hat{S}_-|\psi_A(t)\rangle = \{c_1^*\langle\downarrow, n| + c_2^*\langle\uparrow, n-1|\}\hat{S}_+\hat{S}_-\{c_1|\downarrow, n\rangle + c_2|\uparrow, n-1\rangle\} \\ &= |c_1|^2\langle\downarrow, n|\hat{S}_+\hat{S}_-|\downarrow, n\rangle + c_1^*c_2\langle\downarrow, n|\hat{S}_+\hat{S}_-|\uparrow, n-1\rangle \\ &\quad + c_2^*c_1\langle\uparrow, n-1|\hat{S}_+\hat{S}_-|\downarrow, n\rangle + |c_2|^2\langle\uparrow, n-1|\hat{S}_+\hat{S}_-|\uparrow, n-1\rangle \\ &= |c_1|^2 \cdot 0 + c_1^*c_2\langle\downarrow, n|\uparrow, n-1\rangle + c_2^*c_1 \cdot 0 + |c_2|^2\langle\uparrow, n-1|\uparrow, n-1\rangle \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle\hat{S}_+\hat{S}_-\rangle_{(A)} = |c_2(t)|^2} \quad (8.174)$$

Άρα,

$$\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle_{(A)} + \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle_{(A)} = n \quad (8.175)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_+ \hat{a}_m \rangle_{(A)} &= \langle \psi_A(t) | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \psi_A(t) \rangle = \{c_1^* \langle \downarrow, n | + c_2^* \langle \uparrow, n-1 | \} \hat{S}_+ \hat{a}_m \{c_1 | \downarrow, n \rangle + c_2 | \uparrow, n-1 \rangle \} \\ &= |c_1|^2 \langle \downarrow, n | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \downarrow, n \rangle + c_1^* c_2 \langle \downarrow, n | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \uparrow, n-1 \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 \langle \uparrow, n-1 | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \downarrow, n \rangle + |c_2|^2 \langle \uparrow, n-1 | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \uparrow, n-1 \rangle \\ &= |c_1|^2 \sqrt{n} \langle \downarrow, n | \uparrow, n-1 \rangle + c_1^* c_2 \sqrt{n-1} \langle \downarrow, n | \hat{S}_+ | \uparrow, n-2 \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 \sqrt{n} \langle \uparrow, n-1 | \uparrow, n-1 \rangle + |c_2|^2 \sqrt{n-1} \langle \uparrow, n-1 | \hat{S}_+ | \uparrow, n-2 \rangle \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle \hat{S}_+ \hat{a}_m \rangle_{(A)} = c_2^*(t) c_1(t) \sqrt{n} \quad (8.176)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger \rangle_{(A)} &= \langle \psi_A(t) | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \psi_A(t) \rangle = \{c_1^* \langle \downarrow, n | + c_2^* \langle \uparrow, n-1 | \} \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger \{c_1 | \downarrow, n \rangle + c_2 | \uparrow, n-1 \rangle \} \\ &= |c_1|^2 \langle \downarrow, n | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \downarrow, n \rangle + c_1^* c_2 \langle \downarrow, n | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \uparrow, n-1 \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 \langle \uparrow, n-1 | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \downarrow, n \rangle + |c_2|^2 \langle \uparrow, n-1 | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \uparrow, n-1 \rangle \\ &= |c_1|^2 \sqrt{n+1} \langle \downarrow, n | \hat{S}_- | \downarrow, n+1 \rangle + c_1^* c_2 \sqrt{n} \langle \downarrow, n | \downarrow, n \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 \langle \uparrow, n-1 | \hat{S}_- | \downarrow, n+1 \rangle \sqrt{n+1} + |c_2|^2 \langle \uparrow, n-1 | \downarrow, n \rangle \sqrt{n} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger \rangle_{(A)} = c_1^*(t) c_2(t) \sqrt{n} \quad (8.177)$$

Περίπτωση (E)

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle_{(E)} &= \langle \psi_E(t) | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m | \psi_E(t) \rangle = \{c_1^* \langle \downarrow, n+1 | + c_2^* \langle \uparrow, n | \} \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \{c_1 | \downarrow, n+1 \rangle + c_2 | \uparrow, n \rangle \} \\ &= |c_1|^2 \langle \downarrow, n+1 | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m | \downarrow, n+1 \rangle + c_1^* c_2 \langle \downarrow, n+1 | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m | \uparrow, n \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 \langle \uparrow, n | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m | \downarrow, n+1 \rangle + |c_2|^2 \langle \uparrow, n | \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m | \uparrow, n \rangle \\ &= |c_1|^2 \sqrt{n+1} \sqrt{n+1} \langle \downarrow, n+1 | \downarrow, n+1 \rangle + c_1^* c_2 n \langle \downarrow, n+1 | \uparrow, n \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 (n+1) \langle \uparrow, n | \downarrow, n+1 \rangle + |c_2|^2 n \langle \uparrow, n | \uparrow, n \rangle \\ &= |c_1|^2 (n+1) + n |c_2|^2 = n(|c_1|^2 + |c_2|^2) + |c_1|^2 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle_{(E)} = n + |c_1(t)|^2 \quad (8.178)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle_{(E)} &= \langle \psi_E(t) | \hat{S}_+ \hat{S}_- | \psi_E(t) \rangle = \{c_1^* \langle \downarrow, n+1 | + c_2^* \langle \uparrow, n | \} \hat{S}_+ \hat{S}_- \{c_1 | \downarrow, n+1 \rangle + c_2 | \uparrow, n \rangle \} \\ &= |c_1|^2 \cdot 0 + c_1^* c_2 \langle \downarrow, n+1 | \uparrow, n \rangle + c_2^* c_1 \cdot 0 + |c_2|^2 \langle \uparrow, n | \uparrow, n \rangle \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle_{(E)} = |c_2(t)|^2 \quad (8.179)$$

Άρα,

$$\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle_{(E)} + \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle_{(E)} = n + 1 \quad (8.180)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_+ \hat{a}_m \rangle_{(E)} &= \langle \psi_E(t) | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \psi_E(t) \rangle = \{c_1^* \langle \downarrow, n+1 | + c_2^* \langle \uparrow, n | \} \hat{S}_+ \hat{a}_m \{c_1 | \downarrow, n+1 \rangle + c_2 | \uparrow, n \rangle \} \\ &= |c_1|^2 \langle \downarrow, n+1 | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \downarrow, n+1 \rangle + c_1^* c_2 \langle \downarrow, n+1 | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \uparrow, n \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 \langle \uparrow, n | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \downarrow, n+1 \rangle + |c_2|^2 \langle \uparrow, n | \hat{S}_+ \hat{a}_m | \uparrow, n \rangle \\ &= |c_1|^2 \sqrt{n+1} \langle \downarrow, n+1 | \uparrow, n \rangle + c_1^* c_2 \cdot 0 + c_2^* c_1 \sqrt{n+1} \langle \uparrow, n | \uparrow, n \rangle + |c_2|^2 \cdot 0 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle \hat{S}_+ \hat{a}_m \rangle_{(E)} = c_2^*(t) c_1(t) \sqrt{n+1} \quad (8.181)$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger \rangle_{(E)} &= \langle \psi_E(t) | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \psi_E(t) \rangle = \{c_1^* \langle \downarrow, n+1 | + c_2^* \langle \uparrow, n | \} \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger \{c_1 | \downarrow, n+1 \rangle + c_2 | \uparrow, n \rangle \} \\ &= |c_1|^2 \langle \downarrow, n+1 | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \downarrow, n+1 \rangle + c_1^* c_2 \langle \downarrow, n+1 | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \uparrow, n \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 \langle \uparrow, n | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \downarrow, n+1 \rangle + |c_2|^2 \langle \uparrow, n | \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger | \uparrow, n \rangle \\ &= |c_1|^2 \sqrt{n+2} \langle \downarrow, n+1 | \uparrow, n+2 \rangle + c_1^* c_2 \sqrt{n+1} \langle \downarrow, n+1 | \downarrow, n+1 \rangle \\ &\quad + c_2^* c_1 \cdot 0 + |c_2|^2 \langle \uparrow, n | \downarrow, n+1 \rangle \sqrt{n+1} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\langle \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger \rangle_{(E)} = c_1^*(t) c_2(t) \sqrt{n+1} \quad (8.182)$$

Οι σχέσεις που αποδείξαμε παραπάνω θα χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια, στις Ενότητες 8.10-8.11.

8.10 Απορρόφηση φωτονίου

Ας θεωρήσουμε το πρόβλημα απορροφήσεως ενός φωτονίου που περιγράφεται από τις εξισώσεις

$$|\Psi_A(t)\rangle = c_1(t) |\downarrow, n_m\rangle + c_2(t) |\uparrow, n_m - 1\rangle, \quad (8.183)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_A(t)\rangle = \hat{H} |\Psi_A(t)\rangle, \quad (8.184)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_{JC}^m = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g^m (\hat{S}_+ \hat{a}_m + \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger), \quad (8.185)$$

και τις αρχικές συνθήκες

$$c_1(0) = 1, \quad c_2(0) = 0. \quad (8.186)$$

Το αριστερό μέρος της χρονοεξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger 8.184 γίνεται

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_A(t)\rangle = i\hbar c_1 |\downarrow, n_m\rangle + i\hbar c_2 |\uparrow, n_m - 1\rangle, \quad (8.187)$$

ενώ το δεξιό

$$\begin{aligned}
\hat{H} |\Psi_A(t)\rangle &= (\hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g^m \hat{S}_+ \hat{a}_m + \hbar g^m \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger) (c_1 |\downarrow, n_m\rangle + c_2 |\uparrow, n_m - 1\rangle) \\
&= c_1 \hbar\omega_m n_m |\downarrow, n_m\rangle + c_1 \hbar\Omega |0, n_m\rangle + c_1 \hbar g^m |\uparrow, n_m - 1\rangle \sqrt{n_m} + c_1 \hbar g^m \sqrt{n_m + 1} |0, n_m + 1\rangle \\
&\quad + c_2 \hbar\omega_m (n_m - 1) |\uparrow, n_m - 1\rangle + c_2 \hbar\Omega |\uparrow, n_m - 1\rangle + \\
&\quad c_2 \hbar g^m \sqrt{n_m - 1} |0, n_m - 2\rangle + \hbar g^m |\downarrow, n_m\rangle \sqrt{n_m} c_2 \\
&= c_1 \hbar\omega_m n_m |\downarrow, n_m\rangle + c_1 \hbar g^m |\uparrow, n_m - 1\rangle \sqrt{n_m} \\
&\quad + c_2 \hbar\omega_m (n_m - 1) |\uparrow, n_m - 1\rangle + c_2 \hbar\Omega |\uparrow, n_m - 1\rangle + \hbar g^m |\downarrow, n_m\rangle \sqrt{n_m} c_2.
\end{aligned}$$

Επιδρώντας με $\langle \downarrow, n |$ και στα δύο μέλη,

$$\left. \begin{array}{l} \text{το αριστερό μέρος γίνεται} \\ \text{το δεξιό μέρος γίνεται} \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} i\hbar\dot{c}_1 \\ \hbar\omega_m n_m c_1 + \hbar g^m \sqrt{n_m} c_2 \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$i\dot{c}_1 = n_m \omega_m c_1 + g^m \sqrt{n_m} c_2. \quad (8.188)$$

Αντίστοιχα, επιδρώντας με $\langle \uparrow, n - 1 |$ και στα δύο μέλη,

$$\left. \begin{array}{l} \text{το αριστερό μέρος γίνεται} \\ \text{το δεξιό μέρος γίνεται} \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} i\hbar\dot{c}_2 \\ \hbar g^m \sqrt{n_m} c_1 + \hbar\omega_m (n_m - 1) c_2 + \hbar\Omega c_2 \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$i\dot{c}_2 = g^m \sqrt{n_m} c_1 + [\Omega + (n_m - 1)\omega_m] c_2. \quad (8.189)$$

Δηλαδή, καταλήγουμε στο Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων

$$i \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_m \omega_m & g^m \sqrt{n_m} \\ g^m \sqrt{n_m} & \Omega + (n_m - 1)\omega_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (8.190)$$

Ορίζουμε τώρα τη **γενικευμένη συχνότητα Rabi**

$$\Omega_{n_m} := \left[\left(\frac{\omega_m - \Omega}{2} \right)^2 + g_m^2 n_m \right]^{1/2} \quad (8.191)$$

ή, παραλείποντας για απλότητα τον δείκτη m , ο οποίος δηλώνει τον ΗΜ τρόπο,

$$\Omega_n := \left[\left(\frac{\omega - \Omega}{2} \right)^2 + g^2 n \right]^{1/2} \quad (8.192)$$

Το παραπάνω Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων (8.190) μπορεί να επιλυθεί π.χ. με τη Μέθοδο των Ιδιοτιμών (δείτε Παράρτημα B.7), δηλαδή με τον ίδιο τρόπο που είδαμε στο Κεφάλαιο 5. Κάνοντας τους υπολογισμούς για το πρόβλημα της απορροφήσεως φωτονίου [δηλαδή για τις αρχικές συνθήκες $c_1(0) = 1, c_2(0) = 0$], προκύπτει

$$|c_2(t)|^2 = \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t) \quad (8.193)$$

και

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2 = 1 - \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t) \quad (8.194)$$

Άρα, από την Εξίσωση 8.173 προκύπτει

$$\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle_{(A)} = n - \frac{ng^2 \sin^2(\Omega_n t)}{\Omega_n^2} \quad (8.195)$$

δηλαδή η μέση (αναμενόμενη) τιμή του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα συναρτήσει του χρόνου θα πραγματοποιεί ταλαντώσεις. Ο δείκτης (A) σημαίνει απορρόφηση (absorption). Επίσης, από την Εξίσωση 8.174 προκύπτει

$$\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle_{(A)} = \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t) \quad (8.196)$$

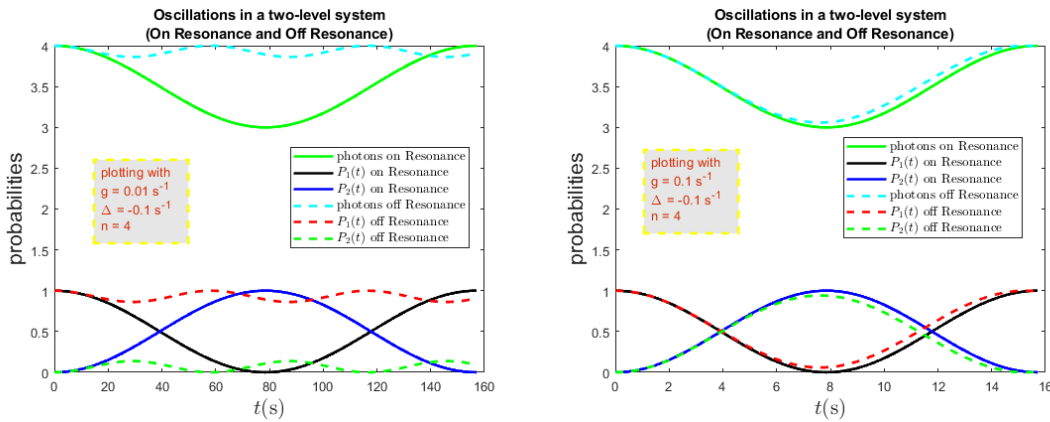
δηλαδή η μέση (αναμενόμενη) τιμή του αριθμού των ηλεκτρονίων στην άνω στάθμη E_2 συναρτήσει του χρόνου θα πραγματοποιεί ταλαντώσεις, οι οποίες καλούνται συχνά **ταλαντώσεις Rabi**. Δυο παραδείγματα ταλαντώσεων Rabi κατά την απορρόφηση φωτονίου φαίνονται στην Εικόνα 8.7.

Επειδή $\sin^2(\Omega_n t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2\Omega_n t)$, η περίοδος των ταλαντώσεων αυτών είναι

$$T = \frac{2\pi}{2\Omega_n} = \frac{\pi}{\Omega_n} = \frac{\pi}{\left[\left(\frac{\omega - \Omega}{2} \right)^2 + g^2 n \right]^{1/2}} \quad (8.197)$$

Επομένως, στον συντονισμό, όπου $\omega = \Omega$, η περίοδος μεγιστοποιείται σε

$$T = \frac{\pi}{g\sqrt{n}}. \quad (8.198)$$



Εικόνα 8.7: Δύο παραδείγματα ταλαντώσεων Rabi κατά την απορρόφηση φωτονίου, δηλαδή, η αρχική συνθήκη είναι 4 φωτόνια στην κοιλότητα και 1 ηλεκτρόνιο στην κάτω στάθμη. Χρησιμοποιούμε κάποιες αυθαίρετες τιμές για τις παραμέτρους. Δεξιά οι δύο στάθμες εμπλέκονται περισσότερο (η παράμετρος g είναι μεγαλύτερη). Παρουσιάζουμε σε συντονισμό ($\Delta = 0$) κι εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$), τη χρονική εξέλιξη της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα, $\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle = n - \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t)$, αλλά και της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των ηλεκτρονίων στην άνω στάθμη, $P_2(t) = \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle = \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t)$, αλλά και στην κάτω στάθμη, $P_1(t)$.

Το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης μεταξύ των σταθμών \mathcal{A} , όπως φαίνεται από τις Εξ. 8.196 και 8.191, είναι

$$\mathcal{A} = \frac{g^2 n}{\Omega_n^2} = \frac{g^2 n}{\left(\frac{\omega - \Omega}{2} \right)^2 + g^2 n} \quad (8.199)$$

Επομένως,

- για $\Omega = \omega$ (συντονισμός) $\Rightarrow \mathcal{A} = 1$, ενώ
- για $\Omega \neq \omega$ (μη συντονισμός) $\Rightarrow \mathcal{A} < 1$.

Συμπερασματικά, ο αριθμός των φωτονίων στην κοιλότητα, n , η ποσότητα g (Εξ. 8.159) και ο αποσυντονισμός (detuning), που ορίσαμε στην Εξ. 5.54 ως $\Delta := \omega - \Omega$, καθορίζουν το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης και την περίοδο των ταλαντώσεων.

8.11 Εκπομπή φωτονίου

Ας θεωρήσουμε το πρόβλημα εκπομπής ενός φωτονίου που περιγράφεται από τις εξισώσεις

$$|\Psi_E(t)\rangle = c_1(t) |\downarrow, n_m + 1\rangle + c_2 |\uparrow, n_m\rangle, \quad (8.200)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_E(t)\rangle = \hat{H} |\Psi_E(t)\rangle, \quad (8.201)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_{JC}^m = \hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g^m (\hat{S}_+ \hat{a}_m + \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger), \quad (8.202)$$

και τις αρχικές συνθήκες

$$c_1(0) = 0, \quad c_2(0) = 1. \quad (8.203)$$

Το αριστερό μέρος της χρονοεξαρτημένης εξίσωσης Schrödinger 8.201 γίνεται

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_E(t)\rangle = i\hbar c_1 |\downarrow, n_m + 1\rangle + i\hbar c_2 |\uparrow, n_m\rangle, \quad (8.204)$$

ενώ το δεξιό

$$\begin{aligned} \hat{H} |\Psi_E(t)\rangle &= (\hbar\omega_m \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m + \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hbar g^m \hat{S}_+ \hat{a}_m + \hbar g^m \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger) (c_1 |\downarrow, n_m + 1\rangle + c_2 |\uparrow, n_m\rangle) \\ &= \hbar\omega_m c_1 (n_m + 1) |\downarrow, n_m + 1\rangle + \hbar\Omega c_1 \cdot 0 + \hbar g^m c_1 |\uparrow, n_m\rangle \sqrt{n_m + 1} + \hbar g^m c_1 \cdot 0 \\ &\quad + \hbar\omega_m c_2 n_m |\uparrow, n_m\rangle + \hbar\Omega c_2 |\uparrow, n_m\rangle + \hbar g^m c_2 \cdot 0 + \hbar g^m c_2 |\downarrow, n_m + 1\rangle \sqrt{n_m + 1} \\ &= \hbar\omega_m c_1 (n_m + 1) |\downarrow, n_m + 1\rangle + \hbar g^m c_1 \sqrt{n_m + 1} |\uparrow, n_m\rangle \\ &\quad + \hbar\omega_m c_2 n_m |\uparrow, n_m\rangle + \hbar\Omega c_2 |\uparrow, n_m\rangle + \hbar g^m c_2 \sqrt{n_m + 1} |\downarrow, n_m + 1\rangle. \end{aligned} \quad (8.205)$$

Επιδρώντας με $\langle \downarrow, n + 1 |$ και στα δύο μέλη,

$$\left. \begin{array}{l} \text{το αριστερό μέρος γίνεται} \\ \text{το δεξιό μέρος γίνεται} \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} & i\hbar \dot{c}_1 \\ & \hbar\omega_m c_1 (n_m + 1) + \hbar g^m c_2 \sqrt{n_m + 1} \end{aligned} \Rightarrow \quad (8.206)$$

$$i\dot{c}_1 = \omega_m (n_m + 1) c_1 + g^m \sqrt{n_m + 1} c_2.$$

Αντίστοιχα, επιδρώντας με $\langle \uparrow, n |$ και στα δύο μέλη,

$$\left. \begin{array}{l} \text{το αριστερό μέρος γίνεται} \\ \text{το δεξιό μέρος γίνεται} \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{aligned} & i\hbar \dot{c}_2 \\ & \hbar g^m c_1 \sqrt{n_m + 1} + \hbar\omega_m c_2 n_m + \hbar\Omega c_2 \end{aligned} \Rightarrow \quad (8.207)$$

$$i\dot{c}_2 = g^m \sqrt{n_m + 1} c_1 + (n_m \omega_m + \Omega) c_2.$$

Δηλαδή, καταλήγουμε στο Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων

$$i \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (n_m + 1)\omega_m & g^m \sqrt{n_m + 1} \\ g^m \sqrt{n_m + 1} & \Omega + n_m \omega_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (8.208)$$

Ορίζουμε τώρα τη γενικευμένη συχνότητα Rabi

$$\Omega_{n_m+1} := \left[\left(\frac{\omega_m - \Omega}{2} \right)^2 + g_m^2 (n_m + 1) \right]^{1/2} \quad (8.209)$$

ή, παραλείποντας για απλότητα τον δείκτη m που δηλώνει τον ΗΜ τρόπο,

$$\Omega_{n+1} := \left[\left(\frac{\omega - \Omega}{2} \right)^2 + g^2 (n + 1) \right]^{1/2} \quad (8.210)$$

Το παραπάνω σύστημα Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων (8.208) μπορεί να επιλυθεί, π.χ. με τη Μέθοδο των Ιδιοτιμών (δείτε Παράρτημα B.7), δηλαδή με τον ίδιο τρόπο που είδαμε στο Κεφάλαιο 5. Κάνοντας τους υπολογισμούς για το πρόβλημα της εκπομπής φωτονίου [δηλαδή για τις αρχικές συνθήκες $c_1(0) = 0, c_2(0) = 1$], προκύπτει

$$|c_1(t)|^2 = \frac{(n+1)g^2}{\Omega_{n+1}^2} \sin^2(\Omega_{n+1}t) \quad (8.211)$$

και

$$|c_2(t)|^2 = 1 - |c_1(t)|^2 = 1 - \frac{(n+1)g^2}{\Omega_{n+1}^2} \sin^2(\Omega_{n+1}t) \quad (8.212)$$

Άρα, από την Εξίσωση 8.178 προκύπτει

$$\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle_{(E)} = n + \frac{g^2(n+1)}{\Omega_{n+1}^2} \sin^2(\Omega_{n+1}t) \quad (8.213)$$

δηλαδή η μέση (αναμενόμενη) τιμή του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα συναρτήσει του χρόνου θα πραγματοποιεί ταλαντώσεις. Ο δείκτης (E) σημαίνει εκπομπή (emission). Επίσης, από την Εξίσωση 8.179 προκύπτει

$$\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle_{(E)} = 1 - \frac{g^2(n+1)}{\Omega_{n+1}^2} \sin^2(\Omega_{n+1}t) \quad (8.214)$$

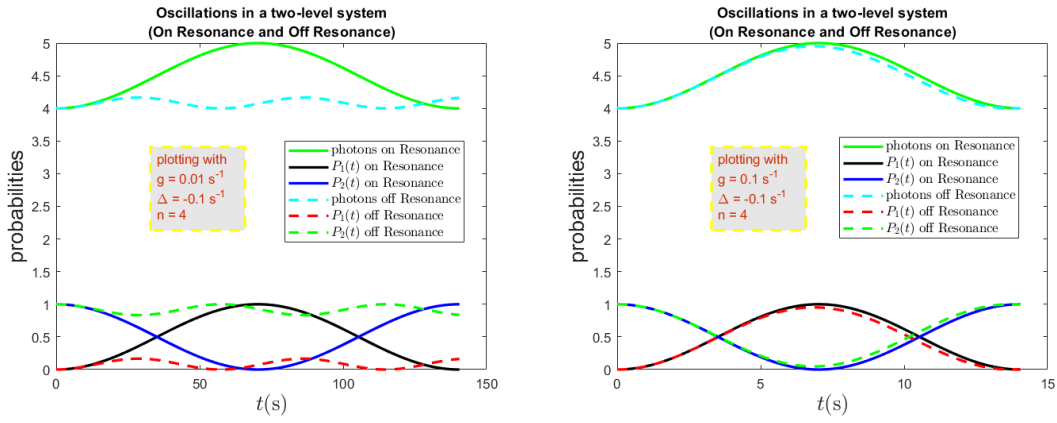
δηλαδή η μέση (αναμενόμενη) τιμή του αριθμού των ηλεκτρονίων στην άνω στάθμη E_2 συναρτήσει του χρόνου θα πραγματοποιεί ταλαντώσεις. Δυο παραδείγματα ταλαντώσεων Rabi κατά την εκπομπή φωτονίου φαίνονται στην Εικόνα 8.8.

Επειδή $\sin^2(\Omega_{n+1}t) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2\Omega_{n+1}t)$, η περίοδος των ταλαντώσεων είναι

$$T = \frac{2\pi}{2\Omega_{n+1}} = \frac{\pi}{\Omega_{n+1}} = \frac{\pi}{\left[\left(\frac{\omega - \Omega}{2} \right)^2 + g^2(n+1) \right]^{1/2}} \quad (8.215)$$

Επομένως, στον συντονισμό, όπου $\omega = \Omega$, η περίοδος μεγιστοποιείται σε

$$T = \frac{\pi}{g\sqrt{n+1}}. \quad (8.216)$$



Εικόνα 8.8: Δύο παραδείγματα ταλαντώσεων Rabi κατά την εκπομπή φωτονίου, δηλαδή, η αρχική συνθήκη είναι 4 φωτόνια στην κοιλότητα και 1 ηλεκτρόνιο στην άνω στάθμη. Χρησιμοποιούμε κάποιες αυθαίρετες τιμές για τις παραμέτρους. Δεξιά οι δύο στάθμες εμπλέκονται περισσότερο (η παράμετρος g είναι μεγαλύτερη). Παρουσιάζουμε σε συντονισμό ($\Delta = 0$) κι εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$), τη χρονική εξέλιξη της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα, $\langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle_{(E)} = n + \frac{g^2(n+1)}{\Omega_{n+1}^2} \sin^2(\Omega_{n+1}t)$, αλλά και της αναμενόμενης τιμής του αριθμού των ηλεκτρονίων στην κάτω στάθμη, $P_1(t) = \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle = \frac{g^2(n+1)}{\Omega_{n+1}^2} \sin^2(\Omega_{n+1}t)$, αλλά και στην άνω στάθμη, $P_2(t)$.

Το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως μεταξύ των σταθμών \mathcal{A} , όπως φαίνεται από τις Εξ. 8.214 και 8.209, είναι

$$\mathcal{A} = \frac{g^2(n+1)}{\Omega_{n+1}^2} = \frac{g^2(n+1)}{\left(\frac{\omega-\Omega}{2}\right)^2 + g^2(n+1)} \quad (8.217)$$

Επομένως,

- για $\Omega = \omega$ (συντονισμός) $\Rightarrow \mathcal{A} = 1$,
- για $\Omega \neq \omega$ (μη συντονισμός) $\Rightarrow \mathcal{A} < 1$.

Συμπερασματικά, όπως στην περίπτωση της απορρόφησης φωτονίου, έτσι και στην περίπτωση της εκπομπής φωτονίου, ο αριθμός των φωτονίων στην κοιλότητα, n , η ποσότητα g (Εξ. 8.159) και ο αποσυντονισμός (detuning), που ορίσαμε στην Εξ. 5.54 ως $\Delta := \omega - \Omega$, καθορίζουν το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως και την περίοδο των ταλαντώσεων.

Βιβλιογραφία

- [1] S. Gasiorowicz. *Quantum Physics*. 2nd edition. New York: Wiley, 1996. ISBN: 9780471857372.
- [2] D. A. Steck. *Quantum and Atom Optics*. available online at <http://steck.us/teaching>. University of Oregon: Oregon Center for Optics και Department of Physics, 2012.
- [3] E. T. Jaynes και F. W. Cummings. “Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser”. Στο: *Proceedings of the IEEE* 51 (1963), σσ. 89–109. DOI: [10.1109/PROC.1963.1664](https://doi.org/10.1109/PROC.1963.1664).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 9

ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ II

Σύνοψη

Συνεχίζουμε την περιήγηση στην κβαντική προσέγγιση. Συζητάμε την αναλογία μεταξύ των μεγεθών, τα οποία περιγράφουν τις ταλαντώσεις Rabi στην ημικλασική και στην κβαντική προσέγγιση. Περιγράφουμε τη λύση των σχετικών διαφορικών εξισώσεων με τη γενική μέθοδο των ιδιοτιμών για ένα και για πολλά φωτόνια στην κοιλότητα. Στη συνέχεια, αναλύουμε τις σχέσεις μεταθέσεως των μποζονίων (όπως είναι τα φωτόνια) και τις σχέσεις αντιμεταθέσεως των φερμιονίων (όπως είναι τα ηλεκτρόνια) και διευκρινίζουμε τι είναι μετάθεση και τι αντιμετάθεση. Ακόμα, συζητάμε κάπως τους τελεστές κλίμακας και τη δεύτερη κβάντωση. Τέλος, περιγράφουμε εγκυκλοπαιδικά την πέμπτη κατάσταση της ύλης, δηλαδή το συμπύκνωμα Bose-Einstein.

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Κβαντικής Φυσικής.

9.1 Απορρόφηση φωτονίου: αναλογία μεταξύ των μεγεθών, τα οποία περιγράφουν τις ταλαντώσεις Rabi στην ημικλασική και στην κβαντική προσέγγιση

Ας θυμηθούμε την περίπτωση της απορροφήσεως φωτονίου στο πλαίσιο της κβαντικής προσέγγισης. Είδαμε ότι η αναμενόμενη τιμή τόσο του αριθμού των ηλεκτρονίων σε κάθε στάθμη, όσο και του αριθμού των φωτονίων στην κοιλότητα εκτελεί ταλαντώσεις Rabi με περίοδο (Εξ. 8.197)

$$T = \frac{2\pi}{\sqrt{4g^2n + (\omega - \Omega)^2}},$$

ενώ το μέγιστο ποσοστό μεταβιβάσεως μεταξύ των σταθμών είναι (Εξ. 8.199)

$$\mathcal{A} = \frac{g^2n}{\Omega_n^2} = \frac{g^2n}{\left(\frac{\omega - \Omega}{2}\right)^2 + g^2n}.$$

Αν θυμηθούμε επιπλέον ότι στην Εξ. 8.164 ορίσαμε τη συχνότητα Rabi ως

$$\Omega_R = \frac{g}{2\sqrt{n}},$$

μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε ότι

$$T = \frac{2\pi}{\sqrt{4g^2n + (\omega - \Omega)^2}} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}, \quad \mathcal{A} = \frac{4g^2n}{4g^2n + \Delta^2} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \quad (9.1)$$

Οι εξισώσεις αυτές έχουν την ίδια μορφή με τις Εξισώσεις 5.86 και 5.88, στις οποίες καταλήξαμε αντιμετωπίζοντας την αλληλεπίδραση μεταξύ ΗΜ πεδίου και δισταθμικού συστήματος ημικλασικά. Συνεπώς, υπάρχει **πλήρης αναλογία** μεταξύ ημικλασικής και κβαντικής προσεγγίσεως.

9.2 Απορρόφηση φωτονίου: λύση διαφορικών εξισώσεων με μέθοδο των ιδιοτιμών για ένα και πολλά φωτόνια στην κοιλότητα

Στο Κεφάλαιο 8 είδαμε τις λύσεις του προβλήματος της απορροφήσεως και τις εκπομπές φωτονίου χωρίς να κάνουμε τους υπολογισμούς. Εδώ παραθέτουμε ενδεικτικούς υπολογισμούς με τη μέθοδο των ιδιοτιμών για την απορρόφηση φωτονίου σε 2 περιπτώσεις: ύπαρξη ενός φωτονίου στην κοιλότητα και ύπαρξη n φωτονίων στην κοιλότητα.

Όπως έχουμε δει, το πρόβλημα ανάγεται στην εύρεση των ιδιοτιμών και ιδιοανυσμάτων του πίνακα (βλ. Εξ. 8.190)

$$A = \begin{pmatrix} n\omega & g\sqrt{n} \\ g\sqrt{n} & \Omega + (n-1)\omega \end{pmatrix}, \quad (9.2)$$

όπου έχουμε παραλείψει, χάριν απλότητας, τους δείκτες m που υποδηλώνουν τον ΗΜ τρόπο.

9.2.1 Ένα φωτόνιο στην κοιλότητα

Στην περίπτωση όπου υπάρχει ένα φωτόνιο στην κοιλότητα, η μορφή του πίνακα γίνεται απλούστερη, ήτοι

$$A = \begin{pmatrix} \omega & g \\ g & \Omega \end{pmatrix}. \quad (9.3)$$

Οι ιδιοτιμές του προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της ορίζουσας

$$\det(A - \lambda I),$$

όπου I ο μοναδιαίος 2×2 πίνακας. Συνεπώς,

$$(\omega - \lambda)(\Omega - \lambda) - g^2 = 0 \Rightarrow \lambda^2 - (\omega + \Omega)\lambda + \omega\Omega - g^2 = 0.$$

Άρα, οι ιδιοτιμές είναι

$$\lambda_{2,1} = \frac{\omega + \Omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega - \Omega}{2}\right)^2 + g^2} := H_1 \pm \Omega_1 \quad (9.4)$$

Ας βρούμε τώρα τα ιδιοανύσματα που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές αυτές.

- Για την ιδιοτιμή $\lambda_1 = H_1 - \Omega_1$ έχουμε

$$A\vec{v}_1 = \lambda_1\vec{v}_1 \Rightarrow \begin{pmatrix} \omega & g \\ g & \Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{pmatrix} = (H_1 - \Omega_1) \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{pmatrix} \Rightarrow \left. \begin{aligned} gv_{21} &= (H_1 - \Omega_1 - \omega)v_{11} \\ gv_{11} &= (H_1 - \Omega_1 - \Omega)v_{21} \end{aligned} \right\}.$$

Αντικαθιστώντας τη δεύτερη εξίσωση στην πρώτη, προκύπτει

$$v_{21} = \frac{(H_1 - \Omega_1 - \omega)(H_1 - \Omega_1 - \Omega)}{g^2} v_{21}.$$

Για να έχουμε μη τετριμμένη λύση, θα πρέπει ο λόγος που εμφανίζεται στην παραπάνω σχέση να είναι ίσος με τη μονάδα. Αντικαθιστώντας τους ορισμούς των H_1 και Ω_1 , μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε ότι αυτό ισχύει. Συνεπώς η εκλογή του v_{21} μπορεί να είναι οποιαδήποτε (πλην του μηδενός). Ας επιλέξουμε $v_{21} = 1$. Τότε

$$gv_{11} = (H_1 - \Omega_1 - \Omega) \Rightarrow v_{11} = \frac{\omega - \Omega - 2\Omega_1}{2g}.$$

Οπότε, τελικά,

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \frac{\omega - \Omega - 2\Omega_1}{2g} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (9.5)$$

- Για την ιδιοτιμή $\lambda_2 = H_1 + \Omega_1$, με εντελώς αντίστοιχους συλλογισμούς, προκύπτει ότι

$$\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} \frac{\omega - \Omega + 2\Omega_1}{2g} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (9.6)$$

Υπενθυμίζεται ότι η γενική λύση είναι της μορφής

$$\vec{x}(t) := \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \sigma_1 \vec{v}_1 e^{-i\lambda_1 t} + \sigma_2 \vec{v}_2 e^{-i\lambda_2 t},$$

όπου οι συντελεστές σ_1, σ_2 καθορίζονται από τις αρχικές συνθήκες. Στην περίπτωση της απορροφήσεως φωτονίου, αυτές είναι $c_1(0) = 1, c_2(0) = 0$. Άρα,

$$\left. \begin{aligned} 1 &= \sigma_1 \frac{\omega - \Omega - 2\Omega_1}{2g} + \sigma_2 \frac{\omega - \Omega + 2\Omega_1}{2g} \\ 0 &= \sigma_1 + \sigma_2 \Rightarrow \sigma_2 = -\sigma_1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow 2g = \sigma_1(\omega - \Omega - 2\Omega_1) - \sigma_1(\omega - \Omega + 2\Omega_1) \Rightarrow$$

$$\sigma_1 = -\frac{g}{2\Omega_1} = -\sigma_2. \quad (9.7)$$

Συνεπώς,

$$\begin{aligned} c_2(t) &= -\frac{g}{2\Omega_1} e^{-i(H_1 - \Omega_1)t} + \frac{g}{2\Omega_1} e^{-i(H_1 + \Omega_1)t} \\ &= -\frac{g}{2\Omega_1} e^{-iH_1 t} (e^{i\Omega_1 t} - e^{-i\Omega_1 t}) = -\frac{g}{\Omega_1} e^{-iH_1 t} i \sin(\Omega_1 t) \\ \Rightarrow c_2(t) &= e^{-i\frac{\omega + \Omega}{2} t} \left[-i \frac{g}{\Omega_1} \sin(\Omega_1 t) \right]. \end{aligned}$$

Οπότε προκύπτει ότι

$$|c_2(t)|^2 = \frac{g^2}{\Omega_1^2} \sin^2(\Omega_1 t) \quad (9.8)$$

και

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2 = 1 - \frac{g^2}{\Omega_1^2} \cos^2(\Omega_1 t) \quad (9.9)$$

Οι παραπάνω σχέσεις είναι οι Εξ 8.193 και 8.194 που μελετήσαμε στο Κεφάλαιο 8 για το πρόβλημα της απορρόφησης φωτονίου, για $n = 1$.

9.2.2 Πολλά φωτόνια στην κοιλότητα

Στην περίπτωση που υπάρχουν n φωτόνια στην κοιλότητα, πρέπει να βρούμε τις ιδιοτιμές και τα ιδιοανύσματα του πίνακα

$$A = \begin{pmatrix} n\omega & g\sqrt{n} \\ g\sqrt{n} & \Omega + (n-1)\omega \end{pmatrix}.$$

Οι ιδιοτιμές του προκύπτουν από την απαίτηση μηδενισμού της οριζουσας

$$\det(A - \lambda I),$$

όπου I ο μοναδιαίος 2×2 πίνακας. Συνεπώς,

$$\begin{aligned} (n\omega - \lambda)[\Omega + (n-1)\omega - \lambda] - ng^2 &= 0 \\ \Rightarrow \lambda^2 - [\Omega + (2n-1)\omega]\lambda + n\omega[\Omega + (n-1)\omega] - ng^2 &= 0. \end{aligned}$$

Άρα, οι ιδιοτιμές είναι

$$\lambda_{2,1} = \frac{\Omega + (2n-1)\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega - \Omega}{2}\right)^2 + ng^2} := H_n \pm \Omega_n \quad (9.10)$$

Ας βρούμε τώρα τα ιδιοανύσματα που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές αυτές.

- Για την ιδιοτιμή $\lambda_1 = H_n - \Omega_n$ έχουμε

$$\begin{aligned} A\vec{v}_1 = \lambda_1\vec{v}_1 &\Rightarrow \begin{pmatrix} n\omega & g\sqrt{n} \\ g\sqrt{n} & \Omega + (n-1)\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{pmatrix} = (H_n - \Omega_n) \begin{pmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \left. \begin{aligned} g\sqrt{n}v_{21} &= (H_n - \Omega_n - n\omega)v_{11} \\ g\sqrt{n}v_{11} &= \{H_n - \Omega_n - [\Omega + (n-1)\omega]\} v_{21} \end{aligned} \right\}. \end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τη δεύτερη εξίσωση στην πρώτη, προκύπτει

$$v_{21} = \frac{(H_n - \Omega_n - n\omega) \{H_n - \Omega_n - [\Omega + (n-1)\omega]\}}{ng^2} v_{21}.$$

Για να έχουμε μη τετριμμένη λύση, θα πρέπει ο λόγος που εμφανίζεται στην παραπάνω σχέση να είναι ίσος με τη μονάδα. Αντικαθιστώντας τους ορισμούς των H_n και Ω_n , μπορούμε εύκολα να διαπιστώσουμε ότι αυτό ισχύει. Συνεπώς η εκλογή του v_{21} μπορεί να είναι οποιαδήποτε (πλην του μηδενός). Ας επιλέξουμε $v_{21} = 1$. Τότε

$$g\sqrt{n}v_{11} = (H_n - \Omega_n - [\Omega + (n-1)\omega]) \Rightarrow v_{11} = \frac{\omega - \Omega - 2\Omega_n}{2g\sqrt{n}}.$$

Οπότε, τελικά,

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \frac{\omega - \Omega - 2\Omega_n}{2g\sqrt{n}} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (9.11)$$

- Για την ιδιοτιμή $\lambda_2 = H_n + \Omega_n$, με εντελώς αντίστοιχους συλλογισμούς, προκύπτει ότι

$$\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} \frac{\omega - \Omega + 2\Omega_n}{2g\sqrt{n}} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (9.12)$$

Υπενθυμίζεται ότι η γενική λύση είναι της μορφής

$$\vec{x}(t) := \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} = \sigma_1 \vec{v}_1 e^{-i\lambda_1 t} + \sigma_2 \vec{v}_2 e^{-i\lambda_2 t},$$

όπου οι συντελεστές σ_1, σ_2 καθορίζονται από τις αρχικές συνθήκες. Στην περίπτωση της απορροφήσεως φωτονίου, αυτές είναι $c_1(0) = 1, c_2(0) = 0$. Άρα,

$$\left. \begin{aligned} 1 &= \sigma_1 \frac{\omega - \Omega - 2\Omega_n}{2\sqrt{n}g} + \sigma_2 \frac{\omega - \Omega + 2\Omega_n}{2\sqrt{n}g} \\ 0 &= \sigma_1 + \sigma_2 \Rightarrow \sigma_2 = -\sigma_1 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \sigma_1 \frac{-4\Omega_n}{2\sqrt{n}g} = 1 \Rightarrow \sigma_1 = -\frac{g\sqrt{n}}{2\Omega_n} = -\sigma_2.$$

Συνεπώς,

$$\begin{aligned} c_2(t) &= -\frac{g\sqrt{n}}{2\Omega_n} e^{-i(H_n - \Omega_n)t} + \frac{g\sqrt{n}}{2\Omega_n} e^{-i(H_n + \Omega_n)t} \\ &= -\frac{g\sqrt{n}}{2\Omega_n} e^{-iH_n t} (e^{i\Omega_n t} - e^{-i\Omega_n t}) = -\frac{g\sqrt{n}}{\Omega_n} e^{-iH_n t} i \sin(\Omega_n t) \\ \Rightarrow c_2(t) &= e^{-i\frac{\Omega + (2n-1)\omega}{2}t} \left[-i \frac{g\sqrt{n}}{\Omega_n} \sin(\Omega_n t) \right]. \end{aligned}$$

Οπότε προκύπτει ότι

$$|c_2(t)|^2 = \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \sin^2(\Omega_n t) \quad (9.13)$$

και

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2 = 1 - \frac{ng^2}{\Omega_n^2} \cos^2(\Omega_n t) \quad (9.14)$$

Οι παραπάνω σχέσεις είναι οι Εξ 8.193 και 8.194 που μελετήσαμε στο Κεφάλαιο 8 για το πρόβλημα της απορροφήσεως φωτονίου.

9.3 Σχέσεις μεταθέσεως μποζονίων και σχέσεις αντιμεταθέσεως φερμιονίων

Ας ονομαστεί \hat{a}_m ο τελεστής καταστροφής **μποζονίων** και \hat{a}_m^\dagger ο τελεστής δημιουργίας **μποζονίων** στην κατάσταση ή τον τρόπο m . Για τα μποζόνια ισχύουν οι σχέσεις μεταθέσεως (commutation relations)

$$\begin{aligned} [\hat{a}_m, \hat{a}_\ell^\dagger] &= \delta_{ml}, \\ [\hat{a}_m, \hat{a}_\ell] &= 0, \\ [\hat{a}_m^\dagger, \hat{a}_\ell^\dagger] &= 0. \end{aligned} \quad (9.15)$$

$[A, B]$ ή $[A, B]_-$ είναι ο μεταθέτης (commutator) που όπως είπαμε ορίζεται ως

$$[A, B] = AB - BA, \quad (9.16)$$

οπότε, όταν $[A, B] = 0 \Rightarrow AB - BA = 0 \Rightarrow AB = BA$, δηλαδή οι ποσότητες μετατίθενται, πράγμα που δείχνει την προέλευση της ονομασίας.

Ας ονομαστεί \hat{a}_i ο τελεστής καταστροφής **φερμιονίων** και \hat{a}_i^\dagger ο τελεστής δημιουργίας **φερμιονίων** στην κατάσταση i . Για τα φερμιόνια ισχύουν οι σχέσεις αντιμεταθέσεως (anticommutation relations)

$$\begin{aligned}\{\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger\} &= \delta_{ij}, \\ \{\hat{a}_i, \hat{a}_j\} &= 0, \\ \{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} &= 0.\end{aligned}\tag{9.17}$$

$\{A, B\}$ ή $[A, B]_+$ είναι η αγκύλη Poisson ή αντιμεταθέτης (anticommutator) που όπως είπαμε ορίζεται ως

$$\{A, B\} = AB + BA,\tag{9.18}$$

οπότε, όταν $\{A, B\} = 0 \Rightarrow AB + BA = 0 \Rightarrow AB = -BA$, δηλαδή οι ποσότητες A, B αντιμετατίθενται, πράγμα που δείχνει την προέλευση της ονομασίας. Αν εφαρμόσουμε τη σχέση $\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger\} = 0$ για την ίδια κατάσταση, π.χ. $i = j = r$, έχουμε $\{\hat{a}_r^\dagger, \hat{a}_r^\dagger\} = 0 \Rightarrow \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_r^\dagger = 0$, που σημαίνει ότι δεν μπορούμε να βάλουμε δύο φερμιόνια στην ίδια κατάσταση, πράγμα που είναι η απαγορευτική αρχή Pauli.

9.4 Τελεστές κλίμακας

Στη γραμμική άλγεβρα, καθώς και στις εφαρμογές της στην κβαντική μηχανική, ορίζεται ο τελεστής αναβιβάσεως (raising operator), ο οποίος αυξάνει την ιδιοτιμή ενός άλλου τελεστή και ο τελεστής καταβιβάσεως (lowering operator), ο οποίος μειώνει την ιδιοτιμή ενός άλλου τελεστή. Αυτοί συλλογικά ονομάζονται τελεστές κλίμακας (ladder operators). Στην κβαντομηχανική, ο τελεστής αναβιβάσεως καλείται συχνά τελεστής δημιουργίας (creation operator) και ο τελεστής καταβιβάσεως καλείται συχνά τελεστής καταστροφής (annihilation operator). Γνωστές εφαρμογές των τελεστών κλίμακας είναι στον απλό αρμονικό ταλαντωτή και στη στροφορμή. Σε πολλές περιοχές της φυσικής και της χημείας η χρήση αυτών των τελεστών αντί κυματοσυναρτήσεων είναι γνωστή ως δεύτερη κβάντωση (second quantization).

9.5 Συμπύκνωμα Bose-Einstein

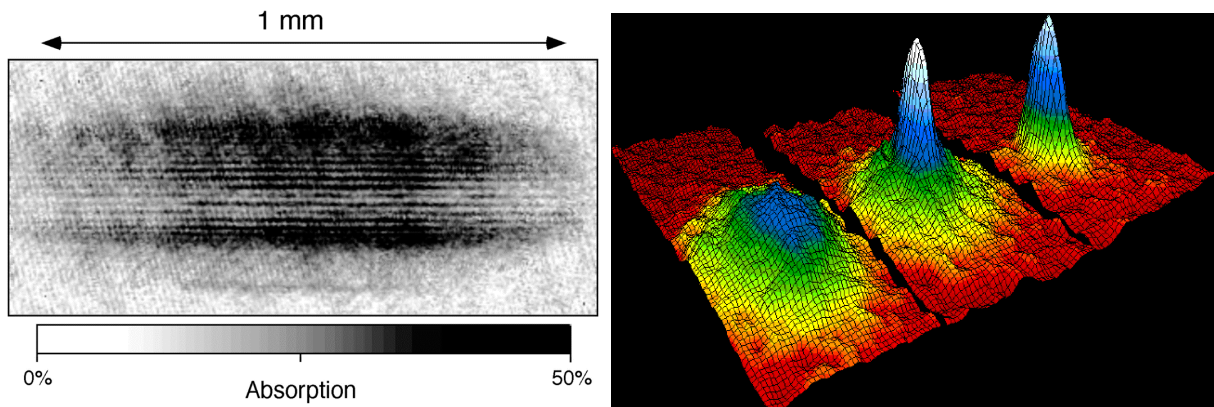
Το **συμπύκνωμα Bose - Einstein** (Bose - Einstein condensate, BEC) είναι μια κατάσταση ενός αραιού αερίου μποζονίων ψυχραϊνόμενου σε θερμοκρασίες κοντά στο απόλυτο μηδέν (0 K ή -273.15°C). Υπό αυτές τις συνθήκες, πολλά από τα μποζόνια καταλαμβάνουν την ίδια κβαντική κατάσταση. Τότε, τα κβαντικά φαινόμενα αντικατοπτρίζονται σε μακροσκοπική κλίμακα. Αυτή η κατάσταση της ύλης προβλέφθηκε από τους **Satyendra Nath Bose** [1] και **Albert Einstein** [2, 3]. Ο Bose, μη μπορώντας να δημοσιεύσει ένα άρθρο του σχετικά με τη στατιστική των κβάντων φωτός (τα οποία τώρα λέμε φωτόνια), το έστειλε στον Einstein, ο οποίος κατάλαβε την αξία του και τον βοήθησε να το δημοσιεύσει, υποβάλλοντάς το για λογαριασμό του Bose [1]. Να σημειωθεί ότι το φωτόνιο έχει σπιν $s = \hbar$. Στη συνέχεια έγραψε κι ο Einstein επάνω στο ίδιο θέμα [2, 3] επεκτείνοντας τις ιδέες του Bose για άλλα συνθετότερα, μαζικά (δηλαδή με μη αμελητέα μάζα) σωματίδια με σπιν s φυσικό πολλαπλάσιο $(0, 1, 2, \dots)$ του \hbar .

Το αποτέλεσμα των προσπαθειών των Bose και Einstein είναι η έννοια του **αερίου Bose** (Bose gas), η οποία κυβερνάται από τη λεγόμενη στατιστική Bose - Einstein, η οποία αφορά τη στατιστική κατανομή πανομοιοτύπων σωματιδίων με σπιν s φυσικό πολλαπλάσιο $(0, 1, 2, \dots)$ του \hbar , που σήμερα ονομάζονται **μποζόνια**. Για τα μποζόνια ΔΕΝ ισχύει κάποια απαγορευτική αρχή, όπως η απαγορευτική αρχή του Pauli για τα φερμιόνια. Έτσι, δύο ή περισσότερα μποζόνια μπορούν να έχουν την ίδια κβαντική κατάσταση ή αλλιώς οσαδήποτε μποζόνια μπορούν να περιγράφονται με την ίδια κυματοσυνάρτηση, πράγμα που λέγεται **συμπύκνωση μποζονίων** (boson condensation). Ψυχραίνοντας μποζόνια σε πολύ χαμηλή θερμοκρασία, αυτά πέπτουν στη

χαμηλότερη διαθέσιμη ενεργειακά κβαντική κατάσταση, δηλαδή «συμπυκνώνονται», πράγμα που οδηγεί σε μια νέα κατάσταση της ύλης. Έτσι, στην περίπτωση των μποζονίων, μπορούν να κατασκευαστούν **συνεκτικά** (coherent) **κύματα** με μακροσκοπικό πλάτος. Τέτοια κύματα μπορούν να περιγραφούν κλασικά. Για παράδειγμα, τα φωτόνια είναι μποζόνια και το αντίστοιχο κλασικό πεδίο είναι το γνωστό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο που ικανοποιεί τις εξισώσεις Maxwell. Έτσι, οσαδήποτε φωτόνια μπορούν καταλαμβάνουν την ίδια κβαντική κατάσταση, όπως εντός των laser.

Μποζόνια είναι οι **φορείς των αλληλεπιδράσεων**, το **μποζόνιο Higgs**, τα συνθετότερα **μεσόνια**, αλλά και **μεγαλύτερα σωματίδια** που έχουν συνολική στροφορμή φυσικό πολλαπλάσιο του \hbar . Αυτό ισχύει ακόμη και για **ολόκληρα άτομα**.

Επί παραδείγματι, το ${}^4_2\text{He}$ έχει πυρήνα δύο πρωτονίων και δύο νετρονίων. Τόσο το πρωτόνιο, όσο και το νετρόνιο είναι βαρυόνια, δηλαδή σύνθετα φερμιόνια με σπιν $\frac{\hbar}{2}$. Διατάσσονται όμως έτσι ώστε η ολική πυρηνική στροφορμή του να είναι $I = 0$. Έτσι, ο πυρήνας του ${}^4_2\text{He}$ είναι μποζόνιο. Το ${}^4_2\text{He}$ έχει ακόμα δύο ηλεκτρόνια που είναι κι αυτά φερμιόνια με σπιν $\frac{\hbar}{2}$. Τα δύο ηλεκτρόνια όμως τοποθετούνται στον υποφλοιό 1s (που αντιστοιχεί σε τροχιακή στροφορμή $L = 0$) με αντίθετα σπιν, οπότε η ολική ηλεκτρονιακή στροφορμή του $J = 0$. Οπότε, επειδή $I = 0$ και $J = 0$ συνεπάγεται ότι το ατομικό σπιν του ${}^4_2\text{He}$ είναι $F = I + J = 0$. Δηλαδή το ουδέτερο άτομο ${}^4_2\text{He}$ είναι μποζόνιο. Άρα, πολλά άτομα ${}^4_2\text{He}$ σε πολύ χαμηλή θερμοκρασία μπορούν να καταλάβουν την ίδια κβαντική κατάσταση (BEC).



Εικόνα 9.1: [Αριστερά] Εικόνα συμβολής δεσμών ατόμων που βρίσκονται σε BEC. Περισσότερες τέτοιες εικόνες μπορείτε να δείτε στις ιστοσελίδες του Atomic Quantum Gases @ MIT. Η εικόνα αυτή (https://www.rle.mit.edu/cua_pub/ketterle_group/Projects_1997/Interference/Straight_Int.jpg) ανήκει στην ομάδα του MIT και είναι μια ευγενική προσφορά του Καθηγητή Wolfgang Ketterle. [Δεξιά] Χρωματική απεικόνιση της κατανομής ταχυτήτων σε BEC ατμών ατόμων ${}^{87}_{37}\text{Rb}$ χαμηλώνοντας τη θερμοκρασία. Από αριστερά προς δεξιά: μόλις πριν την εμφάνιση της BEC, μόλις μετά την εμφάνιση της BEC και σε σχεδόν καθαρή BEC [4]. Εικόνα από [5].

Έτσι, κάποια άτομα, όπως το ${}^4_2\text{He}$, έχουν ολική ατομική στροφορμή φυσικό πολλαπλάσιο του \hbar , είναι δηλαδή μποζόνια και ακολουθούν τη στατιστική Bose-Einstein, οπότε μπορούν να καταλαμβάνουν την ίδια κβαντική κατάσταση, δηλαδή να συμπυκνώνονται και να φτιάχνουν συνεκτικά κύματα με μακροσκοπικό πλάτος! Ακόμα, σε αναλογία με το laser, όπου πολλά φωτόνια έχουν την ίδια κβαντική κατάσταση, μπορεί να κατασκευαστεί και ένα «ατομικό laser» [6]. Το πρώτο κατασκευάστηκε στο MIT από την ομάδα του W. Ketterle το 1996. Θα μπορούσαμε ίσως να προσθέσουμε και όλα τα «ατομικά σπιν» και να πάρουμε το «μοριακό σπιν». Ή να προσθέσουμε όλα τα «μοριακά σπιν» κ.ο.κ.

Η εντυπωσιακότερη ίσως τεκμηρίωση της BEC αφορά συμπύκνωση αερίου ατόμων αλκαλίων (π.χ. ρουβίδιο [4] και νάτριο [7]) με ατομικό σπιν φυσικό πολλαπλάσιο του \hbar . Παλαιότερα, τεκμηρίωσεις της BEC εμφανίστηκαν σε περιπλοκότερα συστήματα, σε χαμηλές θερμοκρασίες. Αντιθέτως, όταν το 1995 η BEC ανακαλύφθηκε σε ψυχρούς ατμούς αλκαλίων (Εικόνα 9.1), οι πειραματικές ενδείξεις ήσαν πολύ ισχυρές. Επίσης,

πρωτοπαρατηρήθηκε συμβολή μεταξύ δύο συμπυκνωμάτων Bose-Einstein ατόμων Na [8], απομακρυσμένων κατά 40 μm , συγκεκριμένα κροσσοί συμβολής υλικών κυμάτων με περίοδο 15 μm , πράγμα που απέδειξε ότι τα άτομα Na συμπεριφέρονται ως φωτόνια σε laser, δηλαδή είναι συνεκτικά. Για εικόνες συμβολής δεσμών ατόμων που βρίσκονται σε BEC δείτε τις ιστοσελίδες του Atomic Quantum Gases @ MIT¹. Το 1997 κατασκευάστηκε το πρώτο παλμικό ατομικό laser [9] και το 2010 επιδείχτηκε BEC σε φωτόνια εντός κοιλότητας [10].

¹https://www.rle.mit.edu/cua_pub/ketterle_group/home.htm

Βιβλιογραφία

- [1] S. N. Bose. “Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese”. Στο: *Zeitschrift fuer Physik* 26 (1924), σσ. 178–181. DOI: [10.1007/BF01327326](https://doi.org/10.1007/BF01327326).
- [2] A. Einstein. “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”. Στο: *Verlag der Königlich-Preussischen Akademie der Wissenschaften* (1924), σσ. 261–267. URL: <http://echo.mpiwg-berlin.mpg.de/MPIWG:DRQK5WYB>.
- [3] A. Einstein. “Quantentheorie des einatomigen idealen Gases”. Στο: *Zweite Abhandlung, Verlag der Königlich-Preussischen Akademie der Wissenschaften* (1925), σσ. 3–14. URL: <http://echo.mpiwg-berlin.mpg.de/MPIWG:BF6V8AT8>.
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman και E. A. Cornell. “Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor”. Στο: *Science* 269 (1995), σσ. 198–201. DOI: [10.1126/science.269.5221.198](https://doi.org/10.1126/science.269.5221.198).
- [5] *Bose Einstein condensate.png*. https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bose_Einstein_condensate.png.
- [6] *The Atom Laser @ MIT in 1997*. https://www.rle.mit.edu/cua_pub/ketterle_group/Projects_1997/Atom_Laser_1997.htm.
- [7] K. B. Davis, M. -O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn και W. Ketterle. “Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms”. Στο: *Physical Review Letters* 75 (1995), σσ. 3969–3973. DOI: [10.1103/PhysRevLett.75.3969](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.3969).
- [8] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H. -J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn και W. Ketterle. “Observation of interference between two Bose condensates”. Στο: *Science* 275 (1997), σσ. 637–641. DOI: [10.1126/science.275.5300.637](https://doi.org/10.1126/science.275.5300.637).
- [9] M. -O. Mewes, M. R. Andrews, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend και W. Ketterle. “Output Coupler for Bose-Einstein Condensed Atoms”. Στο: *Physical Review Letters* 78 (1997), σσ. 582–585. DOI: [10.1103/PhysRevLett.78.582](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.582).
- [10] J. Klaers, J. Schmitt, F. Vewinger και M. Weitz. “Bose–Einstein condensation of photons in an optical microcavity”. Στο: *Nature* 468 (2010), σσ. 545–548. DOI: [10.1038/nature09567](https://doi.org/10.1038/nature09567).

ΤΕΛΕΣΤΗΣ ΚΑΙ ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΥΚΝΟΤΗΤΑΣ

Σύνοψη

Εισαγόμαστε στη συζήτηση για τον τελεστή πυκνότητας και τον πίνακα πυκνότητας. Διακρίνουμε τις καθαρές από τις μεικτές καταστάσεις. Εστιάζουμε στον πίνακα πυκνότητας και στον τελεστή πυκνότητας σε καθαρή κατάσταση δισταθμικού συστήματος. Στη συνέχεια, αναλύουμε τη χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας με την εξίσωση von Neumann. Τέλος, συζητάμε τη μορφή της χρονικής εξέλιξης του πίνακα πυκνότητας παρουσία μηχανισμών αποδιεγέρσεως.

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Κβαντικής Φυσικής.

10.1 Καθαρή κατάσταση και μεικτή κατάσταση

Ίσως σε όλη την κβαντική μηχανική που έχει μελετήσει ο αναγνώστης ή η αναγνώστρια έως τώρα, εξετάστηκαν περιπτώσεις, όπου υπάρχει μία κυματοσυνάρτηση, ας την πούμε σχηματικά $\Psi(\vec{r}, t)$, η οποία περιγράφει το εξεταζόμενο σύστημα. Τότε, το $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ δίνει την πιθανότητα οι συντεταγμένες να βρίσκονται κοντά στη θέση \vec{r} τη χρονική στιγμή t . Αυτή η κυματοσυνάρτηση μπορεί να βρεθεί, τουλάχιστον κατ' αρχήν, από την εξίσωση Schrödinger. Από τη στιγμή που την έχουμε, μπορούμε να υπολογίσουμε την αναμενόμενη τιμή οιοδήποτε τελεστή \hat{A} , ως $\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$. Συνήθως αυτό γίνεται βρίσκοντας μία πλήρη βάση, ας την ονομάσουμε $\{\Phi_k(\vec{r})\}$, όπου k είναι κάποιος συλλογικός κβαντικός αριθμός ικανός να περιγράψει το σύστημα. Επειδή συνήθως μελετάμε συστήματα πεπερασμένου μεγέθους, μπορούμε να λάβουμε τον k διακριτό, οπότε θα χρησιμοποιούμε αθροίσματα \sum_k , αλλά σε άλλες περιπτώσεις θα μπορούσε ο k να είναι συνεχής, οπότε θα χρησιμοποιούσαμε ολοκληρώματα $\int dk$. Αν η βάση μας είναι πλήρης, τότε η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k c_k(t) \Phi_k(\vec{r}). \quad (10.1)$$

Άρα, το πρόβλημα ανάγεται στην εύρεση των συντελεστών $c_k(t)$. Από τη στιγμή που τους υπολογίσουμε, η αναμενόμενη τιμή του τελεστή \hat{A} είναι (για πράξεις δείτε το Παράρτημα B.6)

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \sum_{k,k'} c_k(t) c_{k'}^*(t) A_{k'k} \Rightarrow \quad (10.2)$$

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{k,k'} \rho_{kk'}(t) A_{k'k} \quad (10.3)$$

όπου $A_{kk'}$ είναι το στοιχείο πίνακα του τελεστή \hat{A} μεταξύ των καταστάσεων $|\Phi_k\rangle$ και $|\Phi_{k'}\rangle$ και ορίσαμε

$$\rho_{kk'}(t) = c_k(t) c_{k'}^*(t) \quad (10.4)$$

Άρα, κατ' αρχήν, όλα μπορούν να υπολογιστούν. Μια τέτοια περίπτωση, όπου το σύστημα περιγράφεται από μία κυματοσυνάρτηση, ονομάζεται **καθαρή κατάσταση** (pure state) [1].

Όμως, δεν είναι πάντοτε εφικτό ένα σύστημα να περιγράφεται από μία κυματοσυνάρτηση. Σε πολλές περιπτώσεις το σύστημα για το οποίο ενδιαφερόμαστε είναι συζευγμένο με μια δεξαμενή (reservoir, R), με την οποία μπορεί να ανταλλάσσει θερμότητα, σωματίδια κ.ά. Εάν το ολικό (total, T) σύστημα, δηλαδή το σύστημα για το οποίο ενδιαφερόμαστε και η δεξαμενή είναι απομονωμένα, μπορούμε να ορίσουμε μία κυματοσυνάρτηση για το ολικό σύστημα, ως την πούμε σχηματικά $\Psi_T(\vec{r}, \vec{r}_R, t)$. Εάν δεν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις, θα μπορούσαμε να τη διαχωρίσουμε σε ένα γινόμενο $\Psi(\vec{r}, t) \Psi_R(\vec{r}_R, t)$, πράγμα που δείχνει ότι το τι κάνει το σύστημα για το οποίο ενδιαφερόμαστε είναι ανεξάρτητο από το τι κάνει η δεξαμενή, αφού δεν υπάρχουν αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους. Τότε μπορούμε να διακρίνουμε την $\Psi(\vec{r}, t)$ ως την κυματοσυνάρτηση του συστήματος που μας ενδιαφέρει. Αλλά εάν το σύστημα που μας ενδιαφέρει αλληλεπιδρά με τη δεξαμενή, τότε δεν μπορούμε να διαχωρίσουμε μια κυματοσυνάρτηση του συστήματος που μας ενδιαφέρει και μια κυματοσυνάρτηση της δεξαμενής θερμότητας. Από την άλλη μεριά, μπορεί να μην θέλουμε να εργαστούμε με την $\Psi_T(\vec{r}, \vec{r}_R, t)$, επειδή αυτή περιέχει όλη την πληροφορία για το τι κάνει η δεξαμενή και αυτό μπορεί να μην μας ενδιαφέρει ή να μην το χρειαζόμαστε ή να είναι εξαιρετικά πολύπλοκο. Οπότε, τίθεται το ερώτημα: πώς αντιμετωπίζουμε τέτοιες περιπτώσεις, όπου δεν υπάρχει καλά ορισμένη κυματοσυνάρτηση για το σύστημα, για το οποίο ενδιαφερόμαστε; Μια τέτοια περίπτωση, όπου δεν υπάρχει μια καλά ορισμένη κυματοσυνάρτηση για το σύστημα, για το οποίο ενδιαφερόμαστε ονομάζεται **μεικτή κατάσταση** (mixed state) [1].

Παρ' όλα αυτά, και σε αυτές τις περιπτώσεις, υπάρχει οδός να ακολουθήσουμε. Θα υποθέσουμε ότι το σύστημα για το οποίο ενδιαφερόμαστε έχει πιθανότητα w_i να βρίσκεται στην κατάσταση που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση $\Psi_i(\vec{r}, t)$. Δηλαδή, αντί να λέμε ότι το σύστημα για το οποίο ενδιαφερόμαστε βρίσκεται με βεβαιότητα με μια κατάσταση, η οποία περιγράφεται από μια κυματοσυνάρτηση, το επιτρέπουμε να βρίσκεται, με διαφορετικές πιθανότητες, σε διαφορετικές καταστάσεις, οι οποίες περιγράφονται από διαφορετικές κυματοσυναρτήσεις. Φυσικά, θα πρέπει η ολική πιθανότητα να ισούται με τη μονάδα, δηλαδή

$$\sum_i w_i = 1. \quad (10.5)$$

Σε αυτήν τη μεικτή κατάσταση, η αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή \hat{A} θα είναι

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i w_i \langle \hat{A} \rangle_i, \quad (10.6)$$

αφού το σύστημα βρίσκεται με πιθανότητα w_i στην κατάσταση $\Psi_i(\vec{r}, t)$, στην οποία η αναμενόμενη τιμή του τελεστή \hat{A} είναι

$$\langle \hat{A} \rangle_i = \langle \Psi_i(t) | \hat{A} | \Psi_i(t) \rangle = \int d^3r \Psi_i^*(\vec{r}, t) \hat{A} \Psi_i(\vec{r}, t). \quad (10.7)$$

Αναλυτικότερες πράξεις στο Παράρτημα B.6. Όμως, κάθε μία από τις πιθανές κυματοσυναρτήσεις $\Psi_i(\vec{r}, t)$ μπορεί να αναλυθεί με τη βοήθεια της πλήρους βάσεως $\{\Phi_k(\vec{r})\}$ ως

$$\Psi_i(\vec{r}, t) = \sum_k c_k^i(t) \Phi_k(\vec{r}), \quad (10.8)$$

με

$$\sum_k |c_k^i(t)|^2 = 1. \quad (10.9)$$

Επομένως, εάν γνωρίζουμε αυτούς τους συντελεστές $c_k^i(t)$ και τις πιθανότητες w_i , μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_i w_i \int d^3r \sum_{k'} c_{k'}^{i*}(t) \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \hat{A} \sum_k c_k^i(t) \Phi_k(\vec{r}) \\ &= \sum_i w_i \sum_{k,k'} c_{k'}^{i*}(t) c_k^i(t) \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \hat{A} \Phi_k(\vec{r}) \\ &= \sum_i w_i \sum_{k,k'} c_{k'}^{i*}(t) c_k^i(t) A_{k'k} = \sum_{k,k'} \left[\sum_i w_i c_k^i(t) c_{k'}^{i*}(t) \right] A_{k'k} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle \hat{A} \rangle = \sum_{k,k'} \rho_{kk'}(t) A_{k'k}} \quad (10.10)$$

όπου ορίσαμε

$$\boxed{\rho_{kk'}(t) = \sum_i w_i c_k^i(t) c_{k'}^{i*}(t)} \quad (10.11)$$

Παρατηρούμε ότι η Εξ. 10.4, η οποία ισχύει για μια καθαρή κατάσταση, είναι μια μερική περίπτωση της Εξ. 10.11, η οποία ισχύει γενικά για μια μεικτή κατάσταση. Δηλαδή, όταν είμαστε σε καθαρή κατάσταση, τότε έχουμε μόνο ένα πιθανό i με πιθανότητα $w_i = 1$, οπότε η Εξ. 10.11 ταυτοποιείται με την Εξ. 10.4. Λαμβάνοντας υπ' όψιν την προηγούμενη παρατήρηση, οι εκφράσεις των Εξ. 10.3, 10.10, οι οποίες δίνουν την αναμενόμενη τιμή του τελεστή \hat{A} , ταυτίζονται. Ο πίνακας ρ του οποίου τα στοιχεία δίνονται από τις Εξ. 10.4, 10.11 ονομάζεται **πίνακας πυκνότητας** (density matrix). Βλέπουμε, λοιπόν, ότι με τη βοήθεια του πίνακα πυκνότητας μπορούμε να περιγράψουμε καθαρές αλλά και μεικτές καταστάσεις.

10.2 Πίνακας πυκνότητας και τελεστής πυκνότητας

Ο **πίνακας πυκνότητας** (density matrix) ρ , ο οποίος είναι μια αναπαράσταση του **τελεστή πυκνότητας** (density operator) $\hat{\rho}$, αποτελεί μία πιο γενική περιγραφή ενός κβαντικού συστήματος από την περιγραφή που κάνουμε με τη βοήθεια των κυματοσυναρτήσεων $\Psi(\vec{r}, t)$ ή των καταστατικών ανυσμάτων $|\Psi(t)\rangle$. Συχνά, με κάποια χαλαρότητα, χρησιμοποιούνται αδιακρίτως οι όροι πίνακας πυκνότητας και τελεστής πυκνότητας. Ο πίνακας πυκνότητας και ο τελεστής πυκνότητας, ως φορμαλισμός, εισήχθησαν ανεξάρτητα από τους John von Neumann [2] και Lev Landau [3] το 1927. Τόσο ο πίνακας, όσο και ο τελεστής είναι ερμιτιανοί και ίχνους ίσου με τη μονάδα [4].

Ενώ μία κυματοσυνάρτηση (wavefunction) ή ένα καταστατικό διάνυσμα (state vector) αρκούν για να περιγραφεί ένα κβαντικό σύστημα σε μια καθαρή κβαντική κατάσταση, ο πίνακας πυκνότητας μπορεί να περιγράψει ένα κβαντικό σύστημα και σε μια μεικτή κβαντική κατάσταση. Είναι για παράδειγμα χρήσιμος και σε περιπτώσεις απώλειας συνοχής (decoherence) λόγω αλληλεπιδράσεως του συστήματος για το οποίο ενδιαφερόμαστε με δεξαμενή, με την οποία μπορεί να ανταλλάσσει θερμότητα ή σωματίδια.

Οι Εξ. 10.3, 10.10 δείχνουν ότι για να υπολογίσουμε αναμενόμενες τιμές τελεστών χρειαζόμαστε μόνο τις ποσότητες $\rho_{kk'}(t)$ των Εξ. 10.4, 10.11, αντί για όλα τα Ψ_i και w_i . Εφ' όσον οι αναμενόμενες τιμές είναι εν τέλει αυτό που προσδοκούμε, όλη η χρήσιμη πληροφορία για το σύστημα που μας ενδιαφέρει κωδικοποιείται στα στοιχεία του πίνακα πυκνότητας $\rho_{kk'}(t)$. Επομένως, ο τελεστής πυκνότητας $\hat{\rho}$ μπορεί να οριστεί τέτοιος ώστε

$$\langle \Phi_k(\vec{r}) | \hat{\rho}(t) | \Phi_{k'}(\vec{r}) \rangle = \rho_{kk'}(t) \quad (10.12)$$

Με αυτόν τον ορισμό, οι Εξ. 10.3, 10.10 γράφονται

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_{k,k'} \rho_{kk'}(t) A_{k'k} = \text{Tr}(\rho(t) \cdot A) \quad (10.13)$$

Συμβολίζουμε με Tr και ονομάζουμε ίχνος (trace) ενός τετραγωνικού πίνακα το άθροισμα των διαγωνίων στοιχείων του. Η Εξ. 10.13 ισχύει διότι $\sum_{k'} \rho_{kk'}(t) A_{k'k}$ είναι το διαγώνιο kk στοιχείο του πίνακα που προκύπτει από τον πολλαπλασιασμό των πινάκων $\rho(t)$ και A . Οπότε, αν αθροίσουμε αυτά τα διαγώνια στοιχεία, δηλαδή αθροίσουμε στα k , παίρνουμε το ίχνος του πίνακα $\rho(t) \cdot A$, το οποίο συμβολίζουμε $\text{Tr}(\rho(t) \cdot A)$. Το ίχνος ενός πίνακα ισούται με το άθροισμα των ιδιοτιμών του και παραμένει αναλλοίωτο, εάν αλλάξουμε βάση. Ας δούμε μερικές ιδιότητες του τελεστή πυκνότητας.

1. Μπορούμε να δώσουμε έναν εναλλακτικό ορισμό του τελεστή πυκνότητας για καθαρή κατάσταση, δηλαδή η Εξ. 10.4 μπορεί να γραφτεί και ως

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle \langle \Psi| \quad (10.14)$$

αφού, αν αναπαραστήσουμε

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \end{bmatrix}$$

και άρα

$$\langle \Psi| = [c_1^*(t) \quad c_2^*(t) \quad \dots],$$

προκύπτει

$$|\Psi\rangle \langle \Psi| = \begin{bmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ \vdots \end{bmatrix} [c_1^*(t) \quad c_2^*(t) \quad \dots] = \begin{bmatrix} c_1(t)c_1^*(t) & c_1(t)c_2^*(t) & \dots \\ c_2(t)c_1^*(t) & c_2(t)c_2^*(t) & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \rho. \quad (10.15)$$

2. Η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στην κατάσταση ℓ της βάσεως $\{\Phi_k(r)\}$ είναι $\rho_{\ell\ell}(t)$. Αυτό προκύπτει από τον ορισμό της Εξ. 10.11 για $k = k' = \ell$. Δηλαδή,

$$\rho_{\ell\ell}(t) = \sum_i w_i c_\ell^i(t) c_\ell^{i*}(t) = \sum_i w_i |c_\ell^i(t)|^2. \quad (10.16)$$

Κάθε όρος του αθροίσματος αυτού είναι η πιθανότητα να βρίσκεται το σύστημα στην κατάσταση i επί την πιθανότητα, όντας στην i , να βρίσκεται στην κατάσταση ℓ της βάσεως $\{\Phi_k(r)\}$. Άρα, το άθροισμα είναι η συνολική πιθανότητα να βρίσκεται το σύστημα στην κατάσταση ℓ της βάσεως $\{\Phi_k(r)\}$.

3. Το ίχνος του πίνακα πυκνότητας είναι ίσο με τη μονάδα, δηλαδή

$$\text{Tr}(\rho(t)) = 1. \quad (10.17)$$

Αυτό προκύπτει από την Εξ. 10.16 αθροίζοντας στα ℓ , δηλαδή

$$\sum_{\ell} \rho_{\ell\ell}(t) = \sum_{\ell} \sum_i w_i |c_{\ell}^i(t)|^2 = \sum_i w_i \sum_{\ell} |c_{\ell}^i(t)|^2 = \sum_i w_i = 1, \quad (10.18)$$

διότι $\sum_{\ell} |c_{\ell}^i(t)|^2 = 1$ (Εξ. 10.9) και $\sum_i w_i = 1$ (Εξ. 10.5). Εναλλακτικά, μπορούμε να πάρουμε την Εξ. 10.13 για $\hat{A} = \hat{1}$, όπου $\hat{1}$ είναι ο μοναδιαίος τελεστής, οπότε

$$\langle \hat{1} \rangle = \text{Tr}(\rho(t) \cdot 1) = \text{Tr}(\rho(t)) \quad (10.19)$$

και να παρατηρήσουμε ότι η αναμενόμενη τιμή του μοναδιαίου τελεστή είναι 1. Αυτή η ιδιότητα ουσιαστικά αντικαθιστά τη συνθήκη κανονικοποίησης της κυματοσυναρτήσεως ενός συστήματος που βρίσκεται σε μια καθαρή κατάσταση.

4. Ο τελεστής πυκνότητας είναι ερμιτιανός, $\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger$, δηλαδή για τα στοιχεία του πίνακα πυκνότητας ισχύει $\rho_{kk'} = \rho_{k'k}^*$, το οποίο προκύπτει κατευθείαν παίρνοντας το μιγαδικό συζυγές των Εξ. 10.4, 10.11.
5. Ο τελεστής πυκνότητας $\hat{\rho}$ είναι θετικά ημι-ορισμένος (positive semidefinite), δηλαδή οι ιδιοτιμές του ρ είναι ≥ 0 . Αυτό προκύπτει ως εξής: Αφού ο τελεστής $\hat{\rho}$ είναι ερμιτιανός, υπάρχει μία πλήρης βάση $\{\Phi_n(\vec{r})\}$ στην οποία ο πίνακας ρ είναι διαγώνιος. Αφού ο τελεστής $\hat{\rho}$ είναι ερμιτιανός, οι ιδιοτιμές του πρέπει να είναι πραγματικές. Από την ιδιότητα (2) γνωρίζουμε ότι αυτές οι ιδιοτιμές, οι οποίες είναι τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα ρ στη βάση $\{\Phi_n(\vec{r})\}$, αντιπροσωπεύουν πιθανότητες, οπότε θα είναι όχι μόνο πραγματικές αλλά και θετικές ή μηδενικές. Επειδή ο πίνακας ρ είναι διαγώνιος σε αυτήν τη βάση, $\rho_{n,n'} = \delta_{n,n'} \rho_n$, ρ_n είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή, η οποία από την ιδιότητα (2), είναι και η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στην κατάσταση n .
6. $\text{Tr}(\rho^2) \leq 1$. Αυτό αποδεικνύεται ως εξής: Αφού το ίχνος δεν εξαρτάται από τη βάση, στην οποία το υπολογίζουμε, ας το υπολογίσουμε στη βάση, όπου ο πίνακας ρ είναι διαγώνιος, $\{\Phi_n(\vec{r})\}$. Οπότε, $\text{Tr}(\rho^2) = \sum_n \rho_n^2$. Τα ρ_n , όμως, είναι πιθανότητες, οπότε $0 \leq \rho_n \leq 1$, άρα $\sum_n \rho_n^2 \leq (\sum_n \rho_n)^2 = (\text{Tr}(\rho))^2 = 1^2 = 1$.
7. Όταν το σύστημα βρίσκεται σε καθαρή κατάσταση, τότε $\text{Tr}(\rho^2) = 1$. Αυτό ισχύει λόγω της ιδιότητας (1). Δηλαδή για καθαρή κατάσταση, ισχύει η Εξ. 10.14

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle \langle \Psi|,$$

οπότε

$$\hat{\rho}^2 = |\Psi\rangle \langle \Psi| |\Psi\rangle \langle \Psi| = |\Psi\rangle \langle \Psi| = \hat{\rho},$$

οπότε, $\text{Tr}(\rho^2) = \text{Tr}(\rho) = 1$, λόγω της ιδιότητας (3). Έτσι, η τιμή του $\text{Tr}(\rho^2)$ μας λέει αν το σύστημα βρίσκεται σε καθαρή κατάσταση ($\text{Tr}(\rho^2) = 1$) ή σε μεικτή κατάσταση ($\text{Tr}(\rho^2) < 1$).

Τέλος, χρειαζόμαστε κάτι ανάλογο με την εξίσωση Schrödinger. Όταν βρισκόμαστε σε καθαρή κατάσταση, η εξίσωση Schrödinger μας επιτρέπει να βρίσκουμε την κυματοσυναρτήση σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή, εφ' όσον τη γνωρίζουμε κατά την αρχική χρονική στιγμή. Θα επιθυμούσαμε μια παρόμοια εξίσωση που να μας δίνει τον $\hat{\rho}(t)$, εάν γνωρίζουμε τον $\hat{\rho}(0)$. Αυτή η εξίσωση υπάρχει, ονομάζεται **εξίσωση Liouville-von Neumann** και είναι η

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)], \quad (10.20)$$

όπου το $[\ , \]$ δηλώνει μεταθέτη και \hat{H} είναι η Χαμιλτονιανή του συστήματος. Δείτε παρακάτω τις Εξ. 10.31 ή 10.39. Πρέπει να προσέξουμε ότι για να χρησιμοποιηθεί, θα πρέπει να υπάρχει Χαμιλτονιανή του συστήματος (δηλαδή το σύστημα να είναι απομονωμένο). Εάν το σύστημα αλληλεπιδρά με δεξαμενή, τότε πρέπει να συμπεριλάβουμε το αποτέλεσμα της αλληλεπιδράσεως στην εξέλιξη του τελεστή πυκνότητας. Δείτε για παράδειγμα την Εξ. 10.53.

10.3 Πίνακας πυκνότητας και τελεστής πυκνότητας σε καθαρή κατάσταση δισταθμικού συστήματος

Κατά τους συμβολισμούς που χρησιμοποιήσαμε στα προηγούμενα κεφάλαια, η κατάσταση ενός δισταθμικού συστήματος μπορεί να περιγραφεί από την εξίσωση

$$|\Psi(t)\rangle = c_1(t)|\downarrow\rangle + c_2(t)|\uparrow\rangle = c_1(t)|\Phi_1\rangle + c_2(t)|\Phi_2\rangle. \quad (10.21)$$

Πολλαπλασιάζοντας με $\langle\vec{r}|$,

$$\langle\vec{r}|\Psi(t)\rangle = c_1(t)\langle\vec{r}|\downarrow\rangle + c_2(t)\langle\vec{r}|\uparrow\rangle = c_1(t)\langle\vec{r}|\Phi_1\rangle + c_2(t)\langle\vec{r}|\Phi_2\rangle,$$

παίρνουμε στην αναπαράσταση θέσεως

$$\Psi(\vec{r}, t) = c_1(t)\Phi_1(\vec{r}) + c_2(t)\Phi_2(\vec{r}). \quad (10.22)$$

Έτσι, η πιθανότητα να βρεθεί το ηλεκτρόνιο στη θεμελιώδη ή στη διεγερμένη στάθμη εκφράζεται από τα

$$\boxed{|c_1(t)|^2 = c_1(t)c_1(t)^* \quad \text{και} \quad |c_2(t)|^2 = c_2(t)c_2(t)^*} \quad (10.23)$$

Ας υπολογίσουμε τη μέση τιμή της διπολικής ροπής στην κατάσταση 10.22. Επειδή $\hat{p} = -e\vec{r} = -e\vec{r}$, έχουμε

$$\begin{aligned} \langle\hat{p}\rangle &= \int dV (c_1^*(t)\Phi_1^*(\vec{r}) + c_2^*(t)\Phi_2^*(\vec{r})) (-e\vec{r}) (c_1(t)\Phi_1(\vec{r}) + c_2(t)\Phi_2(\vec{r})) \\ &= |c_1(t)|^2 \int dV \Phi_1^*(\vec{r})(-e\vec{r})\Phi_1(\vec{r}) + c_1^*(t)c_2(t) \int dV \Phi_1^*(\vec{r})(-e\vec{r})\Phi_2(\vec{r}) \\ &\quad + c_2^*(t)c_1(t) \int dV \Phi_2^*(\vec{r})(-e\vec{r})\Phi_1(\vec{r}) + |c_2(t)|^2 \int dV \Phi_2^*(\vec{r})(-e\vec{r})\Phi_2(\vec{r}). \end{aligned}$$

Άρα,

$$\langle\hat{p}\rangle = c_1^*(t)c_2(t)\vec{p}_{12} + c_2^*(t)c_1(t)\vec{p}_{21}, \quad (10.24)$$

διότι

$$\int dV \Phi_1^*(\vec{r})(-e\vec{r})\Phi_1(\vec{r}) = 0 \quad \text{και} \quad \int dV \Phi_2^*(\vec{r})(-e\vec{r})\Phi_2(\vec{r}) = 0,$$

ενώ

$$\begin{aligned} \vec{p}_{12} &= \int dV \Phi_1^*(\vec{r})(-e\vec{r})\Phi_2(\vec{r}) \\ \vec{p}_{21} &= \int dV \Phi_2^*(\vec{r})(-e\vec{r})\Phi_1(\vec{r}). \end{aligned}$$

Κι επειδή

$$\vec{p}_{21} = \vec{p}_{12}^*,$$

η μέση τιμή της διπολικής ροπής $\langle\hat{p}\rangle$ είναι πραγματικός αριθμός, ως άθροισμα δύο συζυγών μιγαδικών αριθμών.

Στην Εξ. 10.24 εμφανίστηκαν οι ποσότητες

$$\boxed{c_1(t)^*c_2(t) \quad \text{και} \quad c_2(t)^*c_1(t)} \quad (10.25)$$

Η Εξ. 10.23 είναι οι «διαγώνιοι όροι» και η Εξ. 10.25 είναι οι «μη διαγώνιοι όροι» του, στη συγκεκριμένη περίπτωση 2×2 , πίνακα πυκνότητας, ο οποίος είναι

$$\boxed{\rho = \begin{bmatrix} c_1c_1^* & c_1c_2^* \\ c_2c_1^* & c_2c_2^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{bmatrix}} \quad (10.26)$$

όπου παραλείψαμε, διότι εννοείται, την εξάρτηση από τον χρόνο. Δηλαδή το στοιχείο πίνακα του πίνακα πυκνότητας είναι το

$$\rho_{nm} := c_n c_m^* \quad (10.27)$$

Κι επειδή μπορούμε να αναπαραστήσουμε

$$|\Psi\rangle = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (10.28)$$

και

$$\langle\Psi| = [c_1^* \quad c_2^*], \quad (10.29)$$

προκύπτει

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} [c_1^* \quad c_2^*] = \begin{bmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{bmatrix} = \rho. \quad (10.30)$$

10.4 Η χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας: η εξίσωση von Neumann

Η εξίσωση von Neumann ή αλλιώς εξίσωση Liouville-von Neumann περιγράφει τη χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας. Έχει τη μορφή

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}], \quad (10.31)$$

όπου το $[\ , \]$ δηλώνει μεταθέτη.

Ας αποδείξουμε τώρα την Εξ. 10.31. Από την Εξ. 10.27 προκύπτει ο ρυθμός μεταβολής ενός στοιχείου του πίνακα πυκνότητας

$$\dot{\rho}_{nm} = \dot{c}_n c_m^* + c_n \dot{c}_m^*. \quad (10.32)$$

Εννοείται ότι τα c_n^* και \dot{c}_n^* μπορούν να πραγματοποιηθούν με οιαδήποτε σειρά, διότι αν π.χ. $z = \alpha + i\beta$, $z \in \mathbb{C}$, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, τότε $z^* = \alpha - i\beta$, $\dot{z} = \dot{\alpha} + i\dot{\beta}$, και $(\dot{z}^*) = \dot{\alpha} - i\dot{\beta} = (\dot{z})^*$. Από την εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

και την Εξ. 10.22, προκύπτει

$$i\hbar \dot{c}_n = \sum_k c_k H_{nk}. \quad (10.33)$$

Χρησιμοποιήσαμε τον ορισμό του στοιχείου πίνακα ενός τελεστή (Εξ. 5.32) και την ορθοκανονικότητα των $\Phi_k(\vec{r})$, δηλαδή ότι $\int dV \Phi_n(\vec{r})^* \Phi_k(\vec{r}) = \delta_{nk}$. Οπότε,

$$-i\hbar \dot{c}_n^* = \sum_k c_k^* H_{nk}^*. \quad (10.34)$$

Αλλά $H_{nk}^* = H_{kn}$, αφού η Χαμιλτονιανή είναι ερμιτιανός τελεστής. Συνδυάζοντας τα παραπάνω, προκύπτει η χρονική εξέλιξη του στοιχείου πίνακα του πίνακα πυκνότητας

$$i\hbar \dot{\rho}_{nm} = \sum_k (H_{nk} \rho_{km} - \rho_{nk} H_{km}) \quad (10.35)$$

Σε λίγο διαφορετική διατύπωση, αν πάρουμε τη χρονική εξέλιξη στον γενικό ορισμό (Εξ. 10.14), προκύπτει

$$\dot{\hat{\rho}} = |\dot{\Psi}\rangle\langle\Psi| + |\Psi\rangle\langle\dot{\Psi}|, \quad (10.36)$$

ενώ από την εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar|\dot{\Psi}\rangle = \hat{H}|\Psi\rangle \quad (10.37)$$

προκύπτει

$$-i\hbar\langle\dot{\Psi}| = \langle\Psi|\hat{H}^\dagger. \quad (10.38)$$

Αλλά $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$, αφού η Χαμιλτονιανή είναι ερμιτιανός τελεστής. Συνδυάζοντας τα παραπάνω, προκύπτει η χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας

$$i\hbar\dot{\rho} = \hat{H}|\Psi\rangle\langle\Psi| - |\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{H} = \hat{H}\rho - \rho\hat{H},$$

ήτοι συνοπτικότερα,

$$\boxed{i\hbar\dot{\rho} = [\hat{H}, \rho]} \quad (10.39)$$

που είναι η Εξ. 10.31.

Ας σημειωθεί ότι κατά τον ορισμό του στοιχείου πίνακα ενός τελεστή (Εξ. 5.32)

$$H_{nk} = \int dV \Phi_n(\vec{r})^* \hat{H} \Phi_k(\vec{r}). \quad (10.40)$$

Ας πούμε ότι έχουμε μια Χαμιλτονιανή διαταραγμένου δισταθμικού συστήματος, όπως στην Εξ. 5.19

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t),$$

όπου $U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)$ είναι η δυναμική ενέργεια της διαταραχής και \hat{H}_0 είναι η Χαμιλτονιανή του αδιατάρακτου δισταθμικού συστήματος. Τότε, από την Εξ. 10.40 και την Εξ. 5.19, προκύπτει

$$\begin{aligned} H_{nk} &= \int dV \Phi_n(\vec{r})^* \hat{H}_0 \Phi_k(\vec{r}) + \int dV \Phi_n(\vec{r})^* U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) \Rightarrow \\ H_{nk} &= E_k \delta_{nk} + U_{\mathcal{E}nk}(t). \end{aligned} \quad (10.41)$$

Αν συνδυάσουμε τις Εξ. 10.33 και 10.41, προκύπτει

$$i\hbar\dot{c}_n = c_n E_n + \sum_k c_k U_{\mathcal{E}nk}(t). \quad (10.42)$$

Σε δισταθμικό σύστημα, κι αν έχουμε προσέγγιση διπόλου, οπότε τα διαγώνια $U_{\mathcal{E}kk}(t)$ μηδενίζονται (Ενότητα 5.3, Εξ. 5.48), προκύπτουν

$$i\hbar\dot{c}_1 = E_1 c_1 + U_{\mathcal{E}12}(t) c_2, \quad (10.43)$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = E_2 c_2 + U_{\mathcal{E}21}(t) c_1. \quad (10.44)$$

Για πραγματικές $\Phi_k(\vec{r})$, $U_{\mathcal{E}21}(t) = U_{\mathcal{E}12}(t)$.

10.5 Η χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας παρουσία μηχανισμών αποδιεγέρσεως

Οι Εξ. 10.43 και 10.44 που μόλις βρήκαμε στην Ενότητα 10.4 μπορούν να τροποποιηθούν, ώστε να συμπεριληφθούν οι αποδιεγέρσεις των ενεργειακών σταθμών 1 και 2, οι οποίες μπορεί να οφείλονται είτε σε αυθόρμητη εκπομπή είτε σε άλλους πιθανούς μηχανισμούς, όπως π.χ. σε συγκρούσεις με τα άτομα του αερίου μείγματος σε ένα laser αερίου. Όπως θα δούμε στο Κεφάλαιο 11, η γρήγορη αποδιέγερση της κατώτερης στάθμης (1) συμβάλει στην επίτευξη αναστροφής πληθυσμού. Μάλιστα θα δούμε (Εξ. 11.42) ότι για τη λειτουργία ενός laser θα πρέπει ο χρόνος ζωής της ανώτερης στάθμης (2) να είναι μεγαλύτερος του χρόνου ζωής της κατώτερης στάθμης (1), ήτοι $t_2 > t_1$. Η συμπερίληψη των αποδιεγέρσεων των ενεργειακών σταθμών 1 και 2 γίνεται

προσθέτοντας στη Χαμιλτονιανή του διαταραγμένου δισταθμικού συστήματος, δηλαδή στην Εξ. 5.19, τον όρο

$$-\frac{i\hbar}{2}\hat{\Gamma}, \quad (10.45)$$

όπου ο τελεστής $\hat{\Gamma}$ έχει την ιδιότητα $\hat{\Gamma}\Phi_k(\vec{r}) = \gamma_k\Phi_k(\vec{r})$, $\gamma_k \in \mathbb{R}$. Δηλαδή

$$\Gamma_{nk} = \gamma_k\delta_{nk} \quad (10.46)$$

ή σε μορφή πίνακα

$$\hat{\Gamma} = \begin{bmatrix} \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_2 \end{bmatrix}. \quad (10.47)$$

Έτσι η Χαμιλτονιανή γίνεται

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{i\hbar}{2}\hat{\Gamma} + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t). \quad (10.48)$$

Τότε η Εξ. 10.41 τροποποιείται σε

$$H_{nk} = E_k\delta_{nk} + U_{\mathcal{E}nk}(t) - \frac{i\hbar}{2}\gamma_k\delta_{nk}. \quad (10.49)$$

Επομένως, χρησιμοποιώντας την Εξ. 10.33 και την Εξ. 10.49 λαμβάνουμε

$$i\hbar\dot{c}_n = c_n E_n + \sum_k c_k U_{\mathcal{E}nk}(t) - \frac{i\hbar}{2}c_n \gamma_n. \quad (10.50)$$

Επομένως, αν λάβουμε υπ' όψιν τους μηχανισμούς αποδιεγέρσεως, σε δισταθμικό σύστημα, οι Εξ. 10.43 και 10.44 αντικαθίστανται από τις

$$i\hbar\dot{c}_1 = E_1c_1 + U_{\mathcal{E}12}(t)c_2 - \frac{i\hbar}{2}\gamma_1c_1, \quad (10.51)$$

$$i\hbar\dot{c}_2 = E_2c_2 + U_{\mathcal{E}21}(t)c_1 - \frac{i\hbar}{2}\gamma_2c_2. \quad (10.52)$$

Χρησιμοποιώντας τις Εξ. 10.51 και 10.52, κι υποθέτοντας ότι $U_{\mathcal{E}21}(t) = U_{\mathcal{E}12}(t)$, μπορεί να αποδειχθεί ότι η χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας με μηχανισμούς αποδιεγέρσεως, δίνεται από την εξίσωση

$$\boxed{i\hbar\dot{\rho} = [\hat{H}, \rho] - \frac{i\hbar}{2}[\hat{\Gamma}, \rho]} \quad (10.53)$$

Υπενθυμίζεται ότι $[,]$ σημαίνει μεταθέτης και $\{ , \}$ αντιμεταθέτης.

Βιβλιογραφία

- [1] M. I. Berciu. *Notes on Statistical Mechanics*. Vancouver, Canada: Department of Physics και Astronomy, University of British Columbia, 2007. URL: <http://www.phas.ubc.ca/~berciu/TEACHING/>.
- [2] J. von Neumann. “Wahrscheinlichkeitstheoretischer Aufbau der Quantenmechanik”. Στο: *Göttinger Nachrichten* 1 (1927), σσ. 245–272.
- [3] L. Landau. “Das Dampfungproblem in der Wellenmechanik”. Στο: *Zeitschrift für Physik* 45 (1927), σσ. 430–441.
- [4] U. Fano. “Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques”. Στο: *Reviews of Modern Physics* 29 (1957), σσ. 74–93.

LASER

Σύνοψη

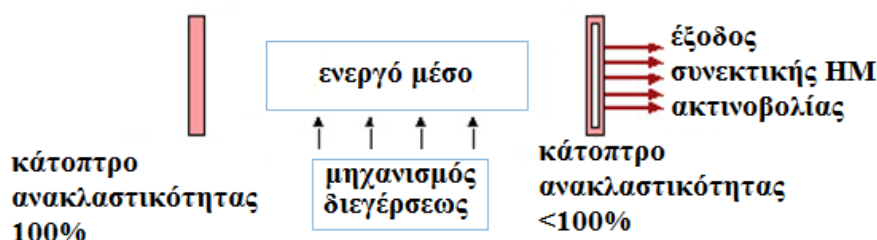
Στην αρχή αναλύουμε τα βασικά μέρη ενός LASER. Ως παράδειγμα, εξετάζουμε το LASER He-Ne. Εξάγουμε τις εξισώσεις ρυθμών για τους πληθυσμούς των σταθμών, των συμμετεχουσών στην εκπομπή συνεκτικής ΗΜ ακτινοβολίας, και για την πυκνότητα ακτινοβολίας στην κοιλότητα. Εκτιμούμε τον αριθμό των διαμήκων τρόπων της κοιλότητας εντός του εύρους γραμμής εκπομπής συνεκτικής ΗΜ ακτινοβολίας. Ευρίσκουμε τους πληθυσμούς των σταθμών και την πυκνότητα ΗΜ ακτινοβολίας στη στάσιμη κατάσταση. Εξηγούμε τι είναι κρίσιμη άντληση και τι είναι αναστροφή πληθυσμού. Στη συνέχεια εξηγούμε πώς επιλύουμε αριθμητικώς τις εξισώσεις των ρυθμών στη γενική περίπτωση, δηλαδή κάθε χρονική στιγμή. Εδώ συμπεριλαμβάνουμε κι ένα εργαστήριο προσομοιώσεως: εξάσκηση στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων των ρυθμών. Κατόπιν, συζητάμε τη δημιουργία στασίμων ΗΜ κυμάτων εντός κοιλότητας. Διακρίνουμε διαμήκεις και εγκάρσιους ΗΜ τρόπους. Στη συνέχεια συζητάμε τη μορφή των εγκαρσίων τρόπων σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδα και σε κυλινδρική κοιλότητα. Ακόμα, καταγράφουμε είδη LASER κι ενδεικτικές εφαρμογές και λέμε λίγα λόγια για το LASER επαφής p-n ή αλλιώς LASER δίοδου και για το LASER κβαντικών τελειών. Τέλος, αναφερόμαστε σε τεχνικές απομόνωσης εγκαρσίων τρόπων.

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Ηλεκτρομαγνητισμού και Κβαντικής Φυσικής.

Το LASER (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) στηρίζεται σε ιδέες του Einstein που δημοσιεύτηκαν στα 1916-1917 [1, 2]. Δεκαετίες μετά (1950-1960), κατόπιν διεθνών προσπαθειών πολλών επιφανών και μη ερευνητών, κατασκευάστηκαν τα πρώτα MASER και LASER. Το 1964 οι Charles Townes, Nikolay Basov και Aleksandr Prokhorov μοιράστηκαν το Βραβείο Νόμπελ Φυσικής «για θεμελιώδες έργο στο πεδίο της κβαντικής ηλεκτρονικής, έργο που οδήγησε στην κατασκευή ταλαντωτών και ενισχυτών βασισμένων στην αρχή λειτουργίας των MASER-LASER». Τα πρώτα LASER χαρακτηρίστηκαν ακόμα και ως λύση σε αναζήτηση προβλήματος, αλλά σήμερα τα LASER χρησιμοποιούνται σε ιατρική, επικοινωνίες, καθημερινή ζωή, στρατό, βιομηχανία, κοσμική κ.ο.κ. Το LASER είναι μια διάταξη που μετατρέπει ενέργεια από άλλες μορφές σε συνεκτική ΗΜ ακτινοβολία. Η εισερχόμενη ενέργεια μπορεί να είναι ΗΜ ακτινοβολία, ηλεκτρική ενέργεια, χημική ενέργεια κ.λπ., ενώ η εξερχόμενη ενέργεια είναι συνεκτική ΗΜ

ακτινοβολία. Ακόμα, εκτός από το ακρωνύμιο LASER, σήμερα χρησιμοποιούνται και παράγωγες λέξεις όπως το lase, lasing. Θα χρησιμοποιούμε εναλλακτικά τόσο το LASER, όσο και το laser.

LASER



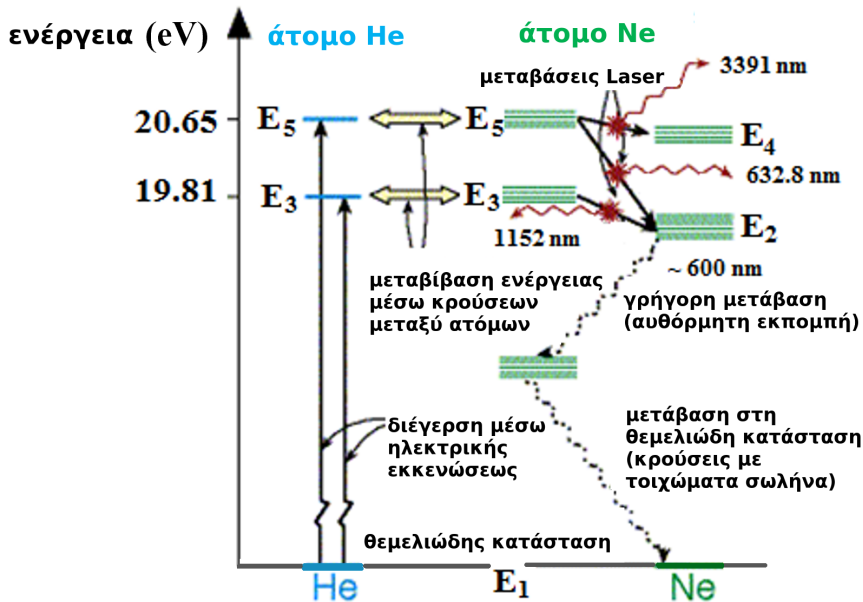
Εικόνα 11.1: Μια διάταξη LASER.

Μια διάταξη LASER απεικονίζεται στην Εικόνα 11.1. Το **ενεργό μέσο** (active medium) είναι μια συλλογή δομικών λίθων (ατόμων, μορίων, ...). Η **κοιλότητα** (cavity) είναι ο χώρος όπου περιορίζεται το ενεργό μέσο, π.χ. ένας γυάλινος σωλήνας. Έχουμε στάσιμα κύματα στη διεύθυνση των κατόπτρων, δηλαδή παράλληλα στον «οπτικό άξονα», π.χ. τον άξονα z . Η απόσταση των κατόπτρων L καθορίζει τους επιτρεπόμενους **τρόπους** (modes) της ΗΜ ακτινοβολίας, δηλαδή τα ω_m . Είναι οι λεγόμενοι **διαμήκεις τρόποι** (longitudinal modes). Οι **εγκάρσιοι τρόποι** (transverse modes) που δημιουργούνται από το εύρος της κοιλότητας καθορίζουν την κατανομή της ενέργειας κατά μήκος και πλάτος της διατομής, δηλαδή κάθετα στον «οπτικό άξονα», π.χ. στο επίπεδο xy .

11.1 LASER He-Ne

Ο μηχανισμός διεγέρσεως - αντλήσεως στο LASER He-Ne παρουσιάζεται στην Εικόνα 11.2. Το ενεργό μέσο είναι μείγμα αερίων Νέου (Ne) - Ηλίου (He) σε αναλογία περίπου 1:10. Κεντρικό ρόλο παίζουν τα άτομα Νέου, ενώ τα άτομα Ηλίου βοηθούν τη διεγέρση των ατόμων Νέου, όπως εξηγείται παρακάτω. Ο μηχανισμός διεγέρσεως αποτελείται από τα εξής βήματα: Αρχικά, μια ηλεκτρική εκκένωση δημιουργεί επιταχυνόμενα ηλεκτρόνια, τα οποία διεγείρουν άτομα He και Ne. Μετά τα άτομα He διεγείρουν άτομα Ne. Σε αυτό το LASER, οι σημαντικότερες διαδικασίες γίνονται μεταξύ τεσσάρων (4) ενεργειακών σταθμών, όπως φαίνεται στην Εικόνα 11.2. Δύο μετασταθείς ενεργειακές στάθμες, οι E_5 και E_3 , δρουν ως άνω στάθμες LASER, ενώ οι λιγότερο σταθερές E_4 και E_2 δρουν ως κάτω στάθμες LASER. **Μετασταθής ενεργειακή στάθμη** (meta-stable energy level) είναι μία «ημι-σταθερή» ενεργειακή στάθμη, δηλαδή με όχι αμελητέο, αλλά και όχι άπειρο χρόνο ζωής. Έτσι, οι κυριότερες επιτρεπόμενες μεταβάσεις είναι: η κύρια ορατή μετάβαση μεταξύ των σταθμών E_5 και E_2 , η οποία είναι η κλασική χαρακτηριστική ερυθρή του LASER He-Ne στα 632.8 nm, η υπέρυθη μετάβαση μεταξύ των σταθμών E_3 και E_2 , στα 1.152 $\mu\text{m} = 1152$ nm, η υπέρυθη μετάβαση μεταξύ των σταθμών E_5 και E_4 , στα 3.391 $\mu\text{m} = 3391$ nm. Τα ενεργειακά επίπεδα έχουν στην πραγματικότητα λεπτή υφή, είναι δηλαδή στην πραγματικότητα πολύπλοκα. Έτσι οι προκύπτουσες ενεργειακές μεταβάσεις δεν είναι δέλτα συναρτήσεις, αλλά έχουν κάποια κατανομή γύρω από ένα κεντρικό μήκος κύματος. Παρόλο που η σημαντικότερη μετάβαση, «σήμα κατατεθέν» του LASER He-Ne αντιστοιχεί σε μήκος κύματος $\lambda_1 = 632.8$ nm (ερυθρό, ελαφρώς προς πορτοκαλί), υπάρχουν κι άλλες μεταβάσεις, όπως $\lambda_2 = 1152$ nm και $\lambda'_2 = 1523$ nm (υπέρυθρο), $\lambda_3 = 3391$ nm (υπέρυθρο), $\lambda_4 = 543.5$ nm (πράσινο), $\lambda_5 = 594.1$ nm (κίτρινο), $\lambda_6 = 604.6$ nm και $\lambda'_6 = 611.9$ nm (πορτοκαλί). Το ποιο από αυτά τα χρώματα θα υποστηριχθεί τελικά εξαρτάται από την κατασκευή της διατάξεως LASER, όπως π.χ. από την απόσταση μεταξύ των δύο κατόπτρων. Μπορούμε να ενισχύσουμε ένα συγκεκριμένο χρώμα με τη χρήση ειδικής επενδύσεως των κατόπτρων που να ανακλά κυρίως τα επιθυμητά φωτόνια. Αν π.χ. θέλουμε να ενισχύσουμε το ερυθρό φως, επενδύουμε τα κάτοπτρα με κατάλληλη επένδυση, ώστε να ανακλούν μόνο το ερυθρό φως. Έτσι, το ερυθρό φως ανακλάται εντός

της κοιλότητας και τα φωτόνιά του πολλαπλασιάζονται μέσω εξαναγκασμένης εκπομπής μεταξύ των E_5 και E_2 , ενώ τα φωτόνια άλλων μηκών κύματος διαπερνούν τα κάτοπτρα χωρίς να αναγκάζονται να περνούν διαρκώς μέσα από το ενεργό μέσο. Με παρόμοιο τρόπο, μπορούν να ενισχυθούν και άλλα μήκη κύματος. Έτσι, υπάρχουν σήμερα πορτοκαλί, κίτρινα και πράσινα LASERS He-Ne, τα οποία χρησιμοποιούν μεταβάσεις που δεν παρουσιάζονται στην Εικόνα 11.2. Όμως, μεγαλύτερη απόδοση στο LASER He-Ne έχει το ερυθρό φως στα 632.8 nm. Τέλος, αξ σημειωθεί ότι σε μερικές διατάξεις LASER υπάρχει η δυνατότητα συντονισμού (tuning), δηλαδή επιλογής του επιθυμητού μήκους κύματος ή ακόμα και η εκπομπή δύο ή περισσότερων μηκών κύματος ταυτοχρόνως.



Εικόνα 11.2: Το ενεργειακό διάγραμμα του LASER He-Ne. Παρουσιάζονται οι κυριότερες μόνο στάθμες και μεταβάσεις.

Παρόλο που οι μεταβάσεις, στις οποίες στηρίζεται η εκπομπή συνεκτικής ΗΜ ακτινοβολίας, αφορούν άτομα Ne, το αέριο He χρησιμοποιείται στο LASER He-Ne, διότι έτσι αυξάνεται η απόδοση. Αυτό οφείλεται σε δύο λόγους: Πρώτον, η άμεση διέγερση ατόμων Ne από την ηλεκτρική εκκένωση είναι αναποτελεσματική, ενώ των ατόμων He αποτελεσματική. Δεύτερον, μία από τις διεγερμένες στάθμες του ατόμου του He (η επισημαινόμενη με E_5) έχει σχεδόν την ίδια ενέργεια με μία από τις διεγερμένες στάθμες του ατόμου του Ne (την επισημαινόμενη επίσης με E_5). Αυτό συμβαίνει και με τις επισημαινόμενες με E_3 διεγερμένες στάθμες. Η διέγερση των ατόμων Ne γίνεται σε τρία στάδια:

1. Η υψηλή τάση επιταχύνει ηλεκτρόνια από την κάθοδο προς την άνοδο.
2. Τα ηλεκτρόνια αυτά συγκρούονται με άτομα He και τους μεταφέρουν την κινητική τους ενέργεια, οπότε τα άτομα He διεγείρονται μεταφέροντας ηλεκτρόνια σε υψηλότερες στάθμες.
3. Τα διεγερμένα άτομα He συγκρούονται με άτομα Ne και τους μεταφέρουν την ενέργεια της διεγέρσεως. Δηλαδή, τα άτομα He δεν συμμετέχουν στο lasing, αλλά αυξάνουν την απόδοση της διεγέρσεως των ατόμων Ne στις άνω στάθμες που συμμετέχουν στο lasing. Έτσι η απόδοση αυξάνεται κατά πολύ.

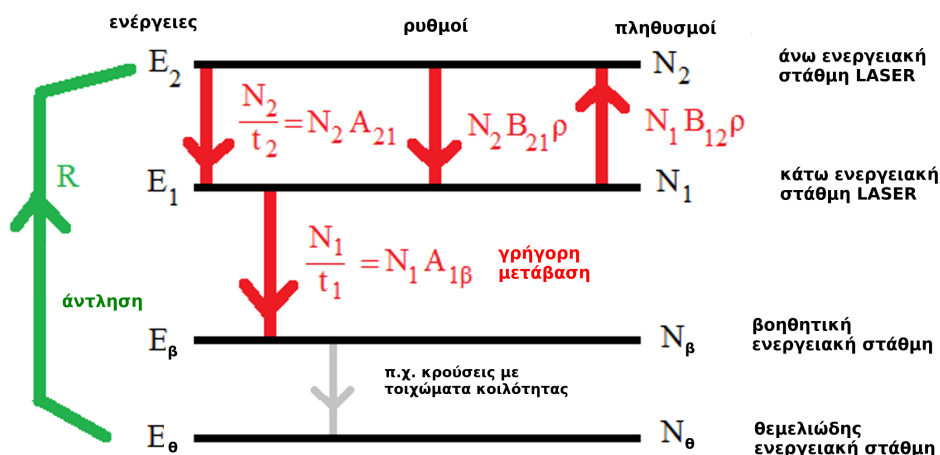
Στις περισσότερες εφαρμογές του LASER He-Ne χρησιμοποιείται η μετάβαση μεταξύ E_5 και E_2 που δίνει ερυθρό φως με μήκος κύματος $\lambda = 632.8$ nm. Αυτή είναι η ισχυρότερη γραμμή στην ορατή περιοχή. Ένα πρόβλημα για τη δημιουργία αυτών των φωτονίων είναι ότι η ενεργειακή στάθμη E_5 μπορεί να εκπέμψει επίσης στο υπέρυθρο με $\lambda = 3391$ nm, που αντιστοιχεί στη μετάβαση μεταξύ E_5 και E_4 . Κάτι τέτοιο μειώνει τον πληθυσμό της ενεργειακής στάθμης E_5 , χωρίς να εκπέμπεται ορατή ακτινοβολία.

Η ενίσχυση της συνεκτικής ΗΜ ακτινοβολίας οφείλεται στην εξαναγκασμένη εκπομπή. Σε ένα σύνηθες LASER He-Ne η ενίσχυση του ενεργού μέσου είναι περίπου 2%. Δηλαδή, σε ένα πέρασμα από το ενεργό μέσο, από το ένα κάτοπτρο στο άλλο, η ποσότητα ακτινοβολίας αυξάνεται από 1 σε 1.02. Οι απώλειες οφείλονται

σε κρούσεις των διεγερμένων ατόμων He με τους τοίχους του σωλήνα που περιέχει το αέριο, σε απορρόφηση από άλλα μόρια κ.λπ. Θα πρέπει λοιπόν να είναι κάτω από 2%. Για να μπορεί να λειτουργεί ένα LASER πρέπει, όπως θα εξηγήσουμε παρακάτω, ο χρόνος ζωής των κατωτέρων ενεργειακών σταθμών που συμμετέχουν στο lasing να είναι πολύ μικρός, ώστε να έχουμε αναστροφή πληθυσμού. Στο αέριο Ne, το οποίο είναι το ενεργό μέσο, η μετάπτωση από την κατώτερη ενεργειακή στάθμη που συμμετέχει στο lasing δεν είναι πολύ γρήγορη, αλλά επιταχύνεται μέσω κρούσεων με τα τοιχώματα του σωλήνα. Επειδή ο αριθμός των κρούσεων με τα τοιχώματα του σωλήνα αυξάνεται, καθώς ο σωλήνας γίνεται μικρότερος, η ενίσχυση της ακτινοβολίας LASER είναι αντιστρόφως ανάλογη με την ακτίνα του σωλήνα. Άρα, η ακτίνα του σωλήνα πρέπει να είναι όσο το δυνατόν μικρότερη. Η ισχύς εξόδου στα LASER He-Ne συνήθως κυμαίνεται από 0.1-100 mW. Το ένα από τα δύο κάτοπτρα είναι τελείως ανακλαστικό, ενώ το άλλο κατά 99% περίπου. Επειδή το ένα κάτοπτρο αφήνει να περάσει μόνο το 1% της ακτινοβολίας, η ισχύς εντός της κοιλότητας είναι 100 φορές μεγαλύτερη από την εκπεμπόμενη ισχύ. Στα LASER He-Ne το μήκος της κοιλότητας είναι της τάξεως των μερικών δεκάδων cm και το πάχος της κοιλότητας είναι της τάξεως των μερικών mm.

11.2 Εξισώσεις ρυθμών των πληθυσμών των συμμετεχουσών στην εκπομπή συνεκτικής ΗΜ ακτινοβολίας σταθμών και της πυκνότητας ακτινοβολίας

Θα παραγάγουμε τις εξισώσεις ρυθμών, δηλαδή τις δύο εξισώσεις, οι οποίες περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη των πληθυσμών των δύο σταθμών, οι οποίες συμμετέχουν στην εκπομπή συνεκτικής ΗΜ ακτινοβολίας και την εξίσωση, η οποία περιγράφει τη χρονική εξέλιξη της πυκνότητας ΗΜ ακτινοβολίας εντός της κοιλότητας. Στην Εικόνα 11.3 παρουσιάζεται ένα σύστημα με τέσσερις στάθμες, στο οποίο έχουμε άντληση από τη θεμελιώδη στάθμη (θ) στην άνω (2) στάθμη LASER. Έτσι, «δισταθμικό σύστημα» σημαίνει εδώ ότι υπάρχουν δύο στάθμες, μεταξύ των οποίων έχουμε εκπομπή συνεκτικής ΗΜ ακτινοβολίας, οι (1) και (2), αλλά υπάρχουν και άλλες επικουρικές στάθμες, όπως η (β) και η (θ). Η βοηθητική ενεργειακή στάθμη (β) χρειάζεται για να μη μένουν τα ηλεκτρόνια στην (1), ώστε να διευκολύνεται η αναστροφή πληθυσμού μεταξύ των (1) και (2). Δηλαδή, υποτίθεται ότι η αυθόρμητη μετάβαση (1) \rightarrow (β) είναι σχετικά γρηγορότερη από την αυθόρμητη μετάβαση (2) \rightarrow (1). Επιπλέον, η μετάβαση (1) \rightarrow (β) είτε είναι μη ακτινοβόλουσα, δηλαδή η ενέργεια μειώνεται χωρίς να εκπέμπεται φωτόνιο, π.χ. με φωνόνια, είτε ακόμα κι αν είναι ακτινοβόλουσα, τα φωτόνια αυτά δεν υποστηρίζονται από τα κάτοπτρα της κοιλότητας. Μία μετάπτωση από μία στάθμη σε μία άλλη λέγεται **μη ακτινοβόλουσα** (non-radiative), όταν γίνεται χωρίς να εκπέμπεται ή να απορροφάται φωτόνιο, π.χ. με φωνόνια, ενώ λέγεται **ακτινοβόλουσα** (radiative), όταν εκπέμπονται ή απορροφούνται φωτόνια.



Εικόνα 11.3: Σχηματικά ένα σύστημα με δύο στάθμες LASER και δύο επικουρικές στάθμες, στο οποίο έχουμε άντληση από τη θεμελιώδη στην άνω στάθμη LASER.

Αρχικά, ορίζουμε την **άντληση** (pumping), $R_2 \equiv R$, η οποία είναι ο ρυθμός με τον οποίο ανεβάζουμε ηλεκτρόνια από τη θεμελιώδη στάθμη (θ) στην άνω (2) στάθμη LASER. Δηλαδή πρόκειται για τον αριθμό των ηλεκτρονίων που ανεβάζουμε διά τον αντίστοιχο χρόνο. Έτσι οι μονάδες μετρήσεως της είναι $[R] = 1/s$. Παρακάτω, θα ορίσουμε διάφορους ρυθμούς, οι οποίοι έχουν τις ίδιες μονάδες, $[1/s]$.

- Για ένα άτομο, η πιθανότητα αυθόρμητης εκπομπής από τη στάθμη (1) στη βοηθητική στάθμη (β), σε χρόνο dt , είναι

$$dW_{1 \rightarrow \beta}^{\text{αυθ. εκπ.}} = A_{1\beta} dt. \quad (11.1)$$

Ορίζουμε τον «χρόνο ζωής» της στάθμης (1), t_1 , μέσω της σχέσεως

$$1 = A_{1\beta} t_1 \Rightarrow t_1 = \frac{1}{A_{1\beta}} \quad (11.2)$$

δηλαδή t_1 είναι ο χρόνος που απαιτείται, ώστε η $dW_{1 \rightarrow \beta}^{\text{αυθ. εκπ.}}$ να γίνει ίση με 1. Οπότε, μπορούμε να γράψουμε

$$dW_{1 \rightarrow \beta}^{\text{αυθ. εκπ.}} = \frac{dt}{t_1}. \quad (11.3)$$

Ο αριθμός των ατόμων που μεταβαίνουν από τη στάθμη (1) στη στάθμη (β) σε χρόνο dt , με αυθόρμητη εκπομπή, είναι

$$dN_{1 \rightarrow \beta}^{\text{αυθ. εκπ.}} = N_1 A_{1\beta} dt = \frac{N_1}{t_1} dt. \quad (11.4)$$

Άρα, ο ρυθμός μεταβάσεως από τη στάθμη (1) στη στάθμη (β), με αυθόρμητη εκπομπή, είναι

$$\frac{dN_{1 \rightarrow \beta}^{\text{αυθ. εκπ.}}}{dt} = N_1 A_{1\beta} = \frac{N_1}{t_1}. \quad (11.5)$$

- Για ένα άτομο, η πιθανότητα αυθόρμητης εκπομπής από τη στάθμη (2) στη στάθμη (1), σε χρόνο dt , είναι

$$dW_{2 \rightarrow 1}^{\text{αυθ. εκπ.}} = A_{21} dt. \quad (11.6)$$

Ορίζουμε τον «χρόνο ζωής» της στάθμης (2), t_2 , μέσω της σχέσεως

$$1 = A_{21} t_2 \Rightarrow t_2 = \frac{1}{A_{21}} \quad (11.7)$$

δηλαδή t_2 είναι ο χρόνος που απαιτείται, ώστε η $dW_{2 \rightarrow 1}^{\text{αυθ. εκπ.}}$ να γίνει ίση με 1. Οπότε, μπορούμε να γράψουμε

$$dW_{2 \rightarrow 1}^{\text{αυθ. εκπ.}} = \frac{dt}{t_2}. \quad (11.8)$$

Ο αριθμός των ατόμων που μεταβαίνουν από τη στάθμη (2) στη στάθμη (1) σε χρόνο dt , με αυθόρμητη εκπομπή, είναι

$$dN_{2 \rightarrow 1}^{\text{αυθ. εκπ.}} = N_2 A_{21} dt = \frac{N_2}{t_2} dt. \quad (11.9)$$

Άρα, ο ρυθμός μεταβάσεως από τη στάθμη (2) στη στάθμη (1), με αυθόρμητη εκπομπή, είναι

$$\frac{dN_{2 \rightarrow 1}^{\text{αυθ. εκπ.}}}{dt} = N_2 A_{21} = \frac{N_2}{t_2}. \quad (11.10)$$

- Για ένα άτομο, η πιθανότητα εξαναγκασμένης εκπομπής από τη στάθμη (2) στη στάθμη (1), σε χρόνο dt , είναι

$$dW_{2 \rightarrow 1}^{\text{εξ. εκπ.}} = B_{21}\rho(\nu)dt. \quad (11.11)$$

Ο αριθμός των ατόμων που μεταβαίνουν από τη στάθμη (2) στη στάθμη (1) σε χρόνο dt , με εξαναγκασμένη εκπομπή, είναι

$$dN_{2 \rightarrow 1}^{\text{εξ. εκπ.}} = N_2 B_{21}\rho(\nu)dt. \quad (11.12)$$

Άρα, ο ρυθμός μεταβάσεως από τη στάθμη (2) στη στάθμη (1), με εξαναγκασμένη εκπομπή, είναι

$$\frac{dN_{2 \rightarrow 1}^{\text{εξ. εκπ.}}}{dt} = N_2 B_{21}\rho(\nu). \quad (11.13)$$

- Για ένα άτομο, η πιθανότητα εξαναγκασμένης απορρόφησης από τη στάθμη (1) στη στάθμη (2), σε χρόνο dt , είναι

$$dW_{1 \rightarrow 2}^{\text{εξ. απορ.}} = B_{12}\rho(\nu)dt. \quad (11.14)$$

Ο αριθμός των ατόμων που μεταβαίνουν από τη στάθμη (1) στη στάθμη (2) σε χρόνο dt , με εξαναγκασμένη απορρόφηση, είναι

$$dN_{1 \rightarrow 2}^{\text{εξ. απορ.}} = N_1 B_{12}\rho(\nu)dt. \quad (11.15)$$

Άρα, ο ρυθμός μεταβάσεως από τη στάθμη (1) στη στάθμη (2), με εξαναγκασμένη απορρόφηση, είναι

$$\frac{dN_{1 \rightarrow 2}^{\text{εξ. απορ.}}}{dt} = N_1 B_{12}\rho(\nu). \quad (11.16)$$

- Αν βρισκόμασταν σε θερμοδυναμική ισορροπία, δηλαδή χωρίς απώλειες και χωρίς άντληση, θα γράφαμε κατά τα γνωστά

$$\begin{aligned} dN_{1 \rightarrow 2} &= dN_{2 \rightarrow 1} \Leftrightarrow \\ N_1 dW_{1 \rightarrow 2}^{\text{εξ. απορ.}} &= N_2 [dW_{2 \rightarrow 1}^{\text{αυθ. εκπ.}} + dW_{2 \rightarrow 1}^{\text{εξ. εκπ.}}] \Leftrightarrow \\ N_1 B_{12}\rho(\nu, T)dt &= N_2 [A_{21}dt + B_{21}\rho(\nu, T)dt] \end{aligned}$$

και στη συνέχεια ονομάζοντας $A_{21} = A$, θέτοντας $B_{21} = B_{12} = B$ και συγκρίνοντας με τον νόμο του Planck θα καταλήγαμε στη σχέση $\frac{A}{B} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}$. Αυτά κάναμε στην Ενότητα 3.2, π.χ. δείτε τις Εξ. 3.7 και 3.10.

- Τώρα όμως έχουμε απώλειες, οι οποίες εκφράζονται με το t_0 , αλλά και άντληση R . Επιπλέον, η ρ δεν αφορά θερμοδυναμική ισορροπία μέλανος σώματος συγκεκριμένης θερμοκρασίας, άρα δεν έχουμε $\rho(\nu, T)$, αλλά $\rho(\nu)$. Άρα, αναμένουμε να δούμε

$$\begin{aligned} N_1 &= N_1(R, t_0), \\ N_2 &= N_2(R, t_0), \\ \rho &= \rho(R, t_0). \end{aligned}$$

Ας κατασκευάσουμε τις διαφορικές εξισώσεις των ρυθμών θέτοντας $A_{21} = A, B_{21} = B_{12} = B$. Λογίζουμε τις θετικές και τις αρνητικές συνεισφορές στους πληθυσμούς των σταθμών (1) και (2), αλλά και στην πυκνότητα ενέργειας HM ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας.

Για τον ρυθμό μεταβολής του πληθυσμού της στάθμης (1) έχουμε

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{N_1}{t_1} - N_1 B_{12}\rho + N_2 B_{21}\rho + \frac{N_2}{t_2}. \quad (11.17)$$

Στην προηγούμενη εξίσωση, στο δεύτερο μέλος, ο πρώτος όρος αφορά απώλεια προς τη (β), ο δεύτερος απώλεια προς τη (2), ενώ ο τρίτος και ο τέταρτος αφορούν κέρδη από τη (2). Άρα, απλοποιώντας τον συμβολισμό ($A_{21} = A, B_{21} = B_{12} = B$),

$$\frac{dN_1}{dt} = -\frac{N_1}{t_1} + B\rho(N_2 - N_1) + AN_2 \quad (11.18)$$

Για τον ρυθμό μεταβολής του πληθυσμού της στάθμης (2) έχουμε

$$\frac{dN_2}{dt} = R + N_1B_{12}\rho - N_2B_{21}\rho - \frac{N_2}{t_2}. \quad (11.19)$$

Στην προηγούμενη εξίσωση, στο δεύτερο μέλος, ο πρώτος όρος αφορά κέρδος από την άντληση, ο δεύτερος κέρδος από την (1), ενώ ο τρίτος και ο τέταρτος αφορούν απώλειες προς την (1). Άρα, απλοποιώντας τον συμβολισμό ($A_{21} = A, B_{21} = B_{12} = B$),

$$\frac{dN_2}{dt} = R + B\rho(N_1 - N_2) - AN_2 \quad (11.20)$$

Για τον ρυθμό μεταβολής της πυκνότητας ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας έχουμε

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\rho}{t_0} + [-N_1B_{12}\rho + N_2B_{21}\rho + A'_{21}N_2] \frac{h\nu}{V} F(\nu). \quad (11.21)$$

Στην προηγούμενη εξίσωση, στο δεύτερο μέλος, ο πρώτος όρος περιγράφει φαινομενολογικά την απώλεια στα κάτοπτρα, ο δεύτερος απώλεια λόγω εξαναγκασμένης απορροφήσεως, ο τρίτος κέρδος λόγω εξαναγκασμένης εκπομπής και ο τέταρτος κέρδος λόγω αυθόρμητης εκπομπής. Προσοχή. Η αυθόρμητη εκπομπή γίνεται προς οιαδήποτε διεύθυνση, οπότε δεν καρπωνόμαστε όλο το $A_{21}N_2$ για αύξηση της ΗΜ ακτινοβολίας στην κοιλότητα. Καρπωνόμαστε μόνο όσα φωτόνια εκπέμπονται σε διεύθυνση περίπου παράλληλη στον άξονα που ορίζουν τα κάτοπτρα. Για τον λόγο αυτό, αφού μας αφορά πολύ μικρό μόνο μέρος της ολικής στερεάς γωνίας, έχουμε τον συντελεστή A'_{21} , ο οποίος είναι κατά πολύ μικρότερος του A_{21} , π.χ. $A'_{21} = 10^{-9} A_{21}$. Απλοποιώντας πάλι τον συμβολισμό ($A_{21} = A, B_{21} = B_{12} = B$),

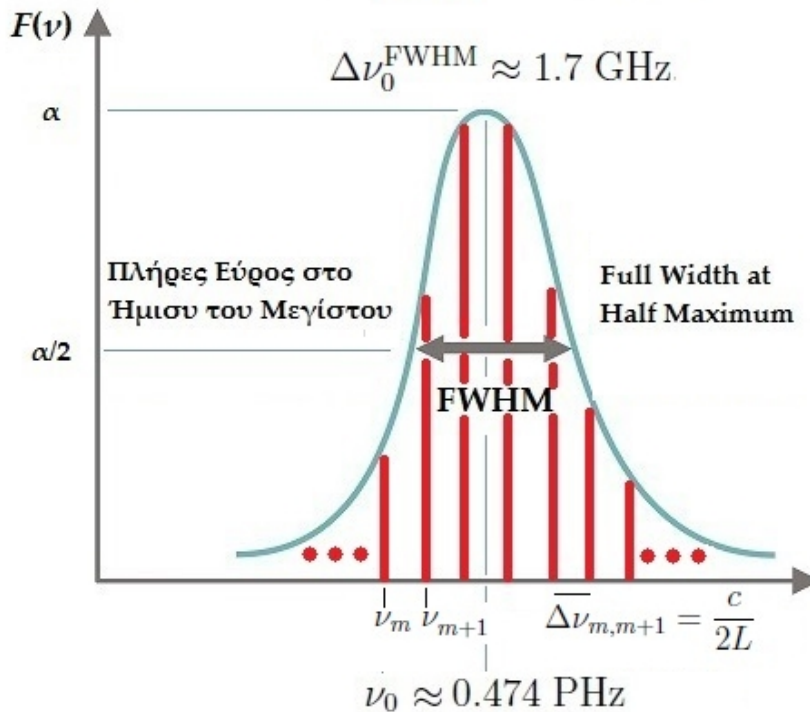
$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\rho}{t_0} + [B\rho(N_2 - N_1) + A'N_2] \frac{h\nu}{V} F(\nu) \quad (11.22)$$

Οι Εξ. 11.18 και 11.20 μερικές φορές αναφέρονται ως «εξισώσεις ύλης», ενώ η Εξ. 11.22 ως «εξίσωση πεδίου».

Ας σχολιάσουμε λίγο τις μονάδες μετρήσεως. Για τους συντελεστές Einstein, $[A] = 1/s$ και $[B] = \frac{m^3}{Js^2}$, ενώ για την πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή συχνότητας, $[\rho] = \frac{J}{m^3Hz} = \frac{Js}{m^3}$. Άρα, $\left[\frac{d\rho}{dt}\right] = \frac{J}{m^3}$. Όπως φαίνεται στην Εξ. 11.22, εκφράζουμε τις **απώλειες ακτινοβολίας στα κάτοπτρα** με ένα φαινομενολογικό όρο $-\frac{\rho}{t_0}$. Εισάγουμε δηλαδή για τον σκοπό αυτό μία ποσότητα t_0 με διαστάσεις χρόνου.

Τότε, οι απώλειες εκφράζονται με μονάδες μετρήσεως $[-\frac{\rho}{t_0}] = \frac{J}{m^3}$. Η παράμετρος t_0 χαρακτηρίζει τον χρόνο που απαιτείται για να αδειάσει η κοιλότητα από τη ρ λόγω απωλειών στα κάτοπτρα, αν δεν υπάρχει ενεργό υλικό. Όσο μικρότερη είναι η ανακλαστικότητα των κατόπτρων, δηλαδή όσο μεγαλύτερες είναι οι απώλειες, τόσο μικρότερος είναι ο χρόνος t_0 . Τα N_1 και N_2 είναι πληθυσμοί με μονάδες μετρήσεως $[N_1] = [N_2] = 1$. Με βάση όσα αναφέραμε παραπάνω, $[N_1B_{12}\rho] = [N_2B_{21}\rho] = [A_{21}N_2] = [A'_{21}N_2] = 1/s$. Η $F(\nu)$ δείχνει τη μορφή της γραμμής εκπομπής, η οποία, όπως είπαμε, δεν είναι συνάρτηση δέλτα, αλλά έχει κάποιο

εύρος. Αυτό απεικονίζεται τυπικά στην Εικόνα 11.4. Η $F(\nu)$ ονομάζεται **συνάρτηση φασματικής γραμμής** και έχει διαστάσεις $[F(\nu)] = 1/\text{Hz}$. FWHM (Full Width at Half Maximum) σημαίνει Πλήρες Εύρος στο Ήμισυ του Μεγίστου. Η μορφή της γραμμής μπορεί να προσεγγιστεί σε κάποιες περιπτώσεις με Γκαουσιανή ή Λορεντζιανή, αλλά αυτά είναι πέραν του περιεχομένου του παρόντος συγγράμματος. V είναι ο όγκος της κοιλότητας με μονάδες μετρήσεως $[V] = \text{m}^3$. Άρα, $\left[\frac{h\nu}{V}F(\nu)\right] = \frac{\text{J}}{\text{m}^3\text{Hz}}$, οπότε, το δεξιό μέρος της Εξ. 11.22 έχει μονάδες $\frac{\text{J}}{\text{m}^3}$.



Εικόνα 11.4: Η συνάρτηση φασματικής γραμμής, $F(\nu)$, εκφράζει τη μορφή της γραμμής εκπομπής. FWHM (Full Width at Half Maximum) σημαίνει Πλήρες Εύρος στο Ήμισυ του Μεγίστου. Σημειώνονται η κεντρική συχνότητα ν_0 , το FWHM εύρος της $\Delta\nu_0^{\text{FWHM}}$, δύο διαδοχικές συχνότητες διαμήκων τρόπων ν_m, ν_{m+1} και η μεταξύ τους απόσταση $\Delta\nu_{m,m+1} = \frac{c}{2L}$. Ως παράδειγμα, παρουσιάζονται τυπικές τιμές για την ερυθρή γραμμή ενός LASER He-Ne. Φαίνεται ότι στο συγκεκριμένο παράδειγμα το FWHM εύρος χωρά 4 διαμήκεις τρόπους.

Εναλλακτικά οι Εξ. 11.18, 11.20, 11.22 μπορούν να γραφτούν στη μορφή

$$\frac{dn_1}{dt} = -\frac{n_1}{t_1} + B\rho(n_2 - n_1) + An_2 \quad (11.23)$$

$$\frac{dn_2}{dt} = r + B\rho(n_1 - n_2) - An_2 \quad (11.24)$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\rho}{t_0} + [B\rho(n_2 - n_1) + A'n_2]h\nu F(\nu) \quad (11.25)$$

όπου θέσαμε

$$n_i = \frac{N_i}{V}, \quad (11.26)$$

και

$$r = \frac{R}{V}. \quad (11.27)$$

11.3 Αριθμός διαμήκων τρόπων εντός εύρους γραμμής εκπομπής

Στο Κεφάλαιο 8 (Εξ. 8.50) είδαμε ότι εντός της κοιλότητας υποστηρίζονται μόνο ΗΜ τρόποι m τέτοιοι ώστε η κυκλική συχνότητα να είναι

$$\omega_m = \frac{m\pi c}{L}, m \in \mathcal{N}^*.$$

L είναι η απόσταση των κατόπτρων κατά μήκος του άξονα z . Άρα, η συχνότητα είναι

$$\nu_m = \frac{mc}{2L}, m \in \mathcal{N}^*. \quad (11.28)$$

Αυτοί οι ΗΜ τρόποι εξήχθησαν θέτοντας συνοριακές συνθήκες κατά μήκος του άξονα z που συνδέει τα δύο κάτοπτρα. Επειδή η διάσταση αυτή της κοιλότητας στον άξονα z έχει συνήθως πολύ μεγαλύτερο μήκος από τις άλλες δύο διαστάσεις της στο επίπεδο xy , οι τρόποι αυτοί ονομάζονται **διαμήκεις τρόποι** (longitudinal modes).

Η ερυθρή γραμμή έχει κεντρικό μήκος κύματος

$$\lambda_0 \approx 632.8 \text{ nm},$$

άρα η αντίστοιχη κεντρική συχνότητα είναι $\nu_0 = \frac{c}{\lambda_0} \approx 0.474 \times 10^{15} \text{ Hz} \Rightarrow$

$$\nu_0 = 0.474 \text{ PHz}.$$

Το FWHM εύρος της ερυθρής γραμμής είναι $\Delta\nu_0^{\text{FWHM}} \approx 1.7 \text{ GHz}$. Άρα,

$$\frac{\Delta\nu_0^{\text{FWHM}}}{\nu_0} \approx 3.6 \times 10^{-6},$$

δηλαδή η ερυθρή γραμμή είναι αρκετά λεπτή. Δείτε την Εικόνα 11.4. Ας προσπαθήσουμε να απαντήσουμε στο **ερώτημα**: Υπάρχουν υποστηριζόμενοι από την κοιλότητα διαμήκεις ΗΜ τρόποι m που να εμπίπτουν στη συχνοτική περιοχή της ν_0 που έχει εύρος $\Delta\nu_0^{\text{FWHM}}$; Από την Εξ. 11.28, συμπεραίνουμε ότι η συχνοτική απόσταση των διαμήκων ΗΜ τρόπων είναι

$$\Delta\nu_{m,m+1} = \frac{c}{2L}. \quad (11.29)$$

Ας υποθέσουμε ότι η κοιλότητα έχει μήκος $L = 0.4 \text{ m}$. Τότε $\Delta\nu_{m,m+1} = 375 \text{ MHz}$. Εντός του FWHM εύρους της φασματικής γραμμής θα χωράνε

$$\left[\frac{\Delta\nu_0^{\text{FWHM}}}{\Delta\nu_{m,m+1}} \right] \text{ ΗΜ τρόποι.} \quad (11.30)$$

[...] συμβολίζουμε εδώ το ακέραιο μέρος. Στο συγκεκριμένο παράδειγμα $\left[\frac{\Delta\nu_0^{\text{FWHM}}}{\Delta\nu_{m,m+1}} \right] = \left[\frac{1.7 \text{ GHz}}{375 \text{ MHz}} \right] = [4.533] = 4$. Δηλαδή βλέπουμε ότι μέσα στο εύρος της γραμμής εμπίπτουν αρκετοί διαμήκεις τρόποι (αλλά και εγκάρσιοι, δείτε την Ενότητα 11.7). Το εύρος κάθε διαμήκου (αλλά και εγκάρσιου, δείτε την Ενότητα 11.7) ΗΜ τρόπου είναι της τάξεως των $\Delta\nu_m^{\text{FWHM}} \approx 1 \text{ με } 10 \text{ MHz}$ και σχετίζεται με τον ρυθμό απωλειών της κοιλότητας μέσω των κατόπτρων t_0 [3].

11.4 Εύρεση των πληθυσμών των σταθμών και της πυκνότητας ΗΜ ακτινοβολίας στη στάσιμη κατάσταση, Κρίσιμη άντληση, Αναστροφή πληθυσμού

Στη στάσιμη κατάσταση (steady state) έχουμε

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_2}{dt} = 0 = \frac{d\rho}{dt}. \quad (11.31)$$

Άρα, οι Εξ. 11.18 και 11.20 γίνονται

$$\boxed{-\frac{N_1}{t_1} + B\rho(N_2 - N_1) + AN_2 = 0} \quad (11.32)$$

$$\boxed{R + B\rho(N_1 - N_2) - AN_2 = 0} \quad (11.33)$$

ενώ, αν αγνοήσουμε το A' ως πολύ μικρότερο του A , τότε η Εξ. 11.22 γίνεται

$$-\frac{\rho}{t_0} + B\rho(N_2 - N_1) + \frac{h\nu}{V}F(\nu) = 0 \Leftrightarrow \quad (11.34)$$

$$\boxed{B\rho(N_2 - N_1) = \frac{\rho}{t_0 \frac{h\nu}{V}F(\nu)}} \quad (11.35)$$

Με πρόσθεση κατά μέλη των Εξ. 11.32 και 11.33 λαμβάνουμε $R = \frac{N_1}{t_1} \Leftrightarrow$

$$\boxed{N_1 = t_1 R} \quad (11.36)$$

Με πρόσθεση κατά μέλη των Εξ. 11.33 και 11.35 λαμβάνουμε

$$R - AN_2 = \frac{\rho}{t_0 \frac{h\nu}{V}F(\nu)} \Leftrightarrow \quad (11.37)$$

$$\boxed{N_2 = \frac{R}{A} - \frac{\rho}{At_0 \frac{h\nu}{V}F(\nu)}} \quad (11.38)$$

Υπάρχουν δύο περιπτώσεις για τη ρ , είτε (Π1) $\rho > 0$ είτε (Π2) $\rho = 0$.

Έστω ότι είμαστε στην (Π1), όπου $\rho > 0$. Τότε, η Εξ. 11.37 ισοδυναμεί με $R > AN_2$. Λόγω της Εξ. 11.36 και του ορισμού (Εξ. 11.7) του χρόνου ζωής της στάθμης (2) $A = A_{21} = \frac{1}{t_2}$ λαμβάνουμε $\frac{N_1}{t_1} > \frac{N_2}{t_2} \Leftrightarrow$

$$\boxed{\frac{t_2}{N_2} > \frac{t_1}{N_1}} \quad (11.39)$$

Τώρα από τις Εξ. 11.35, 11.36, 11.38, επειδή $\rho \neq 0$ συνεπάγεται

$$B \left(\frac{R}{A} - \frac{\rho}{At_0 \frac{h\nu}{V}F(\nu)} \right) - Bt_1 R = \frac{1}{t_0 \frac{h\nu}{V}F(\nu)} \Leftrightarrow \quad (11.40)$$

$$\rho = Rt_0 \frac{h\nu}{V}F(\nu) \frac{t_2 - t_1}{t_2} - \frac{1}{Bt_2}. \quad (11.41)$$

Να σημειωθεί ότι αν $t_2 < t_1$, τότε από την προηγούμενη εξίσωση προκύπτει $\rho < 0$. Άρα, θα πρέπει

$$\boxed{t_2 > t_1} \quad (11.42)$$

δηλαδή, θα πρέπει ο χρόνος ζωής της ανώτερης στάθμης (2) να είναι μεγαλύτερος του χρόνου ζωής της κατώτερης στάθμης (1). Αλλά στην περίπτωση που εξετάζουμε $\rho > 0$, επομένως προκύπτει ότι

$$\boxed{R > \frac{1}{Bt_0(t_2 - t_1) \frac{h\nu}{V}F(\nu)} := R_c} \quad (11.43)$$

Η ποσότητα R_c ονομάζεται **κρίσιμη άντληση**. Προφανώς, για $R_c > 0 \Leftrightarrow$ Εξ. 11.42. Συνεπώς, η ρ μπορεί να γραφτεί

$$\rho = \frac{AR}{BR_c} - \frac{A}{B} \quad (11.44)$$

Από τις Εξ. 11.38, 11.43, 11.44, προκύπτει

$$N_2 = t_1R + (t_2 - t_1)R_c \quad (11.45)$$

Έστω ότι είμαστε στην (Π2), όπου $\rho = 0$. Τότε, από την Εξ. 11.37 προκύπτει $R = AN_2$, οπότε

$$N_2 = t_2R \quad (11.46)$$

Συνοψίζοντας, στη στάσιμη κατάσταση, οι λύσεις των Εξ. 11.32, 11.33, 11.35 είναι

$$N_1 = t_1R, \quad \forall R \quad (11.47)$$

$$N_2 = \begin{cases} t_2R, & \forall R \leq R_c \\ t_1R + (t_2 - t_1)R_c, & \forall R \geq R_c \end{cases} \quad (11.48)$$

$$\rho = \begin{cases} 0, & \forall R \leq R_c \\ \frac{AR}{BR_c} - \frac{A}{B} = \frac{1}{Bt_2R_c}R - \frac{1}{Bt_2}, & \forall R \geq R_c \end{cases} \quad (11.49)$$

Στη συνέχεια, ας κάνουμε μερικές παρατηρήσεις.

Παρατήρηση 1. Η **αναστροφή πληθυσμού** (population inversion) ορίζεται ως

$$\Delta N := N_2 - N_1 \quad (11.50)$$

οπότε από τις Εξ. 11.47 και 11.48 συνάγεται

$$\Delta N = \begin{cases} (t_2 - t_1)R, & \forall R \leq R_c \\ (t_2 - t_1)R_c, & \forall R \geq R_c \end{cases} \quad (11.51)$$

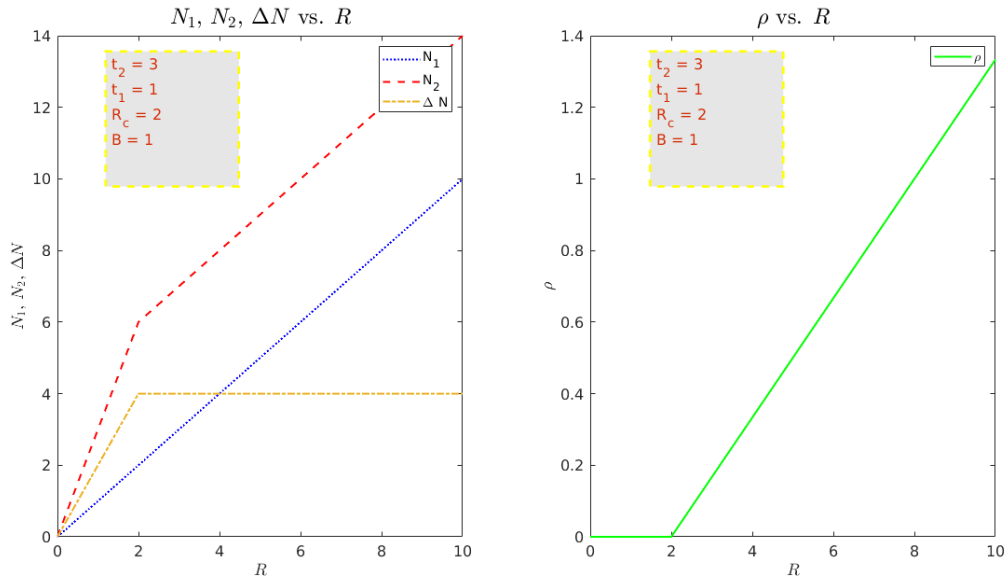
Έτσι φαίνεται ότι $\Delta N > 0 \Leftrightarrow t_2 > t_1$, δηλαδή για να έχουμε αναστροφή πληθυσμού θα πρέπει να ισχύει η Εξ. 11.42.

Στην Εικόνα 11.5 αποδίδεται μία αναπαράσταση των Εξ. 11.47, 11.48, 11.49, 11.51, η οποία έγινε με τη βοήθεια του προγράμματος matlab N1N2DNrho.m, το οποίο παρατίθεται στο Παράρτημα Γ. Οι τιμές των παραμέτρων είναι εδώ επίτηδες αδιάστατες και δεν έχουν κάποια σχέση με πραγματικές τιμές. Ο αναγνώστης - η αναγνώστρια μπορεί να παίξει με τις τιμές των παραμέτρων για να κατανοήσει τη λειτουργία των Εξ. 11.47, 11.48, 11.49, 11.51.

Παρατήρηση 2. Σύμφωνα με την Εξ. 11.43, η κρίσιμη άντληση ορίζεται ως

$$R_c := \frac{1}{Bt_0(t_2 - t_1)\frac{h\nu}{V}F(\nu)}$$

Οπότε, αν μεγαλώσουμε το t_0 , αυτό συνεπάγεται μικρότερη R_c , πράγμα λογικό αφού αν μεγαλώσουμε το t_0 , αυτό συνεπάγεται πτώση των απωλειών, δηλαδή του ρ/t_0 . Επίσης, υπενθυμίζουμε ότι για να έχουμε $R_c > 0$



Εικόνα 11.5: Μία αναπαράσταση των Εξ. 11.47, 11.48, 11.49, 11.51 με τη βοήθεια του προγράμματος matlab N1N2DNrho.m, το οποίο παρατίθεται στο Παράρτημα Γ.

θα πρέπει να ισχύει η Εξ. 11.42, δηλαδή $t_2 > t_1$. Ακόμα, αν $t_2 \gg t_1$ προκύπτει πολύ μικρή R_c .

Παρατήρηση 3. Η σχέση

$$\frac{A}{B} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \Leftrightarrow \frac{1}{B} = \frac{8\pi h t_2 \nu^3}{c^3}, \quad (11.52)$$

άρα η Εξ. 11.43 γίνεται

$$R_c = \frac{8\pi h t_2 \nu^3}{c^3 t_0 (t_2 - t_1) \frac{h\nu}{V} F(\nu)} \propto \nu^2, \quad (11.53)$$

έτσι, π.χ. $R_c(\text{μικροκύματα}) < R_c(\text{ορατό})$, δηλαδή είναι ευκολότερη η δημιουργία συνεκτικής δέσμης στα μικροκύματα παρά στο ορατό.

Παρατήρηση 4. Όλα αυτά έχουν νόημα εφ' όσον επιτρέπεται η μετάπτωση από την άνω στάθμη (2) στην κάτω στάθμη (1) με εκπομπή φωτονίου. Θα πρέπει, δηλαδή, όπως συζητήσαμε στο Κεφάλαιο 7, $\vec{r}_{12} := \int dV \Phi_1^*(\vec{r}) \vec{r} \Phi_2(\vec{r}) \neq 0$, δηλαδή $\vec{\mathcal{P}}_{12} := \int dV \Phi_1^*(\vec{r}) (-e) \vec{r} \Phi_2(\vec{r}) \neq 0$.

Με απώτερο στόχο να επιλύσουμε αριθμητικά τις εξισώσεις των ρυθμών στη γενική περίπτωση, θα κάνουμε, αρχικά, τις Εξ. 11.47, 11.48, 11.49, 11.51 αδιάστατες.

- Πρώτα πρώτα, ας συμπληρώσουμε την αλλαγή μεταβλητών που κάναμε στις Εξ. 11.26 και 11.27, δηλαδή τις

$$n_i = \frac{N_i}{V}, \quad (11.54)$$

και

$$r = \frac{R}{V}, \quad (11.55)$$

με την

$$r_c = \frac{R_c}{V}. \quad (11.56)$$

Τότε οι Εξ. 11.47, 11.48, 11.49, 11.51 γίνονται

$$n_1 = t_1 r, \quad \forall r \quad (11.57)$$

$$n_2 = \begin{cases} t_2 r, & \forall r \leq r_c \\ t_1 r + (t_2 - t_1) r_c, & \forall r \geq r_c \end{cases} \quad (11.58)$$

$$\rho = \begin{cases} 0, & \forall r \leq r_c \\ \frac{Ar}{Br_c} - \frac{A}{B} = \frac{1}{Bt_2 r_c} r - \frac{1}{Bt_2'}, & \forall r \geq r_c \end{cases} \quad (11.59)$$

$$\Delta n := n_2 - n_1 = \begin{cases} (t_2 - t_1) r, & \forall r \leq r_c \\ (t_2 - t_1) r_c, & \forall r \geq r_c \end{cases} \quad (11.60)$$

- Κατόπιν κάνουμε τις Εξ. 11.57, 11.58, 11.59, 11.60 αδιάστατες. Προς τούτο, ορίζουμε τα μεγέθη:

$$n_0 := t_2 r_c \quad (11.61)$$

με μονάδες μετρήσεως $[n_0] = \frac{s}{\text{sm}^3} = 1/\text{m}^3$.

$$\tau := \frac{t}{t_2}, \quad (11.62)$$

δηλαδή, μετράμε τον χρόνο σε μονάδες χρόνου ζωής της άνω (2) στάθμης, t_2 , οπότε η ποσότητα τ είναι αδιάστατη, $[\tau] = 1$.

$$\tau_0 := \frac{t_0}{t_2} \quad (11.63)$$

και

$$\tau_1 := \frac{t_1}{t_2}, \quad (11.64)$$

οι οποίες είναι αδιάστατες, επίσης, $[\tau_0] = [\tau_1] = 1$. Συνεχίζουμε ορίζοντας,

$$r_N := \frac{r}{r_c}, \quad (11.65)$$

που είναι η «αδιάστατη άντληση», $[r_N] = 1$. Κι ακόμα

$$\rho := Bt_2 \rho, \quad (11.66)$$

που είναι η «αδιάστατη πυκνότητα ΗΜ ακτινοβολίας», $[\rho] = \left[\frac{\text{m}^3}{\text{Js}^2} \text{s} \frac{\text{Js}}{\text{m}^3} \right] = 1$. Περαιτέρω ορίζουμε τους «αδιάστατους πληθυσμούς των σταθμών (1) και (2)» ως

$$v_1 := \frac{n_1}{n_0}, \quad (11.67)$$

$$v_2 := \frac{n_2}{n_0}, \quad (11.68)$$

αφού $[v_1] = \frac{[t_1 r]}{[n_0]} = \frac{\text{sm}^3}{\text{sm}^3} = 1$ και π.χ. $[v_2] = \frac{[t_2 r]}{[n_0]} = \frac{\text{sm}^3}{\text{sm}^3} = 1$.

Με βάση τους παραπάνω ορισμούς, οι Εξ. 11.57, 11.58, 11.59, 11.60 γίνονται

$$\boxed{v_1 = \tau_1 r_N, \quad \forall r_N} \quad (11.69)$$

$$\boxed{v_2 = \begin{cases} r_N, & \forall r_N \leq 1 \\ \tau_1 r_N + (1 - \tau_1), & \forall r_N \geq 1 \end{cases}} \quad (11.70)$$

$$\boxed{\rho = \begin{cases} 0, & \forall r_N \leq 1 \\ r_N - 1, & \forall r_N \geq 1 \end{cases}} \quad (11.71)$$

$$\boxed{\Delta v := v_2 - v_1 = \begin{cases} (1 - \tau_1)r_N, & \forall r_N \leq 1 \\ (1 - \tau_1), & \forall r_N \geq 1 \end{cases}} \quad (11.72)$$

Παρατηρήσεις

- Στις Εξ. 11.69, 11.70, 11.71, 11.72, όλα τα μεγέθη είναι αδιάστατα.
- Τα $v_1, v_2, \Delta v$ εξαρτώνται μόνο από τα τ_1 και r_N .
- Το ρ εξαρτάται μόνο από το r_N .

Παραδείγματος χάριν, για $\tau_1 = 0.5$ και $r_N = 1.5$, προκύπτουν

$$v_1 = 0.5 \cdot 1.5 = 0.75$$

$$v_2 = 0.5 \cdot 1.5 + (1 - 0.5) = 0.75 + 0.5 = 1.25$$

$$\Delta v = 0.5$$

$$\rho = 1.5 - 1 = 0.5,$$

ενώ για $\tau_1 = 0.5$ και $r_N = 0.5$, προκύπτουν

$$v_1 = 0.5 \cdot 0.5 = 0.25$$

$$v_2 = 0.5$$

$$\Delta v = 0.25$$

$$\rho = 0.$$

11.5 Αριθμητική επίλυση των εξισώσεων των ρυθμών σε κάθε στιγμή

Ήδη δείξαμε ότι οι εξισώσεις των ρυθμών, δηλαδή οι Εξ. 11.18, 11.20, 11.22 μπορούν να γραφτούν στη μορφή των Εξ. 11.23, 11.24, 11.25

$$\frac{dn_1}{dt} = -\frac{n_1}{t_1} + B\rho(n_2 - n_1) + An_2,$$

$$\frac{dn_2}{dt} = r + B\rho(n_1 - n_2) - An_2,$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{\rho}{t_0} + [B\rho(n_2 - n_1) + A'n_2]h\nu F(\nu),$$

όπου

$$n_i = \frac{N_i}{V},$$

$$r = \frac{R}{V},$$

ενώ, παραπάνω ορίσαμε και την

$$r_c = \frac{R_c}{V}.$$

Ας κάνουμε τώρα τις εξισώσεις των ρυθμών αδιάστατες, χρησιμοποιώντας, όπως πρωτίτερα, τους ορισμούς των Εξ. 11.61, 11.62, 11.63, 11.64, 11.65, 11.66, 11.67, 11.68. Προκύπτουν έτσι οι αδιάστατες Εξ. 11.73, 11.74, 11.75. Για την τελευταία, χρησιμοποιήσαμε και την Εξ. 11.43, μαζί με την Εξ. 11.56.

$$\frac{dv_1}{d\tau} = -\frac{v_1}{\tau_1} + \rho(v_2 - v_1) + v_2 \quad (11.73)$$

$$\frac{dv_2}{d\tau} = r_N + \rho(v_1 - v_2) - v_2 \quad (11.74)$$

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -\frac{\rho}{\tau_0} + \left[\rho(v_2 - v_1) + \frac{A'}{A}v_2 \right] \frac{1}{\tau_0(1 - \tau_1)} \quad (11.75)$$

Παρατηρήσεις

- Στις Εξ. 11.73, 11.74, 11.75, όλα τα μεγέθη είναι αδιάστατα.
- Η λύση των διαφορικών εξισώσεων 11.73, 11.74, 11.75, για τα v_1, v_2, ρ , εξαρτάται μόνο από τα τ_0, τ_1, r_N και $\frac{A'}{A}$.
- Στην επόμενη ενότητα θα τις λύσουμε στο matlab με τη βοήθεια των προγραμμάτων laser.m και call-lasercommands.m.

11.6 Εργαστήριο προσομοιώσεως: εξάσκηση στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων των ρυθμών

Οι Εξ. 11.73, 11.74, 11.75, μπορούν να λυθούν αριθμητικά με διάφορους τρόπους και λογισμικά. Στο παρόν Υποκεφάλαιο αυτό γίνεται στο matlab με τη βοήθεια των δύο αρχείων που παρουσιάζονται παρακάτω στους κώδικες 11.1 και 11.2. Το αποτέλεσμα του τρεξίματος φαίνεται στην Εικόνα 11.6.

Κώδικας 11.1: Το αρχείο matlab calllasercommands.m.

```

1  global tau1 tau0 arn A rhoA
2  x0=[0 0 0];
3  tspan=[0,500];
4  [t,x]=ode45(@Laser,tspan,x0)
5  plot(t,x)
6
7  %figure;
8  %plot(t,x(1),'k',t,x(2),'r',t,x(3),'g')
9  xlabel('\tau','FontSize',16)
10 ylabel('\nu_1, \nu_2, \rho','FontSize',16)
11 set(gca,'fontsize',16)
12 title('\nu_1, \nu_2, \rho vs. \tau','FontSize',16)
13 text(100,1.10,'\nu_1','Color','b','FontSize',16)
14 text(150,1.10,'\nu_2','Color','r','FontSize',16)
15 text(200,1.10,'\rho','Color',[1,0.5,0],'FontSize',16)
16 annotation('textbox',...
```

```

17 [0.6 0.54 0.25 0.22],...
18 'String', {'\tau_1 = ' num2str(tau1)],...
19 ['\tau_0 = ' num2str(tau0)], ['r_N = ' num2str(arn)],...
20 ['AptoA = ' num2str(AptoA)]},...
21 'FontSize',12,...
22 'FontName','Arial',...
23 'LineStyle','--',...
24 'EdgeColor',[1 1 0],...
25 'LineWidth',2,...
26 'BackgroundColor',[0.9 0.9 0.9],...
27 'Color',[0.84 0.16 0]);

```

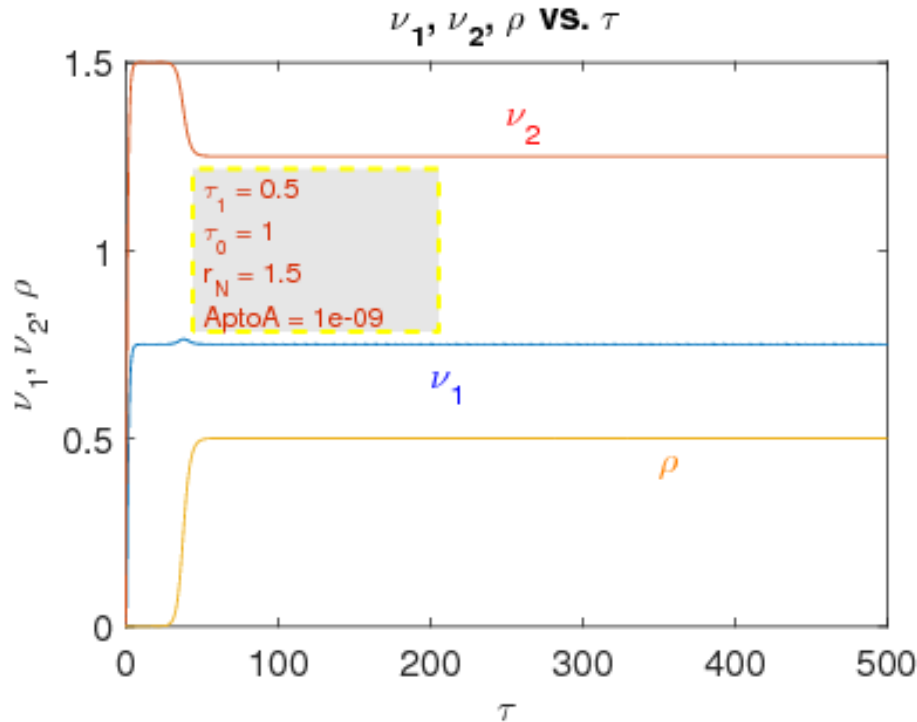
Κώδικας 11.2: Το αρχείο matlab laser.m.

```

1 function xprime = Laser(t,x);
2 global tau1 tau0 arn AptoA
3 %LASER: Computes the derivatives involved in solving the Laser
4 equations.
5 % nu1=x(1), nu2=x(2), rho=x(3)
6 tau1=0.5;
7 tau0=10;
8 arn=1.5; % normalized pumping
9 AptoA=10^(-9);
10 tautau=tau0*(1-tau1);
11 xprime=[x(2)+x(3)*(x(2)-x(1))-x(1)/tau1; arn+x(3)*(x(1)-x(2))-x
12 (2);-x(3)/tau0+(AptoA*x(2)+x(3)*(x(2)-x(1)))*(1/tautau)];
13
14 % Observe that x is stored as x(1), y is stored as x(2), and z as
15 stored as x(3).
16 % Additionally, xprime is a column vector,
17 % as is evident from the semicolon following the first appearance
18 of x(2).
19 % If in the CommandWindow, we type
20 % >> x0=[-8 8 27];
21 % >> tspan=[0,20];
22 % >> [t,x]=ode45(@Lorenz,tspan,x0)

```

Εν είδει παραδείγματος, ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να δούμε την επίδραση της μεταβολής του r_N στη μεταβολή των ν_1 , ν_2 , ρ συναρτήσει του τ . Ας υποθέσουμε ότι κρατάμε σταθερά τα $\tau_0 = 10$, $\frac{A'}{A} = 10^{-9}$ και $\tau_1 = 0.5$. Ας μεταβάλλουμε το r_N θέτοντας τις τιμές 0.5, 1.5, 2.0, 2.5. Το αποτέλεσμα της επιλύσεως των εξισώσεων των ρυθμών με τα προγράμματά μας φαίνεται στην Εικόνα 11.7. Παρατηρούμε αρχικά ότι όταν πια οι τιμές των ν_1 , ν_2 , ρ έχουν σταθεροποιηθεί, δηλαδή έχουμε φτάσει στη στάσιμη κατάσταση, αυτές συμπίπτουν με τις προβλέψεις των Εξ. 11.69, 11.70, 11.71. Ακόμα, αξίζει να σημειώσουμε γιατί υπάρχει διαφορά στον απαιτούμενο χρόνο, ώστε η ρ να γίνει αισθητή. Ο λόγος είναι ότι αυξάνοντας την αδιάστατη άντληση r_N , αυξάνεται ο ν_2 λόγω της Εξ. 11.74, οπότε στην Εξ. 11.75 αυξάνεται ο όρος $\frac{A'}{A}\nu_2$ που είναι ο μοναδικός που οδηγεί σε $\frac{d\rho}{d\tau} > 0$, όταν το ρ είναι αμελητέο.



Εικόνα 11.6: Η γραφική παράσταση των ν_1, ν_2, ρ συναρτήσεων του τ που προκύπτει από τα προγράμματα *matlab*. Στην εικόνα εμφανίζεται ρ , αλλά πρόκειται για το αδιάστατο ρ της Εξ. 11.75.

11.7 Στάσιμα ΗΜ κύματα σε 3D κοιλότητα: Διαμήκεις τρόποι και εγκάρσιοι τρόποι

Ας εξετάσουμε προσεκτικότερα τα στάσιμα ηλεκτρομαγνητικά κύματα που αναπτύσσονται σε μία 3D κοιλότητα (standing electromagnetic waves in a 3D cavity). Υπάρχουν οι λεγόμενοι **διαμήκεις** (longitudinal) και οι λεγόμενοι **εγκάρσιοι** (transverse) **τρόποι** (modes). Αρχικά, ας αναφέρουμε κάποια γενική ονοματολογία. **TE** (**Εγκάρσιοι Ηλεκτρικοί, Transverse Electric**) ονομάζονται οι ΗΜ τρόποι χωρίς ηλεκτρικό πεδίο στη διεύθυνση διαδόσεως. **TM** (**Εγκάρσιοι Μαγνητικοί, Transverse Magnetic**) ονομάζονται οι ΗΜ τρόποι χωρίς μαγνητικό πεδίο στη διεύθυνση διαδόσεως. Τέλος, **TEM** (**Εγκάρσιοι ΗλεκτροΜαγνητικοί, Transverse ElectroMagnetic**) ονομάζονται οι ΗΜ τρόποι χωρίς ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο στη διεύθυνση διαδόσεως. Οι τρόποι που εξετάζουμε εδώ είναι TEM, λογίζοντας ως διεύθυνση διαδόσεως την παράλληλη στη μακριά διάσταση της κοιλότητας, δηλαδή με την εκλογή που κάναμε έως τώρα, την παράλληλη στον άξονα των z διεύθυνση.

Οι **διαμήκεις τρόποι** εμφανίστηκαν ήδη όταν λύσαμε το βασικά μονοδιάστατο (1D) πρόβλημα, βάζοντας κάτοπτρα στις θέσεις $z = 0$ και $z = L$ και θεωρώντας ότι η εφαπτομενική συνιστώσα του \vec{E} μηδενίζεται στα κάτοπτρα (όπως και η κάθετη συνιστώσα του \vec{B}). Βρήκαμε λοιπόν ότι (Εξ. 8.45)

$$k_m = \frac{m\pi}{L}, m \in \mathcal{N}^*.$$

Ακόμα βρήκαμε ότι (Εξ. 8.50)

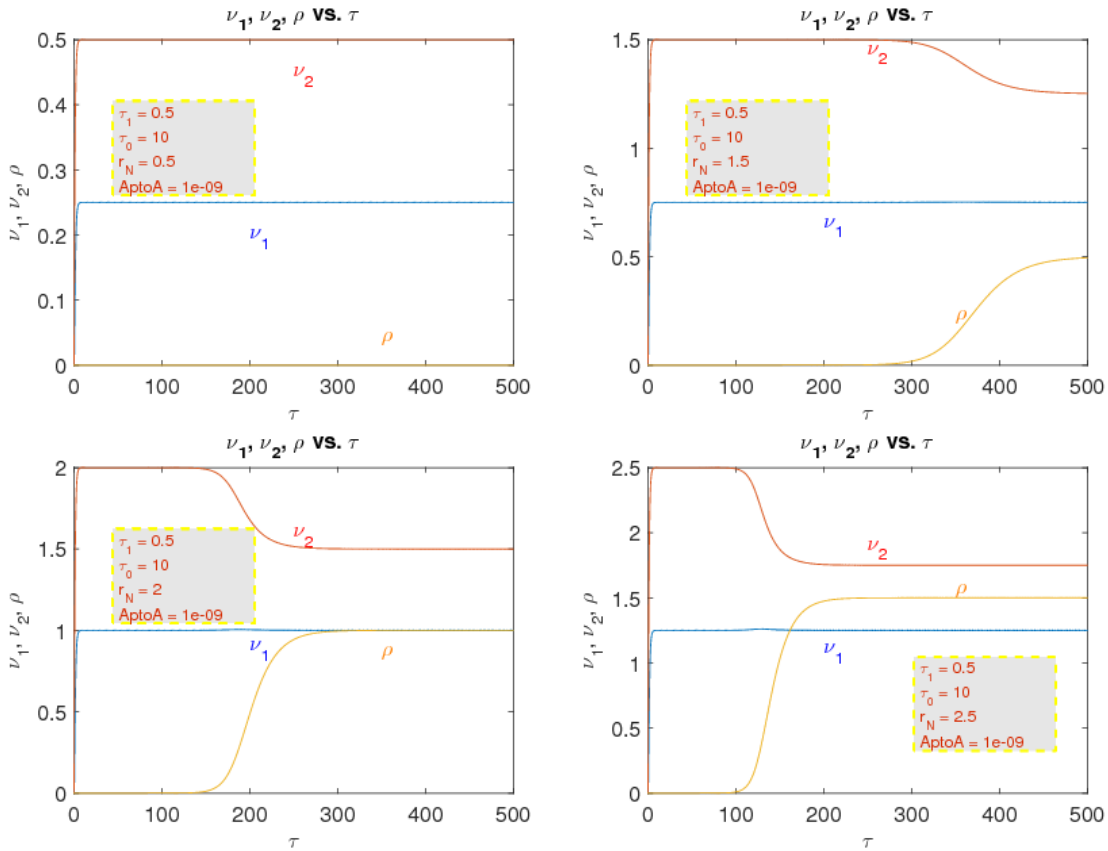
$$\omega_m = \frac{m\pi c}{L}, m \in \mathcal{N}^*.$$

Άρα, (Εξ. 11.28),

$$v_m = \frac{mc}{2L}, m \in \mathcal{N}^*,$$

και

$$L = m \frac{\lambda_m}{2}, \quad (11.76)$$



Εικόνα 11.7: Η επίδραση της μεταβολής του r_N στη μεταβολή των ν_1, ν_2, ρ συναρτήσει του τ . Κρατάμε σταθερά τα $\tau_0 = 10, \frac{A'}{A} = 10^{-9}$ και $\tau_1 = 0.5$, ενώ μεταβάλλουμε το r_N θέτοντας τις τιμές 0.5, 1.5, 2.0, 2.5. Στην εικόνα εμφανίζεται ρ , αλλά πρόκειται για το αδιάστατο ρ της Εξ. 11.75.

όπως αναμενόταν για στάσιμα κύματα, μεταξύ κατόπτρων απεχόντων απόσταση L (μήκος, length). Από την Εξ. 11.28, συμπεράναμε (Εξ. 11.29) ότι η συχνοτική απόσταση των διαμήκων ΗΜ τρόπων είναι

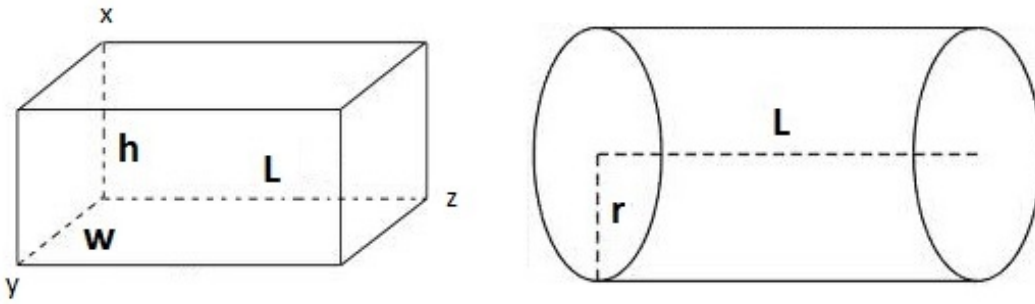
$$\Delta\nu_{m,m+1} = \frac{c}{2L}.$$

Στο 1Δ αυτό πρόβλημα οι λύσεις περιέχουν (Εξ. 8.48) το

$$Z_m(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right),$$

$m = 1, 2, 3, \dots$, οπότε ο αριθμός των κόμβων (nodes), όπου δηλαδή σταθερά μηδενίζεται το $Z_m(z)$, είναι $m' = m - 1$. Θα μπορούσαμε να λύσουμε και τα 1Δ προβλήματα: καθ' ύψος (h) με $p = 1, 2, 3, \dots$ και $p' = p - 1 =$ αριθμός κόμβων στον άξονα x ή κατά πλάτος (w) με $q = 1, 2, 3, \dots$ και $q' = q - 1 =$ αριθμός κόμβων στον άξονα y .

Μια κοιλότητα είναι όμως τριδιάστατη (3Δ), π.χ. σχήματος ορθογωνίου παραλληλεπίπεδου ή κυλίνδρου, όπως φαίνεται στην Εικόνα 11.8. Στην ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα, συνήθως $L \gg h, w$, όπου $L =$ μήκος (length), $h =$ ύψος (height) και $w =$ πλάτος (width). Στην κυλινδρική κοιλότητα, συνήθως $L \gg r$, όπου $L =$ μήκος (length), $r =$ ακτίνα (radius). Οι **εγκάρσιοι τρόποι** προκύπτουν κατά τη λύση του τριδιάστατου προβλήματος και εξαρτώνται από τη γεωμετρία της κοιλότητας, δηλαδή αν π.χ. είναι ορθογώνια παραλληλεπίπεδη ή κυλινδρική. Το θέμα έχει αναπτυχθεί στην Ενότητα 2.10. Ας υποθέσουμε ότι εξετάζουμε μία άδεια ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα με τελείως αγωγίμα τοιχώματα και ακμές ύψους $h = a_x$ (height), πλάτους $w = a_y$ (width) και μήκους $L = a_z$ (length) κατά μήκους των αξόνων x, y και



Εικόνα 11.8: Ορθογώνια παραλληλεπίπεδη και κυλινδρική κοιλότητα.

z , αντιστοίχως. Επιπλέον, ας υποθέσουμε ότι η κοιλότητα βρίσκεται στο πρώτο ογδοημόριο του καρτεσιανού συστήματος συντεταγμένων $Oxyz$ με μία κορυφή στην αρχή του O . Για το ηλεκτρικό πεδίο προκύπτουν οι Εξ. 2.66, 2.67, 2.68

$$\begin{aligned} E_x &= E_{x0} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} && \Rightarrow \text{μηδενίζεται για } y = 0 \text{ και } z = 0, \\ E_y &= E_{y0} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} && \Rightarrow \text{μηδενίζεται για } x = 0 \text{ και } z = 0, \\ E_z &= E_{z0} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t} && \Rightarrow \text{μηδενίζεται για } x = 0 \text{ και } y = 0. \end{aligned}$$

Για το μαγνητικό πεδίο προκύπτουν οι Εξ. 2.72, 2.73, 2.74

$$\begin{aligned} B_x &= \frac{i}{\omega} (E_{y0} k_z - E_{z0} k_y) \sin(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t}, \\ B_y &= \frac{i}{\omega} (E_{z0} k_x - E_{x0} k_z) \cos(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t}, \\ B_z &= \frac{i}{\omega} (E_{x0} k_y - E_{y0} k_x) \cos(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t}. \end{aligned}$$

Ισχύουν ακόμα η Εξ. 2.69

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$$

και η Εξ. 2.70

$$k_x = \frac{m_x \pi}{a_x}, \quad k_y = \frac{m_y \pi}{a_y}, \quad k_z = \frac{m_z \pi}{a_z},$$

όπου $m_x, m_y, m_z \in \mathbb{Z}$. Μπορούμε και να πάρουμε $m_x, m_y, m_z \in \mathbb{N}$, απορροφώντας την αλλαγή προσήμου στα E_{x0}, E_{y0}, E_{z0} , δηλαδή επιτρέποντας στα E_{x0}, E_{y0}, E_{z0} να πάρουν θετικές ή αρνητικές τιμές, τέτοιες που να συμφωνούν με τις συνοριακές συνθήκες. Τα $m_x = p, m_y = q, m_z = m$ που ονομάζονται **αριθμοί τρόπων (mode numbers)** είναι δηλαδή ανεξάρτητοι μη αρνητικοί ακέραιοι που υπακούουν στον περιορισμό πως όχι άνω του ενός μπορούν να μηδενίζεται συγχρόνως [4]. Ο περιορισμός αυτός οφείλεται στο ότι αν δύο ή τρεις από τους m_x, m_y, m_z μηδενίζονται, τότε μηδενίζεται το ΗΜ πεδίο στην κοιλότητα σύμφωνα με τις Εξ. 2.66, 2.67, 2.68 και Εξ. 2.72, 2.73, 2.74. Συνδυάζοντας τα παραπάνω, μπορούμε να γράψουμε ότι η κυκλική συχνότητα και η συχνότητα υπακούουν στον κανόνα

$$\omega_{pqm} = 2\pi\nu_{pqm} = k_{pqm}c, \quad (11.77)$$

όπου k_{pqm} είναι το μέτρο του διανύσματος με συνιστώσες k_x, k_y, k_z .

Για ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα (orthorhombic or rectangular cavity), αποδείξαμε την Εξ. 2.76

$$\omega_{m_x, m_y, m_z} = \pi c \sqrt{\left(\frac{m_x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{m_y}{a_y}\right)^2 + \left(\frac{m_z}{a_z}\right)^2}, \quad \text{άρα,}$$

$$\nu_{m_x, m_y, m_z} = \frac{c}{2} \sqrt{\left(\frac{m_x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{m_y}{a_y}\right)^2 + \left(\frac{m_z}{a_z}\right)^2}.$$

ή

$$\omega_{pqr} = \pi c \sqrt{\left(\frac{p}{h}\right)^2 + \left(\frac{q}{w}\right)^2 + \left(\frac{m}{L}\right)^2}, \quad \text{άρα,}$$

$$\nu_{pqr} = \frac{c}{2} \sqrt{\left(\frac{p}{h}\right)^2 + \left(\frac{q}{w}\right)^2 + \left(\frac{m}{L}\right)^2}.$$

Αν όμως έχουμε τετραγωνική κοιλότητα (tetragonal cavity), με $h = w = a$, τότε

$$\omega_{pqr} = \pi c \sqrt{\frac{p^2 + q^2}{a^2} + \frac{m^2}{L^2}},$$

$$\nu_{pqr} = \frac{c}{2} \sqrt{\frac{p^2 + q^2}{a^2} + \frac{m^2}{L^2}}.$$

Ενώ για κυβική κοιλότητα (cubic cavity), με $h = w = L = a$

$$\omega_{pqr} = \frac{\pi c}{a} \sqrt{p^2 + q^2 + m^2},$$

$$\nu_{pqr} = \frac{c}{2a} \sqrt{p^2 + q^2 + m^2}.$$

Από τις Εξ. 2.66, 2.67, 2.68, 2.72, 2.73, 2.74 προκύπτει ο Πίνακας 11.1 (Πίνακας 2.2)

Πίνακας 11.1: Τρόποι κυβικής κοιλότητας. Οι αριθμοί τρόπων $m_x = p, m_y = q, m_z = m$ είναι ανεξάρτητοι μη αρνητικοί ακέραιοι, υποκείμενοι μόνο στον περιορισμό ότι όχι περισσότεροι από έναν μπορούν να μηδενίζονται συγχρόνως, αλλιώς το ΗΜ πεδίο στην κοιλότητα μηδενίζεται.

$m_x = p$	$m_y = q$	$m_z = m$	$2a/c\nu$	ΗΜ πεδίο
0	0	0	0	0
0	0	1	1	0
0	1	1	$\sqrt{2}$	$\neq 0$
1	1	1	$\sqrt{3}$	$\neq 0$
2	0	0	2	0
2	1	0	$\sqrt{5}$	$\neq 0$

Για την τετραγωνική κοιλότητα

$$\nu_{pqr} = \frac{c}{2} \sqrt{\frac{p^2 + q^2}{a^2} + \frac{m^2}{L^2}} = \frac{c}{2L} \sqrt{1 + \frac{L^2}{a^2} \frac{p^2 + q^2}{m^2}} = \frac{mc}{2L} \sqrt{1 + x}, \quad (11.78)$$

όπου

$$x = \frac{L^2}{a^2} \frac{p^2 + q^2}{m^2}. \quad (11.79)$$

Αυτό το x είναι στην πράξη πολύ μικρό. Επί παραδείγματι, έστω ότι αναφερόμαστε σε ένα LASER He-Ne, με κεντρικό μήκος κύματος $\lambda_0 \approx 632.8 \text{ nm}$, $\nu_0 \approx 0.474 \text{ PHz}$, και μήκος $L = 0.4 \text{ m}$. Ας προσπαθήσουμε να κάνουμε μια εκτίμηση της τάξεως μεγέθους του m . Αν είχαμε μόνο διαμήκεις τρόπους (1Δ πρόβλημα), $\omega_m = \frac{m\pi c}{L} \Rightarrow \nu_m = \frac{mc}{2L} \sim \nu_0 = \frac{c}{\lambda_0} \Rightarrow m \sim \frac{2L}{\lambda_0} = \frac{0.8 \text{ m}}{632.8 \text{ nm}} \Rightarrow m \approx 1.264 \times 10^6$, άρα $m^2 \approx 1.6 \times 10^{12}$. Για $a \approx 1 \text{ mm}$, $(L/a)^2 \approx 160000$, για $a \approx 2 \text{ mm}$, $(L/a)^2 \approx 40000$, για $a \approx 4 \text{ mm}$, $(L/a)^2 \approx 10000$, για $a \approx 10 \text{ mm}$, $(L/a)^2 \approx 1600$. Άρα, για μικρά $p, q \approx 0, 1, 2, \dots$ το x είναι μικρό, οπότε μπορούμε να κάνουμε π.χ. ένα ανάπτυγμα Taylor

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \dots \approx 1 + \frac{x}{2}, \quad (11.80)$$

οπότε προκύπτει

$$\nu_{pqm} \approx \frac{mc}{2L} + \frac{cL}{4a^2} \frac{p^2 + q^2}{m}. \quad (11.81)$$

Άρα,

$$\nu_{00m} \approx \frac{mc}{2L} = \nu_m, \quad (11.82)$$

που είναι οι συχνότητες των διαμήκων τρόπων (longitudinal modes) στο 1Δ πρόβλημα (Εξ. 11.28). **Βεβαίως, στο 3Δ πρόβλημα, αν δύο από τους αριθμούς τρόπων μηδενίζονται, έχουμε μηδενισμό του ΗΜ πεδίου στην κοιλότητα.** Οι τρόποι με $p \neq 0$ ή $q \neq 0$ λέγονται εγκάρσιοι τρόποι (transverse modes). Η συχνοτική απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών εγκαρσίων τρόπων, π.χ. μεταβάλλοντας μόνο το p με συγκεκριμένα q και m είναι λοιπόν

$$\Delta\nu_{p,p+1} \approx \frac{cL}{4a^2} \frac{(p+1)^2 + q^2}{m} - \frac{cL}{4a^2} \frac{p^2 + q^2}{m} = \frac{cL}{4a^2} \frac{2p+1}{m}. \quad (11.83)$$

Για παράδειγμα, για $L = 0.4 \text{ m}$ και $a = 4 \text{ mm}$, $\Delta\nu_{p,p+1} \approx 1.5 (2p+1) \text{ MHz}$, όπου χρησιμοποιήσαμε την εκτίμηση $m \approx 1.264 \times 10^6$. Για σύγκριση, ας θυμηθούμε ότι για $L = 0.4 \text{ m}$, η συχνοτική απόσταση των διαμήκων τρόπων είναι $\Delta\nu_{m,m+1} = \frac{c}{2L} = 375 \text{ MHz}$. Για $p = 1$ προκύπτει $\Delta\nu_{p,p+1} \approx 4.5 \text{ MHz}$, οπότε η συχνοτική απόσταση των εγκαρσίων τρόπων είναι αρκετά μικρότερη από τη συχνοτική απόσταση των διαμήκων τρόπων. Παίρνοντας κι αυτό ως δεδομένο, ποιοτικά, οι διαμήκεις και οι εγκάρσιοι τρόποι σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα παρουσιάζονται [5] στην Εικόνα 11.9. Λάβαμε ακόμα υπ' όψιν ότι για το ίδιο m

$$\begin{aligned} p=1, q=0 \quad \text{ή} \quad p=0, q=1 &\Rightarrow p^2 + q^2 = 1, \\ p=1, q=1 &\Rightarrow p^2 + q^2 = 2, \\ p=2, q=0 \quad \text{ή} \quad p=0, q=2 &\Rightarrow p^2 + q^2 = 4, \\ p=2, q=1 \quad \text{ή} \quad p=1, q=2 &\Rightarrow p^2 + q^2 = 5. \end{aligned}$$

11.8 Μορφή του TEM₀₀ και των TEM_{p'q'} ανώτερης τάξεως σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη και σε κυλινδρική κοιλότητα

Συχνά στην ονοματολογία χρησιμοποιούνται, αντί των δεικτών p, q , οι δείκτες p', q' , οι οποίοι ορίζονται ως εξής:

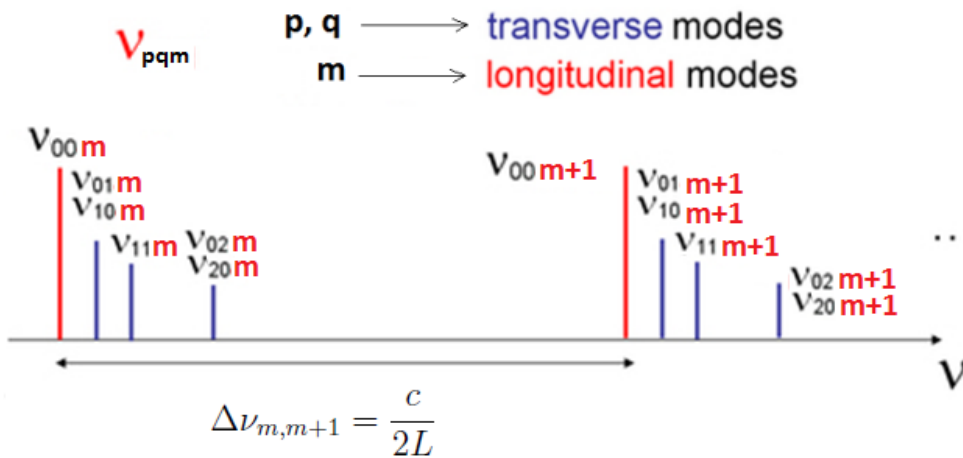
Σε **ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα** οι δείκτες στο TEM_{p'q'} σημαίνουν:

p' = ο αριθμός κόμβων κατά μήκος του άξονα x .

q' = ο αριθμός κόμβων κατά μήκος του άξονα y .

Επί παραδείγματι, TEM₀₂ σημαίνει κανένας κόμβος κατά μήκος του άξονα x και δύο κόμβοι κατά μήκος του άξονα y . Η ένταση ΗΜ ακτινοβολίας του TEM_{p'q'} τρόπου σε καρτεσιανές συντεταγμένες είναι [6]

$$I_{p'q'}(x, y) = I_0 \left[H_{p'} \left(\frac{\sqrt{2}x}{w} \right) e^{-\frac{x^2}{w^2}} \right]^2 \left[H_{q'} \left(\frac{\sqrt{2}y}{w} \right) e^{-\frac{y^2}{w^2}} \right]^2. \quad (11.84)$$



Εικόνα 11.9: Διαμήκεις και εγκάρσιοι τρόποι ν_{pqm} σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα.

Αριστερά στον Πίνακα 11.2 φαίνονται τα πολυώνυμα Hermite $H_n(x)$ που εμπλέκονται στην Εξ. 11.84, ενώ w είναι το FWHM μέγεθος της κηλίδας (spot size) του θεμελιώδους τρόπου TEM_{00} . Η μορφή των TEM που προκύπτει από την Εξ. 11.84 παρουσιάζεται στην Εικόνα 11.10, αριστερά. Οι τρόποι ανώτερης τάξεως έχουν μεγαλύτερη χωρική έκταση. Οπότε, με χρήση μιας οπής (aperture) που παρεμβάλλεται στην έξοδο του laser μπορούμε να κόψουμε εκείνους τους τρόπους που έχουν μεγαλύτερη από την επιθυμητή έκταση. Γενικώς, η συνολική μορφή της εντάσεως ακτινοβολίας οφείλεται στην υπέρθεση όλων των τρόπων της κοιλότητας, παρόλο που συχνά είναι επιθυμητό να λειτουργούμε μόνο στον θεμελιώδη τρόπο.

Πίνακας 11.2: Τα πρώτα πολυώνυμα Hermite, σχετιζόμενα με την ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα και τα πρώτα πολυώνυμα Laguerre, σχετιζόμενα με την κυλινδρική κοιλότητα.

Πολυώνυμα Hermite	Πολυώνυμα Laguerre
$H_0(x) = 1$	$L_0(x) = 1$
$H_1(x) = 2x$	$L_1(x) = -x + 1$
$H_2(x) = 4x^2 - 2$	$L_2(x) = \frac{1}{2}(x^2 - 4x + 2)$
$H_3(x) = 8x^3 - 12x$	$L_3(x) = \frac{1}{6}(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6)$
$H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$	$L_4(x) = \frac{1}{24}(x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24)$
...	...

Σε **κυλινδρική κοιλότητα** οι δείκτες στο $TEM_{p'q'}$ σημαίνουν:

p' = ο αριθμός κόμβων ακτινικά.

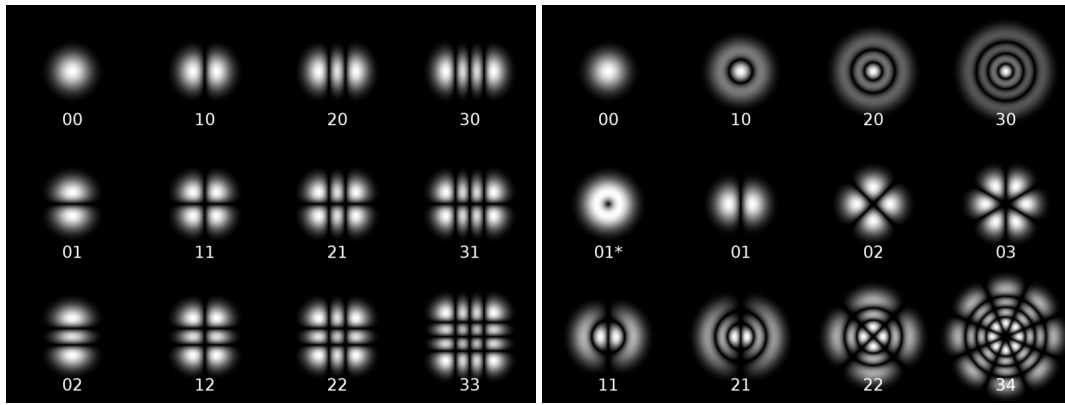
q' = ο αριθμός κόμβων κατά μήκος μισής περιφέρειας, δηλαδή γωνιακά σε γωνία π .

Επί παραδείγματι, TEM_{02} σημαίνει κανένας κόμβος ακτινικά και δύο κατά μήκος μισής περιφέρειας, δηλαδή γωνιακά σε γωνία π . Η ένταση HM ακτινοβολίας του $TEM_{p'q'}$ τρόπου σε πολικές συντεταγμένες (r, φ) είναι [6]

$$I_{p'q'}(\rho, \varphi) = I_0 \rho^{q'} \left[L_{p'}^{q'}(\rho) \right]^2 \cos^2(q'\varphi) e^{-\rho}, \quad (11.85)$$

όπου $\rho = 2r^2/w^2$, w είναι το FWHM μέγεθος κηλίδας του θεμελιώδους τρόπου TEM_{00} , ο οποίος συμπίπτει με τον TEM_{00} της ορθογώνιας παραλληλεπίπεδης κοιλότητας και $L_{p'}^{q'}$ είναι το συσχετισμένο πολυώνυμο Laguerre τάξεως p' και δείκτη q' . Δεξιά στον Πίνακα 11.2 εμφανίζονται τα πολυώνυμα Laguerre,

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n), \quad (11.86)$$



Εικόνα 11.10: [Αριστερά] Εγκάρσιοι τρόποι $TEM_{p'q'}$ σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα [7]. [Δεξιά] Εγκάρσιοι τρόποι $TEM_{p'q'}$ σε κυλινδρική κοιλότητα [8]. Ο TEM_{00} είναι περισσότερο συγκεντρωμένος κοντά στον άξονα z από τους $TEM_{p'q'}$ ανώτερης τάξεως: καθώς αυξάνονται οι δείκτες, οι τρόποι καταλαμβάνουν μεγαλύτερη έκταση στο επίπεδο xy .

από τα οποία κατασκευάζονται τα γενικευμένα ή συσχετισμένα πολυώνυμα Laguerre (generalized Laguerre polynomials or associated Laguerre polynomials) $L_n^a(x)$ που εμπλέκονται στην Εξ. 11.85. Τα πολυώνυμα Laguerre είναι η ειδική περίπτωση για $a = 0$ των γενικευμένων ή συσχετισμένων πολυωνύμων Laguerre. Δηλαδή,

$$L_n^0(x) = L_n(x). \quad (11.87)$$

$$L_n^a(x) = \frac{x^{-a} e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+a}). \quad (11.88)$$

Η μορφή των TEM που προκύπτει από την Εξ. 11.85 παρουσιάζεται στην Εικόνα 11.10, δεξιά.

Συνοπτικά, η μορφή της εντάσεως ΗΜ ακτινοβολίας I των εγκαρσίων τρόπων $TEM_{p'q'}$ σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη (αριστερά) και σε κυλινδρική (δεξιά) κοιλότητα παρουσιάζονται στην Εικόνα 11.10. Στον Πίνακα 11.2 ταξινομούνται τα πρώτα πολυώνυμα Hermite που σχετίζονται με την ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα (αριστερά) και τα πρώτα πολυώνυμα Laguerre που σχετίζονται με την κυλινδρική κοιλότητα (δεξιά).

11.9 Είδη Laser - ενδεικτικές εφαρμογές

Το πρώτο LASER ορατού φωτός ήταν το LASER ρουμπινιού (Ruby LASER) που κατασκευάστηκε το 1960 [9]. Σήμερα υπάρχουν πάρα πολλά είδη LASER, αλλά τα περισσότερα χρησιμοποιούνται μόνο για εξειδικευμένους ερευνητικούς σκοπούς. Τα μήκη κύματός τους εκτείνονται από το υπεριώδες, εις το ορατό, το εγγύς υπέρυθρο, το μέσο υπέρυθρο και το μακρινό υπέρυθρο [10]. Δεν θα επεκταθούμε σε λεπτομέρειες. Εξάλλου, το παρόν σύγγραμμα εστιάζει στην κβαντική οπτική και όχι στα τεχνικά χαρακτηριστικά των LASER για τα οποία υπάρχει αρκετή ελληνόγλωσση βιβλιογραφία, μεταφρασμένη ή μη [11, 12, 13, 14, 15, 16], οπότε δεν θα επεκταθούμε σε τέτοια θέματα. Στον Πίνακα 11.3 παρουσιάζονται τα σημαντικότερα είδη LASER και μερικά μέλη κάθε είδους. Διαφοροποιούνται κυρίως ως προς το ενεργό μέσο και τον μηχανισμό αντήλθεσης.

Οι εφαρμογές των LASER σήμερα καλύπτουν ένα ευρύτατο φάσμα. Ας αναφέρουμε ενδεικτικά μερικές: **έρευνα** (άντληση σε άλλα LASER, συμβολομετρία, ψύξη με LASER, διάφορες φασματοσκοπίες, λιθογραφία, ομοιοστατική μικροσκοπία κ.ά.), **ιατρική** (χειρουργική, οδοντιατρική, εκτομή ιστού, αφαίρεση πέτρας νεφρών, δερματολογία, φωτοθεραπεία αμφιβληστροειδούς κ.ά.), **κοσμητική** (αφαίρεση τατουάζ, ρυτίδων κ.ά.), **τηλεπικοινωνίες, ολογραφία, στρατός, βιομηχανία** (συγκολλήσεις, τομές, φωτισμός οχημάτων, λιθογραφία, χαράξεις κ.ά.), **καθημερινή ζωή** (εκτυπωτές, εγγραφή και ανάγνωση σε δίσκους Blu-ray, DVD, CD κλπ., προβολείς, δείκτες, οπτικοί αναγνώστες, μέτρηση ρύπανσης κ.ά.).

Πίνακας 11.3: Είδη LASER και μερικά μέλη κάθε είδους. Στην πρώτη στήλη αναφέρονται τα ενεργά μέσα και στη δεύτερη τα μήκη κύματος σε nm.

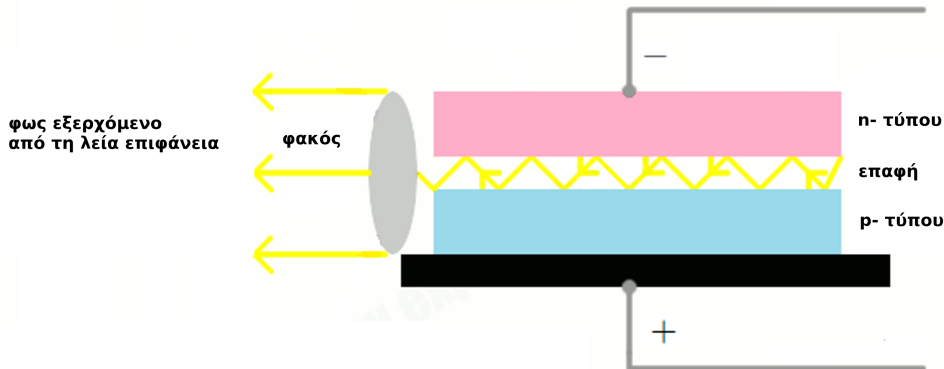
LASER αερίου	άντληση: ηλεκτρική εκκένωση
He-Ne	543.5, 593.9, 611.8, 632.8, 1152.3, 1520, 3391.3
Ar	351, 363.8, 454.6, 457.9, 465.8, 476.5, 472.7, 488.0, 514.5, 528.7
Kr	416, 530.9, 568.2, 647.1, 676.4, 752.5, 799.3
N	337.1
CO ₂	9400, 10600
χημικά LASER	άντληση: χημική αντίδραση
HF	2700 - 2900
DF	3600 - 4200
O, I	1315
LASER βαφής	άντληση: άλλα LASER ή λυχνίες
stilbene	390-435
coumarin	460-515
rhodamine	570-640
LASER ατμών μετάλλου	άντληση: ηλεκτρική εκκένωση
HeCd	441.6, 325
HeHg	567, 615
HeSe	ερυθρό έως υπεριώδες
HeAg	224.3
Sr	430.5
LASER στερεάς καταστάσεως	άντληση: άλλα LASER ή λυχνίες
ρουμπίνι	694.3
Nd:YAG	1064, 1320
NdCrYAG	1064, 1320
Er:YAG	2940
Yb	1030
Ho:YAG	2100
LASER ημιαγωγών	άντληση: διαφορά δυναμικού ή φωτισμός
GaN	400
InGaN	400-500
AlGaInP, AlGaAs	630-900
InGaAsP	1000-2100

11.10 LASER επαφής p-n ή αλλιώς LASER διόδου

Τα περισσότερα laser δεν είναι μικροσκοπικά αντικείμενα. Για παράδειγμα, στα laser He-Ne το μήκος της κοιλότητας είναι μερικά dm και το πάχος της μερικά mm. Παρ' όλα αυτά, χρησιμοποιούμε laser σε φορητά μηχανήματα παραγωγής ήχου και εικόνας (π.χ. DVD players), για να διαβάζουμε τις τιμές των προϊόντων στα καταστήματα με μικρούς ανιχνευτές γραμμωτού κώδικα (barcode readers), σε εκτυπωτές, σε επικοινωνίες με οπτικές ίνες και σε άλλα μικρά αντικείμενα καθημερινής χρήσεως. Αυτά τα μικρού μεγέθους laser είναι συνήθως laser διόδου (laser diodes) ή αλλιώς laser επαφής p-n (p-n junction lasers), τα οποία είναι κατασκευές παρόμοιες με τα LED (= light-emitting diode), τις μικρές ενδεικτικές λυχνίες λειτουργίας διαφόρων συσκευών. Τα laser διόδου πρωτοκατασκευάστηκαν από τον Robert N. Hall τη δεκαετία του 1960 [17]. Επειδή είναι μικρού μεγέθους και φτηνά, είναι σήμερα τα πιο διαδεδομένα laser.

Έχουμε βασικά μια διστρωματική ημιαγωγική διάταξη, όπου το ένα στρώμα είναι ημιαγωγός τύπου p (με

περίσσεια οπών) και το άλλο στρώμα είναι ημιαγωγός τύπου n (με περίσσεια ηλεκτρονίων). Μια συνηθισμένη δίοδος p - n άγει μόνο κατά τη μία διεύθυνση, δηλαδή όταν η διαφορά δυναμικού στα άκρα της έχει τη λεγόμενη ορθή πόλωση (forward bias). Με αντίθετη διαφορά δυναμικού λέμε ότι έχουμε ανάστροφη πόλωση (reverse bias) και η δίοδος δεν άγει. Σε ένα LED ή σε ένα laser δίοδου έχουμε επανασύνδεση ηλεκτρονίων - οπών, η οποία γίνεται διαμέσου του ενεργειακού χάσματος, οπότε παράγονται φωτόνια (μπορεί όμως να εμπλέκονται και φωνόνια στη διαδικασία). Οι συνηθέστεροι ημιαγωγοί που χρησιμοποιούνται σε laser δίοδου είναι τα κράματα $Al_xGa_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$. Ανάλογα με το μέγεθος του ενεργειακού χάσματος, τα φωτόνια αυτά μπορεί να έχουν διάφορα ορατά χρώματα, αλλά και υπέρυθρο ή υπεριώδες.

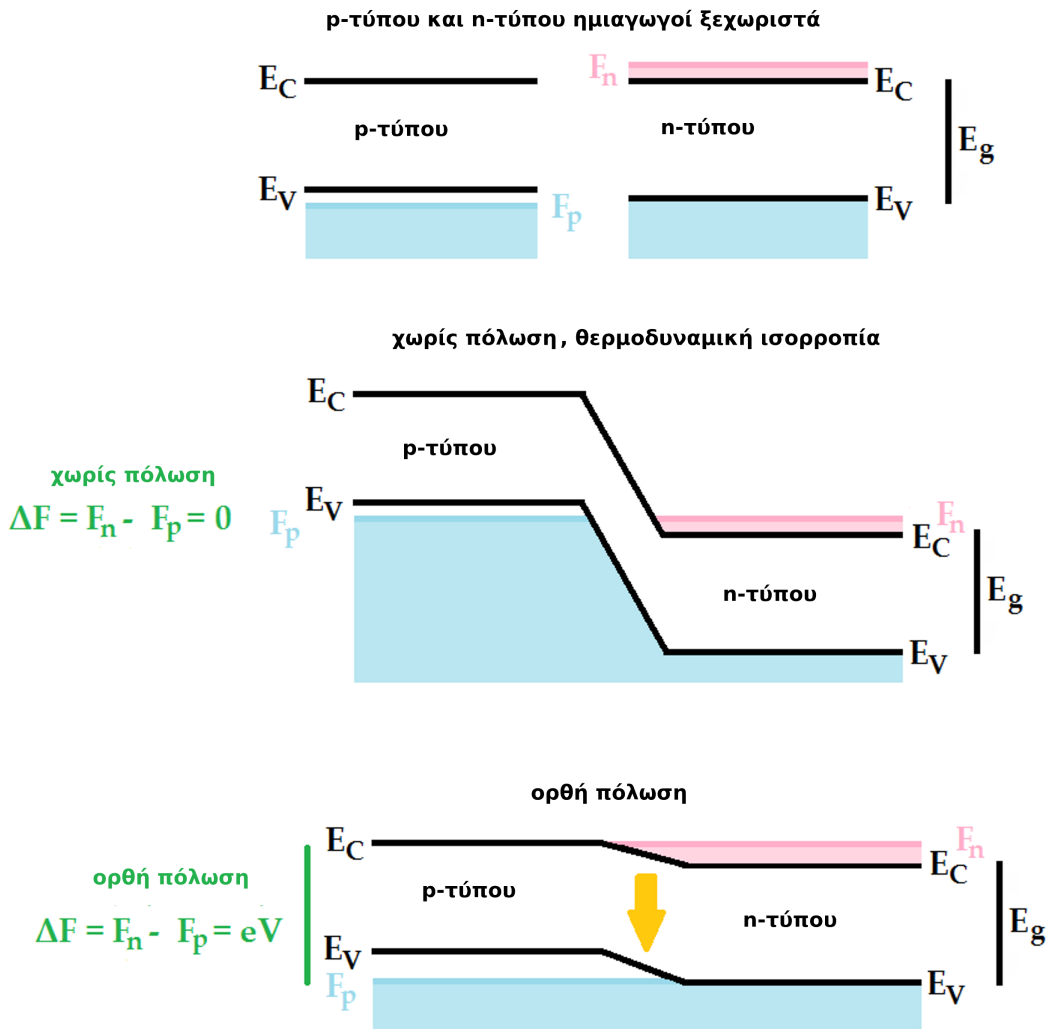


Εικόνα 11.11: Μια διάταξη laser δίοδου με τα δύο ηλεκτρόδια (+) και (-) σε ορθή πόλωση. Οι άνω και κάτω επιφάνειες, που είναι κάθετες στο επίπεδο του σχήματος, έχουν διαστάσεις της τάξεως του mm^2 . Η περιοχή της επαφής, δηλαδή το «μεσαίο» στρώμα, είναι της τάξεως των 100 nm, ενώ οι πλευρικές επιφάνειες είναι της τάξεως των 10-100 μm . Δηλαδή, η διάταξη είναι αρκετά μικρή ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε πολλές καθημερινές μικροσυσκευές.

Η άντληση στην περίπτωση του laser δίοδου οφείλεται στη σωστή (ορθή) διαφορά δυναμικού. Ο αριθμός των προσμείξεων (δοτών) στον ημιαγωγό τύπου n και ο αριθμός των προσμείξεων (αποδεκτών) στον ημιαγωγό τύπου p είναι τόσο μεγάλοι (της τάξεως των $10^{18} cm^{-3}$), ώστε στον ημιαγωγό τύπου n η στάθμη Fermi F_n βρίσκεται στη ζώνη αγωγιμότητας και στον ημιαγωγό τύπου p η στάθμη Fermi F_p βρίσκεται στη ζώνη σθένους (Εικόνα 11.12 άνω). Όταν τα δύο στρώματα έρθουν σε επαφή, η υψηλή συγκέντρωση οπών στην πλευρά του ημιαγωγού τύπου p και η υψηλή συγκέντρωση ηλεκτρονίων στην πλευρά του ημιαγωγού τύπου n δημιουργούν ροές από την πλευρά υψηλής συγκέντρωσης στην πλευρά χαμηλής συγκέντρωσης: τα ηλεκτρόνια διαχέονται στην πλευρά τύπου p και οι οπές διαχέονται στην πλευρά τύπου n , οπότε, στην περιοχή της επαφής, η πλευρά τύπου p φορτίζεται αρνητικά και η πλευρά τύπου n φορτίζεται θετικά, πράγμα που εμποδίζει την περαιτέρω διάχυση ηλεκτρονίων και οπών. Τότε στη διάταξη επέρχεται θερμοδυναμική ισορροπία, οπότε τα επίπεδα Fermi ταυτίζονται και δεν έχουμε πια ροή ηλεκτρονίων ή οπών από το στρώμα p στο στρώμα n ή τούμπαλιν. Δημιουργείται, δηλαδή, ένας φραγμός δυναμικής ενέργειας της τάξεως των 0.1 eV (Εικόνα 11.12 μέση). Εάν εφαρμοστεί εξωτερική διαφορά δυναμικού V , τότε τα επίπεδα Fermi διαχωρίζονται έτσι ώστε

$$\Delta F = F_n - F_p = eV. \quad (11.89)$$

Η τάση λειτουργίας του laser δίοδου είναι μικρή, της τάξεως μεγέθους του V , διότι το ΔF είναι της τάξεως του ενεργειακού χάσματος του ημιαγωγού E_g , το οποίο είναι κοντά στο eV. Έτσι επιτυγχάνεται αναστροφή πληθυσμού στην περιοχή της επαφής (πορτοκαλί βέλος στην Εικόνα 11.12 κάτω). Δηλαδή, εκεί υπάρχουν αρκετά ηλεκτρόνια στη ζώνη αγωγιμότητας και αντιθέτως οπές στη ζώνη σθένους. Κάποια από αυτά τα ηλεκτρόνια μεταπίπτουν αυθορμήτως από τη ζώνη αγωγιμότητας στις κενές θέσεις της ζώνης σθένους, έχουμε δηλαδή



Εικόνα 11.12: Η αρχή λειτουργίας της επαφής p - n ως laser. Άνω: οι ημιαγωγοί τύπου p και τύπου n , ξεχωριστά. Μέση: η δομή χωρίς πόλωση, δηλαδή χωρίς εξωτερική διαφορά δυναμικού, σε θερμοδυναμική ισορροπία. Κάτω: η δομή με ορθή πόλωση, με εξωτερική διαφορά δυναμικού V . Όταν έχει πια σχηματιστεί η δομή, υπάρχουν «τρία στρώματα», διότι έχουμε και την περιοχή της επαφής (όπου φαίνονται κεκλιμένες οι ζώνες). Κατά την ορθή πόλωση έχουμε αναστροφή πληθυσμού στην περιοχή της επαφής, πράγμα που υποδηλώνεται με το πορτοκαλί βέλος. Δηλαδή, στην περιοχή αυτή υπάρχουν πολλά ηλεκτρόνια, τα οποία, καθώς μεταπίπτουν μέσω του ενεργειακού χάσματος E_g , εκπέμπουν φωτόνια και επανασυνδέονται με οπές. Τα φωτόνια αυτά, στη συνέχεια, προκαλούν εξαναγκασμένη εκπομπή σε ηλεκτρόνια της περιοχής επαφής.

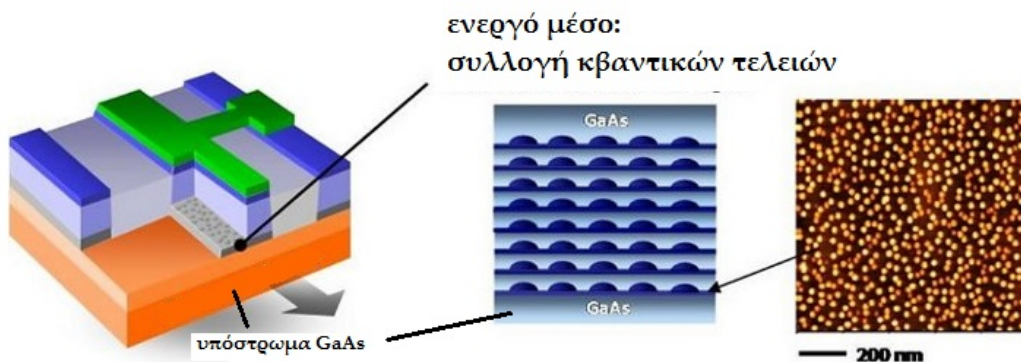
αυθόρμητη εκπομπή. Τα φωτόνια που εκπέμπονται από την αυθόρμητη αυτή εκπομπή δεν είναι, εννοείται, συνεκτικά. Έχουν δηλαδή τυχαία φάση. Εξαναγκάζουν, όμως, άλλα ηλεκτρόνια της ζώνης αγωγιμότητας να μεταπέσουν στη ζώνη σθένους εκπέμποντας φωτόνια, δηλαδή έχουμε εξαναγκασμένη εκπομπή. Δηλαδή, την εκπομπή φωτονίων ίδιας ενέργειας, ορμής, φάσης και πόλωσης. Όμως, επειδή δεν πρόκειται για μετάπτωση από στάθμη πολύ μικρού εύρους σε στάθμη πολύ μικρού εύρους (όπως γίνεται π.χ. σε ένα laser He-Ne), αλλά για μετάπτωση από την κατελιγμένη ενεργειακή περιοχή της ζώνης αγωγιμότητας στην άδεια ενεργειακή περιοχή της ζώνης σθένους, η γραμμή εκπομπής είναι ευρύτερη από π.χ. την γραμμή εκπομπής ενός laser He-Ne, π.χ. 100 φορές ευρύτερη [3].

Τα φωτόνια εξαναγκάζονται να αντανακλούνται στη στενή περιοχή της επαφής μεταξύ των στρωμάτων τύπου p και τύπου n , δημιουργώντας στάσιμα κύματα. Έτσι, τα φωτόνια υποχρεώνονται να περνούν στην επαφή αρκετή ώρα, ώστε να έχουμε πολλές εξαναγκασμένες εκπομπές. Μέρος του ενισχυμένου πια φωτός

εξέρχεται από μία επιφάνεια της δομής, η οποία έχει λειανθεί, ενώ οι άλλες σκοπίμως παραμένουν τραχιές, ώστε να περιορίζεται το φως. Αυτή η λειασμένη επιφάνεια πρέπει να είναι ακριβώς παράλληλη προς την αντίθετή της, ώστε να έχουμε στάσιμα κύματα στην κοιλότητα. Οι δύο αυτές επιφάνειες μπορεί και να καλύπτονται με κάτοπτρα ή μεταλλική επίστρωση ώστε να ενισχύεται η δημιουργία στάσιμων κυμάτων. Με άλλα λόγια, μια διάταξη LED μπορεί να εκπέμψει δέσμη laser, εάν διαθέτει κοιλότητα συντονισμού [3].

11.11 LASER κβαντικών τελειών

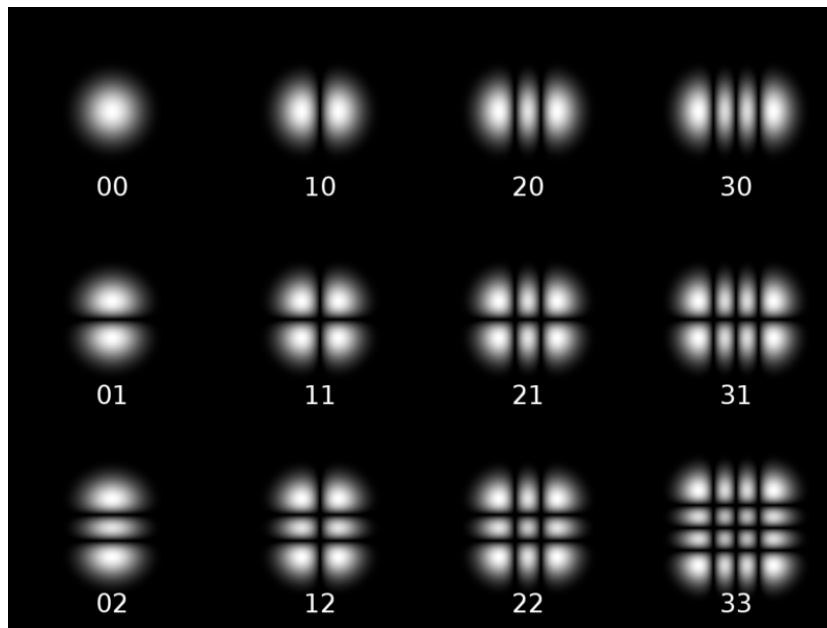
Ένα άλλο laser ημιαγωγών είναι το laser κβαντικών τελειών (quantum dot laser, Εικόνα 11.13). Πρόκειται για διάταξη στην οποία το ενεργό μέσο είναι μια συλλογή κβαντικών τελειών (βλ. Ενότητα 4.3). Λόγω του ισχυρού κβαντικού περιορισμού των φορέων στις κβαντικές τελείες, η ηλεκτρονική τους δομή είναι παρόμοια με αυτήν των ατόμων. Άλλωστε, όπως είπαμε στην ενότητα 4.3, για τον λόγο αυτό οι κβαντικές τελείες ονομάζονται καμιά φορά και τεχνητά άτομα, όταν είναι απλές, ή τεχνητά μόρια, εφ' όσον είναι συζευγμένες. Τα κατασκευαζόμενα από τέτοια ενεργά μέσα laser επιδεικνύουν ιδιότητες παρόμοιες με αυτές των laser αερίου και υπερτερούν από τα άλλα ημιαγωγικά laser, π.χ. ως προς το εύρος της γραμμής εκπομπής. Επειδή η ηλεκτρονική δομή των κβαντικών τελειών εξαρτάται από το μέγεθός τους, αλλά και από το είδος των συνήθως ημιαγωγικών κραμάτων που χρησιμοποιούνται [18, 19], η ενεργός περιοχή μπορεί να κατασκευαστεί έτσι ώστε η διάταξη να λειτουργεί σε διάφορα μήκη κύματος, ακόμα και σε περιοχές που δεν ήταν εφικτές για συνηθισμένα laser ημιαγωγών. Διατάξεις laser κβαντικών τελειών αξιοποιούνται σε εμπορικές εφαρμογές, στην ιατρική, σε οθόνες, στη φασματοσκοπία, στις τηλεπικοινωνίες και αλλού. Προ μερικών χρόνων, κατασκευάστηκε laser κβαντικών τελειών για οπτικές επικοινωνίες [20] στα 10 Gbps = Giga bits per second, με μήκος κύματος λειτουργίας 1.3 μm και θερμοκρασίες λειτουργίας 20 - 70 $^{\circ}\text{C}$. Από τότε, οι επιδόσεις αυτές έχουν βελτιωθεί.



Εικόνα 11.13: Ο κορμός μιας διατάξεως κβαντικών τελειών, ο οποίος μεταδίδει δεδομένα στα 25 Gbps. Εικόνα τροποποιημένη από δελτίο τύπου της Fujitsu, 2010.

11.12 Τεχνικές απομονώσεως των TEM₀₀ και TEM_{p'q'} ανώτερης τάξεως

Στην Εικόνα 11.10 παρουσιάζονται οι εγκάρσιοι τρόποι TEM_{p'q'}. Ας πάρουμε εδώ την περίπτωση της ορθογώνιας παραλληλεπίπεδης κοιλότητας [7], την οποία ξαναπαρουσιάζουμε για διευκόλυνση των αναγνωστών στην Εικόνα 11.14. Παρατηρούμε ότι ο TEM₀₀ είναι περισσότερο συγκεντρωμένος κοντά στον άξονα z (κεντραρισμένος στο σημείο $x = y = 0$) από τους TEM_{p'q'} ανώτερης τάξεως: καθώς αυξάνονται οι δείκτες, ο τρόπος καταλαμβάνει μεγαλύτερη έκταση στο επίπεδο xy. Η πόλωση της δέσμης του φωτός στην έξοδο του laser εξαρτάται από την ανάμειξη των πολώσεων των TEM_{p'q'} που περιέχει [21]. Η πόλωση της εξερχόμενης δέσμης μπορεί να διορθωθεί με τη βοήθεια ενός παραθύρου σε γωνία Brewster, π.χ. δείτε τις



Εικόνα 11.14: Εγκάρσιοι τρόποι $TEM_{p'q'}$ σε ορθογώνια παραλληλεπίπεδη κοιλότητα [7]. Ο TEM_{00} είναι περισσότερο συγκεντρωμένος κοντά στον άξονα z από τους $TEM_{p'q'}$ ανώτερης τάξεως: καθώς αυξάνονται οι δείκτες, οι τρόποι καταλαμβάνουν μεγαλύτερη έκταση στο επίπεδο xy .

Ενότητες 12.1 και 12.3. Οι $TEM_{p'q'}$ ανώτερης τάξεως μπορούν να αποκοπούν με την εισαγωγή ενός διαφράγματος στην πορεία της εξερχομένης δέσμης. Το διάφραγμα αυτό («ίριδα» = οπή μεταβλητού εύρους) κλείνει τόσο ώστε να μην αφήνει να περάσουν οι $TEM_{p'q'}$ ανώτερης τάξεως που έχουν χωρική έκταση μεγαλύτερη από το εύρος της οπής. Έτσι, μπορούμε να απομονώσουμε ακόμα και μια κηλίδα, δηλαδή τον TEM_{00} . Ενώ, ανοίγοντας το εύρος του διαφράγματος, διέρχονται και $TEM_{p'q'}$ ανώτερης τάξεως.

Μπορούμε από την υπέρθεση πολλών $TEM_{p'q'}$ να απομονώσουμε μόνο έναν, ανώτερης τάξεως, με διάφορα τεχνάσματα. Όπως, π.χ. με ένα πολύ λεπτό νήμα, το οποίο τοποθετείται οριζόντια, στο εσωτερικό της κοιλότητας συντονισμού, στο κέντρο της δέσμης laser. Το λεπτό νήμα εισάγει απώλειες λόγω περιθλάσης στον TEM_{00} , επειδή αυτός επικεντρώνεται στο $x = y = 0$. Έτσι ο TEM_{00} καταστρέφεται, ενώ, π.χ. παραμένει ο TEM_{01} , ο οποίος έχει ένταση μηδέν στη θέση $x = y = 0$, οπότε δεν υφίσταται απώλειες. Αν αντιθέτως τοποθετήσουμε το νήμα κατακόρυφα, δεν υφίσταται απώλειες ο TEM_{10} . Επιπλέον, αν το οριζόντιο νήμα μετατοπιστεί λίγο επάνω, τότε θα βρει τον άνω λοβό του 01, οπότε θα καταστρέψει όλο τον τρόπο 01, ενώ κι αν το οριζόντιο νήμα μετατοπιστεί λίγο κάτω, τότε θα βρει τον κάτω λοβό του 01, οπότε θα καταστρέψει όλο τον τρόπο 01. Αν το κατακόρυφο νήμα μετατοπιστεί λίγο αριστερά, τότε θα βρει τον αριστερό λοβό του 10, οπότε θα καταστρέψει όλο τον τρόπο 10, ενώ κι αν το κατακόρυφο νήμα μετατοπιστεί λίγο δεξιά, τότε θα βρει τον δεξιό λοβό του 10, οπότε θα καταστρέψει όλο τον τρόπο 10. Αυτά συμβαίνουν διότι η αλληλεπίδραση με ένα κομμάτι του τρόπου καταστρέφει όλο τον τρόπο, καθώς οι περιοχές, όπου η ένταση του τρόπου μηδενίζεται και οι περιοχές, όπου η ένταση του τρόπου δεν μηδενίζεται αποτελούν μια αδιάσπαστη ενότητα του τρόπου. Η τοποθέτηση του οριζόντιου νήματος σε ανώτερη ή κατώτερη θέση, η οποία καταστρέφει τον 01, και η τοποθέτηση του κατακόρυφου νήματος σε αριστερότερη ή δεξιότερη θέση, η οποία καταστρέφει τον 10, αμφότερες καταστρέφουν και τον 00, αφού η έντασή του είναι παντού μη μηδενική (ο 00 δεν έχει κανέναν κόμβο).

Αν μετατοπιστεί λίγο ακόμα το κατακόρυφο νήμα, θα βρεθεί στο σημείο όπου το πεδίο του 02 μηδενίζεται. Ομοίως, αν μετατοπιστεί λίγο ακόμα το οριζόντιο νήμα, θα βρεθεί στο σημείο όπου το πεδίο του 20 μηδενίζεται. Αυτή η νέα θέση του νήματος θα επιτρέψει στον 02 (ή στον 20) να επιζήσει, εφόσον στη νέα θέση έχει μηδενική ένταση και άρα δεν υφίσταται απώλειες λόγω περιθλάσεως από το λεπτό νήμα. Καταστρέφονται όμως οι 01 και 00 (ή οι 10 και 00). Με παρόμοιο τρόπο μπορούν να απομονωθούν $TEM_{p'q'}$ ακόμα μεγαλύτερης τάξεως.

Βιβλιογραφία

- [1] A. Einstein. “Zur Quantentheorie der Strahlung”. Στο: *Mitteilungen der Physikalischen Gesellschaft* 16 (1916), σσ. 47–62.
- [2] A. Einstein. “Zur Quantentheorie der Strahlung”. Στο: *Physikalische Zeitschrift* 18 (1917), σσ. 121–128.
- [3] Γ. Ι. Παπαδόπουλος και Φ. Λ. Παλληκάρη. *Κβαντική Οπτική και Lasers (εγχειρίδιο μαθήματος)*. Αθήνα: Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2009.
- [4] W. Zimmermann Jr. *The Classical Electromagnetic Modes of a Rectangular Resonant Cavity with particular reference to the text Quantum Physics by R. Eisberg and R. Resnick*. 2012. arXiv: [1207.0792 \[physics.class-ph\]](https://arxiv.org/abs/1207.0792).
- [5] [optique-ingenieur.org courses: Longitudinal and transverse modes](https://www.optique-ingenieur.org/courses/Longitudinal-and-transverse-modes). 2021.
- [6] O. Svelto. *Principles of Lasers*. 5th edition. New York, Dordrecht, Heidelberg, London: Springer, 2010. ISBN: 9781441913012. DOI: [10.1007/978-1-4419-1302-9](https://doi.org/10.1007/978-1-4419-1302-9).
- [7] “Hermite-gaussian” by DrBob at English Wikipedia. Licensed under CC BY-SA 3.0 via Commons. 2021.
- [8] “Laguerre-gaussian” by DrBob at English Wikipedia. Licensed under CC BY-SA 3.0 via Commons. 2021.
- [9] T. H. Maiman. “Stimulated Optical Radiation in Ruby”. Στο: *Nature* 187 (1960), σσ. 493–494. DOI: [10.1038/187493a0](https://doi.org/10.1038/187493a0).
- [10] M. Weber. *Handbook of laser wavelengths*. Taylor και Francis Group, 1999. ISBN: 9780849335082.
- [11] M. Young. *Οπτική και λέιζερ: Οπτικές Ίνες και Κυματοδηγοί*. (Πρωτότυπη έκδοση: *Optics and Lasers*, Springer-Verlag, 2000). ISBN: 9602546758. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ. Μετάφραση: Η. Ζουμπούλης, Γ. Κουρούκλης, Α. Κώνστα, Ε. Λιαροκάπης, Κ. Ράπτης, Ι. Ράπτης, Α. Σεραφετινίδης, Ε. Φαμπρικέζη. Επιστημονική επιμέλεια: Η. Ζουμπούλης, Α. Κώνστα, 2008.
- [12] J. Wilson και J. Hawkes. *Οπτοηλεκτρονική: μια εισαγωγή*. (Πρωτότυπη έκδοση: *Optoelectronics: an introduction*, 3rd edition, Prentice Hall, 1998). ISBN: 9789602546697. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ. Μετάφραση: Α.Α. Σεραφετινίδης, Μ. Ι. Μακροπούλου, Α. Παπαγιάννης, Ι. Ζεργιώτη, Ε. Φαμπρικέζη. Επιστημονική επιμέλεια: Α.Α. Σεραφετινίδης, 2007.
- [13] O. Svelto. *Αρχές των Lasers*. Συμμετρία. Μετάφραση - Επιστημονική επιμέλεια: Γ. Α. Κουρουκλής, Α.Α. Σεραφετινίδης, 1986. ISBN: 9789602664506.
- [14] M. Fox. *Κβαντική Οπτική: Μια εισαγωγή*. (Πρωτότυπη έκδοση: *Quantum Optics: an introduction*, Oxford University Press, 2006). ISBN: 9789605244071. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης. Μετάφραση: Ι. Παπαδόγγονας, 2015.
- [15] Σ. Βες. *Εισαγωγή στην Κβαντική οπτική και Laser*. Θεσσαλονίκη: Εκδόσεις Γιαχουδή - Γιαπούλη, 1999. ISBN: 9780007425389.
- [16] Π. Περσεφόνης. *LASER: Φυσική και Τεχνολογία*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Αράκυνθος, 2010. ISBN: 9789609474047.
- [17] R. N. Hall. Stimulated emission semiconductor devices, 24 October 1962, US Patent number 3245002, 5 April 1966. 1962.
- [18] A. Zora, C. Simserides και G. P. Triberis. “The effect of the size of self-assembled individual quantum dots on their PL spectra”. Στο: *Physica Status Solidi C* 5 (2008), σσ. 3806–3808. DOI: [10.1002/pssc.200780185](https://doi.org/10.1002/pssc.200780185).

- [19] A. Zora, G. P. Triberis και C. Simserides. “Near-Field Optical Properties of Quantum Dots, Applications and Perspectives”. Στο: *Recent Patents on Nanotechnology* 5 (2011), σσ. 188–244. DOI: [10.2174/1872210511105030188](https://doi.org/10.2174/1872210511105030188).
- [20] Fujitsu. *Fujitsu, University of Tokyo Develop World’s First 10Gbit/s Quantum Dot Laser Featuring Breakthrough Temperature-Independent Output*. Press Release. 2004.
- [21] Φ. Παλληκάρη. *Πειράματα με Laser και ιδιότητες της δέσμης του (εγχειρίδιο μαθήματος)*. Αθήνα: ΕΚΠΑ, 2009.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 12

ΔΙΑΦΟΡΑ

Σύνοψη

Παρατίθενται κάποιες χρήσιμες ιδιότητες και στοιχεία. Αναλύουμε για εξισώσεις Fresnel και εξηγούμε τι είναι η γωνία Brewster και η ολική εσωτερική ανάκλαση. Συζητάμε την εκπομπή πολωμένης δέσμης. Αναφερόμαστε στο διάνυσμα Poynting.

Προαπαιτούμενη γνώση: Βασικές γνώσεις Ηλεκτρομαγνητισμού.

12.1 Εξισώσεις Fresnel, Γωνία Brewster

Υπενθυμίζουμε (Ενότητα 2.4) ότι οι Εξ. Maxwell με όρους ολικού φορτίου και ρεύματος, σε διαφορική μορφή (differential form) και ολοκληρωτική μορφή (integral form), είναι

διαφορική μορφή	ολοκληρωτική μορφή
$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$	$\Rightarrow \Phi_{E,S=\partial V} = \oint_{S=\partial V} \vec{E} \cdot d\vec{a} = \frac{q_{\text{εντός } V}}{\epsilon_0}$
$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$	$\Rightarrow \Phi_{B,S=\partial V} = \oint_{S=\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{a} = 0$
$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$	$\Rightarrow \mathcal{E}_{\text{HE}\Delta} = \oint_{L=\partial S} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{\partial \Phi_{B,S}}{\partial t}$
$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$	$\Rightarrow \oint_{L=\partial S} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 I_{\text{που διαπερνά την } S} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \Phi_{E,S}}{\partial t}$

Μεταβήκαμε από τη μία μορφή στην άλλη, χρησιμοποιώντας το θεώρημα Gauss και το θεώρημα Stokes

$$\begin{array}{ll} \text{θεώρημα Gauss} & \oint_{S=\partial V} \vec{\Delta} \cdot d\vec{a} = \int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{\Delta} dV, \\ \text{θεώρημα Stokes} & \oint_{L=\partial S} \vec{\Delta} \cdot d\vec{\ell} = \int_S \vec{\nabla} \times \vec{\Delta} \cdot d\vec{a}. \end{array}$$

Υπενθυμίζεται ότι τα διανύσματα \vec{D} και \vec{H} συνδέονται με τα διανύσματα \vec{E} και \vec{B} , αντιστοίχως, με τις σχέσεις

$$\vec{D} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E}, \quad (12.1)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \mu \vec{H}. \quad (12.2)$$

Ας υποθέσουμε (Υπόθεση 1) ότι **τα ϵ, μ είναι σταθερές και όχι τανυστές.**

Ενώ, οι Εξ. Maxwell με όρους ελευθέρου (free, εξ ου ο δείκτης f) φορτίου και ρεύματος, σε διαφορική μορφή και ολοκληρωτική μορφή είναι

$$\begin{array}{ll} \text{διαφορική μορφή} & \text{ολοκληρωτική μορφή} \\ \boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_f} & \Rightarrow \boxed{\oint_{S=\partial V} \vec{D} \cdot d\vec{a} = q_f, \text{ εντός } V} \end{array} \quad (12.3)$$

$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0} \Rightarrow \boxed{\oint_{S=\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{a} = 0} \quad (12.4)$$

$$\boxed{\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}} \Rightarrow \boxed{\mathcal{E}_{\text{HE}\Delta} = \oint_{L=\partial S} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{\partial \Phi_{B,S}}{\partial t}} \quad (12.5)$$

$$\boxed{\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{J}_f + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}} \Rightarrow \boxed{\oint_{L=\partial S} \vec{H} \cdot d\vec{\ell} = I_{f, \text{που διαπερνά την } S} + \frac{\partial \Phi_{D,S}}{\partial t}} \quad (12.6)$$

Αν δεν υπάρχουν ελεύθερα φορτία και ρεύματα, οι εξισώσεις γίνονται

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0, \quad \oint_{S=\partial V} \vec{D} \cdot d\vec{a} = 0, \quad (12.7)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0, \quad \oint_{S=\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{a} = 0, \quad (12.8)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad \oint_{R=\partial S} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{\partial \Phi_{B,S}}{\partial t}, \quad (12.9)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}, \quad \oint_{R=\partial S} \vec{H} \cdot d\vec{\ell} = \frac{\partial \Phi_{D,S}}{\partial t}. \quad (12.10)$$

Αν έχουμε μια διαχωριστική επιφάνεια δύο μέσων 1 και 2, τότε **επαναλαμβάνοντας την πορεία που ακολουθήσαμε στην Ενότητα 2.5**, δηλαδή εφαρμόζοντας το θεώρημα Gauss σε στοιχειώδη $S = \partial V$

$$\begin{array}{l} \oint_{S=\partial V} \vec{D} \cdot d\vec{a} = 0 \Rightarrow \dots \Rightarrow \\ \boxed{D_{1\perp} = D_{2\perp}} \end{array} \quad (12.11)$$

$$\begin{array}{l} \oint_{S=\partial V} \vec{B} \cdot d\vec{a} = 0 \Rightarrow \dots \Rightarrow \\ \boxed{B_{1\perp} = B_{2\perp}} \end{array} \quad (12.12)$$

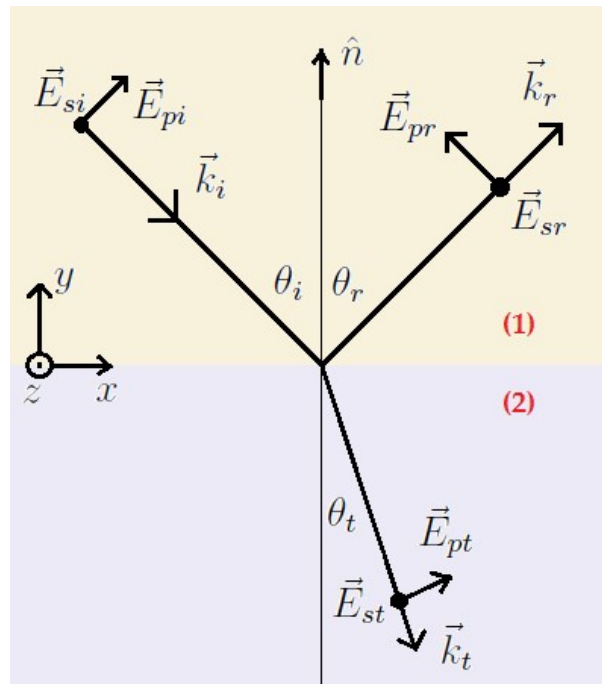
$D_{1\perp}, D_{2\perp}, B_{1\perp}, B_{2\perp}$ είναι οι αλγεβρικές τιμές των καθέτων στη διαχωριστική επιφάνεια συνιστωσών των \vec{D} ή \vec{B} στην πλευρά του μέσου 1 ή 2. Δηλαδή, προκύπτει ότι τα D_{\perp} και B_{\perp} είναι συνεχή στη διεπιφάνεια.

Εφαρμόζοντας το θεώρημα Stokes σε στοιχειώδες $L = \partial S$

$$\oint_{L=\partial S} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{\partial \Phi_{B,S}}{\partial t} \Rightarrow \dots \Rightarrow \boxed{E_{1\parallel} = E_{2\parallel}} \quad (12.13)$$

$$\oint_{L=\partial S} \vec{H} \cdot d\vec{\ell} = \frac{\partial \Phi_{D,S}}{\partial t} \Rightarrow \dots \Rightarrow \boxed{H_{1\parallel} = H_{2\parallel}} \quad (12.14)$$

$E_{1\parallel}, E_{2\parallel}, H_{1\parallel}, H_{2\parallel}$ είναι οι αλγεβρικές τιμές των παραλλήλων στη διαχωριστική επιφάνεια συνιστωσών των \vec{E} ή \vec{H} στην πλευρά του μέσου 1 ή 2. Δηλαδή, προκύπτει ότι τα E_{\parallel} και H_{\parallel} είναι συνεχή στη διεπιφάνεια.



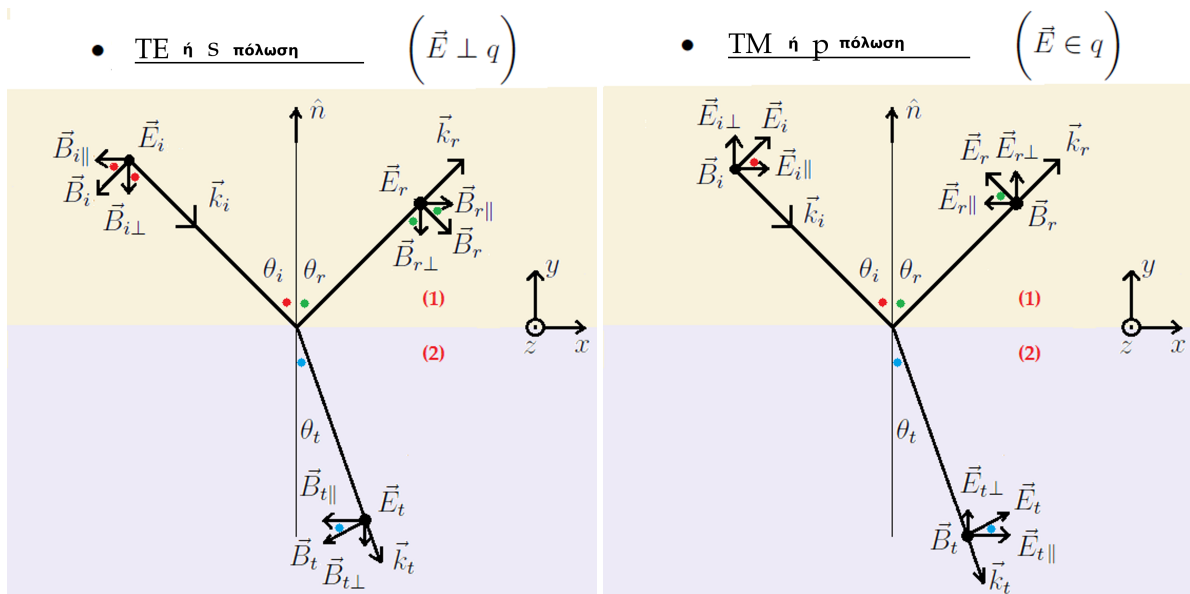
Εικόνα 12.1: Πρόσπτωση ΗΜ κύματος σε διαχωριστική επιφάνεια δύο μέσων 1 και 2. Επίπεδο προσπτώσεως είναι το επίπεδο που σχηματίζουν το προσπίπτον κυματόνισμα \vec{k}_i και το κάθετο στη διεπιφάνεια, στο σημείο προσπτώσεως, μοναδιαίο άνυσμα \hat{n} , δηλαδή εδώ το επίπεδο xy . Φαίνονται οι γωνίες προσπτώσεως, ανακλάσεως, διαθλάσεως $\theta_i, \theta_r, \theta_t$, αντιστοίχως, καθώς και οι s και p συνιστώσες του προσπίπτοντος, ανακλωμένου, διαθλωμένου ηλεκτρικού πεδίου $\vec{E}_{si}, \vec{E}_{pi}, \vec{E}_{sr}, \vec{E}_{pr}, \vec{E}_{st}, \vec{E}_{pt}$, αντιστοίχως.

Ας θεωρήσουμε τώρα την πρόσπτωση ενός ΗΜ κύματος σε μια **διεπιφάνεια** δηλαδή μια διαχωριστική επιφάνεια δύο μέσων 1 και 2 (Εικόνα 12.1) και ότι δεν υπάρχουν ελεύθερα φορτία ή ρεύματα, οπότε ισχύουν οι Εξ. 12.7, 12.8, 12.9, 12.10 καθώς και οι Εξ. 12.11, 12.12, 12.13, 12.14. Περαιτέρω, ας ονομάσουμε η το επίπεδο προσπτώσεως, δηλαδή το επίπεδο που σχηματίζουν το προσπίπτον κυματόνισμα (incident wave vector) \vec{k}_i και το κάθετο στη διεπιφάνεια, στο σημείο προσπτώσεως, μοναδιαίο άνυσμα \hat{n} . Στην Εικόνα 12.1 είναι το επίπεδο xy . Παρεμπιπτόντως, ας ονομάσουμε \vec{k}_r το ανακλώμενο κυματόνισμα (reflected wave vector) και \vec{k}_t το διερχόμενο (transmitted) ή διαθλώμενο (refracted) κυματόνισμα. Η πόλωση ενός ΗΜ κύματος που προσπίπτει σε μια διαχωριστική επιφάνεια χαρακτηρίζεται από τη διεύθυνση του \vec{E} ως προς το η .

Συγκεκριμένα, η πόλωση χαρακτηρίζεται ως s ή p από τις γερμανικές λέξεις senkrecht=κάθετος ή parallel, αντιστοίχως, αναλόγως με το αν το \vec{E} είναι κάθετο ή παράλληλο στο επίπεδο q . Σχηματικά, αν ταυτίσουμε το επίπεδο προοπτικής με το επίπεδο της σελίδας,

- ⊙ \vec{E} πόλωση s ($\vec{E} \perp q$) πόλωση TE (transverse electric),
- ↗ \vec{E} πόλωση p ($\vec{E} \in q$) πόλωση TM (transverse magnetic).

Παρακάτω θα εξετάσουμε ξεχωριστά την πρόσπτωση ΗΜ κύματος σε διαχωριστική επιφάνεια δύο υλικών είτε για την περίπτωση της πολώσεως TE ή αλλιώς πολώσεως s , είτε για την περίπτωση της πολώσεως TM ή αλλιώς πολώσεως p . Πριν προχωρήσουμε, υπενθυμίζεται ότι $\vec{E} \times \vec{B} \parallel \vec{k}$. Με τον δείκτη \perp δηλώνουμε συνιστώσα πεδίου κάθετη στη διαχωριστική επιφάνεια και με τον δείκτη \parallel δηλώνουμε συνιστώσα παράλληλη στη διαχωριστική επιφάνεια.



Εικόνα 12.2: [Αριστερά] Πόλωση TE ή αλλιώς πόλωση s ($\vec{E} \perp q$). Φαίνονται τα $\vec{E}_i, \vec{E}_r, \vec{E}_t, \vec{B}_i, \vec{B}_{i\perp}, \vec{B}_{i\parallel}, \vec{B}_r, \vec{B}_{r\perp}, \vec{B}_{r\parallel}, \vec{B}_t, \vec{B}_{t\perp}, \vec{B}_{t\parallel}$. [Δεξιά] Πόλωση TM ή αλλιώς πόλωση p ($\vec{E} \in q$). Φαίνονται τα $\vec{B}_i, \vec{B}_r, \vec{B}_t, \vec{E}_i, \vec{E}_{i\perp}, \vec{E}_{i\parallel}, \vec{E}_r, \vec{E}_{r\perp}, \vec{E}_{r\parallel}, \vec{E}_t, \vec{E}_{t\perp}, \vec{E}_{t\parallel}$. Ο δείκτης \perp σημαίνει συνιστώσα κάθετη στη διαχωριστική επιφάνεια και ο δείκτης \parallel συνιστώσα παράλληλη στη διαχωριστική επιφάνεια. Με τις χρωματιστές βούλες δηλώνονται ίσες γωνίες.

Στην Εικόνα 12.2 αριστερά παρουσιάζεται η πόλωση TE ή αλλιώς πόλωση s , δηλαδή η κατάσταση όπου $\vec{E} \perp q$. Από την Εξ. 12.1, επειδή $\vec{E} \perp q \Rightarrow \vec{D} \perp q$. Τότε,

$$\text{Συνθήκη Συνέχειας } D_{\perp} \text{ (Εξ. 12.11)} \Rightarrow \text{τίποτε } (\nexists \text{ τέτοιες συνιστώσες για πόλωση } s),$$

$$\text{Συνθήκη Συνέχειας } B_{\perp} \text{ (Εξ. 12.12)} \Rightarrow -B_i \sin \theta_i - B_r \sin \theta_r = -B_t \sin \theta_t,$$

$$\text{Συνθήκη Συνέχειας } E_{\parallel} \text{ (Εξ. 12.13)} \Rightarrow E_r + E_i = E_t,$$

$$\text{Συνθήκη Συνέχειας } H_{\parallel} \text{ (Εξ. 12.14)} \Rightarrow -\frac{B_i \cos \theta_i}{\mu_0 \mu_1} + \frac{B_r \cos \theta_r}{\mu_0 \mu_1} = -\frac{B_t \cos \theta_t}{\mu_0 \mu_2}.$$

Στην Εικόνα 12.2 δεξιά παρουσιάζεται η πόλωση TM ή αλλιώς πόλωση p , δηλαδή η κατάσταση όπου

$\vec{E} \in q$, οπότε $\vec{B} \perp q$.

$$\begin{aligned} \text{Συνθήκη Συνέχειας } D_{\perp} \text{ (Εξ. 12.11)} &\Rightarrow \varepsilon_1(E_i \sin \theta_i + E_r \sin \theta_r) = \varepsilon_2 E_t \sin \theta_t, \\ \text{Συνθήκη Συνέχειας } B_{\perp} \text{ (Εξ. 12.12)} &\Rightarrow \text{τίποτε (}\nexists \text{ τέτοιες συνιστώσες για πόλωση } p\text{)}, \\ \text{Συνθήκη Συνέχειας } E_{\parallel} \text{ (Εξ. 12.13)} &\Rightarrow E_i \cos \theta_i - E_r \cos \theta_r = E_t \cos \theta_t, \\ \text{Συνθήκη Συνέχειας } H_{\parallel} \text{ (Εξ. 12.14)} &\Rightarrow \frac{B_i}{\mu_0 \mu_1} + \frac{B_r}{\mu_0 \mu_1} = \frac{B_t}{\mu_0 \mu_2}. \end{aligned}$$

Έστω ότι c_0 είναι η ταχύτητα του φωτός στο κενό και c η ταχύτητα του φωτός εντός κάποιου υλικού, ενώ n είναι ο δείκτης διαθλάσεως του υλικού. Τότε

$$\left. \begin{aligned} \frac{E}{B} = c \\ n = \frac{c_0}{c} \end{aligned} \right\} \Rightarrow B = n \frac{E}{c_0}. \quad (12.15)$$

Ας υποθέσουμε ότι (Υπόθεση 2) **κατά την αλλαγή υλικών και κατά τη διέλευση μέσω υλικού δεν αλλάζει η συχνότητα** ν του ΗΜ κύματος. Λόγω του θεμελιώδους νόμου της κυματικής

$$c = \lambda \nu = \frac{2\pi}{k} \nu, \quad (12.16)$$

$$n = \frac{c_0}{c} = \frac{2\pi \nu |\vec{k}|}{|\vec{k}_0| 2\pi \nu} \Rightarrow \left. \begin{aligned} |\vec{k}_i| = n_i |\vec{k}_0| \\ |\vec{k}_r| = n_r |\vec{k}_0| \\ |\vec{k}_t| = n_t |\vec{k}_0| \\ n_1 = n_i = n_r \\ n_2 = n_t \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{\begin{aligned} |\vec{k}_i| = n_1 |\vec{k}_0| \\ |\vec{k}_r| = n_1 |\vec{k}_0| \\ |\vec{k}_t| = n_2 |\vec{k}_0| \end{aligned}} \quad (12.17)$$

Αν τα πλάτη είναι σταθερά, τότε στην πόλωση ΤΕ, η συνέχεια της E_{\parallel} , δηλαδή η σχέση $E_r + E_i = E_t$, συνεπάγεται

$$\left. \begin{aligned} E_{0r} e^{i(\vec{k}_r \cdot \vec{r} - \omega_r t)} + E_{0i} e^{i(\vec{k}_i \cdot \vec{r} - \omega_i t)} = E_{0t} e^{i(\vec{k}_t \cdot \vec{r} - \omega_t t)} \\ \forall t, \forall \vec{r} \text{ στη διεπιφάνεια} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{\vec{k}_r \cdot \vec{r} - \omega_r t = \vec{k}_i \cdot \vec{r} - \omega_i t = \vec{k}_t \cdot \vec{r} - \omega_t t} \quad (12.18)$$

ήτοι καταλήγουμε σε μια συνθήκη ταιριάσματος φάσεων (phase matching condition). Ενώ, αν τα πλάτη είναι σταθερά στην πόλωση ΤΜ, η συνέχεια της H_{\parallel} , δηλαδή η σχέση $\frac{B_i}{\mu_0 \mu_1} + \frac{B_r}{\mu_0 \mu_1} = \frac{B_t}{\mu_0 \mu_2}$ συνεπάγεται, παρομοίως, την Εξ. 12.18. Λαμβάνοντας υπ' όψιν την Υπόθεση 2 συνάγεται ότι $\omega_r = \omega_i = \omega_t$, άρα

$$\boxed{\vec{k}_r \cdot \vec{r} = \vec{k}_i \cdot \vec{r} = \vec{k}_t \cdot \vec{r}} \quad (12.19)$$

Ας κοιτάξουμε την Εικόνα 12.2, ας θυμηθούμε την Εξ. 12.17. Τότε, $\vec{k}_i \cdot \vec{r} = \vec{k}_r \cdot \vec{r} \Rightarrow$

$$\begin{aligned} |\vec{k}_i| |\vec{r}| \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_i\right) = |\vec{k}_r| |\vec{r}| \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_r\right) \Rightarrow n_1 |\vec{k}_0| \sin \theta_i = n_1 |\vec{k}_0| \sin \theta_r \Rightarrow \\ \boxed{\theta_r = \theta_i} \end{aligned} \quad (12.20)$$

που είναι ο νόμος της ανακλάσεως (reflection law). Ακόμα,

$$\vec{k}_i \cdot \vec{r} = \vec{k}_t \cdot \vec{r} \Rightarrow |\vec{k}_i| |\vec{r}| \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_i\right) = |\vec{k}_t| |\vec{r}| \cos\left(\frac{\pi}{2} - \theta_t\right) \Rightarrow n_1 |\vec{k}_0| \sin \theta_i = n_2 |\vec{k}_0| \sin \theta_t \Rightarrow$$

$$\boxed{n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t} \quad (12.21)$$

που είναι ο νόμος της διαθλάσεως (refraction law).

Ας εξετάσουμε λεπτομερέστερα την πόλωση TE, χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις που βρήκαμε λίγο πριν. Θα υποθέσουμε ότι τα υλικά μας είναι μη μαγνητικά, δηλαδή πως ισχύει ότι $\mu_1 = \mu_2 = 1$.

$$\left. \begin{array}{l} E_r + E_i = E_t \\ \frac{B_i \cos \theta_i}{\mu_0 \mu_1} - \frac{B_r \cos \theta_r}{\mu_0 \mu_1} = \frac{B_t \cos \theta_t}{\mu_0 \mu_2} \\ \mu_1 = \mu_2 = 1 \\ B = n \frac{E}{c_0} \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} E_r + E_i = E_t \\ n_1 E_i \cos \theta_i - n_1 E_r \cos \theta_r = n_2 E_t \cos \theta_t \\ n := \frac{n_2}{n_1} \text{ (ο σχετικός δείκτης διαθλάσεως)} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{array}{l} E_r + E_i = E_t \\ E_i \cos \theta_i - E_r \cos \theta_r = n E_t \cos \theta_t \end{array} \right\} \xrightarrow{\theta_i = \theta_r} \left. \begin{array}{l} E_r + E_i = E_t \\ E_i - E_r = \frac{n E_t \cos \theta_t}{\cos \theta_i} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\text{(προσθέτοντας κατά μέλη)} \quad 2E_i = E_t \left(1 + \frac{n \cos \theta_t}{\cos \theta_i}\right)$$

$$\boxed{t_{TE} := \frac{E_t}{E_i} = \frac{2 \cos \theta_i}{\cos \theta_i + n \cos \theta_t} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t}} \quad (12.22)$$

Όμως,

$$n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t \quad \text{ή} \quad \sin \theta_i = n \sin \theta_t$$

$$\text{ενώ} \quad \cos \theta_t = \sqrt{1 - \sin^2 \theta_t} = \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta_i}{n^2}},$$

$$\text{οπότε} \quad t_{TE} = \frac{2 \cos \theta_i}{\cos \theta_i + n \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta_i}{n^2}}}.$$

Άρα,

$$\boxed{t_{TE} = \frac{2 \cos \theta_i}{\cos \theta_i + \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_i}}} \quad (12.23)$$

Επίσης,

$$\left. \begin{array}{l} E_t = E_i + E_r = \frac{(E_i - E_r) \cos \theta_i}{n \cos \theta_t} \\ E_r \left(1 + \frac{\cos \theta_i}{n \cos \theta_t}\right) = E_i \left(\frac{\cos \theta_i}{n \cos \theta_t} - 1\right) \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$r_{TE} := \frac{E_r}{E_i} = \frac{\cos \theta_i - n \cos \theta_t}{\cos \theta_i + n \cos \theta_t} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} \quad (12.24)$$

Άρα,

$$r_{TE} = \frac{\cos \theta_i - \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_i}}{\cos \theta_i + \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_i}} \quad (12.25)$$

Άρα, οι Εξ. 12.23 και 12.25 οδηγούν στο συμπέρασμα

$$t_{TE} = r_{TE} + 1 \quad (12.26)$$

Τα t_{TE} και r_{TE} που ορίζονται στις Εξ. 12.22, 12.24 είναι απλώς πηλικά πλατών και όχι διαπερατότητα ή διελυσιμότητα (transmittance, T) και ανακλαστικότητα ή ανακλασιμότητα (reflectance, R). Τα δύο τελευταία ορίζονται παρακάτω, στις Εξ. 12.53.

Αν θέλουμε να μην υπάρχει ανάκλαση TE, πρέπει $r_{TE} = 0$, άρα, λόγω της Εξ. 12.24,

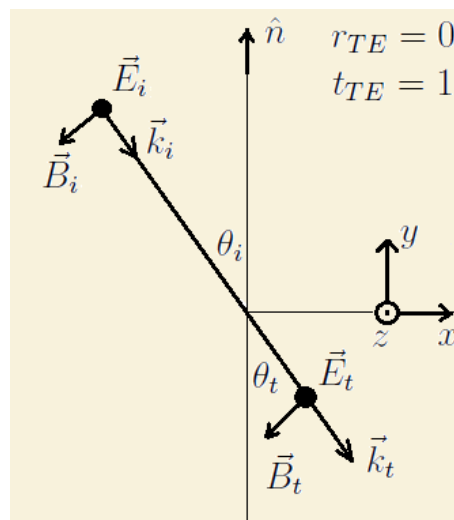
$$\left. \begin{array}{l} n_i \cos \theta_i = n_t \cos \theta_t \\ \text{αλλά (Εξ. 12.21)} \ n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \tan \theta_i = \tan \theta_t \\ \text{όμως οι } \theta_i, \theta_t \text{ είναι οξείες γωνίες} \end{array} \right\} \Rightarrow \quad (12.27)$$

$$\theta_t = \theta_i \quad (12.28)$$

οπότε λόγω των Εξ. 12.27 συνεπάγεται

$$n_t = n_i \quad (12.29)$$

Οι Εξ. 12.28 και 12.29 σημαίνουν ότι το ΗΜ κύμα δεν αλλάζει μέσο διαδόσεως. Δηλαδή πρόκειται για τετριμμένη λύση, σε αυτήν την περίπτωση δεν υπάρχει διεπιφάνεια. Συμπερασματικά, δεν είναι δυνατόν να μην υπάρχει ανακλώμενη s πόλωση. Λόγω αυτών, η Εξ. 12.22 δίνει $t_{TE} = 1$. Τα $r_{TE} = 0, t_{TE} = 1$ επαληθεύουν την Εξ. 12.26. Δείτε την Εικόνα 12.3.



Εικόνα 12.3: Αν θέλουμε να μην υπάρχει ανάκλαση TE (να μην υπάρχει ανακλώμενη s πόλωση), το ΗΜ κύμα δεν αλλάζει μέσο διαδόσεως. Δηλαδή πρόκειται για τετριμμένη λύση, σε αυτήν την περίπτωση δεν υπάρχει διεπιφάνεια. Συμπέρασμα: Δεν είναι δυνατόν να μην υπάρχει ανακλώμενη s πόλωση.

Ας εξετάσουμε λεπτομερέστερα την πόλωση **TM**, χρησιμοποιώντας τις εξισώσεις που βρήκαμε λίγο πριν. Θα υποθέσουμε ότι τα υλικά μας είναι μη μαγνητικά, δηλαδή πως ισχύει ότι $\mu_1 = \mu_2 = 1$.

$$\left. \begin{aligned} E_i \cos \theta_i - E_r \cos \theta_r &= E_t \cos \theta_t \\ \frac{B_i}{\mu_0 \mu_1} + \frac{B_r}{\mu_0 \mu_1} &= \frac{B_t}{\mu_0 \mu_2} \\ \mu_1 &= \mu_2 = 1 \\ B &= n \frac{E}{c_0} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} E_i \cos \theta_i - E_r \cos \theta_r &= E_t \cos \theta_t \\ n_1 E_i + n_1 E_r &= n_2 E_t \\ n &:= \frac{n_2}{n_1} \text{ (ο σχετικός δείκτης διαθλάσεως)} \end{aligned} \right\} \begin{matrix} \theta_i = \theta_r \\ \Rightarrow \end{matrix}$$

$$\left. \begin{aligned} E_i - E_r &= E_t \frac{\cos \theta_i}{\cos \theta_t} \\ E_i + E_r &= n E_t \end{aligned} \right\} \Rightarrow \text{(προσθέτοντας κατά μέλη)} \quad 2E_i = E_t \left(n + \frac{\cos \theta_t}{\cos \theta_i} \right) \Rightarrow$$

$$t_{TM} := \frac{E_t}{E_i} = \frac{2 \cos \theta_i}{n \cos \theta_i + \cos \theta_t} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_t \cos \theta_i + n_i \cos \theta_t} \quad (12.30)$$

Εναλλακτικά,

$$t_{TM} = \frac{2 \cos \theta_i}{n \cos \theta_i + \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \theta_i}{n^2}}} \Rightarrow$$

$$t_{TM} = \frac{2n \cos \theta_i}{n^2 \cos \theta_i + \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_i}} \quad (12.31)$$

Επίσης,

$$\left. \begin{aligned} E_t &= \frac{n \cos \theta_i}{\cos \theta_t} (E_i - E_r) = (E_i + E_r) \\ E_i \left(\frac{n \cos \theta_i}{\cos \theta_t} - 1 \right) &= E_r \left(\frac{n \cos \theta_i}{\cos \theta_t} + 1 \right) \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$r_{TM} := \frac{E_r}{E_i} = \frac{n \cos \theta_i - \cos \theta_t}{n \cos \theta_i + \cos \theta_t} = \frac{n_t \cos \theta_i - n_i \cos \theta_t}{n_t \cos \theta_i + n_i \cos \theta_t} \quad (12.32)$$

ή

$$r_{TM} = \frac{n^2 \cos \theta_i - \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_i}}{n^2 \cos \theta_i + \sqrt{n^2 - \sin^2 \theta_i}} \quad (12.33)$$

Άρα,

$$r_{TM} - n t_{TM} = -1 \quad (12.34)$$

Τα t_{TM} και r_{TM} που ορίζονται στις Εξ. 12.30, 12.32 είναι απλώς πηλικά πλατών και όχι διαπερατότητα ή διελυσσιμότητα (transmittance, T) και ανακλαστικότητα ή ανακλασιμότητα (reflectance, R). Τα δύο τελευταία ορίζονται παρακάτω, στις Εξ. 12.53.

Αν θέλουμε να μην υπάρχει ανάκλαση TM, πρέπει $r_{TM} = 0$, άρα, λόγω της Εξ. 12.32,

$$\left. \begin{aligned} n_t \cos \theta_i &= n_i \cos \theta_t \\ \text{αλλά (Εξ. 12.21)} \quad n_t \sin \theta_t &= n_i \sin \theta_i \end{aligned} \right\} \Rightarrow \frac{\cos \theta_i}{\sin \theta_t} = \frac{\cos \theta_t}{\sin \theta_i} \Rightarrow \sin 2\theta_t = \sin 2\theta_i. \quad (12.35)$$

$$\text{Άρα,} \quad (1) \quad 2\theta_t = 2\theta_i \quad \text{ή} \quad (2) \quad 2\theta_t = \pi - 2\theta_i.$$

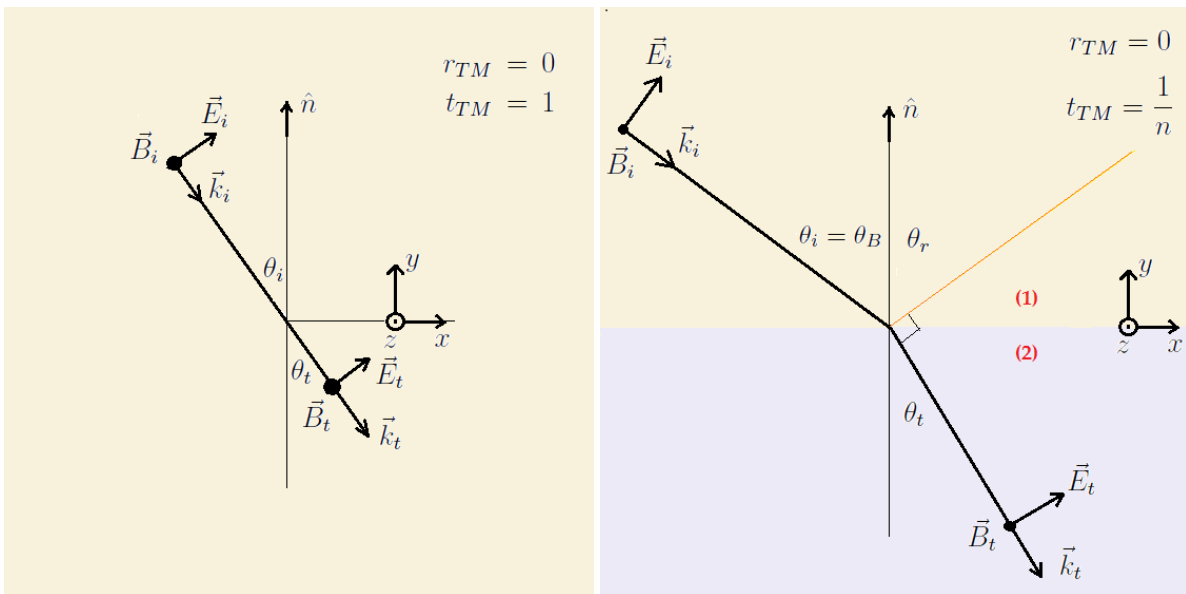
Από την επιλογή (1) προκύπτει

$$\boxed{\theta_t = \theta_i} \quad (12.36)$$

και, λόγω της Εξ. 12.21,

$$\boxed{n_t = n_i} \quad (12.37)$$

Οι Εξ. 12.36-12.37 σημαίνουν ότι το ΗΜ κύμα δεν αλλάζει μέσο διαδόσεως. Δηλαδή πρόκειται για τετριμμένη λύση, σε αυτήν την περίπτωση δεν υπάρχει διεπιφάνεια. Λόγω αυτών, η Εξ. 12.30 δίνει $t_{TM} = 1$. Τα $r_{TM} = 0$, $t_{TM} = 1$, λόγω της Εξ. 12.37, επαληθεύουν την Εξ. 12.34. Δείτε την Εικόνα 12.4 αριστερά.



Εικόνα 12.4: [Αριστερά] Αν θέλουμε να μην υπάρχει ανάκλαση TM (να μην υπάρχει ανακλώμενη p πόλωση), η μία περίπτωση (επιλογή (1)) είναι το ΗΜ κύμα να μην αλλάζει μέσο διαδόσεως. Δηλαδή πρόκειται για τετριμμένη λύση, σε αυτήν την περίπτωση δεν υπάρχει διεπιφάνεια. Τα $r_{TM} = 0$, $t_{TM} = 1$, λόγω της Εξ. 12.37, επαληθεύουν την Εξ. 12.34, δηλαδή $r_{TM} - nt_{TM} = -1$. [Δεξιά] Αν θέλουμε να μην υπάρχει ανάκλαση TM (να μην υπάρχει ανακλώμενη p πόλωση), στην άλλη περίπτωση (επιλογή (2)), η ανακλώμενη δέσμη είναι κάθετη στη διαθλωμένη δέσμη. Όμως, η ανακλώμενη δέσμη, η οποία εδώ σημειώνεται με την πορτοκαλί γραμμή, αφορά την πόλωση TE. Ισχύει $n = n_t/n_i = \tan \theta_i$ και η γωνία θ_i , η οποία ικανοποιεί τη σχέση αυτή ονομάζεται γωνία Brewster, θ_B . Δηλαδή, $\tan \theta_B = n_t/n_i = n$. Τα $r_{TM} = 0$, $t_{TM} = 1/n$ επαληθεύουν την Εξ. 12.34, δηλαδή $r_{TM} - nt_{TM} = -1$. Συμπέρασμα: Είναι δυνατόν να μην υπάρχει ανακλώμενη πόλωση p και αυτό συμβαίνει όταν $\theta_i = \theta_B$.

Από την επιλογή (2) προκύπτει $\theta_t = \frac{\pi}{2} - \theta_i$ ή $\theta_i + \theta_t = \frac{\pi}{2}$, το οποίο λόγω του νόμου της ανακλάσεως (Εξ. 12.20) οδηγεί στο $\theta_r + \theta_t = \frac{\pi}{2}$. Αν ονομάσουμε λ τη γωνία μεταξύ ανακλωμένης και διαθλωμένης

δέσμης, ισχύει $\theta_r + \lambda + \theta_t = \pi$. Οπότε, $\lambda = \frac{\pi}{2}$, δηλαδή η ανακλώμενη δέσμη είναι κάθετη στη διαθλώμενη δέσμη. Δείτε την Εικόνα 12.4 δεξιά.

$$\left. \begin{array}{l} \text{Λόγω του νόμου της διαθλάσεως (Εξ. 12.21), } n_t \sin \theta_t = n_i \sin \theta_i \\ \text{και της επιλογής (2), } \theta_t = \frac{\pi}{2} - \theta_i \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$n_t \sin \left(\frac{\pi}{2} - \theta_i \right) = n_i \sin \theta_i \Rightarrow \frac{n_t}{n_i} = \frac{\sin \theta_i}{\cos \theta_i} \Rightarrow$$

$$\boxed{n = \frac{n_t}{n_i} = \tan \theta_i} \quad (12.38)$$

Η γωνία θ_i που ικανοποιεί την Εξ. 12.38 ονομάζεται **γωνία Brewster**, θ_B . (Τα ίδια προκύπτουν και από την $n_t \cos \theta_i = n_i \cos \theta_t$ των Εξ. 12.35). Τότε η Εξ. 12.30 γίνεται

$$t_{TM} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_t \cos \theta_i + n_i \cos \theta_t} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_t \cos \theta_i + n_i \sin \theta_i} = \frac{2}{n + \tan \theta_i} = \frac{2}{2n} \Rightarrow$$

$$\boxed{t_{TM} = \frac{1}{n}} \quad (12.39)$$

Τα $r_{TM} = 0, t_{TM} = \frac{1}{n}$ επαληθεύουν την Εξ. 12.34. Δείτε την Εικόνα 12.4 δεξιά. Συμπερασματικά, είναι δυνατόν να μην υπάρχει ανακλώμενη πόλωση p και αυτό συμβαίνει όταν $\theta_i = \theta_B$.

Οι Εξ. 12.22, 12.24, 12.30, 12.32, καθώς και οι ισοδύναμές τους, ονομάζονται **εξισώσεις Fresnel** (Fresnel equations). Παρουσιάζονται συνοπτικά εδώ:

$$\boxed{t_{TE} := \frac{E_t}{E_i} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t}} \quad (12.40)$$

$$\boxed{r_{TE} := \frac{E_r}{E_i} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t}} \quad (12.41)$$

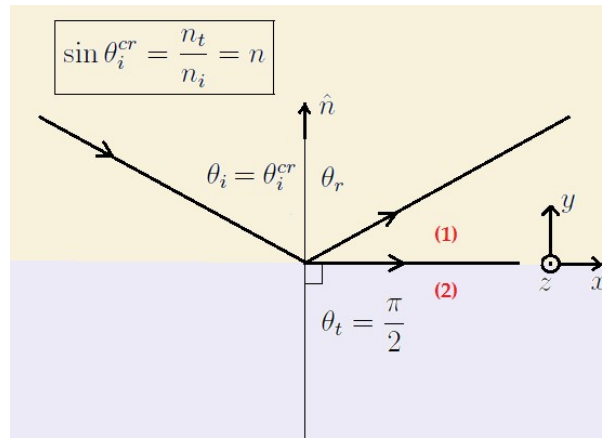
$$\boxed{t_{TM} := \frac{E_t}{E_i} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_t \cos \theta_i + n_i \cos \theta_t}} \quad (12.42)$$

$$\boxed{r_{TM} := \frac{E_r}{E_i} = \frac{n_t \cos \theta_i - n_i \cos \theta_t}{n_t \cos \theta_i + n_i \cos \theta_t}} \quad (12.43)$$

12.2 Ολική εσωτερική ανάκλαση

Ας υποθέσουμε ότι $n_i > n_t$ και ας χρησιμοποιήσουμε τον νόμο της διαθλάσεως (Εξ. 12.21).

$$\left. \begin{array}{l} \text{νόμος διαθλάσεως } n_i \sin \theta_i = n_t \sin \theta_t \\ n_i > n_t \Rightarrow n = \frac{n_t}{n_i} < 1 \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \sin \theta_i < \sin \theta_t \\ \text{οι } \theta_i, \theta_t \text{ είναι οξείες γωνίες} \end{array} \right\} \Rightarrow \theta_i < \theta_t. \quad (12.44)$$



Εικόνα 12.5: Ολική εσωτερική ανάκλαση: η διαθλώμενη ακτίνα εφάπτεται στη διεπιφάνεια, δηλαδή στην ουσία δεν περνά στο άλλο υλικό, $\theta_t = \frac{\pi}{2}$. Η τιμή της θ_i στην οποία συμβαίνει αυτό ονομάζεται κρίσιμη γωνία, δηλαδή $\theta_i^{cr} = \theta_i$. Τότε ισχύει $\sin \theta_i^{cr} = \frac{n_t}{n_i} = n$.

Αλλά, αυξάνοντας την θ_i αυξάνεται η θ_t , διότι από τον νόμο της διαθλάσεως (Εξ. 12.21), $\nearrow \theta_i \Rightarrow \nearrow \sin \theta_i \Rightarrow \nearrow \sin \theta_t \Rightarrow \nearrow \theta_t$. Έτσι, αυξάνοντας την θ_i , αυξάνεται η θ_t , παραμένοντας μεγαλύτερη από την θ_i (Εξ. 12.44). Όταν, λοιπόν, η θ_t φτάσει στην τιμή $\frac{\pi}{2}$, η τιμή της θ_i ονομάζεται κρίσιμη γωνία, δηλαδή $\theta_i^{cr} = \theta_i$. Τότε θα έχουμε $n_i \sin \theta_i^{cr} = n_t \sin(\pi/2)$. Άρα,

$$\boxed{\sin \theta_i^{cr} = \frac{n_t}{n_i} = n} \quad (12.45)$$

Η κατάσταση αυτή, όπου η διαθλώμενη ακτίνα εφάπτεται στη διεπιφάνεια, δηλαδή στην ουσία δεν περνά στο άλλο υλικό, ονομάζεται **ολική εσωτερική ανάκλαση** (total internal reflection). Δείτε την Εικόνα 12.5. Τότε,

$$t_{TE} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} = \frac{2n_i \cos \theta_i^{cr}}{n_i \cos \theta_i^{cr} + n_t \cos \left(\frac{\pi}{2}\right)} = 2,$$

$$r_{TE} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_t \cos \theta_t}{n_i \cos \theta_i + n_t \cos \theta_t} = \frac{n_i \cos \theta_i^{cr} - n_t \cos \left(\frac{\pi}{2}\right)}{n_i \cos \theta_i^{cr} + n_t \cos \left(\frac{\pi}{2}\right)} = 1.$$

Παρατηρούμε ότι η Εξ. 12.26, $t_{TE} = r_{TE} + 1$, ισχύει, αφού $2 = 1 + 1$.

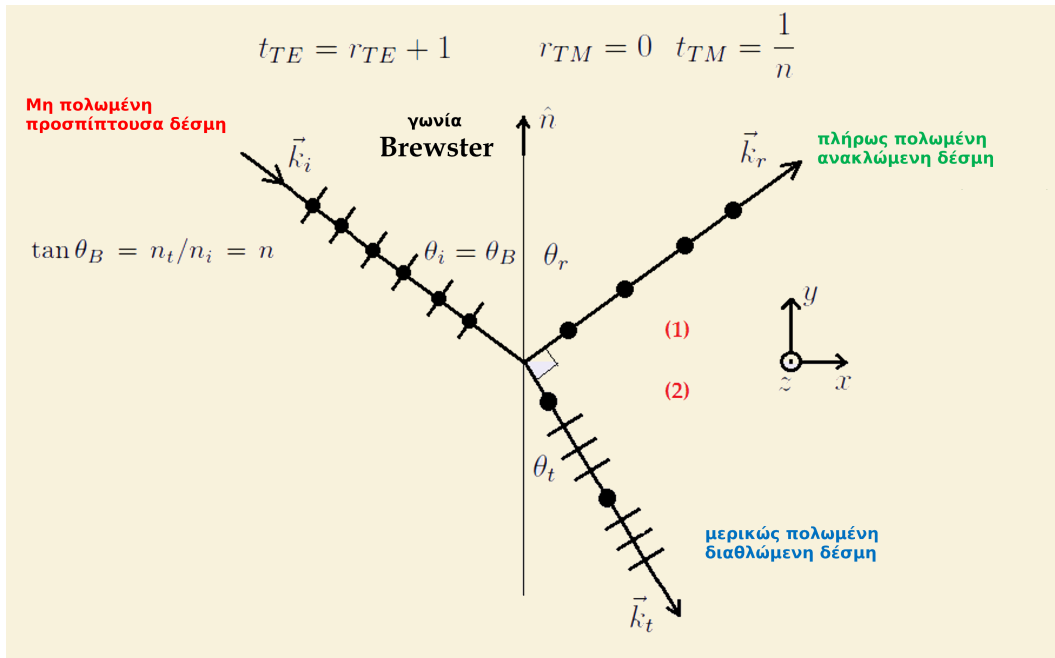
$$t_{TM} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_t \cos \theta_i + n_i \cos \theta_t} = \frac{2n_i \cos \theta_i^{cr}}{n_t \cos \theta_i^{cr} + n_i \cos \left(\frac{\pi}{2}\right)} = \frac{2}{n},$$

$$r_{TM} = \frac{n_t \cos \theta_i - n_i \cos \theta_t}{n_t \cos \theta_i + n_i \cos \theta_t} = \frac{n_t \cos \theta_i^{cr} - n_i \cos \left(\frac{\pi}{2}\right)}{n_t \cos \theta_i^{cr} + n_i \cos \left(\frac{\pi}{2}\right)} = 1.$$

Παρατηρούμε ότι η Εξ. 12.34, $r_{TM} - nt_{TM} = -1$, ισχύει, αφού $1 - n \frac{2}{n} = -1$.

12.3 Εκπομπή πολωμένης δέσμης

Σύμφωνα με όσα είδαμε στην Ενότητα 12.1, όταν η γωνία προσπτώσεως ισούται με τη γωνία Brewster ($\theta_i = \theta_B$), τότε από μη πολωμένη προσπίπτουσα δέσμη προκύπτουν πλήρως πολωμένη ανακλώμενη δέσμη και μερικώς πολωμένη διαθλώμενη δέσμη. Αυτά παρουσιάζονται στην Εικόνα 12.6. Έτσι, αν στην έξοδο μιας διατάξεως laser τοποθετηθεί υλικό τέτοιο ώστε η εξερχόμενη δέσμη να προσπίπτει σε αυτό υπό γωνία $\theta_i = \theta_B$, τότε, μπορούμε να εκμεταλλευτούμε είτε την πλήρως πολωμένη ανακλώμενη δέσμη είτε την μερικώς πολωμένη διαθλώμενη δέσμη. Οι τεχνικές λεπτομέρειες μπορεί να είναι διαφορετικές στα διάφορα είδη laser [1], [2], [3].



Εικόνα 12.6: Όταν η γωνία προσπτώσεως ισούται με τη γωνία Brewster ($\theta_i = \theta_B$), τότε από μη πολωμένη προσπίπτουσα δέσμη προκύπτουν πλήρως πολωμένη ανακλώμενη δέσμη και μερικώς πολωμένη διαθλώμενη δέσμη.

12.4 Διάνυσμα Poynting

Το διάνυσμα Poynting ορίζεται ως

$$\vec{S} := \vec{E} \times \vec{H} \quad (12.46)$$

και από άποψη μονάδων έχουμε

$$[\vec{S}] = [\vec{E}][\vec{H}] = \frac{\text{VA}}{\text{mm}} = \frac{\text{VC}}{\text{m}^2\text{s}} = \frac{\text{J}}{\text{m}^2\text{s}} = \frac{\text{W}}{\text{m}^2},$$

δηλαδή περιγράφει ισχύ ανά μονάδα επιφάνειας. Το μέτρο του θα είναι

$$|\vec{S}| = |\vec{E}||\vec{H}| = \frac{|\vec{E}||\vec{B}|}{\mu\mu_0} = \frac{|\vec{E}|^2 n}{\mu\mu_0 c_0} = |\vec{E}|^2 \sqrt{\frac{\epsilon\mu\epsilon_0\mu_0}{\mu^2\mu_0^2}} \Rightarrow$$

$$|\vec{S}| = |\vec{E}|^2 \sqrt{\frac{\epsilon\epsilon_0}{\mu\mu_0}} \quad (12.47)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση

$$\left. \begin{array}{l} \frac{|\vec{E}|}{|\vec{B}|} = c \\ n = \frac{c_0}{c} \end{array} \right\} \Rightarrow |\vec{B}| = \frac{|\vec{E}|n}{c_0}.$$

Ακόμα, όπως ίσως θυμόμαστε,

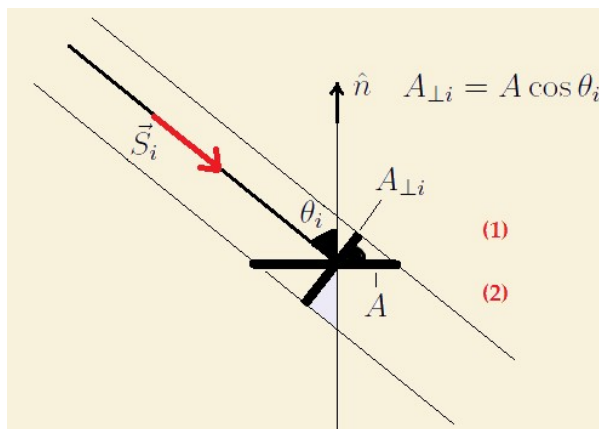
$$\left. \begin{array}{l} c_0 = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \\ c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon \epsilon_0 \mu \mu_0}} \end{array} \right\} \Rightarrow n := \frac{c_0}{c} = \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 \mu \mu_0}{\epsilon_0 \mu_0}} \Rightarrow \boxed{n = \sqrt{\epsilon \mu}}$$

Ας υπολογίσουμε τώρα τα μέτρα των ανυσμάτων Poynting για την προσπίπτουσα, την ανακλώμενη και τη διαθλώμενη δέσμη, από την Εξ. 12.47.

$$|\vec{S}_i| = |\vec{E}_i|^2 \sqrt{\frac{\epsilon_i \epsilon_0}{\mu_i \mu_0}} = |\vec{E}_i|^2 \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_0}{\mu_1 \mu_0}}, \quad (12.48)$$

$$|\vec{S}_r| = |\vec{E}_r|^2 \sqrt{\frac{\epsilon_r \epsilon_0}{\mu_r \mu_0}} = |\vec{E}_r|^2 \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_0}{\mu_1 \mu_0}}, \quad (12.49)$$

$$|\vec{S}_t| = |\vec{E}_t|^2 \sqrt{\frac{\epsilon_t \epsilon_0}{\mu_t \mu_0}} = |\vec{E}_t|^2 \sqrt{\frac{\epsilon_2 \epsilon_0}{\mu_2 \mu_0}}. \quad (12.50)$$



Εικόνα 12.7: Το διάνυσμα Poynting της προσπίπτουσας δέσμης, \vec{S}_i , ένα κομμάτι της διεπιφάνειας, A , και η προβολή του, $A_{\perp i}$, κάθετα στο \vec{S}_i . $A_{\perp i} = A \cos \theta_i$.

Στην Εικόνα 12.7 φαίνεται το διάνυσμα Poynting της προσπίπτουσας δέσμης, \vec{S}_i , ένα κομμάτι της διεπιφάνειας, A , και η προβολή του, $A_{\perp i}$, κάθετα στο \vec{S}_i . Από την Εικόνα φαίνεται ότι $A_{\perp i} = A \cos \theta_i$. Παρόμοια ισχύουν και για την ανακλώμενη και τη διαθλώμενη δέσμη. Συνοπτικά,

$$A_{\perp i} = A \cos \theta_i,$$

$$A_{\perp r} = A \cos \theta_r,$$

$$A_{\perp t} = A \cos \theta_t.$$

Ας ονομάσουμε $P_i(A_{\perp i})$ την ισχύ που προσπίπτει στην επιφάνεια $A_{\perp i}$ κ.ο.κ. κι ας θυμηθούμε ότι το διάνυσμα Poynting περιγράφει ισχύ ανά μονάδα επιφάνειας. Τότε,

$$\begin{aligned} |\vec{S}_i| &= \frac{P_i(A_{\perp i})}{A_{\perp i}} \Rightarrow P_i(A_{\perp i}) = |\vec{S}_i| A_{\perp i} \Rightarrow P_i A_{\perp i} = |\vec{S}_i| A \cos \theta_i, \\ \text{ομοίως} &\Rightarrow P_r A_{\perp r} = |\vec{S}_r| A \cos \theta_r, \\ \text{ομοίως} &\Rightarrow P_t A_{\perp t} = |\vec{S}_t| A \cos \theta_t. \end{aligned}$$

Όμως, αν τα υλικά δεν απορροφούν ενέργεια, τότε η προσπίπτουσα ισχύς ισούται με την ανακλώμενη ισχύ συν τη διαθλώμενη ισχύ. Δηλαδή

$$P_i(A_{\perp i}) = P_r(A_{\perp r}) + P_t(A_{\perp t}). \quad (12.51)$$

Άρα,

$$\begin{aligned} |\vec{S}_i| A \cos \theta_i &= |\vec{S}_r| A \cos \theta_r + |\vec{S}_t| A \cos \theta_t \Rightarrow 1 = \frac{|\vec{S}_r|}{|\vec{S}_i|} + \frac{|\vec{S}_t| \cos \theta_t}{|\vec{S}_i| \cos \theta_i} \Rightarrow \\ 1 &= \frac{|\vec{E}_r|^2}{|\vec{E}_i|^2} + \frac{|\vec{E}_t|^2}{|\vec{E}_i|^2} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \mu_1 \cos \theta_t}{\varepsilon_1 \mu_2 \cos \theta_i}}, \end{aligned}$$

όπου χρησιμοποίησαμε τις Εξ. 12.48, 12.49, 12.50. Με άλλα λόγια,

$$\boxed{1 = R + T} \quad (12.52)$$

όπου ορίσαμε

ανακλαστικότητα ή ανακλασιμότητα (reflectance)	$R := \frac{ \vec{E}_r ^2}{ \vec{E}_i ^2}$	(12.53)
διαπερατότητα ή διελευσιμότητα (transmittance)	$T := \frac{ \vec{E}_t ^2}{ \vec{E}_i ^2} \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \mu_1 \cos \theta_t}{\varepsilon_1 \mu_2 \cos \theta_i}}$	

Οι ποσότητες r και t (π.χ. Εξ. 12.40, 12.41, 12.42, 12.43) ορίστηκαν ως λόγοι πλατών. Οπότε, μπορούμε να γράψουμε

$$1 = r^2 + t^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \mu_1 \cos \theta_t}{\varepsilon_1 \mu_2 \cos \theta_i}}, \quad (12.54)$$

$$R = r^2, \quad (12.55)$$

$$T = t^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_2 \mu_1 \cos \theta_t}{\varepsilon_1 \mu_2 \cos \theta_i}}. \quad (12.56)$$

Για μη μαγνητικά υλικά, δηλαδή όταν $\mu_1 = \mu_2 = 1$, προκύπτει ότι $T = \frac{|\vec{E}_t|^2}{|\vec{E}_i|^2} \frac{n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i} = t^2 n \frac{\cos \theta_t}{\cos \theta_i}$.

Βιβλιογραφία

- [1] M. Young. *Οπτική και λέιζερ: Οπτικές Ύρες και Κυματοδηγοί*. (Πρωτότυπη έκδοση: Optics and Lasers, Springer-Verlag, 2000). ISBN: 9602546758. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ. Μετάφραση: Η. Ζουμπούλης, Γ. Κουρούκλης, Α. Κώνστα, Ε. Λιαροκάπης, Κ. Ράπτης, Ι. Ράπτης, Α. Σεραφετινίδης, Ε. Φαμπρικέζη. Επιστημονική επιμέλεια: Η. Ζουμπούλης, Α. Κώνστα, 2008.
- [2] J. Wilson και J. Hawkes. *Οπτοηλεκτρονική: μια εισαγωγή*. (Πρωτότυπη έκδοση: Optoelectronics: an introduction, 3rd edition, Prentice Hall, 1998). ISBN: 9789602546697. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις ΕΜΠ. Μετάφραση: Α.Α. Σεραφετινίδης, Μ. Ι. Μακροπούλου, Α. Παπαγιάννης, Ι. Ζεργιώτη, Ε. Φαμπρικέζη. Επιστημονική επιμέλεια: Α.Α. Σεραφετινίδης, 2007.
- [3] Σ. Βεσ. *Εισαγωγή στην Κβαντική οπτική και Laser*. Θεσσαλονίκη: Εκδόσεις Γιαχουδή - Γιαπούλη, 1999. ISBN: 9780007425389.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α

ΑΣΚΗΣΕΙΣ

A.1 Ασκήσεις κεφαλαίου 1: Περιδιάβαση

Δεν υπάρχουν ασκήσεις σε αυτό το κεφάλαιο.

A.2 Ασκήσεις κεφαλαίου 2: Κβαντική φύση του φωτός

- **Άσκηση 1.** Συμβατικά στην περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος μακρινό υπέρυθρο (far infrared, FIR) έχουμε μήκος κύματος $25 \mu\text{m} < \lambda < 1000 \mu\text{m}$. Βρείτε σε τι x (Εξ. 2.8) αντιστοιχεί το FIR για θερμοκρασία (α') 300 K, δηλαδή περίπου για τη θερμοκρασία ενός ζώου, (β') 6000 K, δηλαδή περίπου για την ενεργό θερμοκρασία της φωτόσφαιρας του Ηλίου, (γ') 6 K.
- **Άσκηση 2.** Συμβατικά στην περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος υπεριώδες (ultraviolet, UV) έχουμε μήκη κύματος $10 \text{ nm} < \lambda < 400 \text{ nm}$. Βρείτε σε τι x (Εξ. 2.8) αντιστοιχεί το UV για θερμοκρασία (α') 300 K, δηλαδή περίπου για τη θερμοκρασία ενός ζώου, (β') 6000 K, δηλαδή περίπου για την ενεργό θερμοκρασία της φωτόσφαιρας του Ηλίου, (γ') 6 K.
- **Άσκηση 3.** Συμβατικά στην περιοχή του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος μακρινό υπέρυθρο (far infrared, FIR) έχουμε μήκος κύματος $25 \mu\text{m} < \lambda < 1000 \mu\text{m}$. Για το άνω και το κάτω όριο της περιοχής FIR, βρείτε τη θερμοκρασία μέλανος σώματος, στην οποία η πρόβλεψη του νόμου του Wien, ρ_W , είναι το ήμισυ της πειραματικής τιμής, ρ , την οποία παρέχει και ο νόμος του Planck. Ψάχνουμε δηλαδή την περιοχή θερμοκρασιών, στην οποία έχουμε πρόβλημα στις χαμηλότερες συχνότητες.

Λύση ασκήσεως 3.

Απαιτούμε να ικανοποιείται η σχέση $\rho_W = 0.5\rho$. Τότε, σύμφωνα με τις Εξ. 2.11 και 2.12, έχουμε

$$\rho_0 \frac{x^3}{e^x} = 0.5\rho_0 \frac{x^3}{e^x - 1} \Rightarrow e^x - 1 = 0.5e^x \Rightarrow e^x = 2 \Rightarrow x = \ln 2 \approx 0.693.$$

$$x = \frac{h\nu}{k_B T} \xleftrightarrow{c=\lambda\nu} \lambda = \frac{hc}{xk_B T}. \quad (\text{A.1})$$

Ο λόγος

$$\frac{hc}{k_B} \approx 14.404 \times 10^{-3} \text{mK}. \quad (\text{A.2})$$

Άρα, μεταξύ του άνω και του κάτω ορίου του μακρινού υπερώθρου, θα ισχύει η ανισότητα

$$\begin{aligned} 25 \mu\text{m} < \frac{hc}{xk_B T} < 1000 \mu\text{m} &\Rightarrow \\ \frac{hc}{xk_B 1000 \mu\text{m}} < T < \frac{hc}{xk_B 25 \mu\text{m}} &\Rightarrow \\ 21 \text{K} \lesssim T \lesssim 831 \text{K}. \end{aligned}$$

- **Άσκηση 4.** Βρείτε πότε η πρόβλεψη του νόμου των Rayleigh-Jeans, ρ_{RJ} , γίνεται ακριβώς ίση με την πειραματική τιμή, ρ , την οποία προβλέπει και ο νόμος του Planck.

Λύση ασκήσεως 4.

Αναζητούμε πότε ικανοποιείται η συνθήκη $\rho_{\text{RJ}} = \rho$. Από τις Εξ. 2.10 και 2.12, προκύπτει

$$\rho_0 x^2 = \rho_0 \frac{x^3}{e^x - 1}.$$

Συνεπώς, για $x \neq 0$, έχουμε $x = e^x - 1 \Rightarrow e^x = 1 + x \Rightarrow x = 0$, πράγμα **άτοπο**. Συνεπώς, ο νόμος των Rayleigh-Jeans δεν ταυτίζεται ποτέ με τον νόμο του Planck.

- **Άσκηση 5.** Βρείτε τη θερμοκρασία T_Δ στην οποία, στα όρια του υπεριώδους, δηλαδή για $\lambda = 400$ nm, η πρόβλεψη του νόμου των Rayleigh-Jeans, ρ_{RJ} , γίνεται διπλάσια από την πειραματική τιμή, ρ , την οποία προβλέπει και ο νόμος του Planck.

Λύση ασκήσεως 5.

Αναζητούμε πότε ικανοποιείται η συνθήκη $\rho_{\text{RJ}} = 2\rho$. Από τις Εξ. 2.10 και 2.12, προκύπτει

$$\rho_0 x^2 = 2\rho_0 \frac{x^3}{e^x - 1}.$$

Συνεπώς, για $x \neq 0$, έχουμε $2x = e^x - 1 \Rightarrow e^x = 1 + 2x$. Από τη γραφική επίλυση της παραπάνω εξίσωσης προκύπτει ότι $x_\Delta \approx 1.25645 \approx \frac{5}{4}$. Από την Εξ. 2.8, έχουμε

$$x_\Delta = \frac{h\nu}{k_B T_\Delta} \xleftrightarrow{c=\lambda\nu} T_\Delta = \frac{hc}{k_B \lambda x_\Delta}. \quad (\text{A.3})$$

Αντικαθιστώντας τις αριθμητικές τιμές, προκύπτει $T_\Delta \approx 28800$ K. Η θερμοκρασία αυτή αντιστοιχεί μόνο σε επιφανειακή θερμοκρασία αστέρων πολύ μεγάλης μάζας (π.χ. 30 φορές τη μάζα του Ηλίου). Αντισταθμίστε, λοιπόν, πως ο όρος «υπεριώδης καταστροφή» είναι παραπλανητικός.

- **Άσκηση 6.** Να εξεταστεί η συμπεριφορά του νόμου του Planck στα εξής όρια: (α') μηδενική συχνότητα, (β') άπειρη συχνότητα. Επίσης, να αποδειχθεί ότι (γ') στις πολύ μικρές συχνότητες ταυτίζεται με τον νόμο των Rayleigh-Jeans, ενώ (δ') στις πολύ μεγάλες συχνότητες ταυτίζεται με τον νόμο του Wien.

Λύση ασκήσεως 6.

Για $\nu \rightarrow 0 \Rightarrow x \rightarrow 0$:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \rho = \rho_0 \lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{x^3}{e^x - 1} \right) = \rho_0 \lim_{x \rightarrow 0} \left(\frac{3x^2}{e^x} \right) = 0.$$

Για $\nu \rightarrow \infty \Rightarrow x \rightarrow \infty$:

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \rho = \rho_0 \lim_{x \rightarrow \infty} \left(\frac{x^3}{e^x - 1} \right) \stackrel{\text{τελικά}}{=} \rho_0 \lim_{x \rightarrow \infty} \left(\frac{6}{e^x} \right) = 0.$$

Για μικρές συχνότητες, δηλαδή, για μικρά x ($x \downarrow\downarrow$):

$$f(x) = f(0) + f'(0)\frac{x}{1!} + f''(0)\frac{x^2}{2!} + \dots, \quad (\text{A.4})$$

δηλαδή,

$$e^x - 1 = 1 + 1\frac{x}{1!} + 1\frac{x^2}{2!} + \dots - 1 \approx x \quad (\text{1ης τάξεως προσέγγιση}), \quad (\text{A.5})$$

οπότε,

$$\rho = \rho_0 \frac{x^3}{e^x - 1} \approx \rho_0 \frac{x^3}{x} = \rho_0 x^2 = \rho_{\text{RJ}}. \quad (\text{A.6})$$

Για μεγάλες συχνότητες, δηλαδή, για μεγάλα x ($x \uparrow\uparrow$):

$$e^x - 1 \approx e^x \Rightarrow \rho = \rho_0 \frac{x^3}{e^x - 1} \approx \rho_0 \frac{x^3}{e^x} = \rho_{\text{W}}. \quad (\text{A.7})$$

- **Άσκηση 7.** Αποδείξτε ότι $\rho_{\text{W}} \neq \rho_{\text{RJ}}$ για μικρά και μεγάλα x .

Λύση ασκήσεως 7.

Για μεγάλα x ($x \uparrow\uparrow$):

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \rho_{\text{RJ}} = \rho_0 \lim_{x \rightarrow \infty} x^2 = \infty \neq \lim_{x \rightarrow \infty} \rho_{\text{W}} = \rho_0 \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{x^3}{e^x} = 0. \quad (\text{A.8})$$

Για μικρά x ($x \downarrow\downarrow$), παρόλο που για $x \rightarrow 0$ και τα δύο μηδενίζονται:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \rho_{\text{RJ}} = \rho_0 \lim_{x \rightarrow 0} x^2 = 0 = \lim_{x \rightarrow 0} \rho_{\text{W}} = \rho_0 \lim_{x \rightarrow 0} \frac{x^3}{e^x} = 0, \quad (\text{A.9})$$

ωστόσο, παραμένουν άνισα. Πράγματι, με τη βοήθεια του αναπτύγματος

$$f(x) = f(0) + f'(0)\frac{x}{1!} + f''(0)\frac{x^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.10})$$

διαπιστώνουμε ότι

$$e^x = 1 + 1\frac{x}{1!} + 1\frac{x^2}{2!} + \dots \approx 1 + x \quad (\text{1ης τάξεως προσέγγιση}), \quad (\text{A.11})$$

οπότε,

$$\rho_{\text{W}} = \rho_0 \frac{x^3}{e^x} \approx \rho_0 \frac{x^3}{1+x} \neq \rho_0 x^2 = \rho_{\text{RJ}}. \quad (\text{A.12})$$

- **Άσκηση 8.** Για θερμοκρασία (α') 300 K, (β') 6000 K και (γ') 6 K: Υπολογίστε το μήκος κύματος λ_{Δ} , στο οποίο η πρόβλεψη του νόμου των Rayleigh-Jeans ρ_{RJ} είναι διπλάσια από την πειραματική τιμή ρ , την οποία προβλέπει και ο νόμος του Planck. Σε ποια περιοχή του ΗΜ φάσματος ανήκει το λ_{Δ} κάθε φορά;
- **Άσκηση 9.** Αποδείξτε ότι η αντικατάσταση ενός ανύσματος θέσεως

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = -\vec{r} \quad (\text{A.13})$$

ισοδυναμεί στις σφαιρικές συντεταγμένες με τις αντικαταστάσεις

$$\begin{aligned} r &\rightarrow r' = r, \\ \theta &\rightarrow \theta' = \pi - \theta, \\ \phi &\rightarrow \phi' = \pi + \phi. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

- **Άσκηση 10.** Η συνάρτηση $\Gamma [1]$ είναι επέκταση σε πραγματικούς και μιγαδικούς αριθμούς του παραγοντικού με το όρισμά του μετατοπισμένο κατά -1 . Αποδεικνύεται τελικά ότι

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad \text{για } n = 1, 2, 3, \dots \quad \text{παραγοντική μορφή.} \quad (\text{A.15})$$

Η συνάρτηση Γ ορίζεται για όλους τους μιγαδικούς αριθμούς, εκτός από τους αρνητικούς ακεραίους και το μηδέν ($0, -1, -2, \dots$). Εάν ο μιγαδικός z έχει θετικό πραγματικό μέρος, $\text{Real}(z) > 0$, τότε ορίζεται από τη σχέση

$$\Gamma(z) := \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt \quad \text{μορφή Euler.} \quad (\text{A.16})$$

Ο ορισμός μπορεί να επεκταθεί σε όλους τους μιγαδικούς εκτός από τους μη θετικούς ακεραίους με τρόπο που δεν μας ενδιαφέρει εδώ. Η συνάρτηση Γ χρησιμοποιείται κυρίως στις πιθανότητες και τη στατιστική. Ο συμβολισμός $\Gamma(z)$ οφείλεται στον Legendre. Υπάρχουν κι άλλες μορφές

$$\Gamma(z) = 2 \int_0^{\infty} e^{-t^2} t^{2z-1} dt, \quad (\text{A.17})$$

$$\Gamma(z) = \int_0^1 [\ln(1/t)]^{z-1} dt. \quad (\text{A.18})$$

(α') Ξεκινώντας από τη μορφή Euler, αποδείξτε ότι

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \quad (\text{A.19})$$

$$\Gamma(1) = 1 \quad (\text{A.20})$$

$$\Gamma(n) = (n-1)! \quad (\text{A.21})$$

$$\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi} \quad (\text{A.22})$$

Δίνεται το ολοκλήρωμα Gauss

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}. \quad (\text{A.23})$$

(β') Να αποδειχθεί ότι

$$I = \int_0^{\infty} e^{-\gamma r} r^n dr = \gamma^{-(n+1)} n! \quad (\text{A.24})$$

όπου $n = 1, 2, 3, \dots$ και $\gamma > 0$.

- **Άσκηση 11.** Ελέγξτε τα ακόλουθα [2, 1]:

$$(\alpha') \text{ Θεωρώντας γνωστό ότι } \int_0^\infty \frac{\sin^2(ax)}{x^2} dx = \frac{\pi}{2}|a|, \text{ δείξτε ότι για } t > 0, \int_{-\infty}^\infty \frac{\sin^2(xt/2)}{x^2} dx = \frac{\pi t}{2}.$$

$$(\beta') e^{\pm i(\phi+\pi)} = -e^{\pm i\phi}.$$

$$(\gamma') \int_0^{2\pi} e^{i\phi} d\phi = 0.$$

$$(\delta') \text{ Σε προσέγγιση πρώτης τάξεως, } \sqrt{c+x} \approx \sqrt{c} + \frac{x}{2\sqrt{c}}.$$

Λύση ασκήσεως 11.

Τα τρία πρώτα είναι απλά. Το ανάπτυγμα Taylor μιας πραγματικής ή μιγαδικής συναρτήσεως, $f(x)$, πραγματικής ή μιγαδικής μεταβλητής, x , η οποία είναι απείρως παραγωγίσιμη σε ένα πραγματικό ή μιγαδικό αριθμό, a , είναι η δυναμοσειρά

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f^{(3)}(a)}{3!}(x-a)^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n, \quad (\text{A.25})$$

όπου $n!$ είναι το παραγοντικό του n και $f^{(n)}(a)$ είναι η n -οστή παράγωγος της f στο σημείο a . Η μηδενικής τάξεως παράγωγος της f είναι εξ ορισμού η ίδια η f , $(x-a)^0 := 1$ και $0! := 1$. Για $a = 0$, η δυναμοσειρά καλείται και σειρά Maclaurin, δηλαδή

$$f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x + \frac{f''(0)}{2!}x^2 + \frac{f^{(3)}(0)}{3!}x^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n. \quad (\text{A.26})$$

Σε προσέγγιση πρώτης τάξεως

$$f(x) \approx f(0) + \frac{f'(0)}{1!}x. \quad (\text{A.27})$$

Επομένως, για την $f(x) = \sqrt{c+x}$, συνεπάγεται $f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{c+x}} \Rightarrow f'(0) = \frac{1}{2\sqrt{c}}$, ενώ $f(0) = \sqrt{c}$.

$$\text{Άρα, } f(x) \approx \sqrt{c} + \frac{x}{2\sqrt{c}}.$$

- **Άσκηση 12.** Υποθέστε ότι η ΗΜ ενέργεια ενός resonator «ταλαντωτή» συχνότητας ν εντός της κοιλότητας μέλανος σώματος μπορεί να πάρει μόνο διακεκριμένες τιμές (είναι δηλαδή «κβαντισμένη» και μάλιστα ότι έχει τη μορφή

$$E_n = h\nu \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.28})$$

αντί της μορφής $E_n = h\nu n$, $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ που υπέθεσε ο Planck. Βρείτε πώς διαφοροποιείται η πυκνότητα ενέργειας ανά μονάδα συχνότητας ΗΜ ακτινοβολίας μέλανος σώματος σε θερμοδυναμική ισορροπία, $\rho(\nu, T)$ (μονάδες $\frac{\text{J}}{\text{m}^3\text{Hz}}$), έναντι του νόμου του Planck (Εξ. 2.7).

- **Άσκηση 13.** Υπολογίστε το μήκος κύματος, λ_0 , όπου παρουσιάζει μέγιστο ο νόμος του Planck στη μορφή $\rho(\lambda, T)$, θεωρώντας ότι μπορούν να προσεγγιστούν με μέλανα σώματα: (1) το ανθρώπινο σώμα με θερμοκρασία $\theta \approx 36.6^\circ\text{C}$, (2) η φωτόσφαιρα του Ηλίου με «ενεργό θερμοκρασία» $T \approx 5800\text{ K}$ και (3) η φωτόσφαιρα του αστέρα Αλτάιρ με «ενεργό θερμοκρασία» $T \approx 7000 - 8500\text{ K}$.

Απάντηση ασκήσεως 13.

- (1) $\lambda_0 \approx 9355.2\text{ nm} \approx 9.3552\text{ }\mu\text{m}$, δηλαδή στο υπέρυθρο (infrared, IR).
- (2) $\lambda_0 \approx 500\text{ nm}$, δηλαδή στο πράσινο, ενώ το κίτρινο είναι $\approx 570\text{-}590\text{ nm}$.
- (3) $\lambda_0 \approx 414\text{ έως }341\text{ nm}$, δηλαδή ιώδες - υπεριώδες.

- **Άσκηση 14.** Υποθέστε ότι αντί του νόμου του Planck στη μορφή $\rho(\lambda, T)$ της Εξ. 2.18 έλειπε το -1 του παρονομαστή, δηλαδή είχαμε τον αντίστοιχο νόμο του Wien. Αποδείξτε ότι τότε ο νόμος μετατοπίσεως του Wien θα ήταν $\lambda_0 T = \frac{hc}{5k_B}$.
- **Άσκηση 15.** Για τα λ_0 και ν_0 των Εξ. 2.101 και 2.98, αποδείξτε ότι $\lambda_0 \nu_0 \approx 0.568c$, ενώ αν αντί για τον νόμο του Planck στη μορφή $\rho(\nu, T)$ και $\rho(\lambda, T)$ είχαμε τις αντίστοιχες εκφράσεις του Wien, δηλαδή έλειπε το -1 στον παρονομαστή, θα είχαμε $\lambda_0 \nu_0 = \frac{3}{5}c$.
- **Άσκηση 16.** Από την κατανομή του νόμου του Planck $\rho(\nu, T)$ να εξαχθεί η κατανομή $\rho(\omega, T)$, όπου $\omega = 2\pi\nu$ η κυκλική συχνότητα, δηλαδή να δείχθει ότι

$$\rho(\omega, T) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1}. \quad (\text{A.29})$$

- **Άσκηση 17.** Να αποδειχτούν οι Εξ. 2.66, 2.67, 2.68, καθώς και η Εξ. 2.69, οι οποίες προκύπτουν με τον χωρισμό των μεταβλητών x, y, z , εντός του \vec{r} . Οι αποδείξεις παραλείφθηκαν για λόγους συντομίας στο κυρίως κείμενο.

Λύση ασκήσεως 17. Χωρίζουμε τις μεταβλητές x, y, z , εντός του \vec{r} . Στην Εξ. 2.65,

$$\nabla^2 \vec{E}_{\vec{r}} + \frac{\omega^2}{c^2} \vec{E}_{\vec{r}} = \vec{0},$$

αναζητούμε λύσεις της μορφής

$$\vec{E}_{\vec{r}}(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)\hat{e},$$

όπου το \hat{e} ορίζει την πόλωση, δηλαδή τον προσανατολισμό του \vec{E} . Οπότε,

$$YZ \frac{d^2 X}{dx^2} + XZ \frac{d^2 Y}{dy^2} + XY \frac{d^2 Z}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} XYZ = 0 \Rightarrow$$

$$\underbrace{\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2}}_{f(x)} + \underbrace{\frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2}}_{g(y)} + \underbrace{\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2}}_{h(z)} + \frac{\omega^2}{c^2} = 0.$$

Δηλαδή, τρεις συναρτήσεις εξαρτώμενες από διαφορετικές μεταβλητές έχουν σταθερό άθροισμα, οπότε υποθέτουμε ότι κάθε μία από αυτές ισούται με μια σταθερά. Τις σταθερές αυτές τις ονομάζουμε $-k_x^2, -k_y^2, -k_z^2$, αντιστοίχως. Οπότε, προκύπτει η Εξ. 2.69,

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2},$$

αλλά και

$$\frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} \stackrel{\text{θέτουμε}}{=} -k_x^2, \quad \frac{1}{Y} \frac{d^2 Y}{dy^2} \stackrel{\text{θέτουμε}}{=} -k_y^2, \quad \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} \stackrel{\text{θέτουμε}}{=} -k_z^2,$$

ή

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + k_x^2 X = 0, \quad \frac{d^2 Y}{dy^2} + k_y^2 Y = 0, \quad \frac{d^2 Z}{dz^2} + k_z^2 Z = 0.$$

Άρα, έχουμε λύσεις της μορφής

$$X(x) = A_1 \sin(k_x x) + B_1 \cos(k_x x) \quad \boxed{1}$$

$$Y(y) = A_2 \sin(k_y y) + B_2 \cos(k_y y) \quad \boxed{2}$$

$$Z(z) = A_3 \sin(k_z z) + B_3 \cos(k_z z) \quad \boxed{3}$$

Επομένως,

$$\vec{E}_{\vec{r}}(x, y, z) = (\hat{e}_x + \hat{e}_y + \hat{e}_z)$$

$$[A_1 \sin(k_x x) + B_1 \cos(k_x x)][A_2 \sin(k_y y) + B_2 \cos(k_y y)][A_3 \sin(k_z z) + B_3 \cos(k_z z)].$$

Το \hat{e} έχει γενικά τυχαίο προσανατολισμό, οπότε το αναλύσαμε σε συνιστώσες κατά τους άξονες x, y, z , δηλαδή $\hat{e} = \hat{e}_x + \hat{e}_y + \hat{e}_z$. Συνεπώς,

το E_x θα είναι κάποιος πρώτος συνδυασμός των \sin και \cos που περιέχονται στις $\boxed{1} \boxed{2} \boxed{3}$

το E_y θα είναι κάποιος δεύτερος συνδυασμός των \sin και \cos που περιέχονται στις $\boxed{1} \boxed{2} \boxed{3}$

το E_z θα είναι κάποιος τρίτος συνδυασμός των \sin και \cos που περιέχονται στις $\boxed{1} \boxed{2} \boxed{3}$

Οι συνδυασμοί αυτοί θα πρέπει να είναι τέτοιοι ώστε

το E_x να μηδενίζεται για $y = 0$ και $z = 0$,

το E_y να μηδενίζεται για $x = 0$ και $z = 0$,

το E_z να μηδενίζεται για $x = 0$ και $y = 0$,

οπότε, προκύπτουν οι Εξ. 2.66, 2.67, 2.68.

$$E_x = E_{x0} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} \Rightarrow \text{μηδενίζεται για } y = 0 \text{ και } z = 0,$$

$$E_y = E_{y0} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} \Rightarrow \text{μηδενίζεται για } x = 0 \text{ και } z = 0,$$

$$E_z = E_{z0} \sin(k_x x) \sin(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t} \Rightarrow \text{μηδενίζεται για } x = 0 \text{ και } y = 0.$$

- **Άσκηση 18.** Να αποδειχτεί η Εξ. 2.71 και οι Εξ. 2.72, 2.73, 2.74. Οι αποδείξεις παραλείφθηκαν για λόγους συντομίας στο κυρίως κείμενο.

Λύση ασκήσεως 18. Από την (1η') Εξίσωση Maxwell, έχουμε

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0 \Rightarrow \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot (E_x, E_y, E_z) = 0 \Rightarrow \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \Rightarrow$$

$$- E_{x0} k_x \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} +$$

$$- E_{y0} k_y \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} +$$

$$- E_{z0} k_z \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) e^{-i\omega t} = 0 \Rightarrow$$

$$k_x E_{x0} + k_y E_{y0} + k_z E_{z0} = 0, \text{ η οποία είναι η Εξ. 2.71.}$$

Από την (3η') Εξίσωση Maxwell, $\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \Rightarrow$

$$\begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ [E_{x0} \cos(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z)] & [E_{y0} \cos(k_y y) \sin(k_x x) \sin(k_z z)] & [E_{z0} \cos(k_z z) \sin(k_x x) \sin(k_y y)] \end{vmatrix} e^{-i\omega t} = - \left(\frac{\partial B_x}{\partial t}, \frac{\partial B_y}{\partial t}, \frac{\partial B_z}{\partial t} \right) \Rightarrow$$

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial B_x}{\partial t} &= [k_y E_{z0} \cos(k_z z) \sin(k_x x) \cos(k_y y) - k_z E_{y0} \cos(k_y y) \sin(k_x x) \cos(k_z z)] e^{-i\omega t} \Rightarrow \\
-\frac{\partial B_x}{\partial t} &= [k_y E_{z0} - k_z E_{y0}] \sin(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t} \Rightarrow \\
B_x &= \frac{[k_y E_{z0} - k_z E_{y0}]}{i\omega} \sin(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t} \Rightarrow \\
B_x &= \frac{i}{\omega} [k_z E_{y0} - k_y E_{z0}] \sin(k_x x) \cos(k_y y) \cos(k_z z) e^{-i\omega t}, \quad \text{η οποία είναι η Εξ. 2.72.}
\end{aligned}$$

Ομοίως και για τις υπόλοιπες Εξ. 2.73 και 2.74. Με «δημιουργικό πνεύμα», στη χρονική ολοκλήρωση, για $t = 0$, θέσαμε $\vec{B}(0) = \vec{0}$.

- **Άσκηση 19.** Να ελεγχθεί αν το \vec{B} (Εξ. 2.72, 2.73, 2.74) ικανοποιεί την $\nabla \cdot \vec{B} = 0$ στα τοιχώματα, αλλά και τι προκύπτει από τη (2η) Εξίσωση Maxwell, $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$ και την (4η) Εξίσωση Maxwell, $\vec{\nabla} \times \vec{B} = \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$.

- **Άσκηση 20. (Ουσιαστικά πρόκειται για επανάληψη της θεωρίας)** Θεωρήστε γνωστό τον νόμο του Planck,

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{h\nu/k_B T} - 1}.$$

Να αποδειχθούν οι δύο διατυπώσεις του νόμου των Stefan-Boltzmann

(α') για την πυκνότητα ενέργειας, $\rho(T)$, και

(β') για την ένταση ακτινοβολίας, I .

(γ') Να αποδειχθεί ο νόμος του Planck στη μορφή $\rho(\lambda, T)$.

(δ') Ποιες είναι οι μονάδες μετρήσεως των $\rho(\nu, T)$, $\rho(\lambda, T)$, $\rho(T)$, I στο Διεθνές Σύστημα Μονάδων;

$$\text{Δίνεται } \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}.$$

A.3 Ασκήσεις κεφαλαίου 3: Μηχανισμοί αλληλεπίδρασεως φωτονίου - Δισταθμικού Συστήματος

- **Άσκηση 1.** Ας θεωρήσουμε την (Εξαναγκασμένη) Απορρόφηση και ας εστιάσουμε στη διατήρηση ενέργειας και ορμής. Επίσης, ας θεωρήσουμε το άτομο αρχικά ακίνητο. Σε ποια περιοχή μηκών κύματος λ , η κινητική ενέργεια του ατόμου μετά την απορρόφηση του φωτονίου είναι αρκετά μεγάλη (ας πούμε ίση με το 0.05 της ενέργειας του φωτονίου που απορροφάται), ούτως ώστε να μην μπορούμε να την αγνοήσουμε στο ενεργειακό ισοζύγιο; Δίνονται: μάζα πρωτονίου $m_p = 1.672621777(74) \times 10^{-27}$ kg, σταθερά Planck $h = 6.62606957(29) \times 10^{-34}$ Js, ταχύτητα του φωτός στο κενό $c = 2.99792458 \times 10^8$ m/s. Θεωρήστε χάρην απλότητας ότι η μάζα του ατόμου $m_{\text{ατ}} \approx Zm_p + Nm_n + Zm_e \approx Am_p$.
- **Άσκηση 2.** Ας συγκρίνουμε τις πιθανότητες αυθόρμητης εκπομπής και εξαναγκασμένης εκπομπής. Αν επιθυμούμε αυξημένη συνοχή, χρειαζόμαστε μεγάλες ή μικρές συχνότητες, μεγάλες ή μικρές θερμοκρασίες; Κρίνοντας από τη σύγκριση των παραπάνω πιθανοτήτων είναι ευκολότερη η δημιουργία συνεκτικής δέσμης στα ραδιοκύματα ή στο υπέρυθρο;
- **Άσκηση 3.** Έστω ότι επιθυμούμε η πιθανότητα αυθόρμητης εκπομπής να ισούται με την πιθανότητα εξαναγκασμένης εκπομπής. Σε τι θερμοκρασία είναι αυτό εφικτό στα FM ραδιοκύματα, π.χ. σε συχνότητα 100 MHz και στο υπεριώδες, π.χ. σε μήκος κύματος 200 nm;

- Άσκηση 4.** Το dalton (Da) ή ενοποιημένη ατομική μονάδα μάζας (unified atomic mass unit), $u = 1.660538921(073) \times 10^{-27}$ kg, ορίζεται ως το $1/12$ της μάζας του ατόμου του πιο κοινού ισότοπου του άνθρακα ($^{12}_6\text{C}$). Ας θεωρήσουμε ότι αναφερόμαστε στο άτομο του $^{12}_6\text{C}$ που έχει από 6 πρωτόνια, νετρόνια και ηλεκτρόνια. Δίνονται $m_p = 1.007276466812(90) u$, $m_n = 1.00866491600(43) u$, $m_e = 5.4857990946(22) \times 10^{-4} u$. Αν προσθέσουμε $6 m_p + 6 m_n + 6 m_e$ βρίσκουμε περίπου 12.099 u και όχι 12 u, πράγμα που οφείλεται στο «έλλειμμα μάζας», δηλαδή στο ότι μέρος της μάζας ηρεμίας χρησιμοποιείται για να συνδεθούν τα πρωτόνια, νετρόνια, ηλεκτρόνια φτιάχνοντας το άτομο. Ας θεωρήσουμε την (Εξαναγκασμένη) Απορρόφηση και ας εστιάσουμε στη διατήρηση ενέργειας και ορμής. Ας θεωρήσουμε το άτομο αρχικά ακίνητο. Σε ποια περιοχή μηκών κύματος, λ , η κινητική ενέργεια του ατόμου μετά την απορρόφηση του φωτονίου είναι αρκετά μεγάλη (ας πούμε ίση με το ένα δέκατο της ενέργειας του φωτονίου που απορροφάται), ούτως ώστε να μην μπορούμε να την αγνοήσουμε στο ενεργειακό ισοζύγιο; Δίνονται $h = 6.62606957(29) \times 10^{-34}$ Js, $c = 2.99792458 \times 10^8$ m/s.
- Άσκηση 5.** Θεωρούμε συλλογή ατόμων υδρογόνου σε θερμοδυναμική ισορροπία και ότι οι ιδιοενέργειες κάθε ατόμου δίνονται από τη γνωστή σχέση Bohr $E_n \approx \frac{-13.6 \text{ eV}}{n^2}$. Υποθέστε ότι η θερμοκρασία είναι (α') 4.2 K και (β') 300 K. Δίνεται η σταθερά Boltzmann $k_B = 1.3806488(13) \times 10^{-23}$ J/K = $8.6173324(78) \times 10^{-5}$ eV/K.

(Α) Συγκρίνετε τον αριθμό των ατόμων που βρίσκονται στην 1η τροχιά Bohr με τον αριθμό των ατόμων που βρίσκονται στη 2η τροχιά και συνεχίστε ανά ζεύγη έως την 5η τροχιά (ζεύγη 1η-2η, 2η-3η, 3η-4η, 4η-5η).

(Β) Συγκρίνετε τον αριθμό των ατόμων που μεταβαίνουν σε χρόνο dt από την 1η στη 2η τροχιά με εξαναγκασμένη διεργασία, $dN_{1 \rightarrow 2}^{\xi}$, με τον αριθμό των ατόμων που μεταβαίνουν σε χρόνο dt από τη 2η στην 1η τροχιά με εξαναγκασμένη διεργασία, $dN_{2 \rightarrow 1}^{\xi}$. Συνεχίστε ανά ζεύγη έως την 5η τροχιά (ζεύγη 1η-2η, 2η-3η, 3η-4η, 4η-5η). Υποθέστε ότι $B_{12} = B_{21}$.
- Άσκηση 6.** Θεωρήστε μια κβαντική τελεία σχήματος ορθογωνίου παραλληλεπίπεδου με εσωτερικό GaAs διαστάσεων $8 \times 4 \times 4$ nm και περίβλημα $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ με μοριακό κλάσμα Al, x , τέτοιο ώστε η ασυνέχεια της ζώνης αγωγιμότητας μεταξύ των δύο υλικών να είναι $V_b = 224$ meV. Θεωρήστε κατά προσέγγιση την ενεργό μάζα στη ζώνη αγωγιμότητας ίση περίπου με αυτήν του GaAs, δηλαδή $m^* \approx 0.067 m_e$.

(Α) Πόσες ενεργειακές στάθμες έχει αυτή η κβαντική τελεία; Αν δεν μπορείτε να το αποδείξετε, θεωρήστε γνωστό ότι ένα κβαντικό φρέαρ εύρους L περιέχει $n = 1 + \text{Int} \left[\sqrt{\frac{2m^* V_b L^2}{\pi^2 \hbar^2}} \right]$ δέσμιες ενεργειακές καταστάσεις [3]. $\text{Int}[\xi]$ είναι το ακέραιο μέρος του ξ .

(Β) Σε τι μήκος κύματος αντιστοιχεί η μετάβαση από τη θεμελιώδη στην πρώτη διεγερμένη στάθμη της εν λόγω κβαντικής τελείας;

(Γ) Περαιτέρω, υποθέστε ότι έχουμε μια μεγάλη συλλογή από τέτοιες κβαντικές τελείες με ένα ηλεκτρόνιο στην κάθε μία και ότι η στατιστική Boltzmann με ίδια στατιστικά βάρη μπορεί να περιγράψει τον πληθυσμό των ενεργειακών σταθμών. Η θερμοκρασία ας είναι (α') 4.2 K και (β') 300 K. Συγκρίνετε τον αριθμό των κβαντικών τελειών όπου το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στη θεμελιώδη στάθμη, με τον αριθμό των κβαντικών τελειών όπου το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην 1η διεγερμένη στάθμη.

(Δ) Έστω τώρα ότι όλη αυτή η συλλογή κβαντικών τελειών βρίσκεται εντός καταλλήλου HM πεδίου. Συγκρίνετε τον αριθμό των κβαντικών τελειών που μεταβαίνουν σε χρόνο dt από τη θεμελιώδη στην 1η διεγερμένη στάθμη με εξαναγκασμένη διεργασία, $dN_{1 \rightarrow 2}^{\xi}$, με τον αριθμό των κβαντικών τελειών που μεταβαίνουν σε χρόνο dt από την 1η διεγερμένη στη θεμελιώδη στάθμη με εξαναγκασμένη διεργασία, $dN_{2 \rightarrow 1}^{\xi}$. Δίνεται η ανηγμένη σταθερά Planck $\hbar = 1.054571726(47) \times 10^{-34}$ Js, το στοιχειώδες φορτίο $e = 1.602176565(35) \times 10^{-19}$ C, η μάζα του ηλεκτρονίου $m_e = 9.10938291(40) \times 10^{-31}$ kg, η σταθερά Boltzmann $k_B = 1.3806488(13) \times 10^{-23}$ J/K = $8.6173324(78) \times 10^{-5}$ eV/K. Και

γενικώς όποια σταθερά σας χρειάζεται, θεωρήστε την γνωστή.

- **Άσκηση 7.** Να δικαιολογήσετε την Εικόνα 3.7 όπου συγκρίνονται οι στατιστικές Maxwell - Boltzmann (MB), Fermi - Dirac (FD), Bose - Einstein (BE). Με άλλα λόγια, να ζωγραφίσετε τη συνοπτική Εξ. 3.20. Να μελετήσετε τις συναρτήσεις, τα σημαντικά σημεία, τα όρια για $x \rightarrow \pm\infty$ και $x \rightarrow 0^\pm$ κ.ο.κ. Έχουμε θέσει τη συνεχή μεταβλητή $x = \beta(E - \mu)$ και μας ενδιαφέρει ο μέσος αριθμός σωματιδίων \bar{n} συναρτήσει του x .
- **Άσκηση 8.** (α') Δείξτε πως σε θερμοκρασία δωματίου, $T = 300$ K, η κβαντική συγκέντρωση, n_Q , είναι για τα πρωτόνια $\approx 1000 \text{ nm}^{-3}$, ενώ, για τα ηλεκτρόνια είναι $\approx 0.015 \text{ nm}^{-3}$. (β') Ο χαλκός έχει πυκνότητα $\approx 9 \text{ g cm}^{-3}$, σχετική ατομική μάζα ≈ 63.5 και στο στερεό χαλκό κάθε άτομο έχει ένα «ελεύθερο ηλεκτρόνιο». Δείξτε πως τα ηλεκτρόνια του χαλκού δεν μπορούν να περιγραφούν κλασικά, διότι η συγκέντρωσή τους, n , είναι πολύ μεγαλύτερη από την κβαντική συγκέντρωση, n_Q .

A.4 Ασκήσεις κεφαλαίου 4: Συνεχές και διακριτό φάσμα

- **Άσκηση 1.** Να αποδειχτεί πως στην περίπτωση οιονεί μονοδιαστάτου ηλεκτρονιακού αερίου, με καταστάσεις ελεύθερες στη διεύθυνση x και δέσμιες στις διευθύνσεις y, z , οι περιβάλλουσες ιδιοσυναρτήσεις δίνονται από την έκφραση

$$\varphi_{i,j,k_x}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{ik_x x} v_j(y) \zeta_i(z) \quad (\text{A.30})$$

και οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες από την έκφραση

$$E_{i,j,k_x} = E_i + E_j + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}, \quad (\text{A.31})$$

όπου ο k_x είναι «συνεχής» και οι i, j είναι διακριτοί δείκτες.

- **Άσκηση 2.** Να αποδειχτεί πως στην περίπτωση τριδιαστάτου ηλεκτρονιακού αερίου, με καταστάσεις ελεύθερες σε όλες τις διευθύνσεις x, y, z , οι περιβάλλουσες ιδιοσυναρτήσεις δίνονται από την έκφραση

$$\varphi_{i,j,k_x}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z}, \quad (\text{A.32})$$

όπου $V = L_x L_y L_z$ και οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες από την έκφραση

$$E_{k_x, k_y, k_z} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (\text{A.33})$$

όπου οι k_x, k_y, k_z είναι «συνεχείς» δείκτες.

A.5 Ασκήσεις κεφαλαίου 5: Ημικλασική προσέγγιση I

- **Άσκηση 1.** Θεωρήστε τις εξισώσεις που προκύπτουν από τις εξισώσεις Rabi μετά την Rotating Wave Approximation (RWA), δηλαδή

$$\dot{C}_1(t) = C_2(t) \frac{iE_0 \mathcal{P}}{2\hbar} e^{-i(\Omega - \omega)t},$$

$$\dot{C}_2(t) = C_1(t) \frac{iE_0 \mathcal{P}}{2\hbar} e^{i(\Omega - \omega)t}.$$

Θέλουμε να τις λύσουμε με αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$.

(α') Κάντε το μετασχηματισμό

$$C_1(t) = \mathcal{E}_1(t)e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}},$$

$$C_2(t) = \mathcal{E}_2(t)e^{\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}},$$

και αποδείξτε ότι προκύπτει το σύστημα διαφορικών εξισώσεων

$$\begin{bmatrix} \dot{\mathcal{E}}_1(t) \\ \dot{\mathcal{E}}_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{i\Delta}{2} & \frac{i\Omega_R}{2} \\ \frac{i\Omega_R}{2} & \frac{i\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{E}_1(t) \\ \mathcal{E}_2(t) \end{bmatrix}.$$

Ορίσαμε αποσυντονισμό (detuning) το $\Delta := \omega - \Omega$ και συχνότητα Rabi το $\Omega_R := \frac{E_0 \mathcal{P}}{\hbar}$.

(β') Ορίστε το διάνυσμα

$$\vec{x}(t) = \begin{bmatrix} \mathcal{E}_1(t) \\ \mathcal{E}_2(t) \end{bmatrix}$$

και τον πίνακα

$$\tilde{\mathcal{A}} = \begin{bmatrix} -\frac{i\Delta}{2} & \frac{i\Omega_R}{2} \\ \frac{i\Omega_R}{2} & \frac{i\Delta}{2} \end{bmatrix} = -iA = -i \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ \frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix},$$

οπότε, το σύστημα διαφορικών εξισώσεων γίνεται

$$\dot{\vec{x}}(t) = \tilde{\mathcal{A}}\vec{x}(t).$$

Δοκιμάστε λύσεις της μορφής

$$\vec{x}(t) = \vec{v}e^{\tilde{\lambda}t}$$

και αποδείξτε ότι εν τέλει έχουμε να επιλύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών

$$A\vec{v} = \lambda\vec{v},$$

όπου $\tilde{\lambda} = -i\lambda$.

(γ') Λύστε το πρόβλημα για $\Delta = 0$.

(δ') Λύστε το πρόβλημα για $\Delta \neq 0$.

(ε') Συγκρίνετε το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης και την περίοδο των ταλαντώσεων που προκύπτουν στις περιπτώσεις $\Delta = 0$ και $\Delta \neq 0$.

- **Άσκηση 2.** Θεωρήστε δεδομένη την περίπτωση όπου ισχύει η Εξ. 5.115, ειδικότερα ότι η πιθανότητα παρουσίας του ηλεκτρονίου στην άνω στάθμη είναι

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)}{\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2} t^2.$$

Λάβετε υπ' όψιν τον ορισμό της συχνότητας Rabi, $\Omega_R = \frac{\mathcal{P}\mathcal{E}_0}{\hbar}$ (δείτε την Εξ. 5.55) και επιπλέον θεωρήστε ότι βρισκόμαστε σε συντονισμό. Εκτιμήστε τον απαιτούμενο χρόνο, ώστε $P_2(t) = 1$, θεωρώντας ότι το μέτρο της διπολικής ροπής \mathcal{P} είναι της τάξεως μεγέθους $e a_0$, όπου e είναι το στοιχειώδες φορτίο $\approx 1.602 \times 10^{-19}$ C και $a_0 \approx 0.529$ Å είναι η ακτίνα Bohr. Για το μέτρο του ηλεκτρικού πεδίου πάρτε τρεις περιπτώσεις, συγκεκριμένα $10^3, 10^5$ και 10^8 V/m. Δίνεται και η ανηγμένη σταθερά του

Planck $\hbar \approx 1.054 \times 10^{-34}$ Js.

Λύση ασκήσεως 2.

Αν θέλουμε η πιθανότητα να γίνει ίση με μονάδα και βρισκόμαστε σε συντονισμό όπου $\Delta := \omega - \Omega = 0$, τότε ονομάζοντας $x := \frac{\Delta t}{2} \Rightarrow x = 0 \Rightarrow \frac{\sin^2 x}{x^2} \rightarrow 1$. Επομένως, προκύπτει $t = \frac{2\hbar}{\mathcal{P}E_0}$.

Συγκεκριμένα,

$$E_0 = 10^3 \text{ V/m} \Rightarrow t = \frac{2 \times 1.054 \times 10^{-34} \text{ Js}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \cdot 10^3 \text{ V/m}} \approx 2.5 \times 10^{-8} \text{ s} = 25 \text{ ns}$$

$$E_0 = 10^5 \text{ V/m} \Rightarrow t = \frac{2 \times 1.054 \times 10^{-34} \text{ Js}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \cdot 10^5 \text{ V/m}} \approx 2.5 \times 10^{-10} \text{ s} = 0.25 \text{ ns}$$

$$E_0 = 10^8 \text{ V/m} \Rightarrow t = \frac{2 \times 1.054 \times 10^{-34} \text{ Js}}{1.6 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \cdot 10^8 \text{ V/m}} \approx 2.5 \times 10^{-13} \text{ s} = 0.25 \text{ ps}$$

- **Άσκηση 3.** Χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα Oscillations.m (Κώδικας Γ.8 στο Παράρτημα Γ), να γίνει η γραφική παράσταση των ταλαντώσεων δισταθμικού συστήματος, για το οποίο ισχύει ότι $|\Delta| = 3\Omega_R$.
- **Άσκηση 4.** Να φτιαχθεί πρόγραμμα αντίστοιχο του Oscillations.m (Κώδικας Γ.8 στο Παράρτημα Γ) για τρισταθμικό σύστημα και να γίνει η γραφική παράσταση των ταλαντώσεών του για $\Omega_R = \Omega'_R = 1$, $\Delta = 0$.
- **Άσκηση 5.** Δισταθμικό σύστημα σε ημικλασική προσέγγιση και προσέγγιση διπόλου. Δίνονται οι εξισώσεις πριν από την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος

$$\dot{C}_1(t) = C_2(t) \frac{i\Omega_R}{2} [e^{i\Delta t} + e^{-i\Sigma t}], \quad (\text{A.34})$$

$$\dot{C}_2(t) = C_1(t) \frac{i\Omega_R}{2} [e^{-i\Delta t} + e^{i\Sigma t}]. \quad (\text{A.35})$$

(α') Εξηγήστε και ορίστε τα σύμβολα, Ω_R , Δ , Σ , $C_1(t)$, $C_2(t)$.

(β') Ας υποθέσουμε πως η ισχύς της διαταραχής είναι μεγάλη ώστε τα Δ και Σ να είναι μηδαμινά συγκρινόμενα με το Ω_R . Πώς θα απλοποιηθούν τότε οι Εξ. (A.34)-(A.35);

Για τις απλοποιημένες εξισώσεις:

(γ') Βρείτε τα $C_1(t)$, $C_2(t)$ με αρχικές συνθήκες $C_1(0) = 1$, $C_2(0) = 0$.

(δ') Υπολογίστε τις πιθανότητες παρουσίας του ηλεκτρονίου στις στάθμες, $P_1(t)$ και $P_2(t)$, καθώς και την περίοδο, T_R , και το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης, A_R , των ταλαντώσεων Rabi.

(ε') Υπολογίστε τον μέσο ρυθμό μεταβίβασης, $k = \frac{\langle P_2(t) \rangle}{t_{2, \text{μέση}}}$. $\langle P_2(t) \rangle$ είναι η μέση τιμή της πιθανότητας παρουσίας του ηλεκτρονίου στη στάθμη 2 και $t_{2, \text{μέση}}$ είναι ο απαιτούμενος χρόνος ώστε να φτάσει η $P_2(t)$ πρώτη φορά στην τιμή αυτή, έχοντας αρχικά τοποθετήσει το ηλεκτρόνιο στη στάθμη 1.

- **Άσκηση 6.** Κβαντική τελεία και οι μεταβλητές χωρίζονται. Στους άξονες x και y έχουμε φρέατα, τα οποία χωράνε μία μόνο στάθμη, ενώ στον άξονα z έχουμε απλό αρμονικό ταλαντωτή, του οποίου οι στάθμες ισαπέχουν κατά $\hbar\Omega$. Επικεντρωνόμαστε στις κατώτερες τρεις στάθμες, ας τις ονομάσουμε $k = 1, 2, 3$ ($n = 0, 1, 2$). Οπότε, έχουμε τρισταθμικό σύστημα. Θεωρήστε ημικλασική προσέγγιση με ηλεκτρικό πεδίο στον άξονα z . Οι ιδιοσυναρτήσεις στον άξονα z είναι

$$Z_n(z) = u_n(z) \exp\left(-\frac{z^2}{2a^2}\right), \quad (\text{A.36})$$

όπου $a = \left(\frac{\hbar}{m\Omega}\right)^{1/2}$ και δίνονται οι

$$u_0(z) = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}, \quad (\text{A.37})$$

$$u_1(z) = \left(\frac{1}{a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \left[2\left(\frac{z}{a}\right)\right], \quad (\text{A.38})$$

$$u_2(z) = \left(\frac{1}{8a\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \left[2 - 4\left(\frac{z}{a}\right)^2\right]. \quad (\text{A.39})$$

Αποδείξτε πως οι (κυκλικές) συχνότητες Rabi, Ω_R και Ω'_R καθώς και τα μη διαγώνια στοιχεία πίνακα της διπολικής ροής \mathcal{P} και \mathcal{P}' , μεταξύ των σταθμών 12 και 23, αντιστοίχως, ικανοποιούν

(α')

$$\mathcal{P} = -\frac{2ea}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \mu^2 e^{-\mu^2}, \quad (\text{A.40})$$

(β')

$$\mathcal{P}' = -\frac{\sqrt{2}ea}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \mu^2 e^{-\mu^2} + \frac{\sqrt{2}ea}{\sqrt{\pi}} 2 \int_{-\infty}^{\infty} d\mu \mu^4 e^{-\mu^2}, \quad (\text{A.41})$$

κι επειδή δίνεται πως

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mu \mu^2 e^{-\mu^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \quad (\text{A.42})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\mu \mu^4 e^{-\mu^2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4}, \quad (\text{A.43})$$

έχουμε τελικά

(γ')

$$\left|\frac{\Omega_R}{\Omega'_R}\right| = \left|\frac{\mathcal{P}}{\mathcal{P}'}\right| = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (\text{A.44})$$

- **Άσκηση 7.** Χρησιμοποιώντας τη γενική λύση του ΔΣ (Εξ. 5.66), αποδείξτε πως, για αρχική τοποθέτηση του ηλεκτρονίου στην κάτω στάθμη (1), το μέγιστο ποσοστό μεταβίβασης στην άνω στάθμη (2) είναι $4c_1v_{11}c_2v_{12}$.

A.6 Ασκήσεις κεφαλαίου 6: Ημικλασική προσέγγιση II

Δεν υπάρχουν ασκήσεις σε αυτό το κεφάλαιο.

A.7 Ασκήσεις κεφαλαίου 7: Επιτρεπόμενες κι απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις

- **Άσκηση 1.** Να αποδειχτεί, π.χ. στο άτομο του Υδρογόνου, πως η ηλεκτρική δύναμη είναι πολύ μεγαλύτερη από τη βαρυτική. Μάλιστα, βρείτε πόσες τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη είναι.
- **Άσκηση 2.** Βρείτε τον κβαντικό αριθμό n που χαρακτηρίζει την κίνηση της Γης περί τον Ήλιο στο πλαίσιο του προτύπου Bohr. Δίνονται: μάζα Γης, $M = 6 \cdot 10^{24}$ kg, ακτίνα τροχιάς Γης, $R = 1.5 \cdot 10^{11}$ m, γραμμική ταχύτητα Γης, $v = 3 \cdot 10^4$ m/s.

- **Άσκηση 3.** Δείξτε πως η σταθερά A στην αξιμουθιακή συνάρτηση $\Phi_{m_\ell}(\phi) = Ae^{im_\ell\phi}$ μπορεί να εκλεγεί $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ προκειμένου αυτή να είναι κανονικοποιημένη. Δείξτε, επιπλέον, πως για $m'_\ell \neq m_\ell$, οι $\Phi_{m_\ell}(\phi)$ και $\Phi_{m'_\ell}(\phi)$ είναι ορθογώνιες.
- **Άσκηση 4.** Δείξτε πως η $\Theta_{20}(\theta) = \frac{\sqrt{10}}{4}(3\cos^2\theta - 1)$ είναι λύση της πολικής εξίσωσης 7.25 και είναι κανονικοποιημένη.
- **Άσκηση 5.** Θεωρήστε δεδομένη τη συνάρτηση $R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^3}e^{-r/a_0}$ και την Εξ. 7.26 και βρείτε την ενέργεια E_1 του υδρογόνου.
- **Άσκηση 6.** Δείξτε πως οι $R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^3}e^{-r/a_0}$ και $R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\frac{r}{a_0}e^{-r/2a_0}$ είναι λύσεις, και μάλιστα κανονικοποιημένες, της ακτινικής εξίσωσης (7.26). Δίνεται

$$\int_0^\infty dr r^n e^{-\gamma r} = \gamma^{-(n+1)} n!, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \gamma > 0.$$

- **Άσκηση 7.** Να συγκριθούν οι πυκνότητες πιθανότητας ευρέσεως του ηλεκτρονίου στο 1s τροχιακό του ατόμου του υδρογόνου σε απόσταση $\frac{3a_0}{2}, a_0$ και $\frac{a_0}{2}$.
- **Άσκηση 8.** Να βρεθεί η απόσταση, στην οποία μεγιστοποιείται η πυκνότητα πιθανότητας ευρέσεως του ηλεκτρονίου στο 1s τροχιακό του ατόμου του υδρογόνου.
- **Άσκηση 9.** Να βρεθεί η μέση απόσταση του ηλεκτρονίου στο 1s τροχιακό του υδρογόνου. Δίνεται

$$\int_0^\infty dr r^n e^{-\gamma r} = \gamma^{-(n+1)} n!, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \gamma > 0.$$

- **Άσκηση 10.** Αποδείξτε ότι η αντικατάσταση ενός ανύσματος θέσεως $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ ισοδυναμεί, σε σφαιρικές συντεταγμένες με τις αντικαταστάσεις $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \pi + \varphi$, τις οποίες χρησιμοποιήσαμε στην Ενότητα 7.7.

Λύση ασκήσεως 10:

Ας θεωρήσουμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας, το σημείο που απεικονίζεται στην Εικόνα 7.9, το οποίο βρίσκεται στο πρώτο ογδομήριο. Συνεπώς, $\theta \in [0, \pi/2], \varphi \in [0, \pi/2]$.

Η αντικατάσταση $\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \equiv r'$ ισοδυναμεί με

$$\begin{aligned} x' = -x &\Leftrightarrow r' \sin \theta' \cos \varphi' = -r \sin \theta \cos \varphi, \\ y' = -y &\Leftrightarrow r' \sin \theta' \sin \varphi' = -r \sin \theta \sin \varphi, \\ z' = -z &\Leftrightarrow r' \cos \theta' = -r \cos \theta. \end{aligned}$$

Όμως,

$$r' = \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2} = \sqrt{(-x)^2 + (-y)^2 + (-z)^2} = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

Συνεπώς, $r' = r$ και οι παραπάνω σχέσεις γίνονται

$$\begin{aligned} \sin \theta' \cos \varphi' &= -\sin \theta \cos \varphi, \\ \sin \theta' \sin \varphi' &= -\sin \theta \sin \varphi, \\ \cos \theta' &= -\cos \theta. \end{aligned}$$

Από την τρίτη σχέση, εφόσον $\theta, \theta' \in [0, \pi]$, προκύπτει ότι $\theta' = \pi - \theta$. Επιπλέον, διαιρώντας κατά μέλη τις δύο πρώτες εξισώσεις, προκύπτει

$$\tan \varphi' = \tan \varphi.$$

Άρα, εφόσον $\varphi, \varphi' \in [0, 2\pi]$, οι δύο πιθανές λύσεις είναι $\varphi' = \varphi$ και $\varphi' = \pi + \varphi$. Όμως, αντικαθιστώντας την πρώτη λύση σε οποιαδήποτε από τις δύο πρώτες σχέσεις, προκύπτει $\sin \theta' = -\sin \theta$, πράγμα το οποίο, για $\theta, \theta' \in [0, \pi]$ είναι άτοπο. Συνεπώς, $\varphi' = \pi + \varphi$.

- **Άσκηση 11.** Αποδείξτε ότι ισχύει η πιο κάτω έκφραση για το διάνυσμα θέσεως

$$\vec{r} = \frac{r}{2} \sin \theta [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\varphi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\varphi}] + r \cos \theta \hat{e}_z,$$

την οποία χρησιμοποιήσαμε στην Ενότητα 7.7.

Λύση ασκήσεως 11:

$$\begin{aligned} (\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\varphi} &= (\hat{e}_x - i\hat{e}_y)(\cos \varphi + i \sin \varphi) = \hat{e}_x \cos \varphi + \hat{e}_x i \sin \varphi - i\hat{e}_y \cos \varphi + \hat{e}_y \sin \varphi \\ (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\varphi} &= (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)(\cos \varphi - i \sin \varphi) = \hat{e}_x \cos \varphi - \hat{e}_x i \sin \varphi + i\hat{e}_y \cos \varphi + \hat{e}_y \sin \varphi \\ \Rightarrow [\dots] &= 2\hat{e}_x \cos \varphi + 2\hat{e}_y \sin \varphi \Rightarrow \frac{r}{2} \sin \theta [\dots] + r \cos \theta \hat{e}_z = \\ &= r \cos \varphi \sin \theta \hat{e}_x + r \sin \varphi \sin \theta \hat{e}_y + r \cos \theta \hat{e}_z = x\hat{e}_x + y\hat{e}_y + z\hat{e}_z = \vec{r}. \end{aligned}$$

- **Άσκηση 12.** Έχοντας δεδομένο ότι οι συντελεστές Einstein δίνονται από τις Εξ. 5.111, 5.112, 5.113

$$B_{12} = \frac{\mathcal{P}^2 \pi}{6\hbar^2 \varepsilon_0},$$

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3},$$

$$B_{12} = B_{21},$$

υπολογίστε τους για τις ατομικές μεταβάσεις $100 \rightarrow 210$ και $100 \rightarrow 21 \pm 1$ στο άτομο του Υδρογόνου. Δεχτείτε ότι βρισκόμαστε σε συντονισμό.

Λύση ασκήσεως 12:

Οι πράξεις στην Ενότητα 7.7 δείχνουν ότι

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{P}}_{100210} &= -\frac{2^{15/2}}{3^5} ea_0 \hat{e}_z & \Rightarrow |\vec{\mathcal{P}}_{100210}| &= \frac{2^{15/2}}{3^5} ea_0, \\ \vec{\mathcal{P}}_{10021\pm 1} &= -\frac{2^7}{3^5} (\hat{e}_x \pm i\hat{e}_y) ea_0 & \Rightarrow |\vec{\mathcal{P}}_{10021\pm 1}| &= \frac{2^{15/2}}{3^5} ea_0. \end{aligned}$$

Οπότε, ενιαία, μπορούμε να γράψουμε

$$\mathcal{P} = \frac{2^{15/2}}{3^5} ea_0.$$

Άρα, $\mathcal{P} \approx \frac{2^{15/2}}{3^5} 1.602 \times 10^{-19} \text{ C} \cdot 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \approx 0.6313 \times 10^{-29} \text{ Cm}$, αφού το στοιχειώδες φορτίο $e \approx 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$ και η ακτίνα Bohr $a_0 \approx 0.529 \text{ \AA}$. Επομένως,

$$B = B_{12} = B_{21} \approx 0.02121 \times 10^{22} \frac{\text{m}^3}{\text{Js}^2}.$$

Λάβαμε τη διηλεκτρική σταθερά του κενού $\epsilon_0 \approx 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$ και την ανηγμένη σταθερά Planck $\hbar \approx 1.054 \times 10^{-34} \text{ Js}$.

Αφού δεχτήκαμε ότι βρισκόμαστε σε συντονισμό $\Delta := \omega - \Omega = 0 \Rightarrow \omega = \Omega$. Ας υπολογίσουμε, λοιπόν, το Ω . Για τις στάθμες του ατόμου του υδρογόνου έχουμε $E_n = -13.6 \text{ eV}/n^2$. Άρα, $E_1 = -13.6 \text{ eV}$, $E_2 = -3.4 \text{ eV} \Rightarrow E_2 - E_1 = 10.2 \text{ eV} \Rightarrow \Omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \approx 15.5 \times 10^{15} \text{ Hz} = 15.5 \text{ PHz}$.

$$A_{21} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} B = \frac{8\pi \hbar^3 \omega^3}{h^2 c^3} B = \frac{2\hbar \Omega^3}{\pi c^3} B \approx \frac{\Omega^3 \mathcal{P}^2}{3c^3 \hbar \epsilon_0} \approx 1.963 \times 10^9 \text{ Hz}.$$

- **Άσκηση 13.** Υπολογίστε τα στοιχεία πίνακα και τις απλές επικαλύψεις $\langle 100 | \vec{r} | 100 \rangle$ και $\langle 100 | 100 \rangle$, $\langle 100 | \vec{r} | 200 \rangle$ και $\langle 100 | 200 \rangle$, $\langle 200 | \vec{r} | 200 \rangle$ και $\langle 200 | 200 \rangle$, της Ενότητας 7.7.

Λύση ασκήσεως 13:

$$\begin{aligned} \langle 100 | \vec{r} | 100 \rangle &= (\pi a_0^3)^{-1/2} (\pi a_0^3)^{-1/2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi \, e^{-\frac{2r}{a_0}} r \left\{ \frac{\sin \theta}{2} [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\phi} \right. \\ &\quad \left. + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\phi}] + \hat{e}_z \cos \theta \right\} \\ &= \frac{a_0^4}{\pi a_0^3} \int_0^\infty \left(\frac{r}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{2r}{a_0}} d\left(\frac{r}{a_0}\right) \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta \, d\theta \, d\phi \left\{ \frac{\sin \theta}{2} [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\phi} \right. \\ &\quad \left. + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\phi}] + \hat{e}_z \cos \theta \right\} \\ &= \frac{a_0}{\pi} \int_0^\infty q^3 e^{-2q} dq \left\{ \int_0^\pi d\theta \frac{\sin^2 \theta}{2} \int_0^{2\pi} d\phi [(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\phi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\phi}] \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta \hat{e}_z \int_0^{2\pi} d\phi \right\}. \end{aligned}$$

$$\int_0^\infty \underbrace{q^3 e^{-2q}}_{\gamma=2, n=3} dq = 2^{-(3+1)} 3! = \frac{2 \cdot 3}{2^4} = \frac{3}{2^3} = \frac{3}{8},$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi [\dots] = (\hat{e}_x - i\hat{e}_y) \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\phi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y) \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i\phi},$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi e^{\pm i\phi} = \int_0^{2\pi} d\phi \cos(\pm\phi) + i \int_0^{2\pi} d\phi \sin(\pm\phi) = \int_0^{2\pi} d\phi \cos \phi \pm i \int_0^{2\pi} d\phi \sin \phi = 0,$$

$$\int_0^\pi d\theta \frac{\sin^2 \theta}{2} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \frac{1 - \cos 2\theta}{2} d\theta = \frac{1}{4} \left\{ \pi - \int_0^\pi \cos 2\theta \right\} = \frac{\pi}{4},$$

$$\int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta = \frac{1}{2} \int_0^\pi d\theta \sin 2\theta = \frac{1}{2} \left[\frac{-\cos 2\theta}{2} \right]_0^\pi = 0.$$

$$\text{Άρα, } \langle 100 | \vec{r} | 100 \rangle = \frac{a_0}{\pi} \frac{3}{2^3} \left\{ \frac{\pi}{4} \cdot 0 + 0 \cdot 2\pi \right\} = 0, \text{ αναμενόμενο διότι}$$

$$\langle 100 | \vec{r} | 100 \rangle = \int (\acute{\alpha}\rho\tau\iota\alpha)(\pi\epsilon\rho\iota\tau\tau\acute{\eta})(\acute{\alpha}\rho\tau\iota\alpha) = 0.$$

$$\begin{aligned} \text{Ενώ, } \langle 100 | 100 \rangle &= (\pi a_0^3)^{-1} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi e^{-\frac{2r}{a_0}} \\ &= \frac{a_0^3}{\pi a_0^3} \int_0^\infty d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dq \underbrace{q^2 e^{-2q}}_{\gamma=2, n=2} \left[-\cos \theta \right]_0^\pi \cdot 2\pi = \frac{1}{\pi} 2^{-(2+1)} 2!(1+1) \cdot 2\pi = \frac{2^3}{2^3} = 1. \end{aligned}$$

Αναμενόμενο, διότι η $\Phi_{100}(\vec{r})$ είναι κανονικοποιημένη.

$$\begin{aligned} \langle 100 | \vec{r} | 200 \rangle &= (\pi a_0^3)^{-1/2} (32\pi a_0^3)^{-1/2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi e^{-\frac{r}{a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} r \\ &\quad \left\{ \frac{\sin \theta}{2} \left[(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\phi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\phi} \right] + \hat{e}_z \cos \theta \right\} \\ &= \frac{a_0^4}{\pi a_0^3 4\sqrt{2}} \int_0^\infty d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{3r}{2a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\phi \left\{ \frac{\sin \theta}{2} \left[\dots \right] + \hat{e}_z \cos \theta \right\}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dq q^3 e^{-\frac{3q}{2}} (2-q) &= 2 \int_0^\infty dq \underbrace{q^3 e^{-\frac{3q}{2}}}_{\gamma=\frac{3}{2}, n=3} - \int_0^\infty dq \underbrace{q^4 e^{-\frac{3q}{2}}}_{\gamma=\frac{3}{2}, n=4} = 2 \left(\frac{3}{2}\right)^{-(3+1)} 3! - \left(\frac{3}{2}\right)^{-(4+1)} 4! \\ &= \frac{2 \cdot 2^4}{3^4} 2 \cdot 3 - \frac{2^5}{3^5} 2 \cdot 3 \cdot 2^2 = \frac{2^6}{3^3} - \frac{2^8}{3^4} = \left(\frac{4}{3}\right)^3 - \left(\frac{4}{3}\right)^4. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^\pi d\theta \frac{\sin^2 \theta}{2} \int_0^{2\pi} d\phi \left[(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\phi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\phi} \right] + \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta \hat{e}_z \int_0^{2\pi} d\phi \\ = \frac{\pi}{4} \cdot 0 + 0 \cdot 2\pi = 0. \end{aligned}$$

$$\text{Άρα, } \langle 100 | \vec{r} | 200 \rangle = \frac{a_0}{\pi 4\sqrt{2}} \left(\left(\frac{4}{3}\right)^3 - \left(\frac{4}{3}\right)^4 \right) \cdot 0 = 0, \text{ αναμενόμενο διότι}$$

$$\langle 100 | \vec{r} | 200 \rangle = \int (\acute{\alpha}\rho\tau\iota\alpha)(\pi\epsilon\rho\iota\tau\tau\acute{\eta})(\acute{\alpha}\rho\tau\iota\alpha) = 0.$$

$$\text{Ενώ, } \langle 100 | 200 \rangle = (\pi a_0^3)^{-1/2} (32\pi a_0^3)^{-1/2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi e^{-\frac{r}{a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{a_0^3}{\pi a_0^3 4\sqrt{2}} \int_0^\infty d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{3r}{2a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi \\
&= \frac{1}{4\sqrt{2}} \int_0^\infty dq q^2 e^{-\frac{3q}{2}} (2-q) 4\pi \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ 2 \int_0^\infty dq \underbrace{q^2 e^{-\frac{3q}{2}}}_{\gamma=\frac{3}{2}, n=2} - \int_0^\infty dq \underbrace{q^3 e^{-\frac{3q}{2}}}_{\gamma=\frac{3}{2}, n=3} \right\} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ 2 \left(\frac{3}{2}\right)^{-(2+1)} 2! - \left(\frac{3}{2}\right)^{-(3+1)} 3! \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{2^5}{3^3} - \frac{2^5}{3^3} \right\} = 0.
\end{aligned}$$

Αναμενόμενο διότι οι $\Phi_{100}(\vec{r})$ και $\Phi_{200}(\vec{r})$ είναι ορθογώνιες.

$$\begin{aligned}
\langle 200|\vec{r}|200\rangle &= (32\pi a_0^3)^{-1/2} (32\pi a_0^3)^{-1/2} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi e^{-\frac{r}{a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 r \\
&\quad \left\{ \frac{\sin \theta}{2} \left[(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\phi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\phi} \right] + \hat{e}_z \cos \theta \right\} \\
&= \frac{a_0^4}{32\pi a_0^3} \int_0^\infty d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^3 e^{-\frac{r}{a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\phi \\
&\quad \left\{ \frac{\sin \theta}{2} \left[\dots \right] + \hat{e}_z \cos \theta \right\}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty dq q^3 (2-q)^2 e^{-q} &= \int_0^\infty dq q^3 (4 + q^2 - 4q) e^{-q} = \\
&= 4 \int_0^\infty dq \underbrace{q^3 e^{-q}}_{\gamma=1, n=3} + \int_0^\infty dq \underbrace{q^5 e^{-q}}_{\gamma=1, n=5} - 4 \int_0^\infty dq \underbrace{q^4 e^{-q}}_{\gamma=1, n=4} \\
&= 4 \cdot 1^{-(3+1)} 3! + 1^{-(5+1)} 5! - 4 \cdot 1^{-(4+1)} 4! = 4! + 4!5 - 4!4 = \\
&= 4!(1 + 5 - 4) = 2 \cdot 4!
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2} \int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta \int_0^{2\pi} d\phi \left[(\hat{e}_x - i\hat{e}_y)e^{i\phi} + (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)e^{-i\phi} \right] + \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta \hat{e}_z \int_0^{2\pi} d\phi \\
&\int_0^\pi d\theta \sin^2 \theta = \int_0^\pi \frac{1 - \cos 2\theta}{2} d\theta = \frac{\pi}{2} - \left[\frac{\sin 2\theta}{2 \cdot 2} \right]_0^\pi = \frac{\pi}{2} \\
&\int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta = \int_0^\pi \sin \theta d(\sin \theta) = 0.
\end{aligned}$$

Οπότε, $\langle 200|\vec{r}|200\rangle = \frac{a_0}{32\pi} 2 \cdot 4! \left\{ \frac{\pi}{2} \cdot 0 + 0 \cdot 2\pi \right\} = 0$. Αναμενόμενο διότι

$$\langle 200|\vec{r}|200\rangle = \int (\acute{\alpha}\rho\tau\iota\alpha)(\pi\epsilon\rho\iota\tau\tau\acute{\eta})(\acute{\alpha}\rho\tau\iota\alpha) = 0.$$

$$\text{Εν\acute{o}}, \langle 200|200\rangle = \frac{1}{32\pi a_0^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{a_0^3}{32\pi a_0^3} \int_0^\infty d\left(\frac{r}{a_0}\right) \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \left(2 - \frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \underbrace{\int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin\theta d\theta d\phi}_{4\pi \text{ (ολική στερεά γωνία)}} \\
 &= \frac{1}{8} \left\{ \int_0^\infty dq q^2 (4 + q^2 - 4q) e^{-q} \right\} \\
 &= \frac{1}{8} \left\{ 4 \int_0^\infty dq \underbrace{q^2 e^{-q}}_{\gamma=1, n=2} + \int_0^\infty dq \underbrace{q^4 e^{-q}}_{\gamma=1, n=4} - 4 \int_0^\infty dq \underbrace{q^3 e^{-q}}_{\gamma=1, n=3} \right\} \\
 &= \frac{1}{8} \left\{ 4 \cdot 1^{-(2+1)} 2! + 1^{-(4+1)} 4! - 4 \cdot 1^{-(3+1)} 3! \right\} = \frac{8 + 4! - 4!}{8} = 1.
 \end{aligned}$$

Αναμενόμενο διότι η $\Phi_{200}(\vec{r})$ είναι κανονικοποιημένη.

• Άσκηση 14.

1. Να ελεγχθούν οι $2s, 2p_z, 3d_{xz}$ ως προς την ομοτιμία.
2. Βρείτε πόσες και ποιες κομβικές επιφάνειες έχει κάθε μία από τις παραπάνω συναρτήσεις.
3. Να ελεγχθεί αν οι μεταβάσεις $1s \leftrightarrow 2p_z, 1s \leftrightarrow 3p_z, 2s \leftrightarrow 3p_z$ είναι επιτρεπόμενες ή απαγορευμένες στο πλαίσιο της προσεγγίσεως διπόλου και αν ισχύουν οι κανόνες επιλογής $\Delta\ell = \pm 1, \Delta m_\ell = 0, \pm 1$.
4. Να συγκριθούν οι ισχύες των οπτικών μεταβάσεων $1s \leftrightarrow 2p_z, 1s \leftrightarrow 3p_z$ στο πλαίσιο της προσεγγίσεως διπόλου.
5. Τα στοιχεία πίνακα της διπολικής ροπής είναι

$$\vec{\mathcal{P}}_{k_1 k_2} := \int_{\text{παντού}} dV \Phi_{k_1}^*(\vec{r}) (-e)\vec{r} \Phi_{k_2}(\vec{r}).$$

Εξηγήστε γιατί, εάν το στοιχείο πίνακα της διπολικής ροπής μηδενίζεται, δεν υπάρχει τέτοια οπτική μετάβαση.

6. Βρείτε σε τι ενέργεια, συχνότητα, μήκος κύματος αντιστοιχούν οι μεταβάσεις $1s \leftrightarrow 2p_z, 1s \leftrightarrow 3p_z, 2s \leftrightarrow 3p_z$. Ποια από αυτές τις μεταβάσεις θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε για laser στο ορατό;
- **Άσκηση 15.** Έστω μονοδιάστατο απειρόβαθο φρέαρ δυναμικού πλάτους L , με τοιχώματα στις θέσεις $x = -L/2$ και $x = L/2$. Οι ιδιοσυναρτήσεις του είναι

$$\Psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & n = 1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), & n = 2, 4, 6, \dots \\ 0, & \text{εκτός φρέατος} \end{cases}$$

Δίνεται, επίσης, $\cos^2 \theta = \frac{1+\cos(2\theta)}{2}, \sin^2 \theta = \frac{1-\cos(2\theta)}{2}$. Να δειχθεί ότι οι οπτικές μεταβάσεις $3 \leftrightarrow 1$ και $2 \leftrightarrow 4$ απαγορεύονται, ενώ οι μεταβάσεις $1 \leftrightarrow 2$ και $2 \leftrightarrow 3$ επιτρέπονται.

Το ίδιο να δειχθεί και θεωρώντας μονοδιάστατο απειρόβαθο φρέαρ με τοιχώματα στις θέσεις $x = 0$ και $x = L$, ήτοι με ιδιοσυναρτήσεις

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- **Άσκηση 16.** Δίνονται τα ατομικά τροχιακά (συμβολισμός $n\ell m$) του ατόμου του υδρογόνου $210 (2p_z)$ και 32 ± 2 (με κατάλληλο άθροισμα και διαφορά τους φτιάχνονται τα $3d_{x^2-y^2}$ και $3d_{xy}$)

$$\psi_{210}(r, \theta, \varphi) = (32\pi a_0^3)^{-1/2} \frac{r}{a_0} \cos \theta \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right), \quad (\text{A.45})$$

$$\psi_{32\pm 2}(r, \theta, \varphi) = (26244\pi a_0^3)^{-1/2} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\varphi) \exp\left(-\frac{r}{3a_0}\right). \quad (\text{A.46})$$

(α') Βρείτε και δικαιολογήστε την ομοτιμία και τον αριθμό των κομβικών επιφανειών των ατομικών αυτών τροχιακών.

(β') Είναι η μετάβαση $210 \leftrightarrow 32\pm 2$ επιτρεπόμενη στο πλαίσιο της προσεγγίσεως διπόλου; Ικανοποιούνται οι κανόνες $\Delta \ell = \pm 1$ και $\Delta m = 0, \pm 1$;

Δίνεται πως $(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = -\mathbf{r}) \Leftrightarrow (r' = r, \theta' = \pi - \theta, \varphi' = \varphi + \pi)$.

A.8 Ασκήσεις κεφαλαίου 8: Κβαντική προσέγγιση I

- **Άσκηση 1.** Ο δείκτης του ΗΜ τρόπου m παραλείπεται για απλότητα.
 (Α) Να βρείτε τι κάνουν οι όροι $\hat{a}^\dagger \hat{a}, \hat{a} \hat{a}^\dagger, \hat{S}_+ \hat{S}_-, \hat{S}_- \hat{S}_+, \hat{S}_+ \hat{a}^\dagger, \hat{S}_+ \hat{a}, \hat{S}_- \hat{a}^\dagger, \hat{S}_- \hat{a}$, στις καταστάσεις $|\downarrow, n\rangle$ και $|\uparrow, n\rangle$.
 (Β) Να υπολογιστούν τα $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle, \langle \hat{a} \hat{a}^\dagger \rangle, \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle, \langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle, \langle \hat{S}_+ \hat{a}^\dagger \rangle, \langle \hat{S}_+ \hat{a} \rangle, \langle \hat{S}_- \hat{a}^\dagger \rangle, \langle \hat{S}_- \hat{a} \rangle$, για τις καταστάσεις $|\downarrow, n\rangle$ και $|\uparrow, n\rangle$.

Λύση ασκήσεως 1:

(Α)

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |\uparrow, n\rangle = \hat{a}^\dagger \sqrt{n} |\uparrow, n-1\rangle = \sqrt{n} \sqrt{n} |\uparrow, n\rangle = n |\uparrow, n\rangle,$$

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} |\downarrow, n\rangle = \hat{a}^\dagger \sqrt{n} |\downarrow, n-1\rangle = \sqrt{n} \sqrt{n} |\downarrow, n\rangle = n |\downarrow, n\rangle.$$

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger |\uparrow, n\rangle = \hat{a} \sqrt{n+1} |\uparrow, n+1\rangle = \sqrt{n+1} \sqrt{n+1} |\uparrow, n\rangle = (n+1) |\uparrow, n\rangle,$$

$$\hat{a} \hat{a}^\dagger |\downarrow, n\rangle = \hat{a} \sqrt{n+1} |\downarrow, n+1\rangle = \sqrt{n+1} \sqrt{n+1} |\downarrow, n\rangle = (n+1) |\downarrow, n\rangle.$$

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- |\uparrow, n\rangle = \hat{S}_+ |\downarrow, n\rangle = |\uparrow, n\rangle = 1 |\uparrow, n\rangle, \text{ ιδιοκατάσταση με ιδιοτιμή } 1$$

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- |\downarrow, n\rangle = \hat{S}_+ |0, n\rangle = |0, n\rangle = 0 |\downarrow, n\rangle, \text{ ιδιοκατάσταση με ιδιοτιμή } 0^1.$$

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ |\uparrow, n\rangle = \hat{S}_- |0, n\rangle = |0, n\rangle = 0 |\uparrow, n\rangle, \text{ ιδιοκατάσταση με ιδιοτιμή } 0^2.$$

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ |\downarrow, n\rangle = \hat{S}_- |\uparrow, n\rangle = |\downarrow, n\rangle = 1 |\downarrow, n\rangle, \text{ ιδιοκατάσταση με ιδιοτιμή } 1.$$

$$\hat{S}_+ \hat{a}^\dagger |\uparrow, n\rangle = \sqrt{n+1} |0, n+1\rangle,$$

$$\hat{S}_+ \hat{a}^\dagger |\downarrow, n\rangle = \sqrt{n+1} |\uparrow, n+1\rangle.$$

$$\hat{S}_+ \hat{a} |\uparrow, n\rangle = \sqrt{n} |0, n-1\rangle,$$

$$\hat{S}_+ \hat{a} |\downarrow, n\rangle = \sqrt{n} |\uparrow, n-1\rangle.$$

¹διότι $0 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$.

²διότι $0 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$.

$$\begin{aligned}\hat{S}_- \hat{a}^\dagger |\uparrow, n\rangle &= \sqrt{n+1} |\downarrow, n+1\rangle, \\ \hat{S}_- \hat{a}^\dagger |\downarrow, n\rangle &= \sqrt{n+1} |0, n+1\rangle.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_- \hat{a} |\uparrow, n\rangle &= \sqrt{n} |\downarrow, n-1\rangle, \\ \hat{S}_- \hat{a} |\downarrow, n\rangle &= \sqrt{n} |0, n-1\rangle.\end{aligned}$$

(B)

$$\begin{aligned}\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle_{|\uparrow, n\rangle} &= \langle \uparrow, n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \uparrow, n \rangle = n \langle \uparrow, n | \uparrow, n \rangle = n, \\ \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle_{|\downarrow, n\rangle} &= \langle \downarrow, n | \hat{a}^\dagger \hat{a} | \downarrow, n \rangle = n \langle \downarrow, n | \downarrow, n \rangle = n.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{a} \hat{a}^\dagger \rangle_{|\uparrow, n\rangle} &= \langle \uparrow, n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \uparrow, n \rangle = (n+1) \langle \uparrow, n | \uparrow, n \rangle = n+1, \\ \langle \hat{a} \hat{a}^\dagger \rangle_{|\downarrow, n\rangle} &= \langle \downarrow, n | \hat{a} \hat{a}^\dagger | \downarrow, n \rangle = (n+1) \langle \downarrow, n | \downarrow, n \rangle = n+1.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle_{|\uparrow, n\rangle} &= \langle \uparrow, n | \hat{S}_+ \hat{S}_- | \uparrow, n \rangle = \langle \uparrow, n | \uparrow, n \rangle = 1, \\ \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle_{|\downarrow, n\rangle} &= \langle \downarrow, n | \hat{S}_+ \hat{S}_- | \downarrow, n \rangle = \langle \downarrow, n | 0, n \rangle = 0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle_{|\uparrow, n\rangle} &= \langle \uparrow, n | \hat{S}_- \hat{S}_+ | \uparrow, n \rangle = \langle \uparrow, n | 0, n \rangle = 0, \\ \langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle_{|\downarrow, n\rangle} &= \langle \downarrow, n | \hat{S}_- \hat{S}_+ | \downarrow, n \rangle = \langle \downarrow, n | \downarrow, n \rangle = 1.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_+ \hat{a}^\dagger \rangle_{|\uparrow, n\rangle} &= \langle \uparrow, n | \hat{S}_+ \hat{a}^\dagger | \uparrow, n \rangle = \sqrt{n+1} \langle \uparrow, n | 0, n+1 \rangle = 0, \\ \langle \hat{S}_+ \hat{a}^\dagger \rangle_{|\downarrow, n\rangle} &= \langle \downarrow, n | \hat{S}_+ \hat{a}^\dagger | \downarrow, n \rangle = \sqrt{n+1} \langle \downarrow, n | \uparrow, n+1 \rangle = 0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_+ \hat{a} \rangle_{|\uparrow, n\rangle} &= \langle \uparrow, n | \hat{S}_+ \hat{a} | \uparrow, n \rangle = \sqrt{n} \langle \uparrow, n | 0, n-1 \rangle = 0, \\ \langle \hat{S}_+ \hat{a} \rangle_{|\downarrow, n\rangle} &= \langle \downarrow, n | \hat{S}_+ \hat{a} | \downarrow, n \rangle = \sqrt{n} \langle \downarrow, n | \uparrow, n-1 \rangle = 0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_- \hat{a}^\dagger \rangle_{|\uparrow, n\rangle} &= \langle \uparrow, n | \hat{S}_- \hat{a}^\dagger | \uparrow, n \rangle = \sqrt{n+1} \langle \uparrow, n | \downarrow, n+1 \rangle = 0, \\ \langle \hat{S}_- \hat{a}^\dagger \rangle_{|\downarrow, n\rangle} &= \langle \downarrow, n | \hat{S}_- \hat{a}^\dagger | \downarrow, n \rangle = \sqrt{n+1} \langle \downarrow, n | 0, n+1 \rangle = 0.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle \hat{S}_- \hat{a} \rangle_{|\uparrow, n\rangle} &= \langle \uparrow, n | \hat{S}_- \hat{a} | \uparrow, n \rangle = \sqrt{n} \langle \uparrow, n | \downarrow, n-1 \rangle = 0, \\ \langle \hat{S}_- \hat{a} \rangle_{|\downarrow, n\rangle} &= \langle \downarrow, n | \hat{S}_- \hat{a} | \downarrow, n \rangle = \sqrt{n} \langle \downarrow, n | 0, n-1 \rangle = 0.\end{aligned}$$

♣ Για το ηλεκτρόνιο ισχύουν σχέσεις αντιμεταθέσεως (Εξ. 9.17). Μεταξύ άλλων, είχαμε αποδείξει (Εξ. 8.120) ότι

$$\{\hat{S}_+, \hat{S}_-\} = \hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+ = \hat{\mathbf{I}} \Rightarrow \hat{S}_- \hat{S}_+ = \hat{\mathbf{I}} - \hat{S}_+ \hat{S}_- \Rightarrow \langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle = \langle \hat{\mathbf{I}} \rangle - \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle.$$

Αλλά, αν μια κατάσταση $|\kappa\rangle = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ είναι κανονικοποιημένη, τότε $\langle \hat{\mathbf{I}} \rangle_{|\kappa\rangle} = \langle \kappa | \hat{\mathbf{I}} | \kappa \rangle = \langle \kappa | \kappa \rangle = \begin{bmatrix} a^* & b^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = |a|^2 + |b|^2 = 1$. Άρα, $\langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle = 1 - \langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle$, πράγμα που συμφωνεί με τα παραπάνω.

♣ Για τα φωτόνια ισχύουν σχέσεις μεταθέσεως (Εξ. 9.15). Μεταξύ άλλων, είχαμε αποδείξει ότι $[\hat{a}_m, \hat{a}_\ell^\dagger] = \delta_{m\ell} \Rightarrow [\hat{a}_m, \hat{a}_m^\dagger] = 1 \Rightarrow \hat{a}_m \hat{a}_m^\dagger - \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m = 1 \Rightarrow \hat{a}_m \hat{a}_m^\dagger = 1 + \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \Rightarrow \langle \hat{a}_m \hat{a}_m^\dagger \rangle = 1 + \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m \rangle$, πράγμα που συμφωνεί με τα παραπάνω.

- **Άσκηση 2.** Να αποδειχτούν:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & [\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \\ \text{(II)} \quad & [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger, \\ \text{(III)} \quad & \hat{N}(\hat{a}|n\rangle) = (n-1)(\hat{a}|n\rangle), \\ \text{(IV)} \quad & \hat{N}(\hat{a}^\dagger|n\rangle) = (n+1)(\hat{a}^\dagger|n\rangle), \end{aligned}$$

όπου $\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$, δηλαδή ο τελεστής του αριθμού των φωτονίων, \hat{a}^\dagger ο τελεστής δημιουργίας φωτονίων και \hat{a} ο τελεστής καταστροφής φωτονίων.

- **Άσκηση 3.** Από την Εξ. 8.81, χρησιμοποιώντας τις Εξ. 8.97, 8.98 και 8.99, να αποδειχτεί η Εξ. 8.100.

- **Άσκηση 4.** Θεωρήστε την αναβίβαση και καταβίβαση ηλεκτρονίου μεταξύ των ενεργειακών σταθμών δισταθμικού συστήματος ($\Delta\Sigma$).

(α') Ορίστε τους σπινόρες που περιγράφουν το ηλεκτρόνιο σε κάθε μία από τις δύο στάθμες του $\Delta\Sigma$ καθώς και στο κενό, σε μορφή πινάκων στήλης.

(β') Ορίστε τους τελεστές αναβίβασης και καταβίβασης ηλεκτρονίων, \hat{S}_+ και \hat{S}_- , σε μορφή πινάκων. Δείξτε τι αποτέλεσμα έχει η δράση τους στους σπινόρες.

(γ') Βρείτε τα $\hat{S}_+ + \hat{S}_-$ καθώς και $\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+$.

(δ') Δείξτε ότι η χαμιλτονιανή που περιγράφει το $\Delta\Sigma$ είναι $\hat{H}_{\Delta\Sigma} = E_2 \hat{S}_+ \hat{S}_- + E_1 \hat{S}_- \hat{S}_+$ και δείξτε πώς προκύπτει $H_{\Delta\Sigma} = \hbar\Omega \hat{S}_+ \hat{S}_-$.

(ε') Δείξτε ότι

$$\{\hat{S}_+, \hat{S}_+^\dagger\} = \hat{\mathbf{I}}, \quad \{\hat{S}_-, \hat{S}_-^\dagger\} = \hat{\mathbf{I}}, \quad \{\hat{S}_+, \hat{S}_+\} = \hat{\mathbf{0}}, \quad \{\hat{S}_-, \hat{S}_-\} = \hat{\mathbf{0}}.$$

$\hat{\mathbf{I}}$ είναι ο διαγώνιος μοναδιαίος πίνακας 2×2 και $\hat{\mathbf{0}}$ είναι ο μηδενικός πίνακας 2×2 .

(ς') Ας θυμηθούμε τώρα τους πίνακες Pauli $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Αποδείξτε ότι

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z.$$

κ.ο.κ., κυκλικά.

(ζ') Επίσης, αποδείξτε ότι οι πίνακες Pauli αντιμετατίθενται.

(η') Τέλος δείξτε ότι

$$\begin{aligned} \hat{S}_+ + \hat{S}_- &= \hat{\sigma}_x \\ \hat{S}_+ - \hat{S}_- &= i\hat{\sigma}_y \end{aligned}$$

- **Άσκηση 5.**

(α') Για τη Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings ενός HM τρόπου, να υπολογιστούν τα $\langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$, $\langle \hat{a} \hat{a}^\dagger \rangle$, $\langle \hat{S}_+ \hat{S}_- \rangle$, $\langle \hat{S}_- \hat{S}_+ \rangle$, $\langle \hat{S}_+ \hat{a} \rangle$, $\langle \hat{S}_+ \hat{a}^\dagger \rangle$, $\langle \hat{S}_- \hat{a}^\dagger \rangle$, $\langle \hat{S}_- \hat{a} \rangle$, για την κατάσταση

$$|\psi_A(t)\rangle = \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}} |\downarrow, 2\rangle + \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}} |\uparrow, 1\rangle, \quad (\text{A.47})$$

όπου οι ϕ και θ είναι αυθαίρετες γωνίες.

(β') Βρείτε με ποιο σύστημα διαφορικών εξισώσεων ισοδυναμεί τότε η χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger.

A.9 Ασκήσεις κεφαλαίου 9: Κβαντική προσέγγιση II

Δεν υπάρχουν ασκήσεις σε αυτό το κεφάλαιο.

A.10 Ασκήσεις κεφαλαίου 10: Τελεστής και πίνακας πυκνότητας

- **Άσκηση 1.** Αποδείξτε ότι εάν η Χαμιλτονιανή είναι χρονικώς ανεξάρτητη, η Εξ. 10.31 έχει λύση

$$\hat{\rho}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\rho}(0) e^{i\hat{H}t/\hbar}.$$

- **Άσκηση 2.** Από την Εξ. 10.39 αποδείξτε την Εξ. 10.35.

Λύση ασκήσεως 2: Από την Εξ. 10.39 έχουμε

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\rho}_{nm} &= [\hat{H}, \hat{\rho}]_{nm} = \langle n | \hat{H} \hat{\rho} | m \rangle - \langle n | \hat{\rho} \hat{H} | m \rangle \\ &= \sum_{\ell} \langle n | \hat{H} | \ell \rangle \langle \ell | \hat{\rho} | m \rangle - \sum_{\ell} \langle n | \hat{\rho} | \ell \rangle \langle \ell | \hat{H} | m \rangle \\ &= \sum_{\ell} (H_{n\ell} \rho_{\ell m} - \rho_{n\ell} H_{\ell m}), \end{aligned}$$

που είναι η Εξ. 10.35.

- **Άσκηση 3.** Ορίζοντας τον Πίνακα 10.47, χρησιμοποιώντας τις Εξ. 10.51 και 10.52, και υποθέτοντας ότι $U_{\mathcal{E}21}(t) = U_{\mathcal{E}12}(t)$, αποδείξτε ότι η χρονική εξέλιξη του πίνακα πυκνότητας με μηχανισμούς αποδιεγέρσεως δίνεται από την Εξ. 10.53.

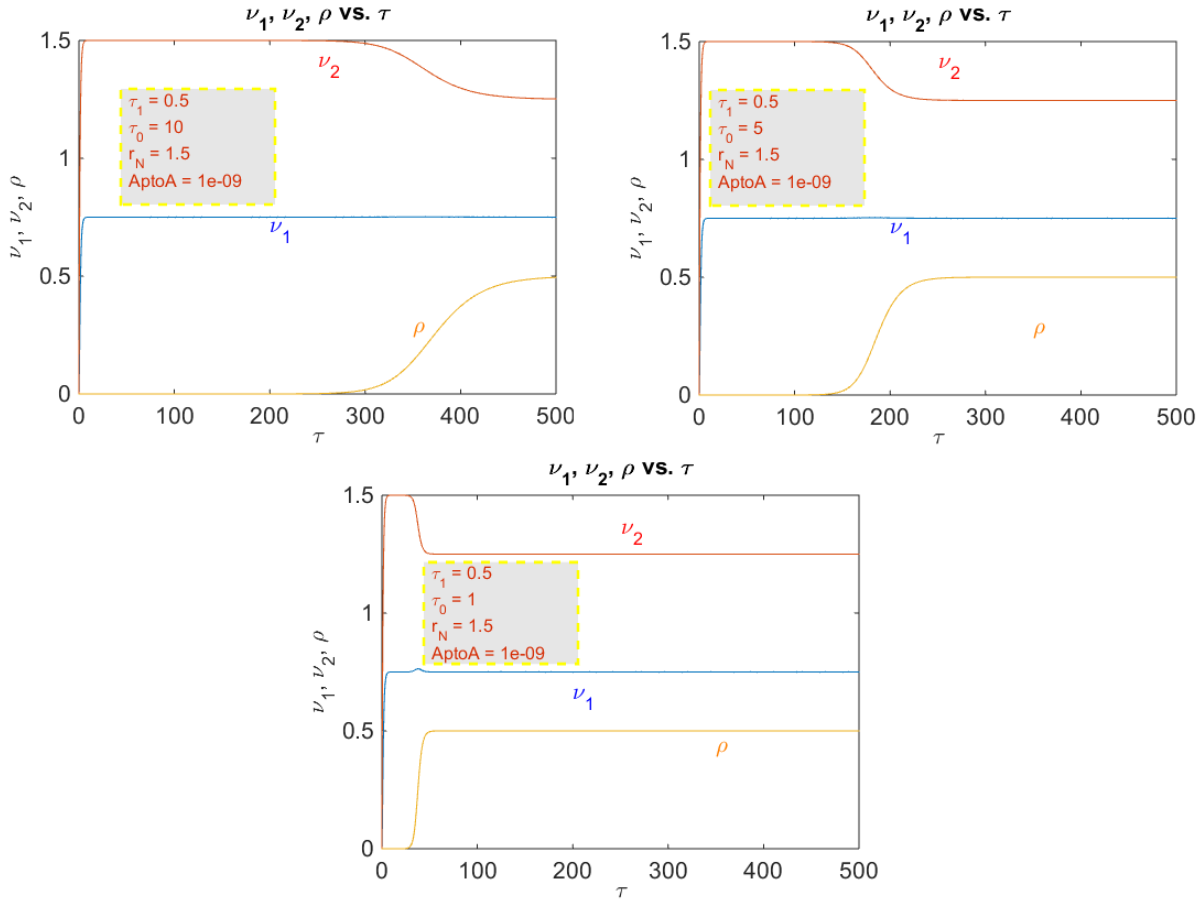
A.11 Ασκήσεις κεφαλαίου 11: Laser

- **Άσκηση 1.** Να γίνουν οι γραφικές παραστάσεις των ν_1 , ν_2 , ρ συναρτήσεων του τ και να εξηγηθούν με τη βοήθεια των Εξ. 11.73, 11.74, 11.75, μεταβάλλοντας το $\tau_1 = 0.25$ ή 0.5 ή 0.75 ή 1.0 ή 1.5 και διατηρώντας τα $r_N = 1.5$, $A'/A = 10^{-9}$, $\tau_0 = 10$.
- **Άσκηση 2.** Θεωρήστε τις διαφορικές εξισώσεις ρυθμών laser στην αδιάστατη μορφή

$$\begin{aligned} \frac{d\nu_1}{d\tau} &= \nu_2 + \rho(\nu_2 - \nu_1) - \frac{\nu_1}{\tau_1}, \\ \frac{d\nu_2}{d\tau} &= r_N + \rho(\nu_1 - \nu_2) - \nu_2, \\ \frac{d\rho}{d\tau} &= -\frac{\rho}{\tau_0} + \left\{ \frac{A'}{A} \nu_2 + \rho(\nu_2 - \nu_1) \right\} \frac{1}{\tau_0(1 - \tau_1)}. \end{aligned}$$

Αποδείξτε ότι εάν $\frac{A'}{A} \ll 1$, τότε στη στάσιμη κατάσταση ισχύουν οι εξισώσεις

$$\begin{aligned} \nu_1 &= \tau_1 r_N, \quad \forall r_N \\ \nu_2 &= \begin{cases} r_N, & \forall r_N < 1 \\ \tau_1 r_N + (1 - \tau_1), & \forall r_N > 1 \end{cases} \\ \rho &= \begin{cases} 0, & \forall r_N < 1 \\ r_N - 1, & \forall r_N > 1 \end{cases} \end{aligned}$$



Εικόνα Α.1: Η λύση των Εξ. 11.73, 11.74, 11.75, αν μεταβάλλουμε το $\tau_0 = 10$ ή 5.0 ή 1.0 , διατηρώντας $\tau_1 = 0.5$, $r_N = 1.5$, $A'/A = 10^{-9}$. Στην εικόνα εμφανίζεται ρ , αλλά πρόκειται για το αδιάστατο ρ της Εξ. 11.75.

- **Άσκηση 3.** Στην Εικόνα Α.1 τα σχήματα παριστάνουν τη λύση των Εξ. 11.73, 11.74, 11.75, μεταβάλλοντας το $\tau_0 = 10$ ή 5.0 ή 1.0 και διατηρώντας $\tau_1 = 0.5$, $r_N = 1.5$, $A'/A = 10^{-9}$.
 (α') Πόσος είναι ο λόγος των χρόνων ζωής των σταθμών 1 και 2;
 (β') Γιατί υπάρχει διαφορά στον απαιτούμενο χρόνο, ώστε η ρ να γίνει αισθητή;
- **Άσκηση 4.** Να γίνουν οι γραφικές παραστάσεις των ν_1, ν_2, ρ συναρτήσεσι του τ και να εξηγηθούν με τη βοήθεια των Εξ. 11.73, 11.74, 11.75, αν μεταβάλλουμε το $A'/A = 10^{-9}$ ή 10^{-4} ή 10^{-1} διατηρώντας τα $\tau_1 = 0.5$, $\tau_0 = 10$, $r_N = 1.5$.
- **Άσκηση 5.** Θεωρήστε τις διαφορικές εξισώσεις ρυθμών LASER στην αδιάστατη μορφή

$$\frac{d\nu_1}{d\tau} = \nu_2 + \rho(\nu_2 - \nu_1) - \frac{\nu_1}{\tau_1}, \quad (\text{A.48})$$

$$\frac{d\nu_2}{d\tau} = r_N + \rho(\nu_1 - \nu_2) - \nu_2, \quad (\text{A.49})$$

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -\frac{\rho}{\tau_0} + \left\{ \frac{A'}{A} \nu_2 + \rho(\nu_2 - \nu_1) \right\} \frac{1}{\tau_0(1 - \tau_1)}. \quad (\text{A.50})$$

Στη στάσιμη κατάσταση, αγνοώντας το $\frac{A'}{A} \ll 1$, ισχύουν οι εξισώσεις

$$\nu_1 = \tau_1 r_N, \quad \forall r_N \quad (\text{A.51})$$

$$v_2 = \begin{cases} r_N, & \forall r_N \leq 1 \\ \tau_1 r_N + (1 - \tau_1), & \forall r_N \geq 1 \end{cases} \quad (\text{A.52})$$

$$\rho = \begin{cases} 0, & \forall r_N \leq 1 \\ r_N - 1, & \forall r_N \geq 1 \end{cases} \quad (\text{A.53})$$

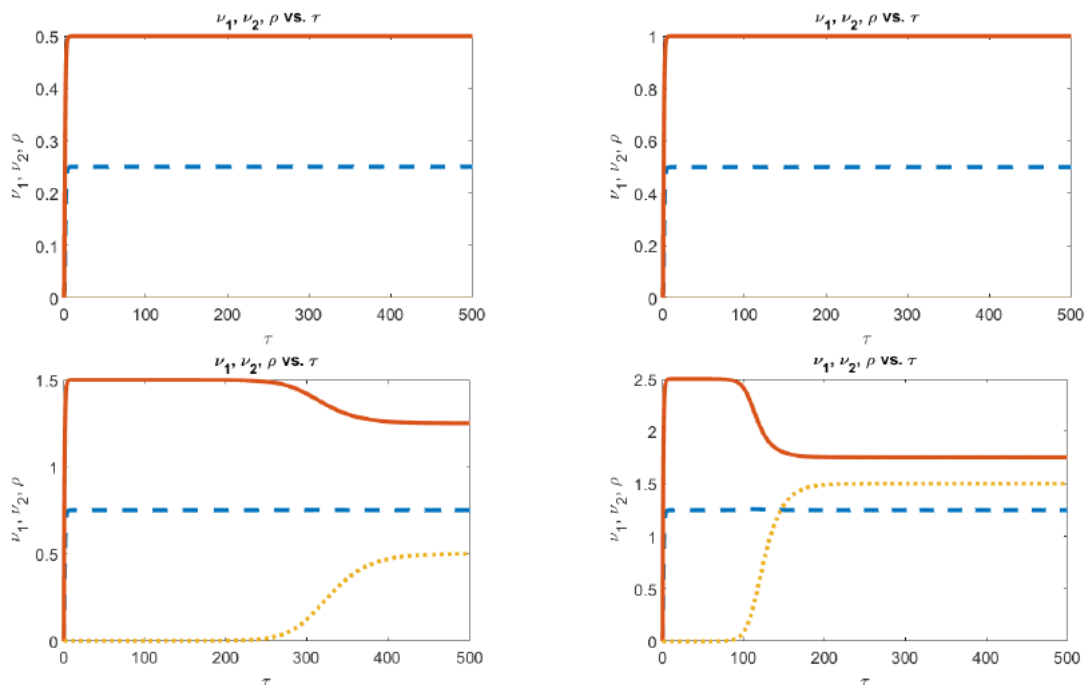
Η αριθμητική επίλυση των Εξ. (A.48), (A.49), (A.50) φαίνεται στην Εικόνα A.2, όπου μεταβάλλουμε μόνο μία από τις παραμέτρους r_N , τ_1 , τ_0 , $\frac{A'}{A}$.

(α') Πόσος είναι ο λόγος των χρόνων ζωής των σταθμών, $\frac{t_1}{t_2}$;

(β') Ποια παράμετρος μεταβάλλεται και ποια είναι η τιμή της μεταβαλλομένης παραμέτρου σε κάθε εικόνα;

(γ') Γιατί υπάρχει διαφορά στον απαιτούμενο χρόνο, ώστε να γίνει η ρ αισθητή στις κάτω εικόνες;

(δ') Γιατί πριν αρχίσει να γίνεται η ρ αισθητή, σε όλες τις εικόνες, $\frac{v_2}{v_1} = 2$;



Εικόνα A.2: Αλλάζουμε μία παράμετρο μόνο και παρακολουθούμε τη χρονική εξέλιξη των διαφορικών εξισώσεων ρυθμών.

A.12 Ασκήσεις κεφαλαίου 12: Διάφορα

Δεν υπάρχουν ασκήσεις σε αυτό το κεφάλαιο.

Βιβλιογραφία

- [1] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol και H. Muehlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Thun und Frankfurt am Main: Verlag Harri Deutsch, 2001. ISBN: 3817120052.
- [2] Γ. Ι. Παπαδόπουλος και Φ. Λ. Παλληκάρη. *Κβαντική Οπτική και Lasers (εγχειρίδιο μαθήματος)*. Αθήνα: Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών, 2009.
- [3] G. Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. EDP Sciences, 1992. ISBN: 9780470217085.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

ΒΟΗΘΗΤΙΚΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΚΑΙ ΛΕΠΤΟΜΕΡΕΙΕΣ ΠΡΑΞΕΩΝ

Β.1 Αριθμητική πρόοδος

Υπενθυμίζεται ο ορισμός της αριθμητικής προόδου (a_n) και μερικές σχετικές σχέσεις.

$$\begin{aligned} a_{n+1} - a_n &= \omega, \quad n = (0), 1, 2, 3, \dots & \omega &: \text{διαφορά} \\ a_n &= a_1 + (n-1)\omega & & \text{αναδρομικός τύπος} \\ \beta &= \frac{\alpha + \gamma}{2} & \beta &: \text{ο αριθμητικός μέσος} \\ S_n &= \frac{n}{2}(a_1 + a_n) & & \text{άθροισμα } n \text{ πρώτων όρων} \end{aligned} \tag{B.1}$$

Β.2 Γεωμετρική πρόοδος

Υπενθυμίζεται ο ορισμός της γεωμετρικής προόδου (a_n) και μερικές σχετικές σχέσεις.

$$\begin{aligned} \frac{a_{n+1}}{a_n} &= \lambda \neq 0, \quad n = (0), 1, 2, 3, \dots & \lambda &: \text{λόγος} \\ a_n &= a_1 \lambda^{n-1} & & \text{αναδρομικός τύπος} \\ \frac{\alpha}{\beta} &= \frac{\beta}{\gamma} \Leftrightarrow \beta^2 = \alpha\gamma & \beta &: \text{γεωμετρικός μέσος} \\ S_n &= \begin{cases} a_1 \frac{\lambda^n - 1}{\lambda - 1}, & \lambda \neq 1 \\ a_1 n, & \lambda = 1 \end{cases} & & \text{άθροισμα } n \text{ πρώτων όρων} \\ S_\infty &= \frac{a_1}{1 - \lambda} & & \text{άθροισμα απείρων όρων } (|\lambda| < 1) \end{aligned} \tag{B.2}$$

B.3 Μια αναπαράσταση της συναρτήσεως δ

Θα δείξουμε ότι η συνάρτηση $\delta_a(x) = \frac{1}{\pi|a|} \frac{\sin^2(ax)}{x^2}$, όπου $a \neq 0$, είναι μια προσέγγιση της $\delta(x)$. Επί παραδείγματι:

$$\begin{aligned} \star \quad \lim_{x \rightarrow 0} \delta_a(x) &= \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{\pi|a|} \frac{\sin^2(ax)}{a^2 x^2} a^2 = \frac{|a|}{\pi} \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin^2(ax)}{a^2 x^2} = \frac{|a|}{\pi} \left(\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin ax}{ax} \right)^2 \\ &= \frac{|a|}{\pi} \left(\lim_{ax \rightarrow 0} \frac{\sin ax}{ax} \right)^2 = \frac{|a|}{\pi} 1^2 = \frac{|a|}{\pi} \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\boxed{\lim_{x \rightarrow 0} \delta_a(x) = \frac{|a|}{\pi} \Rightarrow \lim_{a \rightarrow \infty} \left(\lim_{x \rightarrow 0} \delta_a(x) \right) = \infty}$$

$$\star \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_a(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\pi|a|} \frac{\sin^2 ax}{x^2} dx = \frac{1}{\pi|a|} \pi|a| = 1 \Rightarrow$$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_a(x) dx = 1}$$

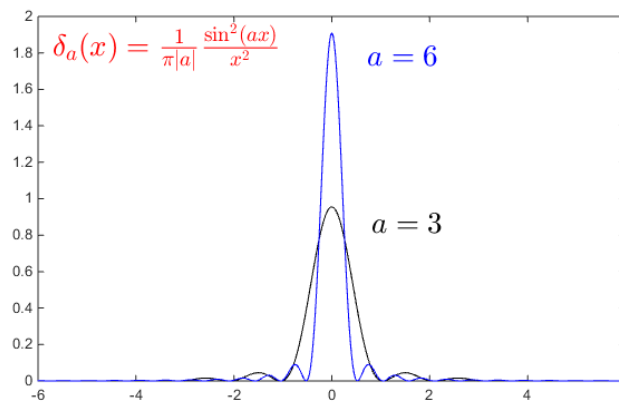
Μόλις χρησιμοποιήσαμε το ορισμένο ολοκλήρωμα [1]

$$\int_0^{\infty} \frac{\sin^2 ax}{x^2} dx = \frac{\pi}{2} |a|,$$

με $a \neq 0$. Δηλαδή, η συνάρτηση $\delta_a(x)$, στο όριο $a \rightarrow \infty$, παριστά την $\delta(x)$, ήτοι

$$\boxed{\lim_{a \rightarrow \infty} \delta_a(x) = \delta(x)}$$

Στην Εικόνα B.1 φαίνεται η $\delta_a(x)$ για $a = 3, 6$.



Εικόνα B.1: Η $\delta_a(x)$ για $a = 3, 6$.

Οπότε, εντελώς κατά προσέγγιση, θα μπορούσαμε να γράψουμε

$$\boxed{\delta(x) \sim \frac{1}{\pi|a|} \frac{\sin^2(ax)}{x^2}} \quad (\text{B.3})$$

Ας παίξουμε λίγο με τη συνάρτηση με προτασιακό τύπο

$$f(x) \equiv \frac{\sin^2 x}{x^2}. \tag{B.4}$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin^2 x}{x^2} = \left(\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} \right)^2 = \left(\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos x}{1} \right)^2 = 1, \tag{B.5}$$

δηλαδή, για $x = 0$, έχουμε ολικό μέγιστο με τιμή 1.

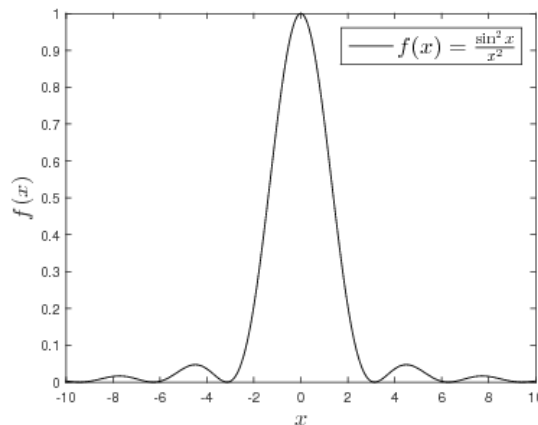
$$\left. \begin{matrix} f(x) = 0 \\ x \neq 0 \end{matrix} \right\} \Rightarrow \sin x = 0 \Rightarrow \text{για } x = n\pi, n \in \mathbb{Z}^*, \text{ έχουμε ολικά ελάχιστα με τιμή } 0. \tag{B.6}$$

Ας ψάξουμε για τοπικά μέγιστα και ελάχιστα

$$f'(x) = \frac{2 \sin x \cos x x^2 - \sin^2 x 2x}{x^4} \Rightarrow f'(x) = 0 \Rightarrow 2x \sin x (x \cos x - \sin x) = 0 \Rightarrow$$

$$\underbrace{x = 0}_{\text{ολικό μέγιστο}} \quad \text{ή} \quad \underbrace{\sin x = 0}_{\substack{x = n\pi, n \in \mathbb{Z}^* \\ \text{ολικά ελάχιστα}}} \quad \text{ή} \quad \underbrace{x = \tan x}_{\substack{x \approx \pm 4.49, \pm 7.72, \dots \\ \text{η διερεύνηση οδηγεί σε τοπικά μέγιστα}}}$$

Η γραφική παράσταση της $f(x)$ παρουσιάζεται στην Εικόνα B.2.



Εικόνα B.2: $f(x) = \frac{\sin^2 x}{x^2}$.

B.4 Μερικές τριγωνομετρικές σχέσεις

Θα αποδείξουμε τη σχέση που σημειώνεται με ★ στην Ενότητα 5.5, δηλαδή την

$$e^{ix} - 1 = 2i \sin\left(\frac{x}{2}\right) e^{i\frac{x}{2}}.$$

$$\begin{aligned} \cos x + i \sin x - 1 &= 2i \sin\left(\frac{x}{2}\right) \cos\left(\frac{x}{2}\right) + 2i \sin\left(\frac{x}{2}\right) i \sin\left(\frac{x}{2}\right) \Leftrightarrow \\ \cos x + i \sin x - 1 &= i \sin x - 2 \sin^2\left(\frac{x}{2}\right) \Leftrightarrow \\ \cos x - \cos^2\left(\frac{x}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{x}{2}\right) &= -2 \sin^2\left(\frac{x}{2}\right) \Leftrightarrow \\ \cos x - \cos^2\left(\frac{x}{2}\right) &= -\sin^2\left(\frac{x}{2}\right) \Leftrightarrow \\ \cos x &= \cos^2\left(\frac{x}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{x}{2}\right), \end{aligned}$$

που ισχύει, διότι

$$\cos(a \pm \beta) = \cos a \cos \beta \mp \sin a \sin \beta.$$

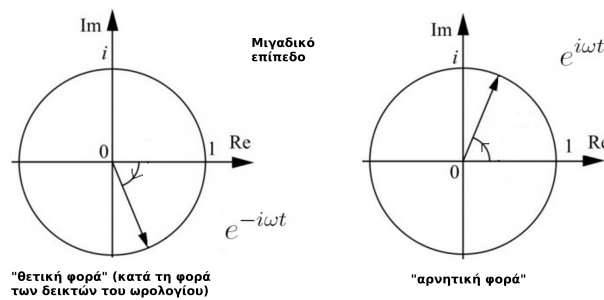
Κατ' αντιστοιχία παρατίθεται και η

$$\sin(a \pm \beta) = \sin a \cos \beta \pm \sin \beta \cos a.$$

B.5 Περιστρεφόμενα κύματα

Έστω ηλεκτρικό πεδίο της μορφής $\vec{\mathcal{E}}(t) = \mathcal{E}_0 \hat{z} \cos \omega t$. Μερικές φορές είναι βολικό να το αποσυνθέσουμε στη θετικώς περιστρεφόμενη και στην αρνητικώς περιστρεφόμενη του συνιστώσα, $\vec{\mathcal{E}}(t)^{(+)}$ και $\vec{\mathcal{E}}(t)^{-}$, αντιστοίχως. Δηλαδή,

$$\vec{\mathcal{E}}(t) = \frac{\mathcal{E}_0}{2} \hat{z} (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) = \frac{\mathcal{E}_0}{2} \hat{z} e^{-i\omega t} + \frac{\mathcal{E}_0}{2} \hat{z} e^{i\omega t} := \vec{\mathcal{E}}(t)^{(+)} + \vec{\mathcal{E}}(t)^{-}.$$



Εικόνα B.3: Περιστρεφόμενα κύματα (Rotating Waves).

B.6 Στοιχεία πίνακα τελεστή

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{M} | \phi \rangle &= \int dx'' \int dx' \langle \psi | x'' \rangle \langle x'' | \hat{M} | x' \rangle \langle x' | \phi \rangle = \int dx'' \int dx' \psi^*(x'') \langle x'' | \hat{M} | x' \rangle \phi(x') \\ \left. \begin{aligned} \langle x'' | \hat{x} | x' \rangle &= \langle x'' | x' | x' \rangle = x' \langle x'' | x' \rangle = x' \delta(x'' - x') = x'' \delta(x'' - x') \\ \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x'' - x') \end{aligned} \right\} \Rightarrow \\ &\text{αποδεικνύεται παρακάτω} \nabla \end{aligned}$$

⇒ αναπτύσσοντας σε δυνάμεις του \hat{x} και του \hat{p}

$$\langle x'' | \hat{M}(\hat{x}, \hat{p}) | x' \rangle = M\left(x'', -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right) \delta(x'' - x') \quad 1\Delta$$

$$\langle \vec{r}'' | \hat{M}(\hat{\vec{r}}, \hat{\vec{p}}) | \vec{r}' \rangle = M(\vec{r}'', -i\hbar \vec{\nabla}'') \delta(\vec{r}'' - \vec{r}') \quad 3\Delta$$

οπότε, π.χ.

$$\begin{aligned} \langle \Phi_\ell | \hat{M} | \Phi_k \rangle &= \int d^3 r' \int d^3 r \langle \Phi_\ell | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{M} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Phi_k \rangle \\ &= \int d^3 r' \int d^3 r \Phi_\ell^*(\vec{r}') \hat{M}(\vec{r}', -i\hbar \vec{\nabla}') \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) \\ &= \int d^3 r \Phi_\ell^*(\vec{r}) \hat{M}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \Phi_k(\vec{r}), \end{aligned}$$

η οποία είναι η Εξ. 5.32.

$$\begin{aligned} [\hat{x}, \hat{p}] &= i\hbar \Leftrightarrow \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x} = i\hbar \Rightarrow \\ \langle x'' | \hat{x}\hat{p} | x' \rangle - \langle x'' | \hat{p}\hat{x} | x' \rangle &= i\hbar \langle x'' | x' \rangle \Rightarrow \\ \langle x'' | x'' \hat{p} | x' \rangle - \langle x'' | \hat{p} x' | x' \rangle &= i\hbar \delta(x'' - x') \Rightarrow \\ (x'' - x') \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle &= i\hbar \delta(x'' - x') \Rightarrow \\ \underbrace{\delta(x'' - x')}_{\text{αποδεικνύεται παρακάτω} \blacktriangledown} &= -(x'' - x') \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x'' - x') \Rightarrow \\ \cancel{(x'' - x')} \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle &= -i\hbar \cancel{(x'' - x')} \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x'' - x') \Rightarrow \\ \langle x'' | \hat{p} | x' \rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x'' - x'). \end{aligned}$$

Ομοίως, για την Εξ. 10.2, έχουμε

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle = \int d^3 r' \int d^3 r \langle \Psi(t) | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \hat{A} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle \\ &= \int d^3 r' \int d^3 r \Psi^*(\vec{r}', t) \hat{A}(\vec{r}', -i\hbar \vec{\nabla}') \delta(\vec{r}' - \vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) \\ &= \int d^3 r \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \Psi(\vec{r}, t) \\ &= \int d^3 r \sum_{k'} c_{k'}^*(t) \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \sum_k c_k(t) \Phi_k(\vec{r}) \\ &= \sum_{k'} c_{k'}^*(t) \sum_k c_k(t) \int d^3 r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \Phi_k(\vec{r}) \\ &= \sum_{k, k'} c_k(t) c_{k'}^*(t) A_{k'k}, \end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την Εξ. 10.1.

Ομοίως, για την Εξ. 10.7, έχουμε

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{A} \rangle_i &= \langle \Psi_i(t) | \hat{A} | \Psi_i(t) \rangle = \int d^3 r \int d^3 r' \langle \Psi_i(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \hat{A} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \Psi_i(t) \rangle \\
 &= \int d^3 r \int d^3 r' \langle \Psi_i(t) | \vec{r} \rangle \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \langle \vec{r}' | \Psi_i(t) \rangle \\
 &= \int d^3 r \langle \Psi_i(t) | \vec{r} \rangle \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \langle \vec{r} | \Psi_i(t) \rangle \\
 &= \int d^3 r \Psi_i^*(\vec{r}, t) \hat{A}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \Psi_i(\vec{r}, t) \\
 &\text{ή απλούστερα} \\
 &= \int d^3 r \Psi_i^*(\vec{r}, t) \hat{A} \Psi_i(\vec{r}, t).
 \end{aligned}$$

▼ Ας κάνουμε την απόδειξη που αναφέραμε παραπάνω. Θα αποδείξουμε πρώτα ότι

$$\boxed{x\delta'(x) = -\delta(x)} \quad (\text{B.7})$$

Προς τούτο, θα ολοκληρώσουμε το αριστερό και δεξιό μέλος, αφού το πολλαπλασιάσουμε με μια συνάρτηση $f(x)$.

Αριστερό μέλος:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{+\infty} x\delta'(x)f(x)dx &= \left[x\delta(x)f(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)(f(x) - xf'(x))dx = \\
 &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)xf'(x)dx = -f(0) + 0 \cdot f'(0) = -f(0).
 \end{aligned}$$

Δεξιό μέλος:

$$- \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)f(x)dx = -f(0).$$

Συνδυάζοντας το αριστερό και το δεξιό μέλος, προκύπτει η ζητούμενη ιδιότητα B.7. Οπότε,

$$\begin{aligned}
 x\delta'(x) = -\delta(x) \quad \text{ή} \quad x \frac{\partial}{\partial x} \delta(x) = -\delta(x) \quad \text{ή} \quad x'' \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x'') = -\delta(x'') \\
 (x'' - x') \frac{\partial}{\partial x''} \delta(x'' - x') = -\delta(x'' - x').
 \end{aligned}$$

B.7 Λύση Συστήματος Διαφορικών Εξισώσεων με τη μέθοδο των Ιδιοτιμών

Στα Κεφάλαια 5 και 8 συναντάμε κάποια συστήματα διαφορικών εξισώσεων. Επί παραδείγματι, το Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 8.190 μπορεί, παραλείποντας για απλότητα τον δείκτη m που δηλώνει τον ΗΜ τρόπο, να γραφεί ως

$$\begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = (-i) \begin{pmatrix} n\omega & g\sqrt{n} \\ g\sqrt{n} & \Omega + (n-1)\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.8})$$

είναι δηλαδή της μορφής

$$\dot{\vec{x}}(t) = \vec{A} \vec{x}(t) \quad (\text{B.9})$$

με

$$\dot{\vec{x}}(t) = \begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \dot{c}_2(t) \end{pmatrix}, \quad \vec{x}(t) = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}, \quad \overleftrightarrow{A} = (-i) \begin{pmatrix} n\omega & g\sqrt{n} \\ g\sqrt{n} & \Omega + (n-1)\omega \end{pmatrix}. \quad (\text{B.10})$$

Ομοίως, το Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 8.208 μπορεί, παραλείποντας για απλότητα τον δείκτη m που δηλώνει τον ΗΜ τρόπο, να γραφεί ως

$$\begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = (-i) \begin{pmatrix} (n+1)\omega & g\sqrt{n+1} \\ g\sqrt{n+1} & \Omega + n\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{B.11})$$

είναι δηλαδή της μορφής

$$\dot{\vec{x}}(t) = \overleftrightarrow{A} \vec{x}(t) \quad (\text{B.12})$$

με

$$\dot{\vec{x}}(t) = \begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \dot{c}_2(t) \end{pmatrix}, \quad \vec{x}(t) = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}, \quad \overleftrightarrow{A} = (-i) \begin{pmatrix} (n+1)\omega & g\sqrt{n+1} \\ g\sqrt{n+1} & \Omega + n\omega \end{pmatrix}. \quad (\text{B.13})$$

Επομένως τα προβλήματα αυτά μπορούν να λυθούν με τη μέθοδο των ιδιοτιμών, όπως έγινε και στο Κεφάλαιο 5.

Βιβλιογραφία

- [1] I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew, G. Musiol και H. Muehlig. *Taschenbuch der Mathematik*. Thun und Frankfurt am Main: Verlag Harri Deutsch, 2001. ISBN: 3817120052.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ

ΠΡΟΓΡΑΜΜΑΤΑ MATLAB

Γ.1 fornu0ofT.m

Κώδικας Γ.1: Ο κώδικας matlab για την κατασκευή της Εικόνας 2.14, fornu0ofT.m.

```
1 tic
2 xl=-5;
3 xr=+5;
4 step=(xr-xl)/100;
5 for i=1:101
6 x(i)=xl+step*(i-1);
7 f(i)=3*(exp(x(i))-1) - x(i)*exp(x(i));
8 end
9 createfigurefornu0ofT(x,f);
10 toc
```

Κώδικας Γ.2: Η συνοδευτική συνάρτηση createfigurefornu0ofT.m του Κώδικα Γ.1.

```
1 function createfigurefornu0ofT(X1, Y1)
2 %CREATEFIGURE2(X1, Y1)
3 % X1: vector of x data
4 % Y1: vector of y data
5
6 % Create figure
7 figure1 = figure;
8
9 % Create axes
10 axes1 = axes('Parent',figure1,'YGrid','on','XGrid','on');
```

```

11      % Uncomment the following line to preserve the Y-limits of the
           axes
12      % ylim(axes1,[-5 5]);
13      box(axes1, 'on');
14      hold(axes1, 'on');
15
16      % Create plot
17      plot(X1,Y1, 'DisplayName', 'f(x)')
18      axis([-5,5, -5,5])
19      title('$$f(x)=3(e^x-1)-xe^x$$', 'interpreter', 'Latex')
20      xlabel('$$x$$', 'interpreter', 'Latex')
21      ylabel('$$f(x)$$', 'interpreter', 'Latex')
22
23      % Create Legend
24      legend1 = legend(axes1, 'show');
25      set(legend1, 'FontSize', 9);

```

Γ.2 forlambda0ofT.m

Κώδικας Γ.3: Ο κώδικας matlab για την κατασκευή της Εικόνας 2.15, forlambda0ofT.m.

```

1      tic
2      xl=-10;
3      xr=+10;
4      step=(xr-xl)/100;
5      for i=1:101
6          x(i)=xl+step*(i-1);
7          f(i)=5*(exp(x(i))-1) - x(i)*exp(x(i));
8      end
9      createfigureforlambda0ofT(x,f);
10     toc

```

Κώδικας Γ.4: Η συνοδευτική συνάρτηση createfigureforlambda0ofT.m του Κώδικα Γ.3.

```

1      function createfigurefornu0ofT(X1, Y1)
2          %CREATEFIGURE2(X1, Y1)
3          % X1: vector of x data
4          % Y1: vector of y data
5
6          % Create figure
7          figure1 = figure;
8
9          % Create axes
10         axes1 = axes('Parent',figure1, 'YGrid', 'on', 'XGrid', 'on');
11         % Uncomment the following line to preserve the Y-limits of the
           axes
12         % ylim(axes1,[-5 5]);

```



```

13     box(axes1, 'on');
14     hold(axes1, 'on');
15
16     % Create plot
17     plot(X1, Y1, 'DisplayName', 'f(\psi)')
18     axis([-10, 10, -10, 50])
19     title('$$f(\psi)=5(e^\psi-1)-\psi e^\psi$$', 'interpreter', 'Latex
20           ')
21     xlabel('$$\psi$$', 'interpreter', 'Latex')
22     ylabel('$$f(\psi)$$', 'interpreter', 'Latex')
23
24     % Create Legend
25     legend1 = legend(axes1, 'show');
26     set(legend1, 'FontSize', 9);

```

Γ.3 WienDisplacementANDPlanckofLambda.m

Κώδικας Γ.5: Ο κώδικας matlab για την κατασκευή της Εικόνας 2.16, WienDisplacementANDPlanckofLambda.m.

```

1     clear all
2     clc
3     tic
4     xl=0; % nm
5     xr=8000; % nm
6     T = 1595 % K black body temperature
7     nop=2001;
8     step=(xr-xl)/(nop-1); % nm
9     for i=1:nop;
10    x(i)=xl+step*(i-1); % nm
11    x(i)=x(i)*1e-9;
12    c1 = 499.24825e-26; %8\pi hc = 499.24825322511997970335670474955
13           x 10^{-26} J m
14    c2 = 14.38777e-3; %hc/k_B = 14.387769599838156234952726573188 x
15           10^{-3} m K
16    rho(i) = c1/(x(i)^5);
17    rho(i)=rho(i)/(exp(c2/(x(i)*T))-1);
18    x(i)=x(i)*1e9;
19    end
20    %plot(x,rho); figure(gcf);
21
22    Lambda0= 2897772/T % nm (Wien Displacement Law)
23    createfigureforPlanckLambdaofT(x, rho, T, Lambda0);
24    toc

```

Κώδικας Γ.6: Η συνοδευτική συνάρτηση `createfigureforPlanckLambdaofT.m` του Κώδικα Γ.5.

```

1  function createfigureforPlanckLambdaofT(X1, Y1, T, Lambda0)
2  %CREATEFIGURE2(X1, Y1)
3  % X1: vector of x data
4  % Y1: vector of y data
5
6
7  % Create figure
8  figure1 = figure;
9
10 % Create axes
11 axes1 = axes('Parent',figure1,'YGrid','on','XGrid','on');
12 %% Uncomment to preserve the Y-limits of the axes
13 % ylim(axes1,[-5 5]);
14 box(axes1,'on');
15 hold(axes1,'on');
16
17 % Create plot
18 plot(X1,Y1,'DisplayName','\rho(\Lambda,T)');
19 axis([0,8000,0,2000])
20 %title('Planck`s Law in terms of Wavelength and Temperature')
21 title(['\rho(\Lambda,T) for T = ', num2str(T), ' K', ' \
22         \Lambda_0=', num2str(Lambda0), ' nm'])
23 xlabel('\Lambda(nm)')
24 ylabel('\rho(J/m^4)')
25
26 % Create Legend
27 legend1 = legend(axes1,'show');
set(legend1,'FontSize',9);

```

Γ.4 WienDisplacementANDPlanckofLambdaMultipleT.m

Κώδικας Γ.7: Ο κώδικας `matlab` για την κατασκευή της Εικόνας 2.17, `WienDisplacementANDPlanckofLambdaMultipleT.m`.

```

1  clear all
2  clc
3  tic
4  xl=0; % nm
5  xr=5000; % nm
6  nop=2001;
7  step=(xr-xl)/(nop-1); % nm
8  for j=1:5
9  T(j)=3000+j*500 % K black body temperature
10 lambda0(j)= 2897772/T(j) % nm (Wien Displacement Law)
11 for i=1:nop;

```

```

12     x(i)=xl+step*(i-1);    % nm
13     x(i)=x(i)*1e-9;
14     c1 = 499.24825e-26; %8\pi hc = 499.24825322511997970335670474955
        x 10^{-26} J m
15     c2 = 14.38777e-3;    %hc/k_B = 14.387769599838156234952726573188 x
        10^{-3} m K
16     rho(i,j) = c1/(x(i)^5);
17     rho(i,j)=rho(i,j)/(exp(c2/(x(i)*T(j)))-1);
18     x(i)=x(i)*1e9;
19     end
20     end
21
22     colorspec = {[1 0 0]; [1 0.5 0]; [0 1 0]; [0 0 1]; [0.4 0 1]};
23     figure(1);
24     title({'\rho(\Lambda,T)', [' \Lambda_0=', num2str(Lambda0,4), ' nm'
        ]})
25     xlabel('\Lambda(nm)')
26     ylabel('\rho(J/m^4)')
27     hold on
28     for i = 1:5
29         plot(x,rho(:, i), 'Color', colorspec{i})
30     end
31     %Legend(num2str(T(:)))
32     Legend([num2str(T(1)), ' K'], [num2str(T(2)), ' K'], [num2str(T(3))
        , ' K'], [num2str(T(4)), ' K'], [num2str(T(5)), ' K'])
33     hold off
34
35     toc

```

Γ.5 Oscillations.m

Κώδικας Γ.8: Ο κώδικας matlab *Oscillations.m* για την κατασκευή της Εικόνας 5.8, η οποία περιγράφει ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό ($\Delta = 0$) και εκτός συντονισμού ($\Delta \neq 0$).

```

1     clear all
2     clc
3     tic
4     OmegaR=1
5     Delta=3*OmegaR
6     Lambda = (sqrt(OmegaR^2+Delta^2))/2
7     TRonR =(2*pi)/(OmegaR)
8     TRoffR=(2*pi)/sqrt(OmegaR^2+Delta^2)
9     pi/Lambda - TRoffR
10    nop=501;
11    tl= 0;
12    tr= TRonR;

```

```

13     step=(tr-tl)/(nop-1); % nm
14     for i=1:nop;
15         t(i)=tl+step*(i-1);
16         P1onR(i)=cos((OmegaR/2)*t(i))^2;
17         P2onR(i)=sin((OmegaR/2)*t(i))^2;
18         P1offR(i)= 1 + (OmegaR^2*(cos(2*Lambda*t(i))-1))/(2*(OmegaR^2+
           Delta^2));
19         P2offR(i)=(OmegaR^2)/(OmegaR^2+Delta^2)*sin(Lambda*t(i))^2;
20     end
21     %plot(x,c,'k',x,y1,'b',x,y2,'r'); figure(gcf);
22     plot(t,P1onR,'k',t,P2onR,'b','LineWidth',2,'LineStyle','-'); hold
           on;
23     %Legend('P_1(t)','P_2(t)')
24     plot(t,P1offR,'r',t,P2offR,'g','LineWidth',2,'LineStyle','--')
25     h = legend('$P_1(t)$ on Resonance','$P_2(t)$ on Resonance','$P_1(
           t)$ off Resonance','$P_2(t)$ off Resonance');
26     set(h,'Interpreter','latex','FontSize',10)
27     title({'Oscillations in a two-level system';'(On Resonance and
           Off Resonance)'}))
28     xlabel('$t$(s)','Interpreter','latex','FontSize',16)
29     ylabel('probabilities','FontSize',16)
30     annotation('textbox',...
31     [0.7 0.45 0.17 0.15],...
32     'String',{'plotting with',['\Omega_R = ' num2str(OmegaR), ' s^{-1}
           '],['\Delta = ' num2str(Delta), ' s^{-1}']},...
33     'FontSize',10,...
34     'FontName','Arial',...
35     'LineStyle','--',...
36     'EdgeColor',[1 1 0],...
37     'LineWidth',2,...
38     'BackgroundColor',[0.9 0.9 0.9],...
39     'Color',[0.84 0.16 0]);
40
41     hold off;
42     toc

```

Γ.6 N1N2DNRho.m

Κώδικας Γ.9: Ο κώδικας `matlab N1N2DNRho.m` δημιουργεί μια αναπαράσταση των Εξ. 11.47, 11.48, 11.49, 11.51, οι οποίες περιγράφουν τους πληθυσμούς των σταθμών, την πυκνότητα ΗΜ ακτινοβολίας και την αναστροφή πληθυσμού στη στάσιμη κατάσταση.

```

1     clear all
2     clc
3     tic
4     OmegaR=1

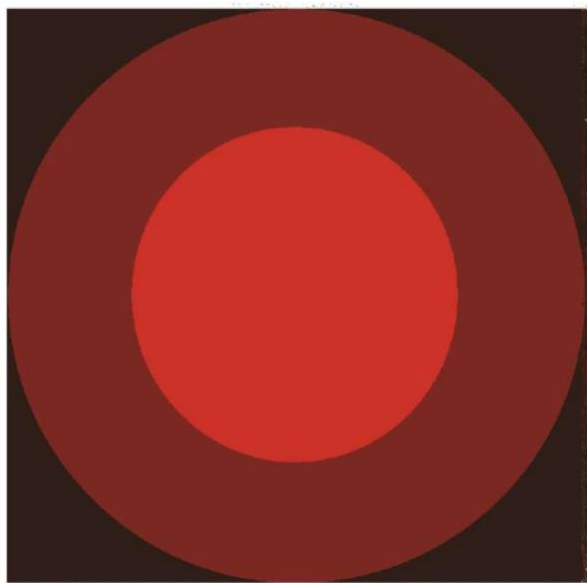
```

```

5      Delta=3*OmegaR
6      Lambda = (sqrt(OmegaR^2+Delta^2))/2
7      TRonR =(2*pi)/(OmegaR)
8      TROffR=(2*pi)/sqrt(OmegaR^2+Delta^2)
9      pi/Lambda -TROffR
10     nop=501;
11     tl= 0;
12     tr= TRonR;
13     step=(tr-tl)/(nop-1); % nm
14     for i=1:nop;
15         t(i)=tl+step*(i-1);
16         P1onR(i)=cos((OmegaR/2)*t(i))^2;
17         P2onR(i)=sin((OmegaR/2)*t(i))^2;
18         P1offR(i)= 1 + (OmegaR^2*(cos(2*Lambda*t(i))-1))/(2*(OmegaR^2+
19             Delta^2));
20         P2offR(i)=(OmegaR^2)/(OmegaR^2+Delta^2)*sin(Lambda*t(i))^2;
21     end
22     %plot(x,c,'k',x,y1,'b',x,y2,'r'); figure(gcf);
23     plot(t,P1onR,'k',t,P2onR,'b','LineWidth',2,'LineStyle','-'); hold
24         on;
25     %Legend('P_1(t)','P2(t)')
26     plot(t,P1offR,'r',t,P2offR,'g','LineWidth',2,'LineStyle','--')
27     h = Legend('$P_1(t)$ on Resonance','$P_2(t)$ on Resonance','$P_1(
28         t)$ off Resonance','$P_2(t)$ off Resonance');
29     set(h,'Interpreter','Latex','FontSize',10)
30     title({'Oscillations in a two-level system';'(On Resonance and
31         Off Resonance)'}))
32     xlabel('$t(s)','$Interpreter','Latex','FontSize',16)
33     ylabel('probabilities','$FontSize',16)
34     annotation('textbox',...
35         [0.7 0.45 0.17 0.15],...
36         'String',{'plotting with',['\Omega_R = ' num2str(OmegaR), ' s^{-1}
37             '],['\Delta = ' num2str(Delta), ' s^{-1}']}]},...
38         'FontSize',10,...
39         'FontName','Arial',...
40         'LineStyle','--',...
41         'EdgeColor',[1 1 0],...
42         'LineWidth',2,...
43         'BackgroundColor',[0.9 0.9 0.9],...
44         'Color',[0.84 0.16 0]);
45
46     hold off;
47     toc

```

Το σύγγραμμα αποτελεί μια εισαγωγή και περιδιάβαση, σε προπτυχιακό επίπεδο, στην κβαντική οπτική. Αναλύουμε την κβαντική φύση του φωτός. Εστιάζουμε στις διεργασίες αλληλεπίδρασης φωτονίου - διαταθμικού συστήματος. Εξηγούμε τι είναι συνεχές και τι διακριτό ενεργειακό φάσμα, καθώς και ενδιάμεσες περιπτώσεις, όπως τις χαμηλοδιάστατες δομές. Η αλληλεπίδραση ηλεκτρομαγνητικού πεδίου - ύλης γίνεται σε πρώτο στάδιο ημικλασικά, όπου το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο αντιμετωπίζεται κλασικά και η ύλη κβαντικά. Εξηγούμε αναλυτικά κατά πόσο επιτρέπονται οι οπτικές μεταβάσεις μεταξύ ενεργειακών σταθμών. Στη συνέχεια, η αλληλεπίδραση ηλεκτρομαγνητικού πεδίου - ύλης γίνεται κβαντικά, δηλαδή το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο αποτελείται από φωτόνια. Εξηγούμε τελεστές κλίμακας και τις διαφορές μεταξύ μποζονίων και φερμιονίων, μεταθέσεως και αντιμεταθέσεως. Κατόπιν, εισάγουμε την έννοια του τελεστή και του πίνακα πυκνότητας. Εξηγούμε τις αρχές λειτουργίας των LASER. Τέλος, αναπτύσσουμε διάφορα σχετικά θέματα. Το βιβλίο περιέχει ασκήσεις, βοηθητικά μαθηματικά και ενδεικτικά προγράμματα matlab.



Το παρόν σύγγραμμα δημιουργήθηκε στο πλαίσιο του Έργου ΚΑΛΛΙΠΟΣ+	
Χρηματοδότης	Υπουργείο Παιδείας και Θρησκευμάτων, Προγράμματα ΠΑΕ, ΕΠΑ 2020-2025
Φορέας υλοποίησης	ΕΛΚΕ ΕΜΠ
Φορέας λειτουργίας	ΣΕΑΒ/Παράρτημα ΕΜΠ/Μονάδα Εκδόσεων
Διάρκεια 2ης Φάσης	2020-2023
Σκοπός	Η δημιουργία ακαδημαϊκών ψηφιακών συγγραμμάτων ανοικτής πρόσβασης (περισσότερων από 700) <ul style="list-style-type: none"> • Προπτυχιακών και μεταπτυχιακών εγχειριδίων • Μονογραφιών • Μεταφράσεων ανοικτών textbooks • Βιβλιογραφικών Οδηγών
Επιστημονικά Υπεύθυνος	Νικόλαος Μήτρου, Καθηγητής ΣΗΜΜΥ ΕΜΠ
ISBN: 978-618-5726-65-2	DOI: http://dx.doi.org/10.57713/kallipos-185

Το παρόν σύγγραμμα χρηματοδοτήθηκε από το Πρόγραμμα Δημοσίων Επενδύσεων του Υπουργείου Παιδείας.