

# Κεφάλαιο 3

ΗΜΙΚΛΑΣΙΚΗ ΑΝΤΙΜΕΤΩΠΙΣΗ

ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΩΣ

ΗΜ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΑΣ - ΥΛΗΣ (ΔΙΣΤΑΘΜΙΚΟΥ ΣΥΣΤΗΜΑΤΟΣ).

ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΟ ΠΕΔΙΟ: ΚΛΑΣΙΚΑ

ΔΙΣΤΑΘΜΙΚΟ ΣΥΣΤΗΜΑ Π.Χ. ΑΤΟΜΟ: ΚΒΑΝΤΙΚΑ.

## 3.1 Ημικλασική αντιμετώπιση:

ΗΜ πεδίο: κλασικά

Δισταθμικό σύστημα: κβαντικά.

Ημικλασική αντιμετώπιση σημαίνει ότι ενώ το δισταθμικό σύστημα (π.χ. άτομο, κβαντική τελεία, κέντρο χρώματος κ.α.) αντιμετωπίζεται κβαντικά ως ένα σύστημα ιδιοκαταστάσεων, αντιμετωπίζουμε κλασικά το ΗΜ πεδίο. Το ΗΜ πεδίο θεωρείται ως μια εξωτερική, χρονικώς μεταβαλλόμενη διαταραχή.

Ακόμα θεωρούμε την ΗΜ ακτινοβολία αρκετά πυκνή 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 του κύματος.

Αν μας ενδιαφέρει η διακύμανση της πυκνότητας της ΗΜ ακτινοβολίας θα πρέπει να εγκαταλείψουμε την ημικλασική προσέγγιση. Αυτό θα γίνει στο επόμενο κεφάλαιο όταν το σύνολο δισταθμικό σύστημα - ακτινοβολία μελετηθεί στην πλήρη κβαντική του μορφή. Δηλαδή στο κεφάλαιο 4 θα αντιμετωπίσουμε κβαντικά και την ΗΜ ακτινοβολία.

### 3.2 Αδιατάρακτο σύστημα (δηλαδή χωρίς ΗΜ πεδίο).

Ας θεωρήσουμε τη Χαμιλτονιανή του αδιατάρακτου ηλεκτρονίου στο άτομο

$$\hat{H}_0 = \frac{\widehat{p}^2}{2m_e} + U(\vec{r}) \quad (3.1)$$

π.χ. στο άτομο του υδρογόνου η δυναμική ενέργεια (Coulomb)

$$U(\vec{r}) = (-e) \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{r} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (3.2)$$

όπου  $e$  το στοιχειώδες φορτίο. Σε πολυηλεκτρονικό άτομο με ατομικό αριθμό  $Z$  η δυναμική ενέργεια (Coulomb)

$$U(\vec{r}) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.3)$$

Εναλλακτικά, μπορούμε να θεωρήσουμε τη θωρακισμένη (screened) μορφή της δυναμικής ενέργειας

$$U_S(\vec{r}) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-k_0 r}. \quad (3.4)$$

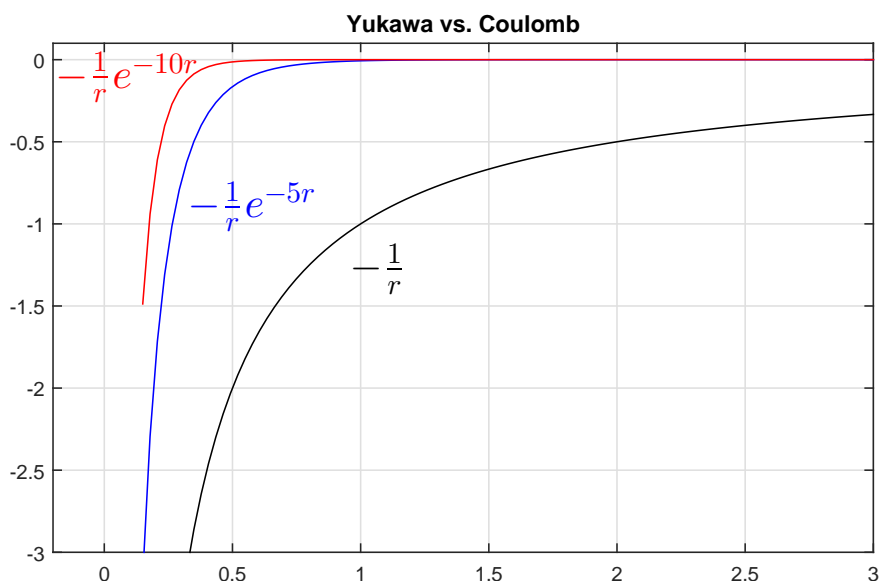
Γενικότερα, το δυναμικό Coulomb έχει τη μορφή

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r}, \quad (3.5)$$

ενώ το θωρακισμένο δυναμικό Coulomb (screened Coulomb potential) έχει τη μορφή

$$V_S(\vec{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze}{r} e^{-k_0 r}, \quad (3.6)$$

όπου  $k_0$  είναι η ισχύς του παράγοντα αποσβέσεως (strength of the damping factor) ή αλλιώς κυματόανυσμα (wave vector) Thomas-Fermi. Το θωρακισμένο δυναμικό  $V_S(\vec{r})$  επονομάζεται 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 στο Σχήμα 3.1.



Σχήμα 3.1: Σύγκριση των δυναμικών ενεργειών Yukawa και Coulomb οι οποίες χάρην απλότητας θεωρούνται εδώ ως  $V_{Yukawa}(r) = -\frac{1}{r}e^{-k_0r}$  και  $V_{Coulomb}(r) = -\frac{1}{r}$  και τα  $r$  και  $k_0$  αδιάστατα. Η δυναμική ενέργεια Coulomb επιδρά σε μεγαλύτερες αποστάσεις ενώ η δυναμική ενέργεια Yukawa αποσβένηται γρηγορότερα, λόγω του παράγοντα  $e^{-k_0r}$ .

Ας θεωρήσουμε τη χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}_0 \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.7)$$

όπου  $\Psi(\vec{r}, t)$  είναι η κυματοσυνάρτηση του αδιατάραχτου ηλεκτρονίου. Περαιτέρω, ας υποθέσουμε χωρισμό μεταβλητών

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r})T(t). \quad (3.8)$$

$\frac{(3.7)}{(3.8)} \Rightarrow \Phi(\vec{r})i\hbar \frac{dT(t)}{dt} = T(t)\hat{H}_0\Phi(\vec{r}) \Rightarrow \frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{\hat{H}_0\Phi(\vec{r})}{\Phi(\vec{r})}$ , για  $T(t) \neq 0 \neq \Phi(\vec{r})$  [αν  $T(t) = 0$  ή  $\Phi(\vec{r}) = 0$ , η Εξ. 3.7 ικανοποιείται τετριμμένα]. Αλλά για να ικανοποιείται η τελευταία εξίσωση  $\forall t, \forall \vec{r}$  θα πρέπει

$$\frac{i\hbar}{T(t)} \frac{dT(t)}{dt} = \frac{\hat{H}_0\Phi(\vec{r})}{\Phi(\vec{r})} = E \text{ (ΣΤΑΘΕΡΑ)} \quad (3.9)$$

αφού το ένα κομμάτι είναι συνάρτηση μόνο του  $t$  και το άλλο μόνο του  $\vec{r}$ . Συνεπώς,

(1)  $\hat{H}_0\Phi(\vec{r}) = E\Phi(\vec{r})$  άρα  $E$  είναι οι ιδιοτιμές της ενέργειας (εν γένει διακριτές, θα χαρακτηρίζονται από κάποιο “ συλλογικό αριθμό ”  $k$  δηλαδή  $\hat{H}_0\Phi_k(\vec{r}) = E_k\Phi_k(\vec{r})$ ) και

$$(2) \frac{dT}{T} = \frac{E dt}{i\hbar} \Rightarrow \ln T = -\frac{iEt}{\hbar} + c \Rightarrow T(t) = e^c e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \Rightarrow T(t) = \mathcal{N} e^{-\frac{iEt}{\hbar}}.$$

Επομένως, συνοψίζοντας

$$\Psi_k(\vec{r}, t) = \mathcal{N} e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} \Phi_k(\vec{r}), \quad (3.10)$$

όπου  $\mathcal{N}$  είναι μια σταθερά κανονικοποίησης, και οι ιδιοκαταστάσεις του ΑΔΙΑΤΑΡΑΚΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ περιγράφονται από την

$$\hat{H}_0\Phi_k(\vec{r}) = E_k\Phi_k(\vec{r}), \quad (3.11)$$

όπου  $E_k$  είναι οι ιδιοενέργειες και  $\Phi_k(\vec{r})$  οι ορθοκανονικές ιδιοσυναρτήσεις. Ακόμα ορίζουμε

$$E_k := \hbar\Omega_k. \quad (3.12)$$

Ας απαιτήσουμε

$$\int |\Psi_k(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \Leftrightarrow |\mathcal{N}|^2 \int |\Phi_k(\vec{r})|^2 dV = 1. \quad (3.13)$$

Για αυτό είπαμε την  $\mathcal{N}$  σταθερά κανονικοποίησης, και υποθέσαμε τις  $\Phi_k(\vec{r})$  ορθοκανονικές.  $dV = d^3r$  είναι ο στοιχειώδης όγκος και  $k$  ένας συλλογικός κβαντικός αριθμός π.χ. στο άτομο υδρογόνου  $k = \{n, \ell, m_\ell\}$ . Στο άτομο του υδρογόνου, στην ιδιοσυνάρτηση  $\Phi_k(r, \theta, \phi)$  αντιστοιχεί η ιδιοενέργεια

$$E_k = \frac{-R_E}{n^2} = E_n, \quad (3.14)$$

όπου

$$R_E = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} \simeq 13.6 \text{ eV} \quad (3.15)$$

είναι η ενέργεια Rydberg. Στο άτομο υδρογόνου προκύπτουν ίδιες ενέργειες με αυτές του προτύπου Bohr δηλαδή

$$E_{n\ell m_\ell} = E_n = \frac{-R_E}{n^2}, \quad (3.16)$$

δηλαδή υπάρχει εκφυλισμός ως προς  $\ell$  και  $m_\ell$ . Αυτό αλλάζει σε πολυηλεκτρονικά άτομα όπου αίρεται ο εκφυλισμός ως προς  $\ell$ , δηλαδή

$$E_{n\ell m} = E_{n\ell}. \quad (3.17)$$

Σε μαγνητικό πεδίο αίρεται και ο εκφυλισμός ως προς  $m_\ell$ .

### Τύποι Ατομικού Προτύπου Bohr

$$E_n = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r_n}, \quad (3.18)$$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \frac{n^2}{Z} = a_0 \frac{n^2}{Z} \quad (3.19)$$

όπου  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} \approx 0.529 \text{ \AA}$  είναι η ακτίνα Bohr. Οπότε

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \frac{Z^2}{n^2} = -R_E \frac{Z^2}{n^2} \quad (3.20)$$

Για  $Z = 1$

$$E_1 = -R_E \approx -13.6 \text{ eV}, \quad r_1 = a_0 \approx 0.529 \text{ \AA}$$

$$E_2 = -3.4 \text{ eV}, \quad r_2 = 4r_1$$

$$E_3 = -1.51 \text{ eV}, \quad r_3 = 9r_1$$

Οι παραπάνω τύποι του προτύπου Bohr προκύπτουν ως γνωστόν από τις παραδοχές κυκλικής τροχιάς, κβάντωσης της στροφορμής ( $mvr = n\hbar$ ) και ταύτισεως της κεντρομόλου δυνάμεως με τη δύναμη Coulomb.

### 3.3 Διαταραγμένο σύστημα (δηλαδή εντός ΗΜ πεδίου).

Χρονικά εξαρτημένη θεωρία διαταραχών.  
Διπολική Ροπή. Προσέγγιση Διπόλου.

Ας θεωρήσουμε τη Χαμιλτονιανή του διαταραγμένου ατόμου δηλαδή παρουσία ΗΜ πεδίου

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \quad (3.21)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.22)$$

με αρχική συνθήκη

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \Phi(\vec{r}) = \text{γνωστή}. \quad (3.23)$$

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

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_k f_k \Phi_k(\vec{r}) \quad (3.24)$$

και

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) \quad (3.25)$$

οπότε

$$C_k(0) = f_k. \quad (3.26)$$

Από τις σχέσεις (3.21), (3.22), (3.25) προκύπτει

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[ \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) \right] = [\hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t)] \left[ \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) \right]. \quad (3.27)$$

Ας υπολογίσουμε τα δύο μέλη αυτής της εξίσωσης. Το Α' μέλος:

$$A' = i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) + i\hbar \sum_k C_k(t) (-i\Omega_k) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) \quad (3.28)$$

Οπότε λόγω της Εξ. 3.12 προκύπτει

$$A' = i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) + \sum_k C_k(t) E_k e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}). \quad (3.29)$$

B' μέλος:

$$B' = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} E_k \Phi_k(\vec{r}) + \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}). \quad (3.30)$$

Άρα απλοποιώντας τον 2ο όρο του A' μέλους με τον 1ο όρο του B' μέλους προκύπτει

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}). \quad (3.31)$$

Τώρα εκμεταλλευόμαστε το γεγονός ότι οι  $\Phi_k(\vec{r})$  είναι ορθοκανονικές. Πολλαπλασιάζουμε την Εξ.(3.31) με  $\Phi_{k'}^*(\vec{r})$  και ολοκληρώνουμε στο χώρο.

$$i\hbar \sum_k \dot{C}_k(t) e^{-i\Omega_k t} \int \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) dV = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \int \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) dV \Rightarrow \quad (3.32)$$

Όμως αφού οι  $\Phi_k(\vec{r})$  είναι ορθοκανονικές,

$$\int \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) dV = \delta_{k'k} \quad (3.33)$$

οπότε

$$i\hbar \dot{C}_{k'}(t) e^{-i\Omega_{k'} t} = \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} U_{\mathcal{E}k'k}(t). \quad (3.34)$$

Ονομάσαμε

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = \int \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) dV = \langle \Phi_{k'} | U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) | \Phi_k \rangle \quad (3.35)$$

τα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής. Άρα, εν τέλει

$$\boxed{\dot{C}_{k'}(t) = \frac{-i}{\hbar} \sum_k C_k(t) e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k)t} U_{\mathcal{E}k'k}(t)} \quad (3.36)$$

Δηλαδή καταλήξαμε σε ένα Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 1<sup>ης</sup> Τάξεως. Αν λύσουμε το Σύστημα (3.36) ουσιαστικά λύνουμε το πρόβλημα (3.21), (3.22).

Η άνωθεν διαδικασία συνιστά τη λεγόμενη χρονικά εξαρτώμενη θεωρία διαταραχών. Παρακάτω θα την εφαρμόσουμε σε δισταθμικό σύστημα υπό την επίδραση μονοχρωματικού και πολωμένου ηλεκτρικού κύματος δηλαδή η διαταραχή μας έχει αυτά τα χαρακτηριστικά.

Γενικά, για οιοδήποτε φυσικό μέγεθος  $M$ , ορίζουμε τα στοιχεία πίνακά του ως <sup>1</sup>

$$M_{k'k} = \int \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \hat{M}(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}) \Phi_k(\vec{r}) dV = \langle \Phi_{k'} | \hat{M} | \Phi_k \rangle \quad (3.37)$$

Να σημειωθεί ότι επειδή  $\int |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1 \Leftrightarrow \int \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) dV = 1$

$$\begin{aligned} &\Rightarrow \int dV \sum_{k'} C_{k'}^*(t) e^{i\Omega_{k'} t} \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \sum_k C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) = 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sum_{k'} \sum_k C_{k'}^*(t) C_k(t) e^{i(\Omega_{k'} - \Omega_k)t} \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) = 1 \Rightarrow \\ &\boxed{\sum_k |C_k(t)|^2 = 1} \Rightarrow \sum_k |C_k(0)|^2 = 1 \Rightarrow \boxed{\sum_k |f_k|^2 = 1} \quad (3.38) \end{aligned}$$

---

<sup>1</sup>περισσότερα στο Παράρτημα Β'.

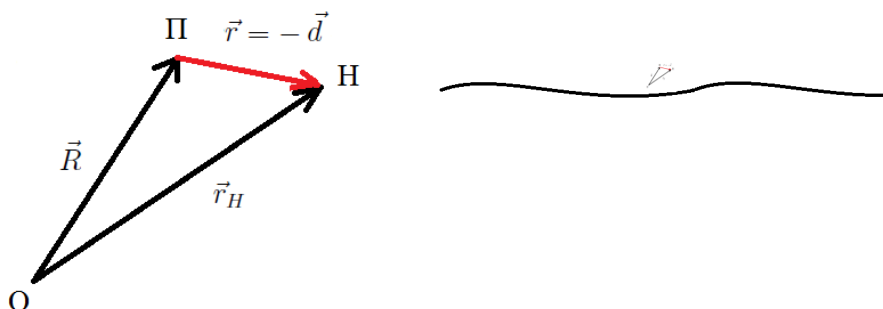


Έστω ηλεκτρικό δίπολο  $\Theta A$  ( $\Theta$ : θετικό,  $A$ : αρνητικό) με φορτίο  $q > 0$  στο  $\Theta$  και  $-q < 0$  στο  $A$ . Η ηλεκτρική διπολική ροπή ορίζεται ως

$$\vec{\mathcal{P}} := q\vec{d} \quad (3.39)$$

όπου  $\vec{d} = A\vec{\Theta}$ . Στο Σχήμα 3.2 θεωρούμε το άτομο του υδρογόνου, οπότε το ηλεκτρικό φορτίο στο  $\Pi \equiv \Theta$  είναι  $q = e > 0$ , ενώ στο  $H \equiv A$  είναι  $-q = -e < 0$ , και  $\vec{d} = A\vec{\Theta} = H\vec{\Pi}$ . Αν  $O$  είναι η αρχή του συστήματος συντεταγμένων, ονομάζουμε  $\vec{r}_H$  το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς  $O$ ,  $\vec{R}$  το διάνυσμα θέσεως του πυρήνα ως προς  $O$ , ενώ  $\vec{r} = \vec{\Pi H} = \vec{\Theta A}$  το διάνυσμα θέσεως του ηλεκτρονίου ως προς τον πυρήνα. Άρα  $\vec{d} = -\vec{r}$ , οπότε

$$\vec{\mathcal{P}} = q\vec{d} = e(-\vec{r}) = -e\vec{r} \quad (3.40)$$



Σχήμα 3.2: (Αριστερά) Αρχή αξόνων  $O$ , πυρήνας  $\Pi$ , ηλεκτρόνιο  $H$ . (Δεξιά) Πολύ σχηματικά: Στις παρούσες συνθήκες, με οπτικά μήκη κύματος, το ηλεκτρικό πεδίο είναι πρακτικά ομογενές. Αν π.χ.  $\lambda = 500 \text{ nm}$ ,  $\lambda/a_0 \approx 10^4$ .

Περιοριζόμαστε τώρα σε δυνάμεις που προέρχονται από το ηλεκτρικό πεδίο οδεύοντος μονοχρωματικού και πολωμένου ΗΜ κύματος

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_a \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r}_H - \omega t + \phi)]$$

όπου το  $\vec{\mathcal{E}}_a$  καθορίζει την πόλωση του κύματος και  $\omega = 2\pi\nu$  είναι η κυκλική συχνότητα,  $\nu$  είναι η συχνότητα.  $\vec{k}$  είναι το κυματόνυσμα με μέτρο  $k = 2\pi/\lambda$ , όπου  $\lambda$  είναι το μήκος κύματος.  $\phi$  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  $\boxed{\vec{r}_H \simeq \vec{R}}$ . 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  $a_0 \simeq 0.529 \text{ \AA} = 0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m} \simeq 0.5 \cdot 10^{-1} \text{ nm}$ , 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

$$\vec{\mathcal{E}} \approx \vec{\mathcal{E}}_a \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{R} - \omega t + \phi)] = \underbrace{\vec{\mathcal{E}}_a \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{R} + \phi)]}_{\vec{\mathcal{E}}_0} \exp(-i\omega t),$$

οπότε

$$\boxed{\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp(-i\omega t) = \vec{\mathcal{E}}(t)} \quad (3.41)$$

Δηλαδή συμπεριλάβαμε το  $\exp[i(\vec{k} \cdot \vec{R} + \phi)]$  στο πλάτος θεωρώντας ότι το ηλεκτρικό πεδίο έχει πρακτικά ΜΟΝΟ ΧΡΟΝΙΚΗ εξάρτηση.

Περαιτέρω, ως χρησιμοποιήσουμε το σύμβολο  $V$  για το δυναμικό και το σύμβολο  $U$  για τη δυναμική ενέργεια. Μπορούμε να γράψουμε

$$\left. \begin{aligned} \vec{\mathcal{E}} &= -\vec{\nabla} V \\ dV &= \frac{\partial V}{\partial x} dx + \frac{\partial V}{\partial y} dy + \frac{\partial V}{\partial z} dz = \vec{\nabla} V \cdot d\vec{r} \end{aligned} \right\} \Rightarrow dV = -\vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{r} \Rightarrow$$

$$V(\vec{r}, t) - \overset{\text{θέτουμε } 0}{V(\vec{0}, t)} = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}$$

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

$$U(\vec{r}, t) - \overset{\text{θέσαμε } 0}{U(\vec{0}, t)} = e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}$$

οπότε, εκ της Εξ. 3.40 προκύπτει

$$\boxed{U(\vec{r}, t) = e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}}(t)} \quad (3.42)$$

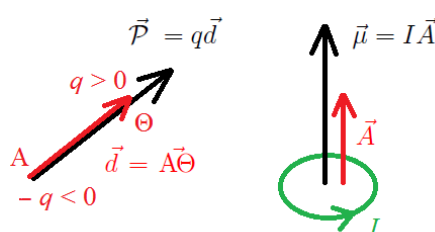
Το σύνολο των άνωθι υποθέσεων, οι οποίες οδήγησαν στη δυναμική ενέργεια διαταραχής της Εξ. 3.42, ονομάζεται **προσέγγιση διπόλου** (dipole approximation).

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

$\vec{E}$  (Ηλεκτρικό Πεδίο)

$\vec{B}$  (Μαγνητικό Πεδίο)



Σχήμα 3.3: Ηλεκτρικό και μαγνητικό δίπολο.

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

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

$U_E = -\vec{P} \cdot \vec{E}$  δυναμική ενέργεια

[ή  $\vec{\mu} = \frac{q}{2m}(\vec{L} + g\vec{S})$  όπου  $m$  η μάζα του σωματιδίου]

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

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

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

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

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

$[U_E] = \text{Cm} \frac{\text{N}}{\text{C}} = \text{Nm} = \text{J}$

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

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

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

Σύμφωνα με το Σχήμα 3.2

$$\vec{P} := q\vec{d} = e(-\vec{r}) \Rightarrow \boxed{\vec{P} = -e\vec{r}} \quad (3.43)$$

$$\vec{P} \cdot \hat{z} = (-e)\vec{r} \cdot \hat{z} \Rightarrow \boxed{P_z = -ez} \quad (3.44)$$

Δείξαμε ότι για οπτικά μήκη κύματος μπορούμε να γράψουμε (Εξ. 3.41)

$$\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp(-i\omega t) = \vec{\mathcal{E}}(t)$$

Θεωρώντας ότι η πόλωση είναι στην κατεύθυνση  $\hat{z}$  και παίρνοντας το πραγματικό μέρος της Εξ. 3.41 έχουμε

$$\vec{\mathcal{E}}(t) = \mathcal{E}_0 \hat{z} \cos \omega t$$

Άρα

$$U_{\mathcal{E}} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}} = -(-e)\vec{r} \cdot \mathcal{E}_0 \hat{z} \cos \omega t \Rightarrow$$

$$U_{\mathcal{E}} = e\mathcal{E}_0 z \cos \omega t \quad (3.45)$$

Ας εστιάσουμε τώρα στα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) = \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}) e\mathcal{E}_0 \cos \omega t \Rightarrow$$

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos \omega t \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}) \quad (3.46)$$

Ας ονομάσουμε και τα στοιχεία πίνακα της συντεταγμένης  $z$

$$z_{k'k} := \int dV \Phi_{k'}^*(\vec{r}) z \Phi_k(\vec{r}) \quad (3.47)$$

τα οποία έχουν τις ιδιότητες

$$z_{k'k}^* = z_{kk'}$$

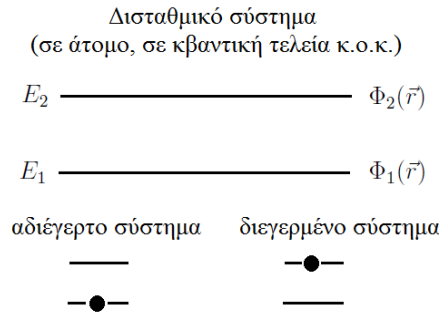
$$z_{kk} = \int dV \underbrace{|\Phi_k(\vec{r})|^2}_{\text{άρτια}} \underbrace{z}_{\text{περιττή}} = 0 \quad (3.48)$$

Δηλαδή τα μη διαγώνια στοιχεία είναι συμμετρικά, ενώ τα διαγώνια στοιχεία μηδενίζονται. Η δεύτερη ιδιότητα οφείλεται στο ότι σε συστήματα όπως τα άτομα, τα χβαντικά φρέατα κ.ο.κ. οι ιδιοσυναρτήσεις είναι άρτιες ή περιττές. Οπότε, το τετράγωνο του μέτρου τους είναι άρτια συνάρτηση.

Εν τέλει, τα στοιχεία πίνακα της δυναμικής ενέργειας της διαταραχής μπορούν να γραφούν ως

$$U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{k'k} \quad (3.49)$$

Στο Σχήμα 3.4 παριστάνεται ένα δισταθμικό σύστημα. Αυτό μπορεί να αποτελείται από τις κατώτερες δύο στάθμες ενός ατόμου ή μιας κβαντικής τελείας κ.ο.κ.. 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 Περιστρεφόμενου Κύματος). Στο



Σχήμα 3.4: Δισταθμικό σύστημα. Όταν το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην κάτω στάθμη  $E_1$  το σύστημα χαρακτηρίζεται αδιεγερτο, ενώ όταν βρίσκεται στην άνω στάθμη  $E_2$  διεγερμένο.

δισταθμικό σύστημα ( $k = 1$  ή  $k = 2$ ) μπορούμε να γράψουμε

$$\begin{aligned} U_{E_{12}}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{12} & U_{E_{12}}(t) &= -\mathcal{P}_{z_{12}} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ U_{E_{21}}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{21} & \text{ή} & U_{E_{21}}(t) = -\mathcal{P}_{z_{21}} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ U_{E_{kk}}(t) &= e\mathcal{E}_0 \cos \omega t z_{kk} = 0 & U_{E_{kk}}(t) &= 0 \end{aligned}$$

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  $\mathcal{P}_{z_{k'k}} = -ez_{k'k}$ . Άρα η 3.49 γίνεται

$$\boxed{U_{E_{k'k}}(t) = -\mathcal{P}_{z_{k'k}} \mathcal{E}_0 \cos \omega t} \quad (3.50)$$

Εάν οι ιδιοσυναρτήσεις μας είναι πραγματικές, τότε στο δισταθμικό μας σύστημα

$$\boxed{\mathcal{P}_{z_{12}} = -ez_{12} = -ez_{21} = \mathcal{P}_{z_{21}} := \mathcal{P}_z := \mathcal{P}} \quad (3.51)$$

και αυτό το  $\mathcal{P}$  χρησιμοποιούμε στην επόμενη ενότητα. Οπότε

$$\begin{aligned} U_{E_{12}}(t) &= -\mathcal{P} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ U_{E_{21}}(t) &= -\mathcal{P} \mathcal{E}_0 \cos \omega t \\ U_{E_{kk}}(t) &= 0, \quad k = 1 \text{ ή } k = 2 \end{aligned}$$

Οπότε, η 3.50 γίνεται

$$\boxed{\begin{array}{ll} U_{\varepsilon k'k}(t) = -\mathcal{P} \varepsilon_0 \cos \omega t & k \neq k' \\ U_{\varepsilon k'k}(t) = 0 & k = k' \end{array}} \quad (3.52)$$

που σημαίνει ότι το μέγεθος της διαταραχής είναι ανάλογο του  $\mathcal{P} \varepsilon_0$  πράγμα που εκφράζεται από τη συχνότητα Rabi  $\Omega_R = \frac{\mathcal{P} \varepsilon_0}{\hbar}$  (δείτε Εξ. 3.59).

### 3.4 Εξισώσεις που περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη δισταθμικού συστήματος. Συχνότητα Rabi. Προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (RWA, Rotating Wave Approximation).

Είχαμε καταλήξει σε ένα Γραμμικό Σύστημα Διαφορικών Εξισώσεων 1ης Τάξεως (Εξ. 3.36), το οποίο αν λύσουμε, ουσιαστικά λύνουμε το πρόβλημα (3.21), (3.22). Η Εξ. 3.36 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

$$\Omega := \Omega_2 - \Omega_1 \quad (3.53)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε και την ταυτότητα  $\cos \omega t = \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}$ .

$$\begin{aligned} \boxed{k' = 1} \quad \dot{C}_1(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_1(t) e^{i(\Omega_1 - \Omega_1)t} \overset{1}{U_{\mathcal{E}11}(t)} \overset{0}{-} - \frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{i(\Omega_1 - \Omega_2)t} U_{\mathcal{E}12}(t) \\ \dot{C}_1(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{-i\Omega t} (-\mathcal{E}_0) \mathcal{P} \cos \omega t = \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar} C_2(t) e^{-i\Omega t} \left\{ \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right\} \\ \boxed{\dot{C}_1(t)} &= \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[ e^{-i(\Omega - \omega)t} + e^{-i(\Omega + \omega)t} \right] C_2(t) \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} \boxed{k' = 2} \quad \dot{C}_2(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_1(t) e^{i(\Omega_2 - \Omega_1)t} U_{\mathcal{E}21}(t) - \frac{i}{\hbar} C_2(t) e^{i(\Omega_2 - \Omega_2)t} \overset{1}{U_{\mathcal{E}22}(t)} \overset{0}{-} \\ \dot{C}_2(t) &= -\frac{i}{\hbar} C_1(t) e^{i\Omega t} (-\mathcal{E}_0) \mathcal{P} \cos \omega t = \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar} C_1(t) e^{i\Omega t} \left\{ \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right\} \\ \boxed{\dot{C}_2(t)} &= \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[ e^{i(\Omega + \omega)t} + e^{i(\Omega - \omega)t} \right] C_1(t) \end{aligned} \quad (3.55)$$

Δηλαδή έχουμε τις ακόλουθες δύο εξισώσεις οι οποίες περιγράφουν τη χρονική εξέλιξη του δισταθμικού συστήματος

$$\begin{aligned} \dot{C}_1(t) &= C_2(t) \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[ e^{-i(\Omega-\omega)t} + e^{-i(\Omega+\omega)t} \right] \quad (0 \text{ RWA}) \\ \dot{C}_2(t) &= C_1(t) \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} \left[ e^{i(\Omega+\omega)t} + e^{i(\Omega-\omega)t} \right] \quad (0 \text{ RWA}) \end{aligned} \quad (3.56)$$

Υπό την προϋπόθεση ότι τα φωτόνια του ΗΜ πεδίου ταιριάζουν 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 ας πούμε περίπου μηδενική επίδραση στο αποτέλεσμα. Η προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (**rotating wave approximation, RWA**) είναι ο ισχυρισμός ότι μπορούμε να αγνοήσουμε αυτούς τους γρήγορους όρους. Άρα μετά την RWA οι Εξισώσεις 3.56 γίνονται

$$\begin{aligned} \dot{C}_1(t) &= C_2(t) \frac{i}{2} \underbrace{\frac{\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar}}_{\Omega_R} e^{-i \underbrace{(\Omega - \omega)}_{-\Delta} t} \\ \dot{C}_2(t) &= C_1(t) \frac{i}{2} \underbrace{\frac{\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar}}_{\Omega_R} e^{i \underbrace{(\Omega - \omega)}_{-\Delta} t} \end{aligned} \quad (3.57)$$

Ορίσαμε τον αποσυντονισμό (detuning) ως

$$\Delta := \omega - \Omega \quad (3.58)$$

και τη συχνότητα Rabi <sup>2</sup> ως

$$\Omega_R := \frac{\mathcal{P}\mathcal{E}_0}{\hbar} \quad (3.59)$$

<sup>2</sup>Από τον Isidor Isaak Rabi (1898-1988).



Εν συνεχεία, θα κάνουμε ένα μετασχηματισμό για να πάρουμε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων με χρονικά ανεξάρτητους συντελεστές. Δηλαδή

$$\begin{aligned} C_1(t) &= \mathbb{C}_1(t) e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} \\ C_2(t) &= \mathbb{C}_2(t) e^{\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} \end{aligned} \quad (3.60)$$

$$\begin{aligned} \dot{C}_1(t) &= \dot{\mathbb{C}}_1(t) e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} + \mathbb{C}_1(t) \left( \frac{-i(\Omega-\omega)}{2} \right) e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} \\ \dot{C}_2(t) &= \dot{\mathbb{C}}_2(t) e^{\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} + \mathbb{C}_2(t) \left( \frac{i(\Omega-\omega)}{2} \right) e^{\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} \end{aligned}$$

οπότε η (3.57) γίνεται

$$\begin{cases} \dot{\mathbb{C}}_1(t) e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} + \mathbb{C}_1(t) \left( \frac{-i(\Omega-\omega)}{2} \right) e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} = \mathbb{C}_2(t) e^{\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} e^{-i(\Omega-\omega)t} \\ \dot{\mathbb{C}}_2(t) e^{\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} + \mathbb{C}_2(t) \left( \frac{i(\Omega-\omega)}{2} \right) e^{\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} = \mathbb{C}_1(t) e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} e^{i(\Omega-\omega)t} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{\mathbb{C}}_1(t) + \mathbb{C}_1(t) \left( \frac{-i(\Omega-\omega)}{2} \right) = \mathbb{C}_2(t) e^{\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} e^{-i(\Omega-\omega)t} \\ \dot{\mathbb{C}}_2(t) + \mathbb{C}_2(t) \left( \frac{i(\Omega-\omega)}{2} \right) = \mathbb{C}_1(t) e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} e^{-\frac{i(\Omega-\omega)t}{2}} \frac{i\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{2\hbar} e^{i(\Omega-\omega)t} \end{cases}$$

και έχοντας ορίσει  $\Delta := \omega - \Omega$  (Εξ. 3.58) και  $\Omega_R := \frac{\mathcal{E}_0 \mathcal{P}}{\hbar}$  (Εξ. 3.59)

$$\begin{cases} \dot{\mathbb{C}}_1(t) = -\frac{i\Delta}{2} \mathbb{C}_1(t) + \frac{i\Omega_R}{2} \mathbb{C}_2(t) \\ \dot{\mathbb{C}}_2(t) = +\frac{i\Omega_R}{2} \mathbb{C}_1(t) + \frac{i\Delta}{2} \mathbb{C}_2(t) \end{cases}$$

οπότε καταλήγουμε σε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων με χρονικά ανεξάρτητους συντελεστές

$$\boxed{\begin{bmatrix} \dot{\mathbb{C}}_1(t) \\ \dot{\mathbb{C}}_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{i\Delta}{2} & \frac{i\Omega_R}{2} \\ \frac{i\Omega_R}{2} & \frac{i\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbb{C}_1(t) \\ \mathbb{C}_2(t) \end{bmatrix}} \quad (3.61)$$

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. 3.61 εισάγουμε το διάνυσμα

$$\vec{x}(t) = \begin{bmatrix} \mathbb{C}_1(t) \\ \mathbb{C}_2(t) \end{bmatrix} \quad (3.62)$$

οπότε

$$\dot{\vec{x}}(t) = \begin{bmatrix} \dot{\mathbb{C}}_1(t) \\ \dot{\mathbb{C}}_2(t) \end{bmatrix} \quad (3.63)$$

και ονομάζοντας

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} -\frac{i\Delta}{2} & \frac{i\Omega_R}{2} \\ \frac{i\Omega_R}{2} & \frac{i\Delta}{2} \end{bmatrix} := -iA \Rightarrow A = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

το σύστημα της Εξ. 3.61 γράφεται

$$\boxed{\dot{\vec{x}}(t) = \tilde{A}\vec{x}(t)} \quad (3.65)$$

Ας δοκιμάσουμε λύσεις της μορφής

$$\vec{x}(t) = \vec{v} e^{\tilde{\lambda}t} \quad (3.66)$$

οπότε

$$\vec{v} \tilde{\lambda} e^{\tilde{\lambda}t} = \tilde{A} \vec{v} e^{\tilde{\lambda}t} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \tilde{A}\vec{v} = \tilde{\lambda}\vec{v} \\ \tilde{\lambda} := -i\lambda \end{array} \right\} \Rightarrow -iA\vec{v} = -i\lambda\vec{v} \Rightarrow \underbrace{A\vec{v} = \lambda\vec{v}}_{\text{πρόβλημα ιδιοτιμών}}$$

Δηλαδή ουσιαστικά το όλο θέμα ανάγεται στο πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\boxed{A\vec{v} = \lambda\vec{v}} \quad (3.67)$$

από το οποίο θα προκύψουν τα κανονικοποιημένα ιδιοανύσματα  $\vec{v}_1, \vec{v}_2$  που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές  $\lambda_1, \lambda_2$ . Έχοντας ελέγξει ότι τα κανονικοποιημένα ιδιοανύσματα  $\vec{v}_1, \vec{v}_2$  που αντιστοιχούν στις ιδιοτιμές  $\lambda_1, \lambda_2$  είναι γραμμικώς ανεξάρτητα, η λύση του προβλήματός μας είναι

$$\boxed{\vec{x}(t) = \sum_{k=1}^2 c_k \vec{v}_k e^{-i\lambda_k t}}$$

όπου βέβαια  $\tilde{\lambda}_k = -i\lambda_k$ . Από τις αρχικές συνθήκες βρίσκουμε τα  $c_k$ . 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  $2 \times 2$  πίνακας. Οπότε

$$\det(A - \lambda I) = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} - \lambda & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} - \lambda \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow$$

στη γενική περίπτωση

$$\lambda_{2,1} = \pm \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}, \quad (3.68)$$

ενώ στην περίπτωση συντονισμού ( $\Delta = 0$ )

$$\lambda_{2,1} = \pm \frac{\Omega_R}{2}. \quad (3.69)$$

Στις επόμενες σελίδες θα βρούμε και τα ιδιοανύσματα καθώς και τη λύση του συστήματος 3.61 χρησιμοποιώντας τις αρχικές συνθήκες  $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$  δηλαδή τοποθετώντας στην αρχή των χρόνων το ηλεκτρόνιο στην κάτω στάθμη. Τότε, λόγω του μετασχηματισμού 3.60 συνάγεται ότι  $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$ .

ΛΥΣΗ για  $\Delta=0$

Αν υποθέσουμε  $\Delta := \omega - \Omega = 0$  τότε  $A = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \end{bmatrix}$  και  $\lambda_{2,1} = \pm \frac{\Omega_R}{2}$

Για  $\lambda_1 = -\frac{\Omega_R}{2}$

$$\left. \begin{aligned} \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} = -\frac{\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -\frac{\Omega_R}{2} v_{21} = -\frac{\Omega_R}{2} v_{11} \\ -\frac{\Omega_R}{2} v_{11} = -\frac{\Omega_R}{2} v_{21} \end{cases} \Rightarrow v_{21} = v_{11} \end{aligned} \right\}$$

Οπότε π.χ. το κανονικοποιημένο  $\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$ .

Για  $\lambda_2 = \frac{\Omega_R}{2}$

$$\left. \begin{aligned} \begin{bmatrix} 0 & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} = \frac{\Omega_R}{2} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{cases} -\frac{\Omega_R}{2} v_{22} = \frac{\Omega_R}{2} v_{12} \\ -\frac{\Omega_R}{2} v_{12} = \frac{\Omega_R}{2} v_{22} \end{cases} \Rightarrow v_{22} = -v_{12} \end{aligned} \right\}$$

Οπότε π.χ. το κανονικοποιημένο  $\vec{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$ .

Άρα

$$\vec{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = c_1 \vec{v}_1 e^{-i\lambda_1 t} + c_2 \vec{v}_2 e^{-i\lambda_2 t} = c_1 \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} + c_2 \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \Rightarrow$$

$$\begin{bmatrix} C_1(t) e^{i\frac{(\Omega-\omega)}{2}t} \\ C_2(t) e^{-i\frac{(\Omega-\omega)}{2}t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{c_1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \\ \frac{c_1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} - \frac{c_2}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \end{bmatrix} \Rightarrow (\text{υποθέσαμε } \Delta = 0) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{c_1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \\ \frac{c_1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} - \frac{c_2}{\sqrt{2}} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \end{bmatrix}$$

Έστωσαν Αρχικές Συνθήκες  $C_1(0) = 1$  και  $C_2(0) = 0$ . Άρα

$$\left. \begin{array}{l} 1 = \frac{c_1}{\sqrt{2}} + \frac{c_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 + c_2 = \sqrt{2} \\ 0 = \frac{c_1}{\sqrt{2}} - \frac{c_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow c_1 = c_2 \end{array} \right\} \Rightarrow c_1 = c_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}$$

Οπότε

$$\begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} + \frac{1}{2} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \\ \frac{1}{2} e^{i\frac{\Omega_R}{2}t} - \frac{1}{2} e^{-i\frac{\Omega_R}{2}t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ i \sin\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{bmatrix} \quad (3.70)$$

Άρα

$$\boxed{\begin{array}{l} |C_1(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \\ |C_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\Omega_R}{2}t\right) \end{array}} \quad (3.71)$$

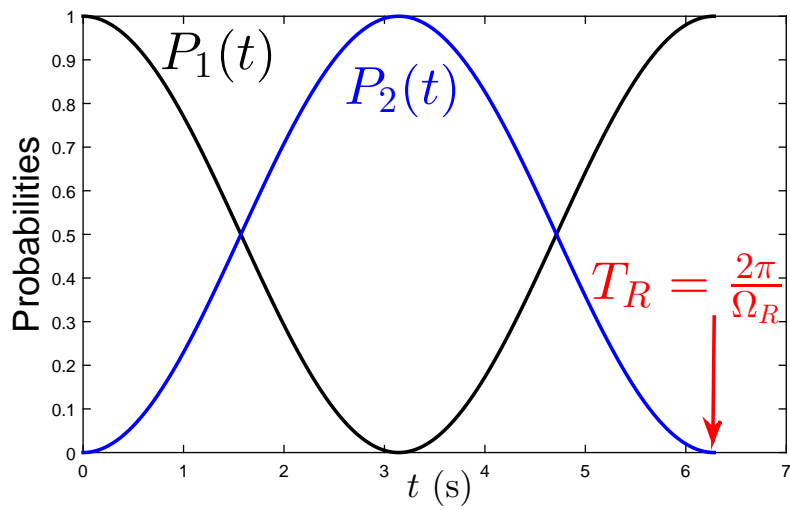
Φυσικά  $|C_k(t)|^2 := P_k(t)$  είναι η πιθανότητα να βρίσκεται το ηλεκτρόνιο στη στάθμη  $k$  τη χρονική στιγμή  $t$ . Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι

$$\boxed{T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}} \quad (3.72)$$

Παρατηρούμε ότι στο συντονισμό όπου  $\omega = \Omega \Leftrightarrow \Delta = 0$ , το πλάτος των ταλαντώσεων είναι

$$\boxed{\mathcal{A} = 1} \quad (3.73)$$

Στη γενικότερη περίπτωση, το πλάτος εξαρτάται από το detuning π.χ.  $\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2 + \Omega_R^2}$ , όπως θα δούμε στις επόμενες σελίδες... Στο Σχήμα 3.5 παρουσιάζονται αυτές οι ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό.



Σχήμα 3.5: Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό δηλαδή με  $\omega = \Omega \Leftrightarrow \Delta = 0$ . Η περίοδος των ταλαντώσεων είναι  $T_R = \frac{2\pi}{\Omega_R}$ , ενώ το πλάτος τους  $\mathcal{A} = 1$ . Εντελώς τυπικά θέσαμε στο σχήμα  $\Omega_R = 1 \text{ s}^{-1}$ , αλλά αυτή η τιμή δεν έχει κάποια σχέση με τις τιμές της  $\Omega_R$  σε πραγματικά συστήματα.

$$\boxed{\Lambda\Upsilon\Sigma\text{H } \gamma_{i\alpha} \Delta \neq 0}$$

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix} \text{ και } \lambda_{2,1} = \pm \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}$$

$$\Gamma_{i\alpha} \lambda_1 = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} := -\lambda < 0$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \begin{bmatrix} v_{11} \\ v_{21} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta}{2}v_{11} - \frac{\Omega_R}{2}v_{21} = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}v_{11} \Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}\right)v_{11} = \frac{\Omega_R}{2}v_{21} \quad (1\eta)$$

$$-\frac{\Omega_R}{2}v_{11} - \frac{\Delta}{2}v_{21} = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}v_{21} \Rightarrow -\frac{\Omega_R}{2}v_{11} = \left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}\right)v_{21} \quad (2\eta)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}\right)v_{11} = \frac{\Omega_R}{2} \frac{-\frac{\Omega_R}{2}v_{11}}{\left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}\right)} \xrightarrow{* (\text{εάν } v_{11} \neq 0)}$$

$$\frac{\Delta^2}{4} - \frac{\Omega_R^2}{4} - \frac{\Delta^2}{4} = -\frac{\Omega_R^2}{4},$$

που ισχύει. Αρκεί δηλαδή  $v_{11} \neq 0$ ,<sup>\*</sup> οπότε π.χ. από την (1η) συνάγεται

$$\boxed{v_{21} = \frac{\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}}{\frac{\Omega_R}{2}}v_{11}} \quad \text{ή} \quad v_{21} = \alpha v_{11} \quad \text{άρα} \quad \vec{v}_1 = \begin{bmatrix} \beta \\ \alpha\beta \end{bmatrix}$$

Για να είναι κανονικοποιημένο θα πρέπει  $\beta^2 + \alpha^2\beta^2 = 1$  π.χ.  $\beta = \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}} \Rightarrow$

$$\boxed{\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}} \\ \frac{\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}} \end{bmatrix}}$$

$$\Gamma\alpha \quad \boxed{\lambda_2 = +\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} := +\lambda > 0}$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\Delta}{2} & -\frac{\Omega_R}{2} \\ -\frac{\Omega_R}{2} & -\frac{\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} \begin{bmatrix} v_{12} \\ v_{22} \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta}{2}v_{12} - \frac{\Omega_R}{2}v_{22} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}v_{12} \Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}\right)v_{12} = \frac{\Omega_R}{2}v_{22} \quad (1\eta)$$

$$-\frac{\Omega_R}{2}v_{12} - \frac{\Delta}{2}v_{22} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}v_{22} \Rightarrow -\frac{\Omega_R}{2}v_{12} = \left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}\right)v_{22} \quad (2\eta)$$

$$\Rightarrow \left(\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}\right)v_{12} = \frac{\Omega_R}{2} \frac{-\frac{\Omega_R}{2}v_{12}}{\left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}\right)} \quad * (\text{εάν } v_{12} \neq 0) \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta^2}{4} - \frac{\Omega_R^2}{4} - \frac{\Delta^2}{4} = -\frac{\Omega_R^2}{4},$$

που ισχύει. Αρκεί δηλαδή  $\boxed{v_{12} \neq 0}$ ,<sup>\*</sup> οπότε π.χ. από την (1η) συνάγεται

$$\Rightarrow \boxed{v_{22} = \frac{\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}}{\frac{\Omega_R}{2}}v_{12}} \quad \text{ή} \quad v_{22} = \alpha' v_{12} \quad \text{άρα} \quad \vec{v}_2 = \begin{bmatrix} \beta' \\ \alpha' \beta' \end{bmatrix}$$

Για να είναι κανονικοποιημένο θα πρέπει  $\beta'^2 + \alpha'^2 \beta'^2 = 1$  π.χ.  $\beta' = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} \Rightarrow$

$$\boxed{\vec{v}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} \\ \frac{\alpha'}{\sqrt{1 + \alpha'^2}} \end{bmatrix}}$$



Άρα

$$\vec{x}(t) = \begin{bmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1(t)e^{-i\frac{\Delta}{2}t} \\ C_2(t)e^{i\frac{\Delta}{2}t} \end{bmatrix} = c_1\vec{v}_1e^{-i\lambda_1t} + c_2\vec{v}_2e^{-i\lambda_2t} = \begin{bmatrix} \frac{c_1}{\sqrt{1+\alpha^2}}e^{-i\lambda_1t} + \frac{c_2}{\sqrt{1+\alpha'^2}}e^{-i\lambda_2t} \\ \frac{c_1\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}}e^{-i\lambda_1t} + \frac{c_2\alpha'}{\sqrt{1+\alpha'^2}}e^{-i\lambda_2t} \end{bmatrix}$$

Έστωσαν Αρχικές Συνθήκες  $C_1(0) = 1$  και  $C_2(0) = 0$ . Επομένως

$$\begin{cases} 1 = \frac{c_1}{\sqrt{1+\alpha^2}} + \frac{c_2}{\sqrt{1+\alpha'^2}} \\ 0 = \frac{c_1\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}} + \frac{c_2\alpha'}{\sqrt{1+\alpha'^2}} \Rightarrow c_2 = -\frac{\alpha}{\alpha'} \frac{\sqrt{1+\alpha'^2}}{\sqrt{1+\alpha^2}} c_1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 1 = \frac{c_1}{\sqrt{1+\alpha^2}} - \frac{\alpha}{\alpha'} \frac{\sqrt{1+\alpha'^2}}{\sqrt{1+\alpha^2}} \frac{c_1}{\sqrt{1+\alpha'^2}} = c_1 \frac{\alpha' - \alpha}{\alpha' \sqrt{1+\alpha^2}} \Rightarrow c_1 = \frac{\alpha' \sqrt{1+\alpha^2}}{\alpha' - \alpha} \\ c_2 = -\frac{\alpha}{\alpha'} \frac{\sqrt{1+\alpha'^2}}{\sqrt{1+\alpha^2}} \frac{\alpha' \sqrt{1+\alpha^2}}{\alpha' - \alpha} \Rightarrow c_2 = -\frac{\alpha \sqrt{1+\alpha'^2}}{\alpha' - \alpha} \end{cases}$$

Επομένως

$$\begin{bmatrix} C_1(t)e^{-i\frac{\Delta}{2}t} \\ C_2(t)e^{i\frac{\Delta}{2}t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\alpha'}{\alpha' - \alpha} e^{-i\lambda_1t} - \frac{\alpha}{\alpha' - \alpha} e^{-i\lambda_2t} \\ \frac{\alpha\alpha'}{\alpha' - \alpha} e^{-i\lambda_1t} - \frac{\alpha\alpha'}{\alpha' - \alpha} e^{-i\lambda_2t} \end{bmatrix} \quad (3.74)$$

Ας υπολογίσουμε τους συντελεστές που εμφανίζονται στην άνω εξίσωση της 3.74.

$$\begin{aligned} \alpha' - \alpha &= \frac{\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}}{\frac{\Omega_R}{2}} - \frac{\frac{\Delta}{2} - \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}}{\frac{\Omega_R}{2}} = -\frac{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{\Omega_R} \\ \frac{\alpha'}{\alpha' - \alpha} &= -\frac{\cancel{\Omega_R}}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} \frac{\Delta - \sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{\cancel{\Omega_R}} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} - \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} \\ \frac{\alpha}{\alpha' - \alpha} &= -\frac{\cancel{\Omega_R}}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} \frac{\Delta + \sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{\cancel{\Omega_R}} = -\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} + \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} \end{aligned}$$

Οπότε η άνω εξίσωση γίνεται

$$\begin{aligned}
 C_1(t)e^{i\frac{\Delta}{2}t} &= \underbrace{\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} - \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}}_{k_1} e^{i\lambda t} + \underbrace{\frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} + \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}}_{k_2} e^{-i\lambda t} \Rightarrow \\
 C_1(t) &= (k_1 e^{i\lambda t} + k_2 e^{-i\lambda t}) e^{-i\frac{\Delta}{2}t} \Rightarrow \\
 |C_1(t)|^2 &= k_1^2 + k_2^2 + k_1 k_2 e^{2i\lambda t} + k_1 k_2 e^{-2i\lambda t} = k_1^2 + k_2^2 + 2k_1 k_2 \cos(2\lambda t) \Rightarrow \\
 |C_1(t)|^2 &= \frac{\Omega_R^2 + \Delta^2 + \Delta^2 - 2\Delta\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} + \frac{\Omega_R^2 + \Delta^2 + \Delta^2 + 2\Delta\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \\
 &\quad + 2\frac{\Omega_R^2 + \Delta^2 - \Delta^2}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \cos(2\lambda t) \Rightarrow \\
 |C_1(t)|^2 &= \frac{2(\Omega_R^2 + 2\Delta^2)}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} + \frac{2\Omega_R^2}{4(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \cos(2\lambda t) = \frac{\Omega_R^2 + 2\Delta^2 + \Omega_R^2 \cos(2\lambda t)}{2(\Omega_R^2 + \Delta^2)} \Rightarrow
 \end{aligned}$$

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 P_1(t) = |C_1(t)|^2 &= 1 - \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \sin^2(\lambda t) \\
 \text{όπου } \lambda &= \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}
 \end{aligned}
 } \quad (3.75)$$

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 πλάτος της ταλαντώσεως του είναι

$$\boxed{
 \mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}
 } \quad (3.76)$$

Για  $\Delta = 0$ ,  $\Rightarrow |C_1(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$ , όπως αναμενόταν (Εξ. 3.71).

Ας υπολογίσουμε τον συντελεστή που εμφανίζεται στην κάτω εξίσωση της 3.74.

$$\frac{\alpha\alpha'}{\alpha' - \alpha} = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} + \Delta}{\Omega_R} \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2} - \Delta}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} = \frac{\Omega_R^2 + \Delta^2 - \Delta^2}{2\Omega_R\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} = \frac{\Omega_R}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}$$

$$\text{οπότε } C_2(t)e^{i\frac{\Delta}{2}t} = \frac{\Omega_R}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}e^{+i\lambda t} - \frac{\Omega_R}{2\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}e^{-i\lambda t} = \frac{\Omega_R}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}i \sin(\lambda t) \Rightarrow$$

$$\boxed{P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \sin^2(\lambda t)} \quad (3.77)$$

$$\text{όπου } \lambda = \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2}$$

Η μέγιστη τιμή του  $|C_2(t)|^2$  είναι  $\frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$  και η ελάχιστη 0, άρα το πλάτος της

ταλαντώσεως είναι  $\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$  σε συμφωνία με την Εξ. 3.76.

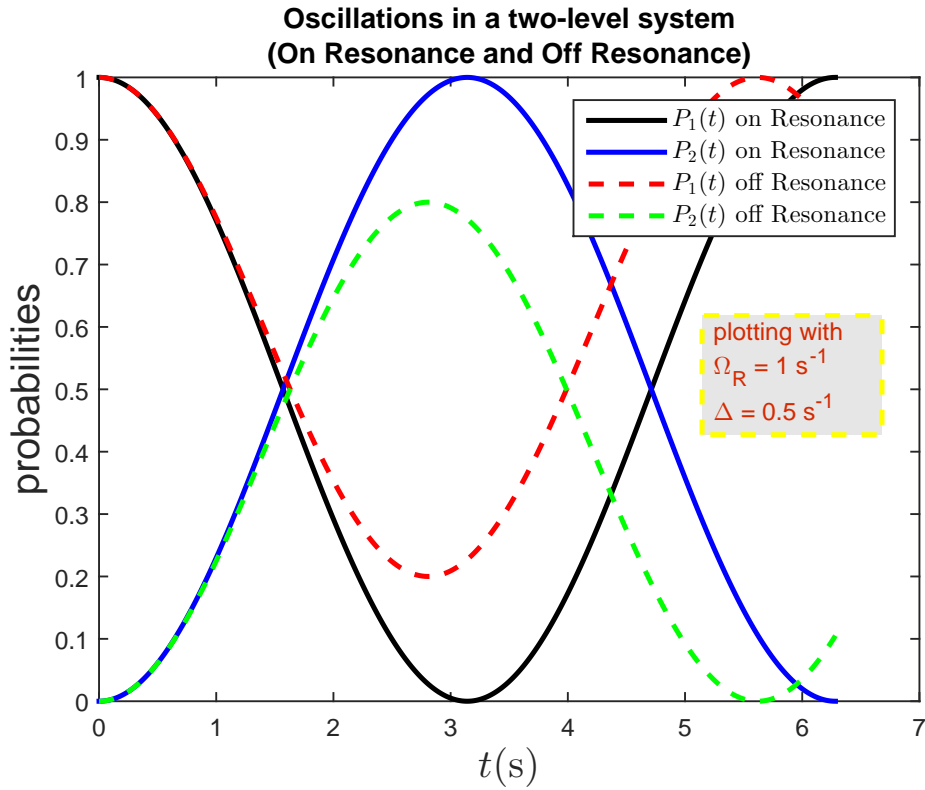
Για  $\Delta = 0$ ,  $|C_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$  όπως αναμενόταν (Εξ. 3.71).

Όπως φαίνεται από τις Εξ. 3.75 και 3.77 η περίοδος των ταλαντώσεων είναι

$$\boxed{T_R = \frac{2\pi}{2\lambda} = \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}} \quad (3.78)$$

και για  $\Delta = 0$  προκύπτει  $T = \frac{2\pi}{\Omega_R}$  σε συμφωνία με την Εξ. 3.72. Επίσης, το πλάτος των ταλαντώσεων που δίνεται από την Εξ. 3.76, για  $\Delta = 0$  συμπίπτει με την Εξ. 3.73. Ταλαντώσεις δισταθμικού συστήματος σε συντονισμό και εκτός συντονισμού παρουσιάζονται στο Σχήμα 3.6. Υπενθυμίζεται ότι  $P_k(t) = |C_k(t)|^2$ ,  $k = 1, 2$  είναι οι πιθανότητες παρουσίας του ηλεκτρονίου στη στάθμη  $k$ . Από τις Εξ. 3.78 και 3.76 είναι φανερό ότι καθώς απομακρυνόμαστε από τον συντονισμό, δηλαδή καθώς αυξάνεται το  $|\Delta|$ , η περίοδος και το πλάτος των ταλαντώσεων μικραίνουν, πράγμα που απεικονίζεται στο Σχήμα 3.6.

Ας δούμε τώρα τι συμβαίνει όταν μικρύνουμε το μέγεθος της διαταραχής δηλαδή τη



Σχήμα 3.6: 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 πλάτος τους  $A = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$ . Εντελώς τυπικά θέσαμε στο σχήμα  $\Omega_R = 1 \text{ s}^{-1}$ , και  $\Delta = 0.5 \text{ s}^{-1}$  αλλά αυτές οι τιμές δεν έχουν κάποια σχέση με τις τιμές των  $\Omega_R, \Delta$  σε πραγματικά συστήματα. Παρατηρούμε τις αλλαγές στην περίοδο και στο πλάτος όταν το δισταθμικό σύστημα βρίσκεται εκτός συντονισμού. Στο Παράρτημα Γ' υπάρχει το προγραμματάκι *matlab Oscillations.m* που δημιουργεί την παρούσα εικόνα.

συχνότητα Rabi  $\Omega_R$ , σε σχέση με την απόλυτη τιμή του detuning  $|\Delta|$  ( $\Omega_R \ll |\Delta|$ ).

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \sin^2 \left( \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t \right) \approx \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2} \sin^2 \left( \frac{\Delta t}{2} \right), \quad \Omega_R \ll |\Delta| \quad (3.79)$$

Οπότε η περίοδος γίνεται  $T_R = 2\pi/|\Delta|$ . Η Εξ. 3.79 ταυτίζεται με την Εξ. 3.82

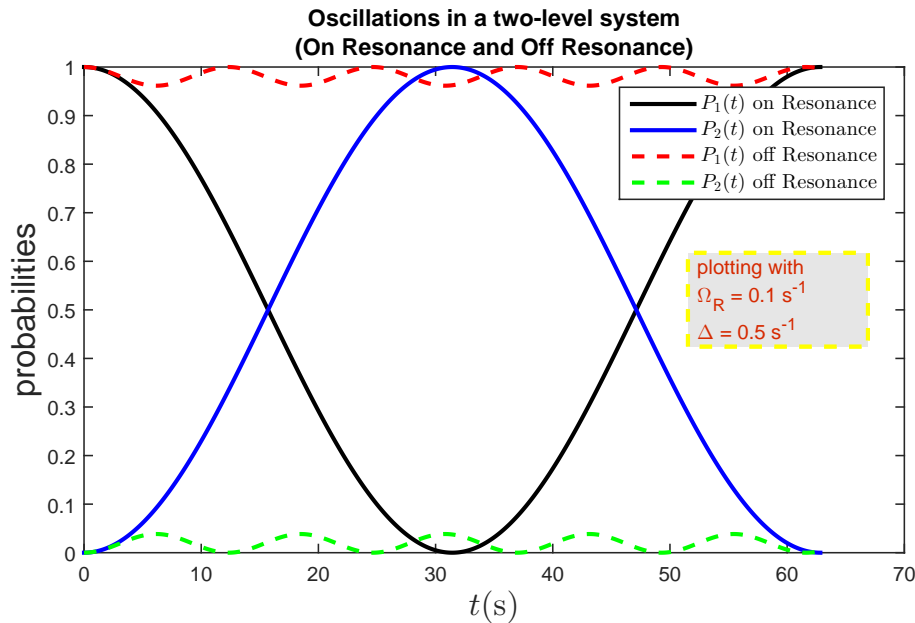
της Ενότητας 3.5 η οποία προκύπτει με την παραδοχή ότι μιλάμε για πολύ μικρούς χρόνους ώστε η λύση να μην απέχει πολύ από τις αρχικές συνθήκες. Αυτή η ταύτιση οφείλεται στο ότι για πολύ μικρό  $\Omega_R$  προκύπτει πολύ μεγάλη περίοδος  $T_R$  πράγμα το οποίο σημαίνει αργή χρονική εξέλιξη.

Περαιτέρω ας δούμε τι συμβαίνει στο όριο απειροελάχιστης διαταραχής.

$$\lim_{\Omega_R \rightarrow 0} T_R = \lim_{\Omega_R \rightarrow 0} \frac{2\pi}{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}} = \frac{2\pi}{|\Delta|} \quad (3.80)$$

$$\lim_{\Omega_R \rightarrow 0} \mathcal{A} = \lim_{\Omega_R \rightarrow 0} \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} = 0 \quad (3.81)$$

Δηλαδή στο όριο απειροελάχιστης διαταραχής το πλάτος των ταλαντώσεων μηδενίζεται, ενώ η περίοδός τους τείνει στο  $\frac{2\pi}{|\Delta|}$  δηλαδή εξαρτάται μόνο από το detuning. Για να πάρουμε μια ιδέα του τι συμβαίνει για μικρά  $\Omega_R$ , παραθέτουμε το Σχήμα 3.7.



Σχήμα 3.7: Ταλαντώσεις διαταθμικού 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 πλάτος τους  $\mathcal{A} = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2}$ . Εντελώς τυπικά θέσαμε στο σχήμα  $\Omega_R = 0.1 \text{ s}^{-1}$ , και  $\Delta = 0.5 \text{ s}^{-1}$  δηλαδή σχετικά μικρό  $\Omega_R$ . Στο Παράρτημα Γ' υπάρχει το προγραμματάκι `matlab Oscillations.m` που δημιουργεί την παρούσα εικόνα.

### 3.5 Λύση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων που προκύπτουν μετά την RWA με την απλοϊκή επαναληπτική μέθοδο Newton.

Ας θυμηθούμε το σύστημα διαφορικών εξισώσεων που προέκυψε μετά την RWA (Εξ. 3.57) το οποίο λύσαμε ακριβώς στην Ενότητα 3.4:

$$\begin{aligned} \dot{C}_1(t) &= C_2(t) \frac{i\mathcal{E}_0\mathcal{P}}{2\hbar} e^{-i(\Omega-\omega)t} & \Omega_R &:= \frac{\mathcal{P}\mathcal{E}_0}{\hbar} \\ \dot{C}_2(t) &= C_1(t) \frac{i\mathcal{E}_0\mathcal{P}}{2\hbar} e^{i(\Omega-\omega)t} & \Delta &:= \omega - \Omega \end{aligned}$$

Εδώ θα λύσουμε τις Εξισώσεις 3.57 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

$$\begin{aligned} \dot{C}_1^{(1)}(t) &= \cancel{C_2^{(0)}(t)} \overset{0}{\nearrow} \frac{i\Omega_R}{2} e^{i\Delta t} = 0 \\ \dot{C}_2^{(1)}(t) &= \cancel{C_1^{(0)}(t)} \overset{1}{\nearrow} \frac{i\Omega_R}{2} e^{-i\Delta t} \Rightarrow \int_0^t \frac{dC_2^{(1)}(t)}{dt} dt = \frac{i\Omega_R}{2} \int_0^t e^{-i\Delta t} dt \Rightarrow \\ C_2^{(1)}(t') - \cancel{C_2^{(1)}(0)} \overset{0}{\nearrow} &= \frac{i\Omega_R}{2} \frac{1}{-i\Delta} [e^{-i\Delta t}]_0^{t'} = -\frac{\Omega_R}{2\Delta} (e^{-i\Delta t'} - 1) \Rightarrow \\ \left. \begin{aligned} C_2^{(1)}(t) &= -\frac{\Omega_R}{2\Delta} (e^{-i\Delta t} - 1) \\ \star e^{ix} - 1 &= 2i \sin\left(\frac{x}{2}\right) e^{i\frac{x}{2}} \end{aligned} \right\} \Rightarrow C_2^{(1)}(t) &= -\frac{\Omega_R}{2\Delta} 2i \sin\left(\frac{-\Delta t}{2}\right) e^{-\frac{i\Delta t}{2}} \Rightarrow \\ &= \frac{\Omega_R}{\Delta} i \sin\left(\frac{\Delta t}{2}\right) e^{-\frac{i\Delta t}{2}}. \end{aligned}$$

★ Η απόδειξη στο Παράρτημα Β'. Συνεπώς

$$P_2^{(1)}(t) = |C_2^{(1)}(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \quad \text{ή} \quad P_2^{(1)}(t) = |C_2^{(1)}(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)}{\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2} t^2 \quad (3.82)$$

Η Εξ. 3.82 ταυτίζεται με την Εξ. 3.79 της Ενότητας 3.4 η οποία ισχύει για πολύ μικρό  $\Omega_R$  οπότε προκύπτει πολύ μεγάλη περίοδος  $T_R$  πράγμα το οποίο σημαίνει αργή χρονική εξέλιξη.

### 3.6 Υπολογισμός των συντελεστών Einstein.

Ας λάβουμε ως αφετηρία τις εξισώσεις

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2} \sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \quad \text{ή} \quad P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2\left(\frac{\Delta t}{2}\right)}{\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2} t^2 \quad (3.83)$$

οι οποίες ισχύουν για πολύ μικρό μέγεθος διαταραχής, το οποίο εκφράζει η  $\Omega_R$ , οπότε προκύπτει πολύ μεγάλη περίοδος  $T_R = 2\pi/|\Delta|$ , πράγμα το οποίο σημαίνει αργή χρονική εξέλιξη. (Όπως είδαμε στην προηγούμενη Ενότητα 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 ★ ΑΝΤΙΚΑΘΙΣΤΟΤΜΕ ★

$$\mathcal{E}_0^2 = \int_{\Omega-\text{κάτι}}^{\Omega+\text{κάτι}} d\omega \frac{\rho(\omega)}{\varepsilon_0}.$$

$\varepsilon_0$  είναι η διηλεκτρική σταθερά του κενού με μονάδες  $[\varepsilon_0] = \frac{C^2}{Nm^2}$  και  $\rho$  η πυκνότητα ενέργειας ΗΜ ακτινοβολίας σε στοιχειώδη περιοχή κυκλικής συχνότητας με μονάδες

$$[\rho] = \frac{Js}{m^3}. \text{ Άρα } \left[ \int d\omega \frac{\rho(\omega)}{\varepsilon_0} \right] = \frac{(1/s) J Nm^2}{m^3 (1/s) C^2} = \frac{JN}{mC^2} = \frac{N^2 m}{mC^2} = \frac{N^2}{C^2} = \left[ \mathcal{E}_0^2 \right].$$

Άρα, από την Εξ. 3.83 καταλήγουμε στην

$$P_2(t) = |C_2(t)|^2 = \frac{\mathcal{P}^2}{4\hbar^2} \int_{\Omega-\kappa\acute{\alpha}\tau\iota}^{\Omega+\kappa\acute{\alpha}\tau\iota} d\omega \frac{\rho(\omega)}{\varepsilon_0} \frac{\sin^2\left(\frac{(\omega-\Omega)t}{2}\right)}{\left(\frac{(\omega-\Omega)t}{2}\right)^2} t^2. \quad (3.84)$$

Θέτουμε

$$x := \frac{(\omega - \Omega)t}{2} \Rightarrow \omega = \frac{2x}{t} + \Omega \Rightarrow d\omega = \frac{2}{t} dx. \quad (3.85)$$

Άρα

$$P_2(t) = \frac{\mathcal{P}^2}{4\hbar^2} \frac{2}{t} \frac{t^2}{\varepsilon_0} \int_{-\kappa\acute{\alpha}\tau\iota(t/2)}^{+\kappa\acute{\alpha}\tau\iota(t/2)} dx \rho(x) \frac{\sin^2 x}{x^2} \Rightarrow$$

$$P_2(t) = \frac{\mathcal{P}^2 t}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \int_{-\kappa\acute{\alpha}\tau\iota(t/2)}^{+\kappa\acute{\alpha}\tau\iota(t/2)} dx \rho(x) \boxed{\frac{\sin^2 x}{x^2}} \simeq \pi \delta(x) \star$$

★ Για την προσέγγιση της  $\delta(x)$  συμβουλευθείτε το Παράρτημα Β΄.

$$x = 0 \Rightarrow \frac{\omega - \Omega}{2} t = 0 \left. \begin{array}{l} \Rightarrow \omega = \Omega \\ \text{όμως } t \text{ πεπερασμένος} \end{array} \right\} \Rightarrow P_2(t) = \frac{\mathcal{P}^2 t \pi}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \rho(\Omega) \Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{dP_2(t)}{dt} = \frac{\mathcal{P}^2 \pi}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \rho(\Omega)}$$

Η ΗΜ ακτινοβολία που προέρχεται από μέλαν σώμα δεν είναι πολωμένη, εν γένει. Συνεπώς, κατά ένα 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 απορροφήσεως είναι

$$\begin{aligned} dW_{\text{απορ}}^{\varepsilon\xi} &= B_{12} \rho(\nu) dt \Rightarrow \\ \frac{dW_{\text{απορ}}^{\varepsilon\xi}}{dt} &= B_{12} \rho(\nu) \\ \text{για } \omega &= \Omega \quad \boxed{\frac{dW_{\text{απορ}}^{\varepsilon\xi}}{dt} = B_{12} \rho(\Omega)} \end{aligned}$$

Άρα

$$\left. \begin{aligned} \frac{dP_2(t)}{dt} &= \frac{\mathcal{P}^2 \pi}{2\hbar^2 \varepsilon_0} \frac{\rho(\Omega)}{3} \\ \frac{dW_{\text{απορ}}^{\varepsilon\xi}}{dt} &= B_{12} \rho(\Omega) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{B_{12} = \frac{\mathcal{P}^2 \pi}{6\hbar^2 \varepsilon_0}} \quad (3.86)$$

ενώ υπενθυμίζεται ότι είχαμε βρει

$$\boxed{\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3}} \quad (3.87)$$

και

$$\boxed{B_{12} = B_{21}} \quad (3.88)$$

Παρά τις απλουστεύσεις που χρειάστηκαν για τον υπολογισμό, η ουσία είναι ότι είναι δυνατόν να υπολογιστούν οι συντελεστές Einstein ενός δισταθμικού συστήματος.

### 3.7 Υπολογισμός των συντελεστών Einstein χρησιμοποιώντας τις λύσεις που προέκυψαν στην Ενότητα 3.4

Ας παραθέσουμε την Εξ. 3.77 της Ενότητας 3.4 και την Εξ. 3.83 της Ενότητας 3.6. Η Εξ. 3.77 μπορεί κι αυτή να γραφεί με ανάλογο τρόπο με την Εξ. 3.83 ήτοι

$$\begin{aligned}
 P_2(t) &= |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Omega_R^2 + \Delta^2} \sin^2 \left( \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t \right) \quad \text{ή} \\
 P_2(t) &= |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2 \left( \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t \right)}{\left( \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t \right)^2} t^2
 \end{aligned} \tag{3.89}$$

όπως δηλαδή γράφαμε

$$\begin{aligned}
 P_2(t) &= |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Delta^2} \sin^2 \left( \frac{\Delta t}{2} \right) \quad \text{ή} \\
 P_2(t) &= |C_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{4} \frac{\sin^2 \left( \frac{\Delta t}{2} \right)}{\left( \frac{\Delta t}{2} \right)^2} t^2
 \end{aligned} \tag{3.90}$$

Όπως είναι φανερό, υπάρχει αναλογία μεταξύ των δευτέρων εκδοχών των  $P_2(t)$ . Μπορούμε λοιπόν να ορίσουμε

$$x := \frac{\sqrt{\Omega_R^2 + \Delta^2}}{2} t. \tag{3.91}$$

όπως είχαμε ορίσει

$$x := \frac{\Delta t}{2} \tag{3.92}$$

στην προηγούμενη Ενότητα 3.6 (Εξ. 3.85). Οπότε ο υπολογισμός του  $B_{12}$  θα γινόταν όπως έγινε και στην προηγούμενη Ενότητα 3.6.

### 3.8 Επιτρεπόμενες και Απαγορευμένες Οπτικές Μεταβάσεις εντός της Προσεγγίσεως Διπόλου.

Υπενθυμίζουμε τα έως τώρα βήματα στην προσέγγιση διπόλου τα οποία αναφέρθηκαν στην Ενότητα 3.3

$$\left. \begin{array}{l} \vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_a \exp [i(\vec{k} \cdot \vec{r}_H - \omega t + \phi)] \\ \vec{r}_H \simeq \vec{R} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \exp(-i\omega t) = \vec{\mathcal{E}}(t) \\ \vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla} V \\ dV = \vec{\nabla} V \cdot d\vec{r} \end{array} \right\} dV = -\vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{r} \left. \right\} \dots \Rightarrow \underset{\text{δυναμικό}}{V} = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} \Rightarrow$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{δυναμική ενέργεια} \\ U \\ \text{ηλεκτρονίου} \end{array} = e \vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} = -\vec{\mathcal{P}} \cdot \vec{\mathcal{E}} \quad (\clubsuit)}$$

δηλαδή η Εξ. 3.42. 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 ποιές 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  $U_{\mathcal{E}k'k}(t) = 0$ , τότε η διαταραχή δεν συζεύγει τις καταστάσεις  $k'$  και  $k$ , οπότε, εάν το ηλεκτρόνιο ήταν στην  $k$  δεν θα μεταβεί στην  $k'$ , και αντιστρόφως. Οπότε εάν  $U_{\mathcal{E}k'k}(t) = 0$  λέμε ότι “ απαγορεύεται η μετάβαση ”  $k' \longleftrightarrow k$ .

### 3.9 “ Ιδιοενέργειες ” διαταραγμένου δισταθμικού συστήματος (δηλαδή με ΗΜ πεδίο).

Έστω ότι θέλουμε να λύσουμε το πρόβλημα  $\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$ , υποθέτοντας ότι μπορούμε να αναπτύξουμε την  $\Psi(\vec{r})$  συναρτήσεως των ιδιοσυναρτήσεων του αδιατάρακτου προβλήματος  $\Phi_k(\vec{r})$  με χρονικά ανεξάρτητους συντελεστές  $g_k$ . Τότε

$$\left. \begin{array}{l} \hat{H} = \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \\ \hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \\ \Psi(\vec{r}) = \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \left[ \hat{H}_0 + U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \right] \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) = E \left[ \sum_k g_k \Phi_k(\vec{r}) \right] \\ \text{Ας εκμεταλλευτούμε ότι οι } \Phi_k(\vec{r}) \text{ είναι ορθοκανονικές.} \\ \text{Πολλαπλασιάζουμε με } \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \text{ και ολοκληρώνουμε στο χώρο.} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

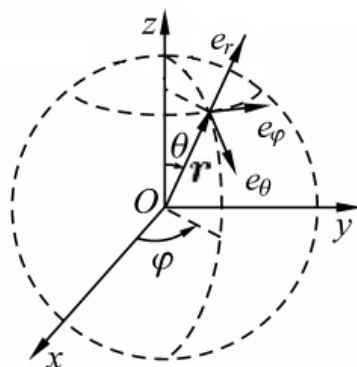
$$\left. \begin{array}{l} \sum_k g_k \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \hat{H}_0 \Phi_k(\vec{r}) + \sum_k g_k \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) = E \sum_k g_k \int d^3r \Phi_{k'}^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) \\ \Rightarrow \sum_k g_k E_k \delta_{k'k} + \sum_k g_k U_{\mathcal{E}k'k}(t) = E \sum_k g_k \delta_{k'k} \Rightarrow \boxed{g_{k'} E_{k'} + \sum_k g_k U_{\mathcal{E}k'k}(t) = E g_{k'}} \\ \left. \begin{array}{l} \text{εάν έχουμε προσέγγιση διπόλου } U = -\vec{p} \cdot \vec{\mathcal{E}} = +e\vec{r} \cdot \vec{\mathcal{E}}_0 e^{-i\omega t} = U_{\mathcal{E}}(\vec{r}, t) \\ U_{\mathcal{E}k'k}(t) = e e^{-i\omega t} \vec{\mathcal{E}}_0 \cdot \vec{r}_{k'k} \end{array} \right\} \Rightarrow$$

αν λάβουμε τη μέση χρονική τιμή σε μια περίοδο  $\frac{2\pi}{\omega}$  του ΗΜ πεδίου, τότε  $\boxed{\langle E \rangle = E_{k'}}$

Δηλαδή κατά μέσο όρο δεν επηρεάζονται οι ιδιοενέργειες.

### 3.10 Άτομο Υδρογόνου: Μορφή ατομικών τροχιακών.

Στο Σχήμα 3.8 φαίνονται οι σφαιρικές συντεταγμένες  $(r, \theta, \varphi)$  όπως συνήθως χρησιμοποιούνται στη φυσική: η απόσταση  $r$  από την αρχή των αξόνων  $O$ , η πολική γωνία  $\theta$ , η αζιμουθιακή γωνία  $\varphi$ . Σημειώνονται και τα μοναδιαία ανύσματα  $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$ .



Σχήμα 3.8: Οι σφαιρικές συντεταγμένες  $(r, \theta, \varphi)$ : η απόσταση από το κέντρο  $r$ , η πολική γωνία  $\theta$ , η αζιμουθιακή γωνία  $\varphi$ . Σημειώνονται και τα μοναδιαία ανύσματα  $\hat{e}_r, \hat{e}_\theta, \hat{e}_\varphi$ .

Οι ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου σε σφαιρικές συντεταγμένες έχουν τη μορφή

$$\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m}(\theta)\Phi_m(\varphi)$$

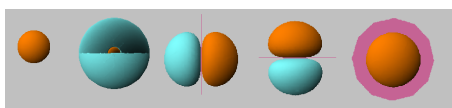
οι οποίες είναι δηλαδή τα  $\Phi_k(\vec{r})$  του γενικού συμβολισμού, όπου  $k = \{n, \ell, m\}$  είναι ο συλλογικός κβαντικός αριθμός. Αναλυτικότερα

- $n = 1, 2, 3, \dots$  είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός
- $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$  είναι ο τροχιακός κβαντικός αριθμός, και
- $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$  είναι ο μαγνητικός κβαντικός αριθμός

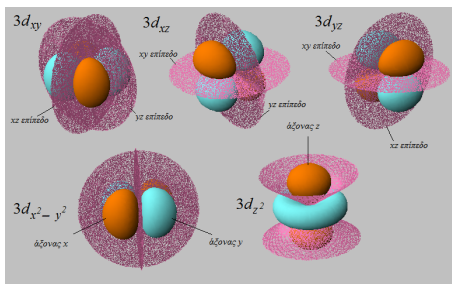
Συγκεκριμένα παρατίθενται παρακάτω τα ατομικά τροχιακά  $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$  [59].

$$\begin{aligned}
 \Psi_{100}(r, \theta, \varphi) &= (\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} & \Psi_{100} &:= 1s \\
 \Psi_{200}(r, \theta, \varphi) &= (32 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} & \Psi_{200} &:= 2s \\
 \Psi_{210}(r, \theta, \varphi) &= (32 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}} & \Psi_{210} &:= 2p_z \\
 \Psi_{21\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= (64 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \frac{r}{a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}} & (\Psi_{21+1} + \Psi_{21-1})/\sqrt{2} &:= 2p_x \\
 & & (\Psi_{21+1} - \Psi_{21-1})/(i\sqrt{2}) &:= 2p_y \\
 \Psi_{300}(r, \theta, \varphi) &= (19683 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(27 - 18\frac{r}{a_0} + 2\frac{r^2}{a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}} & \Psi_{300} &:= 3s \\
 \Psi_{310}(r, \theta, \varphi) &= (6561 \pi a_0^3/2)^{-\frac{1}{2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos \theta & \Psi_{310} &:= 3p_z \\
 \Psi_{31\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= (6561 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(6 - \frac{r}{a_0}\right) \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} & (\Psi_{31+1} + \Psi_{31-1})/\sqrt{2} &:= 3p_x \\
 & & (\Psi_{31+1} - \Psi_{31-1})/(i\sqrt{2}) &:= 3p_y \\
 \Psi_{320}(r, \theta, \varphi) &= (39366 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} (3 \cos^2 \theta - 1) & \Psi_{320} &:= 3d_{z^2} \\
 \Psi_{32\pm 1}(r, \theta, \varphi) &= (6561 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\varphi} & (\Psi_{32+1} + \Psi_{32-1})/\sqrt{2} &:= 3d_{xz} \\
 & & (\Psi_{32+1} - \Psi_{32-1})/(i\sqrt{2}) &:= 3d_{yz} \\
 \Psi_{32\pm 2}(r, \theta, \varphi) &= (26244 \pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{r}{3a_0}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\varphi} & (\Psi_{32+2} + \Psi_{32-2})/\sqrt{2} &:= 3d_{x^2-y^2} \\
 & & (\Psi_{32+2} - \Psi_{32-2})/(i\sqrt{2}) &:= 3d_{xy}
 \end{aligned}$$

Εννοείται ότι οι ιδιοσυναρτήσεις μπορούν να πολλαπλασιαστούν με ένα παράγοντα  $e^{ia}$ , όπου  $a$  μια αυθαίρετη φάση, παραμένοντας ιδιοσυναρτήσεις. Οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες είναι  $E_k = \hbar\Omega_k = -\frac{R_E}{n^2} = E_n$  δηλαδή υπάρχει εκφυλισμός ως προς  $\ell, m$ .  $R_E = 13.6$  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 στο Σχήμα 3.9, τα πέντε ατομικά τροχιακά  $3d$  στο Σχήμα 3.10, ενώ όλα τα ατομικά τροχιακά υδρογονοειδών κυματοσυναρτήσεων έως το  $7s$ , απεικονίζονται στο Σχήμα 3.11.



Σχήμα 3.9: Τα πέντε πρώτα ατομικά τροχιακά  $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$  [60]. Τα χρώματα (πορτοκαλί, γαλανό) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η πορτοκαλί περιοχή είναι θετική, η γαλανή είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα  $e^{ia} = 1$ .



Σχήμα 3.10: Τα πέντε ατομικά τροχιακά  $3d$  [60]. Τα χρώματα (πορτοκαλί, γαλανό) αντιστοιχούν σε διαφορετικά πρόσημα, αν π.χ. η πορτοκαλί περιοχή είναι θετική, η γαλανή είναι αρνητική. Θεωρούμε τον παράγοντα  $e^{ia} = 1$ .

	$s$ ( $l = 0$ )	$p$ ( $l = 1$ )			$d$ ( $l = 2$ )					$f$ ( $l = 3$ )						
	$m = 0$	$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = 0$	$m = \pm 1$		$m = \pm 2$		$m = \pm 3$	
	$s$	$p_z$	$p_x$	$p_y$	$d_{z^2}$	$d_{xz}$	$d_{yz}$	$d_{xy}$	$d_{x^2-y^2}$	$f_{z^3}$	$f_{xz^2}$	$f_{yz^2}$	$f_{xyz}$	$f_{z(x^2-y^2)}$	$f_{x(x^2-3y^2)}$	$f_{y(3x^2-y^2)}$
$n = 1$	•															
$n = 2$	•															
$n = 3$	•															
$n = 4$																
$n = 5$										...	...	...	...	...	...	...
$n = 6$					...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
$n = 7$		...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...

Σχήμα 3.11: Όλα τα ατομικά τροχιακά υδρογονοειδών κυματοσυναρτήσεων έως το  $7s$ . Τα χρώματα (κόκκινο, μπλε) 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 [61].

### 3.11 Άτομο Υδρογόνου:

Υπολογισμός των στοιχείων πίνακα της διπολικής ροπής.

Επιτρεπόμενες και απαγορευμένες οπτικές μεταβάσεις. Κανόνες επιλογής.

Θα χρησιμοποιήσουμε ως παράδειγμα - άσκηση το άτομο του Υδρογόνου. Θεωρείστε τις ιδιοσυναρτήσεις του ατόμου του Υδρογόνου

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r)\Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi) = \Phi_k(\vec{r})$$

όπου

- $k = \{n, \ell, m\}$  ο συλλογικός κβαντικός αριθμός. Δηλαδή
- $n = 1, 2, 3, \dots$  είναι ο κύριος κβαντικός αριθμός
- $\ell = 0, 1, 2, \dots, n - 1$  είναι ο τροχιακός κβαντικός αριθμός, και
- $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$  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  $\ell, m$ .  $R_E = 13.6$  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  $\vec{P} = -e\vec{r}$ , δηλαδή τα  
 $\vec{P}_{k_1 k_2} := \int_{\text{παντού}} dV \Phi_{k_1}^*(\vec{r}) (-e)\vec{r} \Phi_{k_2}(\vec{r})$ .  
 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  $\vec{P}_{100\ 210}$  και  $\vec{P}_{100\ 21\pm 1}$
- 7) Είναι τα μέτρα των  $\vec{P}_{100\ 210}$  και  $\vec{P}_{100\ 21\pm 1}$  ίσα;

Θεωρήστε δεδομένα

$$A') \int_0^{\infty} e^{-\gamma r} r^n dr = \gamma^{-(n+1)} n! \quad \text{όπου } n = 1, 2, 3, \dots \text{ και } \gamma > 0.$$

B') σε σφαιρικές συντεταγμένες  $(r, \theta, \varphi)$ , 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

$$\vec{r} = \frac{r}{2} \sin \theta [(\hat{x} - i\hat{y})e^{i\varphi} + (\hat{x} + i\hat{y})e^{-i\varphi}] + r \cos \theta \hat{z}.$$

Χρησιμοποιούμε την **αλλαγή μεταβλητής**  $q = \frac{r}{a_0}$  και τις **συντομογραφίες**  $n'\ell'm'\ell m := \int d^3r \Psi_{n'\ell'm'}^*(\vec{r}) \Psi_{n\ell m}(\vec{r})$  και  $n'\ell'm'\vec{r}n\ell m := \int d^3r \Psi_{n'\ell'm'}^*(\vec{r}) \vec{r} \Psi_{n\ell m}(\vec{r})$ .

[Απάντηση 1]

$$\begin{aligned}
 100100 &:= \int d^3r \Psi_{100}^*(\vec{r}) \Psi_{100}(\vec{r}) = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} = \\
 &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\infty dr r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \frac{a_0^3}{\pi a_0^3} \int_0^\infty dq q^2 e^{-2q} [-\cos \theta]_0^\pi 2\pi \\
 &= 2 \int_0^\infty dq q^2 e^{-2q} [-\cos \pi + \cos 0] = 4 \int_0^\infty dq q^2 e^{-2q} \stackrel{*}{=} 4 \frac{2!}{2^{2+1}} = 1
 \end{aligned}$$

\* Χρησιμοποιήσαμε το δεδομένο  $A'$  με  $\gamma = 2, n = 2$ . Δηλαδή η 100 είναι κανονικοποιημένη, όπως αναμενόταν. Ομοίως ελέγχεται η κανονικοποίηση των υπολοίπων, υπολογίζοντας τα 200200, 210210, 21±121±1, 300300.

[Απάντηση 2] Ο έλεγχος της ομοτιμίας γίνεται με τη βοήθεια του δεδομένου  $B'$ . 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

$\Psi_{100}(-\vec{r}) = \Psi_{100}(\vec{r})$	*	άρτια
$\Psi_{200}(-\vec{r}) = \Psi_{200}(\vec{r})$	*	άρτια
$\Psi_{300}(-\vec{r}) = \Psi_{300}(\vec{r})$	*	άρτια
$\Psi_{210}(-\vec{r}) = -\Psi_{210}(\vec{r})$	**	περιττή
$\Psi_{21\pm 1}(-\vec{r}) = -\Psi_{21\pm 1}(\vec{r})$	***	περιττή

\* 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 περιττότητα της οφείλεται στο  $\varphi$ . Δηλαδή δείξαμε ότι οι 1s, 2s, 3s είναι άρτιες, ενώ η 2p<sub>z</sub> περιττή. Οι 2p<sub>x</sub> και 2p<sub>y</sub> 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.

[Απάντηση 3]  $\vec{r}_{k_1 k_2} := \int_{\text{παντού}} d^3r \Phi_{k_1}^*(\vec{r}) \vec{r} \Phi_{k_2}(\vec{r})$ . Στον Πίνακα 3.1 περιγράφονται συνοπτικά οι μεταβάσεις μεταξύ των πρώτων δύο φλοιών δηλαδή για  $n = 1, 2$ . (A) 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 3.1: Επιτρεπόμενες (ΕΠΙΤΡ.) και απαγορευμένες (ΑΠΑΓ.) οπτικές μεταβάσεις στο άτομο του Υδρογόνου, μεταξύ των φλοιών 1 και 2, στα πλαίσια της προσεγγίσεως διπόλου. Το \* σημαίνει ότι στο άτομο του υδρογόνου η αρχική και η τελική κατάσταση αντιστοιχούν στην ίδια ενέργεια, είναι δηλαδή εκφυλισμένες, οπότε δεν υπάρχουν τέτοιες μεταβάσεις. Οι  $2p_x$  και  $2p_y$  κατασκευάζονται από το άθροισμα ή την διαφορά των  $21 \pm 1$ .

$k_1 = \{n_1, \ell_1, m_1\}$	$k_2 = \{n_2, \ell_2, m_2\}$	$\Phi_{k_1}^*(\vec{r})$	$\Phi_{k_2}(\vec{r})$	$\Phi_{k_1}^*(\vec{r}) \vec{r} \Phi_{k_2}(\vec{r})$	$\vec{r}_{k_1 k_2}$	$\Delta\ell$	$\Delta m$
100 1s	200 2s	(A)	(A)	(Π) ΑΠΑΓ.	0	0	0
100 1s	210 2p <sub>z</sub>	(A)	(Π)	(A) ΕΠΙΤΡ.	≠ 0	1	0
100 1s	21 ± 1 2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub>	(A)	(Π)	(A) ΕΠΙΤΡ.	≠ 0	1	±1
100 1s	300 3s	(A)	(A)	(Π) ΑΠΑΓ.	0	0	0
200 2s	210 2p <sub>z</sub>	(A)	(Π)	(A) ΕΠΙΤΡ. *	≠ 0	1	0
200 2s	21 ± 1 2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub>	(A)	(Π)	(A) ΕΠΙΤΡ. *	≠ 0	1	±1
200 2s	300 3s	(A)	(A)	(Π) ΑΠΑΓ.	0	0	0
210 2p <sub>z</sub>	21 ± 1 2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub>	(Π)	(Π)	(Π) ΑΠΑΓ.	0	0	±1
210 2p <sub>z</sub>	300 3s	(Π)	(A)	(A) ΕΠΙΤΡ.	≠ 0	-1	0
21 ± 1 2p <sub>x</sub> , 2p <sub>y</sub>	300 3s	(Π)	(A)	(A) ΕΠΙΤΡ.	≠ 0	-1	∓1

[Απάντηση 4]

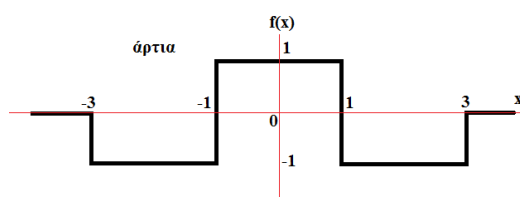
$$\begin{aligned}
 100200 &:= \int d^3r \Psi_{100}^{(A)*} \Psi_{200}^{(A)} = \frac{1}{\pi a_0^3 \sqrt{32}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} = \\
 &= \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} 4\pi \int_0^\infty r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} dr \stackrel{\text{θέτουμε}}{q=\frac{r}{a_0}} \frac{a_0^3}{a_0^3 \sqrt{2}} \int_0^\infty q^2 \cdot e^{-q} (2 - q) e^{-\frac{q}{2}} dq \\
 &= \frac{2}{\sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-\frac{3q}{2}} q^2 dq - \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^\infty e^{-\frac{3q}{2}} q^3 dq = \sqrt{2} \frac{2!}{\frac{3}{2}^{2+1}} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{3!}{\frac{3}{2}^{3+1}} = 0
 \end{aligned}$$

Χρησιμοποιήσαμε το δεδομένο  $A'$ , εδώ με  $\gamma = \frac{3}{2}$ ,  $n = 2$  και  $\gamma = \frac{3}{2}$ ,  $n = 3$ . Δείξαμε δηλαδή ότι  $100200 = 0$ , άρα οι  $\Psi_{100}$  και  $\Psi_{200}$  είναι ορθογώνιες, όπως αναμενόταν. Ομοίως υπολογίζονται και τα υπόλοιπα εσωτερικά γινόμενα μεταξύ των διαφορετικών ιδιοσυναρτήσεων, τα οποία πράγματι μηδενίζονται.

ΣΗΜΕΙΩΣΗ: Το ολοκλήρωμα σε όλο το χώρο μιας άρτιας συναρτήσεως δεν είναι εκ ταυτότητας μηδέν. Αυτό δεν σημαίνει ότι δεν μπορεί να μηδενίζεται, π.χ. δείτε το Σχήμα 3.12. Ενώ, το ολοκλήρωμα σε όλο το 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  $y = -x$



Σχήμα 3.12: Το ολοκλήρωμα σε όλο το χώρο μιας άρτιας συναρτήσεως δεν είναι εκ ταυτότητας μηδέν, αλλά μπορεί να μηδενίζεται, όπως π.χ. της εικονιζομένης άρτιας συναρτήσεως.

[Απάντηση 5]  $\vec{P}_{k'k} = -e\vec{r}_{k'k}$ , οπότε ο υπολογισμός των  $\vec{P}_{100210}$  και  $\vec{P}_{10021\pm 1}$  ανάγεται στον υπολογισμό των  $\vec{r}_{100210}$  και  $\vec{r}_{10021\pm 1}$ , αντιστοίχως.

$$\vec{r}_{100210} = 100 \vec{r}^2 210 =$$

$$\begin{aligned} \int d^3r \Psi_{100}^* \vec{r} \Psi_{210} &= \frac{1}{\pi a_0^3 \sqrt{32}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \underbrace{\vec{r}}_{\text{δεδομένο } \Gamma'} \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ &= \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \left\{ \frac{r}{2} \sin \theta [(\hat{x} - i\hat{y})e^{i\varphi} + (\hat{x} + i\hat{y})e^{-i\varphi}] + r \cos \theta \hat{z} \right\} \\ &\quad \frac{r}{a_0} \cos \theta e^{-\frac{r}{2a_0}} \\ &= \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} \underbrace{\int_0^\infty r^2 dr e^{-\frac{r}{a_0}} r \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}}_{I(r)} \left\{ \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin^2 \theta d\theta d\varphi \frac{1}{2} [(\hat{x} - i\hat{y})e^{i\varphi} + (\hat{x} + i\hat{y})e^{-i\varphi}] \cos \theta \right. \\ &\quad \left. + \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\varphi \cos^2 \theta \hat{z} \right\} \end{aligned}$$

Χρησιμοποιούμε τώρα το δεδομένο  $A'$ , εδώ με  $\gamma = \frac{3}{2}$  και  $n = 4$ .

$$I(r) = a_0^4 \int_0^\infty q^2 dq e^{-q} q q e^{-\frac{q}{2}} = a_0^4 \int_0^\infty q^4 dq e^{-\frac{3q}{2}} = a_0^4 \frac{4!}{\left(\frac{3}{2}\right)^{4+1}} = a_0^4 \frac{2 \cdot 3 \cdot 4}{3^5} 2^5 = a_0^4 \frac{2^8}{3^4}$$

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm i\varphi} d\varphi = \left[ \frac{e^{\pm i\varphi}}{i} \right]_0^{2\pi} = 0$$

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \cos^2 \theta d\theta \hat{z} = 2\pi \hat{z} \int_1^{-1} \frac{d(\cos^3 \theta)}{3} \cdot (-1) = \frac{2\pi \hat{z}}{3} \int_1^{-1} dy = \frac{2\pi \hat{z}}{3} [y]_{-1}^1 =$$

$$\frac{4\pi \hat{z}}{3} \frac{d(\cos^3 \theta)}{3} = 3 \cos^2 \theta (-1) \sin \theta \Rightarrow \frac{d(\cos^3 \theta)}{-3} = \cos^2 \theta \sin \theta d\theta$$

Άρα

$$\vec{r}_{100210} = \frac{1}{4\pi a_0^3 \sqrt{2}} a_0^4 \cdot \frac{2^8}{3^4} \frac{4\pi \hat{z}}{3} = a_0 \hat{z} \frac{2^{15/2}}{3^5} \Rightarrow \vec{r}_{100210} = 100 \vec{r}_{210} = \frac{2^{15/2}}{3^5} a_0 \hat{z} \Rightarrow$$

$$\vec{p}_{100210} = -\frac{2^{15/2}}{3^5} e a_0 \hat{z} \text{ και } |\vec{p}_{100210}| = \frac{2^{15/2} e a_0}{3^5}$$

$$\begin{aligned} \vec{r}_{10021\pm 1} &= 100 \vec{r}_{21 \pm 1} = \int d^3r \Psi_{100}^* \vec{r} \Psi_{21\pm 1} \\ &= \frac{1}{(\pi a_0^3)^{1/2}} \frac{1}{8(\pi a_0^3)^{1/2}} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi e^{-\frac{r}{a_0}} \left\{ \frac{r}{2} \sin \theta [(\hat{x} - i\hat{y})e^{i\varphi} + (\hat{x} + i\hat{y})e^{-i\varphi}] \right. \\ &\quad \left. + r \cos \theta \hat{z} \right\} \frac{r}{a_0} \sin \theta e^{\pm i\varphi} e^{-\frac{r}{2a_0}} = \\ &= \frac{1}{8\pi a_0^3} \int_0^\infty dr r^2 e^{-\frac{r}{a_0}} r \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\varphi \left\{ \frac{\sin \theta}{2} [(\hat{x} - i\hat{y})e^{i\varphi} + (\hat{x} + i\hat{y})e^{-i\varphi}] + \cos \theta \hat{z} \right\} \sin \theta e^{\pm i\varphi} \\ &= \frac{a_0}{8\pi} \int_0^\infty dq q^4 e^{-\frac{3q}{2}} \cdot \text{γωνιακή εξάρτηση} = \frac{a_0}{8\pi} \frac{4!}{\left(\frac{3}{2}\right)^{4+1}} \cdot \text{γωνιακή εξάρτηση} \\ &= \frac{a_0}{\pi} \frac{2^5}{3^4} \cdot \text{γωνιακή εξάρτηση} \end{aligned}$$

Αλλά

$$\int_0^{2\pi} e^{\pm 2i\varphi} d\varphi = \left[ \frac{e^{\pm 2i\varphi}}{\pm 2i} \right]_0^{2\pi} = 0 \quad \text{και} \quad \int_0^{2\pi} e^{\pm i\varphi} d\varphi = \left[ \frac{e^{\pm i\varphi}}{\pm i} \right]_0^{2\pi} = 0$$

$$\text{γωνιακή εξάρτηση} = \int_0^{\pi} d\theta \frac{\sin^3 \theta}{2} \left[ 2\pi(\hat{x} \pm i\hat{y}) \right] = \pi[\hat{x} \pm i\hat{y}] \int_0^{\pi} d\theta \sin^3 \theta = \frac{4\pi}{3}[\hat{x} \pm i\hat{y}]$$

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin^3 \theta = \left[ \frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right]_0^{\pi} = -\frac{1}{3} + 1 - \frac{1}{3} + 1 = \frac{4}{3}$$

$$\text{διότι} \quad \frac{d}{d\theta} \left( \frac{\cos^3 \theta}{3} - \cos \theta \right) = -\cos^2 \theta \cdot \sin \theta + \sin \theta = \sin \theta [1 - \cos^2 \theta] = \sin^3 \theta$$

Άρα

$$\vec{r}_{10021\pm 1} = \frac{a_0}{\pi} \cdot \frac{2^5}{3^4} \frac{4\pi}{3} (\hat{x} \pm i\hat{y}) \Rightarrow \vec{r}_{10021\pm 1} = a_0 \frac{2^7}{3^5} (\hat{x} \pm i\hat{y})$$

$$\vec{p}_{10021\pm 1} = -e a_0 \frac{2^7}{3^5} (\hat{x} \pm i\hat{y}),$$

$$|\vec{p}_{10021\pm 1}| = e a_0 \frac{2^{15/2}}{3^5}$$

[Απάντηση 6] Άρα  $|\vec{p}_{100210}| = |\vec{p}_{10021\pm 1}|$