

Ελληνικό Ανοικτό Πανεπιστήμιο

Σχολή Θετικών Επιστημών

Μεταπτυχιακή Εξειδίκευση στις Π.Σ.Φ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

Φαινόμενα Αλληλεπίδρασης Η/Μ Πεδίου και Ύλης

Γεώργιος Ν. Κρεμμύδης

Επιβλέπων: Ιωάννης Μπάκας

Πάτρα

Σεπτέμβριος 2016

Περιεχόμενα

Μέρος Α

Αλληλεπίδραση H/M ακτινοβολίας με ύλη

- 1) Εισαγωγή του διανυσματικού δυναμικού στη κλασσική ηλεκτροδυναμική. Χαμιλτονιανή συστήματος φορτισμένων σωματιδίων και του H/M πεδίου που παράγεται από αυτά. (σελ 4-5).
- 2) Ανάλυση Fourier του διανυσματικού δυναμικού. (σελ. 5-6)
- 3) Υπολογισμός της χαμιλτονιανής του H/M πεδίου σε συνάρτηση με τις κανονικές μεταβλητές P, Q . Ιστορικά σχόλια. (σελ. 6-8).
- 4) Η παρέμβαση Dirac. Εισαγωγή των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής, του τελεστή αρίθμησης και αναπαράσταση αυτών μέσω μητρών. (σελ. 9-12).
- 5) Εφαρμογή των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στις καταστάσεις φωτονίων. Συμβατότητα με τη μποζονική φύση του H/M πεδίου. (σελ. 12-14).
- 6) Τελεστές Φερμιονίων. (σελ. 14-16).
- 7) Μετάβαση από το κλασσικό πεδίο ακτινοβολίας στο κβαντικό πεδίο ακτινοβολίας. (σελ. 16-22).
- 8) Διακυμάνσεις και σχέσεις απροσδιοριστίας - σχόλια. (σελ. 22-26).
- 9) Ισχύς της κλασσικής προσέγγισης του H/M πεδίου. (σελ. 26-27).
- 10) Μηχανισμός απορρόφησης – εκπομπής φωτονίου από άτομο. Ισχύς της ημικλασσικής προσέγγισης και στις δύο προηγούμενες περιπτώσεις. (σελ. 27-31).

- 11) Εισαγωγή του ισοδύναμου κλασσικού δυναμικού. (σελ. 31-32).
- 12) Στοιχεία χρονοεξαρτώμενης θεωρίας διαταραχών. (σελ. 32-35).
- 13) Αυθόρμητη εκπομπή ακτινοβολίας (διπολική προσέγγιση). (σελ. 35-36)
- 14) Χαρακτηριστικά της αυθόρμητης εκπομπής ακτινοβολίας.
 - i) Υπολογισμός συνολικής πιθανότητας μετάβασης στη διπολική προσέγγιση.
 - ii) Υπολογισμός μέσου χρόνου ζωής μιας ατομικής κατάστασης. Εφαρμογή για τη κατάσταση $2P$ του H .
 - iii) Μετάβαση ηλεκτρικού τετραπόλου, εκπομπή μαγνητικού διπόλου. (σελ. 36-43)
- 15) Σχόλιο πάνω στην αυθόρμητη εκπομπή ακτινοβολίας. (σελ. 43-44)
- 16) Σκέδαση Η/Μ ακτινοβολίας σε άτομο. (σελ. 44-49)
- 17) Σκέδαση Rayleigh. (σελ. 50-52).
- 18) Σκέδαση Thomson. (σελ. 52-54).
- 19) Σύγκριση κβαντικής ανάλυσης των σκεδάσεων Rayleigh – Thomson με την αντίστοιχη κλασσική ανάλυση. (σελ. 55).
- 20) Φαινόμενο Raman. (σελ. 56-57).

Μέρος Β

Επίδραση σταθερού μαγνητικού πεδίου στην ύλη

- 21) Κίνηση ηλεκτρονίων σε μαγνητικό πεδίο. (σελ. 57-58)
- 22) Στάθμες Landau. (σελ. 58-60)
- 23) Εισαγωγή στο φαινόμενο Bohm – Aharonov. (σελ. 60-65)

- 24) Το αναλλοίωτο σε μετασχηματισμούς βαθμίδας. (σελ. 65-67)
- 25) Φαινόμενο Meisner. (σελ. 67-70)
- 26) Κβάντωση μαγνητικής ροής που διέρχεται από το εσωτερικό ενός υπεραγώγιμου δακτυλίου. (σελ. 70-72)

Μέρος Γ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

- 27) Αναλυτικός υπολογισμός των πλατών μετάβασης και της πιθανότητας μετάβασης από αρχική σε τελική κατάσταση. (σελ. 72-74)
- 28) Υπολογισμός των πλατών μετάβασης ανάμεσα σε καταστάσεις του ιδανικού διακριτού φάσματος. (σελ.74-77)
- 29) Κανόνας Fermi και απόδειξη αυτού. (σελ.77-84)
- 30) Βιβλιογραφία (σελ. 85)

Μέρος Α

Αλληλεπίδραση Η/Μ ακτινοβολίας με ύλη

Εισαγωγή του διανυσματικού δυναμικού στη κλασσική ηλεκτροδυναμική. Χαμιλτονιανή συστήματος φορτισμένων σωματιδίων και του Η/Μ πεδίου που παράγεται από αυτά

Για να μελετηθούν τα φαινόμενα της ακτινοβολίας στην περιοχή της κβαντικής φυσικής αρχίζουμε τη μελέτη των ιδιοτήτων του διανυσματικού δυναμικού το οποίο στο πλαίσιο της κλασσικής ηλεκτροδυναμικής ικανοποιεί τη βαθμίδα *Coulomb* $\nabla \mathbf{A} = 0$ (1). Η (1) ονομάζεται και συνθήκη εγκαρσιότητας. Τα ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία που προέρχονται από τη (1) ονομάζονται «πεδία ακτινοβολίας». Η συνθήκη (1) παρουσιάζει ενδιαφέρον κάτω από διαφορετικές περιστάσεις.

Ας υποθέσουμε αρχικά ότι $J_\mu = 0$

Έστω ο μετασχηματισμός βαθμίδας:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda \quad \text{και} \quad A_0 \rightarrow A'_0 = A_0 + \frac{1}{c} \frac{d\Lambda}{dt}$$

$$\text{τέτοιος ώστε} \quad A_0 = -\frac{1}{c} \frac{d\Lambda}{dt}$$

Ο παραπάνω μετασχηματισμός εξουδετερώνει τις τέσσερις συνιστώσες του τετραδιανύσματος της πυκνότητας ρεύματος. Έτσι η συνθήκη *Lorentz* $\frac{dA_\mu}{dx_\mu} = 0$ υποβαθμίζεται στη συνθήκη εγκαρσιότητας $\nabla \mathbf{A} = 0$.

Έστω τώρα η κατάσταση $J_\mu \neq 0$ όπως συμβαίνει στην περίπτωση των αμοιβαία αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων.

Αναλύοντας το $\mathbf{A}$ σε δύο κάθετες συνιστώσες

$\mathbf{A} = \mathbf{A}_\perp + \mathbf{A}_\parallel$ όπου $\nabla \mathbf{A}_\perp = 0$ και $\nabla \times \mathbf{A}_\parallel = 0$ με τη $\mathbf{A}_\perp$ να ονομάζεται εγκάρσια συνιστώσα και την $\mathbf{A}_\parallel$ διαμήκη συνιστώσα. Η συνιστώσα $\mathbf{A}_\parallel$ με τη $\mathbf{A}_0$ μαζί συνεπάγονται τη στιγμιαία στατική αλληλεπίδραση *Coulomb* ανάμεσα στα φορτισμένα σωματίδια. Η

συνιστώσα $A_{\perp}$ ευθύνεται για την ηλεκτρομαγνητική αλληλεπίδραση των φορτισμένων (μη σχετικιστικών) σωματιδίων.

Τότε η συνολική Χαμιλτονιανή των φορτισμένων σωματιδίων και το ηλεκτρομαγνητικά πεδία που παράγονται από αυτή γράφονται:

$$H = \sum_j \frac{1}{2m_j} \left[\mathbf{p}^{(j)} - e_j \frac{\mathbf{A}_{\perp} \mathbf{x}^{(j)}}{c} \right]^2 + \sum_{i>j} \frac{e_i e_j}{4\pi |\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}|} + H_{rad} \quad (2)$$

όπου H_{rad} είναι η ελεύθερη Χαμιλτονιανή του $A_{\perp}$ μόνο.

Μία θεωρία που είναι κβαντισμένη θα ερμηνεύει απλά τα φαινόμενα εκπομπής απορρόφησης ή σκέδασης των φωτονίων των εγκάρσιων ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων. Οι τρεις εξισώσεις για το ελεύθερο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο είναι:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{d\mathbf{A}}{dt} \quad \text{και} \quad \nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{d^2 \mathbf{A}}{dt^2} = 0 \quad (3)$$

Ανάλυση Fourier του διανυσματικού δυναμικού

Έστω ότι τη στιγμή $t = 0$ αναπτύσσουμε το διανυσματικό δυναμικό σε σειρά Fourier. Υποθέτουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες για το $\mathbf{A}$ που υπάρχει μέσα σε ένα κλειστό κουτί το οποίο λαμβάνεται ως κυβικό με πλευρά $L = (V)^{1/3}$. Αφού το $\mathbf{A}$ είναι πραγματικό θα έχουμε:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t)|_{t=0} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \sum_{a=1,2} \left(c_{k,a}^{(0)} \mathbf{u}_{k,a}(\mathbf{x}) + c_{k,a}^{*(0)} \mathbf{u}_{(k,a)}^*(\mathbf{x}) \right)$$

όπου

$$U_{k,a}(\mathbf{x}) = \varepsilon^{(a)} e^{ik\mathbf{x}} \quad \text{όπου} \quad \varepsilon_{(k)}^{(a)}$$

ονομάζεται διάνυσμα (γραμμικό) πόλωσης είναι πραγματικό και η κατεύθυνση του εξαρτάται από τη κατεύθυνση διάδοσης του διανύσματος $\mathbf{k}$. Για δεδομένο $\mathbf{k}$ επιλέγουμε τα $\varepsilon^{(1)}, \varepsilon^{(2)}$ με τέτοιο τρόπο ώστε τα $\varepsilon^{(1)}, \varepsilon^{(2)}, \frac{\mathbf{k}}{|\mathbf{k}|}$ σχηματίζουν από κοινού ένα σύνολο δεξιόστροφων ορθογώνιων μοναδιαίων διανυσμάτων. Γενικά τα $\varepsilon^{(1)}$ και $\varepsilon^{(2)}$ δεν βρίσκονται πάντα στο x και y άξονα

αφού το διάνυσμα $\mathbf{k}$ δεν βρίσκεται πάντα στο z άξονα. Αφού το διάνυσμα $\mathcal{E}^{(a)}$ είναι κάθετο στο διάνυσμα $\mathbf{k}$ η συνθήκη εγκαρσιότητας είναι εγγυημένη.

Η ανάπτυξη Fourier ικανοποιεί τα:

$$\frac{I}{V} \int d^3x \mathbf{U}_{\mathbf{k},a} \mathbf{U}_{\mathbf{k}',a}^* = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \cdot \delta_{aa'}, \text{ και}$$

$$\frac{I}{V} \int d^3x \begin{bmatrix} \mathbf{U}_{\mathbf{k}a} \cdot \mathbf{U}_{\mathbf{k}'a'} \\ \mathbf{U}_{\mathbf{k},a}^* \cdot \mathbf{U}_{\mathbf{k}',a'}^* \end{bmatrix} = \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \delta_{aa'}$$

$$\text{με } k_x, k_y, k_z = \frac{2n\pi}{L} \text{ με } n = \pm 1, \pm 2 \dots \dots$$

λόγω των περιοδικών συνοριακών συνθηκών. Για το $A(\mathbf{x}, t)$ για $t \neq 0$ απλά αντικαθιστούμε τα $C_{\mathbf{k},a}^{(0)}$ και $C_{\mathbf{k},a}^{*(0)}$ με τα $C_{\mathbf{k},a}(t) = C_{\mathbf{k},a}(0)e^{i\omega t}$ και $C_{\mathbf{k},a}^*(t) = C_{\mathbf{k},a}^*(0)e^{i\omega t}$ με $\omega = |\mathbf{k}| \cdot c$.

Με την αντικατάσταση αυτή και η κυματική εξίσωση (3) και το γεγονός ότι το A είναι πραγματικό ικανοποιούνται.

Έτσι:

$$\begin{aligned} A(\mathbf{x}, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_a (C_{\mathbf{k},a}(t) \mathcal{E}^{(a)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + C_{\mathbf{k},a}^* \mathcal{E}^{(a)} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_a (C_{\mathbf{k},a}(0) \mathcal{E}^{(a)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + C_{\mathbf{k},a}^* \mathcal{E}^{(a)} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}) \quad (4) \end{aligned}$$

$$\text{όπου } \mathbf{k}\mathbf{x} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t = \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - |\mathbf{k}|ct$$

Υπολογισμός της χαμιλτονιανής του Η/Μ πεδίου σε συνάρτηση με τις κανονικές μεταβλητές P, Q . Ιστορικά σχόλια

Η Χαμιλτονιανή του πεδίου είναι:

$$H = \frac{1}{2} \int (|\mathbf{B}|^2 + |\mathbf{E}|^2) d^3x = \frac{1}{2} \int \left[|\nabla \times \mathbf{A}|^2 + \left| \frac{1}{c} \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right)^2 \right| d^3x \right]$$

Στον υπολογισμό της ολοκλήρωσης του $|B|^2$ υπεισέρχεται ο όρος:

$$\begin{aligned} & \int (\nabla \times \mathbf{U}_{k,a}) \cdot (\nabla \times \mathbf{U}_{k',a'}) d^3x = \\ & \int \nabla \cdot [\mathbf{U}_{k,a} \times (\nabla \times \mathbf{U}_{k',a'}^*)] d^3x + \int \mathbf{U}_{k,a} \times [\nabla \times (\nabla \times \mathbf{U}_{k',a'}^*)] d^3x = \\ & = -\int \mathbf{U}_{k,a} \nabla^2 \mathbf{U}_{k',a'}^* d^3x = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 V \delta_{kk'} \cdot \delta_{aa'} \end{aligned}$$

Όπου χρησιμοποίησαμε τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες και τη διανυσματική ταυτότητα:

$$\nabla \times (\nabla \times) = \nabla \cdot (\nabla \cdot) - \nabla^2$$

Παρόμοια για την ολοκλήρωση του όρου $|E|^2$ είναι χρήσιμο να υπολογίσουμε πρώτα τον όρο:

$$\int \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{U}_{k,a}}{\partial t}\right) \cdot \left(\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{U}_{k',a'}^*}{\partial t}\right) d^3x = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 V \delta_{kk'} \delta_{aa'}$$

Με βάση αυτές τις σχέσεις παρατηρούμε ότι:

$$H = \sum_k \sum_a 2 \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \mathbf{C}_{k,a}^* \mathbf{C}_{k,a} \quad \text{όπου } \mathbf{C}_{k,a}$$

είναι ο χρονοεξαρτώμενος συντελεστής Fourier που ικανοποιεί την

$$\ddot{\mathbf{C}}_{k,a} = -\omega^2 \mathbf{C}_{k,a}$$

Αυτό μας θυμίζει την έκφραση της ενέργειας για ένα σύνολο ανεξαρτήτων και ασύζευκτων αρμονικών ταλαντωτών. Για να κάνουμε την αναλογία αυτή πιο εμφανή ορίζουμε ως:

$$\mathbf{Q}_{k,a} = \frac{1}{c} (\mathbf{C}_{k,a} + \mathbf{C}_{k,a}^*) \quad \text{και} \quad \mathbf{P}_{k,a} = -\frac{i\omega}{c} (\mathbf{C}_{k,a} - \mathbf{C}_{k,a}^*)$$

ΤΟΤΕ:

$$H = \sum_k \sum_a 2 \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \left[\frac{C(\omega \mathbf{Q}_{k,a} - i \mathbf{P}_{k,a})}{2\omega} \right] \cdot \left[\frac{C(\omega \mathbf{Q}_{k,a} + i \mathbf{P}_{k,a})}{2\omega} \right] =$$

$$= \sum_k \sum_a \frac{1}{2} (P_{k,a}^2 + \omega^2 Q_{k,a}^2) \text{ όπου } P_{k,a}, Q_{k,a}$$

είναι κανονικές μεταβλητές με:

$$\frac{\partial H}{\partial Q_{k,a}} = -\dot{P}_{k,a} \quad , \quad \frac{\partial H}{\partial P_{k,a}} = +\dot{Q}_{k,a}$$

Έτσι το πεδίο ακτινοβολίας μπορεί να θεωρηθεί σαν ένα σύνολο ανεξάρτητων αρμονικών ταλαντωτών ο καθένας από τους οποίους χαρακτηρίζεται από τα k, a και των οποίων οι δυναμικές μεταβλητές είναι ορθογώνιοι γραμμικοί συνδυασμοί των συντελεστών Fourier.

Από το τέλος του 19^{ου} αιώνα είχε αναγνωριστεί ότι η χωροχρονική εξέλιξη του πεδίου ακτινοβολίας που ικανοποιούσε τη κυματική εξίσωση (3) μπορούσε να προσομοιωθεί με τη δυναμική συμπεριφορά ενός συνόλου αρμονικών ταλαντωτών. Ορίζοντας μία μέση ενέργεια της τάξης του ΚΤ σε κάθε ταλαντωτή ακτινοβολίας. Οι Rayleigh και Jeans παρουσίασαν μία έκφραση για τη κατανομή της ενέργειας του πεδίου ακτινοβολίας ως μία συνάρτηση της συχνότητας ω στην ιδεατή κατάσταση κατά την οποία το πεδίο ακτινοβολίας είναι περιορισμένο σε απόλυτα απορροφητικά τοιχώματα. Η έκφραση που παρουσίασαν ήταν σε συμφωνία με τα παρατηρησιακά δεδομένα για χαμηλές τιμές του ω σε αρκετά υψηλές θερμοκρασίες αλλά με μεγάλη διαφορά για τις υψηλές τιμές του ω . Αυτή η δυσαρμονία οδήγησε την Max Planck να κάνει ένα από τα πιο επαναστατικά βήματα που υπήρξαν ποτέ στη ιστορία της επιστήμης. Πρότεινε ότι η ενέργεια του κάθε ενός ταλαντωτή ακτινοβολίας δεν είναι μία αυθαίρετη ποσότητα αλλά πρέπει να είναι ένα ακέραιο πολλαπλάσιο της ποσότητας $\hbar\omega$ όπου το $\hbar$ είναι μία νέα θεμελιώδης σταθερά της φύσης. Αυτό έγινε το 1901. Τέσσερα χρόνια αργότερα στη προσπάθειά του να εξηγήσει το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο ο Einstein πρότεινε ότι τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα με μήκος κύματος $\lambda = \frac{2\pi c}{\omega}$ μπορούν να θεωρηθούν ως ένα σύνολο αμαζών σωματιδίων που το καθένα έχει ενέργεια $\hbar\omega$.

Η παρέμβαση Dirac. Εισαγωγή των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής, του τελεστή αρίθμησης και αναπαράσταση αυτών μέσω μητρών

Σήμερα με τη βοήθεια της μη σχετικιστικής κβαντομηχανικής μπορούμε να πετύχουμε καλύτερα αποτελέσματα. Ακόμα και πριν τη πλήρη ανάπτυξη της μη σχετικιστικής κβαντομηχανικής ο Dirac πρότεινε ότι οι κανονικές δυναμικές μεταβλητές του πεδίου ακτινοβολίας να θεωρηθούν σαν μη μετατιθέμενοι τελεστές όπως τα x, p στον αρμονικό ταλαντωτή.

Έτσι απαιτούμε τα P, Q του πεδίου ακτινοβολίας να μην είναι πλέον απλοί αριθμοί αλλά τελεστές που ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$[Q_{k,a}, P_{k',a'}] = i\hbar \delta_{kk'} \delta_{aa'}$$

$$[Q_{k,a}, Q_{k',a'}] = 0, \quad [P_{k,a}, P_{k',a'}] = 0$$

Ας θεωρήσουμε τώρα γραμμικούς συνδυασμούς των $P_{k,a}, Q_{k,a}$ που δίνονται από τις σχέσεις:

$$\alpha_{k,a} = \left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \right) (\omega Q_{k,a} + iP_{k,a})$$

$$\alpha_{ka}^+ = \left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}} \right) (\omega Q_{k,a} - iP_{k,a})$$

Έτσι τα $\alpha_{k,a}, \alpha_{ka}^+$ είναι το ανάλογο σε τελεστική μορφή των συντελεστών Fourier $C_{k,a}$ και C_{ka}^+ όταν εισάγουμε ένα παράγοντα για να κάνουμε το $Q_{k,a}, Q_{ka}^+$ αδιάστατα δηλαδή:

$$C_{k,a} \rightarrow C \sqrt{\hbar/2\omega Q_{k,a}} \quad \text{τότε ικανοποιούν τις μεταθετικές σχέσεις:}$$

$$[\alpha_{k,a}, \alpha_{k',a'}^+] = -\frac{i}{2\hbar} [Q_{k,a}, P_{k',a'}] + \frac{i}{2\hbar} [P_{k,a}, Q_{k',a'}] = \delta_{kk'} \delta_{aa'}$$

και

$$[\alpha, \alpha_{k',a'}^+] = [\alpha_{k,a}^+, \alpha_{k',a'}^+] = 0$$

Αυτές οι μεταθετικές σχέσεις πρέπει να λαμβάνονται εφόσον οι τελεστές υπολογίζονται για την ίδια χρονική στιγμή π.χ.:

$$\eta \text{ σχέση } [\alpha_{k,a}, \alpha_{k',a'}^+] \text{ ισχύει για } [\alpha_{k,a}^+, \alpha_{k',a'}^+]$$

Προτού συζητήσουμε τη φυσική ερμηνεία των $\alpha_{k,a}$, α_{ka}^+ είναι χρήσιμο να μελετήσουμε τις ιδιότητες των τελεστών που ορίζονται μέσω των σχέσεων: $N_{k,a} = \alpha_{ka}^+, \alpha_{k,a}'$

Έχουμε:

$$\begin{aligned} [\alpha_{k,a}, N_{k',a'}] &= \alpha_{k,a} \alpha_{k',a}^+ \alpha_{k',a} - \alpha_{k',a}^+ \alpha_{k',a} \alpha_{ka} = \\ &= [\alpha_{ka}, \alpha_{k',a'}^+] \alpha_{k',a} - \alpha_{k',a}^+ [\alpha_{k',a'}, \alpha_{k,a}] = \delta_{kk'} \delta_{aa'} \alpha_{ka} \end{aligned}$$

Παρόμοια ισχύει:

$$[\alpha_{k,a}^+, N_{k',a}] = -\delta_{kk'} \delta_{aa'} \alpha_{ka}^+ \quad (5)$$

Σε αντίθεση με τους α, α^+ ο τελεστής N είναι ερμιτιανός. Η ερμιτιανότητα του τελεστή N μας επιτρέπει να θεωρήσουμε ένα σύνολο κανονικοποιημένων ιδιοδιανυσμάτων του τελεστή N που δηλώνονται με το σύμβολο $|n\rangle$ τέτοια ώστε:

$N|n\rangle = n|n\rangle$ όπου n είναι η ιδιοτιμή του N . Αφού ο N είναι ερμιτιανός η ιδιοτιμή n πρέπει να είναι πραγματική.

Έτσι παίρνουμε:

$$N\alpha^+|n\rangle = (\alpha^+N + \alpha^+)|n\rangle = (n+1)\alpha^+|n\rangle \text{ βάσει της} \quad (4)$$

Αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως μία νέα εξίσωση ιδιοτιμών στην το ιδιοδιάνυσμα $\alpha^+|n\rangle$ φαίνεται να έχει ιδιοτιμή $n+1$.

Παρόμοια ισχύει: $N\alpha|n\rangle = (n-1)\alpha|n\rangle$

Ο ρόλος των α^+ και α είναι πλέον σαφής. Ο $\alpha^+(\alpha)$ ενεργώντας πάνω στο $|n\rangle$ δίνει ένα νέο ιδιοδιάνυσμα αυξημένο κατά ένα. Έτσι:

$$\alpha^+|n\rangle = C_+|n+1\rangle \text{ ομοίως και } \alpha|n\rangle = C_-|n-1\rangle \text{ όπου}$$

C_+ και C_- είναι σταθερές. Για να ορίσουμε τα C_+ , C_- έχουμε:

$$\begin{aligned} |C_+|^2 &= |C_+|^2 \langle n+1|n+1\rangle = \langle \alpha^+n|\alpha^+n\rangle = \\ &= \langle n|\alpha\alpha^+|n\rangle = \langle n|N + [\alpha, \alpha^+]|n\rangle = n+1 \text{ και} \\ |C_-|^2 &= \langle \alpha n|\alpha n\rangle = \langle n|\alpha^+\alpha|n\rangle = n \end{aligned}$$

Οι φάσεις των $C_{\pm}$ είναι ακαθόριστες. Μπορούν να οριστούν να είναι μηδέν τη στιγμή $t=0$ από σύμβαση. Έτσι έχουμε για $t=0$:

$$\alpha^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad \alpha|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

Εντωμεταξύ έχουμε:

$$n = \langle n|N|n\rangle = \langle n|\alpha^+\alpha|n\rangle \geq 0 \quad (5)$$

αφού ο τύπος $\alpha|n\rangle$ ορίζεται θετικός. Αυτό μας λέει ότι το n δεν μπορεί να είναι μη ακέραιος γιατί διαφορετικά η ιδιοτιμή του $|n\rangle$ θα μπορούσε να μειώνεται απεριόριστα καθώς διαδοχικά εφαρμόζουμε το α και το n τελικά θα αποκτούσε αρνητικές τιμές κατά αντιδιαστολή με την (5).

Άρα αν n είναι ένας θετικός ακέραιος διαδοχικές δράσεις του τελεστή α θα είχαν τα αποτελέσματα:

$$\alpha|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \dots \alpha|2\rangle = \sqrt{2}|1\rangle$$

$$\alpha|1\rangle = |0\rangle, \quad \alpha|0\rangle = 0$$

Παρατηρούμε ότι εφαρμόζοντας τον α στο $|0\rangle$ παρατηρούμε πάλι το μηδενικό διάνυσμα. Άρα $n=0$ είναι η ελάχιστη ιδιοτιμή του τελεστή N .

Σαφείς αναπαραστάσεις των α, α^+, N με μορφή μητρών που βρίσκονται σε συμφωνία με τις μεταθετικές σχέσεις τους είναι οι:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \dots\dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \dots\dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \dots\dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} \dots\dots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}$$

$$\alpha^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \dots\dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \dots\dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \dots\dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \dots\dots \\ \vdots & & & & \end{pmatrix}$$

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \dots\dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 \dots\dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 \dots\dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 \dots\dots \\ \vdots & & & \end{pmatrix}$$

Τα διανύσματα στήλης αναπαριστώντας ως:

$$|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Οι προηγούμενοι τελεστές δρουν μόνο στην $n + 1 \neq 0$.

Εφαρμογή των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στις καταστάσεις φωτονίων. Συμβατότητα με τη μποζονική φύση του Η/Μ πεδίου

Η προηγούμενη άλγεβρα μπορεί να εφαρμοστεί σε φυσικές καταστάσεις στις οποίες ένας αριθμός φωτονίων με δεδομένη ορμή και πόλωση αυξάνεται ή μειώνεται. Το κυματόνισμα k προκύπτει από τη διαίρεση της ορμής των φωτονίων με το $\hbar$ και το α αντιπροσωπεύει τη κατάσταση πόλωσης του φωτονίου.

Ερμηνεύουμε ένα ιδιοδιάνυσμα του $N_{k,a}$ σαν διάνυσμα μίας κατάστασης με ένα ορισμένο αριθμό φωτονίων στη κατάσταση (k,a) . Για να αναπαραστήσουμε μία κατάσταση στην οποία υπάρχουν πολλοί τύποι φωτονίων με διαφορετικά (k,a) . Θεωρούμε το απευθείας παράγωγο των ιδιοδιανυσμάτων όπως φαίνεται στο:

$$|n_{k_1,a_1}, n_{k_2,a_2}, \dots\rangle = |n_{k_1,a_1}\rangle |n_{k_2,a_2}\rangle \dots |n_{k_j,a_j}\rangle \dots$$

Αυτό το διάνυσμα κατάστασης ανταποκρίνεται στη φυσική κατάσταση στην οποία υπάρχουν n_{k_1,a_1} φωτόνια παρόντα στη κατάσταση (k_1, a_1) , n_{k_2,a_2} φωτόνια στη κατάσταση (k_2, a_2) κ.λ.π.

Ο αριθμός $N_{k,a}$ ονομάζεται βαθμός κατάληψης της κατάστασης (k,a) .

Σαν παράδειγμα η κατάσταση που αναπαριστάται με το:

$$|0\rangle = |0_{k_1,a_1}\rangle |0_{k_2,a_2}\rangle \dots |0_{k_j,a_j}\rangle$$

έχει την ιδιότητα ότι εάν ο τελεστής $a_{k,a}$ εφαρμοστεί σε αυτή θα παρατηρήσουμε το μηδενικό διάνυσμα για κάθε (k,a) . Παρομοίως η ιδιοτιμή του $N_{k,a} = a_{ka}^+ \cdot a_{ka}$ είναι μηδέν για κάθε (k,a) . Η κατάσταση αυτή ονομάζεται κατάσταση κενού. Μία κατάσταση ενός φωτονίου με ορισμένο (k,a) αναπαρίσταται με το $a_{ka}^+|0\rangle$ αφού η ιδιοτιμή του $N_{k,a}$ είναι 1. Μία κατάσταση 2 φωτονίων αναπαρίσταται από το κανονικοποιημένο ιδιοδιάνυσμα:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} a_{ka}^+ a_{ka}^+ |0\rangle$$

όταν το φωτόνιο βρίσκεται στην ίδια κατάσταση και

$$a_{ka}^+ \cdot a_{k',a}^+ |0\rangle$$

όταν τα φωτόνια βρίσκονται σε διαφορετικές καταστάσεις.

Γενικότερα ισχύει:

$$|n_{k_1,a_1}, n_{k_2,a_2} \dots \rangle = \prod_{k_i,a_i} \frac{(a_{k_i,a_i}^+)^{n_{k_i,a_i}}}{\sqrt{n_{k_i,a_i}!}} |0 \rangle$$

Αν ο τελεστής a_{k_i,a_i}^+ εφαρμοστεί στο γενικό διάνυσμα κατάστασης παρατηρούμε ότι:

$$a_{k_i,a_i}^+ |n_{k_1,a_1}, n_{k_2,a_2} \dots n_{k_i,a_i} \rangle = \sqrt{n_{k_i,a_i} + 1} |n_{k_1,a_1}, n_{k_2,a_2} \dots n_{k_i,a_i} + 1, \dots \rangle$$

Άρα ο a_{k_i,a_i}^+ έχει την ιδιότητα να δημιουργεί ένα πρόσθετο φωτόνιο στη κατάσταση (k_i, a_i) αφήνοντας τους αριθμούς κατάληψης όλων των άλλων καταστάσεων ίδιους. Για το λόγο αυτό ο τελεστής a_{ka}^+ ονομάζεται τελεστής δημιουργίας για το φωτόνιο στη κατάσταση k, a παρόμοια ο $a_{k,a}$ θεωρείται ως τελεστής καταστροφής για ένα φωτόνιο στη κατάσταση k, a . Σε αντίθεση με τους προηγούμενους τελεστές ο $N_{k,a}$ είναι διαγώνιος και δεν αλλάζει τον αριθμό κατάληψης των φωτονίων. Απλά μας δίνει με την ιδιοτιμή του τον αριθμό των φωτονίων στη κατάσταση K, a . Ο παραπάνω φορμαλισμός μπορεί να περιγράψει μία φυσική κατάσταση στην οποία ένας αριθμός φωτονίων σε μία δεδομένη κατάσταση είναι απεριορίστος. Επίσης κάθε κατάσταση φωτονίων είναι απαραίτητα συμμετρική κάτω από κάθε εσωτερική αλλαγή ενός ζεύγους της μορφής $(k, a) \leftrightarrow (k', a')$ αφού π.χ. στη κατάσταση των δύο φωτονίων έχουμε:

$$a_{ka}^+ a_{k'a'}^+ |0 \rangle = a_{k'a'}^+ a_{ka}^+ |0 \rangle$$

εξαιτίας των σχέσεων μετάθεσης. Έτσι οι καταστάσεις που παρατηρούμε εφαρμόζοντας τους τελεστές δημιουργίας στο $|0 \rangle$ είναι αυτόματα συμβατές με τη στατιστική Bose – Einstein.

Τελεστές Φερμιονίων

Υπάρχουν στη φύση σωματίδια τα οποία δεν υπακούουν στη στατιστική Bose – Einstein αλλά υπακούουν στη στατιστική Fermi - Dirac. π.χ. ηλεκτρόνια, μίονια, πρωτόνια κ.λ.π.

Για τέτοια σωματίδια ο formalισμός που αναπτύχθηκε προηγουμένως είναι ανεπαρκής. Πρέπει με κάποιο τρόπο να ενσωματώσουμε την απαγορευτική αρχή του Pauli.

Αυτό έγινε το 1928 όταν οι P. Jordan και E.P. Wigner πρότειναν ένα formalισμό στον οποίο θεωρούμε τους τελεστές b_r^+ και b_r οι οποίοι όμως ικανοποιούν τις σχέσεις:

$$\{b_r, b_{r'}^+\} = \delta_{rr'} \quad \{b_r, b_{r'}'\} = \{b_r^+, b_{r'}^+\} = 0$$

$$\text{όπου} \quad \{A, B\} = AB + BA$$

Οι τελεστές b_r^+, b_r ερμηνεύονται σαν τελεστές δημιουργίας και καταστροφής. Ο δείκτης r αντιπροσωπεύει μία επιλεγμένη περιγραφή της κατάστασης της ορμής, του spin, και σύμφωνα με τη θεωρία του Dirac.

Η κατάσταση ενός σωματιδίων μπορεί να δομηθεί και πάλι όπως και πριν σαν:

$$|1_r\rangle = b_r^+ |0\rangle$$

Αλλά όμως:

$$b_r^+ b_r^+ |0\rangle = \frac{1}{2} \{b_r^+, b_r^+\} |0\rangle = 0$$

Άρα δεν είναι δυνατό δύο σωματίδια να βρίσκονται στην ίδια κατάσταση. Αυτό είναι συμβατό με την απαγορευτική αρχή Pauli.

Όμως αν $r \neq r'$ μπορούμε να κατασκευάσουμε μία κατάσταση 2 σωματιδίων.

$$b_r^+ b_{r'}^+ |0\rangle = -b_{r'}^+ b_r^+ |0\rangle$$

Ας σημειωθεί ότι αυτή είναι αντισυμμετρική κάτω από το μετασχηματισμό $r \leftrightarrow r'$ κατ' αντιστοιχία με τη στατιστική Fermi – Dirac. Ορίζουμε τον ερμιτιανό τελεστή N ως $N_r = b_r^+ b_r$ όπως πριν.

Αφού οι τελεστές b_r^+ και b_r ερμηνεύονται σαν τελεστές δημιουργίας και καταστροφής είναι φυσικό για τον τελεστή αρίθμησης N_r να έχουμε:

$$N_r|0\rangle = b_r^+ b_r|0\rangle > 0$$

Γενικά ο τελεστής N_r έχει την ιδιότητα:

$$N_r^2 = b_r^+ b_r b_r^+ b_r = b_r^+ (-b_r^+ b_r + 1) b_r = N_r$$

Άρα $N_r(N_r - 1) = 0$ το οποίο σημαίνει ότι οι ιδιοτιμές του τελεστή N_r θα είναι 0 ή 1. Αυτό σημαίνει ότι η κατάσταση r ή δεν έχει καταληφθεί ή έχει καταληφθεί από μόνο 1 ηλεκτρόνιο.

Οι αναπαράστασεις των τελεστών b_r , b_r^+ , N_r είναι:

$$b_r = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad b_r^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad N_r = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Αυτοί δρουν στα παρακάτω διανύσματα στήλης

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

παρόλο που η άλγεβρα των b, b^+ είναι παρόμοια με των Q, Q^+ είναι σημαντικό να επισημάνουμε ότι οι b, b^+ δεν μπορούν να γραφούν σαν γραμμικοί συνδυασμοί των P, Q ικανοποιώντας τις μεταθετικές σχέσεις:

$$[Q_{k,a}, P_{k,a}] = i \hbar \delta_{kk'} \delta_{aa'}$$

$$[Q_{k,a}, Q_{k',a'}] = 0, \quad [P_{k,a}, P_{k',a'}] = 0$$

Το παραπάνω συνδέεται με το γεγονός ότι δεν υπάρχει κλασσικά μετρήσιμο πεδίο που να ανταποκρίνεται στο κβαντισμένο φερμιονικό πεδίο.

Μετάβαση από το κλασσικό πεδίο ακτινοβολίας στο κβαντικό πεδίο ακτινοβολίας

Φωτόνια σαν κβαντομηχανικές διεγέρσεις του πεδίου ακτινοβολίας.

Οι συντελεστές Fourier στο ανάπτυγμα του κλασσικού πεδίου ακτινοβολίας πρέπει να αντικατασταθούν από αντίστοιχους τελεστές καταστροφής και δημιουργίας. Εφόσον οι κανονικές μεταβλητές του πεδίου ακτινοβολίας θεωρηθούν μη μετατιθέμενοι κβαντομηχανικοί τελεστές. Με την αντικατάσταση:

$$C_{\mathbf{k},a}(t) \rightarrow C \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} a_{\mathbf{k},a}(t) \text{ και}$$

$$C_{\mathbf{k},a}^*(t) \rightarrow C \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} a_{\mathbf{k},a}^+(t) \text{ έχουμε:}$$

$$A(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_K \sum_Q C \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} [a_{\mathbf{k},a}(t) \boldsymbol{\epsilon}^{(a)} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \\ + a_{\mathbf{k},a}^+(t) \boldsymbol{\epsilon}^{(a)} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}}] \quad (5)$$

Παρόλο που το παραπάνω ανάπτυγμα είναι παρόμοιο στη σχέση (4) το νόημα του A είναι πολύ διαφορετικό. Το A είναι μία κλασσική συνάρτηση του οποίου οι 3 συνιστώσες ορίζονται σε κάθε σημείο του χώρου και του χρόνου. Σε αντίθεση το A της σχέσης (5) είναι ένας τελεστής ο οποίος δρα στα διανύσματα κατάστασης των αριθμών κατάληψης όπως συζητήθηκε προηγουμένως. Ας σημειωθεί ωστόσο ότι χρησιμοποιεί ως παραμέτρους το $\mathbf{x}, t$ όπως και στο κλασσικό πεδίο. Ένας τέτοιος τελεστής ονομάζεται τελεστής πεδίου ή κβαντικό πεδίο. Ως τελεστής της Χαμιλτονίας του κβαντισμένου πεδίου ακτινοβολίας μπορεί να θεωρηθεί ο:

$$H = \frac{1}{2} \int (\mathbf{B} \cdot \mathbf{B} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{E}) d^3x$$

Μπορεί να υπολογιστεί όπως και πριν. Τώρα όμως πρέπει να είμαστε προσεκτικοί με τη σειρά των $a_{\mathbf{k},a}, a_{\mathbf{k},a}^+$ αφού δεν είναι πλέον απλοί αριθμοί. Παρατηρούμε ότι:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_a \hbar \omega (a_{\mathbf{k},a}^+ , a_{\mathbf{k},a} + a_{\mathbf{k},a} , a_{\mathbf{k},a}^+) =$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} \sum_a \left(N_{\mathbf{k},a} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad \mu\epsilon \quad \omega = |\mathbf{k}| \cdot c$$

Αφού η απόλυτη κλίμακα της ενέργειας είναι αυθαίρετη μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ως ενέργειες της κατάστασης του κενού το μηδέν δηλαδή: $H|0\rangle = 0$

Αφαιρώντας το ποσό $\sum \frac{\hbar \omega}{2}$ από τη προηγούμενη σχέση έχουμε:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \sum_a \hbar \omega N_{\mathbf{k},a}$$

Όταν ο τελεστής της Χαμιλτονιακής δράσει πάνω στη κατάσταση πολλών φωτονίων θα έχουμε:

$$H \left| n_{\mathbf{k}_1, a_1}, n_{\mathbf{k}_2, a_2} \dots \right\rangle = \sum_i n_{\mathbf{k}_i, a_i} \hbar \omega_i \left| n_{\mathbf{k}_1, a_1}, n_{\mathbf{k}_2, a_2} \dots \right\rangle$$

Η συνολική ορμή του πεδίου ακτινοβολίας δίνεται όπως και στην κλασσική ηλεκτροδυναμική ως το ολοκλήρωμα στο χώρο του διανύσματος Poynting $\frac{(\mathbf{E} \times \mathbf{B})}{c}$. Χρησιμοποιώντας μία έκφραση ενός τελεστή παρόμοια στην εμφάνιση με τη συνολική ορμή του πεδίου ακτινοβολίας στη κλασσική ηλεκτροδυναμική παρατηρούμε ότι ο τελεστής της ορμής είναι:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{c} \int (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) d^3x = \sum_{\mathbf{k}} \sum_a \frac{1}{2} \hbar (a_{\mathbf{k},a}^+ , a_{\mathbf{k},a} +$$

$$+ a_{\mathbf{k},a} a_{\mathbf{k},a}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_a \hbar \mathbf{k} \left(N_{\mathbf{k},a} + \frac{1}{2} \right) \quad (6)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις σχέσεις:

$$\frac{c^2 \hbar}{2\sqrt{\omega \omega'}} \left(\frac{1}{c} \right) a_{\mathbf{k},a} \left(\frac{\omega'}{c} \right) a_{\mathbf{k}',a}^+ \boldsymbol{\epsilon}^{(\alpha)} \times (\mathbf{k}' \times \boldsymbol{\epsilon}^{(\alpha)}) .$$

$$\frac{1}{V} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} d^3\mathbf{x} = \frac{\hbar}{2} a_{\mathbf{k},a} a_{\mathbf{k}',a}^\dagger \mathbf{k} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{aa'}$$

Το $\frac{1}{2}$ που εμφανίζεται στη (6) μπορεί να παραληφθεί αφού αθροίζουμε σε όλα τα $\mathbf{k}$. Έτσι το $\hbar\mathbf{k}$ ακυρώνει το $-\hbar\mathbf{k}$. Άρα:

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_a \hbar\mathbf{k} N_{\mathbf{k},a}$$

Ας θεωρήσουμε τώρα την επίδραση των τελεστών $H, \mathbf{P}$ στη κατάσταση του ενός φωτονίου.

Έχουμε:

$$H a_{\mathbf{k},a}^\dagger |0\rangle = \hbar\omega a_{\mathbf{k},a}^\dagger |0\rangle, \quad \mathbf{P} a_{\mathbf{k},a}^\dagger |0\rangle = \hbar\mathbf{k} a_{\mathbf{k},a}^\dagger |0\rangle$$

Παρατηρούμε ότι $\hbar\omega = \hbar|\mathbf{k}| \cdot c$ και $\hbar\mathbf{k}$ είναι αντίστοιχα η ενέργεια και η ορμή του φωτονίου. Η μάζα του φωτονίου δίνεται από τη σχέση:

$$m^2 = \frac{1}{c^4} (E^2 + |\mathbf{P}|^2 \cdot c^2) = \frac{1}{c^4} ((\hbar\omega)^2 - (\hbar|\mathbf{k}| \cdot c)^2) = 0$$

Η κατάσταση ενός φωτονίου δεν χαρακτηρίζεται μόνο από την ορμή του αλλά επίσης και από το διάνυσμα πόλωσης $\boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}$. Αφού το $\boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}$ μετασχηματίζεται σαν ένα διάνυσμα η γενική θεωρία της στροφορμής μας οδηγεί να συσχετίσουμε με αυτό μία μονάδα στροφορμής. Αυτό εννοούμε λέγοντας ότι το φωτόνιο μία μονάδα στροφορμής spin. Για να βρούμε τις συνιστώσες του spin αρχικά θεωρούμε τα διανύσματα:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^\pm = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)} \pm i\boldsymbol{\varepsilon}^{(2)})$$

τα οποία ονομάζονται κυκλικά διανύσματα πόλωσης. Κάτω από απειροστή στροφή γύρω από τη κατεύθυνση διάδοσης $\mathbf{k}$ ως προς γωνία $d\varphi$ τα κυκλικά διανύσματα πόλωσης μεταβάλλονται κατά:

$$\delta \epsilon^{(\pm)} = \mp \frac{\delta \varphi}{\sqrt{2}} (\epsilon^{(2)} \mp i \epsilon^{(2)}) = \mp i \delta \epsilon^{(\pm)}$$

Επίσης συσχετίζουμε με το $\epsilon^{(\pm)}$ τη συνιστώσα $m = \pm 1$ του spin όπου ως άξονα κβάντωσης έχει επιλεγεί η κατεύθυνση διάδοσης. Αν το $\epsilon^{(a)}$ ήταν μαζί με το k θα θεωρούσαμε $m = 0$ όμως η κατάσταση $m = 0$ απουσιάζει από τη κατάσταση του A εξαιτίας της συνθήκης $k \epsilon^{(a)} = 0$.

Επομένως το spin του φωτονίου είναι ή παράλληλο ή αντιπαράλληλο με τη κατεύθυνση διάδοσης. Σημειώνουμε ότι η απουσία του $m = 0$ έχει αναλλοίωτο νόημα μόνο για ένα σωματίδιο του οποίου η μάζα είναι μηδέν. Αν η μάζα του φωτονίου ήταν διάφορη του μηδενός μπορούμε να βρούμε με ένα μετασχηματισμό Lorentz ένα σύστημα αναφοράς στο οποίο το φωτόνιο θα ηρεμούσε. Σε ένα τέτοιο σύστημα το spin του φωτονίου θα ήταν παράλληλο στο τίποτα.

Η περιγραφή της κατάστασης πόλωσης με το διάνυσμα βάσης $\epsilon^{\pm}$ ονομάζεται αναπαράσταση κυκλικής πόλωσης σε αντίθεση με τη γραμμική αναπαράσταση πόλωσης που βασίζεται στα $\epsilon^{(1)}, \epsilon^{(2)}$. Η σχέση ορθογωνιότητας για το $\epsilon^{\pm}$ είναι:

$$\epsilon^{(\pm)} \epsilon^{(\pm)*} = -\epsilon^{(\pm)} \cdot \epsilon^{(\mp)} = 1$$

$$\epsilon^{(\pm)} \epsilon^{(\mp)*} = -\epsilon^{(\pm)} \cdot \epsilon^{(\pm)} = 0$$

$$k \cdot \epsilon^{(\pm)} = 0$$

Συνοψίζοντας εφαρμόζοντας τα κβαντικά αξιώματα στις κανονικές μεταβλητές του ταλαντωτή ακτινοβολίας οδηγούμαστε με φυσικό τρόπο στην ιδέα ότι οι κβαντικές διεγέρσεις του πεδίου ακτινοβολίας μπορούν να θεωρηθούν ως σωματίδια με μάζα μηδέν και spin 1. Αυτό αποτελεί γενική θεώρηση της κβαντικής θεωρίας πεδίου σύμφωνα με την οποία κάθε πεδίο σχετίζεται με ένα σωματίδιο με ορισμένη μάζα και spin.

Για να μελετήσουμε τη χρονική εξέλιξη του κβαντισμένου πεδίου ακτινοβολίας θα σημειώσουμε ότι οι τελεστές $\alpha_{k,a}, a_{k,a}^+$ είναι

χρονοεξαρτώμενοι τελεστές οι οποίοι ικανοποιούν την εξίσωση κίνησης του Heisenberg.

$$\begin{aligned}\dot{a}_{k,a} &= \frac{i}{\hbar} [H, a_{k,a}] = \left(\frac{i}{\hbar}\right) \sum_{k',a'} [\hbar \omega' N_{k',a'}, a_{k,a}] = \\ &= -i\omega a_{k,a} \quad (7)\end{aligned}$$

$$\ddot{a}_{k,a} = \left(\frac{i}{\hbar}\right) [H, \dot{a}_{k,a}] = \frac{i}{\hbar} [H, -i\omega a_{k,a}] = -\omega^2 a_{k,a} \quad (8)$$

Αυτές οι εκφράσεις είναι παρόμοιες με τις διαφορικές εξισώσεις που ικανοποιούν οι συντελεστές Fourier του κλασσικού πεδίου ακτινοβολίας.

Παρόμοια παίρνουμε:

$$\dot{a}_{k,a}^+ = i\omega a_{k,a}^+ \quad \text{και} \quad \ddot{a}_{k,a}^+ = -\omega^2 a_{k,a}^+$$

Από τις προηγούμενες εξισώσεις για τα $a_{k,a}$, $a_{k,a}^+$ παρατηρούμε ότι το κβαντισμένο πεδίο A ικανοποιεί τις ίδιες κυματικές εξισώσεις όπως και το κλασσικό πεδίο.

Ολοκληρώνοντας τις (7), (8) παίρνουμε για τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής:

$$a_{k,a} = a_{k,a}(0)e^{-i\omega t} \quad a_{k,a}^+ = a_{k,a}^+(0)e^{i\omega t}$$

τελικά έχουμε:

$$\begin{aligned}A(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k \sum_a C \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} [a_{k,a}(0)\epsilon^{(a)} e^{ikx-i\omega t} + \\ &\quad + a_{k,a}^+(0)\epsilon^{(a)} e^{-ikx+i\omega t}]\end{aligned}$$

Σημειώνουμε ότι ο κβαντικός τελεστής A είναι ερμιτιανός ενώ ο κλασσικός τελεστής A είναι πραγματικός. Επίσης τα x, t που εμφανίζονται στο κβαντικό πεδίο $A(x, t)$ δεν είναι κβαντομηχανικές μεταβλητές παρά μόνο παράμετροι από τις οποίες εξαρτάται ο

τελεστής πεδίου. Συγκεκριμένα x, t μπορούν να θεωρηθούν οι χωροχρονικές συντεταγμένες του φωτονίου.

Διακυμάνσεις και Σχέσεις Απροσδιοριστίας - σχόλια

Μπορούμε τώρα να συζητήσουμε μερικές από τις ιδιαιτερότητες από αναλύοντας από τη κβαντική φύση του πεδίου ακτινοβολίας. Καταρχήν ας σημειωθεί ότι ξεχωριστός τελεστής αρίθμησης $N_{k,a}$ όσο και ο συνολικός τελεστής αρίθμησης που ορίζεται ως:

$$N = \sum_k \sum_a N_{k,a} = \sum_k \sum_a a_{k,a}^+ a_{k,a}$$

μετατίθενται με τα A, ε και B λόγω των σχέσεων:

$$[a_{k,a}, N_{k,a}] = -\delta_{kk'} \delta_{aa'} a_{k,a'}$$

$$[a_{k,a}^+, N_{k',a}] = -\delta_{kk'} \delta_{aa'} a_{k,a}^+$$

Όπως είναι γνωστό στη κβαντομηχανική οι παρατηρήσεις που συνδέονται με μη μετατιθέμενους τελεστές δεν μπορούν ταυτόχρονα να οριστούν σε αυθαίρετους βαθμούς ακρίβειας. Στη περίπτωση μας αν ο αριθμός των φωτονίων είναι προσεγγιστικά καθορισμένος πρέπει απαραίτητα να υπάρχουν αβεβαιότητες στις τιμές των πεδίων. Τέτοιες διακυμάνσεις περιμένουμε ακόμα και στη κατάσταση του κενού.

Για να ελέγξουμε αυτή την ερμηνεία ας θεωρήσουμε τον τελεστή του ηλεκτρικού πεδίου:

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

παρόλο που η ανανεωμένη τιμή του ηλεκτρικού πεδίου $\langle 0|\mathbf{E}|0 \rangle$ εξαφανίζεται αφού $a_{k,a}|0 \rangle = 0$ η μέση τετραγωνική διακύμανση του ηλεκτρικού πεδίου είναι:

$$\langle 0|\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}|0 \rangle - |\langle 0|\mathbf{E}|0 \rangle|^2 = \langle 0|\mathbf{E} \cdot \mathbf{E}|0 \rangle = \infty$$

Άρα αν ο αριθμός κατάληψης είναι καθορισμένος μηδέν στην περίπτωση μας τότε η ισχύς του πεδίου είναι εντελώς

απροσδιόριστη. Αφού όμως το μετρήσιμο μέγεθος είναι η μέση ισχύς του πεδίου σε μία περιοχή του χώρου είναι πιο ρεαλιστικό να θεωρήσουμε το μέσο τελεστή πεδίου γύρω από ένα σημείο σαν:

$$\bar{\mathbf{E}} = \frac{1}{\Delta V} \int_{\Delta V} \mathbf{E} d^3\mathbf{x} \quad \text{όπου } \Delta V \text{ που περιέχει το θεωρούμενο σημείο}$$

Μπορούμε να δείξουμε ότι:

$$\langle 0 | \bar{\mathbf{E}} \cdot \bar{\mathbf{E}} | 0 \rangle \sim \hbar c / (\Delta \ell)^4$$

όπου $\Delta \ell$ είναι η γραμμική διάσταση του όγκου ΔV .

Η προηγούμενη εξίσωση χαρακτηρίζει τη διακύμανση του ηλεκτρικού πεδίου όταν δεν υπάρχουν φωτόνια. Γενικά αν το σύνολο των αριθμών κατάληψης είναι προσεγγιστικά καθορισμένο τότε το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο δεν έχουν ακριβή τιμή αλλά παρουσιάζουν διακυμάνσεις γύρω από μία καθορισμένη μέση τιμή. Μία άλλη παράξενη ιδιότητα του κβαντικού πεδίου ακτινοβολίας είναι ότι η συνιστώσες του $\mathbf{E}$ και του $\mathbf{B}$ δεν είναι απαραίτητα μετατιθέμενες.

Για παράδειγμα ισχύει:

$$[E_x(\mathbf{x}, t), B_y(\mathbf{x}', t)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

Αυτό οδηγεί στο ότι δεν μπορούμε με ακρίβεια να ορίσουμε τα $\mathbf{E}$ και $\mathbf{B}$ στο ίδιο σημείο στο χώρο με αυθαίρετες μονάδες ακρίβειας.

Όμως μπορούμε να δείξουμε ότι:

$$[E_x(\mathbf{x}, t), B_y(\mathbf{x}', t')] = 0 \quad \text{για}$$

$$(\mathbf{x} - \mathbf{x}')^2 - \frac{1}{c^2} (t - t')^2 \neq 0$$

Χρησιμοποιώντας τη μεταθετική σχέση:

$$[E_x(\mathbf{x}, t), B_y(\mathbf{x}', t)] = i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$$

μπορούμε να γράψουμε μία σχέση απροσδιοριστίας που εμπλέκει τα $\Delta \mathbf{E}$ και $\Delta \mathbf{B}$. Πριν όμως μία τέτοια σχέση φυσικά πρέπει πρώτα να ορίσουμε τι σημαίνει για τη κβαντική θεωρία η μέτρηση της ισχύς του πεδίου. Αυτό θα απαιτούσε μία πιο προσεκτική συζήτηση με βάση την εργασία των N. Bohr και L. Rosenfeld το 1933.

Από τη κλασική οπτική γνωρίζουμε ότι ένας εντοπισμένος η συγκλίνον φωτεινός παλμός μπορεί να κατασκευαστεί από υπέρθεση επίπεδων κυμάτων με καθορισμένες σχέσεις φάσεων. Για το σκοπό αυτό θεωρούμε ένα τελεστή φάσης $\varphi_{\mathbf{k},a}$ οποίος σχετίζεται με δεδομένα $\mathbf{k}, a$ ώστε η παρατήρηση που ανταποκρίνεται σ' αυτόν είναι η φάση του επίπεδου κύματος.

Αυτό μπορεί να γίνει θέτοντας:

$$a_{\mathbf{k},a} = e^{i(\varphi_{\mathbf{k},a} - \omega t)} \cdot \sqrt{N_{\mathbf{k},a}} \quad \text{και}$$

$$a_{\mathbf{k},a}^{\dagger} = \sqrt{N_{\mathbf{k},a}} \cdot e^{i(\varphi_{\mathbf{k},a} - \omega t)}$$

όπου ο τελεστής $\sqrt{N_{\mathbf{k},a}}$ ικανοποιεί την ιδιότητα $(\sqrt{N_{\mathbf{k},a}})^2 = N_{\mathbf{k},a}$

Το κβαντισμένο πεδίο ακτινοβολίας μπορεί τώρα να γραφεί ώστε οι μόνοι τελεστές που εμφανίζονται να είναι οι $\sqrt{N_{\mathbf{k},a}}$, $\varphi_{\mathbf{k},a}$

Άρα:

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \sum_a c \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \left[\varepsilon^{(a)} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \varphi_{\mathbf{k},a})] \right. \\ \left. + \sqrt{N_{\mathbf{k},a}} + \sqrt{N_{\mathbf{k},a}} \varepsilon^{(a)} \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t + \varphi_{\mathbf{k},a})] \right]$$

Η παραπάνω έκφραση είναι βολική στη συζήτηση για τη σύνδεση με τη κλασική περιγραφή.

Οι σχέσεις μετάθεσης για τα α, α^+ (για δεδομένα k, a) μπορούν τώρα να γραφούν ως:

$$e^{i\varphi} N e^{-i\varphi} - N = 1$$

$$e^{i\varphi} N - N e^{i\varphi} = e^{i\varphi}$$

Είναι εύκολο να δείξουμε αναπτύσσοντας κάθε εκθετικό ότι οι σχέσεις μετάθεσης ικανοποιούν αν $N\varphi - \varphi N = i$. Αυτό οδηγεί με μία νέα σχέση απροσδιοριστίας $\Delta N \cdot \Delta\varphi \geq 1$.

Για παράδειγμα εάν η φάση των δύο συνιστωσών του επίπεδου κύματος είναι δεδομένη ακριβώς τότε δεν μπορούμε να καθορίσουμε το αντίστοιχο αριθμό κατάληψης για τη κάθε μία συνιστώσα του κύματος. Η παραπάνω αρχή απροσδιοριστίας μπορεί να χρησιμοποιηθεί ώστε να παράγει μία πιο οικεία αρχή απροσδιοριστίας για το παλμό φωτός.

Αφού ο τελεστής ορμής γράφεται σαν ένα άθροισμα ενός αριθμών τελεστών με βάρος $\hbar k$ η ορμή του φωτεινού παλμού είναι απροσδιόριστη αφού υπάρχουν καθορισμένες σχέσεις φάσεων ανάμεσα στις συνιστώσες που είναι επίπεδα κύματα. Εντωμεταξύ ένα εντοπισμένο κυματοπακέτο μπορεί να κατασκευαστεί από υπέρθεση επιπέδων κυμάτων με καθορισμένες σχέσεις φάσεων. Άρα δεν μπορούμε να συσχετίσουμε μία καθορισμένη ορμή με ένα καλά εντοπισμένο παλμό. Για απλότητα ας θεωρήσουμε ένα μονοδιάστατο κυματοπακέτο περιορισμένο σε μία περιοχή της οποίας η χαρακτηριστική διάσταση είναι η Δx . Παρόλο που η μαθηματική περιγραφή ενός τέτοιου κυματοπακέτου είναι περίπλοκη περιμένουμε ότι η φάση μίας τυπικής συνιστώσας επίπεδου κύματος πρέπει ποιοτικά να είναι γνωστή με μία ακρίβεια:

$k_x \cdot \Delta x$ τότε η αρχή της απροσδιοριστίας

$$\Delta N \cdot \Delta\varphi \geq 1 \text{ δίνει } \Delta P_x \Delta x \geq \hbar$$

αφού η αβεβαιότητα στην ορμή έχει τάξη $\Delta N \hbar k_x$. Η σχέση είναι παρόμοια με την αρχή της απροσδιοριστίας του Heisenberg για ένα σωματίδιο.

Η αρχή της απροσδιοριστίας για ένα υλικό σωματίδιο π.χ. ένα ηλεκτρόνιο μπορεί να δοθεί μόνο εάν ο παλμός φωτός επίσης ικανοποιεί τη σχέση $\Delta P_x \cdot \Delta x \geq h$.

Αν δεν υπάρχουν περιορισμοί στο Δx και ΔP_x για το παλμό φωτός θα μπορούμε να ορίσουμε τη θέση του ηλεκτρονίου με ένα άπειρο βαθμό ακρίβειας με ένα καλά εντοπισμένο παλμό χωρίς τη μεταφορά ενός υπολογίσιμου ποσού αβεβαιότητας στην ορμή στο ηλεκτρόνιο. Δύο επιτυχημένες μετρήσεις αυτού του είδους θα μπορούσαν να ορίσουν με ακρίβεια την ορμή και τη θέση του ηλεκτρονίου σε αντίθεση με τη σχέση του Heisenberg.

Ισχύς της κλασσικής προσέγγισης του Η/Μ πεδίου

Όλες αυτές οι ιδιαιτερότητες του κβαντισμένου πεδίου ακτινοβολίας φαίνονται ενοχλητικές αν λάβουμε υπόψη ότι η κλασσική θεωρία του Η/Μ ερμηνεύει με μεγάλη επιτυχία πολλά φαινόμενα.

Στη περίπτωση του κενού έχουμε:

$$\langle 0 | \vec{E} \cdot \vec{E} | 0 \rangle \sim \frac{\hbar c}{\lambda^4}$$

Εντωμεταξύ σύμφωνα με τη κλασσική ηλεκτροδυναμική με μέση χρονική τιμή του E^2 μπορεί να υπολογιστεί με την ενεργειακή πυκνότητα του Η/Μ κύματος.

Έχουμε:

$$(E^2)_{\text{μενο}} = \bar{n} \hbar \left(\frac{c}{\lambda} \right)^2 \quad \text{όπου } \bar{n}$$

είναι ο αριθμός των φωτονίων ανά μονάδα όγκου.

Για την αξία της κλασσικής περιγραφής για να αμελήσουμε κβαντικά φαινόμενα πρέπει $\bar{n} \gg \frac{1}{\lambda^3}$. Δηλαδή η περιγραφή των φυσικών φαινομένων που βασίζεται στη κλασσική ηλεκτροδυναμική είναι ρεαλιστική. Εφόσον ο αριθμός των φωτονίων ανά όγκο λ^3 είναι κατά πολύ μεγαλύτερο από ένα.

Επομένως το κλασσικό όριο της κβαντικής θεωρίας της ακτινοβολίας είναι αποδεκτό όταν ο αριθμός των φωτονίων γίνεται τόσο μεγάλος ώστε ο αριθμός κατάληψης μπορεί να θεωρηθεί ως συνεχή μεταβλητή.

Η εξέλιξη στο χώρο και το χρόνο του κλασσικού ηλεκτρομαγνητικού κύματος προσεγγίζει τη δυναμική συμπεριφορά τρισεκατομμυρίων φωτονίων.

Μηχανισμός απορρόφησης – εκπομπής φωτονίου από άτομο. Ισχύς της ημικλασσικής προσέγγισης και στις δύο προηγούμενες περιπτώσεις

Η χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατομικών ηλεκτρονίων και του πεδίου ακτινοβολίας μπορεί να παρατηρηθεί μέσω του μετασχηματισμού:

$$\mathbf{P} \rightarrow \mathbf{P} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \quad \text{όπου τώρα το } \mathbf{A}$$

είναι το κβαντικό πεδίο ακτινοβολίας Έχουμε:

$$H_{int} = \sum_i \left[-\frac{e}{2mc} (\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) + \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \mathbf{P}_i) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \right] \quad (10)$$

Η άθροιση γίνεται πάνω στα ατομικά ηλεκτρόνια που συμμετέχουν στην αλληλεπίδραση.

Η έκφραση $\mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t)$ είναι τώρα ένας τελεστής πεδίου που δρα σε μία φωτονική κατάσταση ή σε πολλές καταστάσεις φωτονίων στη θέση $\mathbf{x}_i$. Όπου το $\mathbf{x}_i$ αναφέρεται στη συντεταγμένη του i ηλεκτρονίου. Ο τελεστής $\mathbf{P}_i$ στο $\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{A}$ είναι ένας διαφορικός τελεστής που δρα σε οτιδήποτε βρίσκεται δεξιά. Όμως εξαιτίας της συνθήκης εγκαρσιότητας $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ είναι θεμιτό να αντικαταστήσουμε το $\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{A}$ με το $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}_i$. Επίσης αφού η μαγνητική ροπή του spin αλληλεπιδρά με το μαγνητικό πεδίο υπάρχει μία πρόσθετη αλληλεπίδραση της μορφής:

$$H_{int}^{(spin)} = - \sum_i \frac{e\hbar}{2mc} \sigma_i [\nabla x A(x, t)] x = x_i \quad (11)$$

Όπως είδαμε το $A(x, t)$ είναι γραμμικός συνδυασμός των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής για φωτόνια.

Η ερώτηση για το ποιος τελεστής δημιουργίας ή καταστροφής συνεπάγεται μη εξαφανιζόμενα στοιχεία της μήτρας εξαρτάται αποκλειστικά από τη φύση των αρχικών και τελικών καταστάσεων.

Για τη χρονοεξαρτώμενη θεωρία των διαταραχών είναι γνωστό ότι το στοιχείο του πίνακα μπορεί να υπολογιστεί σε πρώτη τάξη με τη χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης H_I απλά παίρνοντας το στοιχείο της μήτρας του H_I μεταξύ του A και B . Η H_{int} που εμφανίζεται στις (10), (11) δρα όμως όχι μόνο στις ατομικές καταστάσεις αλλά και στις φωτονικές καταστάσεις. Στη κβαντική θεωρία της ακτινοβολίας το καταστατικό διάνυσμα της αρχικής ή της τελικής κατάστασης προέρχεται απευθείας του καταστατικού διανύσματος για μία ατομική κατάσταση (ορισμένη ως A, B κ.λ.π) και του καταστατικού διανύσματος για μία απλή ή πολλαπλή κατάσταση φωτονίων (χαρακτηρίζεται ως $n_{k,a}$). Έχοντας αυτό κατά νου μπορούμε να υπολογίσουμε το στοιχείο του πίνακα μετάβασης στη πιο χαμηλή τάξη παίρνοντας τα στοιχεία του πίνακα μεταξύ των αρχικών και τελικών καταστάσεων.

Ας θεωρήσουμε αρχικά την απορρόφηση κβάντου φωτός που χαρακτηρίζεται από k, a . Ένα άτομο που αρχικά βρισκόταν στη κατάσταση A μία μετάβαση ακτινοβολίας στη κατάσταση B . Για απλότητα θεωρούμε ότι υπάρχουν φωτόνια μόνο στη κατάσταση (k, a) παρόντα. Αν είναι $n_{k,a}$ φωτόνια στην αρχική κατάσταση θα είναι $n_{k,a} - 1$ φωτόνια στη τελική κατάσταση παρόλο που το A περιέχει και τους δύο τελεστές $a_{k,a}$ και $a_{k,a}^+$ μόνο ο $a_{k,a}$ δημιουργεί ένα στοιχείο πίνακα που δεν εξαφανίζεται όσο υπολογίζουμε τη διαδικασία της απορρόφησης στη χαμηλότερη τάξη.

Ο τετραγωνικός όρος $A \cdot A$ δεν συνεισφέρει στη διαδικασία σε χαμηλή τάξη αφού αλλάζει το συνολικό αριθμό των φωτονίων σε

0 ή ± 2 . Άρα αγνοώντας την αλληλεπίδραση εξαιτίας της μαγνητικής διπολικής ροπής έχουμε:

$$\begin{aligned} & \langle B, n_{k,a-1} | H_{int} | A, n_{k,a} \rangle = \\ & = -\frac{e}{mc} \langle B, n_{k,a-1} | \left| \sum_i c \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega V}} a_{k,a}(0) e^{ikx_i - i\omega t} \mathbf{P}_i \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \right| \\ & A, n_{k,a} \rangle = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{n_{k,a} \hbar}{2\omega V}} \sum_i \langle B | e^{ikx_i} \mathbf{P}_i \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} | A \rangle e^{-i\omega t} \quad (11) \end{aligned}$$

Ας σημειωθεί ότι ο τελεστής καταστροφής για ένα φωτόνιο με ορμή και πόλωση διαφορετικά του $\hbar \mathbf{k}$ και $\boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}$ δίνει μηδενικό στοιχείο πίνακα.

Αξίζει τώρα να συγκρίνουμε την έκφραση που παρατηρούμε χρησιμοποιώντας την ημικλασσική θεωρία της ακτινοβολίας στην οποία το διανυσματικό δυναμικό συμπεριφέρεται κλασσικά. Μέσα στο πλαίσιο της ημικλασσικής θεωρίας μπορούμε να ορίσουμε ένα ισοδύναμο διανυσματικό δυναμικό $A^{(abs)}$ τέτοιο ώστε όταν χρησιμοποιηθεί στη διαδικασία της απορρόφησης παρατηρούμε ένα στοιχείο πίνακα παρόμοιο με το προηγούμενο.

Προφανώς:

$$\begin{aligned} A^{(abs)} &= A_0^{(abs)} e^{ikx - i\omega t} \\ \mu \varepsilon \quad A_0^{(abs)} &= c \sqrt{\frac{n_{k,a} \hbar}{2\omega V}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \end{aligned}$$

Σύμφωνα με την ημικλασσική θεωρία η πιθανότητα απορρόφησης είναι ανάλογη στη πυκνότητα $|A_0|^2$ ενώ στη κβαντική θεωρία είναι ανάλογη στο $n_{k,a}$. Περιμένουμε ότι η ημικλασσική θεωρία προσεγγίζει τη πραγματικότητα για μεγάλες τιμές του $n_{k,a}$ αλλά αφού το στοιχείο του πίνακα (11) είναι γραμμικό ως προς $\sqrt{n_{k,a}}$ η ημικλασσική θεωρία δίνει τις σωστές απαντήσεις ακόμα και για μικρές τιμές του $n_{k,a}$ δηλαδή για ασθενή ακτινοβολία.

Το παραπάνω γεγονός δεν συμβαίνει για τη διαδικασία εκπομπής. Αυτή τη φορά είναι ο τελεστής δημιουργίας $a_{k,\alpha}^+$ που συνεπάγεται ένα μη εξαφανιζόμενο συνδυασμό αφού ο αριθμός κατάληψης των φωτονίων αυξάνεται κατά ένα. Ομοίως έχουμε:

$$\langle B, n_{ka+1} | H_{int} | A, n_{ka} \rangle = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{(n_{ka+1})\hbar}{2\omega V}} \sum_i \langle B | e^{ikx_i} \mathbf{p}_i \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} | A \rangle e^{i\omega t}$$

Αν ο n_{ka} είναι πολύ μεγάλος η ημικλασσική συμπεριφορά βασισμένη στα:

$$\mathbf{A}^{(abs)} = \mathbf{A}_0^{(abs)} e^{ikx - \omega t} \quad \mu\epsilon \quad \mathbf{A}_0^{(abs)} = C \sqrt{\frac{(n_{ka+1})\hbar}{2\omega V}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}$$

είναι επαρκής αφού πρακτικά δεν υπάρχει διαφορά ανάμεσα στο $\sqrt{n_{ka+1}}$ και $\sqrt{n_{ka}}$. Επομένως για πολύ έντονη ακτινοβολία το πρόβλημα μπορεί να αντιμετωπιστεί με τη χρήση της ημικλασσικής θεωρίας. Από την άλλη μεριά όμως για μικρές τιμές των n_{ka} η ημικλασσική θεωρία αποτυγχάνει τελείως. Ειδικότερα το στοιχείο του πίνακα μετάβασης για την εκπομπή πρέπει να μην είναι μηδέν όταν δεν έχουμε αρχικά παρόντα φωτόνια.

Αυτό ερμηνεύει την εκπομπή ενός φωτονίου από ένα απομονωμένο άτομο ακόμα και όταν δεν υπάρχουν παρόντα ηλεκτρομαγνητικά κύματα ένα φαινόμενο γνωστό ως «αυθόρμητη εκπομπή». Σε αντίθεση η εκπομπή ενός φωτονίου στη περίπτωση που $n_{ka} \neq 0$ είναι γνωστή σαν επαγόμενη ή εξαναγκασμένη εκπομπή. Το γεγονός ότι μπορούμε να υπολογίσουμε την αυθόρμητη εκπομπή με τόσο φυσικό τρόπο είναι ένας από τους θριάμβους της κβαντικής θεωρίας της ακτινοβολίας σε αντίθεση με την ημικλασσική θεωρία της ακτινοβολίας.

Έτσι αν στο ηλεκτρομαγνητικό πεδίο περιγράφεται από ένα κλασσικό δυναμικό το στοιχείο του πίνακα μετάβασης για την εκπομπή είναι μηδέν αφού $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = 0$ όταν $\mathbf{A} = 0$. Στη κβαντική

Θεωρία πεδίου όμως το στοιχείο του πίνακα του τελεστή πεδίου $A(x, t)$ που λαμβάνεται μεταξύ της κατάστασης του κενού και μίας φωτονικής κατάστασης δεν εξαφανίζεται. Γενικά στη κλασσική θεωρία το A είναι ένα εξωτερικά εφαρμοζόμενο δυναμικό που επιδρά στα φορτισμένα σωματίδια αλλά δεν δέχεται επιδράσεις από αυτό το A δεν αλλάζει καθώς ένα άτομο πραγματοποιεί μία εκπομπή ακτινοβολίας. Αυτή η περιγραφή είναι ικανοποιητική ακόμα και στο πλαίσιο της κβαντικής θεωρίας όταν ο αριθμός κατάληψης είναι τόσο μεγάλος ώστε το πεδίο ακτινοβολίας μπορεί να θεωρηθεί ως μία ανεξάντλητη πηγή και καταβόθρα φωτονίων. Είναι σαφές ότι για έντονη ακτινοβολία αφαιρώντας η προσθέτοντας ένα φωτόνιο από το πεδίο ακτινοβολίας δεν έχει κάποια πρακτική διαφορά.

Από την άλλη μεριά για ασθενή ή απύουσα ακτινοβολία η κλασσική περιγραφή έρχεται σε δύσκολη θέση αφού η αλλαγή που επιφέρει στο πεδίο ακτινοβολίας η εκπομπή η απορρόφηση ενός φωτονίου είναι εντελώς αξιοσημείωτη.

Εισαγωγή του ισοδύναμου κλασσικού δυναμικού

Με το προηγούμενο κατά νου μπορούμε να ορίσουμε ένα ισοδύναμο κλασσικό δυναμικό για τη προσέγγιση της διαδικασίας εκπομπής ως εξής:

$$A^{(emiss)} = A_0^{(emiss)} e^{-ikx - i\omega t}$$

$$\mu\epsilon \quad A_0^{(emiss)} = c \sqrt{(n_{k,a+1}) \hbar / 2\omega V} \cdot \epsilon^{(a)}$$

Αντιμετωπίζοντας το προηγούμενο δυναμικό ως ένα χρονοεξαρτώμενο διάνυσμα δυναμικού που εμφανίζεται στην εξίσωση Schrodinger μπορούμε να παρατηρήσουμε το σωστό στοιχείο του πίνακα για την εκπομπή.

Το γεγονός ότι το $A^{(emiss)}$ δεν είναι πλέον γραμμικό ως προς το $\sqrt{n_{k,a}}$ και δεν είναι το συζυγές $A^{(abs)}$ αντανακλά την αποτυχία της κλασσικής περιγραφής. Συνοψίζοντας η εκπομπή η απορρόφηση ενός κβάντου φωτός από ένα φορτισμένο σωματίδιο είναι εντελώς

ισοδύναμη με την αλληλεπίδραση ενός φορτισμένου σωματιδίου με το ισοδύναμο μη κβαντισμένο δυναμικό που δίνεται με τις σχέσεις:

$$\text{απορρόφηση} \quad c \sqrt{\frac{n_{k,a} \hbar}{2\omega V}} \epsilon^{(\alpha)} e^{ikx - \omega t} \quad (13)$$

$$\text{εκπομπή} \quad c \sqrt{\frac{(n_{k,a+1}) \hbar}{2\omega V}} \epsilon^{(\alpha)} e^{-ikx + i\omega t} \quad (14)$$

όπου $n_{k,a}$ είναι ο αριθμός κατάληψης των φωτονίων της αρχικής κατάστασης.

Στοιχεία χρονοεξαρτώμενης θεωρίας διαταραχών

Σύμφωνα με τη χρονοεξαρτώμενη θεωρία διαταραχών όπως αναπτύχθηκε από τον Dirac μία ατομική κυματοσυνάρτηση μπορεί να αναπτυχθεί σαν:

$$\Psi = \sum_k C_k(t) \mathcal{U}_k(x) e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} \quad \text{όπου } \mathcal{U}_K(x)$$

Είναι οι ιδιοσυναρτήσεις της ενέργειας με ιδιοτιμές E_K που ικανοποιούν τη σχέση:

$$H_0 \mathcal{U}_k(x) = E_k \mathcal{U}_k(x)$$

χωρίς τη παρουσία της χρονοεξαρτώμενης διαταραχής. Η χρονοεξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger με τη παρουσία της διαταραχής κάτω από την επίδραση ενός χρονοεξαρτώμενου δυναμικού $H_I(t)$ είναι:

$$(H_0 + H_I) \Psi = i\hbar \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = i\hbar \sum_k \left(\dot{C}_k \mathcal{U}_k e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} - e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} C_k e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} \right) \quad (15)$$

Στη περίπτωση μας μαζί με τις κινητικές τους ενέργειες η αδιατάρακτη χαμιλτονιανή περιέχει τις αλληλεπιδράσεις Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων και νουκλεονίων ενώ ο όρος $H_I(t)$ περιέχει την αλληλεπίδραση των ατομικών ηλεκτρονίων με το ισοδύναμο δυναμικό των σχέσεων (13), (14). Χρησιμοποιώντας τη (15) έχουμε:

$$\sum_k H_I C_k \mathcal{U}_k e^{-i \frac{E_k t}{\hbar}} = i\hbar \sum_\ell \dot{C}_\ell \mathcal{U}_\ell e^{-i \frac{E_\ell t}{\hbar}}$$

πολλαπλασιάζοντας με $\mathcal{U}_m^* e^{-i \frac{E_m t}{\hbar}}$ και ολοκληρώνοντας ως προς τις χωρικές συντεταγμένες παρατηρούμε την εξίσωση:

$$\dot{C}_m = \sum_k \left(\frac{1}{i\hbar} \right) \langle m | H_I(t) | k \rangle e^{-i \frac{(E_m - E_k)t}{\hbar}} \cdot C_k(t)$$

Ας υποθέσουμε ότι μόνο η κατάσταση ℓ ήταν κατηλειμένη όταν η χρονοεξαρτώμενη διαταραχή βρίσκεται στη στιγμή $t = 0$. Άρα $C_k(0) = \delta_{k\ell}$.

Μπορούμε να προσεγγίσουμε τον C_m με την:

$$C_m^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' \langle m | H_I(t') | \ell \rangle e^{i \frac{(E_m - E_\ell)t'}{\hbar}}$$

Αν για κάποιο λόγο το $C_m^{(1)}(t)$ μηδενίζεται για μία καλύτερη προσέγγιση έχουμε:

$$C_m \simeq C_m^{(1)} + C_m^{(2)} \quad \mu\epsilon$$

$$C_m^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum_n dt'' \int_0^t dt \int_0^{t'} \langle m | H_I(t'') | n \rangle e^{i \frac{(E_m - E_n)t''}{\hbar}}$$

$$\langle n | H_I(t') | \ell \rangle e^{i (E_n - E_\ell)t'/\hbar}$$

Για ένα φωτόνιο που βρίσκεται σε ένα στοιχείο στερεάς γωνίας $d\Omega$ ο αριθμός των επιτρεπόμενων καταστάσεων σε ένα ενεργειακό διάστημα

$[\hbar\omega, \hbar(\omega + d\omega)]$ μπορεί να γραφτεί ως:

$$\rho_{\hbar\omega, d\Omega} d(\hbar\omega) = \frac{V|\mathbf{k}|^2 d|\mathbf{k}| d\Omega}{(2\pi)^3 \delta(\hbar\omega)} = \frac{V\omega^2}{(2\pi)^3} \frac{d\Omega}{\hbar C^3}$$

Για τη πιθανότητα μετάβασης ανά μονάδα χρόνου σε ένα στοιχείο στερεάς γωνίας $d\Omega$ έχουμε το περίφημο χρυσό κανόνα

$$W_{d\Omega} = \int (|C_m^{(1)}|^2 / t) \rho_{\hbar\omega, d\Omega} d(\hbar\omega) =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} |C_m| H'_I |\ell\rangle|^2 \rho_{\hbar\omega, d\Omega} \text{ όπου } \hbar\omega \text{ πρέπει να ικανοποιεί την}$$

$$E_m - E_\ell + \hbar\omega = 0$$

Αφού διαπραγματευόμαστε την εκπομπή και απορρόφηση ακτινοβολίας ενός φωτονίου από ένα άτομο μπορούμε να εργαστούμε μόνο με τον $C_m^{(1)}$. Το χρονοεξαρτώμενο δυναμικό H_I μπορεί να γραφεί ως:

$$H_I(t) = H'_I e^{\mp i\omega t} \text{ για } \begin{cases} \text{απορρόφηση} \\ \text{εκπομπή} \end{cases}$$

τότε:

$$C_m^{(1)} = \frac{1}{i\hbar} \langle m | H'_I | \ell \rangle \int_0^t dt' e^{i \frac{(E_m - E_\ell \mp \hbar\omega)t'}{\hbar}}$$

Με εκτέλεση της χρονικής ολοκλήρωσης παίρνουμε:

$$|C_m^{(1)}(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle m | H'_I | \ell \rangle|^2 t \delta(E_m - E_\ell \mp \hbar\omega)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την:

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \frac{\ell \sin^2 \alpha x}{\alpha x^2} = \delta(x)$$

Ας σημειωθεί ότι η πιθανότητα μετάβασης ανά μονάδα χρόνου είναι $\left| C_m^{(1)}(t) \right|^2 / t$ ανεξάρτητη του χρόνου.

Ας συμπληρώσουμε τώρα το φορμαλισμό μας στη διαδικασία εκπομπής. Οι επιτρεπόμενες καταστάσεις των φωτονίων που επιτρέπονται από τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες βρίσκονται σε ένα συνεχές φάσμα ενέργειας καθώς ο κανονικοποιημένος όγκος γίνεται άπειρος.

Αυθόρμητη εκπομπή ακτινοβολίας (διπολική προσέγγιση)

Στη περίπτωση της αυθόρμητης εκπομπής μία ατομική κατάσταση A πραγματοποιεί μία μετάβαση στη κατάσταση B με ταυτόχρονη εκπομπή ακτινοβολίας χωρίς τη παρουσία κάποιου εξωτερικού ηλεκτρομαγνητικού κύματος. Το στοιχείο της μήτρας:

$$\langle B | H'_I | A \rangle$$

είναι στη περίπτωση αυτή

$$\langle B, n_{k,a+1} | H_{int} | A, n_{ka} \rangle = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{(n_{ka+1}) \hbar}{2\omega V}}$$

$$\sum_i \langle B | e^{-ikx_i} P_i \epsilon^{(\alpha)} | A \rangle e^{i\omega t}$$

με τον παράγοντα $e^{i\omega t}$ να παραλείπεται ενώ $n_{ka} = 0$. Επίσης για τη πιθανότητα εκπομπής ανά μονάδα χρόνου σε μία στερεά γωνία $d\Omega$ παρατηρούμε:

$$W_{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 \hbar}{2m^2 \omega V} \left| \sum_i \langle B | e^{-ikx_i} \epsilon^{(\alpha)} P_i | A \rangle \right|^2 \frac{V \omega^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3}$$

όπου το ω ικανοποιεί τη διατήρηση της ενέργειας $E_A = E_B + \hbar\omega$

Ο κανονικοποιημένος όγκος V ακυρώνεται όπως θα έπρεπε. Σε μία τυπική ατομική εκπομπή ακτινοβολίας το μήκος κύματος του

εκπεμπόμενου φωτονίου των διαστάσεων του ατόμου αφού ανήκει στην οπτική περιοχή. Έτσι

$$\lambda = \frac{1}{|k|} \gg r_{atom}$$

Αυτό γιατί το λ_{photon} είναι της τάξης μερικών εκατοντάδων $angstrom$ όταν η ατομική ακτίνα είναι της τάξης μίας μονάδας $angstrom$. Αυτό σημαίνει ότι μπορούμε να γράψουμε:

$$e^{-ikx_i} = 1 - ikx_i - \frac{(kx_i)^2}{2} + \dots$$

Αποδεικνύεται επίσης ότι η αλληλεπίδραση της μαγνητικής ροπής του spin είναι επίσης αμελητέα. Αυτό γιατί το στοιχείο μήτρας

$$\left(\frac{e}{mc}\right) \epsilon^{(\alpha)} P_i$$

είναι μεγαλύτερο από το αντίστοιχο

$$\frac{e\hbar}{2mC} \sigma_i \cdot (k \times \epsilon^{(\alpha)}) \text{ αφού } \frac{\lambda_{photon}}{r_{atom}} \gg 1$$

και αφού

$$\text{το } P_i \text{ είναι της τάξης του } \frac{\hbar}{r_{atom}}$$

Μία προσέγγιση στην οποία μόνο το $\epsilon^{(\alpha)} \cdot P_i$ λαμβάνεται υπόψη ονομάζεται προσέγγιση ηλεκτρικού δίπολου.

Χαρακτηριστικά της αυθόρμητης εκπομπής ακτινοβολίας.

- i) **Υπολογισμός συνολικής πιθανότητας μετάβασης στη διπολική προσέγγιση.**
- ii) **Υπολογισμός μέσου χρόνου ζωής μιας ατομικής κατάστασης. Εφαρμογή για τη κατάσταση $2P$ του H .**
- iii) **Μετάβαση ηλεκτρικού τετραπόλου, εκπομπή μαγνητικού δίπολου.**

Για να απλοποιήσουμε ακόμα το πρόβλημα ας υποθέσουμε ότι μόνο ένα από τα ατομικά ηλεκτρόνια συμμετέχει στην αυθόρμητη εκπομπή όπως συμβαίνει στη περίπτωση ενός υδρογονοειδούς ατόμου (ενός ατόμου δηλαδή με ένα ηλεκτρόνιο σθένους).

Παραλείποντας το άθροισμα πάνω στα i έχουμε:

$$W_{d\Omega} = \frac{e^2 \omega}{8\pi^2 m^2 \hbar c^3} |\langle B | \mathbf{P} | A \rangle \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}|^2 d\Omega$$

χρησιμοποιώντας τη σχέση μετάθεσης:

$$[\mathbf{P}^2, x] = -2i\hbar \mathbf{P}$$

μπορούμε να ξαναγράψουμε το στοιχείο της μήτρας $\langle B | \mathbf{P} | A \rangle$

ως εξής:

$$\begin{aligned} \langle B | \mathbf{P} | A \rangle &= \langle B | \left[\frac{im}{\hbar} [H_0, x] \right] | A \rangle = \\ &= -\frac{im(E_B - E_A)}{\hbar} \langle B | x | A \rangle = im\omega x_{BA} \end{aligned}$$

Αυτό το στοιχείο μήτρας είναι ακριβώς ότι θα μπορούσαμε απευθείας να υπολογίσουμε αν η χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης αντικαθίστατο όπως παρακάτω:

$$-\frac{e \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}}{mc} \rightarrow \frac{e}{c} \mathbf{x} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -e \mathbf{x} \mathbf{E}$$

όπου και πάλι κρατήθηκε ο κυρίαρχος όρος στη ανάπτυξη του επίπεδου κύματος του $\mathbf{E}$. Η προέλευση του όρου «προσέγγιση ηλεκτρικού δίπολου» είναι τώρα προφανής.

Ο κανόνας επιλογής για τη στροφορμή είναι:

$$|J_B - J_A| = 1,0 \quad \text{χωρίς } 0 \rightarrow 0$$

Η εξίσωση

$$W_{d\Omega} = \frac{e^2 \omega}{8\pi^2 m^2 \hbar c^3} |\langle B | \mathbf{P} | A \rangle \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}|^2 d\Omega$$

μπορεί επίσης να γραφεί και ως

$$W_{d\Omega} = \frac{e^2 \omega^3}{8\pi^2 \hbar c^3} |\mathbf{x}_{BA}| \cos \theta^{(\alpha)} d\Omega$$

όπου ορίζουμε τη γωνία $\theta^{(\alpha)}$ μέσω του

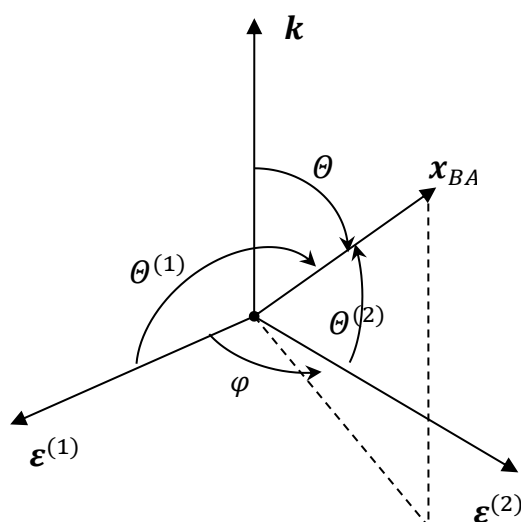
$$\cos \theta^{(\alpha)} = \frac{|\mathbf{x}_{BA} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}|}{|\mathbf{x}_{BA}|}$$

Ας σημειωθεί ότι:

$$\begin{aligned} |\mathbf{x}_{BA}|^2 &= |x_{BA}|^2 + |\mathbf{y}_{BA}|^2 + |z_{BA}|^2 = \\ &= \left| -\frac{(x_{BA} + i \mathbf{y}_{BA})}{\sqrt{2}} \right|^2 + \left| \frac{(x_{BA} - i \mathbf{y}_{BA})}{\sqrt{2}} \right|^2 + |z_{BA}|^2 \end{aligned}$$

Μέχρι τώρα ενδιαφερθήκαμε για την εκπομπή ακτινοβολίας στη οποία ένα φωτόνιο με καθορισμένα $\mathbf{k}, \alpha$ εκπέμπεται. Τώρα θα αθροίσουμε πάνω στις δύο ανεξάρτητες καταστάσεις πόλωσης για δεδομένο $\mathbf{k}$ και θα ολοκληρώσουμε πάνω σε όλες τις κατευθύνσεις διάδοσης.

Από την παρακάτω εικόνα είναι προφανές ότι:



$$\cos \theta^{(1)} = \sin \theta \cos \varphi \quad \text{και}$$

$$\cos \Theta^{(2)} = \sin \theta \sin \varphi$$

το άθροισμα πάνω στις δύο καταστάσεις πόλωσης δίνει $\sin^2 \theta$ ολοκληρώνοντας πάνω σε όλες τις δυνατές κατευθύνσεις διάδοσης με τη κατεύθυνση του $\mathbf{x}_{BA}$ σταθερή στο χώρο παρατηρούμε:

$$2\pi \int_{-1}^1 \sin^2 \theta d(\cos \theta) = 8\pi/3$$

Τελικά για τη συνολική πιθανότητα μετάβασης στην αυθόρμητη εκπομπή έχουμε:

$$W = \frac{e^2 \omega^3}{8\pi \hbar c^3} |\mathbf{x}_{BA}|^2 = \left(\frac{e^2}{4\pi \hbar c} \right) \frac{4}{3} \frac{\omega^3}{c^2} |\mathbf{x}_{BA}|^2 \quad \mu\epsilon \quad \frac{e^2}{4\pi \hbar c} \simeq \frac{1}{137}$$

Ας σημειωθεί ότι οι διαστάσεις είναι $(\chi\rho\acute{o}\nu\omicron\varsigma)^{-1}$ όπως ήταν αναμενόμενο.

Για να υπολογιστεί ο μέσος χρόνος ζωής τ μίας κατάστασης A πρέπει να αθροίσουμε τις πιθανότητες εκπομπής σε όλες τις πιθανές τελικές καταστάσεις που επιτρέπονται από τον κανόνα επιλογής και τη διατήρηση της ενέργειας.

$${}^{\prime}A\rho\alpha \quad \frac{1}{T_A} = \sum_i W_{A \rightarrow B_i}$$

Ειδικότερα είναι σημαντικό να αθροίσουμε πάνω σε όλους τους μαγνητικούς κβαντικούς αριθμούς της τελικής κατάστασης.

Σαν συγκεκριμένο παράδειγμα αναφέρουμε το μέσο χρόνο ζωής για την ακτινοβολούσα $E1$ εκπομπή από τη κατάσταση με κβαντικούς αριθμούς (n, ℓ, m) στη κατάσταση με (n', ℓ', m') όπου $m' = m, m \pm 1$ δίνεται από την:

$$\sum_{m'} W[(n \ell m) \rightarrow (n' \ell' m')] = \frac{e^2 \omega^3}{3\pi \hbar^2 c^3} \left[\begin{matrix} (\ell + 1)/(2\ell + 1) \\ \ell/(2\ell + 1) \end{matrix} \right].$$

$$\cdot \left| \int_U^{\infty} R_{n'\ell'}(r) R_{n\ell}(r) r^3 dr \right|^2 \quad \text{για } \ell' = \begin{cases} \ell + 1 \\ \ell - 1 \end{cases} \quad (16)$$

όπου $R_{n\ell}(r)$ είναι η κανονικοποιημένη ακτινική κυματοσυνάρτηση του υδρογονοειδούς ατόμου που χαρακτηρίζεται από τα n, ℓ . Ας σημειωθεί ότι ο χρόνος ζωής είναι ανεξάρτητος του m . Αυτό είναι λογικό από την άποψη του αναλλοίωτου της περιστροφής. Ο χρόνος ζωής μιας διεγερμένης κατάστασης απουσία εξωτερικού πεδίου δεν πρέπει να εξαρτάται από το προσανατολισμό στο χώρο. Γενικά αφού ο χρόνος ζωής μιας απομονωμένης κατάστασης είναι ανεξάρτητος από τη τιμή του m στον υπολογισμό του χρόνου ζωής μπορούμε ή να αθροίσουμε μόνο πάνω στους τελικούς μαγνητικούς αριθμούς για ένα καθορισμένο αρχικό μαγνητικό κβαντικό αριθμό ή να αθροίσουμε πάνω και στον αρχικό και τελικό μαγνητικό κβαντικό αριθμό και κατόπιν να διαιρέσουμε με τη πολλαπλότητα της αρχικής κατάστασης. Για παράδειγμα στη (16) μπορούμε να κάνουμε την αντικατάσταση:

$$\sum_{m'} \rightarrow \frac{1}{2J+1} \sum_{m'} \sum_m \quad \text{όπου } J$$

είναι η στροφορμή της φθίνουσας κατάστασης.

Ως εφαρμογή της (16) μπορούμε να υπολογίσουμε το χρόνο ζωής της κατάστασης $2P$ του ατόμου του υδρογόνου το οποίο φθίνει στη θεμελιώδη (15).

Οι ακτινικές κυματοσυναρτήσεις είναι:

$$R_{n\ell} = \frac{1}{\sqrt{24\alpha_o^3}} \cdot \frac{r}{a_o} e^{-r/2a_o} \quad \text{και} \quad R_{n'\ell'} = \frac{2}{\sqrt{\alpha_o^3}} e^{-r/2a_o}$$

όπου a_o είναι η ακτίνα Bohr.

Παρατηρούμε $\tau(2P \rightarrow 1s) = 1,6 \cdot 10^{-9} s$

Οι χρόνοι ζωής άλλων διεγερμένων καταστάσεων του ατόμου του υδρογόνου υπάρχουν στη βιβλιογραφία. Γενικά ο χρόνος ζωής

μιας διεγερμένης κατάστασης ενός υδρογονοειδούς ατόμου αυξάνεται με την αύξηση του n γρήγορα ως n^3 για καθορισμένη τιμή του ℓ και ανάλογο του $n^{4,5}$ για το μέσο όρο του ℓ .

Ενίοτε η συμμετρία των ατομικών καταστάσεων μπορεί να είναι τέτοια ώστε η εκπομπή φωτονίου από το ηλεκτρικό δίπολο να είναι απαγορευμένη. Αυτό παρατηρείται όταν το $x_{BA} = 0$ για κάθε κατάσταση B με ενέργεια μικρότερη της αντίστοιχης της A.

Ας επιστρέψουμε στην ανάπτυξη του επίπεδου κύματος

$$e^{-ikx_i} = 1 - ikx_i - \frac{(kx_i)^2}{2} + \dots$$

και λάβουμε σοβαρά τον όρο $k \cdot x$ τον οποίο προηγουμένως αγνοήσαμε. Το στοιχείο μήτρας που πρέπει τώρα να υπολογιστεί μπορεί να αναλυθεί όπως:

$$\langle B | (k \cdot x) (\epsilon^{(\alpha)} \cdot P) | A \rangle = \frac{1}{2} \langle B | (k \cdot x) (\epsilon^{(\alpha)} P) + (k \cdot P) (\epsilon^{(\alpha)} \cdot x) |$$

$$A \rangle + \frac{1}{2} \langle B | (k \cdot x) (\epsilon^{(\alpha)} \cdot P) - (k \cdot P) (\epsilon^{(\alpha)} \cdot x) | A \rangle$$

Ο πρώτος όρος μπορεί να γραφεί σαν:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} [(k \cdot x) (\epsilon^{(\alpha)} \cdot P) + (k \cdot P) (\epsilon^{(\alpha)} \cdot x)] = \\ & = \frac{1}{2} k \cdot (x \cdot P + P \cdot x) \epsilon^{(\alpha)} \quad \text{όπου } x \cdot P + P \cdot x \quad (18) \end{aligned}$$

είναι μία συμμετρική δυαδική

Η μετάβαση ακτινοβολίας σύμφωνα με τον όρο αυτό είναι γνωστό σαν μία μετάβαση ηλεκτρικού τετραπόλου

$$\text{αφού } x \cdot P + P \cdot x = \frac{im}{\hbar} [H_0, xx]$$

$$\text{και } \frac{k}{2} \langle B | x \cdot P + P \cdot x | A \rangle \epsilon^{(\alpha)} = \frac{-im\omega}{2} k \langle B | xx | A \rangle \epsilon^{(\alpha)}$$

Λόγω της συνθήκης εγκαρσιότητας $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} = 0$ είναι θεμιτό να αντικαταστήσουμε τον όρο $\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}$ από το ίχνος του οποίου οι συνιστώσες είναι

$$T_{ij} = x_i x_j - \left(\delta_{ij} / 3 \right) |\mathbf{x}|^2$$

Ας σημειωθεί ότι έχει 5 συνιστώσες οι οποίες μπορούν να γραφούν ως γραμμικοί συνδυασμοί του Y_2^m κατόπιν βάση του θεωρήματος Wigner – Eckhart για τον κανόνα επιλογής της στροφορμής της E_2 εκπομπής έχουμε:

$$|\mathcal{J}_B - \mathcal{J}_A| \leq 2 \leq \mathcal{J}_B + \mathcal{J}_A$$

Ο δεύτερος όρος στη (18) μπορεί να γραφεί ως

$$(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})(\boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{P}) - (\mathbf{k} \cdot \mathbf{P})(\boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{x}) = (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}) \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{P})$$

Ας σημειωθεί ότι ο όρος $\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)}$ είναι ο κυρίαρχος όρος στην ανάπτυξη του επίπεδου κύματος του μαγνητικού πεδίου $\mathbf{B}$ αφού το $\mathbf{x} \times \mathbf{P}$ ο τελεστής στροφορμής του ατομικού ηλεκτρονίου ο οποίος δίνει το τελεστή της μαγνητικής διπολικής ροπής αν συνδυαστεί με τον όρο $\frac{e}{2mc}$. Επομένως η εκπομπή ακτινοβολίας σύμφωνα με τον όρο αυτό ονομάζεται εκπομπή μαγνητικού δίπολου (M1).

Μαζί με αυτό τον όρο μπορούμε να θεωρήσουμε και το κυρίαρχο όρο από την αλληλεπίδραση της μαγνητικής διπολικής ροπής του spin:

$$\frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} \times \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)})$$

ο οποίος είναι της ίδιας τάξης

Ο κανόνας επιλογής για τη στροφορμή είναι για μία M_1 εκπομπή $|\mathcal{J}_B - \mathcal{J}_A| \leq 1$ και όχι $0 \rightarrow 0$ όπως στη περίπτωση E_1 . Σε αντίθεση με την εκπομπή E_1 η ομοτιμία των ατομικών τροχιακών αλλάζει και στην εκπομπή M_1 και στη εκπομπή E_2 .

Οι ατομικές καταστάσεις στις οποίες οι εκπομπές ηλεκτρικού δίπολου είναι απαγορευμένες έχουν μεγάλους χρόνους ζωής. Σε αντίθεση με χρόνους ζωής της τάξης του $10^{-8}s$ όπως μίας εκπομπής E_1 οι χρόνοι ζωής μιας τυπικής M_1 ή E_2 εκπομπής είναι της τάξης του $10^{-3}s$, $\left(\lambda/r_{atom}\right)^2$ φορές του χρόνου μίας τυπικής E_1 εκπομπής.

Σχόλιο πάνω στην αυθόρμητη εκπομπή ακτινοβολίας

Για να ολοκληρώσουμε τη συζήτηση σχετικά με την αυθόρμητη αποδιέγερση θα ήταν χρήσιμο να αναρωτηθούμε ποιος είναι εκείνος ο μηχανισμός που «αναγκάζει» το ηλεκτρόνιο να μεταπέσει από τη διεγερμένη ατομική κατάσταση που βρίσκεται αφού το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο φαίνεται να είναι απών.

Όμως οι κβαντικές διακυμάνσεις του δεν είναι μηδέν. Το κενό ενός κβαντικού πεδίου δεν είναι η κατάσταση του «τίποτα».

Μπορούμε να αντιληφθούμε το κενό σαν ένα κυματικό συναρτοσιοειδές. Ακόμα και στη κατάσταση του «κενού» μπορεί να περιγραφεί (αναπαράσταση Schrodinger) από το κυματικό συναρτοσιοειδές της μορφής

$$\psi_0 = \psi_0(\mathbf{A}(\mathbf{r}))$$

που μας δίνει τα αντίστοιχα πλάτη πιθανότητας για να βρούμε τη μία ή την άλλη μορφή του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου στο χώρο. Η συνδυασμένη διεγερμένη κατάσταση ατόμου και ηλεκτρομαγνητικού πεδίου θα μπορεί να γραφεί στη μορφή

$$\psi_{\alpha,0} = \psi_{\alpha}(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{A},\mathbf{r})$$

Άρα ακόμα και στη κατάσταση του «κενού» οι κβαντικές διακυμάνσεις γύρω από τη μηδενική τιμή του H/M πεδίου γίνονται «αισθητές» γύρω από το διεγερμένο ηλεκτρόνιο και προκαλούν τελικά την αποδιέγερση.

Ο φυσικός μηχανισμός που προκαλεί αυτές τις διακυμάνσεις είναι η αρχή της αβεβαιότητας στην οποία υπόκειται και το H/M πεδίο.

Η κβάντωση του H/M πεδίου έχει μετατρέψει τα πεδιακά μεγέθη σε τελεστές που δε μπορούν να μετρηθούν ταυτόχρονα και με απόλυτη ακρίβεια.

Για τις συνιστώσες του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου ισχύει

$$[E_i(\mathbf{r}, t), B_j(\mathbf{r}, t)] \neq 0 \quad \text{για } i \neq j$$

Άρα ο ταυτόχρονος μηδενισμός τους είναι αδύνατος.

Άρα και για τη χαμιλτονιανή

$$H = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2) dV$$

είναι αδύνατος ο μηδενισμός τους.

Επομένως και στη κατάσταση του «κενού» το H/M πεδίο αδυνατεί να «ηρεμήσει».

Άρα το φαινόμενο της αυθόρμητης αποδιέγερσης πρέπει να αποδοθεί τελικά στην αρχή της αβεβαιότητας.

Σκέδαση H/M ακτινοβολίας σε άτομο

Ας εξετάσουμε τώρα τη σκέδαση φωτονίων από ατομικά ηλεκτρόνια. Πριν τη σκέδαση το άτομο βρίσκεται στη κατάσταση A και το προσπίπτον φωτόνιο χαρακτηρίζεται από $(\mathbf{k}, \epsilon^{(\alpha)})$. Μετά τη σκέδαση το άτομο βρίσκεται στη κατάσταση B και το εξερχόμενο φωτόνιο χαρακτηρίζεται από $(\mathbf{k}', \epsilon^{(\alpha')})$. Για απλότητα ας θεωρήσουμε ένα μονοηλεκτρονικό άτομο και θα αγνοήσουμε τη μαγνητική ροπή του spin του ηλεκτρονίου.

Η χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης

$$H_{int} = \sum_i \left[-\frac{e^2}{2mc} (\mathbf{P}_i \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) + \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \mathbf{P}_i) + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}_i, t) \right]$$

περιέχει το γραμμικό όρο $(\mathbf{A} \cdot \mathbf{P})$ και το τετραγωνικό όρο $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$. Αφού ο $\mathbf{A}$ μεταβάλλει τον αριθμό των φωτονίων κατά ένα ο όρος $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P}$ δεν συνεισφέρει σε πρώτη τάξη στη διαδικασία της σκέδασης στην οποία δεν έχουμε καθαρή μεταβολή του αριθμού των φωτονίων. Από τη άλλη μεριά ο όρος $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}$ περιέχει το $\alpha\alpha^+, \alpha^+\alpha, \alpha\alpha, \alpha^+\alpha^+$. Από αυτά τα πρώτα δύο δίνουν συνδυασμούς που δεν εξαφανίζουν φωτόνια εξασφαλίζοντας ότι οι τελεστές $\alpha^+\alpha$ αναπαριστούν το τελεστή δημιουργίας για το $(\mathbf{k}', \alpha')$ και καταστροφής για το $(\mathbf{k}, \alpha)$.

Έτσι

$$\begin{aligned} & \langle B, \mathbf{k}', \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} | H_{int} | A, \mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \rangle = \\ & = \langle B, \mathbf{k}', \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} | \left[\frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{x}, t) \right] | A, \mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \rangle = \\ & = \langle B, \mathbf{k}', \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} | \left[\frac{e^2}{2mc^2} (a_{\mathbf{k}, \alpha} a_{\mathbf{k}', \alpha'}^+ + a_{\mathbf{k}', \alpha'}^+ a_{\mathbf{k}, \alpha}) \right] \frac{c^2 \hbar^2}{2V\sqrt{\omega\omega'}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha')} \\ & \quad \times \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{x} - i(\omega - \omega')t] | A, \mathbf{k}, \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \rangle = \\ & = \frac{e^2}{2mc^2} \frac{c^2 \hbar^2}{2V\sqrt{\omega\omega'}} 2 \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha')} \exp[-i(\omega - \omega')t] \langle B | A \rangle \end{aligned}$$

όπου αντικαταστήσαμε το $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$ και $e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}}$ με το 1. Αυτό γιατί εξαιτίας της προσέγγισης του μεγάλου μήκους κύματος το ατομικό ηλεκτρόνιο μπορεί να θεωρήσουμε ότι βρίσκεται στην αρχή.

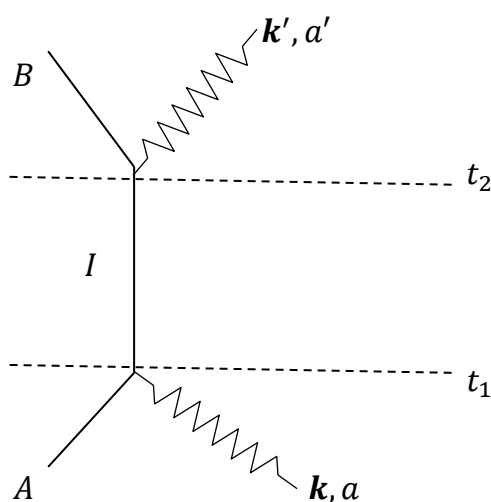
Για το πρώτης τάξης πλάτος μετάβασης έχουμε:

$$\begin{aligned} C^{(1)}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \frac{e^2}{2mc^2} \frac{e^2 \hbar}{2V\sqrt{\omega\omega'}} 2 \delta_{AB} \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha)} \boldsymbol{\varepsilon}^{(\alpha')} \\ & \int_0^t \exp \left[i(\hbar\omega' + E_B - \hbar\omega - E_A)t_1 / \hbar \right] dt_1 \quad \mu\epsilon \\ \omega &= |\mathbf{k}| \cdot c \quad \text{και} \quad \omega' = |\mathbf{k}'| \cdot c \quad \text{όπως συνήθως.} \end{aligned}$$

Παρόλο που ο όρος $A \cdot P$ δεν συνεισφέρει σε πρώτη τάξη αν πάρουμε το όρο $A \cdot P$ δύο φορές είναι της ίδιας τάξης όπως ο όρος $A \cdot A$. Επομένως πρέπει να αντιμετωπίσουμε τη διπλή αλληλεπίδραση $A \cdot P$ και τη μονή $A \cdot A$ παρόμοια. Η αλληλεπίδραση $A \cdot P$ ενεργώντας στη στιγμή t_1 μπορεί ή να εξαφανίσει το προσπίπτον φωτόνιο $(\mathbf{k}, \alpha)$ ή να δημιουργήσει το εξερχόμενο $(\mathbf{k}', \alpha')$. Όταν η αλληλεπίδραση $A \cdot P$ δρα ξανά τη στιγμή $t_2 > t_1$ πρέπει απαραίτητα να δημιουργήσει το εξερχόμενο φωτόνιο $(\mathbf{k}', \alpha')$ αν το εξερχόμενο φωτόνιο δεν έχει ακόμα δημιουργηθεί. Διαφορετικά θα καταλήγαμε σε μηδενικό στοιχείο μήτρας. Με άλλα λόγια αν το εξερχόμενο φωτόνιο έχει ήδη δημιουργηθεί αλλά το εισερχόμενο φωτόνιο δεν έχει καταστραφεί η αλληλεπίδραση $A \cdot P$ ενεργώντας για $t_2 > t_1$ πρέπει να καταστρέψει το εισερχόμενο φωτόνιο $(\mathbf{k}, \alpha)$.

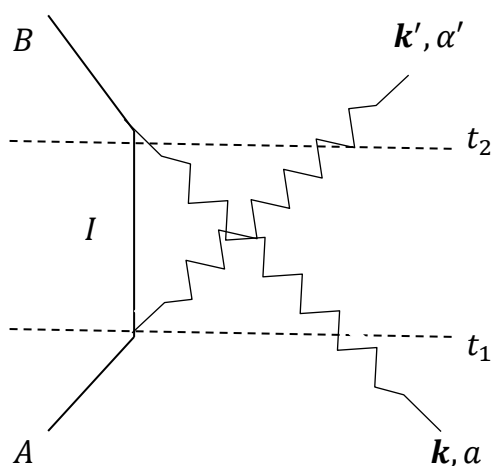
Ανάμεσα σε t_1, t_2 η ατομική κατάσταση I είναι γενικά διαφορετική από τις A, B . Άρα δύο είδη ενδιάμεσων καταστάσεων είναι πιθανά. Στη πρώτη περίπτωση το άτομο βρίσκεται στη κατάσταση I και τα δύο φωτόνια είναι απόντα. Στη δεύτερη το άτομο βρίσκεται στη κατάσταση I και τα δύο φωτόνια (εισερχόμενο και εξερχόμενο) είναι παρόντα.

Στα διαγράμματα Feynman η πρώτη περίπτωση οπτικοποιείται ως εξής:

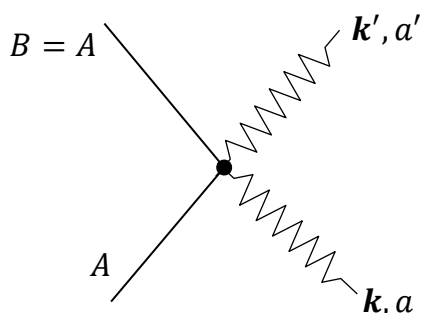


Σύμφωνα με τη παραπάνω εικόνα η ατομική κατάσταση A πρώτα απορροφά το προσπίπτον φωτόνιο τη στιγμή t_1 και μετατρέπεται στη κατάσταση I . Ακολούθως τη στιγμή t_2 η ατομική κατάσταση I εκπέμπει το εξερχόμενο φωτόνιο και μεταβάλλεται στη κατάσταση B .

Για τη δεύτερη διαδικασία η κατάσταση A πρώτα εκπέμπει το εξερχόμενο φωτόνιο τη στιγμή t_1 και αλλάζει στη κατάσταση I . Ακολούθως τη στιγμή t_2 η κατάσταση I απορροφά το προσπίπτον φωτόνιο (το οποίο δεν έχει ακόμα καταστραφεί) και μετατρέπεται στη κατάσταση B .



Σε αντίθεση ή χαμηλής τάξης $A \cdot A$ αλληλεπίδραση αναπαρίστανται από την επόμενη εικόνα



Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενες σελίδες η εκπομπή και απορρόφηση ενός φωτονίου από ένα ατομικό ηλεκτρόνιο ισοδυναμεί με την αλληλεπίδραση του ατομικού ηλεκτρονίου με τα χρονοεξαρτώμενα δυναμικά

$$c \sqrt{\frac{n_{k,a} \hbar}{2\omega V}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} e^{ikx-\omega t} \quad \text{για απορρόφηση}$$

$$\text{και} \quad c \sqrt{\frac{(n_{k,a} + 1) \hbar}{2\omega V}} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} e^{-ikx+i\omega t} \quad \text{για την εκπομπή}$$

Ακολουθώντας αυτό το κανόνα το δεύτερης τάξης πλάτος μετάβασης $c^{(2)}(t)$ όπως ακολουθεί:

$$\begin{aligned} c^{(2)}(t) &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \frac{c^2 \hbar}{2V\sqrt{\omega\omega'}} \left(-\frac{e}{mc}\right)^2 \int_0^t dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \times \\ &\times \left[\sum_I \langle B | \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} | I \rangle \exp[i(E_B - E_I + \hbar\omega')t_2/\hbar] \times \right. \\ &\times \langle I | \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} | A \rangle \exp[i(E_I - E_A - \hbar\omega)t_1/\hbar] + \\ &+ \sum_I \langle B | \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} | I \rangle \exp[i(E_B - E_I - \hbar\omega)t_2/\hbar] \times \\ &\times \langle I | \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} | A \rangle \exp[i(E_I - E_A + \hbar\omega')t_1/\hbar] = \\ &= -\frac{c^2 \hbar}{i\hbar 2V\sqrt{\omega\omega'}} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \sum_I \frac{(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{BI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA}}{E_I - E_A - \hbar\omega} + \\ &+ \frac{(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{BI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA}}{E_I - E_A + \hbar\omega'} \times \int_0^{t_2} dt_2 \exp\left[i \frac{(E_B - E_A + \hbar\omega' - \hbar\omega)t_2}{\hbar}\right] \end{aligned}$$

όπου έχουμε κάνει τη προσέγγιση δίπολου και έχουμε αγνοήσει τον όρο που εξαρτάται από τη τεχνητή ξαφνική στροφή της

διαταραχής η οποία είναι αμελητέα αν η διατήρηση της ενέργειας $(E_B - E_A + \hbar\omega' - \hbar\omega) = 0$ σχεδόν ικανοποιείται.

Συνυπολογίζοντας τους $c^{(1)}(t)$ και $c^{(2)}(t)$ έχουμε για τη πιθανότητα μετάβασης:

$$\begin{aligned} W_{d\Omega} &= \int \left(|c^{(1)} + c^{(2)}|^2 \right) / t \cdot \rho_{E,d\Omega} dE = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{c^2 \hbar}{2V\sqrt{\omega\omega'}} \right)^2 \left(\frac{e}{mc^2} \right)^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega'^2}{\hbar c^3} d\Omega \times \\ &\times \left[\delta_{AB} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} - \frac{1}{m} \sum_I \left(\frac{(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{BI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA}}{E_I - E_A - \hbar\omega} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{BI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA}}{E_I - E_A + \hbar\omega'} \right)^2 \right] \end{aligned}$$

Για να υπολογίσουμε τη διαφορική ενεργό διατομή σκέδασης πρέπει να διαιρέσουμε τη πιθανότητα μετάβασης με τη πυκνότητα ροής η οποία είναι $\frac{c}{V}$ αφού αρχικά υπάρχει ένα φωτόνιο στο κανονικοποιημένο κουτί όγκου V . Τελικά έχουμε για τη διαφορική ενεργό διατομή σκέδαση:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= r_0^2 \left(\frac{\omega'}{\omega} \right) \left| \delta_{AB} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} - \frac{1}{m} \sum_I \left(\frac{(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{BI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA}}{E_I - E_A - \hbar\omega} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{BI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA}}{E_I - E_A + \hbar\omega'} \right) \right|^2 \quad (19) \end{aligned}$$

όπου r_0 είναι η κλασσική ακτίνα του ηλεκτρονίου

$$r_0 = \frac{e^2}{4\pi mc^2} \simeq \frac{1}{137} \frac{\hbar}{mc} \simeq 2,82 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$$

Σκέδαση Rayleigh

Υπάρχουν ορισμένες ειδικές περιπτώσεις της (19) που αξίζει να εξεταστούν λεπτομερώς.

Ας υποθέσουμε τη περίπτωση $A = B$, $\hbar\omega = \hbar\omega'$.

Αυτή η περίπτωση ανταποκρίνεται στην ελαστική σκέδαση του φωτός. Αναφέρεται επίσης και ως σκέδαση Rayleigh γιατί το πρόβλημα μελετήθηκε κλασσικά από το λόρδο Rayleigh.

Για να απλοποιήσουμε τη (19) ξαναγράφουμε τα $\epsilon^{(a)} \cdot \epsilon^{(a')}$ χρησιμοποιώντας τις σχέσεις μετάθεσης ανάμεσα στο x, P τη πληρότητα των ενδιάμεσων καταστάσεων I και τη

$$\begin{aligned} \langle B | P | A \rangle &= im\omega x_{BA} \\ \epsilon^{(a)} \cdot \epsilon^{(a')} &= \frac{1}{i\hbar} \sum_I \left[(x \epsilon^{(a)})_{AI} (P \epsilon^{(a')})_{IA} - \right. \\ &\quad \left. - (P \epsilon^{(a)})_{AI} (x \epsilon^{(a')})_{IA} \right] = \\ &= \frac{1}{m\hbar} \sum_I \frac{1}{\omega_{IA}} \left[(P \epsilon^{(a)})_{AI} (P \epsilon^{(a')})_{IA} + (P \epsilon^{(a')})_{AI} (P \epsilon^{(a)})_{IA} \right] \\ \text{όπου } \omega_{IA} &= \frac{E_I - E_A}{\hbar} \end{aligned}$$

Έτσι οι 3 όροι της (19) συνδυάζονται ώστε:

$$\begin{aligned} \delta_{AA} \epsilon^{(a)} \cdot \epsilon^{(a')} &- \frac{1}{m\hbar} \sum_I \left[\frac{(P \epsilon^{(a')})_{AI} (P \epsilon^{(a)})_{IA}}{\omega_{IA} - \omega} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(P \epsilon^{(a)})_{AI} (P \epsilon^{(a')})_{IA}}{\omega_{IA} + \omega} \right] = \\ &= -\frac{1}{m\hbar} \sum_I \left[\frac{\omega (P \epsilon^{(a')})_{AI} (P \epsilon^{(a)})_{IA}}{\omega_{IA} (\omega_{IA} - \omega)} - \right. \end{aligned}$$

$$- \frac{\omega (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{AI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{IA}}{\omega_{IA} (\omega_{IA} + \omega)} \Bigg]$$

Χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα

$$\frac{1}{(\omega_{IA} \mp \omega)} \simeq \left[1 \pm \left(\frac{\omega}{\omega_{IA}} \right) \right] / \omega_{IA} \text{ για μικρές τιμές του } \omega \text{ έχουμε}$$

$$\begin{aligned} & \sum_I \frac{1}{\omega_{IA}^2} \left[(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{AI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA} - (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{AI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{IA} \right] = \\ & = m^2 \sum_I \left[(\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{AI} (\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA} - (\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{AI} (\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{IA} \right] = \\ & = m^2 ([\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')}, \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)}])_{AA} = 0 \end{aligned}$$

Έτσι παρατηρούμε τη διαφορική ενεργό διατομή σκέδαση Rayleigh για $\omega \ll \omega_{IA}$

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \left(\frac{r_0}{m\hbar} \right)^2 \omega^4 \left| \sum_I \left(\frac{1}{\omega_{IA}} \right)^2 \left[(\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{AI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA} + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{AI} (\mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{IA} \right] \right|^2 = \\ &= \left(\frac{r_0 m}{\hbar} \right)^2 \omega^4 \left| \sum_I \left(\frac{1}{\omega_{IA}} \right) \left[(\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{AI} (\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA} + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + (\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{AI} (\mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{IA} \right] \right|^2 \end{aligned}$$

Από το παραπάνω προκύπτει ότι η ενεργός διατομή σκέδασης στα μεγάλα μήκη κύματος μεταβάλλεται αντιστρόφως ανάλογα της τέταρτης δύναμης του μήκους κύματος (Νόμος Rayleigh).

Για άτομα σε συνήθη άχρωμα αέρια το μήκος κύματος που ανταποκρίνεται σε μία τυπική τιμή του ω_{IA} είναι στην υπεριώδη περιοχή.

Επομένως η προσέγγιση $\omega \ll \omega_{IA}$ είναι καλή για το οπτικό φάσμα. Αυτή η ερμηνεία ερμηνεύει γιατί ο ουρανός είναι μπλε και στη δύση κόκκινος.

Σκέδαση Thomson

Ας θεωρήσουμε τώρα την αντίθετη περίπτωση στην οποία η ενέργεια του προσπίπτοντος φωτονίου είναι πολύ μεγαλύτερη από την ατομική ενέργεια σύνδεσης.

Είναι τώρα λογικό να αγνοήσουμε το δεύτερο και τρίτο όρο της:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 \left(\frac{\omega'}{\omega} \right) \left| \delta_{AB} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')} - \frac{1}{m} \sum_I \frac{(\mathbf{P} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{BI} (\mathbf{P} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA}}{E_I - E_A - \hbar\omega} + \frac{(\mathbf{P} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{BI} (\mathbf{P} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{IA}}{E_I - E_A - \hbar\omega'} \right|^2$$

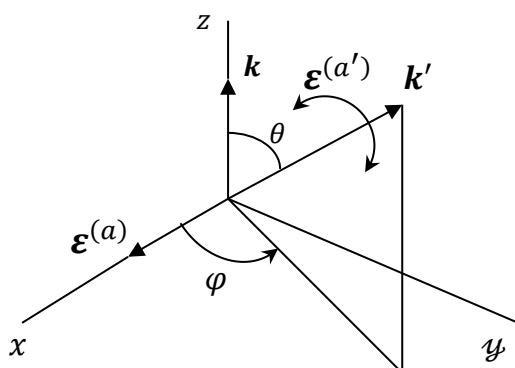
αφού η ενέργεια $\hbar\omega = \hbar\omega'$ είναι πολύ μεγαλύτερη από το $(\mathbf{P} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')})_{AI} (\mathbf{P} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)})_{IA} / m$ άρα η σκέδαση οφείλεται αποκλειστικά στο στοιχείο μήτρας που ανταποκρίνεται στο «πέρασμα γλάρος». Ας σημειωθεί ότι ο όρος $\delta_{AB} \boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')}$ επηρεάζεται από τη φύση του δεσμού του ατομικού ηλεκτρονίου.

Η ενεργός διατομή σκέδαση που υπολογίζεται σ' αυτή τη περίπτωση συμπίπτει με την ενεργό διατομή σκέδασης του φωτός από ένα ελεύθερο (αδέσμευτο) ηλεκτρόνιο που παρατηρήθηκε κλασσικά από τον Thomson.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 |\boldsymbol{\varepsilon}^{(a)} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^{(a')}|^2$$

η προηγούμενη έκφραση είναι ανεξάρτητη του ω

Για να μελετήσουμε την εξάρτηση της σκέδασης Thomson από τη πόλωση θεωρούμε ένα σύστημα αξόνων όπου το $\boldsymbol{\varepsilon}^{(a)}$ και $\mathbf{k}$ λαμβάνονται κατά μήκος του άξονα x και z όπως φαίνεται στη παρακάτω εικόνα



Ο προσανατολισμός του k' χαρακτηρίζεται από τις σφαιρικές συντεταγμένες θ, φ . Το τελικό διάνυσμα πόλωσης $\epsilon^{(a')}$ λαμβάνεται ορθογώνιο στο επίπεδο που ορίζεται από το k και k' για $\alpha' = 1$ και για $\alpha' = 2$ βρίσκεται πάνω στο προηγούμενο επίπεδο.

Οι καρτεσιανές συντεταγμένες για το $\epsilon^{(a')}$ δίνονται από

$$\epsilon^{(a')} = \begin{cases} (\sin\varphi, -\cos\varphi, 0) & \text{για } \alpha' = 1 \\ (\cos\theta \cos\varphi, \cos\theta \sin\varphi, -\sin\theta) & \text{για } \alpha' = 2 \end{cases}$$

Άρα

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = r_0^2 \cdot \begin{cases} \sin^2\varphi & \text{για } \alpha' = 1 \\ \cos^2\theta \cos^2\varphi & \text{για } \alpha' = 2 \end{cases}$$

Για φωτόνια που αρχικά δεν έχουν πόλωση μπορούμε ή να ολοκληρώσουμε τη προηγούμενη σχέση ως προς τη γωνία φ και κατόπιν να διαιρέσουμε με 2π να υπολογίσουμε το:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{χωρίς πόλωση}} = \frac{1}{2} \left[\frac{d\sigma}{d\Omega}(\varphi = 0) + \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(\varphi = \frac{\pi}{2}\right) \right]$$

Οι δύο διαδικασίες είναι εντελώς ισοδύναμες..

Ας σημειωθεί ακόμα και αν το αρχικό διάνυσμα πόλωσης είναι τυχαία ορισμένο το τελικά εκπεμπόμενο φωτόνιο με $\cos\theta \neq \pm 1$ είναι πολωμένο αφού η διαφορική ενεργός διατομή σκέδασης είναι

$r_0^2/2$ για $\epsilon^{(a')}$ ορθογώνιο στο επίπεδο των $\mathbf{k}$ και $\mathbf{k}'$ και $r_0^2/2 \cos^2\theta$ για $\epsilon^{(a')}$ που βρίσκεται στο επίπεδο.

Είναι αξιοσημείωτο ότι η πόλωση του είναι πλήρης για $\theta = \pi/2$. Βρίσκουμε ότι ένας εντελώς μη πολωμένος φωτεινός παλμός σκεδαζόμενος στις 90° έχει ως αποτέλεσμα 100% γραμμικά πολωμένο παλμό του οποίου το διάνυσμα πόλωσης είναι ορθογώνιο με το επίπεδο που ορίζεται από το $\mathbf{k}$ και $\mathbf{k}'$.

Αν το αρχικό φωτόνιο είναι πολωμένο αλλά η πόλωση του τελικού φωτονίου δεν παρατηρείται πρέπει να αθροίσουμε πάνω στις δύο πιθανές καταστάσεις πόλωσης.

Έχουμε

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{άθροιση στη τελική πόλωση}} = r_0^2 (\sin^2\varphi + \cos^2\theta \cos^2\varphi)$$

Αν το αρχικό φωτόνιο δεν είναι πολωμένο και η πόλωση του τελικού φωτονίου δεν μετρήθηκε

Έχουμε

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{\text{χωρίς πόλωση άθροιση στη τελική πόλωση}} = \frac{r_0^2}{2} (1 + \cos^2\theta)$$

Η συνολική διατομή σκέδασης είναι:

$$\sigma_{tot} = \frac{8\pi r_0^2}{3} = 6,65 \times 10^{-25} \text{ cm}^2$$

Όπως ειπώθηκε προηγουμένως η έκφραση για τη διατομή σκέδασης ισχύει μόνο εάν οι ενέργειες των φωτονίων είναι κατά πολύ μεγαλύτερες της ατομικής ενέργειας σύνδεσης. Όμως η προηγούμενη διαδικασία καταρρέει εάν η ενέργεια του φωτονίου είναι τόσο μεγάλη που γίνεται συγκρίσιμη με την ενέργεια ηρεμίας του ηλεκτρονίου. Τότε πρέπει να λάβουμε υπόψη τη σχετικιστική φύση του ηλεκτρονίου (σκέδαση Compton).

Σύγκριση κβαντικής ανάλυσης των σκεδάσεων Rayleigh – Thomson με την αντίστοιχη κλασσική ανάλυση

Η κβαντική – θεωρητική ανάλυση της σκέδασης Rayleigh και Thomson μπορεί να συγκριθεί με την αντίστοιχη κλασσική.

Η σκέδαση ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος στη κλασσική φυσική ακολουθεί την εξής διαδικασία:

- α) ένα δέσμιο ηλεκτρόνιο ταλαντώνεται με την επίδραση του χρονοεξαρτώμενου ηλεκτρικού πεδίου.
- β) Το ταλαντώμενο φορτίο ακτινοβολεί ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα.

Το μοντέλο ενός δέσμιου ηλεκτρονίου που υπακούει στο νόμο Hooke η θέση του ηλεκτρονίου με την επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου $E_0 e^{-i\omega t}$ ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = \frac{e}{m} E_0 e^{-i\omega t}$$

όπου ω_0 είναι η χαρακτηριστική γωνιακή συχνότητα του ταλαντωτή. Τότε η επιτάχυνση του ηλεκτρονίου δίνεται από τη σχέση

$$\ddot{x} = -\left(\frac{e}{m}\right) \frac{\omega^2}{\omega_0^2 - \omega^2} E_0 e^{-i\omega t}$$

Η συνολική διατομή σκέδαση είναι τότε

$$\sigma_{tot} = \frac{8\pi r_0^2}{3} \frac{\omega^4}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2}$$

Για $\omega \ll \omega_0$ έχουμε την αναλογία σ_{tot} με ω^4 ενώ για $\omega \gg \omega_0$ έχουμε διατομή σκέδασης ανεξάρτητη της συχνότητας.

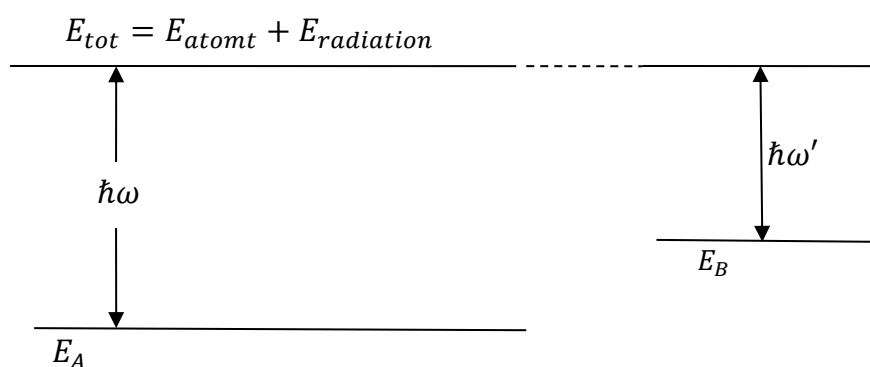
Φαινόμενο Raman

Ο τύπος Kramer – Heisenberg μπορεί να χρησιμοποιηθεί και στην ανελαστική σκέδαση του φωτός στην οποία $\omega \neq \omega'$ και $A \neq B$.

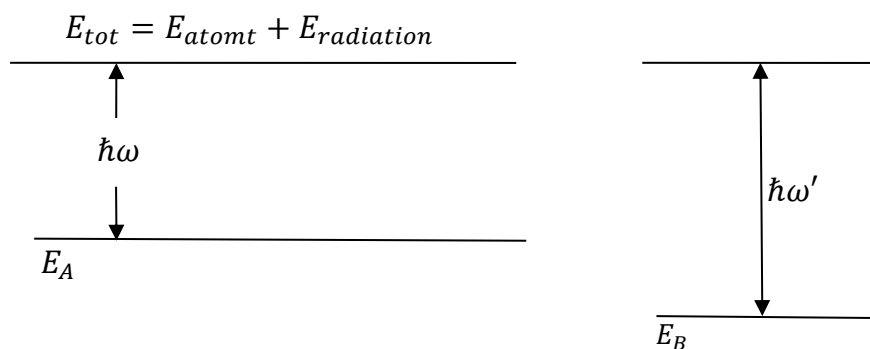
Στην ατομική φυσικό το φαινόμενο ονομάζεται «φαινόμενο Raman». Αν η αρχική κατάσταση είναι η θεμελιώδης τότε η ενέργεια του τελικού φωτονίου δεν μπορεί να είναι μεγαλύτερη της αρχικής ενέργειας $\hbar\omega$ του αρχικού φωτονίου αφού

$$\hbar\omega + E_A = \hbar\omega' + E_B$$

Αυτό εξηγεί τη παρουσία μίας γραμμής Stokes στο ατομικό φάσμα δηλαδή μία γραμμή πιο μετατοπισμένης προς το ερυθρό σε σχέση με την αρχική ακτινοβολία.



Από την άλλη μεριά αν το άτομο βρίσκεται σε μία διεγερμένη κατάσταση η ω' μπορεί να είναι μεγαλύτερη της ω



Αυτό δίνει μία αντί Stokes γραμμή πιο μετατοπισμένη προς το ιώδες σε σχέση με την αρχική ακτινοβολία.

Μέρος Β

Επίδραση σταθερού μαγνητικού πεδίου στην ύλη

Κίνηση ηλεκτρονίων σε μαγνητικό πεδίο

Η σωστή περιγραφή της αλληλεπίδρασης των ατομικών ηλεκτρονίων με τη Η/Μ ακτινοβολία απαιτεί την εισαγωγή του διανυσματικού δυναμικού $\mathbf{A}$ αντί των πεδίων $\mathbf{E}$ και $\mathbf{B}$. Η παραπάνω παρατήρηση επεκτείνεται και στη μελέτη της κίνησης των ηλεκτρονίων σε ένα στατικό μαγνητικό πεδίο.

Η περιγραφή κβαντομηχανικά αυτής της κίνησης γίνεται μέσω της χαμιλτονιανής

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (20)$$

Με βάση τη παραπάνω έκφραση μπορούμε να δείξουμε ότι σε προσέγγιση για ασθενή πεδία καταλήγουμε στη γνωστή έκφραση:

$$U = -\boldsymbol{\mu}_\ell \cdot \mathbf{B} \quad \text{με} \quad \boldsymbol{\mu}_\ell = -\frac{e}{2mc} \boldsymbol{\ell}$$

Αν αγνοήσουμε τον όρο $\mathbf{A}^2$ που προκύπτει με την ανάπτυξη της

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$$

(αν αναφερόμαστε σε ασθενή πεδία) και εργαστούμε στη βαθμίδα Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ η προηγούμενη σχέση παίρνει τη μορφή

$$H \simeq \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A} \quad (21)$$

Άρα ο όρος της δυναμικής ενέργειας είναι τώρα ο

$$U = \frac{e}{mc} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}$$

Για στατικό και ομογενές μαγνητικό πεδίο ισχύει

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= -\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} \quad \text{οπότε η (21) γίνεται:} \\ \mathcal{U} &= -\frac{e}{2mc} \mathbf{P} (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) = -\frac{e}{2mc} (\mathbf{P} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{B} = \\ &= \frac{e}{2mc} (\mathbf{r} \times \mathbf{P}) \cdot \mathbf{B} = -\left(-\frac{e}{2mc} \cdot \boldsymbol{\ell}\right) \cdot \mathbf{B} = \\ &= -\boldsymbol{\mu}_\ell \cdot \mathbf{B} \quad \text{με} \quad \boldsymbol{\mu}_\ell = \left(-\frac{e}{2mc}\right) \boldsymbol{\ell} \end{aligned}$$

Άρα ξεκινώντας από τη σωστή κβαντομηχανική περιγραφή της κίνησης ενός ηλεκτρονίου σε ένα στατικό μαγνητικό πεδίο αποδείχτηκε ότι ο γυρομαγνητικός λόγος ο οφειλόμενος στη τροχιακή στροφορμή είναι: $\gamma_\ell = -e/2mc$.

Στάθμες Landau

Θα επιλύσουμε τώρα την εξίσωση Schrodinger $H\Psi = E\Psi$ για κίνηση ηλεκτρονίου σε ομογενές μαγνητικό πεδίο χωρίς αυτή τη φορά να αγνοήσουμε τον όρο $\mathbf{A}^2$ όπως συμβαίνει στα ασθενή πεδία.

Έχουμε

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} = \frac{1}{2m} (\pi_x^2 + \pi_y^2 + \pi_z^2) \quad \text{όπου } \boldsymbol{\pi} \\ &\text{ο διανυσματικός τελεστής} \quad \boldsymbol{\pi} = \mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \end{aligned}$$

Υποθέτουμε μαγνητικό πεδίο κατά τη κατεύθυνση του άξονα των z με

$$\mathbf{B} = B \hat{z} \quad \text{οπότε} \quad \mathbf{A} = -\frac{1}{2} \mathbf{r} \times \mathbf{B} = \left(-\frac{B}{2} y, \frac{B}{2} x, 0 \right)$$

τότε οι συνιστώσες π_x, π_y, π_z του τελεστή $\boldsymbol{\pi}$ δίνονται από τις εκφράσεις

$$\pi_x = P_x - \frac{1}{2}m\omega y \quad , \quad \pi_y = P_y + \frac{1}{2}m\omega x \quad \text{και}$$

$$\pi_z = P_z \quad \text{όπου} \quad \omega = \frac{eB}{mc}$$

εκφράζει τη κλασσική συχνότητα της κυκλικής κίνησης ενός ηλεκτρονίου στο επίπεδο που έχει διεύθυνση κάθετη στο πεδίο (επίπεδο $x - y$). Άρα για τη χαμιλτονιανή θα έχουμε:

$$H = \frac{1}{2m} \left(P_x - \frac{1}{2}m\omega y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(P_y + \frac{1}{2}m\omega x \right)^2 + \frac{P_z^2}{2m}$$

Όμως

$$\begin{aligned} [\pi_x, \pi_y] &= \left[P_x - \frac{1}{2}m\omega y, P_y + \frac{1}{2}m\omega x \right] = \\ &= \frac{1}{2}m\omega [P_x, x] - \frac{1}{2}m\omega [y, P_y] = \frac{1}{2}m\omega(-i\hbar) - \frac{1}{2}m\omega(i\hbar) = -im\omega\hbar \end{aligned}$$

Εισάγουμε τώρα τους νέους τελεστές

$$P = \frac{\pi_x}{\sqrt{m\omega\hbar}} \quad , \quad Q = \frac{\pi_y}{\sqrt{m\omega\hbar}}$$

Μετά την εισαγωγή των παραπάνω τελεστών η χαμιλτονιανή γράφεται ως:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} (Q^2 + P^2) + \frac{P_z^2}{2m}$$

Αφού ο τελεστής P_z προφανώς μετατίθεται με τους Q, P οι ιδιοτιμές της προηγούμενης χαμιλτονιανής θα δίνονται από τη σχέση:

$$E_{n,k} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Ο όρος $\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ αποτελεί τις ιδιοτιμές του τελεστή $\frac{Q^2 + P^2}{2}$ που είναι αρμονικός ταλαντωτής (σε αδιάστατη μορφή) με $[Q, P] = -i$. Ο δεύτερος όρος $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ αντιστοιχεί στο τελεστή $\frac{P_z^2}{2m}$.

Ο όρος αυτός εκφράζει την ελεύθερη κίνηση του σωματιδίου στον z άξονα.

Από το παραπάνω προκύπτει κβάντωση της κίνησης στο επίπεδο $x - y$. Αυτό θα πρέπει να ήταν αναμενόμενου δεδομένου της αντίστοιχης δέσμιας κλασσικής κυκλικής κίνησης.

Οι κβαντισμένες στάθμες ενέργειας

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad \mu\epsilon \quad \omega = \frac{eB}{mc}$$

ονομάζονται στάθμες Landau.

Με τη βοήθεια των σταθμών Landau μπορούμε να κατανοήσουμε φαινόμενα σε χαμηλές θερμοκρασίες όπως το κβαντικό φαινόμενο Hall.

Εισαγωγή στο φαινόμενο Bohm – Aharonov

Στη κβαντομηχανική όπως αναφέρθηκε και σε προηγούμενο λήμμα της εργασίας έχουμε ένα διαφορετικό αναβαθμισμένο ρόλο του διανυσματικού δυναμικού σε σχέση με τη κλασσική φυσική.

Δηλαδή στη κλασσική φυσική το διανυσματικό δυναμικό λειτουργεί ως ένα βοηθητικό πεδίο που το εισάγουμε μέσω της σχέσης $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ώστε να ικανοποιείται η βασική εξίσωση $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$. Το ίδιο το $\mathbf{A}$ όμως δεν είναι μετρήσιμο πεδίο άρα δεν έχει αυτόνομη φυσική υπόσταση.

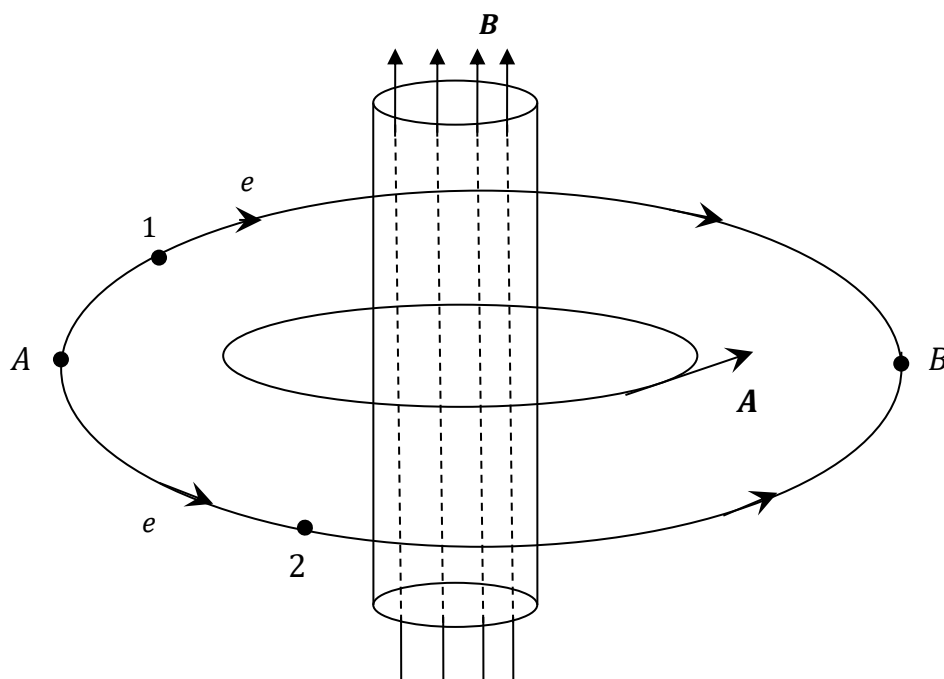
(Ας θυμηθούμε ότι η κλασσική δύναμη

$$\mathbf{F} = q \frac{\mathbf{U}}{c} \times \mathbf{B}$$

και η εξίσωση κίνησης που προκύπτει από αυτή εκφράζονται μέσω του $\mathbf{B}$).

Στη κβαντομηχανική όμως την αντίστοιχη εξίσωση Schrodinger εμφανίζεται το διανυσματικό δυναμικό A και όχι το πεδίο B .

Έστω ηλεκτρόνιο που κινείται σε περιοχή εκτός μαγνητικού πεδίου όπως στη περιοχή του σχήματος όπου το μαγνητικό πεδίο B περιορίζεται εντός του κυλινδρικού σωλήνα ενώ εκτός του σωλήνα δεν υπάρχει μαγνητικό πεδίο.



Παρόλο που το πεδίο B όπως ειπώθηκε εκτός του σωλήνα είναι μηδενικό αυτό δε συμβαίνει για το διανυσματικό δυναμικό A . Αυτό προκύπτει βάσει του ορισμού του $\nabla \times A = B$ ή σε ολοκληρωτική μορφή $\oint A d\ell = \Phi_B$

Λόγω της κυλινδρικής συμμετρίας η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφεί απλά ως

$$A 2\pi\rho = B\pi\alpha^2 \Rightarrow A = \frac{B\alpha^2}{2\rho}$$

όπου α είναι η ακτίνα του σωλήνα και $A = A_0$ η μοναδική μη μηδενική συνιστώσα του A σε κυλινδρικές συντεταγμένες.

Αν και το $\mathbf{B}$ μηδενίζεται εκτός σωλήνα (οπότε το «κλασσικό» ηλεκτρόνιο δεν θα επηρεαστεί) ο μη μηδενισμός του $\mathbf{A}$ θα έχει επιπτώσεις κβαντομηχανικά.

Παίρνοντας τώρα τον τελεστή της ορμής

$$\mathbf{P} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left(\hat{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \hat{\theta}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\theta} + \hat{z}\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

και εισάγοντας το μετασχηματισμό

$$\frac{\partial}{\partial\theta} \rightarrow \frac{\partial}{\partial\theta} + i\lambda \quad \text{με} \quad \lambda = \frac{e B a^2}{2\hbar c}$$

Η χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrodinger γίνεται:

$$\tilde{\nabla}^2\Psi + k^2\Psi = 0 \quad \text{με}$$

$$\tilde{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\lambda\right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

όπου η παράγωγος ως προς το θ έχει αντικατασταθεί με την

$$\frac{\partial}{\partial\theta} + i\lambda$$

Για την ακτινική συνιστώσα της κίνησης του ηλεκτρονίου η λύση της

$$\tilde{\nabla}^2\Psi + k^2\Psi = 0 \quad \text{θέτουμε} \quad \Psi_{(\rho,\theta)} = R_{(\rho)} e^{im\theta}$$

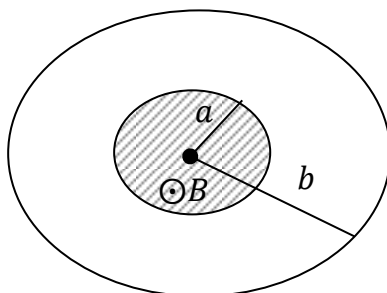
Απαιτώντας η $\Psi_{(\rho,\theta)}$ να είναι μονότιμη συνάρτηση θα πρέπει το m να είναι ακέραιος ή μηδέν ενώ για το ακτινικό μέρος της κυματοσυνάρτησης έχουμε:

$$\rho^2 R'' + \rho R' + (k^2\rho^2 - \nu^2)R = 0$$

Η οποία είναι εξίσωση Bessel τάξης ν με $\nu = |m + \lambda|$

Θέτοντας τις συνοριακές συνθήκες $R(a) = 0$, $R(b) = 0$ επιβάλλουμε στο σωματίδιο να κινείται στο χώρο μεταξύ των

σωλήνων ακτίνας a, b (στο σωλήνα ακτίνας a υπάρχει και το ομογενές μαγνητικό πεδίο)



Η εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών μας δίνει τις ιδιοτιμές της ενέργειας

$$\varepsilon = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Προφανώς οι ιδιοτιμές που θα προκύψουν εξαρτώνται από τη παράμετρο λ αφού αυτή καθορίζει τη τάξη των συναρτήσεων Bessel του προβλήματος.

Θέτοντας κατόπιν

$$\lambda = \frac{\Phi_B}{\Phi_0} \quad \text{όπου} \quad \Phi_B = \pi a^2 B$$

η μαγνητική ροή εντός του εσωτερικού σωλήνα ακτίνας a και

$$\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar c}{e} = \frac{hc}{e}$$

είναι η θεμελιώδης μονάδα μαγνητικής ροής. Άρα η παράμετρος λ εκφράζει τη τιμή της μαγνητικής ροής σε θεμελιώδεις μονάδες.

Αν η παράμετρος $\lambda = n = \text{ακέραιος}$ το $m + n$ θα είναι και αυτός ακέραιος. Άρα οι λύσεις της ακτινικής εξίσωσης θα παραμείνουν ίδιες άρα και οι αντίστοιχες ιδιοτιμές.

Αν λοιπόν η ροή είναι ακέραιο πολλαπλάσιο της θεμελιώδους ροής το μαγνητικό πεδίο δεν έχει επίδραση πάνω στις ενεργειακές στάθμες.

Αν όμως η ροή είναι ημιακέραιο πολλαπλάσιο της θεμελιώδους μονάδας ροής τότε τα πράγματα γίνονται διαφορετικά.

Έστω π.χ.

$$\lambda = \frac{1}{2} \quad \text{τότε} \quad m + \lambda = m + \frac{1}{2}$$

Σε αυτή τη περίπτωση οι συνδυασμοί που προκύπτουν είναι όλοι οι ημιακέραιοι $\pm 1/2, \pm 3/2, \dots$. Η θεμελιώδης κατάσταση θα προκύψει από τις τιμές $\pm \frac{1}{2}$. Τότε η μικρότερη τιμή του ν είναι το $\nu = \frac{1}{2}$ και οι λύσεις της αντίστοιχης εξίσωσης Bessel είναι:

$$\frac{\sin k\rho}{\sqrt{\rho}} \quad \text{και} \quad \frac{\cos k\rho}{\sqrt{\rho}}$$

Με την απαίτηση των συνοριακών συνθηκών προκύπτει:

$$R(\rho) = N \frac{\sin(n\pi(\rho - a/d))}{\sqrt{\rho}} \quad (d = b - a)$$

και ιδιοτιμές ενέργειας

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} n^2 \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

Η προηγούμενη λύση και οι αντίστοιχες ιδιοτιμές δεν αποτελούν τη πλήρη λύση του προβλήματος αφού το ν μπορεί να πάρει και άλλες τιμές $\nu = 3/2, 5/2, \dots$

Η παραπάνω ανάλυση αποτελεί μία εισαγωγή στο φαινόμενο Bohm – Aharonov. Στο φαινόμενο αυτό μία δέσμη ηλεκτρονίων (σχήμα 1) ξεκινά από το σημείο Α και αφού διαχωριστεί σε δύο επιμέρους δέσμες ανασυντίθεται στο σημείο Β στην άλλη πλευρά. Οι δύο επιμέρους δέσμες περνούν εκατέρωθεν του σωλήνα μέσα στο οποίο υπάρχει το μαγνητικό πεδίο. Το πείραμα δείχνει ότι η συμβολή των δύο δεσμών επηρεάζεται από την ύπαρξη ή μη του μαγνητικού πεδίου παρόλο που αυτά δεν διέρχονται από αυτό.

Αποδεικνύεται ότι όταν οι δύο δέσμες φτάσουν στο Β θα παρουσιάσουν μία πρόσθετη διαφορά φάσης

$$\delta = \varphi_1 - \varphi_2 = \frac{e}{\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\boldsymbol{\ell} = \frac{e}{\hbar c} \Phi_B = 2\pi\lambda$$

Αν λ ακέραιος δεν θα υπάρξει καμία επίδραση του πεδίου στη συμβολή των δεσμών (δηλαδή η συμβολή θα πραγματοποιηθεί σαν να μην υπήρχε το πεδίο).

Σε ημιακέραιες τιμές του λ προφανώς θα έχουμε τη μέγιστη επίδραση. Αν οι δέσμες σε αυτή τη περίπτωση έφταναν σε φάση τώρα θα φτάνουν σε αντίθεση φάσης.

Αφού επομένως οι προσθήκη ακέραιων μονάδων ροής δεν δημιουργεί παρατηρήσιμες αλλαγές στη συμβολή των δεσμών περιορίζονται το λ στο διάστημα $[0,1]$ επεκτείνουμε τα συμπεράσματά μας περιοδικά. Αν E_1 είναι η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης θα μπορούμε να γράψουμε:

$$E_1(\lambda + n) = E_1(\lambda)$$

Το αναλλοίωτο σε μετασχηματισμούς βαθμίδας

Με βάση τη προηγούμενη συζήτηση της εισαγωγής στο φαινόμενο Bohm – Aharonov πρέπει να αναρωτηθούμε αν οι λύσεις της εξίσωσης Schrodinger είναι ανεξάρτητες από τη μορφή του διανυσματικού δυναμικού δηλαδή ανεξάρτητες από τους μετασχηματισμούς βαθμίδας που μπορούμε να πραγματοποιήσουμε με αυτό το δυναμικό.

Θα αποδείξουμε ότι η εξίσωση Schrodinger παρουσία

$$\text{διανυσματικού δυναμικού } \mathbf{A} : H\Psi = E\Psi \quad \mu\epsilon \quad H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2$$

παραμένει αναλλοίωτη στου μετασχηματισμούς

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' + \nabla \cdot \Lambda \quad \text{και}$$

$$\Psi' \rightarrow \Psi e^{-i\left(\frac{e}{\hbar c}\right)\Lambda}$$

Ο μετασχηματισμός

$$\Psi' \rightarrow \Psi e^{-i\left(\frac{e}{\hbar c}\right) \cdot A}$$

εισάγει στη κυματοσυνάρτηση μία αλλαγή φάσης ώστε η εξίσωση Schrodinger να διατηρεί την ίδια μορφή της πριν και μετά την αλλαγή βαθμίδας. Δηλαδή να είναι:

$$H'\Psi' = E'\Psi' \quad \text{και} \quad H' = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A}' \right)^2$$

πράγματι θέτοντας

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad \text{έχουμε} \quad \boldsymbol{\pi}'^2 \Psi' = e^{-i\left(\frac{e}{\hbar c}\right) \cdot A} (\boldsymbol{\pi}^2 \Psi)$$

$$\text{οπότε αφού } H = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2m} \text{ παίρνουμε και } H'\Psi' = E\Psi'$$

Άρα παρά την αλλαγή της βαθμίδας του διανυσματικού διατηρείται η αναλλοίωτη μορφή της εξίσωσης Schrodinger. Ωστόσο προκύπτει το ερώτημα : η εισαγωγή μίας χωρικά εξαρτώμενης φάσης στη κυματοσυνάρτηση έχει μετρήσιμο περιεχόμενο αφού αλλοιώνει τη μέση ορμή του σωματιδίου.

Αν όμως θεωρήσουμε ως πραγματικό φυσικό μέγεθος εκείνο που δεν θα επηρεαστεί (ως μέση τιμή) από μία αλλαγή βαθμίδας του διανυσματικού δυναμικού έχουμε ότι ο τελεστής $\boldsymbol{\pi}$ αποτελεί ένα τέτοιο μέγεθος.

πράγματι

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\pi}' \rangle &= (\Psi', \boldsymbol{\pi}' \Psi) = \int \left(\Psi e^{-i\left(\frac{e}{\hbar c}\right) \cdot A} \right)^* \cdot \\ &\cdot e^{-i\left(\frac{e}{\hbar c}\right) \cdot A} (\boldsymbol{\pi} \Psi) dV = \int \Psi^* (\boldsymbol{\pi} \Psi) dV = \langle \boldsymbol{\pi} \rangle \end{aligned}$$

Σε αντίθεση ο τελεστής της ορμής

$$\mathbf{P} = -i\hbar \nabla \text{ δεν έχει την αντίστοιχη ιδιότητα}$$

Αφού όμως ο τελεστής

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$$

έχει αναλλοίωτο περιεχόμενο θα αντιπροσωπεύει κάποιο φυσικό μέγεθος.

Από την εξίσωση κίνησης του Heisenberg

$$i\hbar\dot{x}_i = [x_i, H] \quad \text{προκύπτει}$$

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{x}_i &= [x_i, H] = i\hbar \frac{\partial H}{\partial p_i} = i\hbar \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\frac{1}{2m} \pi_j \pi_j \right) = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \left(\frac{\partial \pi_j}{\partial p_i} + \pi_j \frac{\partial \pi_j}{\partial p_i} \right) = \frac{i\hbar}{2m} (\delta_{ij} \pi_j + \pi_j \delta_{ij}) = i\hbar \frac{\pi_i}{m} \Rightarrow m\dot{x}_i = \pi_i \end{aligned}$$

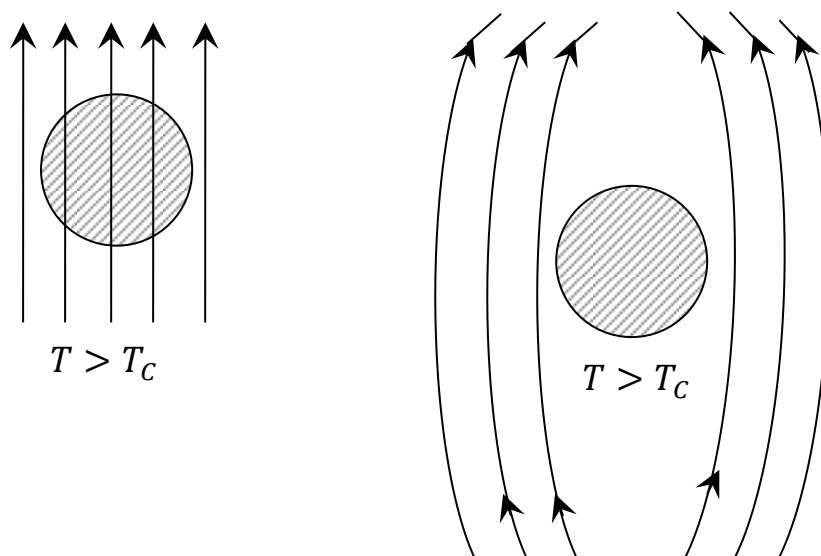
$$\text{Άρα διανυσματικά} \quad m \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \boldsymbol{\pi}$$

Από τη παραπάνω έκφραση είναι εύκολα αντιληπτό ότι εκφράζει τώρα το κβαντικό αντίστοιχο της μηχανικής ορμής του σωματιδίου. Ο τελεστής $\mathbf{P} = -i\hbar\nabla$ διακρίνεται από τον τελεστή $\boldsymbol{\pi}$ και αποτελεί τη «κανονική ορμή» με τις γνωστές του ιδιότητες.

Παρόμοια μπορούμε να δείξουμε ότι η στροφορμή που δημιουργείται από την ορμή $\boldsymbol{\pi}$ δηλαδή η $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \boldsymbol{\pi}$ είναι αναλλοίωτη στους μετασχηματισμούς βαθμίδας σε αντίθεση με τη κανονική ορμή $\boldsymbol{\ell} = \mathbf{r} \times \mathbf{P}$ που δεν είναι αναλλοίωτη στους παραπάνω μετασχηματισμούς.

Φαινόμενο Meisner

Το φαινόμενο Meisner είναι η αποβολή ενός μαγνητικού πεδίου από το εσωτερικό ενός σώματος όταν αυτό μεταβαίνει στην υπεραγώγιμη φάση. Δηλαδή αν T_c η θερμοκρασία μετάβασης στην υπεραγώγιμη φάση τότε για $T < T_c$ υπάρχει αποβολή οποιουδήποτε μαγνητικού πεδίου προϋπήρχε εντός του υλικού όπως σχηματικά φαίνεται παρακάτω



Όπως είναι γνωστό σε θερμοκρασίες $T < T_c$ σχηματίζονται σε ορισμένα (υπεραγώγιμα) υλικά τα ζεύγη Cooper που είναι ζεύγη ηλεκτρονίων. Τα ζεύγη αυτά λειτουργούν ως μποζόνια και δεν υπακούουν στους περιορισμούς της απαγορευτικής αρχής του Pauli. Κβαντομηχανικά μπορούμε να εξηγήσουμε το φαινόμενο Meissner συνδυάζοντας τις κλασσικές εξισώσεις του Maxwell με το κβαντικό ρεύμα πιθανότητας:

$$j = \text{Re}(\psi^*(\mathbf{u}\psi)) \quad \text{με} \quad \mathbf{u} = \frac{\boldsymbol{\pi}}{m} \quad \text{και} \quad \boldsymbol{\pi} = \left(\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)/m$$

Έχουμε επομένως

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_q \Rightarrow \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_q \Rightarrow \nabla(\nabla \cdot \mathbf{A}) - \nabla^2 \mathbf{A} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_q$$

Αφού όμως $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ η παραπάνω έκφραση γίνεται:

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_q \quad \text{όπου} \quad \mathbf{j}_q$$

είναι η πυκνότητα ρεύματος (η οποία προέρχεται από την επίδραση του πεδίου $\mathbf{B}$). Η πυκνότητα ρεύματος συνδέεται με τις πυκνότητες ρεύματος πιθανότητας μέσω της σχέσης

$$\mathbf{j}_q = (-2e) \text{Re} \left(\psi^* \left(\mathbf{P} + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right) / 2m$$

Ο συντελεστής 2 που πολλαπλασιάστηκαν το φορτίο και η μάζα οφείλεται στο ότι τώρα το «σωματίδιο» δεν είναι ένα ηλεκτρόνιο άρα ένα ζεύγος ηλεκτρονίων.

Όμως φυσικά έχουμε ομοιόμορφη κατανομή αρνητικού ηλεκτρικού φορτίου στο υπεραγωγό η οποία εξουδετερώνει την αντίστοιχη ομοιόμορφη κατανομή ηλεκτρικού φορτίου (θετικού) των ιόντων του μεταλλικού πλέγματος.

Η εισαγωγή όμως $\psi = B = \text{σταθερά}$ έχει ως αποτέλεσμα το μηδενισμό του όρου $\mathbf{P}\psi$ στην έκφραση που δόθηκε παραπάνω για τη πυκνότητα του ρεύματος.

Με βάση το παραπάνω στοιχείο η έκφραση αυτή γίνεται τώρα:

$$\mathbf{j}_q = \frac{-2e^2}{mc} |B|^2 \mathbf{A} = \frac{-2e^2 n_c}{mc} \mathbf{A} = \frac{-e^2 \cdot n_e}{mc} \cdot \mathbf{A}$$

$$\text{όπου } n_c = |B|^2 = |\psi|^2$$

η πυκνότητα των σωματιδίων Cooper και $n_e = 2n_c$ είναι η ισοδύναμη πυκνότητα ηλεκτρονίων.

Η σχέση

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_q \quad \text{γράφεται τώρα ως } (\nabla^2 - \gamma^2) \mathbf{A} = 0 \quad \text{με}$$

$$\gamma^2 = \frac{4\pi e^2 n_e}{mc^2}$$

Η προηγούμενη εξίσωση μπορεί να δεχθεί τις λύσεις:

$$\mathbf{A}(x) = \mathbf{A}(0)e^{-x/\ell} \quad \text{και} \quad \mathbf{B}(x) = \mathbf{B}(0)e^{-x/\ell}$$

$$\text{για } 0 \leq x \leq \infty \quad \text{και} \quad \ell = \gamma^{-1} = \left(\frac{mc^2}{4\pi e^2 \cdot n_e} \right)^{1/2}$$

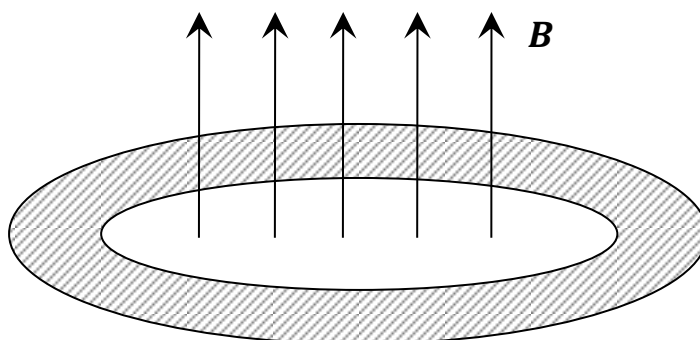
Το ℓ ονομάζεται μήκος London ή μήκος διείσδυσης.

Το μήκος London εκφράζει το μήκος μέσα στο υπεραγώγιμο υλικό που μπορεί να φτάσει το μαγνητικό πεδίο. Μετά από αυτό το

μήκος το μαγνητικό πεδίο μηδενίζεται. Επομένως αν αρχικά προϋπήρχε τώρα θα αποβληθεί. Το φαινόμενο Meisner δεν μπορεί να εξηγηθεί με τη κλασσική φυσική. Είναι ένα καθαρά κβαντομηχανικό φαινόμενο.

Κβάντωση μαγνητικής ροής που διέρχεται από το εσωτερικό ενός υπεραγώγιμου δακτυλίου

Έστω ένας υπεραγώγιμος δακτύλιος του οποίου το επίπεδο είναι κάθετο σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα του φαινομένου Meisner η ύπαρξη μαγνητικού πεδίου στο εσωτερικό του δακτυλίου είναι αδύνατη με εξαίρεση το μήκος ℓ στην επιφάνεια του υπεραγωγού. Εκεί κυκλοφορούν υπεραγώγιμα ρεύματα ώστε να αντισταθμιστεί το εξωτερικό πεδίο εντός του αγωγού και το συνολικό αποτέλεσμα να είναι μηδέν.



Μέσα στο δακτύλιο επομένως η πυκνότητα του ρεύματος θα πρέπει να είναι μηδενική.

Δηλαδή

$$\mathbf{j} = \frac{\text{Re}(\psi^* (\boldsymbol{\pi} \psi))}{2m} = 0$$

Η παραπάνω έκφραση όμως μπορεί να ισχύει μόνο αν

$$\boldsymbol{\pi} \psi = \left(\mathbf{P} + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right) \psi = 0$$

Από τη παραπάνω σχέση προκύπτει ότι αν $\psi = \text{σταθερά}$ θα έπρεπε και $A = 0$ πράγμα που δεν μπορεί να συμβεί με βάση και το φαινόμενο Bohm – Aharonov όπου

$$\oint A d\ell = 0$$

Ποιο σωστό θα είναι μία λύση της μορφής

$$\psi(\mathbf{r}) = B e^{i\theta(\mathbf{r})}$$

εισάγοντας τη τελευταία στη προηγούμενη εξίσωση παίρνουμε

$$\hbar \nabla \theta + \frac{2e}{c} \mathbf{A} = 0$$

η οποία με ολοκλήρωση παίρνει τη μορφή

$$\Delta \theta = \frac{2e}{\hbar c} \cdot \Phi_B \quad \mu\epsilon \quad \Delta \theta = \theta_{\alpha\rho\chi} - \theta_{\tau\epsilon\lambda}$$

η μεταβολή της συνάρτησης θ μεταξύ του αρχικού και τελικού σημείου. Αν τα σημεία αυτά συναντώνται και λόγω της απαίτησης για μονότιμη κυματοσυνάρτηση θα πρέπει η πιο πάνω μεταβολή της φάσης να είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του 2π .

Δηλαδή $\Delta \theta = 2\pi \cdot n$

Άρα

$$2\pi n = \frac{2e}{\hbar c} \Phi_B \Rightarrow \Phi_B = \frac{2\pi n \hbar c}{2e} = n \frac{\Phi_0}{2} \quad \text{όπου} \quad \Phi_0 = \frac{\hbar c}{e}$$

Επομένως η ροή που διαπερνά το εσωτερικό του δακτυλίου είναι κβαντισμένη.

Η ύπαρξη του όρου $\Phi_0/2$ αντί του Φ_0 οφείλεται στο διπλό φορτίο του ζεύγους Cooper.

Η πειραματική επιβεβαίωση (το 1961) της σχέσης

$$\Phi_B = n \frac{\Phi_0}{2}$$

αποτελεί μία εξαιρετική επιτυχία της κβαντομηχανικής αλλά και της θεωρίας των ζευγών Cooper για την ερμηνεία της υπεραγωγιμότητας.

Μέρος Γ

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Αναλυτικός υπολογισμός των πλατών μετάβασης και της πιθανότητας μετάβασης από αρχική σε τελική κατάσταση.

Έστω άτομο που δέχεται τη επίδραση ενός χρονικά μεταβαλλόμενου ηλεκτρικού πεδίου. Η χαμιλτονιανή θα μπορεί τώρα να αναλυθεί στην μορφή $H = H_0 + V(t)$ όπου H_0 η λεγόμενη εσωτερική χαμιλτονιανή του ατόμου (δηλαδή αυτή που υπάρχει απουσία του εξωτερικού δυναμικού) και $V(t)$ το εξωτερικό χρονικό εξαρτώμενο δυναμικό.

Παρατηρούμε ότι για την χρονικά εξαρτώμενη εξίσωση Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H(t)\psi$$

ο κλασσικός τρόπος λύσης που βασίζεται στη μέθοδο του χωρισμού των μεταβλητών δεν μπορεί τώρα να εφαρμοστεί αφού η χαμιλτονιανή εξαρτάται από το χρόνο.

Η μέθοδος που θα εφαρμοστεί ονομάζεται θεωρία των χρονικά εξαρτώμενων διαταραχών. Για να εφαρμοστεί όμως αυτή η μέθοδος θα πρέπει το δυναμικό $V(t)$ να θεωρηθεί ως μικρή διαταραχή στην εσωτερική χαμιλτονιανή του συστήματος.

Μία άλλη προϋπόθεση που θα δεχθούμε στη μελέτη μας είναι ότι η διαταραχή $V(t)$ έχει πεπερασμένη χρονική επίδραση στο σύστημα.

Άρα πριν την επίδραση της στο σύστημα αυτό περιγράφεται από την εσωτερική χαμιλτονιανή και τον ίδιο και μετά το τέλος της.

Θεωρούμε ότι η διαταραχή αρχίζει να δρα τη στιγμή $t = 0$ στην οποία το σύστημα βρίσκεται σε μία από τις αδιατάρακτες ιδιοκαταστάσεις του που περιγράφεται από την αντίστοιχη αδιατάραχτη ιδιοσυνάρτηση $\psi_n(0)$.

Με τη δράση του εξωτερικού δυναμικού $V(t)$ η κατάσταση του συστήματος μετά από χρόνο t θα προκύπτει από τη λύση της εξίσωσης Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H(t)\psi(t) = (H_0 + V(t))\psi(t)$$

στην οποία η αρχική συνθήκη είναι

$$\psi(0) = \psi_n^{(0)}$$

Η λύση $\psi(t)$ της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης Schrodinger θα μπορεί τώρα να γραφεί ως

$$\psi(t) = \sum_{m=1}^{\infty} c_m(t) \psi_m^{(0)} \text{ όπου } \psi_m^{(0)} \text{ οι λύσεις της } H_0\psi = E\psi$$

του αδιατάραχτου συστήματος.

(Αυτό γιατί οι λύσεις αυτές αποτελούν μια πλήρη βάση)

Η φυσική σημασία των συντελεστών $c_m(t)$ τώρα γίνεται προφανής. Τα τετράγωνα της $|c_m(t)|^2$ θα εκφράζουν τις πιθανότητες εύρεσης του συστήματος έπειτα από χρόνο t στην αντίστοιχη ιδιοκατάσταση $\psi_m^{(0)}$.

Αφού

$$c_m(t) = (\psi_m^{(0)}, \psi(t))$$

$$\text{θα έχουμε και } P_m(t) = |c_m(t)|^2 = |(\psi_m^{(0)}, \psi(t))|^2$$

Παρατήρηση

Στην παραπάνω προσέγγιση θεωρούμε ότι η αρχική και τελική κατάσταση ανήκουν στο ιδανικό διακριτό φάσμα.

Άρα αμελούμε προς το παρόν την διαπλάτυνση των φασματικών γραμμών λόγω του πεπερασμένου χρόνου ζωής (φυσική πλάτυνση) και το φαινόμενο μετάβασης σε συνεχές φάσμα.

Υπολογισμός των πλατών μετάβασης ανάμεσα σε καταστάσεις του ιδανικού διακριτού φάσματος

Από τη προηγούμενη συζήτηση είδαμε ότι

$$c_m(t) = (\psi_m^{(0)}, \psi(t))$$

Από την εξίσωση Schrodinger έχουμε:

$$\frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H \psi$$

$$\text{Άρα } \dot{c}_m(t) = \left(\psi_m^{(0)}, \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} \right) = \left(\psi_m^{(0)}, \frac{1}{i\hbar} H \psi \right) \Rightarrow i\hbar \dot{c}_m(t) = (\psi_m^{(0)}, H \psi)$$

Εισάγουμε το ανάπτυγμα

$$\psi(t) = \sum_k c_k(t) \psi_k^{(0)}$$

στη προηγούμενη σχέση και έχουμε:

$$i\hbar \dot{c}_m = \sum_k (\psi_m^{(0)}, H \psi_k^{(0)}) = \sum_k H_{mk} c_k \quad \mu\epsilon$$

$$H_{mk} = (\psi_m^{(0)}, H \psi_k^{(0)})$$

να αποτελούν το στοιχείο της μήτρας της χαμιλτονιανής

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

ως προς τη βάση των ιδιοσυναρτήσεων του αδιατάρακτου συστήματος.

Από τη σχέση $H = H_0 + V(t)$ προκύπτει και η αντίστοιχη

$$H_{mk} = (H_0)_{mk} + V_{mk} = E_m^{(0)} \delta_{mk} + V_{mk}$$

Άρα η σχέση

$$i\hbar \dot{c}_m = (\psi_m^{(0)}, H \psi_k^{(0)}) = \sum_k H_{mk} c_k \quad \text{γράφεται}$$

$$i\hbar \dot{c}_m(t) = E_m^{(0)} c_m(t) + \sum_k V_{mk}(t) c_k(t) \quad (1)$$

Είναι λογικό τώρα να σκεφτούμε για τη παραπάνω εξίσωση μία λύση της μορφής

$$c_m(t) = a_m(t) e^{\frac{-iE_m^{(0)} \cdot t}{\hbar}} \quad (2) \quad \text{με τα } a_m$$

να είναι πλέον συναρτήσεις χρόνου λόγω της χρονοεξαρτώμενης διαταραχής $V(t)$.

Με αντικατάσταση της (2) στην (1) παίρνουμε

$$i\hbar \dot{a}_m(t) = \sum_k V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} a_k(t) \quad (3) \quad \text{με } \omega_{mk} = \frac{E_m^{(0)} - E_k^{(0)}}{\hbar}$$

η γωνιακή συχνότητα Bohr για τη μετάβαση από τη κατάσταση m στη κατάσταση k του αδιατάρακτου συστήματος

Αν τώρα εισάγουμε στην:

$$\psi(t) = \sum_m c_m(t) \psi_m^{(0)} = \sum_m a_m(t) e^{-iE_m^{(0)}t/\hbar} \psi_m^{(0)}$$

όπου $t = 0$ παίρνουμε

$$\psi(0) = \sum_m a_m(0) \psi_m^{(0)} = \psi_n^{(0)} \quad \text{οπότε}$$

προκύπτει προφανώς ότι

$$a_n(0) = 1 \quad \text{και} \quad a_m(0) = 0 \quad \text{αν} \quad n \neq m \quad (4)$$

Η λύση της (3) μπορεί τώρα να πραγματοποιηθεί (όπως και στη μη χρονοεξαρτώμενη θεωρία) μέσω της

$$a_m(t) = a_m^{(0)}(t) + a_m^{(1)} + a_m^{(2)}t + \dots \quad (5)$$

το $a_m^{(0)}$ αποτελεί τη μηδενική τάξης προσέγγισης (αντιστοιχεί στην αδιατάραχτη εξίσωση) $a_m^{(1)}$ ο όρος πρώτης διόρθωσης κ.λ.π.

Για να ικανοποιούνται οι αρχικές συνθήκες (4) θα πρέπει

$$\begin{aligned} \alpha_n^{(0)} &= 1 \quad \text{και} \quad \alpha_m^{(0)} = 0 \quad \text{αν} \quad m \neq n \\ \text{και} \quad \alpha_m^{(1)}(0) &= \alpha_m^{(2)}(0) = \dots = 0 \end{aligned} \quad (6)$$

Αν εισάγουμε την (5) στην (1) παίρνουμε (με την εξίσωση των ποσοτήτων που έχουν την ίδια τάξη στα δύο μέλη της εξίσωσης)

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_m^{(0)} &= 0 \\ i\hbar \dot{a}_m^{(1)} &= \sum_k V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} a_k^{(0)} \\ &\vdots \\ i\hbar \dot{a}_m^{(v)} &= \sum_k V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} a_k^{(v-1)} \end{aligned}$$

Από τη πρώτη προκύπτει ότι $\alpha_m^{(0)} = \text{σταθερό}$

Από τη δεύτερη στο δεξιό μέρος της επιζεί μόνο ο όρος με $k = n$.

Άρα

$$i\hbar \dot{a}_m(t) = V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}$$

Η ολοκλήρωση της παραπάνω σχέσης μας δίνει

$$\alpha_m^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \quad (7)$$

Στην ολοκλήρωση λάβαμε υπόψη την αρχική συνθήκη (6)

Ο τύπος (7) μας δίνει σε πρώτη προσέγγιση το πλάτος μετάβασης από την κατάσταση n στην m με αντίστοιχη πιθανότητα μετάβασης

$$P_m^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2 \quad (8)$$

Για διορθώσεις ανώτερης τάξης μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον αναγωγικό τύπο

$$i\hbar \dot{a}_m^{(v)} = \sum_k V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t} a_k^{(v-1)}$$

που συνδέει κάθε μία διόρθωση με τη προηγούμενή της.

Οι προσεγγιστικοί τύποι (7) και (8) πρέπει να χρησιμοποιούνται με ιδιαίτερη προσοχή.

Κατ' αρχήν θα πρέπει το δυναμικό της διαταραχής $V(t)$ να είναι πολύ μικρό σε σχέση με την αδιατάρακτη χαμιλτονιανή H_0 . Ειδικά στη περίπτωση αρμονικά μεταβαλλόμενης διαταραχής της μορφής

$$V(t) = V_0 \cos(\omega t)$$

υπάρχει και ένα άλλο πρόβλημα.

Για

$$\omega = \omega_0 = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$$

η πιθανότητα μετάβασης από την αρχική κατάσταση στη τελική απειρίζεται κάτι που προφανώς δεν είναι φυσικά αποδεκτό.

Αν δηλαδή η εξωτερική αρμονική διαταραχή παρουσιάζει αυτό που κλασσικά ονομάζουμε συντονισμό ο τύπος (8) δίνει αυτό το αποτέλεσμα.

Το παραπάνω πρόβλημα αντιμετωπίζεται με τον κανόνα του Fermi που αφορά ακριβώς αυτές τις μεταβάσεις συντονισμού.

Κανόνας Fermi και απόδειξη αυτού

Συνεχίζοντας τη συζήτηση της προηγούμενης παραγράφου μπορούμε να σχολιάσουμε το αντίστοιχο κλασσικό ανάλογο στο συντονισμό ενός κλασσικού συστήματος στη μηχανική. Σύμφωνα λοιπόν με το φαινόμενο αυτό έχουμε μαθηματικό απειρισμό της

απόκρισης ενός μηχανικού συστήματος εάν η εξωτερική δύναμη διέγερσης:

$$F = F_0 \cos(\omega t)$$

έχει συχνότητα $\omega = \omega_0$ ενώ η απόσβεση του συστήματος είναι μηδενική. Ο απειρισμός αυτός έχει καθαρά μαθηματικό νόημα αφού στην πράξη η απόσβεση είναι μη μηδενική πράγμα που περιορίζει την απόκριση σε κάποιο πραγματικό πλάτος το οποίο εάν εξακολουθεί να παραμένει τόσο μεγάλο οδηγεί στην αστοχία του συστήματος αφού η ταλάντωση είναι τόσο έντονη που το υλικό οδηγείται εκτός ελαστικής περιοχής.

Επανερχόμαστε τώρα και πάλι στη κβαντομηχανική περίπτωση. Η αλλαγή που πρέπει να επιφέρουμε στο τρόπο προσέγγισης του θέματος βρίσκεται στο γεγονός ότι δεν μπορούμε να αντιμετωπίζουμε τις φασματικές γραμμές ως ιδανικές δηλαδή χωρίς κάποιο εύρος ενέργειας ΔE .

Άρα θα θεωρήσουμε τώρα ότι οι τελικές καταστάσεις είτε ανήκουν σε ένα διακριτό ενεργειακό φάσμα ζωνών ή ανήκουν σε ένα καθαυτό ενεργειακό συνεχές φάσμα όπως συμβαίνει στον ιονισμό ενός ατόμου.

Ορίζουμε τώρα το λεγόμενο ρυθμό μετάβασης

$$\Gamma = -\frac{\Delta N/N}{\Delta t} \quad (9)$$

ως το ποσοστό των ατόμων που εκτελούν τη θεωρούμενη μετάβαση στη μονάδα του χρόνου.

Αν η παραπάνω μετάβαση δεν οδηγεί σε επιστροφή στην αρχική στάθμη η εξίσωση (9) οδηγεί στη προφανή λύση

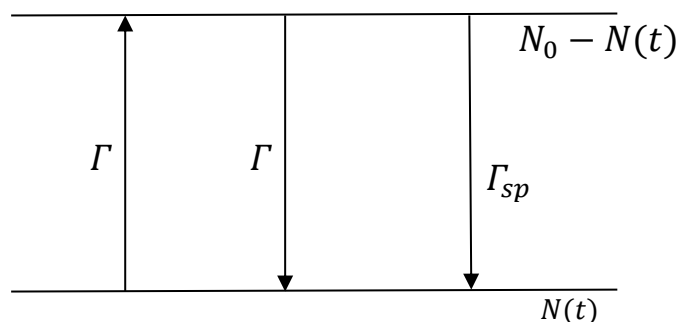
$$N(t) = N_0 e^{-\Gamma \cdot t} \quad (10)$$

Μία προφανής περίπτωση επιστροφής στην αρχική στάθμη είναι η αυθόρμητη αποδιέγερση στην οποία:

$$N(t) = N_0 e^{-\Gamma_{sp} t} = N_0 e^{\frac{-t}{\tau_{sp}}} \text{ όπου } \Gamma_{sp} \text{ και } \tau_{sp} \text{ είναι}$$

ο ρυθμός της θεωρούμενης αυθόρμητης αποδιέγερσης και $\tau_{sp} = \Gamma_{sp}^{-1}$ ο αντίστοιχος μέσος χρόνος ζωής της στάθμης.

Για καλύτερη προσέγγιση μπορούμε να θεωρήσουμε δύο στάθμες ενέργειας στις οποίες οι πληθυσμοί κατάληψης τη χρονική στιγμή t είναι $N(t)$ και $N_0 - N(t)$.



Θεωρούμε ότι για $t = 0$ η ανώτερη στάθμη είναι κενή και η κατώτερη έχει αρχικά πληθυσμό N_0 . Με την επίδραση ενός εξωτερικού H/M πεδίου έχουμε εξαναγκασμένη διέγερση με ρυθμό Γ ομοίως και εξαναγκασμένη αποδιέγερση με τον ίδιο ρυθμό αλλά και αυθόρμητη αποδιέγερση με ρυθμό Γ_{sp} .

Η εξέλιξη του πληθυσμού της αρχικής στάθμης θα καθορίζεται από τη διαφορική εξίσωση:

$$\begin{aligned}\dot{N} &= -\Gamma N + (N_0 - N)\Gamma + (N_0 - N)\Gamma_{sp} = \\ &= -\Gamma N + (N_0 - N)(\Gamma + \Gamma_{sp}) \quad \text{όπου}\end{aligned}$$

η φυσική σημασία του κάθε όρου είναι προφανής.

Θεωρώντας ως $N(0) = N_0$ η λύση είναι:

$$N(t) = \frac{\Gamma N_0}{2\Gamma + \Gamma_{sp}} e^{-(2\Gamma + \Gamma_{sp}) \cdot t} + \frac{(\Gamma + \Gamma_{sp})}{2\Gamma + \Gamma_{sp}} N_0$$

Για $t \rightarrow \infty$ βρίσκουμε το τελικό σταθερό αριθμό της αρχικής στάθμης

$$N(\infty) = \frac{(\Gamma + \Gamma_{sp})}{2\Gamma + \Gamma_{sp}} \cdot N_0$$

Ο υπολογισμός του ρυθμού Γ μίας διαδικασίας μετάβασης συντονισμού υπολογίζεται από τον περίφημο «χρυσό κανόνα Fermi».

Σύμφωνα με αυτόν έχουμε:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{Fi}|^2 \rho(E_F) \quad (11)$$

με $\rho(E_F)$ είναι η πυκνότητα κατάστασης στη περιοχή της τελικής κατάστασης $E_F = E_i + \hbar\omega$ και U_{Fi} το στοιχείο της μήτρας του τελεστή $V(t) = V_0 \cos(\omega t)$ που σε μιγαδική μορφή γράφεται ως

$$V(t) = \mathcal{V} e^{-i\omega t} + \mathcal{V} e^{i\omega t} \quad \mu\epsilon \quad \mathcal{V} = \frac{V_0}{2}$$

Στο τύπο (11) η πυκνότητα $\rho(E_f)$ δηλώνει κατ' αρχήν μετάβαση σε περιοχή συνεχούς φάσματος.

Μπορούμε ωστόσο να επεκτείνουμε τη προηγούμενη διαπίστωση και σε καταστάσεις διακριτού φάσματος για διαπλατυσμένη (λόγω της αρχής της αβεβαιότητας) γραμμή εύρους ΔE . Σε αυτή τη περίπτωση η πυκνότητα καταστάσεων

$$\rho = \frac{\Delta N}{\Delta E} = \frac{1}{\Delta E}$$

αφού υπάρχει μόνο μία αντιστοιχούσα κβαντική κατάσταση στο εύρος ΔE της γραμμής.

Μία προϋπόθεση εφαρμογής του τύπου (11) είναι και η

$$\Delta E \gg |\mathcal{V}_{Fi}|$$

Το προηγούμενο δηλώνει το γεγονός ότι η ισχύς της διαταραχής είναι πολύ μικρότερη του πλάτους ΔE της γραμμής.

Ένα άλλο χαρακτηριστικό του τύπου (11) είναι ότι δεν αναφέρεται στη πιθανότητα μετάβασης $P_{i \rightarrow f}(\tau)$ όπου τ ο χρόνος δράσης της διαταραχής.

Η σύνδεση της πιθανότητας $P_{i \rightarrow f}(\tau)$ με τον συντελεστή Γ είναι σχετικά εύκολη για μετάβαση μίας κατεύθυνσης (χωρίς επιστροφές).

Έχουμε

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{N_f(\tau)}{N_0} = \text{το κλάσμα των ατόμων που βρέθηκαν στη στάθμη } f \text{ ξεκινώντας από τη στάθμη } i \text{ μετά από χρόνο } t$$

Είναι

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{N_f(\tau)}{N_0} = \frac{N_0 - N(\tau)}{N_0} = \frac{N_0(1 - e^{-\Gamma\tau})}{N_0} \Rightarrow P_{i \rightarrow f} = 1 - e^{-\Gamma\tau}$$

Αναπτύσσοντας το παραπάνω ως προς $\Gamma\tau$ και αγνοώντας τους όρους

$$(\Gamma\tau)^2, (\Gamma\tau)^3 \dots \dots \text{ έχουμε}$$

$$P_{i \rightarrow f} = \Gamma\tau + \dots \dots \mu\epsilon \ (\Gamma\tau) \ll 1$$

Σύμφωνα με τη παραπάνω σχέση η $P_{i \rightarrow f}(\tau)$ είναι ανάλογη του χρόνου δράσης του τ με συντελεστή αναλογίας το ρυθμό Γ .

Εξαιτίας της πλάτυνσης της γραμμής το φυσικά σωστό αποτέλεσμα θα είναι η άθροιση (ολοκλήρωση) προς όλες τις δυνατές τελικές καταστάσεις f μέσα από το ολοκλήρωμα

$$\overline{P}_{(i \rightarrow f)} = \int_{-\infty}^{+\infty} P_{i \rightarrow f}(\tau) \rho(E_f) dE_f$$

Ως μεταβλητή της ολοκλήρωσης παίρνουμε τώρα τη τελική ενέργεια E_f , τα όρια ολοκλήρωσης εκτείνονται γενικά από $-\infty$ έως $+\infty$.

Ο τύπος (7) για τη διαταραχή της μορφής

$$V(t) = \mathcal{V} e^{-i\omega t} + \mathcal{V} \cdot e^{i\omega t} \text{ γίνεται}$$

$$\begin{aligned}\alpha_{i \rightarrow f}(\tau) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t} dt = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{V}_{fi} \cdot \left[\int_{-\tau/2}^{\tau/2} e^{i(\omega_{fi}-\omega)t} dt + \int_{-\tau/2}^{\tau/2} e^{i(\omega_{fi}+\omega)t} dt \right]\end{aligned}$$

Με βάση την ιδιότητα της συνάρτησης

$$\begin{aligned}\delta(\omega) , \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} dt &= 2\pi \delta(\omega) \text{ και για } \tau \rightarrow \infty \text{ παίρνουμε} \\ \alpha_{i \rightarrow f} &= -\frac{i}{\hbar} \mathcal{V}_{fi} \left(2\pi \delta(\omega_{fi} - \omega) + 2\pi \delta(\omega_{fi} + \omega) \right) \quad (12)\end{aligned}$$

Από τη προηγούμενη αν

$$E_f > E_i \Rightarrow \omega_{fi} > 0 \text{ ο όρος } 2\pi \delta(\omega_{fi} + \omega) \text{ μηδενίζεται}$$

Αν όμως $E_f < E_i \Rightarrow \omega_{fi} < 0$ τότε μηδενίζεται ο πρώτος όρος του αθροίσματος.

Για τη πρώτη περίπτωση το πλάτος πιθανότητας $\alpha_{i \rightarrow f}(\infty)$ γίνεται

$$\alpha_{i \rightarrow f}(\infty) = -\frac{2\pi i}{\hbar} \mathcal{V}_{fi} \delta(\omega_{fi} - \omega)$$

$$\text{με } \omega_{fi} - \omega = 0 \rightarrow f - E_i = \hbar\omega \rightarrow E_f = E_i + \hbar\omega$$

που είναι η τελική τιμή της ενέργειας του ατόμου λόγω της απορρόφησης του φωτονίου.

Στη δεύτερη περίπτωση πρέπει

$$\omega_{fi} + \omega = 0 \Rightarrow E_f = E_i - \hbar\omega$$

Η τελευταία σχέση εκφράζει τη μείωση της ενέργειας του ατόμου λόγω της αποβολής του φωτονίου.

Ο πρώτος όρος της (12) αντιστοιχεί στην απορρόφηση συντονισμού και ο δεύτερος στην εξαναγκασμένη αποδιέγερση.

Αν όμως η αρχική κατάσταση του ατόμου είναι η θεμελιώδης κατάσταση του υπάρχει μόνο ο πρώτος όρος και επομένως

$$\alpha_{i \rightarrow f} = -\frac{i}{\hbar} U_{fi} 2\pi \delta_\tau(\omega_f - \omega) \quad \mu\epsilon$$

$$\delta_\tau(\Omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} e^{i\Omega t} dt = \frac{\sin\left(\tau\Omega/2\right)}{\pi\Omega}$$

και $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \delta_\tau(\Omega) = \delta(\Omega) = \text{συνάρτηση δέλτα του Dicac}$

Στο όριο $\tau \rightarrow \infty$ παίρνουμε

$$\begin{aligned} \alpha_{i \rightarrow f}(\infty) &= -\frac{2\pi i}{\hbar} U_{fi} \delta(\omega_{fi} - \omega) = \\ &= -\frac{2\pi i}{\hbar} U_{fi} \delta\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{\hbar}\right) \end{aligned}$$

Στο όριο $\tau \rightarrow \infty$ η μετάβαση οδηγείται υποχρεωτικά στη τελική κατάσταση $E_f = E_i + \hbar\omega$

Στη περίπτωση τώρα που το τ δεν είναι άπειρο η συνάρτηση

$$\delta_\tau(\omega_{fi} - \omega) = \delta_\tau\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{\hbar}\right)$$

μας δίνει μία στενή κατανομή τιμών ενέργειας E_f γύρω από τη τιμή $E_i + \hbar\omega$

Για τη πιθανότητα $P_{i \rightarrow f}(\tau)$ τώρα έχουμε

$$P_{i \rightarrow f}(\tau) = |\alpha_{i \rightarrow f}(\tau)|^2 = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |U_{fi}|^2 \delta_\tau^2\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{\hbar}\right)$$

Άρα

$$\bar{P}_{i \rightarrow f}(\tau) = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_\tau^2\left(\frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{\hbar}\right) |U_{fi}|^2 \rho(E_f) dE_f$$

Εισάγουμε τώρα τη μεταβλητή

$$\Omega = \frac{E_f - E_i - \hbar\omega}{\hbar} \Rightarrow dE_f = \hbar d\Omega$$

Άρα

$$\bar{P}_{i \rightarrow f}(\tau) = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{\tau}^2(\Omega) |U_{fi}|^2 \rho(E_i + \hbar\omega + \hbar\Omega) d\Omega \quad (13)$$

Επειδή τώρα η κατανομή για $\tau \rightarrow \infty$ γίνεται ολοένα και οξύτερη μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι συναρτήσεις $|U_{fi}|^2$ και $\rho(E_f)$ έχουν σταθερή (πρακτικά) τιμή στο μικρό διάστημα ολοκλήρωσης. Η τιμή αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως τιμή στο μέσο της περιοχής δηλαδή για $\Omega = 0$

τότε η (13) γίνεται

$$\begin{aligned} \bar{P}_{i \rightarrow f}(\tau) &= \frac{4\pi^2}{\hbar} |U_{fi}|^2 \rho(E_i + \hbar\omega + \hbar\Omega)|_{\Omega=0} \cdot \\ &\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{\tau}^2(\Omega) d\Omega = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |U_{fi}|^2 \rho(E_i + \hbar\omega) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{\tau}^2(\Omega) d\Omega \end{aligned}$$

Όμως ισχύει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta_{\tau}^2(\Omega) d\Omega = \frac{\tau}{2\pi}$$

Άρα η προηγούμενη σχέση παίρνει τη μορφή

$$\begin{aligned} \bar{P}_{i \rightarrow f}(\tau) &= \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |U_{fi}|^2 \rho(E_i + \hbar\omega) \frac{\tau}{2\pi} = \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}|^2 \rho(E_f) \tau \quad \mu\epsilon \quad E_f = E_i + \hbar\omega \end{aligned}$$

Από την αναλογική σχέση

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}(\tau) &= \Gamma \tau \quad \mu\epsilon \quad (\Gamma \tau) \ll 1 \quad \text{προκύπτει} \\ \Gamma &= \frac{2\pi}{\hbar} |U_{fi}|^2 \rho(E_f) \quad \text{που είναι και το ζητούμενο.} \end{aligned}$$

Βιβλιογραφία

- Quantum Mechanics (Eugen Merzbacher)
- Advanced Quantum Mechanics (J.J. Sakurai)
- Κβαντομηχανική II (Διονύσης Μπονάνος)
- Κβαντομηχανική II (Στέφανος Τραχανάς)
- Σχετικιστική Κβαντομηχανική (Στέφανος Τραχανάς)
- Εισαγωγή στη Κβαντομηχανική (Γ. Ανδριτσόπουλος)
- Gauge Theories in Particle Physics Volume 1 (J.R. Aitchison, A.J.G. Hey)