

3. ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΩΝ EINSTEIN ΜΕ ΘΕΩΡΙΑ ΔΙΑΤΑΡΑΧΩΝ

3.1 Προκαταρκτικά

Είδαμε τη σημασία των διεργασιών απορρόφησης και εκπομπής ακτινοβολίας από άτομα για την ακτινοβολία μέλανος σώματος και την ανάπτυξη πυκνής μονοχρωματικής ακτινοβολίας σε laser.

Οι διεργασίες αυτές περιγράφονται φαινομενολογικά μέσω των συντελεστών A και B του Einstein. Μιά και η απορρόφηση και εκπομπή ακτινοβολίας από άτομα διαλαμβάνει αλληλεπίδραση ακτινοβολίας με τα άτομα, θα μπορούσαμε να παρακολουθήσουμε την εξέλιξη τόσο της ατομικής κίνησης όσο και της ακτινοβολίας κατά την απορρόφηση και διεγερόμενη εκπομπή. Για το σκοπό αυτό θα πρέπει να μελετήσουμε τη δυναμική του συστήματος άτομο και ακτινοβολία σε αλληλεπίδραση. Για να ευκολύνουμε τα πράγματα θα θεωρήσουμε την περίπτωση ενός ατόμου και μίας μονοχρωματικής ακτινοβολίας και μάλιστα θα περιοριστούμε στην κίνηση ενός από τα ηλεκτρόνια του ατόμου. Αυτό μπορεί να γίνει κατά προσέγγιση εφόσον τα φωτόνια που ανταλλάσσει η ακτινοβολία με το άτομο ταιριάζουν ενεργειακά μεταξύ δύο σταθμών όπου μπορεί να κινείται το ηλεκτρόνιο μας. Για να απλοποιήσουμε περισσότερο τα πράγματα μπορούμε στις θεωρήσεις μας να έχουμε υπόψη το άτομο του υδρογόνου που έχει ένα ηλεκτρόνιο ή ένα υδρογονοειδές άτομο του οποίου το υπό θεώρηση ηλεκτρόνιο θα βλέπει ένα θωρακισμένο δυναμικό Coulomb ανάλογο του

$$\left(\frac{1}{r}\right) e^{-\alpha r} \quad (3.1)$$

Σε πρώτο στάδιο θα πάρουμε την ακτινοβολία ως ένα χρονικά διαγραφόμενο εξωτερικό αίτιο και έτσι αυτό που μένει στη μελέτη μας είναι η κίνηση του ατόμου. Αυτή η προσέγγιση είναι επιτρεπτή εφόσον έχουμε αρκετά πυκνή ακτινοβολία μια και η απορρόφηση ή η εκπομπή ενός φωτονίου από το υπό μελέτη άτομο δεν μπορεί να επηρεάσει αισθητά τα πλάτη του ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου του κύματος. Σε περιπτώσεις που ενδιαφέρον οι διακυμάνσεις της πυκνότητας της ακτινοβολίας είναι ανάγκη να θεωρήσουμε τόσο τη δυναμική του ατόμου όσο και της ακτινοβολίας σε αλληλεπίδραση. Αυτό θα γίνει αργότερα όταν το σύστημα άτομο-ακτινοβολία θα μελετηθεί στην πλήρη κβαντική του μορφή.

Αρχίζουμε τώρα με την Χαμιλτονιανή του υπό θεώρηση ηλεκτρονίου στο άτομο μας

$$H_o = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}) \quad (3.2)$$

Η κατάσταση του ηλεκτρονίου περιγράφεται από την κυματική συνάρτηση $\Psi(\vec{r}, t)$, οποία υπακούει την εξίσωση του Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H_o \Psi(\vec{r}, t) \quad (3.3)$$

Όπως είναι γνωστό η ποσότητα $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 d^3\vec{r}$ παρέχει την πιθανότητα ευρέσεως του ηλεκτρονίου τη στιγμή t μεταξύ \vec{r} και $\vec{r} + d\vec{r}$. Όταν το δυναμικό είναι ελκτικό η (3-3) επιδέχεται περιοδικές λύσεις. Το δυναμικό Coulomb από τον πυρήνα στα άτομα είναι ένα ισχυρό δυναμικό όσο πλησιάζουμε τον πυρήνα. Όπως είπαμε και προηγούμενα για ευκολία μας θα φανταζόμαστε το άτομο του υδρογόνου. Το δυναμικό σε απόσταση r από τον πυρήνα είναι $|e|/r$. Έτσι η δυναμική ενέργεια του ηλεκτρονίου σε απόσταση r είναι $U(r) = -e^2/r$.

Οι διάφορες περιοδικές λύσεις της εξίσωσης του Schrödinger (3-3) έχουν τη μορφή

$$\Psi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) \quad (3.4)$$

όπου $\Phi(\vec{r})$ υπακούει την (χρονικά ανεξάρτητη) εξίσωση Schrödinger

$$H_o \Phi(\vec{r}) = E \Phi(\vec{r}) \quad (3.5)$$

με το $\Phi(\vec{r})$ να πληροί τις συνήθεις συνοριακές συνθήκες που απαιτούνται στην κβαντική μηχανική δηλαδή όσο μεγαλώνει το r οι τιμές της $\Phi(\vec{r})$ να πέφτουν κατά τρόπο που

$$\int |\Phi(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = 1 \quad (3.6)$$

Η εξίσωση της κίνησης (3-3) επιδέχεται απειρία λύσεων της μορφής (3-4) η κάθε μια των οποίων χαρακτηρίζεται από ορισμένους κβαντικούς αριθμούς τους οποίους και θα συμβολίζουμε συλλογικά με ένα δείκτη, πέστε, k . Π.χ. στην περίπτωση του ατόμου του υδρογόνου το k στέκει για τρεις κβαντικούς αριθμούς, n, ℓ, m . Στην ιδιοκατάσταση $\Psi(r, \theta, \varphi)$ αντιστοιχεί ενέργεια

$$E_{nlm} = -\frac{e^2}{2\alpha_0 n^2} = -\frac{Ry}{n^2} \quad (3.7)$$

όπου α_0 ($\approx 0.53\text{\AA}$) η ακτίνα του Bohr. Έτσι, λοιπόν, η λύση με δείκτη k θα είναι Φ_k . Αυτή είναι μία ιδιοσυνάρτηση της εξίσωσης (3-3). Η Φ_k είναι η k ιδιοσυνάρτηση της (3-5) ή του Χαμιλτονιακού τελεστή H_o και E_k είναι η ενέργεια του συστήματος που περιγράφεται από την ιδιοσυνάρτηση (ή ιδιοκατάσταση) Φ_k

Τα πιο πάνω για υπενθύμιση σας και τώρα μπαίνουμε στο θέμα της χρονικά εξαρτημένης θεωρίας διαταραχών για χρήση στη μελέτη της αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας με άτομα.

3.2 Χρονικά εξαρτώμενη θεωρία διαταραχών

Είναι γνωστό ότι ένα μικρό σύνολο από τα προβλήματα της Φυσικής μπορούν να τύχουν ακριβούς αναλυτικής λύσεως. Για να κάνουμε πρόοδο καταφεύγουμε σε προσεγγιστικές και αριθμητικές λύσεις. Σκοπός της παρεμβολής του εδαφίου αυτού είναι η εξυπηρέτηση του μαθήματος, και ως εκ τούτου η διαμόρφωση του θα αφορά στην αλληλεπίδραση ακτινοβολίας με άτομο.

Θεωρούμε άτομο με ενεργό ηλεκτρόνιο του οποίου η Χαμιλτονιανή είναι H_0 και οι διάφορες ιδιοκαταστάσεις Φ_k με αντίστοιχες ιδιοτιμές ενέργειας $E_k = \hbar\Omega_k$, τις οποίες είμαστε σε θέση να γνωρίζουμε. Το k αντιπροσωπεύει συλλογικά τους διάφορους κβαντικούς αριθμούς. Έχουμε:

$$H_0\Phi_k = \hbar\Omega_k\Phi_k \quad (3.8)$$

Αν διαταράξουμε το σύστημα με πρόσθετο δυναμικό $V(\vec{r}, t)$ η Χαμιλτονιανή του συστήματος μας γίνεται

$$H = H_0 + V(\vec{r}, t) \quad (3.9)$$

Στις εφαρμογές το V θα προέρχεται από το ηλεκτρικό πεδίο οδεύοντος ή στάσιμου κύματος και θα είναι μικρό έναντι της H_0 . Το πρόβλημα προς επίλυση είναι πρόβλημα αρχικών τιμών που σχετίζεται με την εξίσωση του Schrödinger με Χαμιλτονιανή την (3-9)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H\Psi(\vec{r}, t) \quad (3.10)$$

και τίθεται ως εξής: Δεδομένου ότι η κατάσταση του συστήματος τη στιγμή $t = 0$ είναι

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \Phi(\vec{r}) \quad (3.11)$$

ποία είναι η κατάσταση του συστήματος $\Psi(\vec{r}, t)$ ανά πάσα στιγμή t , όταν η Ψ υπακούει τη (3-10);

Το πρόβλημα αναλυτικά είναι εν γένει άλυτο, και καταφεύγουμε στην πιο κάτω διαδικασία προκειμένου υπό ορισμένες συνθήκες (κατά βάση για μικρούς χρόνους) να προσεγγίσουμε τη λύση. Γράφουμε τόσο την άγνωστη συνάρτηση, Ψ , όσο και την αρχική κατάσταση, Φ , ως γραμμικούς συνδυασμούς των ιδιοσυναρτήσεων Φ_k .

$$\Phi(\vec{r}) = \sum f_k \Phi_k(\vec{r}) \quad (3.12)$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum C_k(t) e^{-i\Omega_k t} \Phi_k(\vec{r}) \quad (3.13)$$

Αυτό είναι δυνατό λόγω της πληρότητας του συνόλου των ιδιοκαταστάσεων $\{\Phi_k\}$. Είναι ενδεχόμενο πολλοί από τους συντελεστές f_k (αρχικά μιγαδικά πλάτη) να είναι μηδέν. Τώρα, προκειμένου η $\Psi(\vec{r}, 0)$ να συμπίπτει με την $\Phi(\vec{r})$ έχουμε

$$C_k(0) = f_k \quad (3.14)$$

Εν συνεχεία εισάγουμε την (3-13) στην εξίσωση κίνησης (3-10) και λαμβάνοντας υπόψη την (3-8) παίρνουμε

$$\sum_k i\hbar \dot{C}_k e^{-i\Omega_k t} \Phi_k = \sum_k V(\vec{r}, t) \Phi_k C_k e^{-i\Omega_k t} \quad (3.15)$$

Πολλαπλασιάζουμε την (3-15) επί $\Phi_n^*(\vec{r})$ και ολοκληρώνουμε εφ' όλου του χώρου, και δεδομένης της ορθοκανονικότητας των ιδιοκαταστάσεων Φ_k , δηλαδή

$$\int \Phi_n^*(\vec{r}) \Phi_k(\vec{r}) d^3\vec{r} = \delta_{nk} \quad (3.16)$$

καταλήγουμε με απλές ανακατατάξεις στην εξίσωση

$$\dot{C}_n = -\frac{i}{\hbar} \sum_k V_{nk}(t) e^{-i(\Omega_k - \Omega_n)t} C_k \quad (3.17)$$

όπου V_{nk} είναι το στοιχείο πίνακα που δίνεται ως

$$V_{nk} = \int \Phi_n^*(\vec{r}) V(\vec{r}, t) \Phi_k(\vec{r}) d^3\vec{r} = (\Phi_n | V | \Phi_k) \quad (3.18)$$

Η διαδικασία για την εύρεση της (3-18) ισχύει για όλες τις καταστάσεις της βάσεως $\{\Phi_n\}$. Έτσι θεωρώντας όλους του κβαντικούς αριθμούς n έχουμε ένα άπειρο σύστημα διαφορικών εξισώσεων 1ης τάξεως της μορφής (3-17) για τον υπολογισμό των πλατών $C_n(t)$. Το σύστημα αυτό είναι ισοδύναμο με την εξίσωση του Schödinger, διότι γνωρίζοντας τα πλάτη C_n ευρίσκουμε την ζητούμενη λύση μέσω της (3-12) & (3-13). Τα διάφορα $C_n(t)$ ευρίσκονται κατ' αρχήν από την λύση του συστήματος των (3-17) με αρχικές συνθήκες που δίνονται στην (3-14). Για τη λύση του συστήματος των (3-17), που είναι γραμμικό, μπορεί σε ικανοποιητικό βαθμό να επέμβει ο υπολογιστής ή να γίνει εφαρμογή προσεγγιστικής διαδικασίας που υπολογρεύεται από τις συνθήκες του προβλήματος.

Τα πιο πάνω συνιστούν τη λεγόμενη χρονικά εξαρτημένη θεωρία των διαταραχών, εφαρμογή της οποίας θα κάνουμε σε δισταθμικό άτομο υπό την επίδραση μονοχρωματικού ηλεκτρικού κύματος.

3.3 Δισταθμικό άτομο υπό την επίδραση πολωμένου H/M κύματος

Είδαμε ότι οι εξισώσεις για την κίνηση των πλατών, C_k , των διαφόρων ιδιοκαταστάσεων Φ_k ενός ηλεκτρονίου (θεωρούμε την περίπτωση ενός ενεργού ηλεκτρονίου) σε άτομο υπό την επίδραση πολωμένου H/M-κύματος παίρνουν τη μορφή (3.17)

$$\dot{C}_n = -\frac{i}{\hbar} \sum_k V_{nk}(t) e^{-i(\omega_k - \omega_n)t} C_k \quad (3.19)$$

Τα n και k είναι συλλογικά στη θέση των κβαντικών αριθμών. Το n διατρέχει όλες τις δυνατές τιμές του και ως εκ τούτου έχουμε ένα άπειρο σύστημα γραμμικών εξισώσεων.

Το σύστημα (3-19) με τον μετασχηματισμό

$$C_n = e^{i\omega_n t} C'_n \quad (3.20)$$

μπορεί να γραφτεί ως

$$\dot{C}'_n + i\omega_n C'_n = -\frac{i}{\hbar} \sum_k V_{nk}(t) C'_k \quad (3.21)$$

αν και αυτό δεν πολυεξυπηρετεί, εφόσον ο χρόνος εξακολουθεί να έχει την παρουσία του στα στοιχεία πίνακα $V_{nk}(t)$. Το πρόβλημα μας έχει ως εξής: Αν το σύστημα μας πριν την διαταραχή βρισκόταν στην κατάσταση Φ_ℓ η αρχική κυματική συνάρτηση θα ήταν

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \Phi_\ell(\vec{r}) \quad (3.22)$$

δηλαδή $C_\ell(0) = 1$ και όλα τα άλλα $C_n(0) = 0$. Παρεμπιπτόντως η αρχική κατάσταση του συστήματος μπορεί να είναι μείγμα περισσοτέρων ιδιοκαταστάσεων και τότε θα μας είναι δεδομένα για τη στιγμή 0 τόσα πλάτη όσα επαρκούν για την περιγραφή της $\Psi(\vec{r}, 0)$.

Επανερχόμαστε στο πρόβλημα με αρχική τιμή τη (3-22). Η περίπτωση αυτή μας ενδιαφέρει στην αλληλεπίδραση ατόμου με H/M κύμα. Για μικρούς χρόνους από την έναρξη της διαταραχής το $C_\ell(t)$ δεν θα διαφέρει και πολύ από το 1, ενώ τα άλλα $C_n(t)$ δεν θα έχουν αποστεί και πολύ από το 0. Το $|C_\ell(t)|^2$ είναι η πιθανότητα το σύστημα να είναι κατά τη

στιγμή t στην κατάσταση ℓ . Αντίστοιχα και για τα διάφορα άλλα $|C_n(t)|^2$. Για κάθε t έχουμε

$$\sum_n |C_n(t)|^2 = 1 \quad (3.23)$$

Περιοριζόμαστε τώρα σε δυνάμεις που προέρχονται από το ηλεκτρικό πεδίο οδεύοντος πολωμένου κύματος. Όπως είδαμε στην περίπτωση αυτή το ηλεκτρόνιο μας βρίσκεται κατά πολύ καλή προσέγγιση υπό την επίδραση ηλεκτρικού πεδίου της μορφής

$$\underline{\mathcal{E}} = \underline{\mathcal{E}}_o \cos(\underline{k} \cdot \underline{R} - \omega t) \quad (3.24)$$

Το \underline{R} στην (3-24) είναι το άνωσμα της θέσης του πυρήνα του ατόμου και ω η συχνότητα του κύματος. Η κατεύθυνση του $\vec{\mathcal{E}}_o$ καθορίζει την πόλωση. Το $\underline{k} \cdot \underline{R}$ συνιστά μία φάση την οποία στους πάρα κάτω λογαριασμούς θα παραλείψουμε. Το ηλεκτρικό πεδίο που επενεργεί στο ηλεκτρόνιο μας εξαρτάται μονάχα από τον χρόνο. Έτσι η δυναμική συνάρτηση από την οποία παράγεται η δύναμη της διαταραχής είναι

$$V(\underline{r}, t) = -e\underline{\mathcal{E}}(t) \cdot \vec{r} \quad (3.25)$$

Στα πιο κάτω θα θεωρήσουμε το κύμα μας πολωμένο στην κατεύθυνση z και έτσι

$$\underline{\mathcal{E}}(t) = \hat{z}\mathcal{E}_o \cos(\omega t) \quad (3.26)$$

Όσο μεγαλύτερο το πλάτος του κύματος τόσο μεγαλύτερη και η ενέργεια που εδράζεται σε αυτό. Η συχνότητα ω καθορίζει μέσω του τύπου $\hbar\omega$ την ενέργεια των φωτονίων που μπορεί να ανταλλάξει το κύμα μας.

Ας φανταστούμε τώρα ένα άτομο στην κατάσταση Φ_1 με (ηλεκτρονική) ενέργεια E_1 . Στο άτομο αυτό υπάρχει και μια παραπλήσια ενεργειακή στάθμη E_2 τέτοια ώστε $E_2 - E_1 = \hbar\omega$, δηλαδή τα φωτόνια του κύματος μας

ταιριάζουν ενεργειακά με την σταθμική διαφορά των καταστάσεων 1 και 2. Στην περίπτωση αυτή λόγω της διατήρησης της ενέργειας η κίνηση των πλατών θα περιορίζεται κατά κύριο λόγο μεταξύ των C_1 και C_2 . Κατά ένα τρόπο θα έχουμε ένα δισταθμικό άτομο τα στοιχεία του οποίου δίνονται στο πιο κάτω διάγραμμα του σχήματος. Όταν περιοριζόμαστε σε δισταθμικό άτομο και το ηλεκτρόνιο βρίσκεται στην κάτω στάθμη θα το λέμε αδιέγερτο και όταν το ηλεκτρόνιο ενεργειακά θα κατέχει την πάνω στάθμη, το άτομο μας θα είναι διεγερμένο.

Μας ενδιαφέρει το πρόβλημα της απορρόφησης ακτινοβολίας από ένα άτομο και για τη μελέτη μας θα κάνουμε χρήση του τεχνάσματος με κατάλληλο δισταθμικό άτομο. Ξεκινάμε με το άτομο μας αδιέγερτο και παίρνουμε το ηλεκτρικό πεδίο πολωμένο στην κατεύθυνση του z-άξονα. Με το ηλεκτρικό πεδίο $\underline{x}(t) = \hat{z}\underline{\mathcal{E}}_0 \cos(\omega t)$ που επενεργεί επί του ηλεκτρονίου τα στοιχεία πίνακα $V_{nk}(t)$ που εμφανίζονται στην (3-19) είναι:

Ενέργειες	2	Στάθμες	Καταστάσεις
E_2	2	—————	Φ_2
E_1	1	—————	Φ_1

Σχήμα 3-1 Ενεργειακές στάθμες και ιδιοκαταστάσεις ενός δισταθμικού ατόμου

$$V_{12} = -e\mathcal{E}_0 \cos(\omega t) \int \Phi_1^*(\vec{r},) (\hat{z} \cdot \vec{r}) \Phi_2(\vec{r}) d^3\vec{r}$$

$$V_{21} = -e\mathcal{E}_0 \cos(\omega t) \int \Phi_2^*(\vec{r},) (\hat{z} \cdot \vec{r}) \Phi_1(\vec{r}) d^3\vec{r} = V_{12}^* \quad (3.27)$$

$$V_{11} = V_{22} = 0$$

Τα V_{11} και V_{22} είναι 0 λόγω του ότι η έκφραση $|\Phi_j(r)|^2 \bar{r}$ είναι αντισυμμετρική ως προς την αρχή των αξόνων όπου είναι ο πυρήνας του ατόμου.

Το $\hat{z} \cdot \underline{r}$ στην (3-27) ισούται με z και θα συμβολίσουμε τα ολοκληρώματα για τα V_{12} και V_{21} με z_{12} , z_{21} . Τα z_{12} και z_{21} είναι εν γένει μιγαδικά μήκη και είναι κάτι ανάλογο του κλασσικού μήκους του δίπολου που επάγεται από την εφαρμογή ηλεκτρικού πεδίου σε άτομο λόγω της μετατόπισης του κέντρου του ηλεκτρονικού φορτίου έναντι του πυρήνα. Στην κλασική περίπτωση είδαμε την δημιουργία δίπολου και την ανάπτυξη διπολικής ροπής. Στην περίπτωση μας το αντίστοιχο είναι οι διπολικές ροπές $|e|z_{12}$ και $|e|z_{21}$. Στα παρακάτω θα θεωρήσουμε την περίπτωση όπου το z_{12} είναι πραγματικό και η διπολική ροπή θα είναι

$$p = |e|z_{12} \quad (3.28)$$

Θυμίζουμε ότι η κλασική έκφραση για την ενέργεια δίπολου υπό σταθερό ηλεκτρικό πεδίο είναι: $-\underline{p} \cdot \underline{E}$.

Γράφοντας τώρα την διαφορά $\omega_2 - \omega_1$ ως Ω (σταθμική διαφορά $E_2 - E_1 = \hbar\Omega$) και περιοριζόμενοι σε δύο στάθμες 1 και 2 στην (3-19) έχουμε

$$\begin{aligned} \dot{C}_1 &= i \frac{p \mathcal{E}_0}{2\hbar} \left[e^{-i(\Omega-\omega)t} + e^{-i(\Omega+\omega)t} \right] C_2 \\ \dot{C}_2 &= i \frac{p \mathcal{E}_0}{2\hbar} \left[e^{i(\Omega-\omega)t} + e^{i(\Omega+\omega)t} \right] C_1 \end{aligned} \quad (3.29)$$

Για την λήψη των (3-29) είχαμε εκφράσει το $\cos\omega t$ ως $\frac{1}{2}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$. Οι (3-29) είναι οι εξισώσεις στις οποίες κατάληξε ο Rabi την δεκαετία του 30

μελετώντας την απορρόφηση και εκπομπή μικροκυμάτων από σπιν (πραγματικά δισταθμικά “άτομα”) με την διαφορά ότι εκεί την θέση των p και \mathcal{E}_o παίρνουν αντίστοιχα η μαγνητική ροπή και πλάτος μαγνητικού πεδίου.

Στα παρακάτω θα πάρουμε για μικρούς χρόνους λύσεις των εξισώσεων κίνησης (3-29) για τα πλάτη C_1 και C_2 κάνοντας χρήση της προσέγγισης Rabi. Στη συνέχεια ξεκινώντας με συνθήκες απορρόφησης φωτονίου θα υπολογίσουμε τον συντελεστή B του Einstein.

3.4 Προσέγγιση Rabi

Οι εξισώσεις (3-29) είναι μεν γραμμικές, αλλά η εμφάνιση του χρόνου στους συντελεστές είναι τέτοια που δεν επιτρέπει την εύρεση αναλυτικών λύσεων. Το πρόβλημα μας για την απορρόφηση φωτονίου είναι, δοθέντος ότι

$$C_1(0) = 1, \quad C_2(0) = 0 \quad (3.30)$$

το πως θα εξελιχθούν τα $C_1(t)$ και $C_2(t)$ με βάση την δυναμική των (3-29);

Ακολουθούμε την επαναληπτική μέθοδο του Νεύτωνα, παίρνοντας ως μηδενικής τάξεως προσέγγιση των εξής: $C_1^{(0)}(t) = 1$, $C_2^{(0)}(t) = 0$. Αυτό γίνεται με την σκέψη ότι για μικρούς χρόνους η λύση μας για μεν το C_1 δεν θα απέχει πολύ του 1 και για το C_2 θα είναι κοντά στο 0. Από την δεύτερη των (3-29) έχουμε

$$\dot{C}_2^{(1)} = i \frac{p\mathcal{E}_o}{2\hbar} \left[e^{i(\Omega-\omega)t} + e^{i(\Omega+\omega)t} \right] = f(t) \quad (3.31)$$

Διατηρώντας την αρχική συνθήκη $C_2^{(0)} = 0$ η (3-31) δίνει:

$C_2^{(1)}(t) = \int_0^t f(\tau) d\tau$ και παίρνουμε

$$C_2^{(1)}(t) = \frac{p\mathcal{E}_0}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\Omega-\omega)t} - 1}{\Omega - \omega} + \frac{e^{i(\Omega+\omega)t} - 1}{\Omega + \omega} \right] \quad (3.32)$$

Η (3-32) είναι η λύση για τη C_2 αλλά για μικρά t .

Προκειμένου να προχωρήσουμε θα εφαρμόσουμε την επαναληπτική διαδικασία. Για δισταθμικά άτομα και μονοχρωματικά πεδία η λύση με την επαναληπτική διαδικασία επαρκεί σε πρώτη τάξη. Αν όμως υπάρχουν πολλές συχνότητες τότε η προσέγγιση αυτή δεν δίνει ακριβή λύση. Η ακριβέστερη λύση βρίσκεται όταν θεωρήσουμε το πεδίο στη κβαντισμένη του μορφή όπως στο επόμενο κεφάλαιο. Πλην, όμως, ας εξετάσουμε στενότερα την (3-32). Για οπτικές συχνότητες το Ω και ω είναι της τάξεως του 10^{14} Hz ως 10^{15} Hz . Δεδομένου ότι $\Omega - \omega \approx 0$ το δεύτερο κλάσμα στις τετραγωνικές παρενθέσεις είναι μηδαμινό έναντι του πρώτου που περιέχει το $\Omega + \omega$. Αν κατ' αυτό τον τρόπο πάμε σε ανώτερες τάξεις προσεγγίσεις θα γεννηθούν όροι ανωτέρας τάξεως με το $\Omega + \omega$ στον παρανομαστή και ο λόγος της παράλειψής τους γίνεται έτσι ευκολότερος. Παραλείπουμε λοιπόν από τις αρχικές εξισώσεις (3-29) τους όρους που διαλαμβάνουν το $\Omega + \omega$ και λαμβάνουμε τις προσεγγιστικές εξισώσεις Rabi.

$$\begin{aligned} i\dot{C}_1 &= \frac{p\mathcal{E}_0}{2\hbar} e^{-i(\Omega-\omega)t} C_2 \\ i\dot{C}_2 &= \frac{p\mathcal{E}_0}{2\hbar} e^{i(\Omega-\omega)t} C_1 \end{aligned} \quad (3.33)$$

Οι (3-33) συνιστούν τις εξισώσεις Rabi στην προσέγγιση του λεγόμενου στρεφόμενου κύματος. Στη (3-33) έχουμε διατηρήσει τους όρους συστροφής από την (3-29) και αποδιώξαμε τους όρους αντιστροφής. Η ορολογία προέκυψε από την στροφή στο μιγαδικό επίπεδο. Για το άτομο

παίρνουμε $\Psi \sim e^{-i\Omega t}$ ομοίως και για το κύμα $\Psi_{HM} \sim e^{-i\omega t}$. Και οι δύο εκφράσεις δίνουν ομόφορες στροφές στο μιγαδικό επίπεδο. Όμως, ο τρόπος που συμπλέκονται είναι $\Psi^* \Psi_{HM} \sim e^{i(\Omega-\omega)t}$. Η έκφραση $e^{i(\Omega-\omega)t}$ διαλαμβάνει αντίφορο στροφή.

Οι εξισώσεις (3-33) μπορούν να λυθούν επακριβώς, πλην όμως στο παρόν στάδιο θα αρκεστούμε στο να τις μετασχηματίσουμε σε βολικότερη μορφή μέσω της αλλαγής των μεταβλητών C_1 και C_2 ως εξής:

$$\begin{aligned} C_1 &= e^{-i(\Omega-\omega)t/2} C'_1 \\ C_2 &= e^{-i(\Omega-\omega)t/2} C'_2 \end{aligned} \quad (3.34)$$

Εισάγοντας τις (3-34) στις (3-33) καταλήγουμε

$$\begin{aligned} i\dot{C}'_1 + \frac{\Omega - \omega}{2} C'_1 &= \frac{p\mathcal{E}_0}{2\hbar} C'_2 \\ i\dot{C}'_2 + \frac{\Omega - \omega}{2} C'_2 &= \frac{p\mathcal{E}_0}{2\hbar} C'_1 \end{aligned} \quad (3.35)$$

Οι (3-35) λύνονται αναλυτικά, αλλά αυτό θα γίνει αργότερα. Επί του παρόντος θα προχωρήσουμε στον υπολογισμό του συντελεστή B , όπου επαρκεί η προσέγγιση για μικρούς χρόνους.

3.5 Υπολογισμός του συντελεστή B του Einstein

Προκειμένου να υπολογίσουμε την πιθανότητα διέγερσης του ατόμου σε μικρούς χρόνους κάνουμε χρήση της αντίστοιχης λύσεως (3-32) για το πλάτος $C_2^{(1)}(t)$ ευρέσεως του ηλεκτρονίου στη στάθμη 2. Από την (3-32) κρατάμε τον μεγάλο όρο συστροφής και έχουμε ύστερα από τροποποίηση

$$C_2(t) \approx -\frac{p\epsilon_o}{2\hbar} e^{i(\Omega-\omega)t} \frac{e^{i(\Omega-\omega)t/2} - e^{-i(\Omega-\omega)t/2}}{\Omega - \omega} \quad (3.36)$$

Η πιθανότητα διέγερσης του ατόμου γράφεται, από την (3-36), ως

$$|C_2(t)|^2 = \frac{p^2 \epsilon_o^2}{4\hbar^2} \frac{\sin^2\left(\frac{\Omega - \omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\Omega - \omega}{2}\right)^2} \quad (3.37)$$

Στο μέλαν σώμα το E_o^2 στην (3-37) προέρχεται από μία πυκνότητα ακτινοβολίας $\rho(\omega)$ μεταξύ ω και $\omega + d\omega$ και αντικαθιστούμε με

$$\mathcal{E}_o^2 = \int \frac{1}{\epsilon_o} \rho(\omega) d\omega \quad (3.38)$$

όπου ϵ_o η διηλεκτρική σταθερά του κενού.

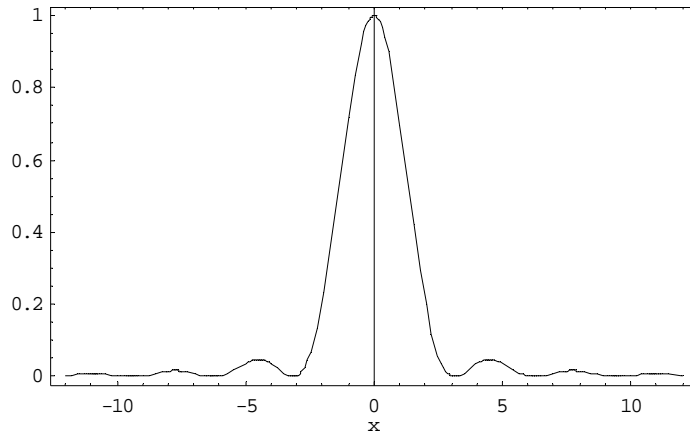
Η πιθανότητα διέγερσης του ατόμου από κύματα (της αυτής πολώσεως) και όλων των συχνοτήτων είναι

$$P_2 = \frac{p^2}{4\epsilon_o \hbar^2} \int d\omega \rho(\omega) \frac{\sin^2\left(\frac{\Omega - \omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\Omega - \omega}{2}\right)^2} \quad (3.39)$$

Στο ολοκλήρωμα της (3-39) η ολοκλήρωση γίνεται εφ' όλων των συχνοτήτων, αλλά σημαντική συμβολή έχουν μόνον συχνότητες παραπλήσιες στην συχνότητα, Ω , του ατόμου. Για τον υπολογισμό του πιο πάνω ολοκληρώματος γράφουμε

$$\frac{\sin^2\left(\frac{\Omega - \omega}{2} t\right)}{\left(\frac{\Omega - \omega}{2}\right)^2} = t^2 \frac{\sin^2 x}{x^2}, \quad \text{όπου} \quad x = \frac{\omega - \Omega}{2} t \quad (3.40)$$

Σχεδιάζουμε τώρα τη συνάρτηση $(\sin^2 x)/x^2$ και έχουμε:



Σχήμα 3-2. Η μεταβολή της συνάρτησης $(\sin^2 x)/x^2$ συναρτήσει της x

Βλέπουμε ότι η συμβολή σε ένα ολοκλήρωμα της $(\sin^2 x)/x^2$ με μία συνάρτηση $F(x)$ προέρχεται από τις τιμές του x γύρω από το $x=0$. Όταν η $F(x)$ περί το $x=0$ μεταβάλλεται αργά έχουμε

$$\int_{-\infty}^{\infty} F(x) \frac{\sin^2 x}{x^2} dx \approx F(0) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi F(0) \quad (3.41)$$

Μπορούμε κατά ένα τρόπο να κάνουμε την αντικατάσταση

$$\frac{\sin^2 x}{x^2} \rightarrow \pi \delta(x) \quad (3.42)$$

Με τη βοήθεια των (3-40) και (3-42) η (3-39) γράφεται

$$P_2 = \frac{P^2}{2\varepsilon_0 \hbar^2} \pi t \rho(\Omega) \quad (3.43)$$

όπου για την (3-43) λάβαμε υπόψη ότι $d\omega = (2/t)dx$.

Έχουμε λοιπόν

$$\frac{dP_2}{dt} = \frac{\pi P^2}{2\varepsilon_0 \hbar^2} \rho(\Omega) \quad (3.44)$$

Η (3-44) παρέχει τον ρυθμό της πιθανότητας απορρόφησης ενός φωτονίου από άτομο αρχικά στην στάθμη E_1 που διαθέτει στάθμη $E_2 = E_1 + \hbar\Omega$. Ο εν λόγω ρυθμός έχει υπολογιστεί με βάση κύματα πολωμένα σε δεδομένη κατεύθυνση. Στην περίπτωση μέλανος σώματος η ακτινοβολία δεν είναι πολωμένη και κατά ένα τρόπο το $\rho(\Omega)$ μίας πόλωσης στην (3-44) θα πρέπει να αντικατασταθεί με το $\rho(\Omega)/3$, σύμφωνα με τις σχέσεις πλατών έντασης πεδίου

$$\langle \varepsilon_o^2 \rangle = \langle \varepsilon_{ox}^2 + \varepsilon_{oy}^2 + \varepsilon_{oz}^2 \rangle = 3 \langle \varepsilon_{oz}^2 \rangle, \quad \langle \varepsilon_{oz}^2 \rangle = \frac{1}{3} \langle \varepsilon_o^2 \rangle \quad (3.45)$$

Για μέλαν σώμα η (3-44) τροποποιείται στην

$$dP_2 = \frac{\pi p^2}{6\varepsilon_o \hbar^2} \rho(\Omega) dt \quad (3.46)$$

Συγκρίνοντας την (3-46) με την σχέση του Einstein για διεγερμένη απορρόφηση

$$dW_{\delta,\alpha} = B\rho(\Omega) dt \quad (3.47)$$

παίρνουμε για την συντελεστή B την έκφραση

$$B = \frac{\pi p^2}{6\varepsilon_o \hbar^2} \quad (3.48)$$

Όπως είδαμε και προηγούμενα ο συντελεστής A εξαρτάται από τους διαύλους που έχει διαθέσιμους σε μία κοιλότητα να εκπέμψει ένα διεγερμένο άτομο. Έχοντας υπόψη ότι για το μέλαν σώμα ο λόγος A/B είναι

$$\frac{A}{B} = \frac{\hbar\Omega^3}{\pi^2 c^3} \quad (3.49)$$

βρίσκουμε για τον συντελεστή A την έκφραση

$$A = \frac{p^2 \Omega^3}{6\pi \hbar \varepsilon_o c^3} \quad (3.50)$$

Στους λογαριασμούς μας, όπως θα προσέξατε, ξεχάσαμε την συνθήκη διατήρησης της ορμής.

3.6 Ασκήσεις

Άσκηση 3-1.

Θεωρήστε άτομο με ένα οπτικά ενεργό ηλεκτρόνιο το οποίο υπό την επίδραση του ηλεκτρικού πεδίου

$$\underline{E} = \hat{i}E_x(z,t) = \hat{i}E_0(z)\cos(\omega t)$$

περιορίζεται να κινείται μεταξύ των ιδιοκαταστάσεων $u_1(\underline{r})$, $u_2(\underline{r})$ της αδιατάρακτης Χαμιλτονιανής του ατόμου με αντίστοιχες ενέργειες E_1 , E_2 .

Αν η κυματοσυνάρτηση του ηλεκτρονίου υπό την επίδραση της Η/Μ ακτινοβολίας είναι

$$\Psi(\underline{r},t) = C_1(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_1t\right)u_1(\underline{r}) + C_2(t)\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_2t\right)u_2(\underline{r})$$

βρείτε τις εξισώσεις κίνησης των (μιγαδικών) πλατών $C_1(t)$, $C_2(t)$ όταν το $E(z)$ μεταβάλλεται ελάχιστα σε αποστάσεις της τάξης των ατομικών διαστάσεων. Αν $E_1 < E_2$, δώστε τις αρχικές συνθήκες στις οποίες θα υποβάλετε τα πλάτη C_1 , C_2 προκειμένου να βρείτε τη πιθανότητα ώστε το άτομο να απορροφήσει ενέργεια $E_2 - E_1 = \hbar\omega$. Εκφράστε τη πιθανότητα αυτή συναρτήσει των πλατών. Δώστε την αντίστοιχη απάντηση όταν το άτομο θα εκπέμψει ενέργεια $E_2 - E_1 = \hbar\omega$.

Άσκηση 3-2.

Υπολογίστε το ολοκλήρωμα

$$r_{1j} = \int u_1^*(\underline{r}) r u_j(\underline{r}) d^3r$$

όταν η $u_1(\underline{r})$ είναι η θεμελιώδης κατάσταση του Υδρογόνου $\Phi_{100}(r,\theta,\phi)$, και η $u_j(\underline{r})$ είναι μία από τις διεγερμένες καταστάσεις Φ_{200} , Φ_{210} , $\Phi_{21\pm 1}$

$$\begin{aligned}\Phi_{100}(r, \theta, \phi) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp\left(-r/a_0\right) \\ \Phi_{200}(r, \theta, \phi) &= (32\pi a_0^3)^{-1/2} \left(2 - r/a_0\right) \exp\left(-r/2a_0\right) \\ \Phi_{210}(r, \theta, \phi) &= (32\pi a_0^3)^{-1/2} \left(r/a_0\right) \cos \theta \exp\left(-r/2a_0\right) \\ \Phi_{21,\pm 1}(r, \theta, \phi) &= (64\pi a_0^3)^{-1/2} \left(r/a_0\right) \sin \theta \exp(\pm i\phi) \exp\left(-r/2a_0\right)\end{aligned}$$

με αντίστοιχες ενέργειες

$$\hbar\Omega_n = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\alpha_0 n^2}$$

όπου ϵ_0 είναι η διηλεκτρική σταθερά του κενού και $\alpha_0 = 0.53 \text{ \AA}$ η ακτίνα του Bohr.

(α) Δείξτε ότι $r_{11} = r_{22} = 0$.

(β) Βρείτε μεταξύ ποίων καταστάσεων u_{ij} μπορεί να αναπτυχθεί διπολική ροπή $p \neq 0$. Διατυπώστε συμπεράσματα σε ότι αφορά τη δυνατότητα διέγερσης του ατόμου από τη στάθμη E_1 στη E_2 μέσω ηλεκτρικού πεδίου για τις διάφορες καταστάσεις u_j .

(γ) Βάσει των σχέσεων (3-48) & (3-50) για το ρυθμό πιθανότητας διεγερμένης εκπομπής από την ακτινοβολία μέλανος σώματος, υπολογίστε τους συντελεστές B και A για τις συγκεκριμένες ατομικές μεταβάσεις στο άτομο Υδρογόνου.

Οι υπολογισμοί διευκολύνονται αν χρησιμοποιήσετε την πιο κάτω έκφραση για το διάνυσμα της θέσης

$$\underline{r} = \frac{1}{2} r \sin \theta \left[(\hat{i} - i \hat{j}) e^{i\phi} + (\hat{i} + i \hat{j}) e^{-i\phi} \right] + \hat{k} r \cos \theta$$

και το ολοκλήρωμα

$$\int_0^{\infty} e^{-\gamma r} r^n dr = \gamma^{-(n+1)} n!$$