

6. Ο πίνακας πυκνότητας



τα προηγούμενα κεφάλαια η πιθανότητα να βρεθεί δισταθμικό άτομο με χαρακτηριστική κυματοσυνάρτηση

$$\Psi(r, t) = c_1(t)u_1(\underline{r}) + c_2(t)u_2(\underline{r}) \quad (6.1)$$

στη θεμελιώδη ή διεγερμένη κατάσταση εκφράσθηκε μέσα από τα πλάτη $|c_1|^2 = c_1 c_1^*$ & $|c_2|^2 = c_2 c_2^*$, αντίστοιχα. Στους υπολογισμούς όμως της διπολικής ροπής $\langle e \underline{r} \rangle$ έκαναν την εμφάνισή τους και συνδυασμένες εκφράσεις πιθανότητας: $c_1 c_2^*$ & $c_2 c_1^*$

$$\begin{aligned} \langle e \underline{r} \rangle &= \int \Psi^*(\underline{r}, t) e \underline{r} \Psi(\underline{r}, t) d^3 r = \\ &= c_1 c_2^* \int u_1^* e \underline{r} u_2 d^3 r + c_2 c_1^* \int u_2^* e \underline{r} u_1 d^3 r \end{aligned} \quad (6.2)$$

ή

$$\langle e \underline{r} \rangle = e [c_1 c_2^* \underline{r}_{21} + c_2 c_1^* \underline{r}_{12}] \quad (6.3)$$

Εάν οι u_1 και u_2 είναι πραγματικές συναρτήσεις τότε $e \underline{r}_{12} = e \underline{r}_{21} = e \underline{r}_{12}^* = P$. Η μέση τιμή της διπολικής ροπής είναι πραγματικός αριθμός γιατί υπολογίζεται από το άθροισμα δύο συζυγών, των γινομένων των πλατών πιθανότητας. Γινόμενα όπως τα

$$c_1 c_1^* \quad c_1 c_2^* \quad c_2 c_1^* \quad c_2 c_2^* \quad (6.4)$$

χρησιμοποιούνται συχνά και προκειμένου να διευκολυνθούν οι υπολογισμοί ταυτίζονται με τα στοιχεία ενός πίνακα, του πίνακα πυκνότητας. Ορίζεται έτσι ο πίνακας πυκνότητας ρ (η έννοια έχει εισαχθεί από τον von Neumann)

$$\rho = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

Το στοιχείο του πίνακα πυκνότητας είναι το

$$\rho_{nm} = c_n c_m^* \quad (6.6)$$

με διαγώνια στοιχεία τις γνωστές πιθανότητες εύρεσης ενός δισταθμικού ατόμου στη θεμελιώδη και διεγερμένη κατάσταση

$$\rho_{11} = |c_1|^2 \quad \& \quad \rho_{22} = |c_2|^2 \quad (6.7)$$

Ο πίνακας γράφεται επίσης σαν το γινόμενο

$$\rho = \Psi \Psi^* = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{pmatrix} \quad (6.8)$$

και είναι μία αναπαράσταση του τελεστή της πυκνότητας πιθανότητας¹⁴ ρ ,

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (6.9)$$

ώστε το στοιχείο πίνακα ρ_{12} να είναι

$$\rho_{12} = \langle u_1 | \rho | u_2 \rangle = \langle u_1 | \Psi \rangle \langle \Psi | u_2 \rangle = c_1 c_2^* \quad (6.10)$$

όταν η κυματοσυνάρτηση είναι η 6-1. Η (6-9) αποτελεί και το γενικό ορισμό του τελεστή του πίνακα πυκνότητας όταν η κυματοσυνάρτηση $|\Psi\rangle$ είναι γνωστή.

Οι διαστάσεις του πίνακα πυκνότητας για το δισταθμικό άτομο είναι 2x2, εάν κανείς όμως μελετά προβλήματα με περισσότερες από δύο

¹⁴ όταν πρόκειται για ένα σύστημα σε συγκεκριμένη γνωστή κατάσταση $|\Psi\rangle$, κοίτα επίσης και την σχέση 6-28.

ιδιοκαταστάσεις οι διαστάσεις αυξάνονται ανάλογα. Ο πίνακας πυκνότητας έχει την ιδιότητα το άθροισμα των διαγώνιων στοιχείων του να ισούται με τη μονάδα, ανεξάρτητα από τη βάση ως προς την οποία αναπτύσσεται, δεδομένου ότι αντιπροσωπεύει το άθροισμα όλων των πιθανοτήτων. Το άθροισμα των διαγώνιων στοιχείων ενός πίνακα, που είναι και το άθροισμα των ιδιοκαταστάσεων του, ονομάζεται ίχνος του πίνακα (trace) και συμβολίζεται με το Tr, επομένως:

$$\text{Tr}\rho = \sum_m \rho_{mm} = \sum_m |c_m|^2 = 1 \quad (6.11)$$

6.1 Η αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή A με τη βοήθεια του πίνακα πυκνότητας

Η αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή A ορίζεται ως

$$\langle A \rangle = \int \Psi^*(\underline{r}, t) A \Psi(\underline{r}, t) d^3 \underline{r} \quad (6.12)$$

εάν η κυματοσυνάρτηση $\Psi(\underline{r}, t)$ ως προς κάποια βάση u_n στην εικόνα αλληλεπίδρασης είναι

$$\Psi(\underline{r}, t) = \sum_n c_n(t) u_n(\underline{r}) \quad (6.13)$$

η $\langle A \rangle$ μπορεί να υπολογισθεί με τη βοήθεια του πίνακα πυκνότητας. Αποδεικνύεται (άσκηση 6-1) ότι η αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή A που γράφεται υπό μορφή πίνακα με στοιχεία A_{nm} , είναι το άθροισμα των διαγώνιων στοιχείων του τελεστή που προκύπτει αν πολλαπλασιασθεί ο πίνακας πυκνότητας ρ με τον A,

$$\langle A \rangle = \sum_m (\rho A)_{mm} \quad (6.14)$$

Εάν χρειάζεται να υπολογισθεί η μέση τιμή της $\langle A \rangle$ ως προς κάποια παράμετρο ξ του τελεστή A (π.χ. το A είναι ο τελεστής της κινητικής ενέργειας που εξαρτάται από τις διάφορες δυνάμεις ξ ενός συστήματος μορίων αερίου) τότε η μέση τιμή της $\langle A \rangle$ ως προς ξ θα υπολογίζεται όπως και στην (6-14) αλλά χρησιμοποιώντας τώρα τη μέση τιμή του πίνακα πυκνότητας (άσκηση 6-1)

$$\langle \bar{A} \rangle = \sum_m (\bar{\rho} A)_{mm} \quad \& \quad \frac{d}{dt} \langle A(t) \rangle = \sum_m (\dot{\rho} A)_{mm} \quad (6.15)$$

6.2 Εξίσωση του πίνακα πυκνότητας

6.2.1 Χωρίς μηχανισμούς αποδιέγερσης

Ο ρυθμός μεταβολής ενός στοιχείου του πίνακα θα είναι

$$i\hbar \dot{\rho}_{nm} = i\hbar c_n \dot{c}_m^* + i\hbar \dot{c}_n c_m^* \quad (6.16)$$

Ισχύει όμως για την εξίσωση του Schrödinger

$$i\hbar \dot{c}_n = \sum_k H_{nk} c_k \quad \text{και} \quad -i\hbar \dot{c}_m^* = \sum_k H_{mk}^* c_k^* \quad (6.17)$$

όπου¹⁵

$$H_{nk} = \int u_n^* H u_k d^3 r \quad (6.18)$$

¹⁵ με $H = H_0 + V$

τότε η εξίσωση του στοιχείου ρ_{nm} του πίνακα θα είναι

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\rho}_{nm} &= \sum_k \left(H_{nk} c_k c_m^* - c_n c_k^* H_{mk} \right) = \\ &= \sum_k \left(H_{nk} \rho_{km} - \rho_{nk} H_{km} \right) \end{aligned} \quad (6.19)$$

Η γενική εξίσωση του πίνακα πυκνότητας υπολογίζεται από την (6-9)¹⁶

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= \frac{\partial}{\partial t} (|\Psi\rangle\langle\Psi|) = \\ &= |\dot{\Psi}\rangle\langle\Psi| + |\Psi\rangle\langle\dot{\Psi}| = -\frac{i}{\hbar} H |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{i}{\hbar} |\Psi\rangle\langle\Psi| H^* = \\ &= -\frac{i}{\hbar} (H\rho - \rho H^*) = -\frac{i}{\hbar} (H\rho - \rho H) = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$\boxed{\dot{\rho} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho]} \quad (6.21)$$

Η εξίσωση αυτή αποτελεί την εξίσωση κίνησης του πίνακα πυκνότητας

Το στοιχείο πίνακα της εξίσωσης κίνησης (6-19) προκύπτει εξ' άλλου και από την (6-21) ως εξής

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\rho}_{nm} &= \langle n | (H\rho - \rho H) | m \rangle = \\ &= \sum_k \left\{ \langle n | H | k \rangle \langle k | \rho | m \rangle - \langle n | \rho | k \rangle \langle k | H | m \rangle \right\} = \sum_k (H_{nk} \rho_{km} - \rho_{nk} H_{km}) \end{aligned} \quad (6.22)$$

6.2.2 Με μηχανισμούς αποδιέγερσης

Η εξίσωση της κίνησης 6-21 υπολογίστηκε χωρίς να ληφθούν υπόψη μηχανισμοί αποδιέγερσης των δύο σταθμών. Οι μηχανισμοί αποδιέγερσης

¹⁶ Οι τετραγωνικές αγκύλες συμβολίζουν το μεταθέτη $[A, B] = AB - BA$

που συμβαίνουν όχι μόνο από αυθόρμητη μετάπτωση αλλά και από άλλους μηχανισμούς όπως συγκρούσεις στα αέρια, είναι απαραίτητοι για τη λειτουργία του laser. Η ταχεία αποδιέγερση της κατώτερης στάθμης E_1 συμβάλλει στην επίτευξη της συνθήκης αναστροφής πληθυσμού όπως συζητήθηκε στο κεφάλαιο 5. Ο χρόνος ζωής της στάθμης αυτής πρέπει να είναι μικρός, μικρότερος από αυτόν της διεγερμένης στάθμης E_2 . Στο εδάφιο αυτό θα υπολογισθεί η εξίσωση κίνησης (6-21) αυτή τη φορά λαμβάνοντας υπόψη τους μηχανισμούς αποδιέγερσης των δύο σταθμών.

Ο νέος αυτός περιορισμός περιγράφεται αρκετά καλά με προσθήκη δύο προσθετών στις εξισώσεις των συντελεστών c_1 & c_2 (6-17)

$$\begin{aligned}\dot{c}_1 &= -\frac{i}{\hbar} E_1 c_1 - \frac{i}{\hbar} V_{12} c_2 - \frac{1}{2} \gamma_1 c_1 \\ \dot{c}_2 &= -\frac{i}{\hbar} E_2 c_2 - \frac{i}{\hbar} V_{12} c_1 - \frac{1}{2} \gamma_2 c_2\end{aligned}\quad (6.23)$$

Τα γ_1, γ_2 είναι οι σταθερές απόσβεσης των πιθανοτήτων $|c_1|^2$ & $|c_2|^2$. Από την (6-8)

$$i\hbar\dot{\rho} = i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* \end{pmatrix} + i\hbar \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{c}_1^* & \dot{c}_2^* \end{pmatrix} \quad (6.24)$$

Οι παράγωγοι των c_1 & c_2 είναι γνωστοί από τις 6-23 και αντικαθιστώντας στην 6-24 προκύπτει

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] - \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{pmatrix} - \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_2 \end{pmatrix} \quad (6.25)$$

Θέτοντας

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \gamma_1 & 0 \\ 0 & \gamma_2 \end{pmatrix} \quad (6.26)$$

προκύπτει η νέα εξίσωση κίνησης του πίνακα πυκνότητας¹⁷ με μηχανισμούς αποδιέγερσης των δύο σταθμών

$$i\hbar\dot{\rho} = [H, \rho] - \frac{i\hbar}{2} \{\Gamma, \rho\} \quad (6.27)$$

6.3 Μέθοδος αποθήκης. Εξίσωση πίνακα πυκνότητας

Έως τώρα ασχοληθήκαμε με συστήματα που αποτελούνται από το άτομο συν το πεδίο για τη μελέτη ανταλλαγής φωτονίων. Πολλές φορές όμως μας ενδιαφέρει μόνο η εξέλιξη του H/M πεδίου στο laser ανεξάρτητα από το τι κάνουν τα άτομα στο υλικό laser μέσα στο συντονιστή. Στη περίπτωση αυτή εφαρμόζουμε τον ανηγμένο πίνακα πυκνότητας του H/M πεδίου (που παίζει το ρόλο ενός αρμονικού ταλαντωτή), θεωρώντας το υλικό laser σαν μία αποθήκη δισταθμικών ατόμων. Θεωρούμε επίσης ότι το πεδίο μεταβάλλεται ελάχιστα κατά την διεργασία ανταλλαγής φωτονίου ώστε να είναι δυνατός ο υπολογισμός μίας αδρομερούς εξίσωσης του πίνακα πυκνότητας ως προς το πεδίο μονάχα. Για τον υπολογισμό της εξίσωσης του πίνακα πυκνότητας, θεωρείται αρχικά ότι το πεδίο αλληλεπιδρά με τα δισταθμικά άτομα, υπολογίζεται στη συνέχεια ο συνδυασμένος πίνακας πυκνότητας πεδίου-ατόμου και τελικά λαμβάνεται από αυτόν ο ανηγμένος πίνακας πυκνότητας βρίσκοντας το ίχνος του ως προς τις ατομικές συντεταγμένες.

Συνήθως σε ένα σύστημα που αποτελείται από πολλά σώματα δεν γνωρίζουμε ακριβώς το συγκεκριμένη τους κατάσταση $|\Psi\rangle$ αλλά το κλάσμα τους¹⁸ P_Ψ που έχει κυματόνισμα $|\Psi\rangle$. Ο πίνακας πυκνότητας του πεδίου την χρονική στιγμή t θα γράφεται

¹⁷ Η αγκύλη Poisson ορίζεται ως $\{A, B\} = AB - BA$

¹⁸ Στην (6-9) το σύστημα βρίσκεται σε μία μόνο συγκεκριμένη κατάσταση $|\Psi\rangle$

$$\rho(t) = \sum P_{\Psi} |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (6.28)$$

Έστω ότι μέσα στο συντονιστή εισέρχονται άτομα στη κάτω στάθμη με ρυθμό r_1 και στη πάνω στάθμη με ρυθμό r_2 , όπως ακριβώς στη περίπτωση του maser (εδάφιο 5-3), βλέπε σχήμα 6.1. Τα άτομα αυτά, που βρίσκονται στη θερμοκρασία T , θα έχουν κατανομή Boltzmann στις ενέργειες τους

$$\frac{r_2}{r_1} = \exp[-(E_2 - E_1)/kT] = \exp(-\hbar\omega/kT) \quad (6.29)$$

Αν εμφανισθεί αδιέγερτο άτομο η πυκνότητα $\rho(t)$ θα μεταβληθεί μέσα σε μικρό χρονικό διάστημα τ κατά $\delta\rho(t)$

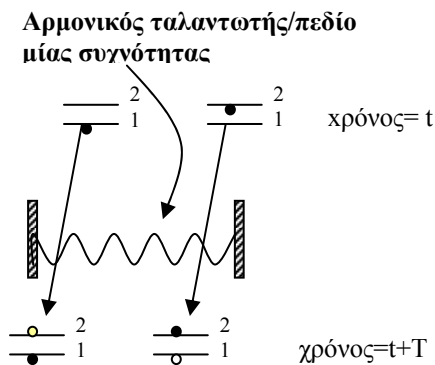
$$\delta\rho(t) = \rho(t + \tau) - \rho(t) \quad (6.30)$$

Μας ενδιαφέρει να υπολογίσουμε τη μεταβολή του πίνακα πυκνότητας. Αν μέσα σε χρόνο τ εισάγονται αδιέγερτα άτομα στη στάθμη $|\downarrow\rangle$ με ρυθμό r_1 και διεγερμένα άτομα στη στάθμη $|\uparrow\rangle$ με ρυθμό r_2 η μεταβολή του $\rho(t)$ θα είναι, επειδή για μικρούς χρόνους τ στην πράξη είναι

$$\tau \equiv dt, \quad \delta\rho(t) \equiv d\rho(t) \quad (6.31)$$

$$\frac{d\rho(t)}{dt} \approx \frac{\delta\rho(t)}{t + \tau - t} = r_1 (\delta\rho(t))_1 + r_2 (\delta\rho(t))_2 \quad (6.32)$$

Συνολικά επομένως εισάγονται στο μικρό χρόνο τ , $r_2\tau$ διεγερμένα και $r_1\tau$ αδιέγερτα άτομα ενώ η μεταβολή του πίνακα πυκνότητας είναι $(\delta\rho_2)$ και $(\delta\rho_1)$, αντίστοιχα. Αρχικά θα υπολογισθεί η μεταβολή του πίνακα πυκνότητας του συστήματος άτομο-πεδίο για ένα μόνο (διεγερμένο ή αδιέγερτο) άτομο υπολογίζοντας πρώτα το $\rho(t+\tau)$ και αφαιρώντας του το $\rho(t)$, σχέση 6-30.



Σχήμα 6-1. Η διαδρομή δισταθμικών ατόμων μέσα στο συντονιστή. Αρχικά στη στάθμη 1 ή 2 μετά από χρόνο τ μεταβαίνουν στη άλλη στάθμη προς τα πάνω ή κάτω αλληλεπιδρώντας με ηλεκτρικό πεδίο μίας συχνότητας.

Μετά είναι εύκολο να θεωρηθεί η μεταβολή του ρ για όλα τα εισαγόμενα άτομα ανάγοντας τον μόνο ως προς τις συντεταγμένες του πεδίου.

Σύμφωνα με τη (6-28) και επειδή το κυματόνισμα $|\Psi\rangle$ είναι η υπέρθεση ιδιοκαταστάσεων $|n\rangle$ με πλάτος πιθανότητας c_n ,

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n(t) |n\rangle, \langle\Psi| = \sum_m c_m^*(t) \langle m| \quad (6.33)$$

ο πίνακας πυκνότητας παίρνει τη μορφή

$$\rho(t) = \sum_{\Psi} P_{\Psi} \sum_{n,m} c_n^{\Psi}(t) c_m^{*\Psi}(t) |n\rangle \langle m| = \sum_{n,m} \rho_{n,m} |n\rangle \langle m| \quad (6.34)$$

όπου

$$\rho_{nm} = \sum_{\Psi} P_{\Psi} c_n^{\Psi}(t) c_m^{*\Psi}(t) \quad (6.35)$$

Έστω ότι τη χρονική στιγμή t ένα αδιέγερτο άτομο $|\downarrow\rangle$ διέρχεται μέσα στο συντονιστή και η διαδρομή του διαρκεί χρόνο τ. Στο χρόνο αυτό η

πυκνότητα θα γίνει $\rho(t+\tau)$. Η εξέλιξη της $\rho(t)$ σε $\rho(t+\tau)$ υπολογίζεται από την αρχική της τιμή με την επίδραση του εξελικτικού τελεστή

$$\rho_{\text{άτομο-πεδίο}}(t+\tau) = e^{-i/\hbar H(t+\tau-t)} \rho_{\alpha-\pi}(t) e^{i/\hbar H(t+\tau-t)} \quad (6.36\alpha)$$

που στην εικόνα της αλληλεπίδρασης γίνεται

$$\rho_{\text{άτομο-πεδίο}}(t+\tau) = e^{-i/\hbar H_1\tau} \rho_{\alpha-\pi}(t) e^{i/\hbar H_1\tau} \quad (6.36\beta)$$

όπου

$$\rho_{\alpha-\pi}(t) = \sum_{n,m} \rho_{nm}(t) |\downarrow n\rangle \langle m \downarrow| \quad (6.37)$$

Η Χαμιλτονιανή, H , γράφεται στη προσέγγιση Rabi όπως στην (4-70). Όπως συζητήθηκε όμως στο εδάφιο 4-7 η επίδραση του εξελικτικού τελεστή στην αρχική κατάσταση σύμφωνα με τη (4-85) στη προκειμένη περίπτωση, ($\Omega=\omega$) είναι

$$e^{-i/\hbar H_1\tau} |\downarrow n\rangle = \cos(g\sqrt{n}\tau) |\downarrow n\rangle - i \sin(g\sqrt{n}\tau) |\uparrow n-1\rangle \quad (6.38)$$

επειδή

$$\begin{aligned} e^{-i/\hbar H_1\tau} |\downarrow n\rangle &= \\ &= \cos\left[g\tau\sqrt{S^+S+a^+a}\right] |\downarrow, n\rangle - i\hbar g(S^+a + Sa^+) \frac{\sin\left[g\tau\sqrt{S^+S+a^+a}\right]}{\hbar g\sqrt{S^+S+a^+a}} |\downarrow, n\rangle \end{aligned} \quad (6.39)$$

Ομοίως

$$\langle m, \downarrow | e^{i/\hbar H_1\tau} = \cos(g\tau\sqrt{m}) \langle m \downarrow | + i \sin(g\tau\sqrt{m}) \langle m-1, \uparrow | \quad (6.40)$$

και από την (6-36) προκύπτει

$$\rho_{a-\pi}(t+\tau) = \sum_{n,m} \rho_{nm}(t) \left\{ \begin{array}{l} \cos(g\tau\sqrt{n})\cos(g\tau\sqrt{m})|\downarrow, n\rangle\langle m, \downarrow| + \\ i\cos(g\tau\sqrt{n})\sin(g\tau\sqrt{m})|\downarrow, n\rangle\langle m-1, \uparrow| \\ -i\sin(g\tau\sqrt{n})\cos(g\tau\sqrt{m})|\uparrow, n-1\rangle\langle m, \downarrow| + \\ \sin(g\tau\sqrt{n})\sin(g\tau\sqrt{m})|\uparrow, n-1\rangle\langle m-1, \uparrow| \end{array} \right\}$$

(6.41)

Το ίχνος της (6-41) ως προς τις ατομικές μεταβλητές $|\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$ δίνει τον ανηγμένο πίνακα πυκνότητας του πεδίου τη χρονική στιγμή $t+\tau$, δηλαδή

$$\rho(t+\tau) = \sum_{n,m} \rho_{nm}(t) \left\{ \begin{array}{l} \cos(g\tau\sqrt{n})\cos(g\tau\sqrt{m})|n\rangle\langle m| + \\ \sin(g\tau\sqrt{n})\sin(g\tau\sqrt{m})|n-1\rangle\langle m-1| \end{array} \right\} \quad (6.42)$$

Οι τριγωνομετρικές εκφράσεις μπορούν να απλοποιηθούν μέσα από τις σχέσεις

$$\begin{aligned} \cos(g\tau\sqrt{n})\cos(g\tau\sqrt{m}) &\approx 1 - \frac{1}{2}g^2\tau^2(n+m) \\ \sin(g\tau\sqrt{n})\sin(g\tau\sqrt{m}) &\approx g^2\tau^2\sqrt{nm} \end{aligned} \quad (6.43)$$

Από την (6-32) τότε υπολογίζεται η μεταβολή στον πίνακα πυκνότητας του πεδίου μέσα σε χρόνο τ από την είσοδο αδιέγερτων ατόμων

$$\delta\rho_1(t) = \sum_{nm} \rho_{nm}(t)(g\tau)^2 \left[-\frac{1}{2}(n+m)|n\rangle\langle m| + \sqrt{nm}|n-1\rangle\langle m-1| \right] \quad (6.44)$$

του οποίου το kl στοιχείο πίνακα είναι¹⁹

$$\delta\rho^{(1)}_{kl}(t) = \langle k|\delta\rho^{(1)}(t)|l\rangle = (g\tau)^2 \left[-\frac{1}{2}\rho_{kl}(t)(k+l) + \rho_{k+1,l+1}(t)\sqrt{(k+1)(l+1)} \right] \quad (6.45)$$

εφόσον μόνο για $k=n$, $l=m$ στον πρώτο προσθεταίο και $k=n-1$, $l=m-1$ στο δεύτερο προσθεταίο της (6.44) τα γινόμενα ανυσμάτων κατάστασης δεν

¹⁹ Δεδομένου ότι η βάση $|n\rangle, |m\rangle$ είναι ορθοκανονική

είναι μηδέν. Από αυτήν υπολογίζεται η μεταβολή του πίνακα πυκνότητας για συγκεκριμένο αριθμό k φωτονίων μέσα στο συντονιστή, όταν διέρχεται από αυτόν ένα αδιέγερτο άτομο:

$$\langle k | \delta \rho_1(t) | k \rangle = (g\tau)^2 [-k\rho_{kk}(t) + (1+k)\rho_{k+1,k+1}(t)] \quad (6.46)$$

και όταν διέρχονται N αδιέγερτα άτομα

$$N \langle k | \delta \rho_1(t) | k \rangle = N(g\tau)^2 [-k\rho_{kk}(t) + (1+k)\rho_{k+1,k+1}(t)] \quad (6.47)$$

Ανάλογα, υπολογίζεται και η μεταβολή του πίνακα πυκνότητας $\delta\rho_2(t)$ όταν διέρχεται ένα διεγερμένο άτομο στον συντονιστή

$$\delta\rho_2(t) = (g\tau)^2 \sum_{nm} \rho_{nm}(t) \left[-\frac{1}{2}(n+m+2) |n\rangle\langle m| + \sqrt{(n+1)(m+1)} |n+1\rangle\langle m+1| \right] \quad (6.48)$$

Επομένως συνολικά υπολογίζεται από τις (6-30), (6-45), (6-48) η μεταβολή του πίνακα πυκνότητας σε

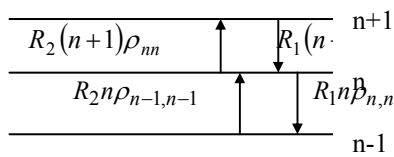
$$\begin{aligned} \langle n | \dot{\rho}(t) | m \rangle = \dot{\rho}_{nm}(t) = & -\frac{1}{2} [R_1(n+m) + R_2(n+m+2)] \rho_{nm}(t) + \\ & + R_1 \sqrt{(n+1)(m+1)} \rho_{n+1,m+1}(t) + R_2 \sqrt{nm} \rho_{n-1,m-1}(t) \end{aligned} \quad (6.49)$$

όπου οι συντελεστές ρυθμού, R_i , είναι

$$R_i = r_i (g\tau)^2 \quad i = 1, 2, \dots \quad (6.50)$$

Μπορεί τώρα να υπολογισθεί από την (6-49) η εξίσωση ρυθμού της πιθανότητας φωτονίων που συμβολίζεται ρ_{nn}

$$\dot{\rho}_{nn} = -[R_1 n + R_2(n+1)] \rho_{nn} + R_1(n+1) \rho_{n+1,n+1} + R_2 n \rho_{n-1,n-1} \quad (6.51)$$



Σχήμα 6-2.
Διάγραμμα ροής
πιθανότητας
φωτονικών
αριθμών.

Το σχήμα (6-2) δείχνει το διάγραμμα καταστάσεων των φωτονικών αριθμών. Οι όροι με το R_2 αντιστοιχούν σε εισαγωγή διεγερμένων ατόμων που προσφέρουν ένα φωτόνιο στο πεδίο, άρα τα αντίστοιχα βέλη κοιτούν προς τα πάνω, ενώ όταν εισέρχεται αδιέγερτο άτομο τα βέλη κοιτούν προς τα κάτω. Έστω ότι το πεδίο έχει n φωτόνια και υφίσταται μόνο μικρές μεταβολές γύρω από κατάσταση n φωτονίων. Ο όρος $R_2(n+1)\rho_{nn} = r_2 \cdot (n+1)(g\tau)^2 \cdot \rho_{nn}$ αναφέρεται (α) στο αριθμό διεγερμένων ατόμων που εισάγονται σε χρόνο τ , r_2 , (β) στην πιθανότητα αλληλεπίδρασης (εξαναγκασμένης εκπομπής) από πεδίο n φωτονίων μέσα στο χρόνο αυτό, $g^2(n+1)\tau^2$ (το αντίστροφο της συχνότητας Rabi), ενώ το πεδίο πηγαίνει από κατάσταση $n \rightarrow n+1$, (γ) και την πιθανότητα το πεδίο να έχει n φωτόνια, ρ_{nn} . Όσον αφορά την εισαγωγή αδιέγερτων ατόμων ο αντίστοιχος όρος στο ρυθμό πίνακα πιθανότητας είναι ο $r_1 \cdot n(g\tau)^2 \cdot \rho_{nn}$, έχοντας ομαδοποιήσει πάλι τους επί μέρους παράγοντες για ευκολία στη συζήτηση. Ο όρος αυτός προκύπτει από (α) τη συνεισφορά του αριθμού αδιέγερτων ατόμων που εισέρχονται σε χρόνο τ , r_1 , (β) τη πιθανότητα αλληλεπίδρασης τους (απορρόφησης) με τα n φωτόνια του πεδίου στο χρόνο αυτό που είναι αντίστροφο της συχνότητας Rabi $g^2n\tau^2$ (το πεδίο πάει από $n \rightarrow n-1$ φωτόνια) και (γ) τη πιθανότητα το πεδίο να έχει n φωτόνια, ρ_{nn} . Εφόσον επομένως υπάρχουν πιθανότητες το πεδίο να έχει είτε $n+1$ είτε $n-1$ φωτόνια θα πρέπει και αυτές οι περιπτώσεις να υπάρχουν μέσα στο ρυθμό του πίνακα πυκνότητας όταν θεωρείται η κατάσταση ισορροπίας. Αν λοιπόν το πεδίο έχει $n-1$ φωτόνια, αλληλεπιδρά με τα διεγερμένα άτομα και πηγαίνει από $n-1 \rightarrow n$ φωτόνια με διεργασία διεγερμένης και αυθόρμητης εκπομπής, ενώ αν είχε $n+1$ φωτόνια

αλληλεπιδρά (απορρόφηση) με αδιέγερτα άτομα και πηγαίνει από $n+1 \rightarrow n$. Έτσι εισάγονται οι δύο επί πλέον προσθεταίοι στην εξίσωση ρυθμού.

Ισορροπία επιτυγχάνεται όταν εξισώνονται οι συνεισφορές ανάμεσα από δύο επίπεδα φωτονικών καταστάσεων, όπως π.χ.

$$r_2 n (g\tau)^2 \rho_{n-1,n-1} = r_1 n (g\tau)^2 \rho_{nm} \quad (6.52)$$

Η σχέση (6-52) γράφεται επίσης

$$\rho_{nm} = \frac{r_2}{r_1} \rho_{n-1,n-1} \quad (6.53)$$

Ο λόγος των ρυθμών εισαγωγής ατόμων όμως ακολουθεί τη κατανομή Boltzmann (6-29) και από τη (6-53) προκύπτει

$$\rho_{nm} = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \rho_{n-1,n-1} \quad (6.54)$$

6.4 Υπολογισμός της κατανομής μέλανος σώματος (Planck)

Αντικαθιστώντας με επανάληψη την (6-54) στο τον εαυτό της, για $n = 1, 2, 3 \dots$ προκύπτει

$$\rho_{nm} = \rho_{00} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}} \quad (6.55)$$

Το ρ_{00} προσδιορίζεται από τη συνθήκη ότι το άθροισμα όλων των πιθανοτήτων ιδιοκαταστάσεων n του πεδίου πρέπει να είναι ίσο προς 1, $Tr\rho_{nm} = 1$, δηλαδή

$$\sum_n \rho_{00} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}} = 1 \quad (6.56)$$

Η έκφραση $e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}$ αποτελεί μία φθίνουσα γεωμετρική πρόοδο και από το άθροισμα των άπειρων όρων της²⁰ η (6-56) γίνεται

$$\rho_{00} = 1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \quad (6.57)$$

ώστε

$$\rho_{nn} = \frac{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}}} \quad (6.58)$$

Η (6-58) είναι μια μορφή της κατανομής ακτινοβολίας μέλανος σώματος του Planck, ενός πεδίου με $\langle n \rangle$ φωτόνια κατά μέσον όρο σε θερμοδυναμική ισορροπία. Από αυτήν υπολογίζεται το $\langle n \rangle$: Ο πίνακας πυκνότητας (6-58) πολλαπλασιάζεται με τον αριθμό των φωτονίων, n , και υπολογίζεται το ίχνος του πίνακα που προκύπτει σύμφωνα με την (6-14)

$$\langle n(t) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n \rho_{nn}(t) \quad (6.59)$$

ώστε τελικά να βρεθεί το $\langle n(t) \rangle$ ²¹

$$\langle n(t) \rangle = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (6.60)$$

²⁰ $\sum_{n=0}^{\infty} e^{-n\lambda} = \frac{1}{1 - e^{-\lambda}}$, πρώτος όρος = 1 και ο λόγος = $e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$

²¹ $\frac{e^{-\lambda}}{(1 - e^{-\lambda})^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-n\lambda}$ με παραγωγή του αθροίσματος άπειρων όρων φθίνουσας γεωμετρικής προόδου

η κατανομή Bose-Einstein όπως είχε αναφερθεί στη σχέση 2-27.

6.5 Ασκήσεις

Άσκηση 6-1

Χρησιμοποιώντας ένα πλήρες σύστημα κυματικών συναρτήσεων $\{u(r)\}$ ως βάση, δείξτε ότι η αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή A , όταν το σύστημα εκτυλίσσεται σύμφωνα με τη κυματική συνάρτηση (6-13) παίρνει τη μορφή

$$\langle A \rangle = \sum_{n,m} c_n(t) c_m^*(t) A_{mn}$$

όπου το στοιχείο του πίνακα A_{mn} δίνεται από την

$$A_{mn} = \int u_m^*(r) A u_n(r) d^3 r.$$

Δείξτε ότι ο πίνακας πυκνότητας $\rho(t)$ στη βάση $\{u_n\}$ με στοιχεία

$$\rho(t) = c_n(t) c_m^*(t)$$

έχει ως εξίσωση για τη κίνηση του την (6-21) (ανάλογο της κλασικής εξίσωσης του Liouville) όπου η H είναι η Χαμιλτονιανή του συστήματος και δίνεται μέσω στοιχείων πίνακα της μορφής (6-18). Αν έχουμε συλλογή από πανομοιότυπα συστήματα που να περιγράφεται με κατανομή τυχαίων μεγεθών, δείξτε ότι η μέση τιμή της αναμενόμενης τιμής του τελεστή A δίνεται από την (6-15), όπου $\bar{\rho}$ είναι η μέση τιμή του πίνακα πυκνότητας η οποία υπακούει τη κβαντική εξίσωση Liouville.

Άσκηση 6-2

(α) Βρείτε τις εξισώσεις που κυβερνούν τη κίνηση των στοιχείων πίνακα δισταθμικού ατόμου (στάθμες E_1, E_2) υπό την επίδραση εξωτερικού κλασικού ηλεκτρικού πεδίου $E_x \hat{i}$. Στη περίπτωση αυτή η βάση αποτελείται από τις $|u_1\rangle = |\downarrow\rangle, |u_2\rangle = |\uparrow\rangle$.

(β) Βρείτε ακόμη τις εξισώσεις του πίνακα πυκνότητας για το δισταθμικό άτομο σε πολωμένο κβαντισμένο H/M πεδίο λαμβάνοντας υπόψη και τη δυναμική H/M πεδίου. Η βάση τώρα αποτελείται από τις συναρτήσεις $|\downarrow, n\rangle, |\uparrow, m\rangle$, $n, m = 0, 1, 2, \dots$. Ερμηνέψατε και στις δύο περιπτώσεις τα στοιχεία του πίνακα πυκνότητας.

Άσκηση 6-3

Υποθέστε ότι οι πιθανότητες κατάληψης των σταθμών 1 και 2 σε ένα δισταθμικό άτομο φθίνουν με σταθερές απόσβεσης γ_1, γ_2 . Δείξτε ότι η εξίσωση κίνησης του πίνακα πυκνότητας παίρνει τη μορφή (6-27).

Άσκηση 6-4

Υπολογίσατε τη πιθανότητα απορρόφησης $\rho_{22}(t)$ φωτονίου από την εξίσωση του πίνακα πυκνότητας (6-21) όταν αδιέγερτο δισταθμικό άτομο αλληλεπιδρά με το ηλεκτρικό πεδίο της άσκησης 4-1.

