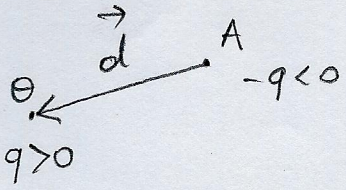
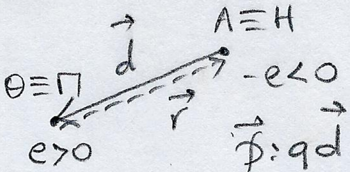
(ΗΛΕΚΤΡΙΚΗ) ΔΙΠΟΛΙΚΗ ΡΟΠΗ (electric) dipole moment

Ⓐ



$$\vec{d} := \vec{A\Theta}$$

$$\vec{p} := q\cdot\vec{d}$$



$$\vec{p} : q\vec{d} = e(-\vec{r})$$

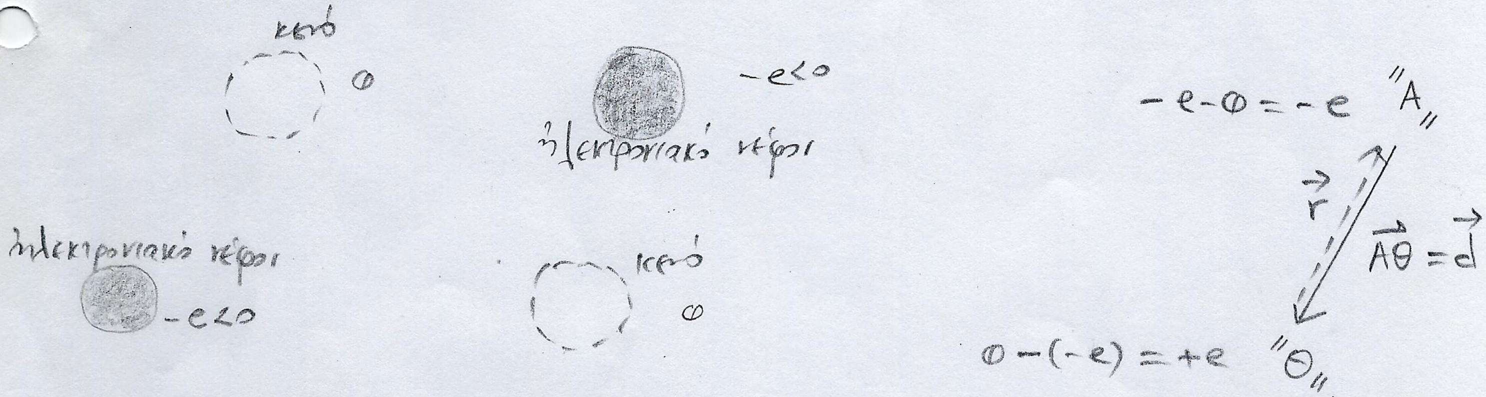
$$\vec{p} = -e\vec{r}$$

$[U] = N\cdot m = J$ $\quad U = -\vec{p}\cdot\vec{\mathcal{E}}$ δυναμική ενέργεια (potential energy)

$[\vec{\tau}] = N\cdot m$ $\quad \vec{\tau} = \vec{p}\times\vec{\mathcal{E}}$ (μηχανική) ροπή (torque)

ΗΛΕΚΤΡΙΚΗ ΔΙΠΟΛΙΚΗ ΡΟΠΗ ΜΕΤΑΒΑΣΕΩΣ

transition (electric) dipole moment



Αρχικώς

Τελικώς

Τελικώς − Αρχικώς

$$\vec{p} = e\vec{d} = -e\vec{r}$$

Τελεστής (ηλεκτρικής) διπολικής ροπής μεταβάσεως

$$\hat{\vec{d}} = \hat{\vec{p}} := \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \vec{d}_{ij} |\Phi_i\rangle\langle\Phi_j|$$

$$\vec{d}_{ij} = \vec{p}_{ij} = -e \langle \Phi_i | \hat{\vec{r}} | \Phi_j \rangle = \dots = -e \int d^3r\, \Phi_i(\vec{r})^* \, \vec{r}\, \Phi_j(\vec{r})$$

$$\hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle$$

$$\langle \Phi_i | \hat{\vec{r}} | \Phi_j \rangle = \sum_{|\vec{r}'\rangle} \sum_{|\vec{r}''\rangle} \langle \Phi_i | \vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \hat{\vec{r}} | \vec{r}''\rangle \langle \vec{r}'' | \Phi_j \rangle$$

$$= \sum_{|\vec{r}'\rangle} \sum_{|\vec{r}''\rangle} \Phi_i(\vec{r}')^* \, \vec{r}'' \underbrace{\langle \vec{r}' | \vec{r}''\rangle}_{\delta_{\vec{r}'\vec{r}''}} \Phi_j(\vec{r}'')$$

$$= \sum_{|\vec{r}'\rangle} \Phi_i(\vec{r}')^* \, \vec{r}' \, \Phi_j(\vec{r}') = \sum_{|\vec{r}\rangle} \Phi_i(\vec{r})^* \, \vec{r} \, \Phi_j(\vec{r})$$

$$= \int d^3r\, \Phi_i(\vec{r})^* \, \vec{r} \, \Phi_j(\vec{r})$$

ΔΣ

$$\hat{\vec{p}} = \vec{d}_{11} |\Phi_1\rangle\langle\Phi_1| + \vec{d}_{12} |\Phi_1\rangle\langle\Phi_2| + \vec{d}_{21} |\Phi_2\rangle\langle\Phi_1| + \vec{d}_{22} |\Phi_2\rangle\langle\Phi_2|$$

$$\vec{d}_{11} = -e \int d^3r\, \Phi_1(\vec{r})^* \, \vec{r} \, \Phi_1(\vec{r}) = 0$$

$$\vec{d}_{12} = -e \int d^3r\, \Phi_1(\vec{r})^* \, \vec{r} \, \Phi_2(\vec{r}) \neq 0$$

$\vec{d}_{12} = \vec{d}_{21}$ για $\{\Phi_i(\vec{r})\}$ πραγματικές

$$\vec{d}_{21} = -e \int d^3r\, \Phi_2(\vec{r})^* \, \vec{r} \, \Phi_1(\vec{r}) \neq 0$$

$$\vec{d}_{22} = -e \int d^3r\, \Phi_2(\vec{r})^* \, \vec{r} \, \Phi_2(\vec{r}) = 0$$

$$\hat{\vec{p}} = \vec{d}_{12} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} + \vec{d}_{21} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{\vec{p}} = \vec{d}_{12} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Ⓖ

δυναμική ενέργεια

$$U_E = -\vec{p}\cdot\vec{E}$$

δυναμική ενέργεια m τρόπου

$$U_E^m = -\vec{p}\cdot\vec{E}^m$$

Τελεστής δυναμικής ενέργειας m τρόπου

$$\hat{U}_E^m = -\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{E}}^m$$

$$\hat{U}_E^m = -\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\vec{d}_{ij}\,|\Phi_i\rangle\langle\Phi_j|\cdot\hat{E}_x^m(z,t)\,\hat{x}$$

ΔΣ $$\hat{U}_E^m = -\vec{d}_{12}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\cdot\hat{E}_x^m(z,t)\,\hat{x} = -\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\hat{E}_x^m(z,t)\quad\vec{d}_{12}\cdot\hat{x}$$

$$\vec{d}_{12}\cdot\hat{x} = -e\int d^3r\,\Phi_1^*(\vec{r})\,\vec{r}\,\Phi_2(\vec{r})\cdot\hat{x} =$$

$$= -e\int d^3r\,\Phi_1^*(\vec{r})\,x\,\Phi_2(\vec{r}) = -e\,x_{12} = p_{x12} := p$$

Άρα

$$\hat{U}_E^m = e x_{12}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\hat{E}_x^m(z,t)$$

$$\hat{E}_x^m(z,t) = \left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)(\hat{a}_m^+ + \hat{a}_m)$$

$$\hat{B}_y^m(z,t) = \left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2}\frac{1}{c}\cos\left(\frac{m\pi z}{L}\right)i(\hat{a}_m^+ - \hat{a}_m)$$

$$\hat{S}_+ + \hat{S}_- = \begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$

$$\hat{U}_E^m = e x_{12}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)\left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)(\hat{a}_m^+ + \hat{a}_m)$$

$$\hat{U}_E^m = \underbrace{e x_{12}\left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)}_{\hbar g^m}(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)(\hat{a}_m^+ + \hat{a}_m)$$

$$\hbar g^m = e x_{12}\left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)\quad (gm)$$

$$\hat{U}_\Sigma^m = \hbar g^m \left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right)\left(\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m\right)$$

χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης ΔΣ – m τρόπου του ΗΜ πεδίου

(στην ατομική φυσική λέγεται συχνά $\hat{H}_{AF}$

AF = atom – field)

$$g_m \Rightarrow \quad \hbar |g^m| = |\wp| \left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2} \left|\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)\right|$$

$$\Omega_R^m := 2\sqrt{n}\, g^m$$

είναι καλύτερα να ορίσουμε τη συχνότητα Rabi ακριβώς έτσι ώστε να υπάρχει πλήρης αναλογία με την ημικλασική περίπτωση

ΤΟ ΓΙΑΤΙ ΘΑ ΦΑΝΕΙ ΠΑΡΑΚΑΤΩ

$$\frac{\hbar\Omega_R}{2\sqrt{n}} = |\wp| \left(\frac{\hbar\omega_m}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2} \left|\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)\right|$$

$$\Omega_R = \frac{|\wp|}{\hbar} \left(\frac{4\hbar\omega_m n}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2} \left|\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)\right| := \frac{|\wp|\, E_{0m}}{\hbar}$$

"πλάτος" ηλεκτρικού πεδίου $\quad E_{0m} = \left(\frac{4\hbar\omega_m n}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2} \cdot \underbrace{\left|\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)\right|}$ → χωρικά διαμορφωμένο

$$[E_{0m}] = \left(\frac{J}{\frac{F}{m}\cdot m^3}\right)^{1/2} = \left(\frac{C\cdot V}{\frac{C}{V}\cdot m^2}\right)^{1/2} = \frac{V}{m}$$

μονάδες ηλεκτρικού πεδίου

ΣΥΝΟΨΗ ΧΑΜΙΛΤΟΝΙΑΝΩΝ

$$\hat{H}_{HM,m} = \hbar\omega_m\left(\hat{a}_m^{+}\hat{a}_m + \frac{1}{2}\right)$$ m τρόπος ΗΜ πεδίου $\hbar\omega_m\left(\hat{N}_m + \frac{1}{2}\right)$

$$\omega_m = \frac{m\pi c}{L}\ , m \in \mathbb{N}^*$$

κι αγνοώντας τον όρο $\frac{\hbar\omega_m}{2}$

$$\hat{H}_{HM,m} = \hbar\omega_m\hat{a}_m^{+}\hat{a}_m \qquad \hbar\omega_m\hat{N}_m$$

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = E_2\hat{S}_+\hat{S}_- + E_1\hat{S}_-\hat{S}_+ \qquad E_2 - E_1 = \hbar\Omega$$ διστάθμικό σύστημα

θέτονται $E_1 = \emptyset$

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = \hbar\Omega\hat{S}_+\hat{S}_-$$

χωρικά διαμορφωμένο "πλάτος"

$$E_{0m} = \left|\left(\frac{4\hbar\omega_m n_m}{\varepsilon_0 V}\right)^{1/2}\sin\left(\frac{m\pi z}{L}\right)\right|$$

$$\hat{U}_{\varepsilon}^{m} = \hbar g^{m}\left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right)\left(\hat{a}_m^{+} + \hat{a}_m\right) = \hat{H}_{\substack{\alpha\lambda\lambda \\ HMm-\Delta\Sigma}}$$ αλληλεπίδραση m τρόπου ΗΜ πεδίου – ΔΣ

$$\Omega_R^m := 2\sqrt{n_m}\,g_m$$

$$\Omega_R^m := \frac{|\wp|E_{0m}}{\hbar}$$ συχνότητα Rabi

Άρα η ολική Χαμιλτονιανή τού m τρόπου γράφεται

$$\hat{H}_{Rm} = \hbar\omega_m\hat{a}_m^{+}\hat{a}_m + \hbar\Omega\hat{S}_+\hat{S}_- + \hbar g^{m}\left(\hat{S}_+ + \hat{S}_-\right)\left(\hat{a}_m^{+} + \hat{a}_m\right)$$

ονομάζεται συχνά Χαμιλτονιανή Rabi

ΠΡΟΣΟΧΗ $|\uparrow, n_m\rangle$ κ $|\downarrow, n_m\rangle$ ιδιοκαταστάσεις τη $\underbrace{\left(\hbar\omega_m\hat{a}_m^{+}\hat{a}_m + \hbar\Omega\hat{S}_+\hat{S}_-\right)}^{\hat{H}_{HMm} + \hat{H}_{\Delta\Sigma}}$

καί όχι τη $\hat{H}_{HM,m} + \hat{H}_{\Delta\Sigma} + \hat{H}_{\substack{\alpha\lambda\lambda \\ \Delta\Sigma-HMm}}$

Άς δούμε προσεκτικότερα τη Χαμιλτονιανή Αλληλεπίδρασης ΔΣ – ΗΜ πεδίο

ΔΣ – ενός τρόπου m του ΗΜ πεδίου

$$\hat{U}_\Sigma^m = \hbar g^m (\hat{S}_+ + \hat{S}_-)(\hat{a}_m^\dagger + \hat{a}_m) =$$

$$= \hbar g^m \Big(\underbrace{\hat{S}_+ \hat{a}_m^\dagger}_{1ος} + \underbrace{\hat{S}_+ \hat{a}_m}_{2ος} + \underbrace{\hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger}_{3ος} + \underbrace{\hat{S}_- \hat{a}_m}_{4ος} \Big)$$

1ος $\hat{S}_+ \hat{a}_m^\dagger$

$\rightsquigarrow$ f_i ω_i

$\begin{pmatrix} \circ \\ \bullet \end{pmatrix}$ πριν

$\begin{pmatrix} \bullet \\ \circ \end{pmatrix}$ μετά $\rightsquigarrow$ $f_f < f_i$, $\omega_f < \omega_i$

$\Delta E > 0$

άν έχω πολλούς τρόπους δεν είναι παράδοξος μηχανισμός

2ος $\hat{S}_+ \hat{a}_m$

$\rightsquigarrow$ $\begin{pmatrix} \circ \\ \bullet \end{pmatrix}$ πριν

$\begin{pmatrix} \bullet \\ \circ \end{pmatrix}$ μετά

ίσως διατηρεί την ενέργεια

3ος $\hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger$

$\begin{pmatrix} \bullet \\ \circ \end{pmatrix}$ πριν

$\begin{pmatrix} \circ \\ \bullet \end{pmatrix}$ μετά $\rightsquigarrow$

ίσως διατηρεί την ενέργεια

4ος $\hat{S}_- \hat{a}_m$

$\rightsquigarrow$ f_i ω_i

$\begin{pmatrix} \bullet \\ \circ \end{pmatrix}$ πριν

$\begin{pmatrix} \circ \\ \bullet \end{pmatrix}$ $\rightsquigarrow$ $f_f > f_i$, $\omega_f > \omega_i$

$\Delta E < 0$

άν έχω πολλούς τρόπους δεν είναι παράδοξος μηχανισμός

Άν αγνοήσουμε τον 1ο και τον 4ο όρο που ο καθένας μόνος του δεν διατηρεί την ενέργεια

$$\Rightarrow \hat{U}_\Sigma^m = \hbar g^m (\hat{S}_+ \hat{a}_m + \hat{S}_- \hat{a}_m^\dagger)$$

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

Jaynes – Cummings Χαμιλτονιανή

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = E_2 \hat{S}_+ \hat{S}_- + E_1 \hat{S}_- \hat{S}_+ \qquad E_2 - E_1 = \hbar\Omega$$

μπορούμε να θέσουμε

$$E_2 = \frac{\hbar\Omega}{2}$$

$$\hbar\Omega \qquad \text{μηδέν}$$

$$E_1 = -\frac{\hbar\Omega}{2}$$

$$\hat{H}_{\Delta\Sigma} = \frac{\hbar\Omega}{2} \hat{S}_+ \hat{S}_- - \frac{\hbar\Omega}{2} \hat{S}_- \hat{S}_+$$

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_- \hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{S}_+ \hat{S}_- - \hat{S}_- \hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \hat{\sigma}_z$$

Άρα $\hat{H}_{\Delta\Sigma} = \frac{\hbar\Omega}{2} \hat{\sigma}_z$ η μορφή του $\hat{H}_{\Delta\Sigma}$ στο άρθρο των Jaynes–Cummings

$\hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$ $\qquad$ $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$

ΑΣΚΗΣΗ

Να ἀποδειχτοῦν οἱ σχέσεις

(α') $[\hat{a},\hat{a}]=0$ $\quad$ (β') $[\hat{a}^+,\hat{a}^+]=0$ $\quad$ (γ') $[\hat{a},\hat{a}^+]=1$ $\quad$ (δ') $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$

(ε') $[\hat{N},\hat{a}]=-\hat{a}$ $\quad$ (ς') $[\hat{N},\hat{a}^+]=\hat{a}^+$ $\quad$ (ζ') $\hat{N}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = (n-1)\left(\hat{a}|n\rangle\right)$

(η') $\hat{N}\left(\hat{a}^+|n\rangle\right) = (n+1)\left(\hat{a}^+|n\rangle\right)$

(α') $[\hat{a},\hat{a}] = \hat{a}\hat{a}-\hat{a}\hat{a}=0$ $\quad$ (β') $[\hat{a}^+,\hat{a}^+] = \hat{a}^+\hat{a}^+-\hat{a}^+\hat{a}^+=0$

(γ') $$[\hat{a},\hat{a}^+]|n\rangle = \hat{a}\hat{a}^+|n\rangle - \hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \hat{a}\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle - \hat{a}^+\sqrt{n}\,|n-1\rangle =$$
$$= \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\,|n\rangle - \sqrt{n}\sqrt{n}\,|n\rangle = (n+1)|n\rangle - n|n\rangle = 1\cdot|n\rangle$$

$\Rightarrow [\hat{a},\hat{a}^+]=1$

(ε') $$[\hat{N},\hat{a}] = [\hat{a}^+\hat{a},\hat{a}] = \hat{a}^+\underbrace{\cancel{[\hat{a},\hat{a}]}}_{0} + \underbrace{\cancel{[\hat{a}^+,\hat{a}]}}_{-1}\hat{a} = -\hat{a}$$

(ς') $$[\hat{N},\hat{a}^+] = [\hat{a}^+\hat{a},\hat{a}^+] = \hat{a}^+\underbrace{\cancel{[\hat{a},\hat{a}^+]}}_{1} + \underbrace{\cancel{[\hat{a}^+,\hat{a}^+]}}_{0}\hat{a} = \hat{a}^+$$

(δ') $$\hat{N}|n\rangle = \hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \hat{a}^+\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n}\,|n\rangle = n|n\rangle \Rightarrow \hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

(ζ') $$\hat{N}\left(\hat{a}|n\rangle\right) = \hat{N}\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \sqrt{n}\,(n-1)\,|n-1\rangle = (n-1)\sqrt{n}\,|n-1\rangle = (n-1)\left(\hat{a}|n\rangle\right)$$

(η') $$\hat{N}\left(\hat{a}^+|n\rangle\right) = \hat{N}\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\,\hat{N}\,|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\,(n+1)\,|n+1\rangle \Rightarrow$$
$$(n+1)\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$
$$(n+1)\left(\hat{a}^+|n\rangle\right)$$