

ΣΥΜΠΛΗΡΩΜΑ ΘΕΩΡΙΑΣ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ 15

1. Μεταβάσεις συντονισμού πέρα από τον κανόνα του Fermi: Ταλαντώσεις Rabi

Τα όσα είπαμε σε τούτο το κεφάλαιο για τις μεταβάσεις συντονισμού και την εφαρμογή σε αυτές του κανόνα του Fermi αφήνουν ένα εμφανές κενό στην περίπτωση που παύει να ισχύει η ανισότητα $|U_{fi}| \ll \Delta E$, οπότε ο σχετικός τύπος $\Gamma = (2\pi/\hbar)|U_{fi}|^2/\Delta E$ δεν είναι πια εφαρμόσιμος. Το οποίο, βεβαίως, θα συμβεί είτε όταν η στάθμη κατάληξης είναι πολύ στενή (ΔE πολύ μικρό) είτε όταν το προσπίπτον ΗΜ πεδίο είναι πολύ ισχυρό ($|U_{fi}|$ πολύ μεγάλο) όπως είναι πλέον σύνηθες με τις διαθέσιμες δέσμες λέιζερ. Τι συμβαίνει τότε σε μια μετάβαση συντονισμού; Τούτο το συμπλήρωμα θεωρίας θα σας βοηθήσει να καλύψετε αυτό το κενό. Οι επιμέρους «ασκήσεις» που πρέπει να λύσετε είναι οι ακόλουθες:

- α) Εξηγήστε από φυσικής πλευράς γιατί στη γειτονιά ενός συντονισμού –δηλαδή για $\omega \rightarrow \omega_{fi}$ – όλες οι άλλες ατομικές καταστάσεις μπορούν να αγνοηθούν πλην εκείνων που συμμετέχουν στη μετάβαση. Δηλαδή το άτομο μπορεί να θεωρηθεί τότε ως ένα *δικαταστασιακό σύστημα* και η κατάστασή του την τυχούσα χρονική στιγμή t να γραφεί ως

$$\psi(t) = c_1(t)\psi_1 + c_2(t)\psi_2, \quad (1)$$

όπου $\psi_1 \equiv \psi_1(\mathbf{r})$ και $\psi_2 \equiv \psi_2(\mathbf{r})$ οι (χρονανεξάρτητες) κυματοσυναρτήσεις των δύο καταστάσεων -1 και $2-$ της μετάβασης. Επικαλεστείτε τώρα τη γενική ιδέα της *μηχανικής των μητρών* –σελ. 170-71 και *Συμπλήρωμα θεωρίας* Κεφ. 13– για να δείξετε ότι η κατάσταση του ατόμου σε μια τυχούσα χρονική στιγμή t θα περιγράφεται από το χρονεξαρτημένο διάνυσμα στήλης

$$\psi(t) = \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix} \quad (2)$$

και η χαμιλτονιανή $H = H_0 + V(t)$ από μια αντίστοιχη 2×2 μήτρα έτσι ώστε η χρονεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger να γράφεται ως

$$i\hbar \dot{\psi}(t) = H(t) \psi(t) \quad \text{ή} \quad i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1(t) \\ \dot{c}_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

δηλαδή ως ένα γραμμικό διαφορικό σύστημα 2×2 , μορφολογικά ταυτόσημο με την αρχική εξίσωση.

- β) Δείξτε ότι υπό κάποιες προϋποθέσεις –που θα πρέπει να διατυπώσετε– η χαμιλτονιανή μήτρα H του παραπάνω δικαταστασιακού συστήματος θα γράφεται ως

$$H = H_0 + V = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & A(t) \\ A^*(t) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & A(t) \\ A^*(t) & E_2 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

οπότε η εξίσωση *Schrödinger* (3) θα παίρνει τη μορφή

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \dot{c}_1 &= E_1 c_1 + A(t) c_2 \\ i\hbar \dot{c}_2 &= A^*(t) c_1 + E_2 c_2 \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

και με τις αλλαγές μεταβλητής

$$c_1(t) = a_1(t) e^{-iE_1 t/\hbar}, \quad c_2(t) = a_2(t) e^{-iE_2 t/\hbar} \quad (6)$$

–τις οποίες καλείστε να δικαιολογήσετε φυσικά– την

$$\left. \begin{aligned} i\hbar \dot{a}_1 &= A(t) e^{-i\omega_0 t} a_2 \\ i\hbar \dot{a}_2 &= A^*(t) e^{i\omega_0 t} a_1 \end{aligned} \right\} \quad \left(\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \right), \quad (7)$$

από όπου –με απαλοιοφή του ενός ή του άλλου αγνώστου– προκύπτουν οι δύο συνήθειες διαφορικές εξισώσεις

$$\ddot{a}_1 + \left(i\omega_0 - \frac{\dot{A}}{A} \right) \dot{a}_1 + \frac{|A|^2}{\hbar^2} a_1 = 0 \quad (8)$$

και

$$\ddot{a}_2 - \left(i\omega_0 + \left(\frac{\dot{A}}{A} \right)^* \right) \dot{a}_2 + \frac{|A|^2}{\hbar^2} a_2 = 0, \quad (9)$$

οι οποίες –για κάθε δεδομένη συνάρτηση $A(t)$ – θα πρέπει να λυθούν σε συνδυασμό με τις αρχικές συνθήκες

$$a_1(0) = 1, \quad a_2(0) = 0$$

που αντιστοιχούν σε «αρχική θέση» του ατόμου στη θεμελιώδη κατάσταση ψ_1 . Επαληθεύστε όλα τα παραπάνω και γράψτε επίσης τις αρχικές συνθήκες βάσει των οποίων θα μπορεί να λυθεί καθεμία από τις εξισώσεις (8) και (9) χωριστά.

- γ) Δείξτε ότι η εξίσωση (8) –ή η (9)– καταλήγει σε μια εξίσωση με σταθερούς συντελεστές (και επομένως ακριβώς επιλύσιμη) μόνο όταν $A(t) = U e^{i\omega t}$ και η εξίσωση που προκύπτει τότε είναι η

$$\ddot{a}_1 + i(\omega_0 - \omega) \dot{a}_1 + (U/\hbar)^2 a_1 = 0, \quad (10)$$

όπου U ένας δεδομένος πραγματικός αριθμός με διαστάσεις ενέργειας που χαρακτηρίζει την ισχύ του εξωτερικού πεδίου. Λύστε την (10) στην περίπτωση του συντονισμού ($\omega = \omega_0$) και δείξτε ότι η πιθανότητα μετάβασης $P_{1 \rightarrow 2}$ συναρτηθεί του χρόνου θα έχει την τετραγωνισμένη ημιτονοειδή μορφή

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) = \sin^2(Ut/\hbar). \quad (11)$$

Σε ποιες περιπτώσεις (και με τι παραδοχές) το στοιχείο μήτρας $A(t)$ μπορεί να γραφεί ως $Ue^{i\omega t}$; Έχουν φυσικό ενδιαφέρον αυτές οι περιπτώσεις;

- δ) Λύστε επίσης την (10) και εκτός συντονισμού ($\omega \neq \omega_0$) και δείξτε ότι τώρα η πιθανότητα μετάβασης $P_{1 \rightarrow 2}(t)$ θα γράφεται ως

$$\begin{aligned} P_{1 \rightarrow 2}(t) &= \frac{(U/\hbar)^2}{(\omega - \omega_0)^2/4 + (U/\hbar)^2} \sin^2\left(\sqrt{(\omega - \omega_0)^2/4 + (U/\hbar)^2} t\right) \\ &\equiv \left(\frac{U/\hbar}{\omega_R}\right)^2 \sin^2(\omega_R t), \end{aligned} \quad (12)$$

όπου

$$\omega_R = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2/4 + (U/\hbar)^2}, \quad (13)$$

η λεγόμενη *συχνότητα Rabi* του προβλήματος, με αντίστοιχη ονομασία *-ταλαντώσεις Rabi-* για την *περιοδική μεταβολή* των πληθυσμών των δύο σταθμών που περιγράφεται από τις εξισώσεις (11) ή (12). Και η οποία αποτελεί πλέον καθημερινό φαινόμενο σε σύγχρονα πειράματα με ισχυρές δέσμες λέιζερ. Για μεταβάσεις συντονισμού ο «χρυσός κανόνας» του Fermi έχει χάσει πλέον την παλιά του λάμψη!

Άσκηση

- α) Όπως έχουμε ήδη τονίσει με κάθε δυνατή έμφαση, στη γειτονιά ενός συντονισμού –π.χ. $1 \rightarrow 2$ – η ενεργός διατομή για τη μετάβαση στην κατάσταση 2 (ή στην 1 αν βρισκόμαστε ήδη στη 2) είναι τόσο πολύ μεγαλύτερη από τη διατομή μιας οποιασδήποτε άλλης διαδικασίας που θα μπορούσε να λάβει χώραν –π.χ., μετάβαση σε μια άλλη στάθμη 3, σκέδαση, ιοντισμός κ.λπ.– ώστε μπορούμε άνετα να αγνοήσουμε όλες τις άλλες ατομικές καταστάσεις και να θεωρήσουμε ότι το «παιχνίδι παίζεται» μόνο ανάμεσα στις καταστάσεις 1 και 2 και να χειριστούμε το πρόβλημα στη λεγόμενη *δικαταστασιακή προσέγγιση* (two state approximation) με τον τρόπο που περιγράψαμε στην εκφώνηση.
- β) Επειδή –για τους λόγους που αναφέραμε στο κείμενο– οι περισσότερες μεταβάσεις του παραπάνω τύπου πραγματοποιούνται επίσης στο πλαίσιο της ηλεκτροδιπολικής προσέγγισης –οπότε η χαμιλτονιανή είναι ανάλογη του z (αν $\mathcal{E} \uparrow \hat{z}$)– η αναπαράστασή της υπό μορφήν μιας 2×2 μήτρας θα περιέχει μόνο μη διαγώνια στοιχεία, αφού οι ατομικές καταστάσεις είναι άρτιες ή περιττές και επομένως τα διαγώνια στοιχεία μήτρας τού z – z_{11} και z_{22} – σίγουρα θα μηδενίζονται. Έτσι, η μήτρα αλληλεπίδρασης του ατόμου με το εξωτερικό ΗΜ πεδίο θα έχει την πιο περιορισμένη μορφή^(*)

^(*) Συχνά χρησιμοποιούμε και για τον όρο αλληλεπίδρασης στη χαμιλτονιανή μήτρα το σύμβολο V που χρησιμοποιούμε για το δυναμικό, ενώ ένας άλλος, επίσης συνήθης, συμβολισμός είναι ο H_I , όπου ο δείκτης I (\equiv Interaction) αναφέρεται, βέβαια, στην αλληλεπίδραση που αντιπροσωπεύει ένας τέτοιος όρος.

$$V = \begin{pmatrix} 0 & A(t) \\ A^*(t) & 0 \end{pmatrix},$$

στην οποία αφήσαμε τα μη διαγώνια στοιχεία να έχουν την πιο γενική δυνατή μορφή. Να είναι απλώς *συζυγείς μιγαδικοί αριθμοί* –ώστε η μήτρα V να είναι *ερμιτιανή*– αλλά με τυχούσα χρονική εξάρτηση. Όσο για την αδιατάρακτη χαμιλτονιανή μήτρα H_0 αυτή θα έχει, βεβαίως, *διαγώνια μορφή* με διαγώνια στοιχεία τις ενέργειες E_1 και E_2 των δύο καταστάσεων της μετάβασης. Έτσι, θα είναι τελικά

$$H = H_0 + V = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & A(t) \\ A^*(t) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & A(t) \\ A^*(t) & E_2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

και η εξίσωση Schrödinger θα μετατρέπεται αυτόματα στην ισοδύναμη «μητρική» μορφή

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\psi} = H\psi &\Rightarrow i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & A(t) \\ A^*(t) & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \begin{aligned} i\hbar \dot{c}_1 &= E_1 c_1 + A c_2 \\ i\hbar \dot{c}_2 &= A^* c_1 + E_2 c_2 \end{aligned} \end{aligned} \quad (15)$$

η οποία απλοποιείται σημαντικά αν «αφαιρέσουμε» από τους συντελεστές $c_1(t)$ και $c_2(t)$ τη χρονική τους εξάρτηση που οφείλεται στην αδιατάρακτη χαμιλτονιανή H_0 , κάνοντας τις αλλαγές μεταβλητής

$$c_1(t) = e^{-iE_1 t/\hbar} a_1(t), \quad c_2(t) = e^{-iE_2 t/\hbar} a_2(t)$$

των οποίων η αντικατάσταση στο σύστημα (15) δίνει

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_1 &= A(t) e^{-i\omega_0 t} a_2 \\ i\hbar \dot{a}_2 &= A^*(t) e^{i\omega_0 t} a_1 \end{aligned} \quad \left(\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \right) \quad (16)$$

που είναι μια σαφώς απλούστερη μορφή, όπως είχαμε ήδη την ευκαιρία να δούμε και στο πλαίσιο ενός ανάλογου χειρισμού στη σελίδα 742 του βιβλίου.

Από τις (16) είναι τώρα πολύ εύκολο να απαλείψουμε τον ένα ή τον άλλο από τους δύο αγνώστους και να καταλήξουμε στις δύο δευτεροτάξιες εξισώσεις

$$\begin{aligned} \ddot{a}_1 + \left(i\omega_0 - \frac{\dot{A}}{A} \right) \dot{a}_1 + \frac{|A|^2}{\hbar^2} a_1 &= 0 \\ \ddot{a}_2 - \left(i\omega_0 + \left(\frac{\dot{A}}{A} \right)^* \right) \dot{a}_2 + \frac{|A|^2}{\hbar^2} a_2 &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Όσο για τις αρχικές συνθήκες, αν το άτομο βρισκόταν αρχικά στην κατάσταση 1, αυτές θα έχουν τη μορφή

$$a_1(0) = 1, \quad a_2(0) = 0$$

και αν τις εισαγάγουμε στο σύστημα (16) –για $t = 0$ – θα πάρουμε

$$\dot{a}_1(0) = 0, \quad \dot{a}_2(0) = -i \frac{A^*(0)}{\hbar},$$

απ' όπου είναι φανερό ότι η καλύτερη τακτική για να βρούμε τη λύση είναι να επιλέξουμε την πρώτη από τις εξισώσεις (17), για την οποία οι αρχικές συνθήκες έχουν την απλούστερη δυνατή μορφή

$$a_1(0) = 1, \quad \dot{a}_1(0) = 0 \quad (18)$$

και αφού βρούμε τη λύση της να χρησιμοποιήσουμε την πρώτη εξίσωση του συστήματος (16) για να εκφράσουμε τη συνάρτηση a_2 , μέσω της a_1 , ως

$$a_2(t) = i\hbar \frac{\dot{a}_1 e^{i\omega_0 t}}{A(t)}. \quad (19)$$

γ) Από τη μορφή της πρώτης από τις εξισώσεις (17) είναι τώρα φανερό ότι αν είναι

$$A(t) = U e^{i\omega t} \quad (U = \text{σταθερά})$$

τότε θα καταλήγει στην εξίσωση με σταθερούς συντελεστές

$$\ddot{a}_1 + i(\omega_0 - \omega) \dot{a}_1 + (U/\hbar)^2 a_1 = 0 \quad (20)$$

και αν $\omega = \omega_0$, στην

$$\ddot{a}_1 + (U/\hbar)^2 a_1 = 0,$$

που λύνεται αμέσως –σε συνδυασμό και με τις αρχικές συνθήκες (18)– και δίνει

$$a_1(t) = \cos(Ut/\hbar),$$

οπότε, βάσει της (19), θα έχουμε επίσης ότι

$$a_2(t) = i \sin(Ut/\hbar)$$

και τα τετράγωνα των απόλυτων τιμών αυτών των λύσεων θα δίνουν, βεβαίως, τις πιθανότητες να βρούμε το άτομο στη μία ή την άλλη από τις καταστάσεις ψ_1 και ψ_2 . Θα είναι δηλαδή

$$P_1(t) = \cos^2\left(\frac{Ut}{\hbar}\right) \Rightarrow P_{1 \rightarrow 2}(t) \equiv P_2(t) = \sin^2\left(\frac{Ut}{\hbar}\right) \quad (21)$$

και είναι, προφανώς, $P_1 + P_2 = 1$, όπως θα έπρεπε. Το συμπέρασμα είναι πολύ ενδιαφέρον: Υπό τις συνθήκες που συζητήσαμε στην εκφώνηση, όχι μόνο δεν

ισχύει πλέον ο κανόνας του Fermi, αλλά η συμπεριφορά του συστήματος είναι ακριβώς η αντίθετη. Οι πληθυσμοί των δύο σταθμών, αντί να τείνουν σε μια σταθερή κατάσταση ισορροπίας –όπως θα επέβαλλε ο κανόνας του Fermi–, ταλαντώνονται περιοδικά μεταξύ των δύο σταθμών με συχνότητα $\omega = \omega_R = U/\hbar$, όπου $U = |A(t)|$ η ισχύς της εξωτερικής διαταραχής.

Όσον αφορά τις συνθήκες υπό τις οποίες το μη διαγώνιο στοιχείο $A(t)$ της διαταραχής $V(t)$ μπορεί να γραφεί ως $Ue^{i\omega t}$, αυτό γίνεται εύκολα φανερό αν σκεφτείτε την ανάλυση σε όρο θετικής και σε όρο αρνητικής συχνότητας που είχαμε κάνει στο κείμενο (σελ. 717-718) για μια ημιτονοειδή διαταραχή, προκειμένου να διακρίνουμε εκείνον που ευθύνεται για τη συγκεκριμένη διαδικασία που εξετάζουμε (διέγερση ή εξαναγκασμένη αποδιέγερση). Στην πραγματικότητα, εδώ, επειδή η μήτρα $V(t)$ περιέχει και το συζυγές στοιχείο $A^*(t) = Ue^{-i\omega t}$, ενυπάρχει σε αυτήν η δυνατότητα και των δύο αυτών διαδικασιών. Το συμπέρασμα είναι σαφές. Η μήτρα αλληλεπίδρασης

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & Ue^{i\omega t} \\ Ue^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix}$$

αντιπροσωπεύει την επίδραση πάνω στο άτομο ενός ημιτονοειδούς ΗΜ κύματος συχνότητας ω , στο όριο της ηλεκτροδιπολικής προσέγγισης, και με την πρόσθετη συνθήκη ότι ο ένας από τους δύο όρους $e^{i\omega t}$ και $e^{-i\omega t}$ είναι «εκτός συντονισμού» και μπορεί να αγνοηθεί. (Αυτό το τελευταίο σημείο θα γίνει αρκετά σαφέστερο στο επόμενο πρόβλημα.)

Θα επανέλθουμε στη φυσική ανάλυση των αποτελεσμάτων (21) αφού λύσουμε πρώτα την εξίσωση (20) και για $\omega \neq \omega_0$. Θέτοντας, για λόγους απλότητας,

$$\Omega = \frac{U}{\hbar} \quad \text{και} \quad a_1(t) \equiv a(t)$$

η (20) γράφεται ως

$$\ddot{a} - i(\omega - \omega_0)\dot{a} + \Omega^2 a = 0 \quad (22)$$

και θα λυθεί, βεβαίως, με την εκθετική αντικατάσταση

$$a(t) = e^{i\lambda t}$$

που οδηγεί αμέσως στην

$$\lambda^2 - (\omega - \omega_0)\lambda - \Omega^2 = 0$$

με ρίζες

$$\lambda_{\pm} = \frac{\omega - \omega_0}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega - \omega_0}{2}\right)^2 + \Omega^2} = \mu \pm \omega_R,$$

όπου

$$\mu = \frac{\omega - \omega_0}{2}, \quad \omega_R = \sqrt{\mu^2 + \Omega^2},$$

οπότε η γενική λύση $a(t)$ της (22) θα γράφεται ως

$$\begin{aligned} a(t) &= c_+ e^{i\lambda_+ t} + c_- e^{i\lambda_- t} = e^{i\mu t} (c_+ e^{i\omega_R t} + c_- e^{-i\omega_R t}) \\ &\equiv e^{i\mu t} (c_1 \cos \omega_R t + c_2 \sin \omega_R t) \end{aligned}$$

και μετά την επιβολή των αρχικών συνθηκών $a(0) = 1$, $\dot{a}(0) = 0$, ως

$$\begin{aligned} a(t) &= e^{i\mu t} \left(\cos \omega_R t - i \frac{\mu}{\omega_R} \sin \omega_R t \right) \\ \Rightarrow P_1(t) &= |a(t)|^2 = \cos^2 \omega_R t + \frac{\mu^2}{\omega_R^2} \sin^2 \omega_R t \\ &\equiv 1 - \left(1 - \frac{\mu^2}{\omega_R^2} \right) \sin^2 \omega_R t \equiv 1 - \frac{\Omega^2}{\omega_R^2} \sin^2 \omega_R t \\ \Rightarrow P_2(t) &= 1 - P_1(t) = \left(\frac{\Omega}{\omega_R} \right)^2 \sin^2 \omega_R t. \end{aligned}$$

Θα είναι λοιπόν τελικά

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) \equiv P_2(t) = \frac{\Omega^2}{\omega_R^2} \sin^2 \omega_R t, \quad (23)$$

όπου

$$\Omega = \frac{U}{\hbar}, \quad \omega_R = \sqrt{\left(\frac{\omega - \omega_0}{2} \right)^2 + \Omega^2}, \quad (24)$$

όπως μας ζητήθηκε να αποδείξουμε.

Σημειώστε ότι για $\omega = \omega_0$ –δηλαδή στον συντονισμό– είναι $\omega_R = \Omega$ και ο τύπος (23) ξαναδίνει το προηγούμενό μας αποτέλεσμα (εξ. (21)). Σημειώστε ακόμα ότι για $\omega \neq \omega_0$ –δηλαδή εκτός συντονισμού– η πιθανότητα μετάβασης (23) ουδέποτε γίνεται μονάδα· η μέγιστη τιμή της

$$P_{\max}(\omega) = \frac{\Omega^2}{\omega_R^2} = \frac{\Omega^2}{\left(\frac{\omega - \omega_0}{2} \right)^2 + \Omega^2}$$

είναι πάντα μικρότερη του ένα και γίνεται διαρκώς μικρότερη καθώς απομακρυνόμαστε από τον συντονισμό. Όλα τα παραπάνω συνοψίζονται στο σχήμα που ακολουθεί.

