

## Κβαντική Περιγραφή του Κόσμου μας

Κωνσταντίνος Σφέτσος

Καθηγητής Φυσικής

Γενικό Τμήμα, Πανεπιστήμιο Πατρών

Θερινό Σχολείο Φυσικής στην Εκπαίδευση

28 Ιουνίου - 1 Ιουλίου 2010

Εστία Επιστημών Πάτρας

## Τι εννοούμε Κόσμος;

- ▶ Μην πανικοβάλεστε! Δεν θα καταφύγω σε Φιλοσοφία....
- ▶ Η **Φυσική**, ως **Θεμελιώδη Επιστήμη**, συγκεκριμενοποιεί και ποσοτικοποιεί το ερώτημα.
- ▶ Θα επιχειρήσω να περιγράψω, με βάση μια και μόνο θεωρία, την **Κβαντική Φυσική**, φαινόμενα:
  - ▶ σε αποστάσεις από  $10^{-12} - 10^{-9} \text{ m}$ , δηλαδή σε επίπεδο **ατόμων και μορίων**.
  - ▶ για **μη σχετικιστικές ενέργειες** και αρκετά **ασθενή Ηλεκτρομαγνητικά Πεδία**.  
**Μη παραγωγή νέων σωματιδίων**.
- ▶ Ουσιαστικά θα περιγράψω:
  - ▶ Πολύ βασικούς **χημικούς μηχανισμούς** από πρώτες αρχές.
  - ▶ Πρωτοποριακή (στην εποχή της) **Τεχνολογική** εφαρμογή.

# Περιεχόμενα

- ▶ Βασικά στοιχεία της Κβαντικής Φυσικής.
- ▶ Στοιχεία Κβαντικής Θεωρίας Χημικού Δεσμού.
- ▶ Το περιοδικό σύστημα των στοιχείων.
- ▶ Το μόριο της Αμμωνίας.
- ▶ Τεχνολογική εφαρμογή: Το MASER Αμμωνίας.

# Βασικά στοιχεία της Κβαντικής Φυσικής

## Φυσικά συστήματα και οι καταστάσεις τους

- ▶ Περιγράφονται από διανύσματα  $|\Psi\rangle$ , με συζυγή  $\langle\Psi|$ .
- ▶ Με βάση ένα **ορθοκανονικό** και **πλήρες** σύστημα  $|i\rangle$

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} , \quad \sum_i |i\rangle\langle i| = \mathbb{I} ,$$

η  $\Psi$  αναλύεται ως γραμμικός συνδυασμός

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle \implies c_i = \langle i|\Psi\rangle .$$

$c_i$  είναι το **πλάτος πιθανότητας** η κατάσταση  $|\Psi\rangle$  να βρίσκεται στην βασική κατάσταση  $|i\rangle$ .

Αν  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ , τότε  $|c_i|^2$  είναι η πιθανότητα.

- ▶ Φυσικές ποσότητες  $A$  αντιστοιχούν σε Ερμιτιανούς τελεστές

$$A \rightarrow \hat{A} : \quad \hat{A}_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle = \langle i|\hat{A}^\dagger|j\rangle = \hat{A}_{ji}^* .$$

## Χρονοεξέλιξη Φυσικών Συστημάτων

- ▶ Η χρονική εξέλιξη από  $|\Psi(t_1)\rangle$  σε  $|\Psi(t_2)\rangle$  καθορίζεται απ' τη δράση ενός τελεστή  $U(t_2, t_1)$  ως

$$\boxed{|\Psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle} \implies \langle\Psi(t_2)| = \langle\Psi(t_1)|U^\dagger(t_2, t_1) .$$

- ▶ Βασική ιδιότητα του  $U(t_2, t_1)$

$$\begin{aligned} |\Psi(t_3)\rangle &= U(t_3, t_1)|\Psi(t_1)\rangle \\ &= U(t_3, t_2)|\Psi(t_2)\rangle = U(t_3, t_2)U(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle . \end{aligned}$$

Άρα

$$\boxed{U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2)U(t_2, t_1)} .$$

- ▶ Επειδή

$$U(t_1, t_1) = \mathbb{I} \implies U(t_1, t_2)U(t_2, t_1) = \mathbb{I} .$$

- ▶ Διατήρηση της πιθανότητας

$$\langle \Psi(t_2) | \Psi(t_2) \rangle = \langle \Psi(t_1) | U^\dagger(t_2, t_1) U(t_2, t_1) \Psi(t_1) \rangle = \langle \Psi(t_1) | \Psi(t_1) \rangle .$$

Άρα

$$\boxed{U^\dagger(t_2, t_1) U(t_2, t_1) = \mathbb{I}} .$$

- ▶ Ο υπολογισμός του  $U$  αποτελεί το **κεντρικό πρόβλημα** στην Κβαντική Φυσική. Ειδικότερα:
  - ▶ Σε περιοδικά συστήματα η απόκριση μετά από μία περίοδο:  
 $U(T, 0)$ .
  - ▶ Σε σκέδαση ο λεγόμενος πίνακας:  $S = U(\infty, -\infty)$ .

## Η εξίσωση του Schrödinger

- ▶ Για **απειροστή** χρονική εξέλιξη

$$\Psi(t + dt) = U(t + dt, t)\Psi(t), \quad U(t + dt, t) \simeq \mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H} dt,$$

οπότε

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi.$$

- ▶ Για **ένα σωματίο** με **μάζα**  $m$  σε **εξωτερικό** δυναμικό  $V(\mathbf{x})$

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}).$$

Οι τελεστές ορμής και θέσης αναπαρίστανται ως

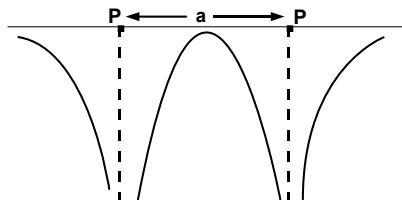
$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}, \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla.$$

- ▶ Για **πολλά σωματία** πρέπει να περιλάβουμε και το δυναμικό **αλληλεπίδραση** τους.

# Στοιχεία Κβαντικής Θεωρίας Χημικού Δεσμού

Από άτομα σε μόρια

- ▶ Άτομα σχηματίζουν μόρια μόνον αν **ενεργειακά συμφέρον**.
- ▶ Η Κβαντική Φυσική ερμηνεύει **πλήρως** τις **χημικές ιδιότητες**.

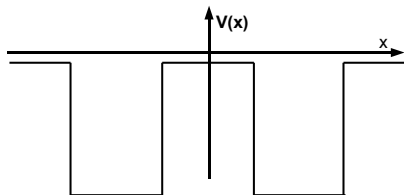


Σχήμα: Μονοδιάστατο μόριο με ενδοπυρηνική απόσταση  $a$ .

- ▶ Ποιά είναι η κυματοσυνάρτηση  $\Psi$  της βασικής κατάστασης;
- ▶ Ποιά είναι η αντίστοιχη ιδιοενέργεια;
- ▶ Συμφέρει ενεργειακά τα ηλεκτρόνια να είναι κοινά στους δύο πυρήνες (**απεντοπισμός**); Αν ναι, σχηματισμός μορίου.



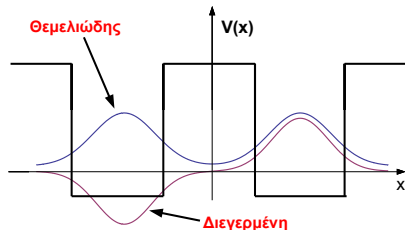
Ασφαλή συμπεράσματα χωρίς πολύπλοκους υπολογισμούς;



Σχήμα: Προτυποποίηση με διπλό πηγάδι.

Η κυματοσυνάρτηση της **θεμελιώδους**:

- ▶ **Εντοπισμένη** γύρω απ' τα ελάχιστα του  $V(x)$ .
- ▶ Δεν έχει **κόμβο** και διατηρεί τη **συμμετρία** του  $V(x)$ .



Οι κυματοσυναρτήσεις προσεγγιστικά

$\Psi_1(x)$  και  $\Psi_2(x)$  οι κυματοσυναρτήσεις των δύο πηγαδιών

$$\text{Συμμετρία : } \Psi_2(-x) = \Psi_1(x) .$$

- ▶ Θεμελιώδης κατάσταση:

$$\Psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2) , \quad \Psi_+(-x) = \Psi_+(x) .$$

- ▶ Πρώτη διεγερμένη κατάσταση:

$$\Psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2) , \quad \Psi_-(-x) = -\Psi_-(x) .$$

- ▶ Η προσέγγιση είναι καλή αν ο βαθμός αλληλεπικάλυψης

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi_1 \Psi_2 ,$$

είναι μικρός.

## Οι ιδιοτιμές προσεγγιστικά

- ▶ Για τα δύο πηγάδια οι Χαμιλτονιανές είναι

$$H_i = \frac{p^2}{2m} + V_i(x), \quad H_i \Psi_i = E_0 \Psi_i, \quad i = 1, 2,$$

με

Δέσμιες καταστάσεις :  $E_0 < 0$ .

- ▶ Η Χαμιλτονιανή του διπλού πηγαδιού είναι

$$H = \frac{p^2}{2m} + V_1(x) + V_2(x).$$

- ▶ Η ενέργεια που αντιστοιχεί στις προσεγγιστικές  $\Psi_{\pm}$  είναι

$$E_{\pm} = \langle \Psi_{\pm} | H | \Psi_{\pm} \rangle = \frac{1}{2}(H_{11} + H_{22}) \pm \frac{1}{2}(H_{12} + H_{21}),$$

όπου ο πίνακας

$$H_{ij} = \langle \Psi_i | H | \Psi_j \rangle.$$

- ▶ Για τα στοιχεία του πίνακα

$$H_{11} = \underbrace{\langle \Psi_1 | H_1 | \Psi_1 \rangle}_{=E_0} + \underbrace{\langle \Psi_1 | V_2 | \Psi_1 \rangle}_{\approx 0} \simeq E_0 .$$

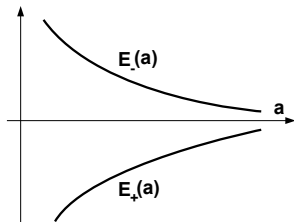
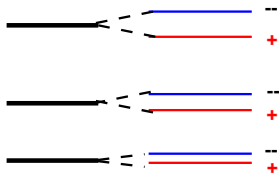
και

$$H_{12} = \langle \Psi_1 | \underbrace{E_0 + V_1}_{< 0} | \Psi_2 \rangle = -\epsilon(a) < 0 .$$

- ▶ Λόγω **συμμετρίας**  $H_{22} = H_{11}$  και  $H_{21} = H_{12}$ .
- ▶ Η ενέργεια των δύο καταστάσεων είναι

$$E_{\pm}(a) \simeq E_0 \mp \epsilon(a) .$$

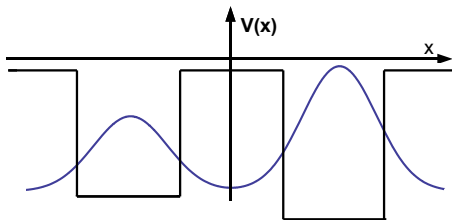
**Μονά πηγάδια**      **Διπλά πηγάδια**



**Σχήμα:** Εντονότερη **άρση εκφυλισμού** για διεγερμένες καταστάσεις.

## Πολικότητα και μόρια διαφορετικών ατόμων

Ανισόβαθα πηγάδια



Σχήμα: Η κυματοσυνάρτηση  $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ , με  $c_2 > c_1$ .

- ▶ Ηλεκτρονικό νέφος παρουσιάζει **πολικότητα**.
- ▶ Το **βαθύτερο** πηγάδι είναι ηλεκτραρνητικό.
- ▶ Το μόριο έχει **διπολική ροπή**. Σημαντικό σε **τεχνολογικές εφαρμογές** καθότι ευαίσθητο σε ΗΜ πεδία.
- ▶ **Μεγάλη** πολικότητα αντιστοιχεί σε **στερεά και υγρή** κατάσταση σε θερμοκρασία περιβάλλοντος. Αν **μικρή**, ασθενείς αλληλεπιδράσεις (Van der Waals), **αέρια** κατάσταση.

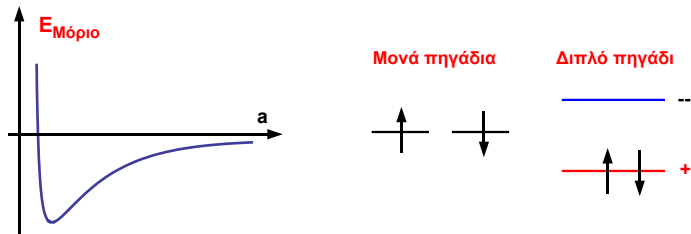
## Σχηματισμός μορίων

Επικοινωνία των διαφόρων σταθμών με βάση:

- ▶ Την ελαχιστοποίηση της ενέργειας του μοριακού δεσμού.
- ▶ Την απαγορευτική αρχή του Pauli.

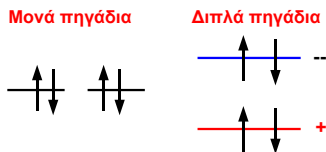
Ενέργεια δεσμού  $H_2$  (προσεγγιστικά):

$$E_{\text{Μόριο}} = 2(E_0 - \epsilon(a)) + e^2/a .$$



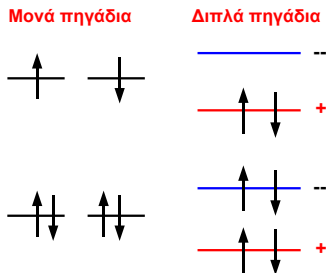
Σχήμα: Ενέργεια δεσμού και καταστάσεις στο μόριο του  $H_2$ .

- ▶ Χωρίς ενεργειακό όφελος δεν σχηματίζεται μόριο.



Σχήμα: Δύο άτομα *He* δεν σχηματίζουν μόριο (ευγενές αέριο).

- ▶ Ενεργειακό όφελος εξαιτίας (κυρίως) των ηλεκτρονίων της ημι-κατειλημμένης στάθμης (Ηλεκτρόνια σθένους).



Σχήμα: Δύο άτομα *Li* σχηματίζουν το μόριο *Li<sub>2</sub>*.

# Το περιοδικό σύστημα των στοιχείων

## Άρση εκφυλισμού σε πραγματικά μόρια

- ▶ **Μονοηλεκτρονικά** άτομα, π.χ.  $H$ :
  - ▶ Κυματοσυναρτήσεις  $\Psi_{n,\ell,m}$ , με κβαντικούς αριθμούς:  $n = 1, 2, \dots$  (**κύριος**),  $\ell = 0, 1, \dots, n - 1$  (**στροφορμή**) και  $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$ .
  - ▶ Ιδιοενέργειες  $E_n = -13.6Z eV/n^2$  με **εκφυλισμό**  $2n^2$ .
- ▶ **Πολυατομικά** μόρια:
  - ▶ Ηλεκτρόνια **σθένους** αισθάνονται ένα **θωρακισμένο δυναμικό**, π.χ. της μορφής

$$V_{\Theta\omega\rho.}(r) = -Ze^2 \frac{e^{-mr}}{r} > V_{\text{Coul.}}(r) = -\frac{Ze^2}{r} .$$

- ▶ Όλες οι στάθμες ανεβαίνουν και ο **εκφυλισμός** στον κβαντικό αριθμό  $\ell$  **αίρεται**

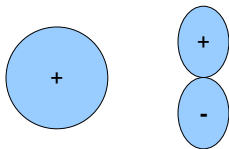
$$E_{n,\ell} \quad \text{με} \quad E_{n,\ell_1} < E_{n,\ell_2} \quad \text{αν} \quad \ell_1 < \ell_2 .$$



## Τροχιακά

Είναι οι ατομικές καταστάσεις σε ορολογία χημικών.

- ▶ Οι καταστάσεις απαριθμούνται ως  $ns$ ,  $np$ ,  $nd$  κλπ.
  - ▶  $n$  ο κύριος κβαντικός αριθμός.
  - ▶  $s$ ,  $p$  και  $d$  αντιστοιχούν σε  $\ell = 0, 1$  και  $2$ .
- ▶ Στην Φύση τα σημαντικότερα τροχιακά είναι τα  $s$  και  $p$ .
- ▶ Τροχιακά  $s$ : Έχουν σφαιρική συμμετρία.
- ▶ Τροχιακά  $p$ : Παρουσιάζουν κατευθυντικότητα σε άξονα.



Σχήμα: Τροχιακά  $s$  και  $p$ .

- ▶ Όσον αφορά την άρση του εκφυλισμού

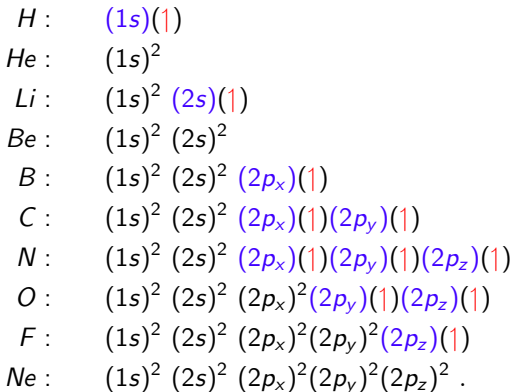
$$E_{ns} < E_{np} < E_{nd} < \dots$$

## Ερμηνεία του Περιοδικού Πίνακα

- ▶ Τα πρώτα 10 στοιχεία, με τις ενέργειες ιονισμού τους:

<i>H</i> , 13.6	-	-	-	-	-	-	<i>He</i> , 24.6
<i>Li</i> , 5.4	<i>Be</i> , 9.3	<i>B</i> , 8.3	<i>C</i> , 11.3	<i>N</i> , 14.5	<i>O</i> , 13.6	<i>F</i> , 17.4	<i>Ne</i> , 21.6

- ▶ Επικρισμός των ενεργειακών σταθμών:



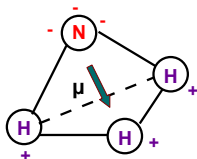
# Το μόριο της Αμμωνίας

## Κβαντική περιγραφή

- ▶ Το άζωτο  $N$  έχει ατομικό αριθμό  $Z = 7$ .

Τροχιακά :  $(1s)^2(2s)^2 \underbrace{(1p_x)(1p_y)(1p_z)}_{\text{Ηλεκτρόνια Σθένους}}$  ,

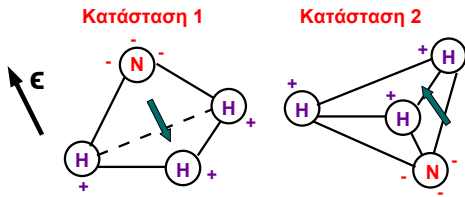
- ▶ Μπορεί να ενωθεί με 3  $H$  στο μόριο της αμμωνίας  $NH_3$ .



Σχήμα: Το μόριο  $NH_3$  και το διάνυσμα διπολικής ροπής.

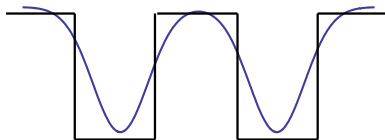
- ▶ Το άζωτο έλκει τα ηλεκτρόνια περισσότερο απ' ότι τα υδρογόνα. Έντονη **πολικότητα** και **διπολική ροπή**.

- ▶ Εκφυλισμός λόγω **συμμετρίας** ως προς τη θέση του  $N$ .



Σχήμα: Το μόριο  $NH_3$  με τις **δύο δυνατές** θέσεις του  $N$ . Παρατηρείστε τις **αντίθετες διπολικές ροπές**.

- ▶ Το **ισοδύναμο** δυναμικό



Σχήμα: Το άζωτο κινείται στο παραπάνω **δυναμικό** (κυανή γραμμή), απλοποιημένο σε **διπλό πηγάδι** (μαύρη γραμμή).

- ▶ Έχουμε δύο **σχεδόν εκφυλισμένες** στάθμες με

$$\Delta E_{NH_3} = E_- - E_+ = 2\epsilon = 10^{-4} \text{ eV (πειραματικά) .}$$

Αντιστοιχεί σε  $\nu = 24 \text{ GHz}$ ,  $\lambda = 1.25 \text{ cm}$  (μικροκύματα).

- ▶ **Υγρή** και **αέρια** κατάσταση:

- ▶ Στη βασική κατάσταση  $\Psi_+$  (άρτια) η διπολική ροπή είναι μηδέν και η αμμωνία είναι αέριο (βράζει σε  $-33 \text{ }^\circ\text{C}$ ).
- ▶ Αν υγρό, μετάβαση στις καταστάσεις πολικότητας  $\Psi_{1,2}$ . Όφελος από αλληλεπίδραση διπόλων ( $\sim 10^{-1} \text{ eV}$ ).

- ▶ **Χρόνος ημι-ζωής:**

$$\begin{aligned} T_{NH_3} &\simeq \left( \frac{\Delta E_{\text{ατ. αποδ.}}}{\Delta E_{NH_3}} \right)^3 T_{\text{ατ. αποδ.}} \simeq (10^4)^3 \times 10^{-8} \text{ sec} \\ &= \boxed{10^4 \text{ sec}} . \end{aligned}$$

- ▶ Η διεγερμένη κατάσταση είναι **μακρόβια**.
- ▶ Σε θερμοκρασία **περιβάλλοντος**  $T = 30 \text{ }^\circ\text{C}$  (ή  $1/40 \text{ eV} \gg \Delta E_{NH_3}$ ), πρακτικά τα **μισά μόρια** του αερίου βρίσκονται στη διεγερμένη κατάσταση.

# Τεχνολογική εφαρμογή: Το MASER αμμωνίας

Παραγωγή ΗΜ ακτινοβολίας:

- ▶ **Ασυντόνιστες** αποδιεγέρσεις οδηγούν σε εκπομπή **ασύμφωνης** ακτινοβολίας.
- ▶ **Εξαναγκασμένες ταυτόχρονες** μεταβάσεις πληθώρας πανομοιότυπων κβαντικών συστημάτων οδηγούν σε **υψηλής ποιότητας** ΗΜ σήματα.
- ▶ Στην περίπτωση της αμμωνίας: **Ενίσχυση Μικροκυμάτων με Εξαναγκασμένη Εκπομπή Ακτινοβολίας (MASER = Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation)**.

Πρακτικά ζητήματα:

- ▶ **Διαχωρισμός** μορίων, κρατώντας αυτά στην υψηλή στάθμη, με εφαρμογή σταθερού Ηλεκτρικού Πεδίου.
- ▶ **Εξαναγκασμένη** μετάβαση με εφαρμογή χρονοεξαρτημένου Ηλεκτρικού Πεδίου.

## Αμμωνία σε σταθερό Ηλεκτρικό πεδίο

Το πεδίο επηρεάζει διαφορετικά τις καταστάσεις 1 και 2 (με αντίθετες διπολικές ροπές).

- ▶ Ενέργεια αλληλεπίδρασης διπόλου με Ηλεκτρικό Πεδίο  $\mathcal{E}$

$$E_{\Delta\text{ιπ.}} = -\mu \cdot \mathcal{E} .$$

- ▶ Για τις καταστάσεις 1 και 2 έχουμε

$$H_{11} = E_0 + \mu\mathcal{E} , \quad H_{22} = E_0 - \mu\mathcal{E} .$$

Υποθέτοντας ότι το μόριο δεν παραμορφώνεται πολύ

$$H_{12} = H_{21} = -\epsilon ,$$

- ▶ Άρα έχουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \Psi = E\Psi , \quad \Psi = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} .$$

- ▶ Οι ιδιοτιμές είναι

$$\text{Θεμελιώδης : } E_+ = E_0 - \sqrt{\epsilon^2 + \mu^2 \mathcal{E}^2} ,$$

$$\text{1η διεγερμένη : } E_- = E_0 + \sqrt{\epsilon^2 + \mu^2 \mathcal{E}^2} .$$

- ▶ Για μικρά πεδία εργαστηρίου ( $\mu \mathcal{E} \ll \epsilon$ ,  $\mu \sim 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}$ ,  $\mathcal{E} \sim 10^3 \text{ V/m}$ )

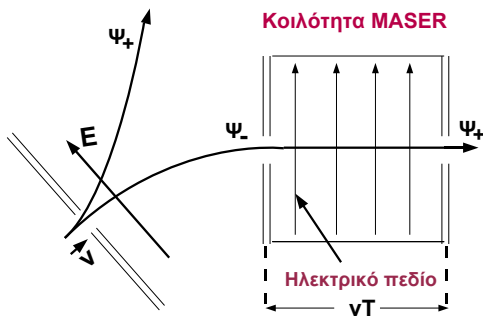
$$E_{\pm} \simeq E_0 \mp \epsilon \mp \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{2\epsilon} .$$

- ▶ Η διαφορετική συμπεριφορά των δύο καταστάσεων μπορεί να χρησιμοποιηθεί για των διαχωρισμό των μορίων.
- ▶ Αυτό επιτυγχάνεται με εφαρμογή **ανομοιογενούς Ηλεκτρικού Πεδίου**, καθέτως στη δέσμη.
  - ▶ Οι **δυνάμεις** που δέχονται τα μόρια στις καταστάσεις  $\Psi_+$   $\Psi_-$  είναι **αντίθετες**.
  - ▶ Συγκεκριμένα (εξ' ορισμού)

$$F_{\pm} = -\nabla E_{\pm} \simeq \pm \frac{\mu^2}{2\epsilon} \nabla \mathcal{E}^2 .$$



## Η σχηματική αναπαράσταση της συσκευής MASER



- ▶ Στο 1ο στάδιο επιτυγχάνεται ο διαχωρισμός της δέσμης.
- ▶ Στο 2ο στάδιο επιτυγχάνεται συντονισμός και εξαναγκασμένη μετάβαση την διεγερμένης στη βασική κατάσταση με αποβολή ΗΜ ενέργειας.

## Αμμωνία σε χρονοεξαρτώμενο Ηλεκτρικό Πεδίο

- ▶ Μέσα στην κοιλότητα το Ηλεκτρικό Πεδίο  $\mathcal{E} = \mathcal{E}(t)$ . Άρα

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \Psi = i\hbar \frac{d\Psi}{dt}, \quad \Psi(t) = \begin{pmatrix} C_1(t) \\ C_2(t) \end{pmatrix}.$$

- ▶ Αναλυτικά

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_1}{dt} &= (E_0 + \mu\mathcal{E}(t))C_1 - \epsilon C_2, \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} &= -\epsilon C_1 + (E_0 - \mu\mathcal{E}(t))C_2. \end{aligned}$$

- ▶ Θέτουμε  $C_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_1 \pm C_2)$ , οπότε

$$i\hbar \frac{dC_{\pm}}{dt} = (E_0 \mp \epsilon)C_{\pm} + \mu\mathcal{E}(t)C_{\mp},$$

με αρχική συνθήκη

$$C_+(0) = 0, \quad C_-(0) = 1.$$

- ▶ Επιπλέον αλλάζουμε μεταβλητή ως

$$C_{\pm} = e^{-i/\hbar(E_0 \mp \epsilon)t} D_{\pm} ,$$

οπότε

$$i\hbar \frac{dD_{\pm}}{dt} = \mu \mathcal{E}(t) e^{\mp i\omega_0 t} D_{\mp} , \quad \hbar\omega_0 = 2\epsilon ,$$

με  $D_+(0) = 0$  και  $D_-(0) = 1$ .

- ▶ Ας υποθέσουμε ότι

$$\mathcal{E}(t) = 2\mathcal{E}_0 \cos \omega t .$$

Τότε για μικρά πλάτη αν  $\omega \simeq \omega_0$  προσεγγίζουμε

$$i\hbar \frac{dD_{\pm}}{dt} \simeq \mu \mathcal{E}_0 e^{\pm i(\omega - \omega_0)t} D_{\mp} .$$

- ▶ Αν ακριβώς  $\omega = \omega_0$ , τότε

$$i\hbar \frac{dD_{\pm}}{dt} \simeq \mu \mathcal{E}_0 D_{\mp} \implies \frac{d^2 D_{\pm}}{dt^2} + \left( \frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 D_{\pm} = 0 ,$$

αρμονικός ταλαντωτής. Το σύστημα επιλύεται και γενικά.

- ▶ Πιθανότητα μετάβασης στην κατάσταση  $\Psi_+$

$$P_+(t) = |C_+(t)|^2 = |D_+(t)|^2 = \frac{\mu^2 \mathcal{E}_0^2}{\hbar^2 \Omega^2} \sin^2 \Omega t ,$$

όπου

$$\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2/4 + \mu^2 \mathcal{E}_0^2/\hbar^2} .$$

- ▶ **Μεγιστοποίηση** πλάτους μετάβασης για

$$\omega = \omega_0 \quad \Longrightarrow \quad \Omega = \frac{\mu \mathcal{E}_0}{\hbar} .$$

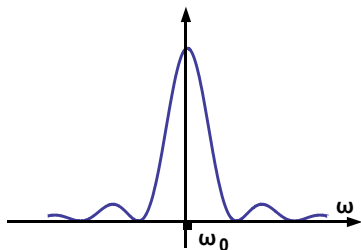
- ▶ Τότε, τη χρονική στιγμή

$$T = \frac{\pi \hbar}{2\mu \mathcal{E}_0} ,$$

το μόριο έχει  $P_+(T) = 1$  να είναι στην βασική κατάσταση.

- ▶ Αν το μήκος της κοιλότητας MASER είναι  $\nu T$ , **όλα τα μόρια** την εγκαταλείπουν στη **βασική** κατάσταση.

- ▶ Σχετικοί πληθυσμοί για άλλες χρονικές στιγμές;



Σχήμα: Σχετική πιθανότητα  $P_+(t)$  ως συνάρτηση της συχνότητας  $\omega$ .

- ▶ Τι απέγινε η ενεργειακή διαφορά;
  - ▶ Προσδώθηκε στο μηχανισμό που γεννά το πεδίο εντός της κοιλότητας.
  - ▶ Τροφοδότησε και ενίσχυσε το ΗΜ πεδίο (ίδιας συχνότητας) που εξανάγκασε την μετάβαση.
  - ▶ Για τις λεπτομέρειες χαιαζόμαστε κβάντωση του ΗΜ πεδίου.
- ▶ **Συμπέρασμα:** Η μοριακή ενέργεια μετατράπηκε σε ενέργεια ΗΜ κύματος υψηλής ποιότητας και έντασης.