Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
Σχολή Θετικών Επιστημών

Τμήμα Φυσικής
Τομέας Πυρηνικής Φυσικής και Στοιχειωδών Σωματιδίων

Μεταπτυχιακή εργασία

Κβαντική σκέδαση σε αλυσίδα Τ-τύπου

Κουτσοκώστας Γεώργιος

Αθήνα, 2018

Περιεχόμενα

Περίληψη

Τα καθοδηγούμενα (*driven*) κβαντικά συστήματα έχουν ξεχωριστό ενδιαφέρον στη σύγχρονη φυσική καθώς επιτρέπουν την επίδραση με ελεγχόμενο τρόπο σε ένα κβαντικό σύστημα μέσω μίας εξωτερικής διέγερσης. Με αυτό τον τρόπο είναι εφικτός ο σχεδιασμός διατάξεων με προκαθορισμένες ιδιότητες διέλευσης.

Στην παρούσα εργασία μελετάμε μία αλυσίδα T-τύπου που περιγράφει την σύζευξη μίας κβαντικής τελείας με ένα άπειρο κυματοδηγό, θεωρώντας ότι αυτή είναι χρονικά εξαρτώμενη. Εστιάζουμε στην μεταβολή του συντελεστή διέλευσης καθώς αλλάζουν οι παράμετροι της τελείας. Δείχνουμε ότι η διάταξη υποστηρίζει ζεύγος συντονισμών *Fano* σε ενέργειες που καθορίζονται τόσο από τις δέσμιες καταστάσεις της αντίστοιχης στατικής διάταξης όσο και από τον νόμο καθοδήγησης. Χρησιμοποιώντας την πρόσφατα δημοσιευμένη Θεωρία Διαδοτών Γεωμετρικών Φάσεων (*GPPA*) μπορούμε να κατανοήσουμε τον φυσικό μηχανισμό που οδηγεί στην δημιουργία των συντονισμών *Fano*. Έτσι ανοίγει ο δρόμος για την διαχείριση αυτών των συντονισμών ώστε να επιτευχθεί ενδιαφέρουσα πολυμορφία στην συμπεριφορά του συντελεστή διέλευσης.

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Πρόλογος

Τα τελευταία χρόνια υπάρχει έντονο ενδιαφέρον για την μελέτη κβαντικών συστημάτων που εξαρτώνται από το χρόνο. Αυτά βρίσκουν εφαρμογή σε πληθώρα προβλημάτων που άπτονται της φυσικής ψυχρών ατόμων, του ελέγχου ιδιοτήτων κβαντικών τελειών ή τοπολογικών μονωτών κ.α. Ένα θεμελιώδες ερώτημα σε αυτή τη κατεύθυνση είναι η μελέτη της απόκρισης του συστήματος στην επίδραση περιοδικού δυναμικού ή παλμών με πιθανές εφαρμογές στην διαχείριση Κβαντικής Πληροφορίας.

Πιο συγκεκριμένα, συστήματα υπό την επίδραση χρονικά εξαρτώμενου καθοδηγητικού όρου (*driving*), έχουν προκαλέσει έντονο θεωρητικό και πειραματικό ερευνητικό ενδιαφέρον καθώς επιτρέπουν τον έλεγχο θεμελιωδών ιδιοτήτων τους. Επίσης αυτά τα συστήματα είναι κατάλληλα για τη μελέτη των κβαντικών συντονισμών που έχουν αρκετές εφαρμογές. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον σε αυτή την κατεύθυνση παρουσιάζουν οι συντονισμοί τύπου *Fano* χαρακτηριζόμενοι από μία απότομη πτώση του συντελεστή διέλευσης που μπορεί να φτάσει σε μηδενισμό και επομένως σε ολική ανάκλαση του εισερχόμενου κύματος.

Σε αυτή την εργασία παρουσιάζεται μία μελέτη του συντελεστή διέλευσης σε κβαντική αλυσίδα T-τύπου καθώς και των συντονισμών που αυτή η διάταξη εμφανίζει. Στο κεφάλαιο 1 γίνεται αναφορά σε μη διαταρακτικές μεθόδους επίλυσης χρονοεξαρτώμενων κβαντικών συστημάτων και ειδικότερα στη μέθοδο *Floquet*. Στα κεφάλαια 2 και 3 παρουσιάζεται η μέθοδος *GPPA*, μέσω της οποίας δίνεται η ερμηνεία των εν λόγω συντονισμών. Τέλος στο κεφάλαιο 4 μελετάμε το πρόβλημα μίας κβαντικής τελείας που ενώνεται με μία αλυσίδα απείρων σημείων και αναλύονται οι συντονισμοί του συντελεστή διέλευσης για διάφορες τιμές του παραμετρικού χώρου.

1.2 Μεθοδολογίες επίλυσης κβαντικών συστημάτων που εξαρτώνται από το χρόνο

Συνήθως το χρονικά εξαρτώμενο πρόβλημα *Schrödinger* επιλύεται είτε με χρήση διαταρακτικών μεθόδων, εάν το χρονικά μεταβαλλόμενο δυναμικό είναι ασθενές, είτε με χρήση της θεωρίας *Floquet* εαν η Χαμιλτονιανή είναι περιοδική συνάρτηση του χρόνου. Στην γενικότερη περίπτωση, δηλ. όταν το χρονικά εξαρτώμενο σύστημα δεν ανήκει σε καμία από τις δύο αυτές περιπτώσεις, η επίλυση γίνεται με κατάλληλες αριθμητικές μεθόδους.

Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με περιοδικά μεταβαλλόμενη Χαμιλτονιανή και επομένως μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την θεωρία *Floquet*, μετατρέποντας την χρονικά εξαρτώμενη διαφορική εξίσωση σε σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων για τα λεγόμενα κανάλια *Floquet*. Αυτά περιγράφουν τις αρμονικές συνιστώσες της κυματοσυνάρτησης του συστήματος που μελετάμε (βλέπε ενότητα 1.3). Το μεγάλο πλεονέκτημα της Θεωρίας *Floquet* είναι ότι η σύγκλιση στην ακριβή λύση είναι εκθετικά γρήγορη ως προς τον αριθμό των καναλιών που συμπεριλαμβάνουμε στην αντίστοιχη σειρά. Έτσι είναι εφικτός ο έλεγχος του σφάλματος αποκοπής οδηγώντας σε, πρακτικά, ακριβή λύση.

Από την άλλη μεριά, η Θεωρία *Floquet* έχει ένα μειονέκτημα που αφορά τη σύνδεση του χρονικά μεταβαλλόμενου προβλήματος με το αντίστοιχο στατικό πρόβλημα, επειδή οι κυματοσυναρτήσεις των καναλιών *Floquet* ορίζονται στον χώρο συχνοτήτων και όχι στον χρόνο. Έτσι δυσχεραίνεται η φυσική ερμηνεία της φαινομενολογίας των χρονικά μεταβαλλόμενων συστημάτων και η αναγνώριση των υποκείμενων μηχανισμών.

Για να καλυφθεί αυτό το κενό αναπτύχθηκε πρόσφατα η μέθοδος *GPPA* που βελτιώνει την αδιαβατική θεωρία διαταραχών, επιτυγχάνοντας ικανοποιητική περιγραφή των ιδιοτήτων ενός χρονοεξαρτώμενου συστήματος ενώ παράλληλα επιτρέπει τη σύνδεση με μεταβάσεις μεταξύ ιδιοκαταστάσεων του 'στιγμιαία' στατικού προβλήματος, ρίχνοντας φως στους μηχανισμούς που οδηγούν στην παρατηρούμενη φαινομενολογία.

Στην παρούσα εργασία θα στηριχτούμε στις δύο αυτές μεθόδους δηλ. *Floquet* και *GPPA*, για να μελετήσουμε και να ερμηνεύσουμε το πρόβλημα σκέδασης σε μία αλυσίδα T-τύπου με χρονικά μεταβαλλόμενη σύζευξη τελείας - κυματοδηγού.

1.3 Θεωρία *Floquet*

Στη θεωρία *Floquet*, όπως είπαμε στην προηγούμενη παράγραφο, η χρονικά εξαρτημένη εξίσωση *Schrödinger*, για χαμιλτονιανή περιοδική στο χρόνο, μετατρέπεται σε αλγεβρική. Αυτό γίνεται με τη βοήθεια του θεωρήματος *Floquet* που λέει ότι η λύση της εξίσωσης *Schrödinger*:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H(x,t)\psi(x,t), \tag{1.3.1}$$

αν η χαμιλτονιανή είναι περιοδική στο χρόνο (με περίοδο T):

$$\hat{H}(x,t+T) = H(x,t) \tag{1.3.2}$$

μπορεί να γραφτεί σαν:

$$\psi(x,t) = \sum_n \Phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_F+n\hbar\omega)t}, \qquad \omega = \frac{2\pi}{T} \tag{1.3.3}$$

όπου η σταθερά E_F λέγεται ενέργεια *Floquet* (σε προβλήματα σκέδασης είναι η αρχική ενέργεια) και τα n καλούνται κανάλια *Floquet*. Κάνοντας ανάπτυγμα *Fourier*:

$$H(x,t) = \sum_n \tilde{H}_n(x) e^{-in\omega t} \quad , \quad \tilde{H}_n(x) = \frac{1}{T}\int_0^T dt e^{-in\omega t} H(x,t) \tag{1.3.4}$$

βρίσκουμε:

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \sum_n \left(E_F + n\hbar\omega\right)\Phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_F+n\hbar\omega)t} \tag{1.3.5}$$

ενώ για το δεξί μέλος έχουμε

$$\begin{aligned} H(x,t)\psi(x,t) &= H(x,t)\sum_n \Phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_F+n\hbar\omega)t} \\ &= \sum_n\sum_m \tilde{H}_m(x)\Phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar}[E_F+(n+m)\hbar\omega]t} \\ &= \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}(E_F+n\hbar\omega)t}\sum_m \tilde{H}_{n-m}(x)\Phi_m(x) \end{aligned} \tag{1.3.6}$$

και άρα:

$$\left(E_F + n\hbar\omega\right)\Phi_n(x) = \sum_m \tilde{H}_{n-m}(x)\Phi_m(x) \tag{1.3.7}$$

Επομένως το χρονικά εξαρτημένο πρόβλημα (1.3.1) μετατράπηκε σε στατικό.

Υπάρχουν αρκετοί τρόποι για να μετατραπεί η εξίσωση αυτή σε αλγεβρική. Σε ένα πρόβλημα σκέδασης, για παράδειγμα, διαλέγουμε μία μορφή για την $\Phi_n(x)$ με κατάλληλες ασυμπτωτικές συνθήκες και οι εξισώσεις *Floquet* βρίσκονται με εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών στα σημεία σκέδασης.

Οι αλγεβρικές εξισώσεις *Floquet* λύνονται με πολλούς τρόπους. Το κύριο πλεονέκτημα της θεωρίας $Floquet$ είναι ότι μπορεί να εφαρμοστεί σε πληθώρα κβαντικών συστημάτων που εξαρτώνται περιοδικά από το χρόνο αλλά έχει το μειονέκτημα ότι δεν μπορεί να εφαρμοστεί αν το $driving$ είναι μη περιοδικό. Επίσης ένα ακόμη μειονέκτημα είναι ότι περνάμε σε μία πιο ενεργή περιγραφή του συστήματος (με τα κανάλια $Floquet$). Παρόλα αυτά είναι εξαιρετικά ακριβής και θα την χρησιμοποιήσουμε και εμείς σε αυτή την εργασία μαζί με τη διαταραχτική $GPPA$. Αυτό γίνεται γιατί η αναλυτική τεχνική, στις παραμετρικές περιοχές που ισχύει η διαταραχτική θεωρία, μας βοηθάει στην καλύτερη κατανόηση του φυσικού προβλήματος και η $Floquet$ μας βοηθάει να ελέγχουμε τη σύγκλιση της $GPPA$.

Κεφάλαιο 2

Η Θεώρηση Διαδοτών Γεωμετρικών Φάσεων

2.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο θα εισάγουμε τη Θεώρηση Διαδοτών Γεωμετρικών Φάσεων (*Geometrical Phase Propagator Approach* ή *GPPA*). Αυτή βασίζεται σε μία επανάθροιση των συνεισφορών δυνητικών διαδικασιών που ξεκινούν και τελειώνουν στην ίδια κατάσταση.

Θα δείξουμε επίσης πως μπορούμε μέσω της *GPPA* να κατανοήσουμε καλύτερα τους κβαντικούς συντονισμούς και πως μπορούμε να υπολογίσουμε χρόνους ζωής. Ο υπολογισμός της Μήτρας Σκέδασης ακολουθεί στο επόμενο κεφάλαιο.

2.2 Η *GPPA* αναλυτικά

2.2.1 Κατάστρωση του προβλήματος

Ξεκινάμε παρουσιάζοντας τα βασικά χαρακτηριστικά της *GPPA*. Ξεκινάμε από την χρονικά εξαρτημένη εξίσωση *Schrödinger*:

$$i\hbar\partial_t \left|\psi_t\right\rangle = \hat{H}\left(t\right)\left|\psi_t\right\rangle \quad ; \quad \hat{H}\left(t\right) = \hat{H}_0 + \hat{H}_I\left(t\right) \tag{2.2.1}$$

θεωρώντας ότι: $\hat{H}_I\left(t\rightarrow\pm\infty\right)=0$. Αναπτύσσουμε την $\left|\psi_t\right\rangle$ στη χρονικά εξαρτημένη βάση:

$$\left|\psi_t\right\rangle = \sum_n \alpha_n\left(t\right)\left|n_t\right\rangle \quad ; \quad \hat{H}\left(t\right)\left|n_t\right\rangle = E_n\left(t\right)\left|n_t\right\rangle \tag{2.2.2}$$

όπου $E_n\left(t\right)$ οι προσωρινές ιδιοτιμές της ενέργειας. Ο δείκτης n μετρά δέσμιες καταστάσεις και αν υπάρχει και συνεχές κομμάτι θα δηλωθεί ρητά. Εισάγουμε εδώ το μη διαγώνιο πλάτος μετάβασης Φ_{nm} το οποίο καλείται και $''flip''$:

$$\Phi_{nm}(t) = \langle n_t| i\hbar\partial_t |m_t\rangle - \langle n_t| i\hbar\partial_t |n_t\rangle \delta_{n,m} \quad ; \quad \bar{E}_n(t) = E_n(t) - \langle n_t| i\hbar\partial_t |n_t\rangle \tag{2.2.3}$$

η εξίσωση (2.2.1) γίνεται:

$$i\hbar\dot{\alpha}_n(t) + \sum_m \Phi_{nm}(t)\,\alpha_m(t) = \bar{E}_n(t)\,\alpha_n(t)\,. \tag{2.2.4}$$

η λύση της οποίας μπορούμε να δείξουμε ότι είναι ένα διατεταγμένο εκθετικό:

$$\alpha_n(t) = \sum_m \left(\hat{T}e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \hat{M}(\tau)}\right)_{nm} \alpha_m(t_i) \quad ; \quad M_{nm}(t) = \bar{E}_n(t)\,\delta_{n,m} - \Phi_{nm}(t) \tag{2.2.5}$$

το οποίο χωρίζεται ως εξής:

$$\left(\hat{T}e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \hat{M}(\tau)}\right)_{nm} = e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \bar{E}_n}\left(\hat{T}e^{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \hat{\varphi}(\tau)}\right)_{nm} \equiv e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \bar{E}_n} X_{nm}(t,t_i) \tag{2.2.6}$$

όπου

$$\varphi_{nm}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \bar{E}_n}\,\Phi_{nm}(t)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \bar{E}_m} \tag{2.2.7}$$

Επομένως τελικά η λύση της εξίσωσης *Schrödinger* γράφεται ως:

$$|\psi_t\rangle = \sum_{n,m} e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \bar{E}_n(\tau)} X_{nm}(t,t_i)\alpha_m(t_i)\,|n_t\rangle \tag{2.2.8}$$

όπου

$$X_{nm}(t,t_i) = \delta_{nm} + \frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} dt_1 \varphi_{nm}(t_1) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_k \int\limits_{t_i}^{t} dt_2 \int\limits_{t_i}^{t_2} dt_1 \varphi_{nk}(t_2)\varphi_{km}(t_1) + \ldots \tag{2.2.9}$$

2.2.2 Αναδιάταξη των μη διαγώνιων όρων της σειράς

Χωρίς βλάβη της γενικότητας θεωρούμε $\alpha_m(t_i) = \delta_{m,q}$ όπου ο δείκτης $''q''$ δηλώνει την αρχική κατάσταση (όχι απαραίτητα την θεμελιώδη). Χωρίζουμε την εξίσωση (2.2.8) σε δύο κομμάτια:

$$|\psi_t\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \bar{E}_n} X_{nq}(t,t_i)|n_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \bar{E}_q} X_{qq}(t,t_i)|q_t\rangle + \sum_{n\neq q} e^{-\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \bar{E}_n} X_{nq}(t,t_i)|n_t\rangle \tag{2.2.10}$$

Ξεκινάμε με τα μη διαγώνια στοιχεία:

$$X_{nq} = \left(\hat{T} e^{\frac{i}{\hbar}\int\limits_{t_i}^{t} d\tau \hat{\varphi}(\tau)}\right)_{nq} = \sum_{r=1}^{\infty} X_{nq}^{(r)}, n \neq q \tag{2.2.11}$$

όπου

$$X_{nq}^{(r)} = \sum_{n_1,\dots,n_{r-1}} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^r \int\limits_{t_i}^{t} dt_r \int\limits_{t_i}^{t_r} dt_{r-1} \dots \int\limits_{t_i}^{t_2} dt_1 \varphi_{nn_{r-1}}(t_r)\, \varphi_{n_{r-1}n_{r-2}}(t_{r-1}) \dots \varphi_{n_1 q}(t_1) \tag{2.2.12}$$

Το κύριο χαρακτηριστικό της $GPPA$ είναι μία αναδιάταξη των όρων της παραπάνω σειράς έτσι ώστε να πάρουμε μία δομή που να περιέχει τον αριθμό των μεταπτώσεων μεταξύ των καταστάσεων. Ξεκινάμε από τον πρώτο και τον τρίτο όρο:

$$X_{nq}^{(1)} = \frac{i}{\hbar} \int\limits_{t_i}^{t} dt_1 \varphi_{nq}(t_1) \tag{2.2.13}$$

και

$$X_{nq}^{(3)} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \sum_{n_1,n_2} \int\limits_{t_i}^{t} dt_3 \int\limits_{t_i}^{t_3} dt_2 \int\limits_{t_i}^{t_2} dt_1 \varphi_{nn_2}(t_3) \varphi_{n_2 n_1}(t_2)\, \varphi_{n_1 q}(t_1) \tag{2.2.14}$$

Αν απομονώσουμε τη συνεισφορά του $n_2 = q$ στον όρο τρίτης τάξης και την συνδυάσουμε με τον όρο πρώτης τάξης βρίσκουμε:

$$X_{nq}^{(1)} \to \frac{i}{\hbar} \int\limits_{t_i}^{t} dt_3 \varphi_{nq}(t_3) \left[1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{n_1} \int\limits_{t_i}^{t_3} dt_2 \int\limits_{t_i}^{t_2} dt_1 \varphi_{qn_1}(t_2)\, \varphi_{n_1 q}(t_1)\right] \tag{2.2.15}$$

Αν επαναλάβουμε την διαδικασία στους όρους ανώτερης τάξης εισάγουμε τον επόμενο επανορισμό του πλάτους:

$$X_{nq}^{(1)'} = \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} dt_1 \varphi_{nq}(t_1) X_{qq}(t_1, t_i) \tag{2.2.16}$$

Αντίστοιχα πράγματα μπορούν να γίνουν και με τον όρο δεύτερης και τέταρτης τάξης:

$$\begin{aligned} X_{nq}^{(2)} \to & \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{n_3} \int_{t_i}^{t} dt_4 \int_{t_i}^{t_4} dt_3 \varphi_{nn_3}(t_4) \varphi_{n_3 q}(t_3) \\ & \times \left[1 + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{n_1} \int_{t_i}^{t_3} dt_2 \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \varphi_{qn_1}(t_2) \varphi_{n_1 q}(t_1)\right] \end{aligned} \tag{2.2.17}$$

και άρα:

$$X_{nq}^{(2)'} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_{n_1} \int_{t_i}^{t} dt_2 \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \varphi_{nn_1}(t_2) \varphi_{n_1 q}(t_1) X_{qq}(t, t_i) \tag{2.2.18}$$

Αν επαναλάβουμε τη διαδικασία για όλους τους όρους του αναπτύγματος (2.2.11) βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} X_{nq} = & \sum_{r=1}^{\infty} X_{nq}^{(r)'} \\ = & \sum_{r=1}^{\infty} \sum_{n_1 \neq q, \ldots, n_{r-1} \neq q} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^r \int_{t_i}^{t} dt_r \int_{t_i}^{t_r} dt_{r-1} \ldots \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \varphi_{nn_{r-1}}(t_r) \varphi_{n_{r-1} n_{r-2}}(t_{r-1}) \ldots \\ & \times \varphi_{n_1 q}(t_1) X_{qq}(t_1, t_i) \end{aligned} \tag{2.2.19}$$

Η αναδιάταξη μπορεί να συνεχιστεί θεωρώνατς τον πρώτο και τον τρίτο όρο του ανωτέρου αναπτύγματος:

$$X_{nq}^{(1)'} = \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} dt_1 \varphi_{nq}(t_1) X_{qq}(t_1, t_i) \tag{2.2.20}$$

και

$$X_{nq}^{(3)'} = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^3 \sum_{n_1 \neq q, n_2 \neq q} \int_{t_i}^{t} dt_3 \int_{t_i}^{t_3} dt_2 \int_{t_i}^{t_2} dt_1 \varphi_{nn_2}(t_3) \varphi_{n_2 n_1}(t_2)\, \varphi_{n_1 q}(t_1)\, X_{qq}(t_1, t_i), \quad (2.2.21)$$

Αν απομονώσουμε από την εξίσωση (2.2.21) τον $n_1 = n$ όρο και τον συνδυάσουμε με την εξίσωση (2.2.20) παίρνουμε:

$$X_{nq}^{(1)'} \rightarrow \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} dt_1 \left[1 + \sum_{n_2 \neq q} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_1}^{t} dt_3 \int_{t_1}^{t_3} dt_2 \varphi_{nn_2}(t_3)\, \varphi_{n_2 n}(t_2) \right] \varphi_{nq}(t_1)\, X_{qq}(t_1, t_i) \quad (2.2.22)$$

Κάνοντας τη διαδικασία για όλες τις τάξεις ορίζουμε το ακόλουθο 'ανακανονικοποιημένο' πλάτος:

$$X_{nq}^{(1)R} = \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} dt_1 X_{nn}^{[q]}(t, t_1)\, \varphi_{nq}(t_1)\, X_{qq}(t_1, t_i) \quad (2.2.23)$$

Εδώ ο παράγοντας $X_{nn}^{[n_1,..]}(t_b, t_a)$ δίνει το πλάτος πυκνότητας πιθανότητας ένα σύστημα που ξεκινάει τη χρονική στιγμή t_a από την κατάσταση n να καταλήξει στην ίδια κατάσταση τη χρονική στιγμή t_b χωρίς να περάσει από τις καταστάσεις $n_1, n_2, ...$. Επομένως μπορούμε να αποδώσουμε στο $X_{nq}^{(1)R}$ μια απλή φυσική εξήγηση: το σύστημα ξεκινάει από την κατάσταση $|q_{t_i}\rangle$ και παραμένει σε αυτή με πλάτος πυκνότητας πιθανότητας $X_{qq}(t_1, t_i)$ μέχρι τη χρονική στιγμή t_1 όπου μεταβαίνει στην κατάσταση $|n_{t_1}\rangle$ με πλάτος $\varphi_{nq}(t_1)$. Εν συνεχεία παραμένει σε αυτή την κατάσταση με πλάτος $X_{nn}^{[q]}(t, t_1)$ μέχρι τον τελικό χρόνο t. Με παρόμοιο τρόπο εφαρμόζουμε τα παραπάνω σε όλους τους όρους του αναπτύγματος (2.2.19):

$$X_{nq}(t, t_i) = \sum_{r=1}^{\infty} X_{nq}^{(r)R}(t, t_i) \quad (2.2.24)$$

όπου

$$\begin{aligned} X_{nq}^{(r)R}(t, t_i) = & \sum_{n_{r-1} \neq ... = n_1 \neq q, n} \left(\frac{i}{\hbar}\right)^r \int_{t_i}^{t} dt_r \int_{t_i}^{t_r} dt_{r-1} ... \int_{t_i}^{t_2} dt_1 X_{nn}^{[n_{r-1},...,q]}(t, t_r) \\ & \times \varphi_{nn_{r-1}}(t_r)\, X_{n_{r-1} n_{r-1}}^{[n_{r-2},...,q]}(t_r, t_{r-1}) ... X_{n_1 n_1}^{[q]}(t_2, t_1)\, \varphi_{n_1 q}(t_1) \\ & \times X_{qq}(t_1, t_i). \end{aligned} \quad (2.2.25)$$

Το ότι ο υπολογισμός μη διαγωνίων όρων ανάγεται σε υπολογισμό διαγωνίων όρων είναι το κύριο συστατικό της $GPPA$

Η διαταρακτική θεωρία, όπως και η Αδιαβατική Θεωρία Διαταραχών (ΑΘΔ), βασίζεται στα πλάτη μετάβασης (που θα καλούμε $''flips''$ από εδώ και στο εξής):

$$\Phi_{nm} = \langle n_t| i\hbar\partial_t |m_t\rangle = \frac{\langle n_t| i\hbar\partial_t \hat{H}_I\left(t\right)|m_t\rangle}{E_m\left(t\right) - E_n\left(t\right)}\left(n \neq m\right) \tag{2.2.26}$$

Από εδώ βλέπουμε ότι, όπως και στην ΑΘΔ, δεν πρέπει να υπάρχει *level crossing* και εκφυλισμός των δέσμιων καταστάσεων. Επίσης πρέπει τα $''flips''$ να είναι σχετικά μικρά.

Για ένα σύστημα με πεπερασμένο αριθμό δέσμιων καταστάσεων η σειρά (2.2.24) τερματίζεται, π.χ. για σύστημα δύο καταστάσεων (προβλήματα τύπου *Landau-Zener*) υπάρχει μόνο ένας όρος:

$$X_{10}(t_f, t_i) = X_{10}^{(r=1)R}(t_f, t_i) = \frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t_f} dt_1 \underbrace{X_{11}^{[0]}(t_f, t_1)}_{=1}\varphi_{10}(t_1)X_{00}(t_1, t_i) \tag{2.2.27}$$

Αν αναπτύξουμε το $X_{nn}^{[n_1,\ldots]}$ σε δυνάμεις των "$flips$" παίρνουμε την ΑΘΔ.

Αν υπάρχει συνεχές φάσμα συνεισφέρει μέσω των αντίστοιχων ολοκληρωμάτων.

Κλείνοντας δεν διατάξαμε μια σειρά που δεν μπορεί να διαταχτεί αλλά την αλλάξαμε με ένα τρόπο που μπορεί και να τερματίζεται για υπεραδιαβατικές μεταβάσεις. Επίσης ο υπολογισμός μη διαγωνίων όρων ανάγεται σε υπολογισμό διαγωνίων όρων. Σχετικά με τα διαγώνια στοιχεία θα δούμε στην επόμενη ενότητα ότι οι διάφορες συνεισφορές αθροίζονται σε μη τετριμμένα εκθετικά.

2.2.3 Εκθετικοποίηση του πλάτους X_{nn}

Παίρνουμε τον πρώτο όρο της (2.2.10) (που θα συμβολίζουμε σαν X_{nn} από εδώ και στο εξής). Αυτός αντιστοιχεί στην πιθανότητα το σύστημά μας να βρίσκεται αρχικά ($t = t_i = -T \to -\infty$) σε μία συγκεκριμένη κατάσταση (όχι απαραίτητα δέσμια) και να καταλήγει τελικά ($t = t_f = T \to +\infty$) στη ίδια κατάσταση (χρόνος ζωής). Έτσι, χωρίς να θέσουμε ακόμη $t = t_f$, έχουμε:

$$f_n\left(t\right) = \langle n_t| \hat{T}e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t} dt\hat{H}(t)}|n_{t_i}\rangle = \langle n_t| \psi_t\rangle \tag{2.2.28}$$

από όπου βρίσκουμε :

$$f_n\left(t\right) = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t} dt'\bar{E}_q(t')}\langle n| \hat{T}e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t} dt'\hat{\varphi}(t')}|n\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^{t} dt'\bar{E}_n(t')}X_{nn}\left(t, t_i\right) \tag{2.2.29}$$

Αναπτύσσοντας σε δυνάμεις του φ βολεύει να εισάγουμε το πλάτος:

$$\tilde{\Phi}_{nm} = e^{-\frac{i}{\hbar}t\varepsilon_n}\varphi_{nm}e^{+\frac{i}{\hbar}t\varepsilon_m} \quad , \quad \varepsilon_n = \frac{1}{t_f - t_i}\int_{t_i}^{t_f} dt\bar{E}_n(t) \equiv \left\langle \bar{E}_n(t)\right\rangle \tag{2.2.30}$$

και το ανάπτυγμα $Fourier$:

$$B_{nm}(\nu) = \frac{1}{\sqrt{2T}}\int_{-T}^{T} dt\tilde{\Phi}_{nm}(t)\, e^{i\omega\nu t}, \quad \tilde{\Phi}_{nm}(t) = \frac{1}{\sqrt{2T}}\sum_{\nu=-\infty}^{\infty} B_{nm}(\nu)\, e^{-i\omega\nu t}; \;\; \omega = \pi/T \tag{2.2.31}$$

Εισάγοντας ένα μικρό φανταστικό μέρος για να εξασφαλίσουμε αιτιατή διάδοση και σύγκλιση στο όριο $t_i = -T \to -\infty$ βρίσκουμε:

$$X_{nn} = \sum_{r=1}^{\infty}\frac{(-1)^r}{(2T)^{r/2}}\sum_{n_1,\ldots,n_{r-1}}\sum_{\nu_1,\ldots,\nu_r=-\infty}^{\infty}\frac{B_{nn_{r-1}}(\nu_r)\ldots B_{n_1 n}(\nu_1)\, e^{-\frac{i}{\hbar}t(\hbar\omega(\nu_1+\ldots+\nu_r)+i\eta)}}{(\hbar\omega(\nu_1+\ldots+\nu_r)+i\eta)\ldots(\hbar\omega\nu_1-(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n)+i\eta)} \tag{2.2.32}$$

Αμέσως βλέπουμε ότι στην παραπάνω έκφραση υπάρχουν απλοί πόλοι (π.χ. όταν $\nu_1+\ldots+\nu_r=0$) αλλά και ανώτερης τάξης. Για να συνεχίσουμε απομονώνουμε όλους τους πόλους και υπολογίζουμε τη λογαριθμική παράγωγο $-i\hbar\partial_t \ln X_{nn}(t)$ που προκύπτει πεπερασμένη. Θα κάνουμε την απόδειξη μέχρι τέταρτη τάξη.

Γράφουμε την εξίσωση (2.2.32) μέχρι τέταρτη τάξη:

$$\begin{aligned}
&X_{nn}(t,t_i) = 1 - \tfrac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1 n}(\nu_2)e^{-\frac{i}{\hbar}t(\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)+i\eta)}}{\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)[\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)+i\eta]}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^{3/2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3=-\infty}^{\infty}\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1 n_2}(\nu_2)B_{n_2 n}(\nu_3)e^{-\frac{i}{\hbar}t(\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)+i\eta)}}{\left(\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right)\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)[\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)+i\eta]}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^2}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}\\
&\times\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1 n_2}(\nu_2)B_{n_2 n_3}(\nu_3)B_{n_3 n}(\nu_4)e^{-\frac{i}{\hbar}t(\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)+i\eta)}}{\left(\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right)\left(\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right)\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)[\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)+i\eta]}\\
&+\ldots
\end{aligned} \tag{2.2.33}$$

Απομονώνουμε όλους τους πόλους:

$$
\begin{aligned}
&X_{nn}(t,t_i) = 1 - \tfrac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n}(\nu_2)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)(i\eta)}\\
&-\tfrac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n}(\nu_2)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2)t}}{\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)[\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)]}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^{3/2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3,0}\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n}(\nu_3)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)(i\eta)}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^{3/2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3,0})\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n}(\nu_3)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)t}}{\left[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)[\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)]}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0}\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right]\left[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)(i\eta)}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0})\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)t}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right]\left[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)[\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)]}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\delta_{\nu_3+\nu_4,0}\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left(\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_3-i\eta\right)(-i\eta)\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)(i\eta)}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0}\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right][-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)(i\eta)}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_3+\nu_4,0})\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{-i\omega(\nu_3+\nu_4)t}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right](-i\eta)\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)[\hbar\omega(\nu_3+\nu_4)]}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0})\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{-\frac{i}{\hbar}t\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right][-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)[\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)]}\\
&+\ldots
\end{aligned}
\tag{2.2.34}
$$

Υπολογίζουμε τη χρονική παράγωγο αυτής της έκφρασης:

$$
\begin{aligned}
&-i\hbar\dot{X}_{nn}(t,t_i) = \tfrac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n}(\nu_2)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&+\tfrac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n}(\nu_2)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2)t}}{\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^{3/2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3,0}\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n}(\nu_3)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&-\tfrac{1}{(2T)^{3/2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3,0})\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n}(\nu_3)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)t}}{\left[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^2}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0}\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right]\left[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^2}\sum_{n_1\neq n,n_2,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0})\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)t}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right]\left[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^2}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\delta_{\nu_3+\nu_4,0}\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left(\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_3-i\eta\right)(-i\eta)\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^2}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0}\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right]\left[-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^2}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_3+\nu_4,0})\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{-i\omega(\nu_3+\nu_4)t}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right](-i\eta)\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&+\tfrac{1}{(2T)^2}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0})\\
&\times\tfrac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{-\frac{i}{\hbar}t\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)}}{\left[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\right]\left[-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)\right]\left(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\right)}\\
&+\ldots
\end{aligned}
\tag{2.2.35}
$$

Υπολογίζουμε τη λογαριθμική παράγωγο:

$$
-i\hbar\frac{\partial_t X_{nn}(t,t_i)}{X_{nn}(t,t_i)} = -i\hbar\partial_t X_{nn}(t,t_i)\sum_{a=0}^{\infty}\left[1-X_{nn}(t,t_i)\right]^a \tag{2.2.36}
$$

ή

$$
\begin{aligned}
&-i\hbar\frac{\partial_t X_{nn}(t,t_i)}{X_{nn}(t,t_i)} = (2.2.35)\times\Bigg[1+\frac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n}(\nu_2)e^{\frac{t\eta}{\hbar}}}{\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)(i\eta)} \\
&+\frac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n}(\nu_2)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2)t}}{\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)[\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)]}+\ldots\Bigg]
\end{aligned}
\tag{2.2.37}
$$

και κρατώντας όρους μέχρι τέταρτη τάξη βρίσκουμε:

$$
\begin{aligned}
&-i\hbar\frac{\partial_t X_{nn}(t,t_i)}{X_{nn}(t,t_i)} = \frac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n}(\nu_2)}{\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)} \\
&+\frac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n}(\nu_2)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2)t}}{\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)} \\
&-\frac{1}{(2T)^{3/2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3,0}\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n}(\nu_3)e}{\big[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\big]\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)} \\
&-\frac{1}{(2T)^{3/2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3,0}) \\
&\times\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n}(\nu_3)e^{-i\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)t}}{\big[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\big]\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)} \\
&+\frac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0} \\
&\times\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)}{\big[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\big]\big[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\big]\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)} \\
&+\frac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0}) \\
&\times\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)}{\big[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\big]\big[\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i\eta\big]\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)} \\
&+\frac{1}{(2T)^{2}}\sum_{n_1\neq n,n_2=n,n_3\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3,\nu_4=-\infty}^{\infty}(1-\delta_{\nu_1+\nu_2,0})(1-\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4,0}) \\
&\times\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)B_{n_2n_3}(\nu_3)B_{n_3n}(\nu_4)e^{-\frac{i}{\hbar}t\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3+\nu_4)}}{\big[\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i\eta\big][-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)]\big(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i\eta\big)} \\
&+\ldots
\end{aligned}
\tag{2.2.38}
$$

που είναι πεπερασμένη. Τελικά, αν ολοκληρώσουμε μέχρι τον τελικό χρόνο, βρίσκουμε:

$$
\int_{t_i}^{t_f} dt e^{-it\omega(\nu_1+\nu_2+\ldots+\nu_r)} = (t_f-t_i)\,\delta_{\nu_1+\nu_2+\ldots+\nu_r,0}
\tag{2.2.39}
$$

και έχουμε

$$
X_{nn}(t_f,t_i) = e^{\frac{i}{\hbar}(t_f-t_i)\gamma_n}
\tag{2.2.40}
$$

όπου

$$\begin{aligned}
\gamma_n &= \frac{1}{2T}\sum_{n_1\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2,0}\frac{B_{nn_1}(\nu_1)\,B_{n_1n}(\nu_2)}{\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_2-i0}\\
&-\frac{1}{(2T)^{3/2}}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n}\sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_3=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_1+\nu_2+\nu_3,0}\frac{B_{nn_1}(\nu_1)\,B_{n_1n_2}(\nu_2)\,B_{n_2q}(\nu_3)}{(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i0)}\\
&\times\frac{1}{(\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i0)}\\
&+\frac{1}{(2T)^2}\sum_{\nu_4,\nu_3,\nu_2,\nu_1=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_4+\nu_3+\nu_2+\nu_1,0}\sum_{n_1\neq n,n_2\neq n,n_3\neq n}\frac{1}{(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_1-i0)}\\
&\times\frac{B_{nn_3}(\nu_4)\,B_{n_3n_2}(\nu_3)\,B_{n_2n_1}(\nu_2)\,B_{n_1n}(\nu_1)}{(\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2)-i0)(\varepsilon_{n_3}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_1+\nu_2+\nu_3)-i0)}-\ldots
\end{aligned}\tag{2.2.41}$$

Επαναλαμβάνοντας την ίδια μεθοδολογία μπορούμε να υπολογίσουμε, όρο προς όρο, κάθε τάξη r. Το γενικό αποτέλεσμα είναι:

$$\begin{aligned}
\gamma_n &= \sum_{r=2}^{\infty}\gamma_n^{(r)}\\
\gamma_n^{(r)} &= \frac{(-1)^r}{(2T)^{r/2}}\sum_{n_1\neq n,..,n_{n-1}\neq n}\sum_{\nu_1,..,\nu_n=-\infty}^{\infty}\delta_{\sum_{\ell=1}^{r}\nu_\ell,0}\\
&\times\frac{B_{nn_1}(\nu_1)B_{n_1n_2}(\nu_2)...B_{n_{n-1}n}(\nu_r)}{\left(\varepsilon_{n_{n-1}}-\varepsilon_n-\hbar\omega\nu_r-i0\right)...(\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_n-\hbar\omega(\nu_2+...+\nu_r)-i0)}
\end{aligned}\tag{2.2.42}$$

Μία σημαντική παρατήρηση είναι ότι στο τελικό αποτέλεσμα στα αθροίσματα έχουμε πάντα $n_i\neq n$. Αυτό, αν θυμηθούμε και ότι τα B_{nm} είναι μη διαγώνια (βλέπε εξίσωση 2.2.3), μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η σειρά (2.2.42) τερματίζεται αν το σύστημα έχει πεπερασμένο αριθμό δέσμιων καταστάσεων. Έτσι π.χ. για ένα σύστημα δύο καταστάσεων:

$$\gamma_0=\frac{1}{2T}\sum_{\nu=-\infty}^{\infty}\frac{B_{01}(-\nu)B_{10}(\nu)}{\varepsilon_1-\varepsilon_0-\hbar\omega\nu-i0}\tag{2.2.43}$$

Μία άλλη ενδιαφέρουσα περίπτωση είναι η πιθανότητα ο παράγοντας γ_n να αποκτήσει θετικό φανταστικό μέρος καθώς τότε εμφανίζεται ένας μη τετριμμένος παράγοντας απόσβεσης. Για να συμβεί αυτό πρέπει είτε ο δείκτης n_i της εξίσωσης (2.2.42) να έχει συνεχές κομμάτι ή να υπάρχει εκφυλισμός ($\epsilon_n\approx\epsilon_{n'}$ με $n\neq n'$)

Τότε

$$|f_n(t_f)|^2=|X_{nn}(t_f,t_i)|^2=e^{-\frac{2}{\hbar}(t_f-t_i)|\mathrm{Im}\gamma_n|}\equiv e^{-(t_f-t_i)/\tau_n}\tag{2.2.44}$$

όπου $\tau_n = \hbar/2\mathrm{Im}\gamma_n$ είναι ο χρόνος ζωής της κατάστασης $|q_t\rangle$.

Κοιτώντας την εξίσωση (2.2.41) παρατηρούμε ότι, αν απομονώσουμε τη συνεισφορά που έρχεται από τους όρους $n_3 = n_1$ και $\nu_3 + \nu_2 = 0$ ο τέταρτης τάξης όρος ενώνεται με αυτόν της δεύτερης:

$$\begin{aligned} &\sum_{n_1 \neq n} \sum_{\nu_1=-\infty}^{\infty} \frac{B_{nn_1}(\nu_1) B_{n_1 n}(-\nu_1)}{\varepsilon_{n_1} - \varepsilon_n + \hbar\omega\nu_1 - i0} \rightarrow \\ &\sum_{n_1 \neq n} \sum_{\nu_1=-\infty}^{\infty} \frac{B_{nn_1}(\nu_1) B_{n_1 n}(-\nu_1)}{\varepsilon_{n_1} - \varepsilon_n + \hbar\omega\nu_1 - i0} \left[1 + \frac{1}{2T} \sum_{n_2 \neq n} \sum_{\nu_2=-\infty}^{\infty} \frac{B_{n_1 n_2}(\nu_2) B_{n_2 n_1}(-\nu_2)}{\varepsilon_{n_2} - \varepsilon_n + \hbar\omega(\nu_1+\nu_2) - i0} \right] \end{aligned} \tag{2.2.45}$$

Ομοίως μπορούμε να κάνουμε τη διαδικασία αυτή και σε όρους επόμενης τάξης. Το αποτέλεσμα είναι:

$$\gamma_n = \frac{1}{2T} \sum_{n_1} \sum_{\nu_1=-\infty}^{\infty} \frac{B_{nn_1}(\nu_1) B_{n_1 n}(-\nu_1)}{\varepsilon_{n_1} - \varepsilon_n - \delta\varepsilon_{n_1 n}(\nu_1) + \hbar\omega\nu_1 - i0} + O\left(B^3\right) \tag{2.2.46}$$

Η κυρίαρχη συνεισφορά στην ¨διόρθωση στην ενέργεια’ δίνεται από τη σχέση:

$$\delta\varepsilon_{n_1 n}(\nu_1) = \frac{1}{2T} \sum_{n_2 \neq n} \sum_{\nu_2=-\infty}^{\infty} \frac{B_{n_1 n_2}(\nu_2) B_{n_2 n_1}(-\nu_2)}{\varepsilon_{n_2} - \varepsilon_n + \hbar\omega(\nu_1 + \nu_2) - i0} + O\left(B^3\right) \tag{2.2.47}$$

Ας επισημάνουμε ένα σημείο ακόμη:

- Ο δείκτης n_1 στην διόρθωση της ενέργειας είναι πάντα διακριτός, αν είναι συνεχής τότε ο περιορισμός $n_1 \neq n$ είναι μέτρου μηδέν και δεν έχει νόημα.

Κεφάλαιο 3

Μήτρα σκέδασης

3.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο θα δούμε πως η $GPPA$ μπορεί να εφαρμοστεί για τον υπολογισμό της μήτρας σκέδασης (S_{fi}) σε καθοδηγούμενα κβαντικά συστήματα. Αν και η σκέδαση σε χρονικά εξαρτημένα δυναμικά έχει μελετηθεί διεξοδικά η περίπτωση αλυσίδων Τ-τύπου με χρονικά μεταβαλλόμενη ζεύξη τελείας - κυματοδηγού δεν έχει εξετασθεί στην υπάρχουσα βιβλιογραφία. Στην παρούσα εργασία θα αναλύσουμε τις ιδιότητες διέλευσης στο σύστημα αυτό χρησιμοποιώντας τις μεθόδους $Floquet$ και $GPPA$, εστιάζοντας στην ερμηνεία των εμφανιζόμενων συντονισμών καθώς και στον έλεγχο των ιδιοτήτων τους.

3.2 Υπολογισμός της μήτρας σκέδασης με τη βοήθεια της $GPPA$

Στην έκφραση (2.2.9) για τα πλάτη X_{nm} χρησιμοποιούμε τα αναπτύγματα $Fourier$ (2.2.31) και επαναλαμβάνουμε την διαδικασία της ενότητας 2.2.3. Το αποτέλεσμα είναι:

$$\begin{aligned} X_{nm}(t_f, t_i) = \delta_{nm} \\ &+ i\sqrt{2\pi}\sum_{\nu=-\infty}^{\infty} B_{nm}(\nu)\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m - \omega\nu) \\ &+ i\sum_{n_1}\sum_{\nu_2,\nu_1=-\infty}^{\infty} \frac{B_{nn_1}(\nu_2)B_{n_1m}(\nu_1)}{\varepsilon_{n_1} - \varepsilon_m - \omega\nu_1 - \delta\varepsilon_{n_1m}(\nu_1) - i0}\delta(\varepsilon_n - \varepsilon_m - \omega(\nu_2+\nu_1)) \\ &+ 0(B^3) \end{aligned} \tag{3.2.1}$$

όπου

$$\delta\varepsilon_{n_1 m}(\nu_1) = \frac{1}{2\pi}\sum_{n_2\neq n}\sum_{\nu_4,\nu_3=-\infty}^{\infty}\delta_{\nu_4+\nu_3=0}\frac{B_{n_1 n_2}(\nu_4)\, B_{n_2 n_1}(\nu_3)}{\varepsilon_{n_2}-\varepsilon_m-\hbar\omega(\nu_1+\nu_3)-i0}+O\left(B^3\right). \quad (3.2.2)$$

Ο υπολογισμός μας θα δίνει τη μήτρα σκέδασης και στα ελαστικά και στα ανελαστικά κανάλια ανεξαρτήτως αν το *driving* είναι περιοδικό ή όχι. Η γενική έκφραση είναι ($\hbar = 1$):

$$S_{fi} = e^{i(\varepsilon_f t_f - \varepsilon_i t_i)}\left\langle k_f \right| \psi(t_f)\rangle . \quad (3.2.3)$$

Ο δείκτης i δίνει την αρχική κατάσταση και ο δείκτης f την τελική. Με τη βοήθεια της εξίσωσης (2.2.8) βρίσκουμε:

$$S_{fi} = \sum_{n,m} e^{i(\varepsilon_f t_f - \varepsilon_i t_i) - i\int_{t_i}^{t_f} dt\bar{E}_n(t)} X_{nm}(t_f,t_i)a_m(t_i)b_n(t_f) \quad (3.2.4)$$

όπου

$$a_m(t_i) = \langle m(t_i)|\, k_i\rangle \quad , \quad b_n(t_f) = \langle k_f|\, n(t_f)\rangle . \quad (3.2.5)$$

Τα $X_{nm}(t_f,t_i)$ υπολογίζονται διαταρακτικά από τη σειρά (3.2.1).

- Μια απλή αναδιάταξη των όρων δίνει:

$$\begin{aligned} X_{nm}(t_f,t_i) &= \delta_{nm} \\ &+ i\sqrt{2\pi}\sum_{\nu=-\infty}^{\infty} B_{nm}(\nu)\delta(\varepsilon_n-\varepsilon_m-\omega\nu) \\ &+ i\sum_{n_1}\sum_{\nu,\nu_1=-\infty}^{\infty}\frac{B_{nn_1}(\nu-\nu_1)B_{n_1 m}(\nu_1)}{\varepsilon_{n_1}-\varepsilon_m-\omega\nu_1-\delta\varepsilon_{n_1 m}(\nu_1)-i0}\delta(\varepsilon_n-\varepsilon_m-\omega\nu) \\ &+ 0(B^3) \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

  Ο δείκτης ν δίνει τη συνεισφορά των ανελαστικών καναλιών.

- Οι εξισώσεις (3.2.4), (3.2.5), (3.2.6) και (3.2.2) είναι το υπόβαθρο για τον υπολογισμό της μήτρας σκέδασης με τη βοήθεια της *GPPA*.

- Τα B_{nm} θα πρέπει να είναι σχετικά μικρά για να συγκλίνει η θεωρία διαταραχών.

- Οι αρχικές και οι τελικές συνθήκες είναι επίπεδα κύματα:

$$\left\langle x \mid \psi_{t_{i,f}} \right\rangle = \frac{e^{ik_{i,f}x}}{\sqrt{2\pi}} \tag{3.2.7}$$

Κεφάλαιο 4

Κβαντική σκέδαση σε αλυσίδα Τ-τύπου

4.1 Εισαγωγή

4.1.1 Κβαντικές τελείες

Η ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας (χειρισμός της ύλης σε ατομικό ή μοριακό επίπεδο) έχει αυξηθεί τα τελευταία χρόνια λόγω των πολλών δυνατών τεχνολογικών εφαρμογών όπως στη φυσική ημιαγωγών και αλλού. Ένα κεντρικό θέμα στη νανοτεχνολογία είναι οι κβαντικές τελείες (*quantum dots*). Αυτές είναι πολύ μικρά "σωματίδια" (νανοκρύσταλλοι σε ημιαγώγιμο υλικό) με διάσταση μερικά νανόμετρα (συνήθως $2-6nm$) με οπτικές και ηλεκτρικές ιδιότητες διαφορετικές από αυτές των μεγαλύτερων σωματιδίων. Μερικές φορές αναφέρονται σαν τεχνητά άτομα, ένας όρος που δηλώνει ότι μπορούν να είναι αντικείμενα με δέσμιες καταστάσεις όπως τα άτομα. Οι κβαντικές τελείες έχουν μεταξύ άλλων πολλές εφαρμογές όπως στην κβαντική τεχνολογία και αλλού.

Μια ενδιαφέρουσα εφαρμογή των κβαντικών τελειών προκύπτει από την δυνατότητα τους να συνδεθούν με αγωγούς και να αποτελέσουν έτσι εργαλεία για την διαχείριση μετάδοσης πληροφορίας μέσω ελέγχου της διέλευσης κυματομορφών σε αγώγιμες διατάξεις.

δοτ.θπγ 

Σχήμα 4.1: Κβαντική τελεία

4.1.2 Κατασκευή του προβλήματος

Οι κβαντικές τελείες μελετώνται θεωρητικά σαν σημειακές οντότητες μηδενικής διάστασης ενώ οι αγωγοί σαν άπειρα ή ημιάπειρα αντικείμενα με έναν όρο 'αναπήδησης' (*hopping*) μεταξύ του *dot* και του αγωγού. Το απλούστερο σενάριο είναι ένα *dot* ανάμεσα σε δύο ημιάπειρους αγωγούς (σχήμα 4.2*a*), το οποίο έχει τετριμμένη συμπεριφορά στην χρονοανεξάρτητη σκέδαση μην εμφανίζοντας συντονισμούς στο συντελεστή διέλευσης. Ένα άλλο πιθανό σενάριο είναι ένα *dot* συνδεδεμένο με έναν άπειρο αγωγό σε ένα σημείο (σχήμα 4.2*b*). Σε αυτό το σύστημα, το οποίο λέγεται αλυσίδα Τ-τύπου θα επικεντρωθούμε σε αυτό το κεφάλαιο. Μπορεί να υπάρχουν και συστήματα με πολύπλοκη γεωμετρία εμπλέκοντας πολλές κβαντικές τελείες οι οποίες μπορούν να οδηγήσουν σε πιο σύνθετα προφίλ του συντελεστή διέλευσης. (σχήμα 4.2*c*).

Η γενική Χαμιλτονιανή του μοντέλου είναι :

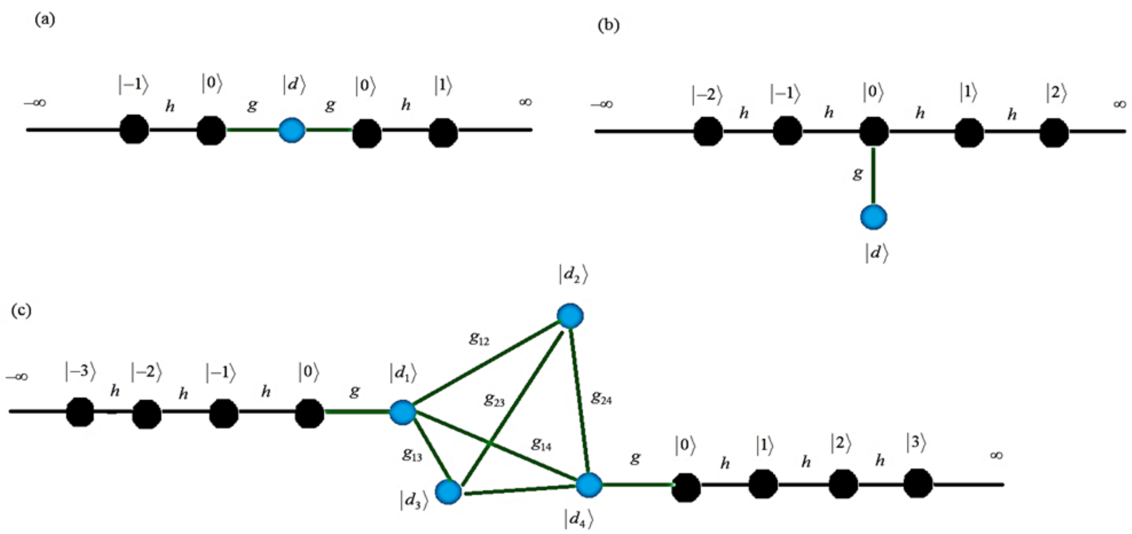
$$\hat{H} = \hat{H}_d + \sum_{a=1,2} \left(\hat{H}_a + \hat{H}_{d,a} \right) \tag{4.1.1}$$

όπου το *dot* δίνεται από τη Χαμιλτονιανή *tight-binding*:

$$\hat{H}_d = \sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i \left| d_i \right\rangle \left\langle d_i \right| - \sum_{1 \leq i < j \leq N} g_{ij} \left(\left| d_i \right\rangle \left\langle d_j \right| + \left| d_i \right\rangle \left\langle d_j \right| \right) \tag{4.1.2}$$

με το $|d_i\rangle$ να δηλώνει τις καταστάσεις του *dot*, ενώ ε_i είναι το δυναμικό στη θέση i και g_{ij} η αλληλεπίδραση ανάμεσα στο i και στο j *dot* με $g_{ij} = g_{ji} \in \mathbb{R}$. Για κάθε αγωγό έχουμε:

$$\hat{H}_a = -h \sum_{x_a=0}^{\infty} \left(\left| x_a + 1 \right\rangle \left\langle x_a \right| + \left| x_a \right\rangle \left\langle x_a + 1 \right| \right) \ , \quad h > 0 \tag{4.1.3}$$



Σχήμα 4.2: Διάφορες διατάξεις με κβαντικές τελείες.

με την αλληλεπίδραση να δίδεται από την εξίσωση:

$$\hat{H}_{d,a} = -g_a \left(|x_a = 0\rangle \langle d_a| + |d_a\rangle \langle x_a = 0| \right) \tag{4.1.4}$$

όπου g_a το *hopping*.

.

Για το τύπου-Τ *dot* μοντέλο του σχήματος 4.2b μπορούμε να γράψουμε:

$$\hat{H} = -h \sum_{x=-\infty}^{\infty} \left(|x+1\rangle \langle x| + |x\rangle \langle x+1| \right) + \varepsilon_d |d\rangle \langle d| - g_0 \left(|0\rangle \langle d| + |d\rangle \langle 0| \right). \tag{4.1.5}$$

Στόχος είναι να υπολογίσουμε την αγωγιμότητα G αυτού του συστήματος ή τον συντελεστή μετάβασης ο οποίος συνδέεται με την αγωγιμότητα με την σχέση

$$G = \frac{e^2}{\pi\hbar} T \tag{4.1.6}$$

Ένας τρόπος να δούμε συντονισμούς είναι η Χαμιλτονιανή να έχει εξάρτηση από τον χρόνο. Συγκεκριμένα για την περίπτωση του σχήματος 4.2a έχει δειχτεί ότι η αλλαγή $\varepsilon_d \to \varepsilon_d \cos(\omega t)$ δίνει συντονισμούς τύπου $Fano$ στο προφίλ του συντελεστή διέλευσης για συγκεκριμένα σετ παραμέτρων (π.χ. $h = 1, \varepsilon_d = -1, \omega = 3$).

Εμείς θα εισάγουμε την χρονική εξάρτηση στο *hopping* για το σύστημα του σχήματος 4.2b:

$$g_0 \to g_0 + g_1 \cos(\omega t). \tag{4.1.7}$$

Με αυτή την επιλογή αναμένουμε μη τετριμμένη συμπεριφορά στο προφίλ του συντελεστή διέλευσης. Θα λύσουμε και πάλι το πρόβλημα και με την $GPPA$ και με την $Floquet$.

4.2 Η χρονικά ανεξάρτητη Χαμιλτονιανή για την αλυσίδα T-τύπου

Αρχικά θα διατυπώσουμε τη Χαμιλτονιανή του προβλήματος T-τύπου χωρίς την ύπαρξη χρόνου και θα προσπαθήσουμε να βρούμε τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις αυτής. Η Χαμιλτονιανή επομένως γράφεται:

$$\hat{H} = -h \sum_{x=-\infty}^{\infty} \left(|x+1\rangle \langle x| + |x\rangle \langle x+1| \right) + \varepsilon_d |d\rangle \langle d| - (g_0) \left(|0\rangle \langle d| + |d\rangle \langle 0| \right) \tag{4.2.1}$$

Εμάς μας ενδιαφέρει να λύσουμε το πρόβλημα: $\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$

Για να προχωρήσουμε στην εύρεση των ιδιοκαταστάσεων και ιδιοτιμών της Χαμιλτονιανής θα χρησιμοποιήσουμε την βάση: $\{|x\rangle, |d\rangle\}$. Όταν επομένως προβάλλουμε την παραπάνω εξίσωση σε αυτή τη βάση προκύπτει το εξής σύστημα:

$$-h \left[\langle x+1 | \Psi \rangle + \langle x-1 | \Psi \rangle \right] - g_0 \delta_{x,0} \langle d | \Psi \rangle = E \langle x | \Psi \rangle \tag{4.2.2}$$

$$(\varepsilon_d - E) \langle d | \Psi \rangle = g_0 \langle 0 | \Psi \rangle \tag{4.2.3}$$

Προκειμένου τώρα να μετατραπεί το παραπάνω σύστημα εξισώσεων σε ένα αλγεβρικό πρέπει να θεωρήσουμε μια μορφή την οποία θα παίρνει η κυματοσυνάρτηση. Στην περίπτωση που ψάχνουμε αν το σύστημα επιδέχεται ως λύσεις δέσμιες καταστάσεις (κυματοσυναρτήσεις οι οποίες μηδενίζονται εκθετικά στο $-\infty, +\infty$) κάνουμε την παρακάτω υπόθεση ($ansatz$) για τη μορφή της κυματοσυνάρτησης :

$$\langle x | \Psi_b \rangle = A \begin{cases} e^{qx}, & \text{αν } x \leq -1 \\ \psi_0, & \text{αν } x = 0 \\ e^{-qx}, & \text{αν } x \geq 1 \end{cases} \tag{4.2.4}$$

$$\langle d | \Psi_b \rangle = A \varphi_d \tag{4.2.5}$$

όπου q σχετίζεται με την ενέργεια της δέσμιας κατάστασης, οι Ψ_0 και Ψ_b είναι σταθερές οι οποίες πρέπει να υπολογιστούν και A η σταθερά κανονικοποίησης. Αντικαθιστώντας την παραπάνω έκφραση στην (4.4.1) για $x = 2$ μας οδηγεί σε μια έκφραση για την ενέργεια της δέσμιας κατάστασης:

$$E_b = -2h\cosh q \tag{4.2.6}$$

Για $x = 1$ βρίσκουμε $\varphi_0 = 1$ ενώ για $x = 0$ έχουμε $\varphi_d = \frac{2h}{g_0}\sinh q$. Επίσης για $x = 0$ χρησιμοποιώντας (4.4.2) βρίσκουμε $\varphi_d = \frac{g_0}{\varepsilon_d + 2h\cosh q}$. Για τις 2 τελευταίες εξισώσεις έχουμε:

$$g_0^2 - 2h(\varepsilon_d + 2h\cosh q)\sinh q = 0 \tag{4.2.7}$$

Αυτή είναι η εξίσωση που δίνει το q της δέσμιας κατάστασης. Είναι μια απλή αριθμητική άσκηση να δεί κάποιος ότι αυτή η εξίσωση έχει πάντα μια πραγματική λύση που αντιστοιχεί στη δέσμια κατάσταση. Προχωρώντας πρέπει να υπολογίσουμε τη σταθερά κανονικοποίησης A. Αυτή υπολογίζεται χρησιμοποιώντας :

$$\langle \Psi_b | \Psi_b \rangle = |\langle d | \Psi_b \rangle|^2 + \sum_{x=-\infty}^{\infty} |\langle x | \Psi_b \rangle|^2 = 1. \tag{4.2.8}$$

Το τελικό αποτέλεσμα είναι:

$$\langle x | \Psi_b \rangle \equiv \Psi_b(x) = \frac{\sqrt{\tanh q}(\varepsilon_d + 2h\cosh q)}{\sqrt{g_0^2 \tanh q + (\varepsilon_d + 2h\cosh q)^2}} e^{-q|x|} \tag{4.2.9}$$

$$\langle d | \Psi_b \rangle \equiv \Psi_b(d) = \frac{g_0\sqrt{\tanh q}}{\sqrt{g_0^2 \tanh q + (\varepsilon_d + 2h\cosh q)^2}} \tag{4.2.10}$$

Όμως το σύστημα έχει και μια δεύτερη δέσμια κατάσταση, το οποίο το βλέπει κανείς προσπαθώντας να λύσει αριθμητικά την εξίσωση των δέσμιων καταστάσεων στο μιγαδικό επίπεδο. Επιλέγοντας όμως $q \to q' + i\pi$ οδηγεί στην εύρεση και μίας δεύτερης κατάστασης. Στην περίπτωση $q' + i\pi$ έχουμε ότι, αφού $\cosh(q' + i\pi) = -\cosh q'$, $E_b = 2h\cosh q'$.

Αφού όμως τα q και q' είναι θετικά η ενέργεια των δέσμιων καταστάσεων είναι για τη βασική στάθμη αρνητική ενώ για τη πρώτη διεγερμένη θετική. Ειδικά για την περίπτωση $\varepsilon_d = 0$ οι 2 τιμές γίνονται αντίθετες.

Θα ψάξουμε τώρα να βρούμε και ελεύθερες λύσεις για το πρόβλημά μας. Για το συνεχές κομμάτι του φάσματος έχουμε την $(''+'')$ και την $(''-'')$. Στην πρώτη περίπτωση η υπόθεση της μορφής της κυματοσυνάρτησης είναι :

$$\langle x | \Psi_k \rangle = A \begin{cases} e^{ikx} + be^{-ikx}, & \text{αν } x \leq -1 \\ \psi_0, & \text{αν } x = 0 \\ ce^{ikx}, & \text{αν } x \geq 1 \end{cases} \tag{4.2.11}$$

$$\langle d|\ \Psi_k\rangle = A\varphi_d \tag{4.2.12}$$

ενώ για τη δεύτερη έχουμε αντίστοιχα:

$$\langle x|\ \Psi_k\rangle = A\begin{cases} ce^{-ikx}, & \text{αν } x \leq -1 \\ \psi_0, & \text{αν } x = 0 \\ e^{-ikx} + be^{ikx}, & \text{αν } x \geq 1 \end{cases} \tag{4.2.13}$$

$$\langle d|\ \Psi_k\rangle = A\varphi_d \tag{4.2.14}$$

όπου $k > 0$ είναι η ορμή. Οι διάφοροι συντελεστές b, c και ψ_0 υπολογίζονται από τις (4.4.1) και (4.4.2) όπου A είναι η σταθερά κανονικοποίησης. Επαναλαμβάνοντας την ίδια διαδικασία όπως και αυτή στη περίπτωση των δέσμιων καταστάσεων έχουμε:

$$\varepsilon_k = -2h\cos k \tag{4.2.15}$$

Το τελικό αποτέλεσμα είναι:

$$\left\langle x\right|\ \left.\Psi_k^{(\pm)}\right\rangle \equiv \Psi_k^{(\pm)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(e^{\pm ikx} + b_k e^{ik|x|}\right) \tag{4.2.16}$$

$$\left\langle d\right|\ \left.\Psi_k^{(\pm)}\right\rangle \equiv \Psi_k^{(\pm)}(d) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{2ihg_0\sin k}{g_0^2 + 2ih\sin k(\varepsilon_d + 2h\cos k)} \tag{4.2.17}$$

όπου b_k ορίζεται στην Εξ. (4.3.17). Κάποιος μπορέι εύκολα να ελέγξει οτι στην περίπτωση αυτής της διάταξης η προβολή είναι ανεξάρτητη της επιλογής ('+') ή ('−') κυματοσυνάρτησης.

Οι εξισώσεις (4.4.7), (4.4.8), (4.4.14) και (4.4.15) δημιουργούν μια ορθογώνια χρονοεξαρτώμενη βάση όπου πρέπει να ελέγξουμε την πληρότητα:

$$\sum_{b=1}^{2}\left|\Psi_b\right\rangle\left\langle\Psi_b\right| + \int_0^\pi dk\left|\Psi_k^{(+)}\right\rangle\left\langle\Psi_k^{(+)}\right| + \int_0^\pi dk\left|\Psi_k^{(-)}\right\rangle\left\langle\Psi_k^{(-)}\right| = \hat{1} \tag{4.2.18}$$

Τα όρια ολοκλήρωσης είναι το $(0, \pi)$ καθώς υποθέτουμε ότι $k > 0$ όταν υπολογίζουμε την βάση και επειδή δουλεύουμε στην πρώτη ζώνη *Brillouin* . Παρ'όλα αυτά μπορεί να δεί κάποιος ότι

$$\int_0^\pi dk\left|\Psi_k^{(+)}\right\rangle\left\langle\Psi_k^{(+)}\right| + \int_0^\pi dk\left|\Psi_k^{(-)}\right\rangle\left\langle\Psi_k^{(-)}\right| = \int_{-\pi}^\pi dk\left|\Psi_k^{(+)}\right\rangle\left\langle\Psi_k^{(+)}\right| \tag{4.2.19}$$

και απο εδώ κα ιστο εξής θα χρησιμοποιούμε αυτή την έκφραση. Ο πιο απλός τρόπος να ελεχθεί η πληρότητα είναι να προβάλλουμε την $|d\rangle$ στην Εξ. (4.2.18):

$$\sum_{b=1}^{2} |\langle d|\ \Psi_b\rangle|^2 + \int_{-\pi}^{\pi} dk \left|\langle d|\ \Psi_k^{(+)}\rangle\right|^2 = 1. \tag{4.2.20}$$

Έχοντας τώρα στην διάθεση μας τις ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτονιανής είναι εύκολο να υπολογίσει κανείς τους συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης για το εν λόγω πρόβλημα. Αυτοί ορίζονται ως:

$\left|T_{k_i}^{st}\right|^2 = \frac{J_{transmission}}{J_{incoming}}$.

$\left|R_{k_i}^{st}\right|^2 = \frac{J_{reflexion}}{J_{incoming}}$

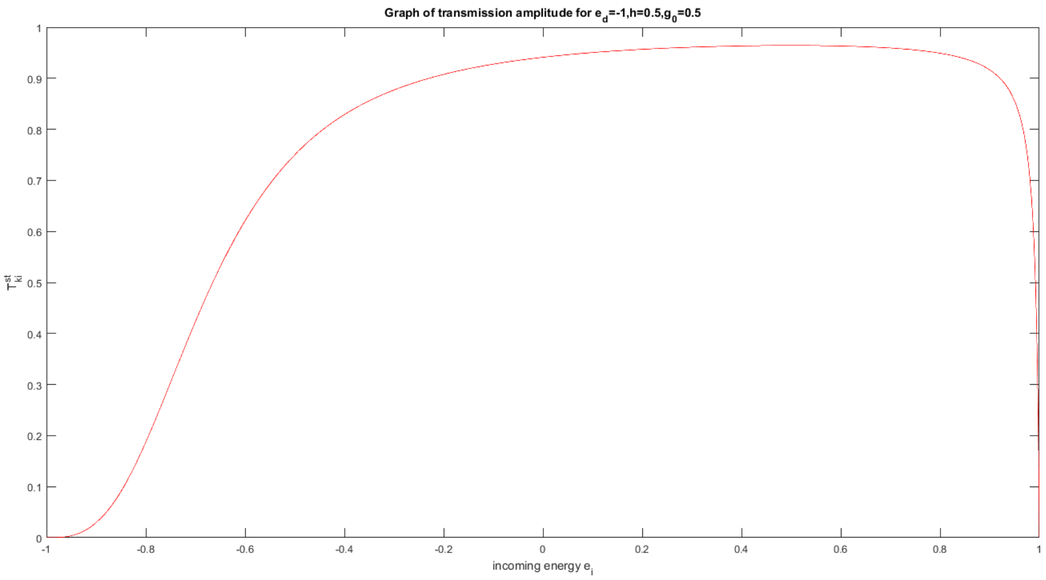
Άρα οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης προκύπτουν να είναι:

$$T_{k_i}^{st} = 1 + b_{k_i}, \qquad R_{k_i}^{st} = b_{k_i} \tag{4.2.21}$$

όπου :

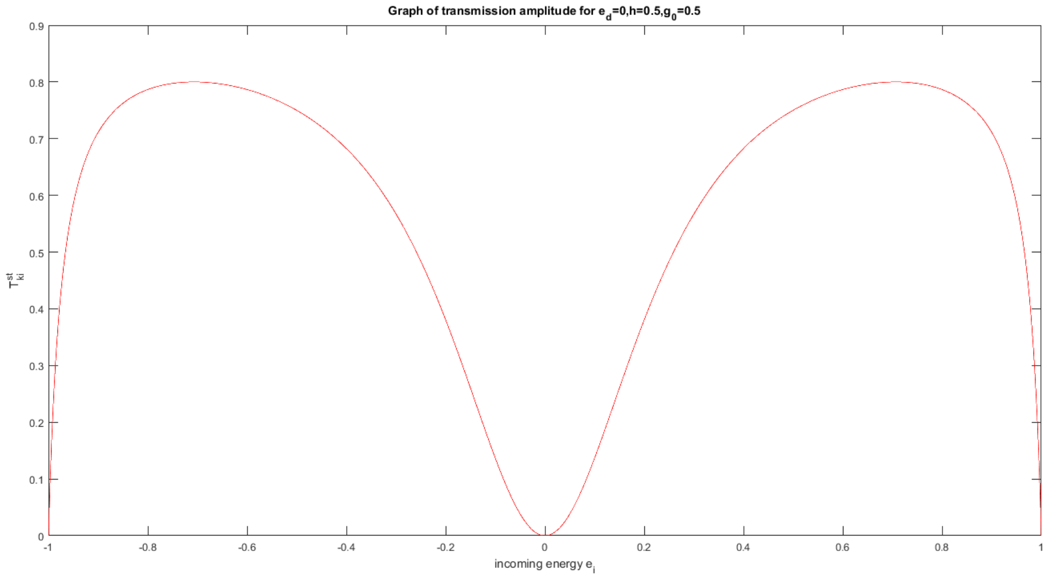
$$b_k = -\frac{g_0^2}{g_0^2 + 2ih(\varepsilon_d - \varepsilon_k)\sin k} \tag{4.2.22}$$

Το γράφημα του συντελεστή διέλευσης $\left|T_{k_i}^{st}\right|^2$ ως συνάρτηση της εισερχόμενης ενέργειας για την συγκεκριμένη επιλογή παραμέτρων είναι:



Σχήμα 4.3: Συντελεστής διέλευσης $\left|T_{k_i}^{st}\right|^2$ για $e_d = -1, g_0 = 0.5, h = 0.5$

Εξετάζοντας την εξίσωση 4.3.17 μπορούμε να δούμε οτι $\varepsilon_d = \varepsilon_{k_i}$ τότε $b_{k_i} = -1$ και $\left|T_{k_i}^{st}\right|^2 = 0$ όπως μπορεί να φανεί και στο ακόλουθο γράφημα:



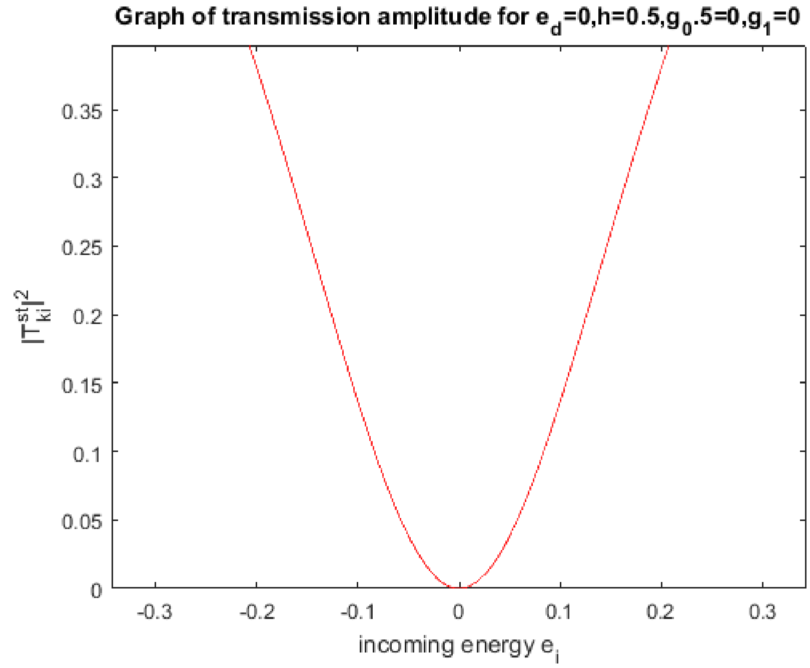
Σχήμα 4.4: Συντελεστής διέλευσης $\left|T_{k_i}^{st}\right|^2$ για $e_d = 0, g_0 = 0.5, h = 0.5$

Συνεπώς όσο ισχύει η σχέση $\varepsilon_d = -2hcosk_i$ ο συντελεστής διέλευσης θα έχει μηδενισμό ο οποίος θα βρίσκεται στο διάστημα $[-2h, 2h]$ για k_i που ανήκει στην ζώνη *Brillouin* $[-\pi, \pi]$.

Για $e_d = 0$ κάνοντας κάποιος το ανάπτυγμα Taylor γύρω από το $k = \pi/2$ παίρνει:

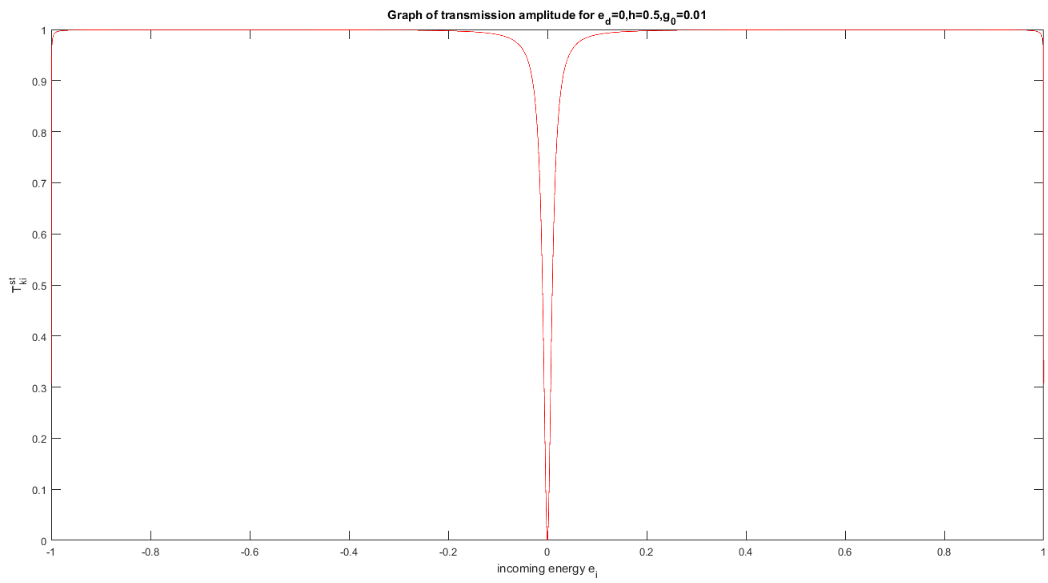
$$|b_k|^2 = \frac{g_0^4}{g_0^4 + 16h^4(k - \pi/2)^2} \tag{4.2.23}$$

το οποίο έχει συμπεριφορά Breit-Wigner. Παρατηρούμε επομένως ότι στην παρούσα διάταξη εμφανίζεται ένα βύθισμα τύπου Breit-Wigner ενώ συνήθως το προφίλ Breit-Wigner εμφανίζεται ως κορυφή στην εξάρτηση του συντελεστή διέλευσης από την εισερχόμενη ενέργεια.



Σχήμα 4.5: Κορυφή Breit- Wigner στο συντελεστή διέλευσης $\left|T_{k_i}^{st}\right|^2$ για $e_d = 0, g_0 = 0.5, h = 0.5$

Μία ακόμη παρατήρηση η οποία θα είναι χρήσιμη στην επερχόμενη ανάλυση είναι να δούμε πως η παράμετρος g_0 διαμορφώνει το συντελεστή διέλευσης $\left|T_{k_i}^{st}\right|^2$. Ειδικά για μικρές τιμές του g_0 έχουμε:



Σχήμα 4.6: συντελεστής διέλευσης $\left|T_{k_i}^{st}\right|^2$ για $e_d = 0, g_0 = 0.01, h = 0.5$

4.3 Εισαγωγή χρόνου στη Χαμιλτονιανή μέσω θεωρίας διαταραχών για την αλυσίδα T-τύπου

Σε αυτή τη παράγραφο θα προσπαθήσουμε να λύσουμε το παραπάνω πρόβλημα εισάγοντας τώρα στη Χαμιλτονιανή το δυναμικό ως μια χρονοεξαρτώμενη διαταραχή η οποία ενεργοποιείται μέσω κάποιας $\theta(t-t_i)$ με t_i να τείνει στο $-\infty$.

Άρα:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{4.3.1}$$

όπου $\hat{H}_0$ είναι το γνωστό πρόβλημα:

$$\hat{H}_0 = -h \sum_{x=-\infty}^{\infty} \left(|x+1\rangle \langle x| + |x\rangle \langle x+1| \right) + \varepsilon_d |d\rangle \langle d| \tag{4.3.2}$$

και $\hat{V}$ είναι η διαταραχή:

$$\hat{V} = -g_0 \left(|0\rangle \langle d| + |d\rangle \langle 0| \right). \tag{4.3.3}$$

Το στατικό $\hat{H}_0 |n\rangle = \varepsilon_n |n\rangle$ έχει ως λύση την κατάσταση $|d\rangle$ με ιδιοτιμή ε_d και τα επίπεδα κύματα $|k\rangle$ με ιδιοτιμές:

$$\varepsilon_k = -2h \cos k \tag{4.3.4}$$

Γράφουμε τώρα το δυναμικό $\hat{V}$ στην εικόνα αλληλεπίδρασης ($\hbar = 1$):

$$\hat{V}_I(t) = e^{it\hat{H}_0} \hat{V} e^{-it\hat{H}_0} \tag{4.3.5}$$

Ως συνήθως στην χρονοεξαρτημένη θεωρία διαταραχών αναπτύσουμε το τελεστή της χρονικής εξέλιξης του συστήματος και έχουμε :

$$\hat{U}_I(t_f, t_i) = P \ \exp\left(-i \int_{t_i}^{t_f} dt \hat{V}_I(t) \right). \tag{4.3.6}$$

Στην εικόνα αλληλεπίδρασης η ποσότητα $\langle k_f | \hat{U}_I(t_f, t_i) |k_i\rangle$ (για $t_i \to -\infty$ και $t_f \to \infty$) ισούται με το στοιχείο πίνακα σκέδασης:

$$S_{fi} = \langle k_f | \hat{U}_I(t_f, t_i) |k_i\rangle = S_{fi}^{(0)} + S_{fi}^{(1)} + S_{fi}^{(2)} + ... \tag{4.3.7}$$

όπου οι όροι $S_{fi}^{(k)}$ υπολογίζονται ως εξής:

$$
\begin{aligned}
S_{fi}^{(0)} &= \delta(k_f - k_i) \\
S_{fi}^{(1)} &= -i \int_{t_i}^{t_f} dt_1 e^{it_1(\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_{k_i})} \langle k_f | \hat{V} | k_i \rangle \\
S_{fi}^{(2)} &= (-i)^2 \sum_{n=k,d} \int_{t_i}^{t_f} dt_2 \int_{t_i}^{t_2} dt_1 e^{it_2(\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_n)} e^{it_1(\varepsilon_n - \varepsilon_{k_i})} \langle k_f | \hat{V} | n \rangle \langle n | \hat{V} | k_i \rangle \\
&. \\
&. \\
&.
\end{aligned}
\tag{4.3.8}
$$

Αφού $\langle d|\, k\rangle = 0$ και $\langle 0|\, k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ εύκολα μπορούμε να υπολογίσουμε:

$$
\langle d| \hat{V} |k\rangle = -\frac{g_0^2}{\sqrt{2\pi}}, \qquad \langle k| \hat{V} |k'\rangle = \langle d| \hat{V} |d\rangle = 0 \tag{4.3.9}
$$

Αυτό απλοποιεί τους υπολογισμούς καθώς $S_{fi}^{(1)}$ ισούται με το μηδέν και από το άθροισμα $S_{fi}^{(2)}$ μόνο ο d όρος παραμένει. Επίσης από τη σχέση(4.3.9) μπορούμε να δούμε οτι προκειμένου να πάρουμε μη μηδενικό αποτέλεσμα οι όροι $V_{nm} \equiv \langle n|\hat{V}\,|m\rangle$ πρέπει να μεταβαίνουν από το συνεχές στο d και αντίστροφα. Αυτό δε μπορεί να συμβεί για περιττούς όρους της διαταραχής, οπότε αυτοί μηδενίζονται. Στην τέταρτη τάξη ο μόνος όρος που παραμένει είναι ο $V_{k_f d} V_{dk'} V_{k'd} V_{dk_i}$, όπου k' πρέπει να είναι ακέραιος. Ομοίως υπολογίζουμε όλους τους άρτιους όρους του διαταρακτικού σχήματος :

$$
\begin{aligned}
S_{fi}^{(1)} &= 0 \\
S_{fi}^{(2)} &= i g_0^2 \tfrac{\delta(\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_{k_i})}{\varepsilon_d - \varepsilon_i - i0} \\
S_{fi}^{(3)} &= 0 \\
S_{fi}^{(4)} &= i g_0^2 \tfrac{\delta(\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_{k_i})}{(\varepsilon_d - \varepsilon_i - i0)^2} \sum_{k' \neq d} \tfrac{V_{dk'} V_{k'd}}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k_i} - i0} \\
S_{fi}^{(5)} &= 0 \\
S_{fi}^{(6)} &= i g_0^2 \tfrac{\delta(\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_{k_i})}{\left(\varepsilon_d - \varepsilon_{k_i} - i0\right)^3} \sum_{k' \neq d} \tfrac{V_{dk'} V_{k'd}}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k_i} - i0} \sum_{k'' \neq d} \tfrac{V_{dk''} V_{k''d}}{\varepsilon_{k''} - \varepsilon_{k_i} - i0} \\
&. \\
&. \\
&.
\end{aligned}
\tag{4.3.10}
$$

ή

$$\begin{aligned} S_{fi} =& \delta(k_f - k_i) \\ &+ i g_0^2 \frac{\delta(\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_{k_i})}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k_i} - i0} \left[1 + \frac{\delta\varepsilon_{dk_i}}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k_i} - i0} + \left(\frac{\delta\varepsilon_{dk_i}}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k_i} - i0} \right)^2 + \left(\frac{\delta\varepsilon_{dk_i}}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k_i} - i0} \right)^3 + ... \right] \end{aligned} \tag{4.3.11}$$

όπου

$$\delta\varepsilon_{dk_i} = \sum_{k' \neq d} \frac{V_{dk'} V_{k'd}}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k_i} - i0} = \frac{g_0^2}{2\pi} \left[\Pr \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk'}{\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k_i}} + i\pi \int_{-\pi}^{\pi} dk' \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_{k_i}) \right] \tag{4.3.12}$$

Το ολοκλήρωμα στα k' είναι στο $[-\pi, \pi]$ επειδή στο σύστημα Τ-τύπου μας ενδιαφέρει η πρώτη ζώνη *Brillouin*. Η έκφραση στην αγκύλη Εξ. 4.3.11 είναι μία δυναμοσειρά. Το άθροισμα αυτής δίνει $\frac{1}{1 - \frac{\delta\varepsilon_{dk}}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k_i} - i0}}$ και το αποτέλεσμα τελικά είναι:

$$S_{fi} = \delta(k_f - k_i) + i g_0^2 \frac{\delta(\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_{k_i})}{\varepsilon_d - \varepsilon_{k_i} - \delta\varepsilon_{dk_i}} \tag{4.3.13}$$

Αυτό είναι το ακριβές αποτέλεσμα αφού έχουμε αθροίσει όλους τους όρους της θεωρίας διαταραχών (4.3.7). Για τη δέλτα συνάρτηση έχουμε (χρησιμοποιώντας την (4.3.4) και για $k_i = (0, \pi)$):

$$\delta(\varepsilon_{k_f} - \varepsilon_{k_i}) = \frac{1}{2h \sin k_i} \left[\delta(k_f - k_i) + \delta(k_f + k_i) \right] \tag{4.3.14}$$

Μπορεί να δείξει κάποιος ότι η πρωτεύουσα τιμή στην Εξ. (4.3.12) είναι μηδέν και το φανταστικό μέρος υπολογίζεται εύκολα κάνοντας χρήση της Εξ. (4.3.14). Το αποτέλεσμα είναι:

$$\delta\varepsilon_{dk_i} = \frac{i g_0^2}{2h \sin k_i} \tag{4.3.15}$$

Αντικαθιστώντας την Εξ. (4.3.14) και (4.3.15) στην (4.3.13) παίρνουμε το τελικό αποτέλεσμα για το πίνακα σκέδασης στην χρονοεξαρτώμενη περίπτωση:

$$S_{fi} = \left[1 + b_{k_i} \right] \delta(k_f - k_i) + b_{k_i} \delta(k_f + k_i) \tag{4.3.16}$$

όπου

$$b_k = - \frac{g_0^2}{g_0^2 + 2ih(\varepsilon_d - \varepsilon_k) \sin k} \tag{4.3.17}$$

άρα ο συντελεστής ανάκλασης και διέλευσης είναι

$$T^{st}_{k_i} = 1 + b_{k_i}, \quad R^{st}_{k_i} = b_{k_i} \tag{4.3.18}$$

και συμφωνεί με την προηγούμενη παράγραφο όπως ήταν αναμενόμενο.

4.4 Εύρεση της βάσης για τη χρονικά εξαρτημένη Χαμιλτονιανή

Για να μπορέσουν να γίνουν οι υπολογισμοί του $GPPA$ χρειαζόμαστε τη στιγμιαία (χρονοεξαρτημένη) βάση.

Όπως θα φανεί παρακάτω η στιγμιαία βάση έχει επίσης τόσο δέσμιες όσο και ελεύθερες καταστάσεις. Προβολή της βάσης $\{|x\rangle, |d\rangle\}$ στην $\hat{H}(t)|\Psi\rangle = E(t)|\Psi\rangle$ για τη Χαμιλτονιανή (4.2.1) οδηγεί στο παρακάτω σύστημα εξισώσεων:

$$-h\left[\langle x+1|\,\Psi\rangle + \langle x-1|\,\Psi\rangle\right] - g(t)\delta_{x,0}\langle d|\,\Psi\rangle = E\langle x|\,\Psi\rangle \tag{4.4.1}$$

$$(\varepsilon_d - E)\langle d|\,\Psi\rangle = g(t)\langle 0|\,\Psi\rangle \tag{4.4.2}$$

Για να μπορέσουμε να προχωρήσουμε πρέπει, όπως και στη στατική περίπτωση, να κάνουμε μια υπόθεση για τη μορφή της λύσης που θέλουμε να έχουμε κάθε τυχούσα χρονική στιγμή t. Στην περίπτωση των δέσμιων καταστάσεων ($|\Psi_b\rangle$) ξανά η κατάλληλη επιλογή είναι μια κυματοσυνάρτηση η οποία τείνει στο μηδέν για $x \to \pm\infty$

$$\langle x|\,\Psi_b\rangle = A\begin{cases} e^{qx}, & \text{αν } x \leq -1 \\ \psi_0, & \text{αν } x = 0 \\ e^{-qx}, & \text{αν } x \geq 1 \end{cases} \tag{4.4.3}$$

$$\langle d|\,\Psi_b\rangle = A\varphi_d \tag{4.4.4}$$

όπου $q \equiv q(t) > 0$ είναι συνάρτηση του χρόνου και σχετίζεται με την ενέργεια της δέσμιας κατάστασης, οι Ψ_0 και Ψ_b είναι σταθερές οι οποίες πρέπει να υπολογιστούν και A η σταθερά κανονικοποίησης. Όπως στην παράγραφο (4.2) έτσι και εδώ με αντικατάσταση των (4.4.3) και (4.4.4) στην (4.4.1) προκύπτουν:

$$E_b(t) = -2h\cosh q(t) \tag{4.4.5}$$

$$g^2(t) - 2h(\varepsilon_d + 2h\cosh q(t))\sinh q(t) = 0 \tag{4.4.6}$$

Αυτές είναι οι εξισώσεις που δίνουν τόσο τον κβαντικό αριθμό $q(t)$ όσο και την αντίστοιχη ενέργεια συναρτήσει αυτού για κάθε χρονική στιγμή. Ομοίως υπολογίζουμε τη σταθερά κανονικοποίησης A.

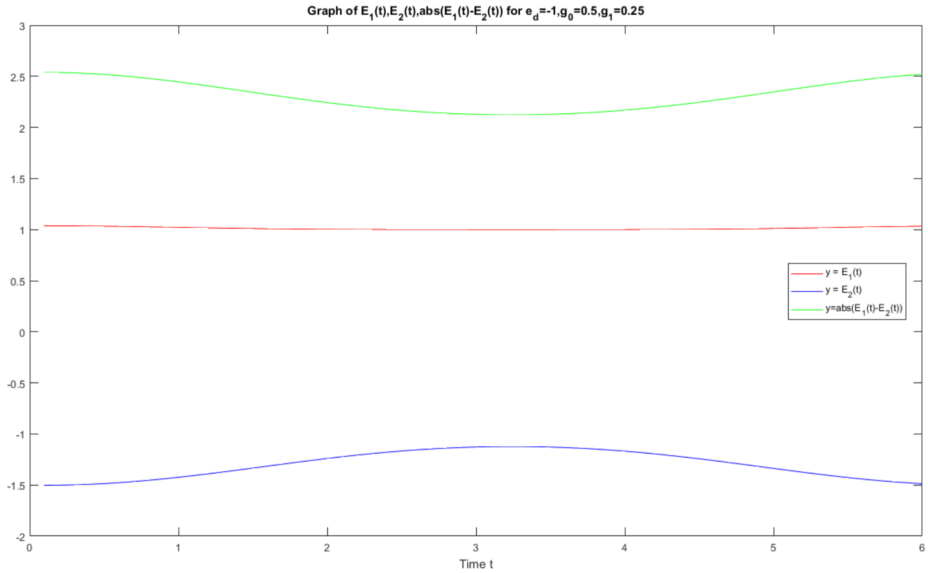
Το τελικό αποτέλεσμα είναι:

$$\langle x|\ \Psi_b\rangle \equiv \Psi_b(x,t) = \frac{\sqrt{\tanh q(t)}(\varepsilon_d + 2h\cosh q(t))}{\sqrt{g^2(t)\tanh q(t) + (\varepsilon_d + 2h\cosh q(t))^2}} e^{-q(t)|x|} \tag{4.4.7}$$

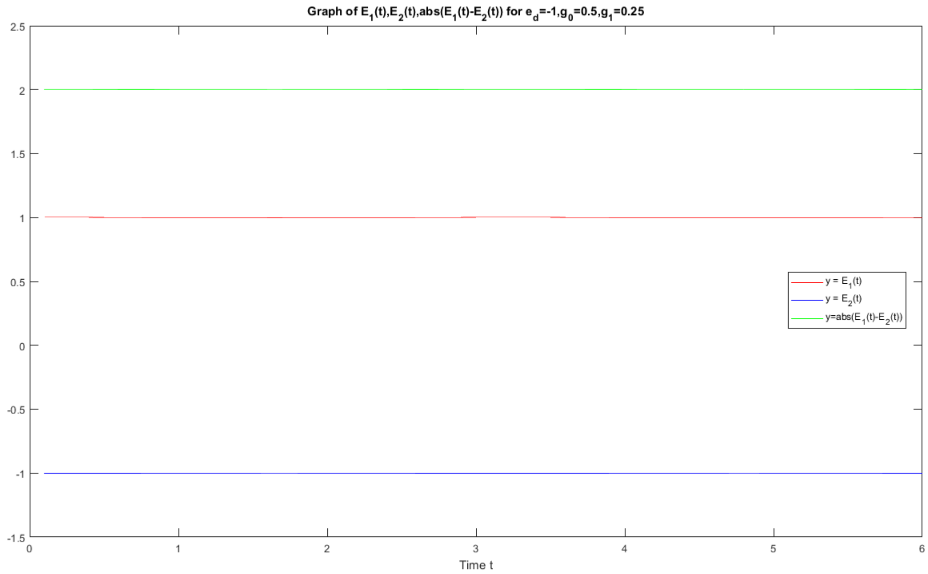
$$\langle d|\ \Psi_b\rangle \equiv \Psi_b(d,t) = \frac{g(t)}{\sqrt{g^2(t)\tanh q(t) + (\varepsilon_d + 2h\cosh q(t))^2}} \tag{4.4.8}$$

Όμως το σύστημα αυτό (όπως είδαμε και στη στατική περίπτωση) έχει και μια δεύτερη δέσμια κατάσταση. Επιλέγοντας $q \to q' + i\pi$ οδηγούμαστε στην εύρεση αυτής. Στην περίπτωση $q' + i\pi$ έχουμε ότι, αφού $\cosh(q' + i\pi) = -\cosh q'$, τότε $E_b(t) = 2h\cosh q'$. Η ουσιώδης διαφορά με τη στατική περίπτωση είναι ότι η προσθήκη χρόνου οδηγεί στο να αποκτούν μια διακύμανση στο χρόνο (ένα εύρος) οι ενέργειες των δέσμιων καταστάσεων.

Αφού όμως τα q και q' είναι θετικά η ενέργεια των δέσμιων καταστάσεων είναι για τη βασική στάθμη αρνητική ενώ για τη πρώτη διεγερμένη θετική. Ειδικά για την περίπτωση $\varepsilon_d = 0$ οι 2 τιμές γίνονται αντίθετες. Από εδώ και στο εξής θα αναφερόμαστε στις μέσες τιμές των ενεργειών των δέσμιων καταστάσεων σε μια περίοδο ως ε_1 και ε_2. Δεν υπάρχει όπως βλέπουμε κάποιος εκφυλισμός στο φάσμα οπότε μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την $GPPA$ χωρίς πρόβλημα. Παραδείγματα των παραπάνω βλέπουμε στα σχήματα που ακολουθούν. Αφού αυτές οι 2 δέσμιες καταστάσεις με τη προσθήκη του συνεχούς φάσματος οδηγούν στη δημιουργία πλήρους βάσης δεν χρειάζεται να αναζητήσουμε άλλη δέσμια κατάσταση.



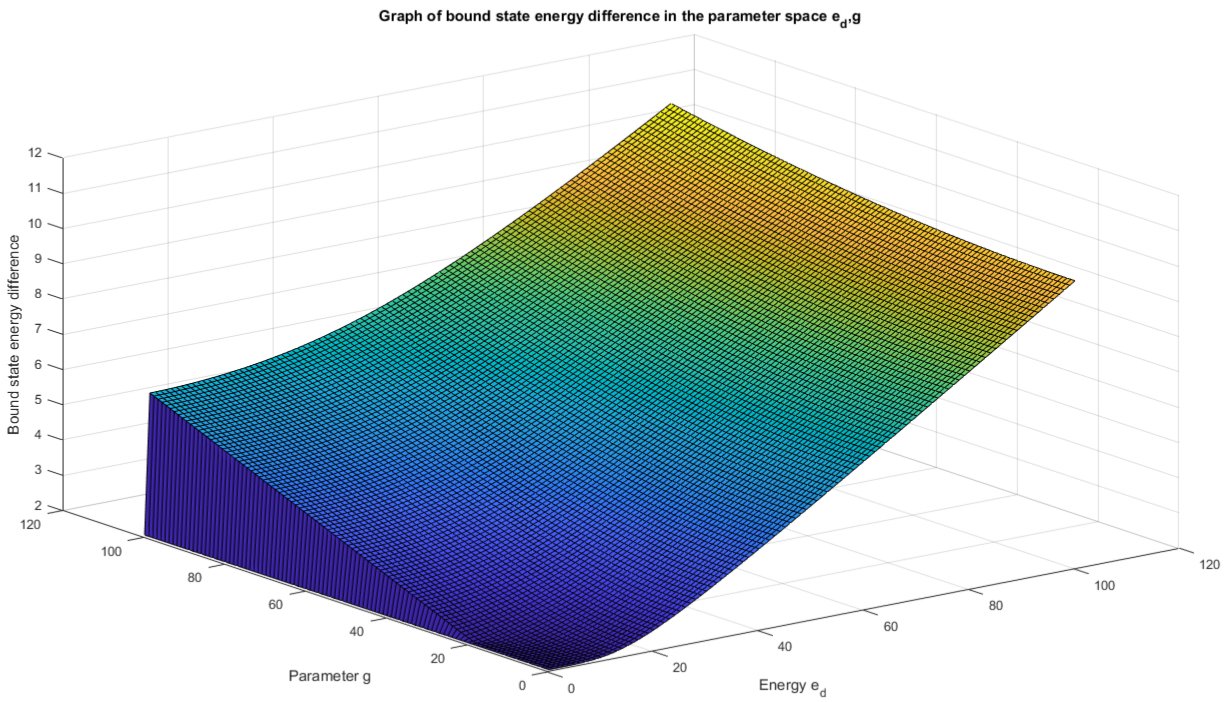
Σχήμα 4.7: Ενέργεια των 2 δέσμιων καταστάσεων ως συνάρτηση του χρόνου για το μοντέλο T-τύπου με την επιλογή παραμέτρων $e_d = -1, g_0 = 0.5, g_1 = 0.25$.



Σχήμα 4.8: Ενέργεια των 2 δέσμιων καταστάσεων ως συνάρτηση του χρόνου για το μοντέλο T-τύπου με την επιλογή παραμέτρων $e_d = 0, g_0 = 0, g_1 = 0.25$.

Ενδιαφερόμαστε να βρούμε την ελάχιστη διαφορά των ενεργειών των 2 δέσμιων καταστάσεων στο παραμετρικό χώρο g_0, g_1, h, e_d. Για να γίνει αυτό επιλέγουμε $g = g_0 + g_1 cos(\omega t)$, $h = 1$

και δουλεύουμε στο παραμετρικο χώρο g, e_d. Με αυτές τις επιλογές κατασκευάζουμε το ακόλουθο γράφημα:



Σχήμα 4.9: Γράφημα την διαφοράς των ενεργειών των δέσμιων καταστάσεων στο παραμετρικό χώρο g, e_d

Παρατηρούμε ότι για $h = 1$ η ελάχιστη τιμή της διαφοράς των ενεργειών είναι 2 και προκύπτει για μικρές τιμές των g ή e_d.

Για το συνεχές κομμάτι του φάσματος έχουμε, όπως είδαμε στη προηγούμενη παράγραφο, 2 διαφορετικές καταστάσεις, την $(''+'')$ και την $(''-'')$. Στην πρώτη περίπτωση η υπόθεση της μορφής της κυματοσυνάρτησης είναι :

$$\langle x|\ \Psi_k\rangle = A\begin{cases} e^{ikx}+be^{-ikx}, & \text{αν } x\le -1\\ \psi_0, & \text{αν } x=0\\ ce^{ikx}, & \text{αν } x\ge 1\end{cases} \tag{4.4.9}$$

$$\langle d|\ \Psi_k\rangle = A\varphi_d \tag{4.4.10}$$

ενώ για τη δεύτερη έχουμε αντίστοιχα:

$$\langle x|\ \Psi_k\rangle = A\begin{cases} ce^{-ikx}, & \text{αν } x\le -1 \\ \psi_0, & \text{αν } x=0 \\ e^{-ikx}+be^{ikx}, & \text{αν } x\ge 1 \end{cases} \tag{4.4.11}$$

$$\langle d|\ \Psi_k\rangle = A\varphi_d \tag{4.4.12}$$

όπου $k>0$ είναι η ορμή. Οι διάφοροι συντελεστές b,c και ψ_0 υπολογίζονται από τις Εξ. (4.4.1) και (4.4.2) όπου A είναι η σταθερά κανονικοποίησης. Επαναλαμβάνοντας την ίδια διαδικασία όπως και αυτή στη περίπτωση των δέσμιων καταστάσεων έχουμε:

$$\varepsilon_k = -2h\cos k \tag{4.4.13}$$

Το τελικό αποτέλεσμα είναι:

$$\left\langle x|\ \Psi_k^{(\pm)}\right\rangle \equiv \Psi_k^{(\pm)}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(e^{\pm ikx}+b_k e^{ik|x|}\right) \tag{4.4.14}$$

$$\left\langle d|\ \Psi_k^{(\pm)}\right\rangle \equiv \Psi_k^{(\pm)}(d,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{2ihg(t)\sin k}{g^2(t)+2ih\sin k(\varepsilon_d+2h\cos k)} \tag{4.4.15}$$

όπου b_k ορίζεται στην Εξ. (4.3.17). Κάποιος μπορεί εύκολα να ελέγξει ότι στην περίτωση της *dot* διάταξης η προβολή είναι ανεξάρτητη της επιλογής ('+') ή ('−') κυματοσυνάρτησης. Η πληρότητα της χρονοεξαρτώμενης βάσης δείχνεται με τον τρόπο της ενότητας (4.2).

Το επόμενο βήμα είναι να βρούμε τα $''flips''$ και από εκεί τα αντίστοιχα B_{nm}. Αυτό γίνεται για να ελεγχθεί η ισχύς του διαταρακτικού σχήματος. Εδώ θα εμφανιστούν μεταβάσεις από το συνεχές στο συνεχές, από το συνεχές στις δέσμιες καταστάσεις και από τη μία δέσμια κατάσταση στην άλλη :

Για τα $''flips''$ βρίσκουμε:

$$\Phi_{12}(t) = -\frac{ig(t)\dot{g}(t)(2\varepsilon_d - E_1(t) - E_2(t))\sqrt{\tanh q_1(t)\tanh q_2(t)}}{(E_2(t)-E_1(t))\sqrt{\tanh q_1(t)g^2(t)+(\varepsilon_d-E_1(t))^2}\sqrt{\tanh q_2(t)g^2(t)+(\varepsilon_d-E_2(t))^2}} \tag{4.4.16}$$

όπου $E_i(t) = -2h\cos q_i(t)$. Επίσης

$$\Phi_{q_i k^{(\pm)}}(t) = \frac{g(t)\dot{g}(t)(2\varepsilon_d-\varepsilon_k-E_i(t))\sqrt{\tanh q_i(t)}2h\sin k}{\sqrt{2\pi}\,(\varepsilon_k-E_i(t))\left[g^2(t)+2ih\sin k(\varepsilon_d-\varepsilon_k)\right]\sqrt{\tanh q_i(t)g^2(t)+(\varepsilon_d-E_i(t))^2}}. \tag{4.4.17}$$

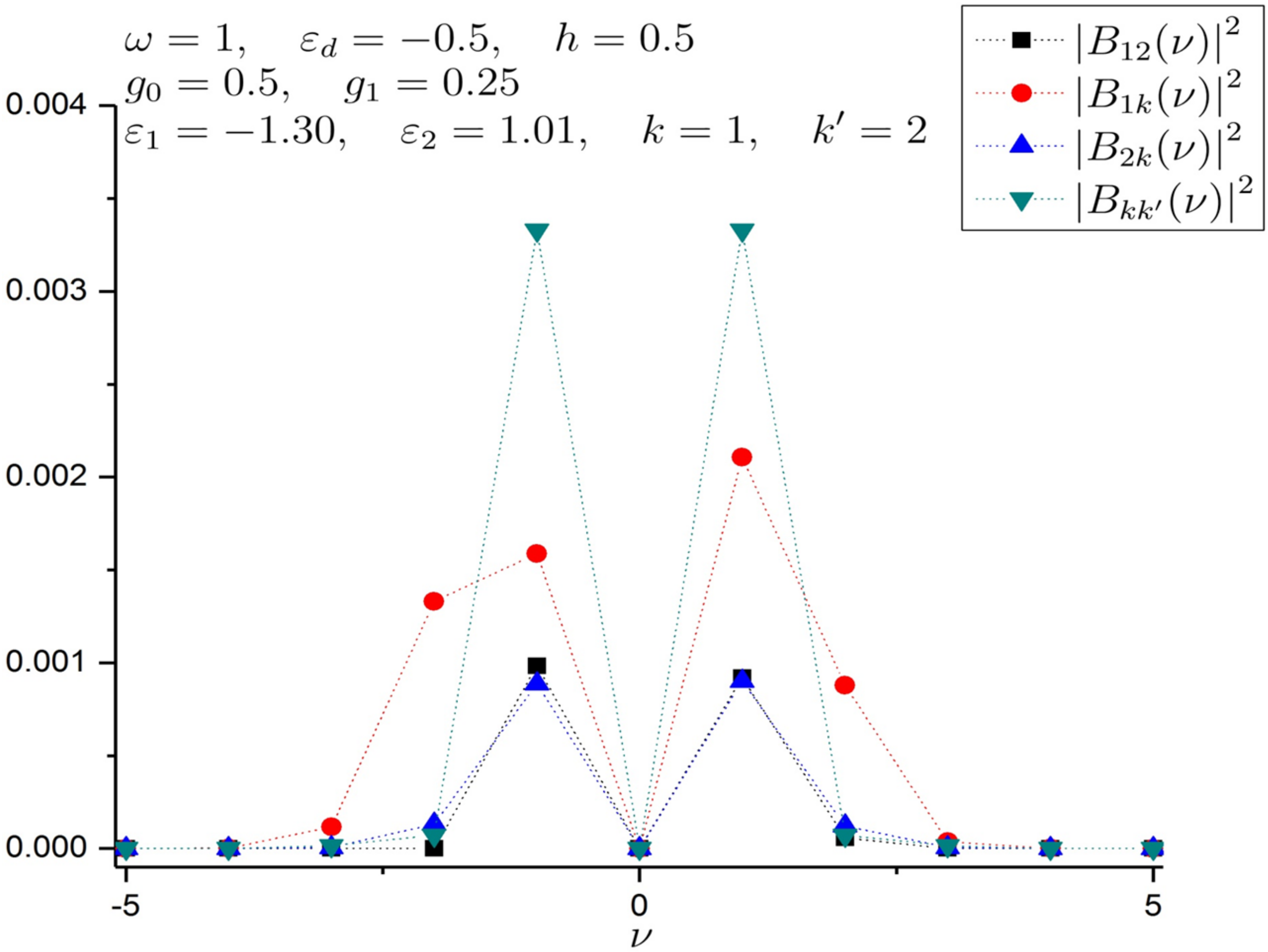
και

$$\Phi_{k_1^{(\pm)}k_2^{(\pm)}}(t) = \frac{1}{2\pi}\frac{f_{k_1k_2}(t)}{\cos(k_1 - i\eta) - \cos k_2} - i\frac{f_{k_1k_1}(t)}{\sin k_1}\delta(k_1 - k_2) \tag{4.4.18}$$

όπου

$$f_{k_1k_2}(t) = \frac{ig(t)\dot{g}(t)}{2h}\frac{4h^2(2\varepsilon_d - \varepsilon_{k_1} - \varepsilon_{k_2})\sin k_1 \sin k_2}{[g^2(t) - 2ih\sin k_1(\varepsilon_d - \varepsilon_{k_1})]\,[g^2(t) + 2ih\sin k_2(\varepsilon_d - \varepsilon_{k_2})]} \tag{4.4.19}$$

Έχοντας βρεί τα $''flips''$ κατασκευάζουμε το ακόλουθο γράφημα:



Σχήμα 4.10: Μετασχηματισμός Fourier των flips

4.5 Θωρία Floquet για το χρονικά εξαρτημένο πρόβλημα Τ-τύπου

Ξεκινάμε από την χρονοεξαρτημένη εξίσωση Schrödinger για την Τ-τύπου Χαμιλτονιανή (4.2.1) όπου μια ημιτονική συνάρτηση έχει επιλεγεί ως $g(t)$:

$$g_0 \to g_0 + g_1 cos\omega t. \tag{4.5.1}$$

Εφαρμόζουμε τώρα το θεώρημα Floquet [1]:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i(E_F+n\omega)t} |\varphi_n\rangle \tag{4.5.2}$$

Αφού αναδιατάξουμε κατάλληλα τα αθροίσματα των διάφορων καναλιών της Floquet βρίσκουμε:

$$\begin{aligned}(E_F+n\omega)|\varphi_n\rangle &= -h\sum_{x=-\infty}^{\infty}\left(|x+1\rangle\langle x|\,\varphi_n\rangle + |x\rangle\langle x+1|\,\varphi_n\rangle\right) + \varepsilon_d|d\rangle\langle d|\,\varphi_n\rangle \\ &= -g_0\left(|0\rangle\langle d|\,\varphi_n\rangle + |d\rangle\langle 0|\,\varphi_n\rangle\right) - \frac{g_1}{2}\left(|0\rangle\langle d|\,\varphi_{n+1}\rangle + |d\rangle\langle 0|\,\varphi_{n+1}\rangle\right) \\ &\quad - \frac{g_1}{2}\left(|0\rangle\langle d|\,\varphi_{n-1}\rangle + |d\rangle\langle 0|\,\varphi_{n-1}\rangle\right).\end{aligned} \tag{4.5.3}$$

Προβάλλουμε τώρα αυτή την εξίσωση στη βάση $\{|x\rangle, |d\rangle\}$ και βρίσκουμε ένα σύστημα εξισώσεων :

$$\begin{aligned}(E_F+n\omega)\langle x|\,\varphi_n\rangle + h\left(\langle x+1|\,\varphi_n\rangle + \langle x-1|\,\varphi_n\rangle\right) = \\ = -\delta_{x,0}\left(g_0\langle d|\,\varphi_n\rangle + \tfrac{g_1}{2}\langle d|\,\varphi_{n+1}\rangle + \tfrac{g_1}{2}\langle d|\,\varphi_{n+1}\rangle\right)\end{aligned} \tag{4.5.4}$$

$$(E_F+n\omega-\varepsilon_d)\langle d|\,\varphi_n\rangle = -g_0\langle 0|\,\varphi_n\rangle - \frac{g_1}{2}\langle 0|\,\varphi_{n+1}\rangle - \frac{g_1}{2}\langle d|\,\varphi_{n-1}\rangle. \tag{4.5.5}$$

Αντικαθιστούμε την Εξ.(4.5.5) στην (4.5.4) και απλοποιώντας τους $\langle d|\,\varphi_n\rangle$ όρους βρίσκουμε:

[1] Προκειμένου να επιτευχθεί κατάλληλη σύγκλιση της κυματοσυνάρτησης στο $t_i \to -\infty$ χρησιμοποιούμε μια μικρή μιγαδική σταθερά τέτοια ώστε $E_F \to E_F - i\eta$

$$
\begin{aligned}
(E_F + n\omega)\langle x|\,\varphi_n\rangle + h\left(\langle x+1|\,\varphi_n\rangle + \langle x-1|\,\varphi_n\rangle\right) = \tfrac{g_1^2}{4[E_F+(n-1)\omega-\varepsilon_d-i\eta]}\langle 0|\,\varphi_{n-2}\rangle \\
+\tfrac{g_0 g_1}{2}\left(\tfrac{1}{E_F+(n-1)\omega-\varepsilon_d-i\eta} + \tfrac{1}{E_F+n\omega-\varepsilon_d-i\eta}\right)\langle 0|\,\varphi_{n-1}\rangle \\
+\left(\tfrac{g_0^2}{E_F+n\omega-\varepsilon_d-i\eta} + \tfrac{g_1^2}{4[E_F+(n+1)\omega-\varepsilon_d-i\eta]} + \tfrac{g_1^2}{4[E_F+(n-1)\omega-\varepsilon_d-i\eta]}\right)\langle 0|\,\varphi_n\rangle \\
+\tfrac{g_0 g_1}{2}\left(\tfrac{1}{E_F+(n+1)\omega-\varepsilon_d-i\eta} + \tfrac{1}{E_F+n\omega-\varepsilon_d-i\eta}\right)\langle 0|\,\varphi_{n+1}\rangle \\
+\tfrac{g_1^2}{4[E_F+(n+1)\omega-\varepsilon_d-i\eta]}\langle 0|\,\varphi_{n+2}\rangle
\end{aligned}
\tag{4.5.6}
$$

Το επόμενο βήμα είναι να κάνουμε κατάλληλη επιλογή για την κυματοσυνάρτηση :

$$
\langle x|\,\varphi_n\rangle = A\begin{cases}\delta_{n,0}e^{\frac{i}{\hbar}k_n x} + R_n e^{-\frac{i}{\hbar}k_n x}, & \text{αν } x \le -1\\ F_n, & \text{αν } x = 0\\ T_n e^{\frac{i}{\hbar}k_n x}, & \text{αν } x \ge 1.\end{cases}
\tag{4.5.7}
$$

όπου k είναι η αρχική ορμή ενώ οι R_n και T_n είναι οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης αντίστοιχα στο $n-$οστό κανάλι Floquet. F_n είναι απλά η προβολή $\langle 0|\,\varphi_n\rangle$ και A η σταθερά κανονικοποίησης.

Αντικαθιστώντας αυτό στην εξίσωση Εξ. (4.5.6), για $x = 2$ δίνει k_n:

$$
k_n = \arccos\left[-\frac{E_F + n\omega}{2h}\right]
\tag{4.5.8}
$$

Για $n = 0$ σε αυτήν την εξίσωση βλέπουμε οτι E_F είναι στην πραγματικότητα η αρχική εισερχόμενη ενέργεια.

Αντικαθιστώντας τώρα την εξίσωση Εξ.(4.5.7) στην (4.5.6) για $x = 1$ οδηγεί στην $F_n = T_n$ ενώ για $x = 1$ προκύπτει οτι $\delta_{n,0} + R_n = T_n$. Αυτές οι 2 εξισώσεις απλοποιούνται στην (4.5.8):

$$
\langle x|\,\varphi_n\rangle = A\begin{cases}2i\delta_{n,0}\sin k_n x + T_n e^{-ik_n x}, & \text{αν } x \le -1\\ T_n, & \text{αν } x = 0\\ T_n e^{\frac{i}{\hbar}k_n x}, & \text{αν } x \ge 1.\end{cases}
\tag{4.5.9}
$$

και τελικά αντικαθιστούμε αυτή τη κυματοσυνάρτηση στην (4.5.6) για $x = 0$. Όταν το κάνουμε αυτό οι εξισώσεις Floquet δίνουν:

$$
A_n^{-2}T_{n-2} + A_n^{-1}T_{n-1} + A_n^{0}T_n + A_n^{1}T_{n+1} + A_n^{2}T_{n+2} = 2ih\sin k\delta_{n,0}
\tag{4.5.10}
$$

Όπου οι συντελεστές δίνονται από τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$A_n^{-2} = \frac{g_1^2}{4\left[\varepsilon_d - E_F - (n-1)\omega + i\eta\right]} \tag{4.5.11}$$

$$A_n^{-1} = \frac{g_0 g_1}{2}\left(\frac{1}{\varepsilon_d - E_F - (n-1)\omega + i\eta} + \frac{1}{\varepsilon_d - E_F - n\omega + i\eta}\right) \tag{4.5.12}$$

$$\begin{aligned} A_n^0 =& 2ih\sin k_n + \frac{g_0^2}{\varepsilon_d - E_F - n\omega + i\eta} \\ &+ \frac{g_1^2}{4}\left(\frac{1}{\varepsilon_d - E_F - (n+1)\omega + i\eta} + \frac{1}{\varepsilon_d - E_F - (n-1)\omega + i\eta}\right) \end{aligned} \tag{4.5.13}$$

$$A_n^{1} = \frac{g_0 g_1}{2}\left(\frac{1}{\varepsilon_d - E_F - (n+1)\omega + i\eta} + \frac{1}{\varepsilon_d - E_F - n\omega + i\eta}\right) \tag{4.5.14}$$

$$A_n^{2} = \frac{g_1^2}{4\left[\varepsilon_d - E_F - (n+1)\omega + i\eta\right]} \tag{4.5.15}$$

Ο ολικός συντελεστής διέλευσης δίνεται από :

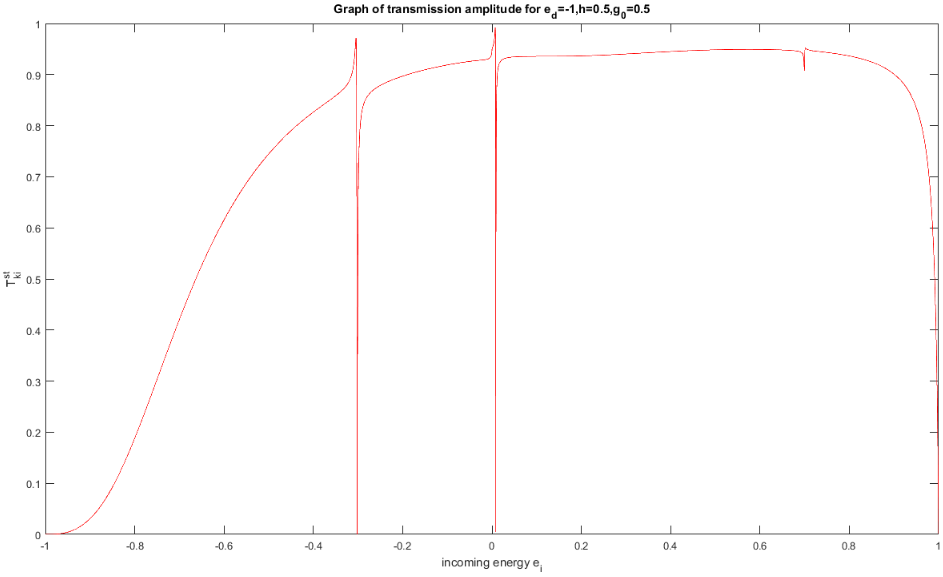
$$T_{tot}(k_i) = |T_{ii}(k_i)|^2 + \sum_{n=-\infty, n\neq 0}^{\infty} \left|\frac{k_f(n)}{k_i}\right| |T_{fi}(k_i)|^2, \quad T_{ii}(k_i) = T_0, \quad T_{fi}(k_i) = T_n, \quad k_i \equiv k_0 \tag{4.5.16}$$

όπου $k_f(n) \equiv k_n$ δίνεται από την Εξ. (4.5.8). Χρησιμοποιώντας την σχέση $E_F = -2h\cos k_0$ έχουμε οτι:

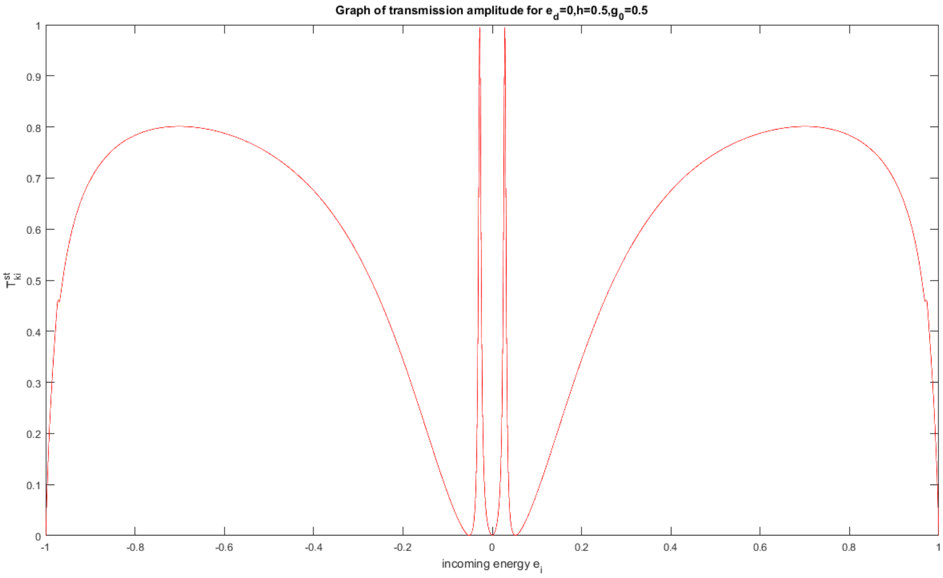
$$k_f(n) = \arccos\left[\cos k_i - \frac{n\omega}{2h}\right] \tag{4.5.17}$$

και μπορούμε να δούμε ότι, για δεδομένες τιμές παραμέτρων, το άθροισμα της Εξ. (4.5.16) συγκλίνει εκθετικά.

Ως δύο παραδείγματα παραθέτουμε τα ακόλουθα γραφήματα για το συντελεστή διέλευσης $|T_{ii}(k_i)|^2$:



Σχήμα 4.11: $|T_{ii}(k_i)|^2$ ως συνάρτηση του e_{k_i} για $e_d = -1, g_0 = 0.5, h = 0.5$



Σχήμα 4.12: $|T_{ii}(k_i)|^2$ ως συνάρτηση του e_{k_i} για $e_d = 0, g_0 = 0.5, h = 0.5$

4.6 Πίνακας σκέδασης για την αλυσίδα Τ-τύπου

Παρόλο που η θεωρία Floquet προσφέρει ακριβείς λύσεις για το πρόβλημα που μελετάμε, λόγω της περιοδικότητας του δυναμικού, αδυνατεί να ερμηνεύσει τη φυσική προέλευση των συντονισμών Fano που παρατηρούμε στο σχήμα (1.7). Για να επιτευχθεί αυτή η ερμηνεία καταφεύγουμε στη μέθοδο GPPA. Το στοιχείο του πίνακα σκέδασης δίνεται από την:

$$S_{fi} = e^{i(\varepsilon_{k_f} t_f - \varepsilon_{k_i} t_i)} \int_{-\pi}^{\pi} dk' e^{-i\bar{E}_{k'}(t_f - t_i)} \int_{-\pi}^{\pi} dk X_{k'^+ k^+}(t_f, t_i) \left\langle k_f \,\middle|\, \Psi_{k'}^{(+)} \right\rangle \left\langle \Psi_k^{(+)} \,\middle|\, k_i \right\rangle \quad (4.6.1)$$

όπου:

$$\begin{aligned} X_{k'k}(t_f, t_i) =& \delta(k' - k) + i\sqrt{2\pi} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} B_{k'k}(n) \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k - \omega n) \\ &+ i \int_{-\pi}^{\pi} dp \sum_{n,\nu=-\infty}^{+\infty} \frac{B_{k'p}(n-\nu) B_{pk}(\nu)}{\varepsilon_p - \varepsilon_k - \omega\nu - i0} \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k - \omega n) \\ &+ i \sum_{b=1,2} \sum_{n,\nu=-\infty}^{+\infty} \frac{B_{k'b}(n-\nu) B_{bk}(\nu)}{\varepsilon_b - \varepsilon_k - \omega\nu - \delta\varepsilon_{bk}(\nu) - i0} \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k - \omega n) + \mathcal{O}(B^3), \end{aligned} \quad (4.6.2)$$

Ο όρος διόρθωσης της ενέργειας θα περιλαμβάνει τώρα έναν όρο που δίνει μεταβάσεις μεταξύ των δύο δέσμιων καταστάσεων. Για παράδειγμα:

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_{1k}(\nu) =& \frac{1}{2\pi} \sum_{\nu'=-\infty}^{\infty} \frac{B_{12}(-\nu') B_{21}(\nu')}{\varepsilon_2 - \varepsilon_k - (\nu + \nu')\omega - i0} + \frac{1}{2\pi} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} dp \frac{B_{1p}(-\nu') B_{p1}(\nu')}{\varepsilon_p - \varepsilon_k - (\nu + \nu')\omega - i0} \\ =& \frac{1}{2\pi} \sum_{\nu'=-\infty}^{\infty} \frac{|B_{12}(-\nu')|^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_k - (\nu + \nu')\omega - i0} + \frac{1}{2\pi} \mathrm{Pr} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} dp \frac{|B_{1p}(-\nu')|^2}{\varepsilon_p - \varepsilon_k - (\nu + \nu')\omega} \\ &+ \frac{i}{2} \int_{-\pi}^{\pi} dp \delta\left(\varepsilon_p - \varepsilon_k - (\nu + \nu')\omega\right) |B_{1p}(-\nu')|^2 \\ \equiv& \mathrm{Re}\left(\delta\varepsilon_{1k}(\nu)\right) + i \mathrm{Im}\left(\delta\varepsilon_{1k}(\nu)\right) \end{aligned} \quad (4.6.3)$$

Οι όροι $\left\langle k_f \,\middle|\, \Psi_{k'}^{(+)} \right\rangle$ και $\left\langle \Psi_k^{(+)} \,\middle|\, k_i \right\rangle$ μπορούν μα υπολογιστούν αν εισάγουμε την πλήρη βάση

$$|d\rangle \langle d| + \sum_{x=-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| = \mathbb{1} \quad (4.6.4)$$

Το αποτέλεσμα είναι:

$$\left\langle k_f \;\middle|\; \Psi^{(+)}_{k'} \right\rangle = \delta(k_f - k') + \frac{ib_{k'}}{2\pi} \frac{\sin k'}{\cos k_f - \cos(k' + i\eta)} \tag{4.6.5}$$

$$\left\langle \Psi^{(+)}_{k} \;\middle|\; k_i \right\rangle = \delta(k - k_i) + \frac{ib^*_{k}}{2\pi} \frac{\sin k}{\cos(k - i\eta) - \cos k_i} \tag{4.6.6}$$

όπου η περίπτωση $k_f = k_i$ έχει ελεγχθεί προσθέτοντας ένα μικρό μιγαδικό κομμάτι $i\eta$. Βλέποντας ποιοι όροι δίνουν δέλτα συνάρτηση βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} S_{k_f k_i} =& T_{ii}(0)\delta(k_f - k_i) + R_{ii}(0)\delta(k_f - k_i) \\ &+ \sum_{n=-\infty, n\neq 0}^{+\infty} T_{fi}(n)\delta(k_f(n) - k_i) + \sum_{n=-\infty, n\neq 0}^{+\infty} R_{fi}(n)\delta(k_f(n) - k_i) \end{aligned} \tag{4.6.7}$$

όπου $k_f(n)$ είναι η τελική ορμή όπως μπορεί να δεί κάποιος από τη δέλτα συνάρτηση της εξίσωσης Εξ. (4.6.2) και δίνεται από την

$$k_f(n) = \arccos\left[\cos k_i - \frac{n\omega}{2h}\right]. \tag{4.6.8}$$

$T_{ii}(0)$, $R_{ii}(0)$ είναι οι ελαστικοί συντελεστές διέλευσης και ανάκλασης και $T_{ii}(n)$, $R_{ii}(n)$ οι αντίστοιχοι ανελαστικοί. Εύκολα βλέπουμε οτι δίνονται από τις ακόλουθες εκφράσεις:

$$T_{ii}(0) = T^{st}_{k_i} + \frac{i}{2h\left|\sin k_i\right|} Y_{k_i k_i}(0) \tag{4.6.9}$$

$$R_{ii}(0) = R^{st}_{k_i} + \frac{i}{2h\left|\sin k_i\right|} Y_{-k_i k_i}(0) \tag{4.6.10}$$

$$T_{fi}(n) = \frac{i}{2h\left|\sin k_f(n)\right|} Y_{k_f k_i}(n) \tag{4.6.11}$$

$$R_{fi}(n) = \frac{i}{2h\left|\sin k_f(n)\right|} Y_{-k_f k_i}(n) \tag{4.6.12}$$

όπου $T^{st}_{k_i}$ και $R^{st}_{k_i}$ δίνεται από την (4.3.18) και

$$
\begin{aligned}
Y_{k_f k_i}(n) = \sqrt{2\pi} B_{k_f k_i}(n) &+ \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{B_{k_f 1}(n-\nu) B_{1k_i}(\nu)}{\varepsilon_1 - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - \delta\varepsilon_{1k_i}(\nu) - i0} \\
&+ \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{B_{k_f 2}(n-\nu) B_{2k_i}(\nu)}{\varepsilon_2 - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - \delta\varepsilon_{2k_i}(\nu) - i0} \\
&+ \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} dp \frac{B_{k_f p}(n-\nu) B_{pk_i}(\nu)}{\varepsilon_p - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - i0} + \mathcal{O}(B^3).
\end{aligned}
\tag{4.6.13}
$$

Σε αυτή την έκφραση έχουμε κρατήσει προφανώς τη διόρθωση της ενέργειας στους παρονομαστές του δεύτερου και τρίτου όρου, παρόλο που οι όροι $\mathcal{O}(B^3)$ παραλείπονται από το συνολικό πλάτος. Αυτό είναι ασυνεπές χωρίς όμως να επηρεάζει το αποτέλεσμά μας όσο ο συνδυασμός $\varepsilon_b - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega$, $b = 1, 2$ είναι σημαντικά μεγαλύτερος από το $\mathcal{O}(B^2)$. Παρ'όλα αυτά μπορεί να συμβεί ο παραπάνω συνδυασμός να πηγαίνει στο μηδέν. Σε αυτή τη περίπτωση ο όρος διόρθωσης της ενέργειας, όντας ίδιας τάξης με τον αριθμητή, γίνεται σημαντικός και δε μπορεί να παραλειφθεί. Αυτή η περίπτωση δημιουργεί τη μη τετριμμένη μορφή του συντελεστή διέλευσης που θα συζητηθεί στην επόμενη παράγραφο.

Γυρίζοντας πίσω στην Εξ. (4.6.3) αν υπολογίσουμε το $\mathrm{Re}\,(\delta\varepsilon_{bk}(\nu))$, $b = 1, 2$ μπορούμε να δούμε ότι δίνει μικρή συνεισφορά ($\leq 10^{-5}$) για όλες τις τιμές παραμέτρων που χρησιμοποιούμε. Ο πρώτος όρος που περιλαμβάνει μεταβάσεις μεταξύ των δέσμιων καταστάσεων υπολογίζεται εύκολα καθώς ο παρονομαστής ποτέ δεν ισούται με το μηδέν, ενώ ο δεύτερος όρος που περιλαμβάνει την κύρια τιμή υπολογίζεται αριθμητικά. Όσον αφορά το μιγαδικό κομμάτι υπολογίζουμε απλώς το ολοκλήρωμα κάνοντας χρήση της δέλτα συνάρτησης:

$$
\mathrm{Im}\,(\delta\varepsilon_{bk}(\nu)) = \frac{1}{2} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2h\,|\sin p|} |B_{bp}(-\nu')|^2 \tag{4.6.14}
$$

αν $p = \arccos\left[\cos k_i - \frac{(\nu+\nu')\omega}{2h}\right] \in (-\pi, \pi)$ [2].

Για τον όρο της Εξ.(4.7.5) που περιλαμβάνει τις μεταβάσεις απο το συνεχές στο συνεχές έχουμε:

[2] Μπορεί να μοιάζει οτι έχουμε απόκληση όταν $\sin p = 0$. Εδώ όμως δεν συμβαίνει αυτό καθώς όπως είδαμε στην Εξ. (4.4.17) για τους αριθμητές έχουμε $|B_{bp}(-\nu)|^2 \sim \sin^2 p$

$$
\begin{aligned}
\sum_{\nu=-\infty}^{\infty}\int_{-\pi}^{\pi} dp\frac{B_{k_fp}(n-\nu)B_{pk_i}(\nu)}{\varepsilon_p-\varepsilon_{k_i}-\nu\omega-i0} =&\mathrm{Pr}\sum_{\nu=-\infty}^{\infty}\int_{-\pi}^{\pi} dp\frac{B_{k_fp}(n-\nu)B_{pk_i}(\nu)}{\varepsilon_p-\varepsilon_{k_i}-\nu\omega} \\
&+i\pi\int_{-\pi}^{\pi} dp\delta\left(\varepsilon_p-\varepsilon_{k_i}-\nu\omega\right)B_{k_fp}(n-\nu)B_{pk_i}(\nu)
\end{aligned}
\tag{4.6.15}
$$

Ο πρώτος όρος είναι μια μη τετριμμένη πρωτεύουσα τιμή που υπολογίζεται αριθμητικά και δίνει μικρές συνεισφορές, ενώ ο δεύτερος όρος υπολογίζεται με τον ίδιο τρόπο όπως ο $\mathrm{Im}\left(\delta\varepsilon_{bk}(\nu)\right)$ απλώς, δηλαδή, λύνοντας το ολοκλήρωμα κάνοντας χρήση της δέλτα συνάρτησης και δίνει μεγαλύτερη συνεισφορά από το πρώτο.

4.7 Αποτελέσματα και σχολιασμός

Σε αυτή τη παράγραφο θα προσπαθήσουμε να ερμηνεύσουμε τη προέλευση των συντονισμών Fano και θα δούμε ορισμένες ενδιαφέρουσες ιδιότητες αυτών. Ας οργανώσουμε αρχικά όλα τα στοιχεία που χρειαζόμαστε για αυτό το σκοπό:

$$
\begin{aligned}
S_{k_fk_i} =&T_{ii}(0)\delta(k_f-k_i)+R_{ii}(0)\delta(k_f-k_i) \\
&+\sum_{n=-\infty,n\neq 0}^{+\infty}T_{fi}(n)\delta(k_f(n)-k_i)+\sum_{n=-\infty,n\neq 0}^{+\infty}R_{fi}(n)\delta(k_f(n)-k_i)
\end{aligned}
\tag{4.7.1}
$$

$$
T_{ii}(0)=T_{k_i}^{st}+\frac{i}{2h\left|\sin k_i\right|}Y_{k_ik_i}(0) \tag{4.7.2}
$$

$$
R_{ii}(0)=R_{k_i}^{st}+\frac{i}{2h\left|\sin k_i\right|}Y_{-k_ik_i}(0) \tag{4.7.3}
$$

$$Y_{k_f k_i}(0) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{B_{k_f 1}(-\nu) B_{1k_i}(\nu)}{\varepsilon_1 - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - \delta\varepsilon_{1k_i}(\nu) - i0} + \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{B_{k_f 2}(-\nu) B_{2k_i}(\nu)}{\varepsilon_2 - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - \delta\varepsilon_{2k_i}(\nu) - i0} + \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} dp \frac{B_{k_f p}(-\nu) B_{pk_i}(\nu)}{\varepsilon_p - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - i0} + \mathcal{O}(B^3). \tag{4.7.4}$$

Υπολογίζοντας τον τρίτο όρο αυτού του αθροίσματος καταλήγουμε στο ότι είναι αρκετά μικρός ώστε να μπορεί να παραλειφθεί. Επομένως:

$$Y_{k_f k_i}(0) = \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{B_{k_f 1}(-\nu) B_{1k_i}(\nu)}{\varepsilon_1 - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - \delta\varepsilon_{1k_i}(\nu) - i0} + \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{B_{k_f 2}(-\nu) B_{2k_i}(\nu)}{\varepsilon_2 - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - \delta\varepsilon_{2k_i}(\nu) - i0} \tag{4.7.5}$$

Ορίζουμε τώρα την ποσότητα:

$$A_{bk_i}(\nu) = \frac{|B_{bk_i}(\nu)|^2}{(\varepsilon_b - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - Re\delta\varepsilon_{bk_i}(\nu)) - iIm\delta\varepsilon_{bk_i}(\nu)}, \qquad b = 1, 2 \tag{4.7.6}$$

όπου:

$$\mathrm{Im}\left(\delta\varepsilon_{bk}(\nu)\right) = \frac{1}{2} \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{1}{2h\left|\sin p\right|} |B_{bp}(-\nu')|^2 \tag{4.7.7}$$

Για σχεδόν όλες τις τιμές της εισερχόμενης ενέργειας η πιθανότητα της αυθόρμητης απορρόφησης είναι για το σύστημα πολύ μικρή και δε παίζει ρόλο στη διαμόρφωση του πλάτους $Y_{k_i k_i}(0)$ και επομένως δεν επηρεάζει το συντελεστή διέλευσης ο οποίος καθορίζεται από όρους που περιλαμβάνουν μεταβάσεις από το συνεχές στο συνεχές ακολουθώντας το στατικό προφίλ. Παρόλα αυτά για κάποιες τιμές της εισερχόμενης ενέργειας μπορεί να εμφανιστεί συντονισμός ο οποίος οδηγεί σε μηδενισμό του πραγματικού μέρους του παρονομαστή της Εξ. (4.7.6):

$$\varepsilon_b - \varepsilon_{k_i} - \nu\omega - Re(\delta\varepsilon_{bk_i}(\nu)) \approx 0, \qquad b = 1, 2. \tag{4.7.8}$$

Για αυτό το πρόβλημα μας ενδιαφέρει να βρούμε τις ακριβείς τιμές των παραμέτρων του προβλήματος για τις οποίες οι 2 συντονισμοί Fano μπορούν να έρθουν κοντά μεταξύ τους. Ο λόγος που το επιδιώκουμε αυτό είναι ότι επιθυμούμε να δούμε πώς ερχόμενοι ενεργειακά κοντά οι 2 συντονισμοί (δημιουργώντας ένα προσεγγιστικό εκφυλισμό) επηρεάζουν τις ιδιότητες του συντελεστή διέλευσης. Δηλαδή :

$$\varepsilon_{k_i1} - \varepsilon_{k_i2} \approx (\varepsilon_{b_1} - \varepsilon_{b_2}) - (\nu_1 - \nu_2)\omega \tag{4.7.9}$$

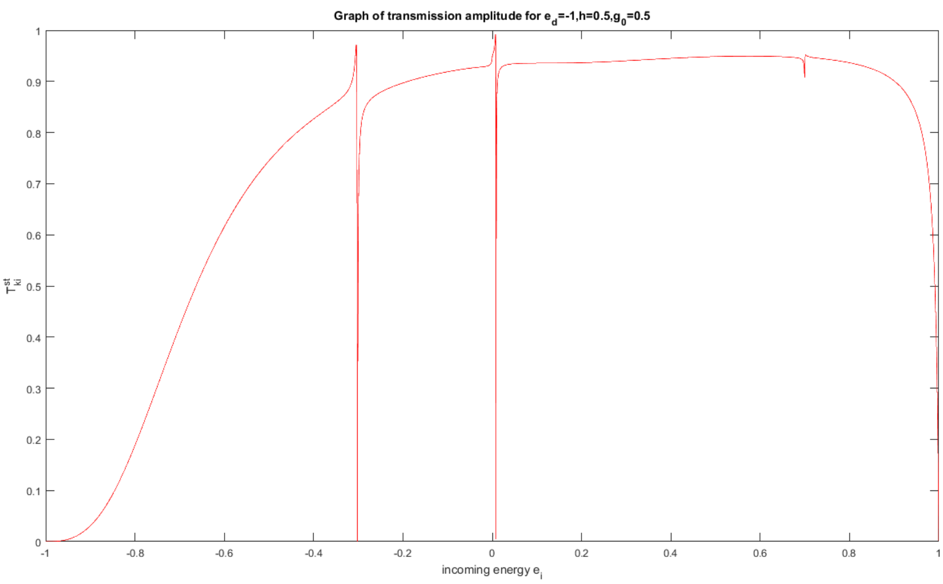
Όπως θα δούμε και στη ανάλυση που ακολουθεί οι 2 κύριοι συντονισμοί Fano συμβαίνουν για $\nu = 1$ και $\nu = -1$ άρα θέτοντας $\omega = 1$ στην εξίσωση (1.5.9) έχουμε:

$$\varepsilon_{k_i1} - \varepsilon_{k_i2} \approx (\varepsilon_{b_1} - \varepsilon_{b_2}) - 2 \tag{4.7.10}$$

Πρέπει απλώς να βρούμε τώρα τις παραμέτρους για τις οποίες $(\varepsilon_{b_1} - \varepsilon_{b_2}) = 2$ και οι 2 συντονισμοί θα έρθουν κοντά. Αλλά όπως έχουμε ήδη δεί στο γράφημα 1.6 θέτοντας την παράμετρο $g_0 = 0$ και g_1 αρκετά μικρές μπορούμε να το πετύχουμε αυτό.

4.7.1 Γραφήματα του συντελεστή διέλευσης και η ερμηνεία τους για διάφορες τιμές παραμέτρων

Είμαστε έτοιμοι τώρα να υπολογίσουμε το συντελεστή διέλευσης για διάφορες τιμές παραμέτρων :



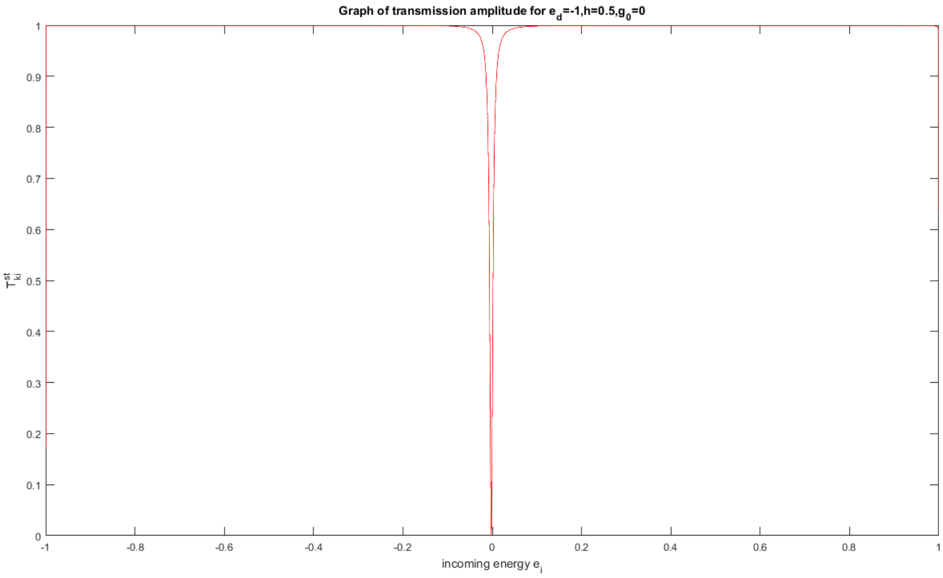
Σχήμα 4.13: $|T_{ii}(k_i)|^2$ ώς συνάρτηση του e_{k_i} για $e_d = -1, g_0 = 0.5, h = 0.5$

Για αυτή την επιλογή παραμέτρων οι δέσμιες καταστάσεις έχουν ενέργειες:

$\varepsilon_{b_1} = 1.01$ και $\varepsilon_{b_2} = -1.30$
Λύνοντας την εξίσωση (1.58) έχουμε:

	ε_{k_i1}	ε_{k_i2}
$\nu = -2$	3.0087	0.7025
$\nu = -1$	2.0087	-0.2975
$\nu = 0$	1.0087	-1.2975
$\nu = 1$	0.0087	-2.2975
$\nu = 2$	-0.9913	-3.2975

Είναι προφανές ότι ενδιαφερόμαστε για τις τιμές στο διάστημα $[-1, 1]$ δηλαδή: $\varepsilon_{k_i1} = 0.0087$ για $\nu_1 = 1$ και $\varepsilon_{k_i2} = -0.2975$ για $\nu_2 = -1$.

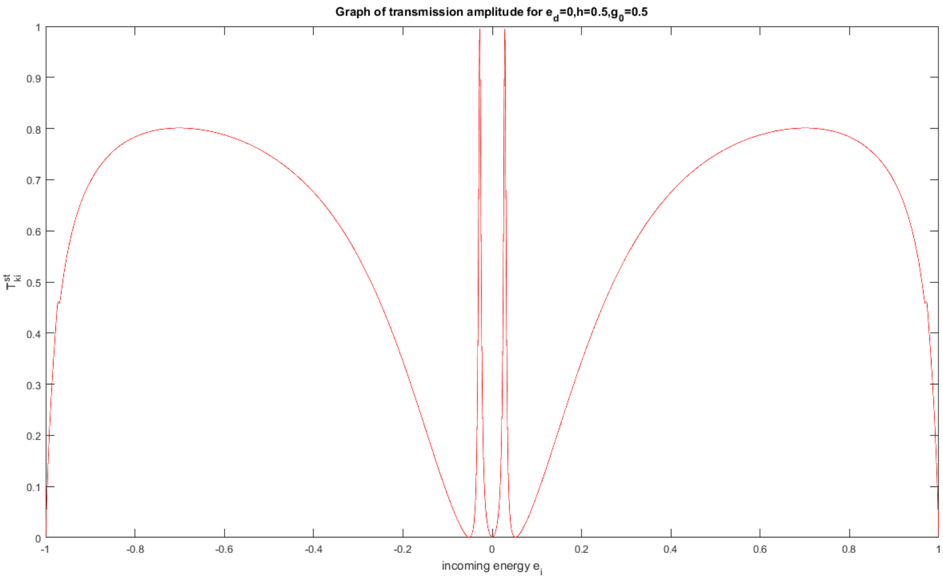


Σχήμα 4.14: $|T_{ii}(k_i)|^2$ ως συνάρτηση του e_{k_i} για $e_d = -1, g_0 = 0, h = 0.5$

Με τις παραπάνω παραμέτρους οι δέσμιες καταστάσεις έχουν ενέργειες:
$\varepsilon_{b_1} = 1.0000$ και $\varepsilon_{b_2} = -1.0277$
Λύνοντας την εξίσωση (1.58) προκύπτει:

	ε_{k_i1}	ε_{k_i2}
$\nu = -2$	3.0000	0.9723
$\nu = -1$	2.0000	-0.0277
$\nu = 0$	1.0000	-1.0277
$\nu = 1$	0.0000	-2.0277
$\nu = 2$	-1.0000	-3.0277

Εμείς ενδιαφερόμαστε για τις τιμές στο διάστημα $[-1,1]$ οπότε: $\varepsilon_{k_i1} = 0.000$ για $\nu_1 = 1$ και $\varepsilon_{k_i2} = -0.0277$ για $\nu_2 = -1$.



Σχήμα 4.15: $|T_{ii}(k_i)|^2$ ως συνάρτηση του e_{k_i} για $e_d = 0, g_0 = 0.5, h = 0.5$

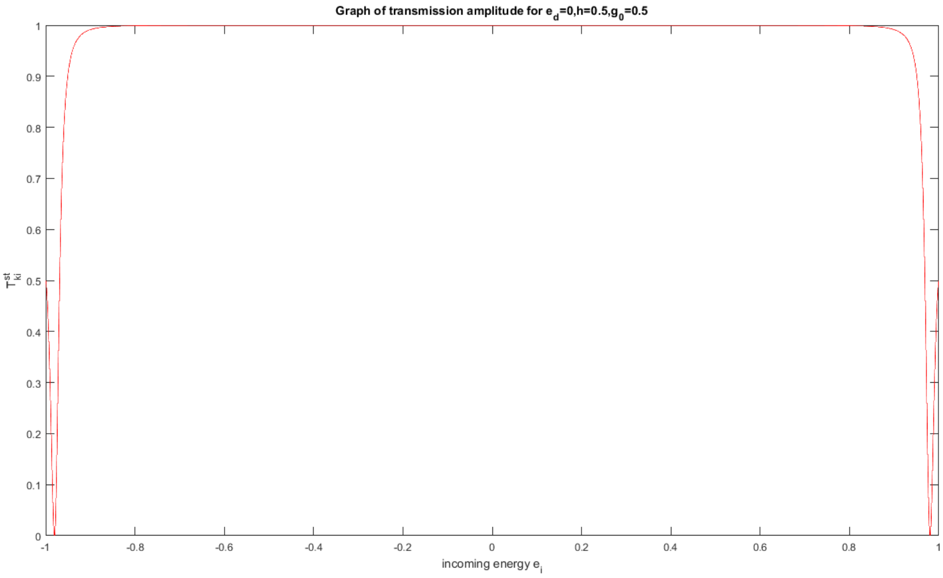
Για την επιλογή παραμέτρων του παραπάνω σχήματος οι δέσμιες καταστάσεις έχουν ενέργειες:

$\varepsilon_{b_1} = 1.0318$ και $\varepsilon_{b_2} = -1.0318$

Λύνοντας την εξίσωση (1.58) προκύπτει:

	ε_{k_i1}	ε_{k_i2}
$\nu = -2$	3.0318	0.9682
$\nu = -1$	2.0318	-0.0318
$\nu = 0$	1.0318	-1.0318
$\nu = 1$	0.0318	-2.0318
$\nu = 2$	-0.9682	-3.0318

Συνεπώς: $\varepsilon_{k_i1} = 0.0318$ για $\nu_1 = 1$ και $\varepsilon_{k_i2} = -0.0318$ για $\nu_2 = -1$.



Σχήμα 4.16: $|T_{ii}(k_i)|^2$ ως συνάρτηση του e_{k_i} για $e_d = 0, g_0 = 0, h = 0.5$

Τέλος για τη παραπάνω επιλογή παραμέτρων οι δέσμιες καταστάσεις έχουν ενέργειες: $\varepsilon_{b_1} = 1.0000$ και $\varepsilon_{b_2} = -1.0000$
Λύνοντας την εξίσωση (1.58) προκύπτει :

	ε_{k_i1}	ε_{k_i2}
$\nu = -2$	3.0000	1.0000
$\nu = -1$	2.0000	-0.0000
$\nu = 0$	1.0000	-1.0000
$\nu = 1$	0.0000	-2.0000
$\nu = 2$	-1.0000	-3.0000

Οπότε βλέπουμε: $\varepsilon_{k_i1} = 0.0000$ για $\nu_1 = 1$ και $\varepsilon_{k_i2} = -0.0000$ για $\nu_2 = -1$

4.7.2 Ερμηνεία των γραφημάτων των συντελεστών διέλευσης

Για αυτό το σύστημα οι πιθανότητες $|B_{bk}(\nu)|^2$ είναι ταχέως μειούμενες συναρτήσεις των ν (Σχήμα 4.10) και k στο εύρος τιμών όπου το διαταρακτικό σχήμα ισχύει και επομένως οι $\nu = \pm 1$ όροι κυριαρχούν:

$$A_{bk_i^{(j)}}(\nu^{(j)}) = \frac{i2h\left|\sin(k_i^{(j)})\right|\left|B_{bk_i^{(j)}}(\nu^{(j)})\right|^2}{\delta_{b,1}\left|B_{bk_i^{(j)}}(-1)\right|^2 + \delta_{b,2}\left|B_{bk_i^{(j)}}(1)\right|^2}, \quad b = 1, 2; \quad j = 1, 2, 3 \qquad (4.7.11)$$

Τώρα η εικόνα έχει γίνει καθαρή. Για κάθε ζεύγος από τιμές ϵ, ν, ας πούμε για παράδειγμα $\varepsilon_{k_i 2} = -0.2975$ για $\nu_2 = -1$, ο όρος του συντονισμού έχει μορφή:

$$A_{2k_i^{(2)}}(-1) = \frac{i2h \left|\sin(k_i^{(2)})\right| \left|B_{2k_i^{(2)}}(-1)\right|^2}{\left|B_{2k_i^{(2)}}(-1)\right|^2} = i2h \left|\sin(k_i^{(2)})\right| \tag{4.7.12}$$

Αυτή είναι στη πραγματικότητα η μόνη συνεισφορά η οποία επιζεί από το άθροισμα $\sum_\nu A_{bk_i^{(j)}}(\nu)$ που εμφανίζεται στους όρους της Εξ. (4.7.5). Επιπλέον ο όρος $\sum_\nu A_{2k_i^{(j)}}(\nu)$ δεν περιλαμβάνει συνεισφορές λόγω συντονισμού και γι'αυτό θεωρείται αμελητέος. Η συνεισφορά του πλάτους (4.7.6) στο ελαστικό μέρος του συντελεστή διέλευσης είναι:

$$\frac{i}{2h\left|\sin(k_i^{(2)})\right|} A_{2k_i^{(2)}}(1) \approx -1 \tag{4.7.13}$$

Αυτή η κυρίαρχη συνεισφορά, μαζί με το γεγονός οτι $b_{k_i^{(2)}} \simeq 0$ Εξ. (4.3.17), οδηγεί το συντελεστή διέλευσης στο μηδέν Εξ. (4.7.2):

$$T_{ii}(0) \approx T_{k_i}^{st} - 1 \approx 0 \tag{4.7.14}$$

Η ίδια ανάλυση μπορεί να επαναληφθεί και στη περίπτωση $\varepsilon_{k_i 1} = 0.0087$ για $\nu_1 = 1$ που συνδέεται με τη δεύτερη δέσμια κατάσταση. Για αυτή τη περίπτωση

$$A_{1k_i^{(2)}}(1) = \frac{i2h \left|\sin(k_i^{(1)})\right| \left|B_{1k_i^{(1)}}(1)\right|^2}{\left|B_{1k_i^{(2)}}(1)\right|^2} = i2h \left|\sin(k_i^{1)})\right| \tag{4.7.15}$$

Αυτή η κυρίαρχη συνεισφορά μαζί με το γεγονός οτι $b_{k_i^{(1)}} \simeq 0$ Εξ. (4.3.17), οδηγούν το πλάτος διέλευσης στο μηδέν Εξ. (4.7.2):

$$T_{ii}(0) \approx T_{k_i}^{st} - 1 \approx 0 \tag{4.7.16}$$

Μια ακόμα σημαντική περίπτωση που αξίζει να αναλυθεί είναι αυτή του σχήματος (1.10).

Σε αυτή τη περίπτωση έχουμε : $\varepsilon_{k_i 1} = 0.0318$ για $\nu_1 = 1$ και $\varepsilon_{k_i 2} = -0.0318$ για $\nu_2 = -1$.

Επαναλαμβάνοντας τη προηγούμενη διαδικασία έχουμε για $\varepsilon_{k_i 2} = -0.0318$,, $\nu_2 = -1$:

$$A_{2k_i^{(2)}}(-1) = \frac{i2h \left|\sin(k_i^{(2)})\right| \left|B_{2k_i^{(2)}}(-1)\right|^2}{\left|B_{2k_i^{(2)}}(-1)\right|^2} = i2h \left|\sin(k_i^{(2)})\right| \tag{4.7.17}$$

$$\frac{i}{2h\left|\sin(k_i^{(2)})\right|} A_{2k_i^{(2)}}(1) \approx -1 \tag{4.7.18}$$

Αυτή η κυρίαρχη συνεισφορά μαζί με το γεγονός οτι $b_{k_i^{(2)}} \simeq 0$ Εξ. (4.3.17), οδηγούν το πλάτος διέλευσης στο μηδέν Εξ. (4.7.2):

$$T_{ii}(0) \approx 0 - 1 \approx -1 \tag{4.7.19}$$

και για $\varepsilon_{k_i 1} = 0.0318$, $\nu_1 = 1$

$$A_{1k_i^{(1)}}(-1) = \frac{i2h\left|\sin(k_i^{(1)})\right|\left|B_{1k_i^{1)}}(-1)\right|^2}{\left|B_{1k_i^{(1)}}(-1)\right|^2} = i2h\left|\sin(k_i^{(1)})\right| \tag{4.7.20}$$

$$\frac{i}{2h\left|\sin(k_i^{(1)})\right|} A_{1k_i^{(1)}}(1) \approx -1 \tag{4.7.21}$$

$$T_{ii}(0) \approx 0 - 1 \approx -1 \tag{4.7.22}$$

Άρα η εικόνα είναι η ακόλουθη: για σχεδόν όλες τις εισερχόμενες ορμές η πιθανότητα το σωματίδιο να παγιδευτεί σε κάποια από τις δέσμιες καταστάσεις είναι αμελητέα και το προφίλ του συντελεστή διέλευσης καθορίζεται από μεταπτώσεις του συνεχούς και ακολουθεί τη στατική λύση. Μη τετριμμένη συμπεριφορά έχουμε όταν συμβαίνει κάποιος συντονισμός ο οποίος μαθηματικά ορίζεται ως λύση της εξίσωσης (4.7.10) ενώ φυσικά συμβαίνει όταν τα εύρη ενεργειών που αποκτούν η δέσμια και ελέυθερη κατάσταση (λόγω της εισαγωγής της χρονικά μεταβαλλόμενης διαταραχής) επικαλύπτονται. Σε αυτές τις περιπτώσεις η πιθανότητα παγίδευσης του σωματιδίου αυξάνει κατακόρυφα και αν οι σχετικές τιμές των μεταβάσεων από το συνεχές στη δέσμια κατάσταση το επιτρέπουν, ο συντελεστής διέλευσης μπορεί να μηδενιστεί.

Περνώντας στα ανελαστικά κανάλια βλέπουμε στα προηγούμενα διαγράμματα ότι συνεισφέρουν σχετικά λίγο. Επίσης λόγω της μορφής των συναρτήσεων δέλτα στην εξίσωση (4.7.1), για τις παραμέτρους που έχουμε χρησιμοποιήσει σε αυτή την ενότητα, τα μόνα ανελαστικά κανάλια που συνεισφέρουν είναι αυτά που δείχνουμε.

Αν η εξίσωση (4.7.8) δεν έχει ρίζες (π.χ. αν $\omega > 2$) τότε ο συντελεστής διέλευσης στο ελαστικό κανάλι ακολουθεί πιστά το στατικό αποτέλεσμα και τα ανελαστικά κανάλια δεν συνεισφέρουν καθόλου.

4.8 Συμπεράσματα

Σε αυτό το κεφάλαιο μελετήσαμε διεξοδικά το προφίλ του συντελεστή διέλευσης (ή την αγωγιμότητα) στο σύστημα τύπου-Τ με μία κβαντική τελεία συζευγμένη με έναν άπειρο αγωγό. Αναλύσαμε αρχικά την στατική περίπτωση και επικεντρωθήκαμε στην χρονικά εξαρτημένη περίπτωση όπου εισάγαμε αρμονική ζεύξη μεταξύ της κβαντικής τελείας και του αγωγού.

Η επίλυση με $Floquet$ έδειξε την εμφάνιση δύο ασυμμετρικών ελαχίστων όπου ο συντελεστής διέλευσης μηδενίζεται και ένα ακόμη όπου μειώνεται λίγο. Για να εξηγήσουμε το φαινόμενο αυτό μικροσκοπικά χρησιμοποιήσαμε τη $GPPA$ στο πλαίσιο της οποίας δώσαμε έναν ξεκάθαρο ορισμό για το τι εννοούμε κβαντικό συντονισμό, τον συνδέσαμε με την ύπαρξη των δέσμιων καταστάσεων και δείξαμε κάτω από ποιες προϋποθέσεις μπορούμε να έχουμε συντονισμό τύπου $Fano$ όπου ο συντελεστής διέλευσης μηδενίζεται.

Η σύγκριση με την $Floquet$ είναι αρκετά ενθαρρυντική. Οι εισερχόμενες ορμές όπου ο συντελεστής διέλευσης μηδενίζεται υπολογίζονται με ικανοποιητική ακρίβεια και τα διαταρακτικά (μέχρι δεύτερη τάξη) αποτελέσματα είναι σε πολύ καλή συμφωνία με τα αποτελέσματα της $Floquet$.

Τελικά με κατάλληλη επιλογή των παραμέτρων καταφέραμε να φέρουμε κοντά τους 2 συντονισμούς $Fano$ και να δημιουργήσουμε μια διάταξη όπου για δεδομένη εισερχόμενη ορμή να έχουμε είτε μηδενική είτε πλήρη διέλευση. Αυτό το φαινόμενο μπορεί να οδηγήσει στη δημιουργία διατάξεων διαχείρησης πληροφορίας (π.χ. τρανζίστορ).

Παράρτημα Α′

Αριθμητικές μέθοδοι

Σε αυτό το παράρτημα θα δώσουμε τις αριθμητικές μεθόδους που χρησιμοποιήσαμε στην εργασία. Οι υπολογισμοί έγιναν με $Matlab$.

Α′.1 Αριθμητική επίλυση των εξισώσεων *Floquet*

Ας δούμε πως φτιάχνουμε τον πίνακα *Floquet* για για το πρόβλημα του τύπου-Τ *dot* (βλέπε εξίσωση (4.5.10) . Έστω ότι έχουμε μόνο 5 κανάλια *Floquet*: $n = -2, ..., 2$ και άρα $T_{-3} = T_3 = 0$. Με αυτό τον περιορισμό εφαρμόζουμε την εξίσωση (4.5.10) για κάθε $n = -2, ..., 2$:

$$\begin{bmatrix} C_{-2} & D_{-2} & F_{-2} & 0 & 0 \\ B_{-1} & C_{-1} & D_{-1} & F_{-1} & 0 \\ A_0 & B_0 & C_0 & D_0 & F_0 \\ 0 & A_1 & B_1 & C_1 & D_1 \\ 0 & 0 & A_2 & B_2 & C_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{-2} \\ T_{-1} \\ T_0 \\ T_1 \\ T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2ih \sin k_0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{Α′.1.1}$$

Ο F^{-1} μπορεί να υπολογιστεί εύκολα. Για έλεγχο των υπολογισμών χρησιμοποιήθηκαν 2 μέθοδοι (απαλοιφή $Gauss$ και LU) που έδωσαν τα ίδια αποτελέσματα.

Βιβλιογραφία

[1] A. Rivas, S. F. Huelga, Open quantum systemsdoi:10.1007/978-3-642-23354-8. URL http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-23354-8

[2] H.-P. Breuer, F. Petruccione, The theory of open quantum systems, Oxford University Press on Demand, 2002.

[3] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, Quantum computation and quantum information, Cambridge university press, 2010.

[4] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger, Many-body physics with ultracold gases, Reviews of Modern Physics 80 (3) (2008) 885964. doi:https://doi.org/10.1103/ RevMod-

Phys.80.885. URL http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.80.885

[5] A. P. Alivisatos, Semiconductor clusters, nanocrystals, and quantum dots, Science 271 (5251) (1996) 933. doi:10.1126/science.271.5251.933. URL http://dx.doi.org/10.1126/science.271.52

[6] D. Loss, D. P. DiVincenzo, Quantum computation with quantum dots, Physical Review A 57 (1) (1998) 120126. doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevA.57. 120. URL http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.57.120

[7] D. M. Willard, A. Van Orden, Quantum dots: resonant energy-transfer sensor, Nat. Mater. 2 (9) (2003) 575576. doi:10.1038/nmat972.

[8] G. Pavlou, A. Karanikas, F. Diakonos, Life-times of quantum resonances through the geometrical phase propagator approach, Annals of Physics 375 (2016) 351367. doi:10.1016/j.aop.2016 URL http://dx.doi.org/10.1016/j.aop.2016.10.014

[9] W. Li, L. E. Reichl, Floquet scattering through a time-periodic potential, Physical Review B 60 (23) (1999) 1573215741. doi:10.1103/PhysRevB.60.15732. URL http://dx.doi.org/10.1103/

[10] K. Sasada, N. Hatano, G. Ordonez, Resonant Spectrum Analysis of the Conductance of an Open Quantum System and Three Types of Fano Parameter, Journal of the Physical Society of Japan 80 (10) (2011) 104707104707. arXiv:0905.3953, doi: 10.1143/JPSJ.80.104707. URL http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.80.104707

[11] N. Hatano, Equivalence of the effective Hamiltonian approach and the Siegert boundary

[12] M. Moskalets, M. Buttiker, Floquet scattering theory of quantum pumps, Physical Review B 66 (20) (2002) 205320. arXiv:cond-mat/0208356, doi:10.1103/ PhysRevB.66.205320. URL http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.66.205320

[13] J. J. Sakurai, J. Napolitano, Modern Quantum Mechanics, 2nd Edition, Pearson Education, 2014. doi:10.1119/1.14491. 114 Bibliography

[14] N. Zettili, Quantum Mechanics: Concepts and Applications, 2nd Edition, Wiley, 2009.

[15] H. Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets, WORLD SCIENTIFIC PUB CO INC, 2009.

[16] F. K. Diakonos, P. A. Kalozoumis, A. I. Karanikas, N. Manifavas, P. Schmelcher, Geometric-phase-propagator approach to time-dependent quantum systems, Physical Review A 85 (6) (2012) 062110. doi:10.1103/PhysRevA.85.062110. URL http://dx.doi.org/10.1103/PhysR

[17] S.Gasiorowicz, Quantum Physics, JOHN WILEY INC, 2003. URL http://www.ebook.de/de/pro quantumphysics.html

[18] Semiconductor Quantum Dots, Springer, 2002. URL http://www.ebook.de/de/product/5719963 dots.html Bibliography 117

[19] N. Hatano, K. Sasada, H. Nakamura, T. Petrosky, Some Properties of the Resonant State in Quantum Mechanics and Its Computation, Progress of Theoretical Physics

119 (2) (2008) 187222. arXiv:0705.1388, doi:10.1143/PTP.119.187. URL http://dx.doi.org/10.1143/PTI

[20] G. E. Pavlou, N. E. Palaiodimopoulos, P. A. Kalozoumis, A. Sourpis, F. K. Diakonos, A. I. Karanikas, Time-dependent transport through a t-coupled quantum dotarXiv: 1702.08758v1.

[21] National and Kapodistrian University of Athens School of Science Doctoral Dissertation Adiabatic description of quantum resonances in time dependent systems Georgios Pavlou 2017