



ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ  
Εθνικόν και Καποδιστριακόν  
Πανεπιστήμιον Αθηνών  
Τμήμα Φυσικής

Πτυχιακή εργασία

Διάδοση κυμάτων ύλης σε  
μονοδιάστατες, περιοδικά χρονικά  
μεταβαλλόμενες δομές δυναμικού

Ένα απλό μονοδιάστατο μοντέλο για εισαγωγή χρονικής  
εξάρτησης

Διονύσιος Γαλάνης

Επιβλέπων: Ν. Στεφάνου

Αθήνα 2021



## Περίληψη

Στην παρούσα εργασία, επιλύεται αριθμητικά το χβαντικό πρόβλημα σκέδασης ενός σωματιδίου χωρίς σπιν από ένα συγκεκριμένο μονοδιάστατο δυναμικό. Στο πρώτο κεφάλαιο, εξετάζεται η σκέδαση από ένα χρονοανεξάρτητο δυναμικό, το οποίο δημιουργείται από την επανάληψη της ίδιας δομικής μονάδας αποτελούμενης από δύο τετραγωνικούς φραγμούς διαφορετικού ύψους. Για αυτόν τον σκοπό, δίνονται βασικά στοιχεία της χβαντικής θεωρίας σκέδασης και των δύο ισοδύναμων μεθόδων του πίνακα σκέδασης και του πίνακα μεταφοράς. Επίσης, συμπεράσματα της θεωρίας Bloch επικαλούνται για την εξήγηση φαινομένων όταν ο αριθμός επαναλήψεων γίνει αρκετά μεγάλος. Το σημαντικότερο από αυτά είναι η παρατηρούμενη εμφάνιση ενεργειακών ζωνών κι ενεργειακών χασμάτων (όπου έχουμε πλήρη ανάκλαση). Αυτή η συζήτηση τελειώνει με την εισαγωγή μίας ή δύο ατελειών και την εμφάνιση ενός αντίστοιχου αριθμού καταστάσεων συντονισμού μηδενικής ανακλαστικότητας μέσα σε ένα ενεργειακό χάσμα. Έπειτα, στο δεύτερο κεφάλαιο αντιμετωπίζεται το πρόβλημα σκέδασης από ένα περιοδικά ταλαντούμενο σκαλοπάτι δυναμικού με τη βοήθεια της θεωρίας Floquet. Τα συμπεράσματα χρησιμοποιούνται για την εισαγωγή χρονικής εξάρτησης στη στατική δομή με δύο ατέλειες. Η συζήτηση επικεντρώνεται στην παρατήρηση μίας ισχυρής μετάβασης σε καθεστώς τριπλού συντονισμού, όπου ένα σωματίδιο στην προαναφερθείσα κάτω κατάσταση συντονισμού μεταπηδά στην άνω κατάσταση συντονισμού όταν η συχνότητα ταλάντωσης γίνει ίση με τη διαφορά στις συχνότητες των δύο καταστάσεων. Τέλος, αναλύεται ένα παράδειγμα αλληλεπίδρασης ανάμεσα σε κυματοσυναρτήσεις Floquet με τη μορφή αμοιβαίας άπωσης καταστάσεων που οδηγεί σε αποφυγή σημείων διασταύρωσης.

## Abstract

In this work, the problem of quantum scattering of a spinless particle by a particular one-dimensional potential is solved numerically. In the first chapter, the scattering by a time-independent potential, created by the repetition of a structural unit composed of two square barriers of different height, is examined. For this purpose, basic elements of the quantum theory of scattering and of two equivalent methods, that of the scattering matrix and that of the transmission matrix, are given. Also, results of Bloch's theory are invoked to explain phenomena when the number of repeating units becomes large enough. The most important of them is the observed appearance of energy bands and energy gaps (where we have total reflection). This discussion ends with the insertion of one or two imperfections and the appearance of a corresponding number of resonance states with zero reflectivity inside an energy gap. Next, in the second chapter, the problem of scattering by a periodically vibrating potential step is approached with the help of Floquet's theory. The results are used to introduce time dependence in the previous static structure with two imperfections. The discussion is focused on the observation of a pronounced transition in a triple-resonance regime, where a particle in the aforementioned lower resonance state jumps to the higher resonance state when the vibrational frequency becomes equal to the difference between the states' frequency. Finally, an example of interaction between Floquet wave functions is demonstrated in the form of avoided crossing.



# Περιεχόμενα

Περίληψη	iii
Περιεχόμενα	v
Εισαγωγή	1
<b>1 Διάδοση κύματος ύλης σε στατική πολυστρωματική δομή</b>	<b>3</b>
1.1 Σκέδαση από δυναμικό στη μία διάσταση . . . . .	3
1.2 Ιδιότητες του πίνακα μεταφοράς . . . . .	6
1.3 Μέθοδος του πίνακα σκέδασης . . . . .	11
1.4 Άπειρη περιοδική δομή-Κυματοσυναρτήσεις Bloch . . . . .	12
1.5 Μονοδιάστατος τετραγωνικός φραγμός δυναμικού εύρους $\alpha$ και ύψους $V$ . . . . .	16
1.6 Πολυστρωματική δομή φραγμών δυναμικού . . . . .	16
1.7 Καταστάσεις ατελειών . . . . .	19
<b>2 Σκέδαση σωματιδίου από περιοδικά χρονικά μεταβαλλόμενη δομή</b>	<b>25</b>
2.1 Σκέδαση σωματιδίου από ταλαντούμενη διεπιφάνεια . . . . .	25
2.2 Ταλαντούμενο σκαλοπάτι δυναμικού-Σύγκριση με την αδιαβατική προσέγγιση . . . . .	31
2.3 Πολυστρωματική δομή με ταλαντούμενες διεπιφάνειες . . . . .	34
2.4 Επίδραση της διαφοράς φάσης μεταξύ της κίνησης των διεπιφανειών	38
2.5 Συμπεράσματα-Προοπτικές . . . . .	43
<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>45</b>



# Εισαγωγή

Η μεσοσκοπική φυσική είναι ένας κλάδος της φυσικής στερεάς κατάστασης ο οποίος ασχολείται με διατάξεις μεγέθους από μερικά νανόμετρα έως και αρκετά μικρόμετρα ([1], εισαγωγικές παρατηρήσεις, και [2]). Το αντικείμενο μελέτης είναι ως επί το πλείστον η μεταφορά ηλεκτρονίων, καθώς οι διαστάσεις των διατάξεων είναι αρκετά μικρές ώστε να γίνεται εμφανής η χβαντική συμπεριφορά των ηλεκτρονίων, αλλά ταυτόχρονα αρκετά μεγάλες ώστε να μη χρειάζεται η περιγραφή του πεδίου το οποίο αισθάνονται τα ηλεκτρόνια σε ατομικό επίπεδο. Η εμφάνιση της μεσοσκοπικής φυσικής έγινε τη δεκαετία του 1980, όταν κατέστη δυνατή η παρασκευή αγώγιμων διατάξεων στην κλίμακα των νανομέτρων με μεθόδους όπως, για παράδειγμα, η επιταξία μοριακής δέσμης (molecular beam epitaxy-MBE) και το μικροσκόπιο σάρωσης σήραγγας (scanning tunneling microscope-STM)[2]. Με αυτές τις δύο υλοποιήθηκαν χαρακτηριστικά πειράματα τα οποία επιδεικνύουν τα χβαντικά φαινόμενα τα οποία διέπουν την κίνηση των ηλεκτρονίων, όπως η χβάντωση της αγωγιμότητας συναρτήσεως του φάρδους του αγωγού ([3, 4] πάνω σε διδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων σε διεπιφάνεια GaAs-AlGaAs) και συντονισμοί στην αγωγιμότητα λόγω του φαινομένου Aharonov-Bohm [5].

Παράλληλα με την πειραματική ανάπτυξη, σημαντική θεωρητική έρευνα γινόταν για την πρόβλεψη και την εξήγηση αυτών των αποτελεσμάτων. Ενδεικτικά αναφέρονται εδώ οι δημοσιεύσεις [6–9] από τους Landauer, Büttiker, Imry και άλλους<sup>1</sup>. Ένα από τα σημαντικότερα απότοκα των θεωρητικών ερευνών ήταν ο φορμαλισμός Landauer-Büttiker. Σύμφωνα με αυτόν, η αγωγιμότητα ανάμεσα σε δεξαμενές ηλεκτρονίων οι οποίες συνδέονται μέσω ενός μεσοσκοπικού αγωγού εξαρτάται άμεσα από τον συντελεστή διέλευσης ενός ηλεκτρονίου διαμέσου του αγωγού. Επομένως, ο υπολογισμός της αγωγιμότητας ανάγεται σε ένα κλασικό χβαντομηχανικό πρόβλημα σκέδασης, ήτοι στην επίλυση της εξίσωσης Schrödinger για ένα ηλεκτρόνιο. Απαραίτητη προϋπόθεση για να έχει νόημα ο φορμαλισμός είναι η διάδοση των ηλεκτρονίων να είναι συνεκτική, δηλαδή ο αγωγός να είναι αρκετά μικρός ώστε να μπορούν να αγνοηθούν διαδικασίες τυχαιοποίησης της σχετικής φάσης μεταξύ των ηλεκτρονίων. Πιο επίσημα, αυτή η προϋπόθεση εκφράζεται ως η ανάγκη οι διαστάσεις του αγωγού να είναι μικρότερες από το χαρακτηριστικό μήκος χαλάρωσης φάσης. Για μία πληρέστερη παρουσίαση του φορμαλισμού, καλές πηγές είναι το βιβλίο [1] του S. Datta (το οποίο μπορεί να χρησιμεύσει γενικότερα ως μία καλή εισαγωγή στη μεσοσκοπική φυσική) και το βιβλίο [10] του M. V. Moskalets (όπου δίνεται παραπάνω έμφαση σε χρονοεξαρτώμενα προβλήματα σκέδασης).

Ο σκοπός αυτής της πτυχιачής εργασίας είναι, δεδομένης της χρησιμότητας

---

<sup>1</sup>Στην πραγματικότητα, η ποσότητα τέτοιων εργασιών είναι αρκετά μεγάλη, με αποτέλεσμα ούτε να είναι δυνατό να συνοψιστούν όλες εδώ, ούτε να υπάρξει η βεβαιότητα ότι δεν έχουν παραληφθεί σημαντικοί ερευνητές. Ο ενδιαφερόμενος αναγνώστης ενθαρρύνεται να ακολουθήσει τη βιβλιογραφία των εδώ παρατιθέμενων δημοσιεύσεων.

του στον φορμαλισμό Landauer-Büttiker, να υπολογιστεί ο συντελεστής διέλευσης για ένα απλό μοντέλο μίας μονοδιάστατης μεσοσκοπικής δομής: διαδοχικά στρώματα αποτελούμενα από δύο γειτονικούς φραγμούς δυναμικού διαφορετικού ύψους. Παρατηρεί κάποιος ότι η προσέγγιση του δυναμικού ως απλών ορθογώνιων φραγμών βασίζεται, πρώτον, στην προσέγγιση μέσου πεδίου και, δεύτερον, στο ότι το μήκος κύματος του διαδιδόμενου ηλεκτρονίου είναι αρκετά μεγαλύτερο από το μήκος μέσα στο οποίο μεταβάλλεται το δυναμικό με συνεχή τρόπο στη διεπιφάνεια δύο φραγμών. Είναι εύλογο να υποθέσουμε ότι η δεύτερη προϋπόθεση συνεπάγεται την πρώτη, με αποτέλεσμα στο μήκος κύματος του σωματιδίου να πρέπει να επιβληθεί ένα κοινό κάτω όριο. Την ίδια στιγμή, πρέπει να προσέξουμε το ότι, ενώ υποθέτουμε πως το πλάτος των φραγμών είναι αρκετά μεγαλύτερο από αυτό το μήκος μεταβολής του δυναμικού, θέλουμε το συνολικό μήκος της δομής να είναι μικρότερο από το μήκος χαλάρωσης φάσης. Ξεκαθαρίζουμε από τώρα ότι η αντιμετώπιση τέτοιων προβλημάτων, όπως και η απάντηση ερωτημάτων σχετικά με την ακριβή εφαρμογή του φορμαλισμού για τον υπολογισμό της αγωγιμότητας ή την πειραματική υλοποίηση της δομής, δεν ανήκουν στους σκοπούς της εργασίας. Το μόνο το οποίο θα μας απασχολήσει είναι η επίλυση της εξίσωσης Schrödinger και η εύρεση των καταστάσεων σκέδασης για ένα ηλεκτρόνιο. Επίσης, επειδή φαινόμενα σπιν θα αγνοηθούν και δε θα γίνουν αντικαταστάσεις τιμών μαζών και φορτίων, δεν υπάρχει λόγος να περιορίσουμε το σκεδαζόμενο σωματίδιο σε ηλεκτρόνιο. Παραδείγματος χάριν, η δημοσίευση [11], από την οποία δανείζεται η ιδέα για την εισαγωγή χρονικής εξάρτησης μέσω ταλαντούμενων διεπιφανειών, πραγματεύεται τη σκέδαση νετρονίων από ένα μακροσκοπικό ταλαντούμενο κάτοπτρο. Στο πρώτο κεφάλαιο, μελετάται μία απλή πολυστρωματική δομή σχηματιζόμενη από την παράθεση της ίδιας δομικής μονάδας φραγμών δυναμικού. Έπειτα, στο ίδιο κεφάλαιο επιχειρείται η εισαγωγή ατελειών και η μελέτη των αντίστοιχων καταστάσεων οι οποίες εμφανίζονται στις περιοχές των ενεργειακών χασμάτων. Στο δεύτερο κεφάλαιο, εισάγεται περιοδική χρονική εξάρτηση στο δυναμικό μέσω της αρμονικής ταλάντωσης κάποιων διεπιφανειών. Τη βάση για την πραγμάτευση του χρονοεξαρτώμενου προβλήματος αποτελεί το θεώρημα του Floquet. Οι γενικές γραμμές της διαδικασίας μπορούν επίσης να βρεθούν στο [10]. Για μία πιο γενική θεώρηση του θεωρήματος Floquet και των εφαρμογών του στην κβαντομηχανική, καλή πηγή είναι το άρθρο [12].

Για το στατικό πρόβλημα, σημαντική βοήθεια ήταν η μεταπτυχιακή εργασία του Σπύρου Κανταρέλλη [13], όπου παρόμοια αποτελέσματα εξάγονται για έναν ακουστικό κρύσταλλο, γεγονός το οποίο υπογραμμίζει τα κοινά σημεία κάθε κυματικής διάδοσης σε περιοδικά μέσα [14]. Η προσέγγιση του πίνακα σκέδασης, βασικό εργαλείο για τα παρακάτω, εξηγείται και στο [15].



# Κεφάλαιο 1

## Διάδοση κύματος ύλης σε στατική πολυστρωματική δομή

### 1.1 Σκέδαση από δυναμικό στη μία διάσταση

Έστω ότι θέλουμε να λύσουμε ένα μονοδιάστατο κβαντομηχανικό πρόβλημα σκέδασης ενός σωματιδίου από ένα δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας (το οποίο, δηλαδή, είναι πρακτικά μηδέν για  $|x| < M$ , όπου  $M > 0$  μία σταθερά). Τέτοια προβλήματα προκύπτουν, παραδείγματος χάριν, από την τρισδιάστατη εξίσωση Schrödinger με χωρισμό μεταβλητών, αν η συμμετρία του φυσικού συστήματος είναι κατάλληλη. Για χρονοανεξάρτητα δυναμικά  $V(x)$ , η λύση του προβλήματος έγκειται στην επίλυση της μονοδιάστατης χρονοανεξάρτητης εξίσωσης Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi_E(x)}{dx^2} + V(x)\phi_E(x) = E\phi_E(x), \quad (1.1)$$

όπου  $E$  η ενέργεια της ιδιοκατάστασης  $\phi_E$ . Από εδώ και στο εξής, θα παραλείψουμε τον δείκτη  $E$  για λόγους συντομίας. Επειδή ενδιαφερόμαστε για τις καταστάσεις σκέδασης, εξετάζουμε μόνο την περίπτωση  $E > 0$ .

Αρκετά μακριά από το δυναμικό, η εξ. (1.1) ανάγεται στην εξίσωση Schrödinger ενός ελεύθερου σωματιδίου

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = E\phi(x). \quad (1.2)$$

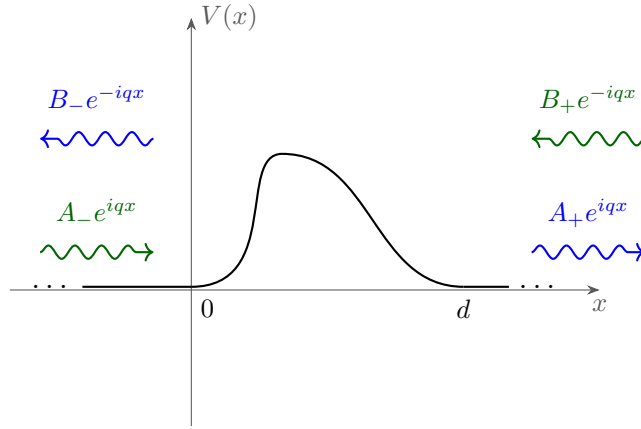
Συνεπάγεται ότι η οριακή μορφή της  $\phi$  είναι εν γένει

$$\phi = \begin{cases} A_- e^{iqx} + B_- e^{-iqx}, & x \rightarrow -\infty \\ A_+ e^{iqx} + B_+ e^{-iqx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases}, \quad (1.3)$$

όπου

$$q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0. \quad (1.4)$$

Οι οριακές συνθήκες οι οποίες καθορίζουν την ακριβή λύση του προβλήματος συνίστανται στον προσδιορισμό δύο εκ των τεσσάρων συντελεστών που εμφανίζονται στην εξ. (1.3). Οι υπόλοιποι δύο συντελεστές όπως και η μορφή της  $\phi$  στην περιοχή του δυναμικού προκύπτουν από την απαίτηση συνέχειας της  $\phi$  και της πρώτης της παραγώγου (εκτός από κάποιες εξαιρέσεις όταν το δυναμικό παρουσιάζει ακραία συμπεριφορά, οι οποίες δε θα μας απασχολήσουν). Για συγκεκριμένη  $E$ , η



Σχήμα 1.1: Περιγραφή της σκέδασης από δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας στη μία διάσταση με χρήση του πίνακα σκέδασης. Τα ανεξάρτητα κύματα (δηλαδή τα εισερχόμενα) σημαίνονται με πράσινο, ενώ τα εξαρτώμενα (δηλαδή τα εξερχόμενα) σημαίνονται με μπλε.

γενική λύση της εξ. (1.1), η οποία είναι μία γραμμική δευτεροτάξια διαφορική εξίσωση, δίνεται από τον γραμμικό συνδυασμό δύο ανεξάρτητων λύσεων-διανυσμάτων βάσης, με την κάθε μία να αποτελεί λύση της εξ. (1.1) για συγκεκριμένες οριακές συνθήκες.

Μία συνήθης τακτική είναι να πάρουμε ως πρώτο διάνυσμα βάσης τη λύση για  $B_+ = 0$  και  $A_- = 1$ . Αυτή η λύση αντιστοιχεί στη σκέδαση ενός σωματιδίου με πρακτικά καθορισμένη θετική ορμή, το οποίο προσπίπτει στο δυναμικό από αριστερά. Κατά συνέπεια, είναι λογικό στα δεξιά του δυναμικού να μην υπάρχει πιθανότητα ανίχνευσης του σωματιδίου με αρνητική ορμή (υπενθυμίζουμε ότι  $\hat{p}e^{-iqx} = -\hbar q e^{-iqx}$ ). Μετονομάζοντας τους εναπομείναντες δύο συντελεστές, έχουμε

$$\phi_{left} = \begin{cases} e^{iqx} + r^+ e^{-iqx}, & x \rightarrow -\infty \\ t^+ e^{iqx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (1.5)$$

Οι  $r^+$  και  $t^+$  συνδέονται ως γνωστόν με τους συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης ( $R$  και  $T$  αντίστοιχα). Πιο συγκεκριμένα, το ρεύμα πιθανότητας ορίζεται ως

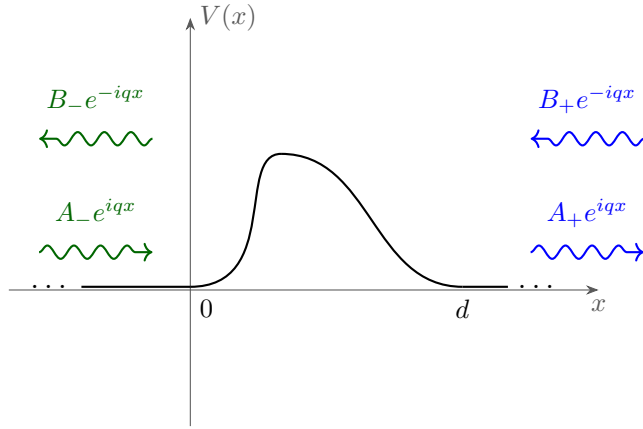
$$J(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}[\phi^* \frac{d\phi}{dx}] = \text{const.} \quad (1.6)$$

και δεν εξαρτάται από τη θέση λόγω της εξίσωσης συνέχειας για τη ροή πιθανότητας. Αν ορίσουμε ρεύματα  $J_{in}$ ,  $J_{ref}$  και  $J_{tr}$  για κάθε μία από τις συνιστώσες της  $\phi_{left}$  (δηλαδή εισερχόμενο, ανακλώμενο και διερχόμενο κύμα), τότε

$$R = \left| \frac{J_{ref}}{J_{in}} \right| = |r^\pm|^2 \quad \text{και} \quad T = \left| \frac{J_{tr}}{J_{in}} \right| = |t^\pm|^2, \quad (1.7)$$

Όπως εξηγείται στην ενότητα 1.2, οι  $R$  και  $T$  είναι ανεξάρτητοι της κατεύθυνσης πρόσπτωσης για δυναμικά πεπερασμένης εμβέλειας.

Ως δεύτερο διάνυσμα βάσης παίρνουμε τότε την κατάσταση με  $B_+ = 1$  και



Σχήμα 1.2: Περιγραφή της σκέδασης από δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας στη μία διάσταση με χρήση του πίνακα μεταφοράς. Τα ανεξάρτητα κύματα (δηλαδή αυτά στα αριστερά του δυναμικού) σημαίνονται με πράσινο, ενώ τα εξαρτώμενα (δηλαδή αυτά στα δεξιά) σημαίνονται με μπλε.

$A_- = 0$  η οποία αντιστοιχεί σε πρόσπτωση του σωματιδίου από τα δεξιά

$$\phi_{right} = \begin{cases} t^- e^{-iqx}, & x \rightarrow -\infty \\ e^{-iqx} + r^- e^{iqx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (1.8)$$

Η γενική λύση δίνεται τότε ως  $\phi = A_- \phi_{left} + B_+ \phi_{right}$ . Η σχέση η οποία συνδέει τους εξαρτημένους συντελεστές  $A_+$  και  $B_-$  με τους ανεξάρτητους  $A_-$  και  $B_+$  είναι γραμμική και παρέχεται από τον πίνακα σκέδασης

$$\begin{pmatrix} A_+ \\ B_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t^+ & r^- \\ r^+ & t^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_- \\ B_+ \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} A_- \\ B_+ \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

Υπάρχει και μία δεύτερη αρκετά χρήσιμη προσέγγιση. Αυτή είναι να θεωρήσουμε ως ανεξάρτητους τους  $A_-$  και  $B_-$ . Ο πίνακας ο οποίος δίνει αυτή τη φορά τους εξαρτημένους συντελεστές είναι ο πίνακας μεταφοράς

$$\begin{pmatrix} A_+ \\ B_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_- \\ B_- \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_- \\ B_- \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

Οι συναρτήσεις βάσης είναι τώρα οι

$$\phi_+ = \begin{cases} e^{iqx}, & x \rightarrow -\infty \\ M_{11} e^{iqx} + M_{21} e^{-iqx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (1.11)$$

$$\phi_- = \begin{cases} e^{-iqx}, & x \rightarrow -\infty \\ M_{12} e^{iqx} + M_{22} e^{-iqx}, & x \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (1.12)$$

Λόγω της φυσικής πληροφορίας την οποία μεταφέρουν οι  $r$  και  $t$ , θέλουμε να εκφράσουμε τα στοιχεία του  $M$  συναρτήσει αυτών. Μετά από πράξεις έχουμε

$$M = \begin{pmatrix} t^+ - r^+ r^- / t^- & r^- / t^- \\ -r^+ / t^- & 1 / t^- \end{pmatrix} \quad (1.13)$$

Ας εξετάσουμε τη λίγο πιο συγκεκριμένη περίπτωση το δυναμικό να είναι πραγματικά 0 εκτός του διαστήματος  $[0, d]$ . Τότε η οριακή μορφή της  $\phi$  εκτείνεται μέχρι τα  $x = 0$  και  $x = d$

$$\phi = \begin{cases} A_- e^{iqx} + B_- e^{-iqx}, & x < 0 \\ A_+ e^{iqx} + B_+ e^{-iqx}, & x > d \end{cases} . \quad (1.14)$$

Ας γράψουμε την παραπάνω συνάρτηση στη μορφή

$$\begin{aligned} \phi &= \begin{cases} A_- e^{iqx} + B_- e^{-iqx}, & x < 0 \\ A_+ e^{iqd} e^{iq(x-d)} + B_+ e^{-iqd} e^{-iq(x-d)}, & x > d \end{cases} \\ &= \begin{cases} A_- e^{iqx} + B_- e^{-iqx}, & x < 0 \\ C_+ e^{iq(x-d)} + D_+ e^{-iq(x-d)}, & x > d \end{cases} . \end{aligned} \quad (1.15)$$

Τώρα, οι κυματοσυναρτήσεις αριστερά και δεξιά του δυναμικού, οι οποίες έχουν τη μορφή αθροίσματος ελεύθερων κυμάτων, έχουν αναπτυχθεί ως προς διαφορετικά σημεία αναφοράς. Παρότι εμείς αναπτύσσουμε, για λόγους ευκολίας, ως προς τα δύο σημεία τα οποία οριοθετούν το δυναμικό, εν γένει τα δύο κέντρα ανάπτυξης είναι αυθαίρετα

$$\begin{aligned} \phi &= \begin{cases} A_- e^{iqx_1} e^{iq(x-x_1)} + B_- e^{-iqx_1} e^{-iq(x-x_1)}, & x < 0 \\ A_+ e^{iqx_2} e^{iq(x-x_2)} + B_+ e^{-iqx_2} e^{-iq(x-x_2)}, & x > d \end{cases} \\ &= \begin{cases} C_- e^{iq(x-x_1)} + D_- e^{-iq(x-x_1)}, & x < 0 \\ C_+ e^{iq(x-x_2)} + D_+ e^{-iq(x-x_2)}, & x > d \end{cases} . \end{aligned} \quad (1.16)$$

Εύκολα καταλαβαίνει κανείς ότι μπορούμε πάλι να ορίσουμε συντελεστές  $r$  και  $t$  για κάθε επιλογή κέντρων ανάπτυξης, οι οποίοι αποκαλούνται γενικευμένοι συντελεστές

$$r_{gen}^+ = e^{-2iqx_1} r^+ , \quad (1.17\alpha')$$

$$t_{gen}^+ = e^{iq(x_2-x_1)} t^+ , \quad (1.17\beta')$$

$$r_{gen}^- = e^{2iqx_2} r^- , \quad (1.17\gamma')$$

$$t_{gen}^- = e^{iq(x_2-x_1)} t^- . \quad (1.17\delta')$$

Σε αυτούς τους γενικευμένους συντελεστές αντιστοιχεί ένας γενικευμένος πίνακας σκέδασης  $Q_{gen}$ , όπως κι ένας γενικευμένος πίνακας μεταφοράς  $M_{gen}$ , ο οποίος για ανάπτυξη σαν της εξ. (1.15) συνδέεται με αυτόν της προηγούμενης παραγράφου με την απλή σχέση

$$M_{gen} = \begin{pmatrix} e^{iqd} & 0 \\ 0 & e^{-iqd} \end{pmatrix} M . \quad (1.18)$$

Παρακάτω, μόνο οι γενικευμένοι συντελεστές και πίνακες θα χρησιμοποιηθούν, οπότε η αναφορά σε αυτούς ως γενικευμένους και οι δείκτες  $gen$  θα παραλείπονται γενικά.

## 1.2 Ιδιότητες του πίνακα μεταφοράς

Η σημαντικότερη ιδιότητα του γενικευμένου πίνακα μεταφοράς, πάνω στην οποία εδράζεται η αντίστοιχη μέθοδος για τη μελέτη πολυστρωματικών δομών, είναι

ότι, αν στα δεξιά του πρώτου δυναμικού, με πίνακα μεταφοράς  $M_1$ , θεωρήσουμε ένα δεύτερο δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας, με πίνακα μεταφοράς  $M_2$ , ο πίνακας μεταφοράς του συνολικού δυναμικού είναι απλώς το γινόμενο των επιμέρους πινάκων ([16]-Κεφάλαιο III, Συμπλήρωμα N)

$$M = M_2 \cdot M_1 , \quad (1.19)$$

εφόσον το κέντρο ανάπτυξης του  $M_1$  για τα κύματα στα δεξιά του πρώτου δυναμικού και το κέντρο ανάπτυξης του  $M_2$  για τα κύματα στα αριστερά του δεύτερου δυναμικού ταυτίζονται. Αν έχουμε αναπτύξει τα ελεύθερα κύματα όπως στην εξ. (1.15), η παραπάνω προϋπόθεση πληρείται. Επαγωγικά, η εξ. (1.19) γενικεύεται για πολυστρωματική δομή.

Ο πίνακας μεταφοράς έχει κι άλλες σημαντικές ιδιότητες πέραν της προαναφερθείσας. Ας επιστρέψουμε στην εξ. (1.1). Επειδή η μεταβλητή  $x$ , το δυναμικό  $V(x)$  και η ενέργεια  $E$  είναι πραγματικά μεγέθη, αν η  $\phi$  είναι λύση της εξίσωσης, τότε και η  $\phi^*$  είναι λύση. Εφαρμόζοντας αυτό το συμπέρασμα στην εξ. (1.11), παίρνουμε την

$$(\phi_+)^* = \begin{cases} e^{-iqx} & x \rightarrow -\infty \\ M_{21}^* e^{iqx} + M_{11}^* e^{-iqx} & x \rightarrow +\infty \end{cases} . \quad (1.20)$$

Συγκρίνοντας με την εξ. (1.12) και επικαλούμενοι τη μοναδικότητα των λύσεων, βρίσκουμε ότι

$$M_{22} = M_{11}^* \quad \text{και} \quad M_{12} = M_{21}^* . \quad (1.21)$$

Επομένως, κάθε πίνακας μεταφοράς έχει τη μορφή

$$M = \begin{pmatrix} f & g^* \\ g & f^* \end{pmatrix} . \quad (1.22)$$

Σύγκριση με την εξ. (1.13) μας δίνει ότι

$$-r^+/t^- = (r^-/t^+)^* \Rightarrow |r^+| = |r^-| , \quad (1.23)$$

σχέση η οποία μας λέει ότι ο συντελεστής ανάκλασης  $R$  είναι ο ίδιος, ανεξάρτητα από τη μεριά από την οποία προσπίπτει το σωματίδιο στο δυναμικό (εφόσον βέβαια το δυναμικό είναι πεπερασμένης εμβέλειας). Κατά συνέπεια, δείκτες  $\pm$  είναι περιττοί.

Ταυτόχρονα, η εξίσωση συνέχειας εξασφαλίζει ότι σε μονοδιάστατα χρονοανεξάρτητα προβλήματα το ρεύμα πιθανότητας είναι σταθερό κατά μήκος του άξονα  $x$

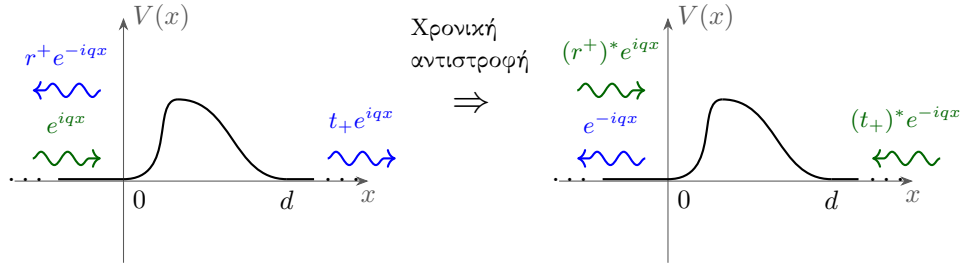
$$J(x) = \frac{\hbar}{m} \text{Im}[\phi^* \frac{d\phi}{dx}] = \text{const.} \quad (1.6)$$

Εφαρμόζοντας αυτό το συμπέρασμα για άλλη μία φορά στην εξ. (1.11), παίρνουμε ότι

$$\det M = |f|^2 - |g|^2 = 1 . \quad (1.24)$$

Αν τώρα στην εξ. (1.22) του πίνακα μεταφοράς αντικαταστήσουμε τους συντελεστές της εξ. (1.5), βρίσκουμε ότι

$$r^+ = -g/f^* \quad \text{και} \quad t^+ = f + g^* r^+ = 1/f^* . \quad (1.25)$$



Σχήμα 1.3: Επίδραση του τελεστή χρονικής αντιστροφής πάνω στην κατάσταση πρόσπτωσης σωματίου από αριστερά. Τα εισερχόμενα κύματα σημαίνονται με πράσινο και τα εξερχόμενα με μπλε.

Από την εξ. (1.13) έχουμε τότε ότι

$$t^+ = t^- . \quad (1.26)$$

Κατά συνέπεια, και ο συντελεστής  $T$  είναι ανεξάρτητος από τη μεριά από την οποία προσπίπτει το σωματίδιο.

Ας εξετάσουμε λίγο περισσότερο τις προηγούμενες διαπιστώσεις. Ως γνωστόν, ο τελεστής χρονικής αντιστροφής παίρνει το μιγαδικό συζυγές μίας κυματοσυνάρτησης και ταυτόχρονα αντιστρέφει τον χρόνο  $t: t \rightarrow -t$ . Η χρονικά ανεστραμμένη κυματοσυνάρτηση ικανοποιεί την ίδια εξίσωση Schrödinger με την αρχική κυματοσυνάρτηση, μόνο που το δυναμικό εξελίσσεται ανάποδα στον χρόνο. Σε χρονοανεξάρτητα προβλήματα, όπως αυτά τα οποία εξετάζουμε σε αυτήν την ενότητα, οι ιδιοκαταστάσεις της ενέργειας παραμένουν ιδιοκαταστάσεις της ίδιας ενέργειας και μετά τη χρονική αντιστροφή, η οποία για αυτές τις ιδιοκαταστάσεις εκφυλίζεται στον απλό τελεστή μιγαδικής συζυγίας. Ας θεωρήσουμε τώρα τη σκέδαση σωματίου το οποίο προσπίπτει από τ' αριστερά (Σχήμα 1.3). Σε αυτήν, ένα ρεύμα πιθανότητας προσπίπτει στο δυναμικό και χωρίζεται σε δύο ρεύματα πιθανότητας, ένα ανακλώμενο κι ένα διερχόμενο. Η χρονική αντιστροφή αλλάζει τη φορά των ρευμάτων πιθανότητας, όπως στην κλασική φυσική αλλάζει τη φορά των ταχυτήτων: τώρα δύο ρεύματα πιθανότητας προσπίπτουν στο δυναμικό, και συμβάλλουν δίνοντας μόνο ένα εξερχόμενο προς τα αριστερά ρεύμα. Πρέπει, λοιπόν, να ισχύει

$$r^+(r^+)^* + t^-(t^+)^* = 1 . \quad (1.27)$$

Όμως, η σταθερότητα του ρεύματος πιθανότητας μας δίνει

$$|r^+|^2 + |t^+|^2 = 1 . \quad (1.28)$$

Αφαιρώντας κατά μέλη, έχουμε ότι

$$(t^+)^*(t^+ - t^-) = 0 \Rightarrow t^+ = t^- , \quad (1.29)$$

εφόσον  $t^+ \neq 0$ . Αν  $t^+ = 0$ , μπορούμε να πάρουμε την κατάσταση πρόσπτωσης από δεξιά και να δείξουμε ότι η ισότητα των συντελεστών  $t$  συνεχίζει να ισχύει. Βλέπουμε ότι η συμμετρία χρονικής αντιστροφής κρύβεται πίσω από τις σχέσεις αυτές των  $r$  και  $t$ . Βέβαια, για την προηγούμενη απόδειξη, άλλη μία προϋπόθεση πρέπει να ισχύει: το δυναμικό πρέπει να είναι πρακτικά μηδέν στο άπειρο και στις δύο κατευθύνσεις. Τροποποιώντας λίγο την παραπάνω απόδειξη παρακάμπτουμε

μερικώς αυτήν την απαίτηση και στην περίπτωση όπου από τη μία μεριά το δυναμικό έχει μία σταθερή τιμή διάφορη του μηδενός. Ωστόσο, αν θέλουμε τότε να εξάγουμε την ανεξαρτησία των  $R$  και  $T$  από την κατεύθυνση πρόσπτωσης, πρέπει να είμαστε προσεκτικοί. Η απόδειξη ισχύει μόνο όταν μπορούν να οριστούν όλοι οι συντελεστές  $r$  και  $t$ . Αυτό δε συμβαίνει όταν η ενέργεια του σωματιδίου είναι μικρότερη από τη μία ασυμπτωτική τιμή του δυναμικού, καθώς τότε δεν μπορούμε να έχουμε προσπίπτοντα κύματα προερχόμενα από αυτήν την κατεύθυνση. Με αυτήν την εξαίρεση, έχουμε αποδείξει την ανεξαρτησία του  $R$  -οπότε και του  $T$ - από την κατεύθυνση πρόσπτωσης.

Μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζει η διαγωνιοποίηση του πίνακα μεταφοράς. Εύκολα βρίσκει κανείς ότι η χαρακτηριστική του εξίσωση είναι η

$$\lambda^2 - 2\text{Re}(f)\lambda + 1 = 0, \quad (1.30)$$

με λύσεις

$$\lambda_{\pm} = \text{Re}f \pm \sqrt{\text{Re}(f)^2 - 1}. \quad (1.31)$$

Κατ' αρχάς, παρατηρούμε ότι ο  $M$  είναι σίγουρα διαγωνίσιμος για  $\text{Re}(f) \neq \pm 1$ , διότι έχει δύο διαφορετικές ιδιοτιμές. Έπειτα, για  $\text{Re}(f) \neq \pm 1$  μπορούμε να διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

1.  $|\text{Re}(f)| < 1$ :  $\lambda_{\pm} = \text{Re}f \pm i\sqrt{1 - \text{Re}(f)^2}$ . Οι δύο ιδιοτιμές είναι μιγαδικές συζυγείς κι έχουν μέτρο 1.
2.  $|\text{Re}(f)| > 1$ :  $\lambda_{\pm} = \text{Re}f \pm \sqrt{\text{Re}(f)^2 - 1}$ . Οι δύο ιδιοτιμές είναι πραγματικές και ομόσημες. Η μία είναι μεγαλύτερη και η άλλη μικρότερη του 1 κατ' απόλυτη τιμή.

Και στις δύο περιπτώσεις, ο  $M$  μπορεί να γραφεί ως

$$M = F \begin{pmatrix} \lambda_+ & 0 \\ 0 & \lambda_- \end{pmatrix} F^{-1} = F \cdot \Lambda \cdot F^{-1}, \quad (1.32)$$

όπου  $\Lambda$  ο διαγώνιος πίνακας των ιδιοτιμών και  $F$  ο πίνακας με στήλες τα αντίστοιχα ιδιοανύσματα.

Υποθέτουμε τώρα ότι έχουμε μία πολυστρωματική δομή η οποία αποτελείται από  $N$  διαδοχικές επαναλήψεις της ίδιας δομικής μονάδας. Αυτή η δομική μονάδα δημιουργεί ένα δυναμικό στην έκταση της, με πίνακα μεταφοράς  $M$ . Λόγω της εξ. (1.19), ο πίνακας μεταφοράς ολόκληρης της δομής είναι

$$M_{tot} = M^N = F \cdot \Lambda^N \cdot F^{-1}. \quad (1.33)$$

Αν βρισκόμαστε στην περίπτωση 2, για αρκετά μεγάλα  $N$  ο συντελεστής διέλευσης έχει μία συγκεκριμένη συμπεριφορά. Συγκεκριμένα, μία από τις δύο ιδιοτιμές (έστω η  $\lambda_+$ ) θα είναι μεγαλύτερη του 1 κατά απόλυτη τιμή, ενώ η άλλη θα είναι μικρότερη. Κατά συνέπεια,  $|\lambda_+|^N \gg |\lambda_-|^N$  και

$$M^N \cong \lambda_+^N \begin{pmatrix} f_{11}f_{11}^{-1} & f_{11}f_{12}^{-1} \\ f_{21}f_{11}^{-1} & f_{21}f_{12}^{-1} \end{pmatrix}. \quad (1.34)$$

Από την εξ. (1.13) βλέπουμε ότι

$$t^- \sim \lambda_+^{-N} \Rightarrow T \sim |\lambda_+|^{-2N}, \quad (1.35)$$

δηλαδή ότι ο συντελεστής διέλευσης φθίνει εκθετικά με το  $N$ . Θα δούμε στην ενότητα 1.6 ότι το  $N$  δε χρειάζεται να είναι πολύ μεγάλο, αλλά ότι αρκούν τιμές όπως  $N = 8$ .

Αντίθετα, στην περίπτωση 1, η συμπεριφορά είναι τελείως διαφορετική. Έστω ότι  $\lambda_{\pm} = e^{\pm i\theta}$ . Τότε  $2\text{Re}(f) = \lambda_+ + \lambda_- = 2\cos\theta$ . Σύμφωνα με το θεώρημα Cayley-Hamilton, ο  $M$  ικανοποιεί τη χαρακτηριστική του εξίσωση

$$M^2 - 2\cos\theta M + I = 0. \quad (1.36)$$

Αξιοποιώντας την ταυτότητα [17]

$$U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x), \quad n \in \mathbb{N}, \quad (1.37)$$

όπου  $U_n(x)$  τα πολυώνυμα Chebyshev δευτέρου είδους, μπορούμε να δείξουμε επαγωγικά ότι

$$\begin{aligned} M^N &= U_{N-1}(\cos\theta)M - U_{N-2}(\cos\theta)I \\ &= \begin{pmatrix} fU_{N-1}(\cos\theta) - U_{N-2}(\cos\theta) & g^*U_{N-1}(\cos\theta) \\ gU_{N-1}(\cos\theta) & f^*U_{N-1}(\cos\theta) - U_{N-2}(\cos\theta) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Για τους ολικούς συντελεστές  $r_{tot}^+$  και  $t_{tot}^+$  έχουμε, λόγω της εξ. (1.25) ότι

$$\frac{r_{tot}^+}{t_{tot}^+} = -g^*U_{N-1}(\cos\theta) = \frac{r^+ \sin(N\theta)}{t^+ \sin\theta}, \quad (1.39)$$

όπου  $r^+$  και  $t^+$  οι αντίστοιχοι συντελεστές της δομικής μονάδας. Έγινε επίσης χρήση της ακόλουθης ιδιότητας των πολυωνύμων Chebyshev [17]

$$U_N(\cos\theta) = \frac{\sin[(N+1)\theta]}{\sin\theta}. \quad (1.40)$$

Μπορούμε τώρα να υπολογίσουμε τον ολικό συντελεστή ανάκλασης συναρτήσει των συντελεστών ανάκλασης και διέλευσης της δομικής μονάδας και του  $\theta$

$$R_{tot} = \frac{R \sin^2(N\theta)}{T \sin^2\theta + R \sin^2(N\theta)}. \quad (1.41)$$

Ας εξετάσουμε τι συμβαίνει καθώς το  $\theta$  μεταβάλλεται από το 0 ως το  $\pi$  ή αντίστροφα. Θα δούμε στην ενότητα 1.6 ότι αυτό πράγματι συμβαίνει καθώς διατρέχουμε μία ενεργειακή ζώνη. Για  $\theta = 0$  ή  $\pi$ ,  $\sin\theta = \sin(N\theta) = 0$  αλλά ταυτόχρονα  $\sin(N\theta)/\sin\theta \rightarrow 1$ , οπότε

$$R_{tot} \rightarrow R. \quad (1.42)$$

Ωστόσο, ανάμεσα στο 0 και στο  $\pi$  υπάρχουν  $N-1$  σημεία μηδενισμού του  $\sin(N\theta)$

$$\theta = \frac{n}{N}\pi, \quad n = 1, 2, \dots, N-1, \quad (1.43)$$

για τα οποία  $\sin\theta \neq 0$ . Σε αυτά τα σημεία, λοιπόν,  $R_{tot} = 0$ .

Ας κάνουμε μία υποσημείωση για το τι συμβαίνει όταν  $\text{Re}f = \pm 1$ . Η εξ. (1.31) μας δίνει μία μόνο ιδιοτιμή  $\lambda = \text{Re}f$ . Την ίδια στιγμή, η εξ. (1.24) μας δίνει ότι  $|\text{Im}f| = |g|$ . Έχουμε, λοιπόν, ένα μόνο σύστημα για τον υπολογισμό ιδιοανυσμάτων

$$\begin{pmatrix} i|g| & |g|e^{-i\phi} \\ |g|e^{i\phi} & -i|g| \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (1.44)$$

Αυτό το σύστημα μας δίνει ένα μόνο ιδιοάνυσμα με  $|x_1| = |x_2|$ , οπότε ο πίνακας μεταφοράς δεν είναι διαγωνίσιμος.



### 1.3 Μέθοδος του πίνακα σκέδασης

Θα κάνουμε μία μικρή στροφή εδώ, και θα μιλήσουμε για τη σκέδαση ενός σωματιδίου το οποίο ικανοποιεί την εξ. (1.1) κατά τη διέλευση του από μία περιοχή δυναμικού  $V_1$  στα αριστερά σε μία περιοχή δυναμικού  $V_2$  στα δεξιά (π.χ. έχουμε μία επαφή μεταξύ δύο υλικών). Με σύνθεση τέτοιων διεπιφανειών μπορούμε να περιγράψουμε -και περιγράφουμε- δομές πεπερασμένου εύρους όπως αυτήν της ενότητας 1.6. Το να μιλάμε για διεπιφάνειες ξεχωριστά θα μας επιτρέψει στο επόμενο κεφάλαιο να εισάγουμε άμεσα τη χρονική εξάρτηση την οποία θέλουμε.

Θεωρούμε ότι η μετάβαση από τη μία περιοχή στην άλλη γίνεται απότομα σε μία θέση, έστω τη  $x = 0$ . Αυτή η προσέγγιση είναι έγκυρη εφόσον το χαρακτηριστικό μήκος κύματος του σωματιδίου είναι αρκετά μεγαλύτερο από το εύρος της περιοχής μετάβασης. Αν ορίσουμε

$$q_1 = \sqrt{\frac{2m(E - V_1)}{\hbar^2}} \quad \text{και} \quad q_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_2)}{\hbar^2}}, \quad (1.45)$$

τότε η λύση (για πρόπτωση από αριστερά) είναι

$$\phi = \begin{cases} e^{iq_1x} + r_{nongen}^+ e^{-iq_1x}, & x \leq 0 \\ t_{nongen}^+ e^{iq_2x}, & x > 0 \end{cases}. \quad (1.46)$$

Η αντίστοιχη λύση για πρόπτωση από δεξιά είναι εύκολο να βρεθεί. Αν επαναλάβουμε μία ανάπτυξη παρόμοια με αυτήν της εξ. (1.16), θα πάρουμε τους αντίστοιχους με της ενότητας 1.1 γενικευμένους συντελεστές

$$\phi = \begin{cases} e^{iq_1(x-x_1)} + r^+ e^{-iq_1(x-x_1)}, & x \leq 0 \\ t^+ e^{iq_2(x-x_2)}, & x > 0 \end{cases}. \quad (1.47)$$

Ισχύει ότι

$$t^+ = t_{nongen}^+ e^{i(q_2x_2 - q_1x_1)}, \quad (1.48\alpha')$$

$$r^+ = r_{nongen}^+ e^{-2iq_1x_1}, \quad (1.48\beta')$$

$$t^- = t_{nongen}^- e^{i(q_2x_2 - q_1x_1)}, \quad (1.48\gamma')$$

$$r^- = r_{nongen}^- e^{2iq_2x_2}. \quad (1.48\delta')$$

Για το συγκεκριμένο πρόβλημα, λόγω της συνέχειας της  $\phi$  και της πρώτης της παραγώγου στο  $x = 0$ , εύκολα βρίσκουμε ότι

$$t^+ = \frac{2q_1}{q_1 + q_2} e^{i(q_2x_2 - q_1x_1)}, \quad (1.49\alpha')$$

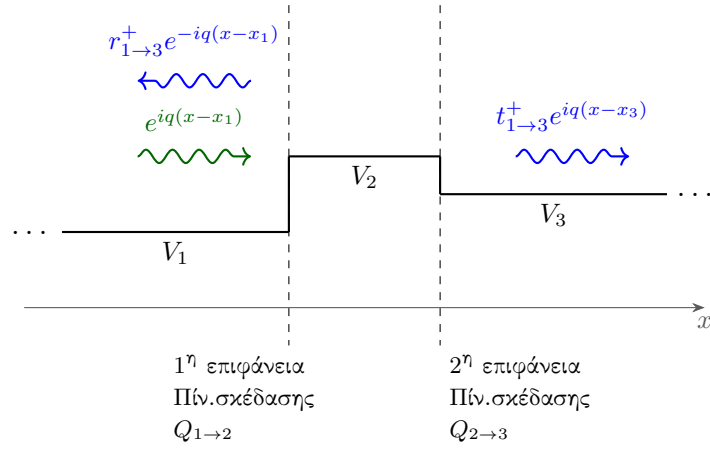
$$r^+ = \frac{q_1 - q_2}{q_1 + q_2} e^{-2iq_1x_1}, \quad (1.49\beta')$$

$$t^- = \frac{2q_2}{q_1 + q_2} e^{i(q_2x_2 - q_1x_1)}, \quad (1.49\gamma')$$

$$r^- = \frac{q_2 - q_1}{q_1 + q_2} e^{2iq_2x_2}. \quad (1.49\delta')$$

Ο πίνακας σκέδασης της διεπιφάνειας  $x = 0$  είναι

$$Q = \begin{pmatrix} t^+ & r^- \\ r^+ & t^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q^I & Q^{II} \\ Q^{III} & Q^{IV} \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$



Σχήμα 1.4: Σκέδαση από δύο διαδοχικές διεπιφάνειες ενός σωματίου προσπίπτοντος από τα αριστερά. Οι συντελεστές  $r_{1\to3}^+$  και  $t_{1\to3}^+$  δίνονται από τις εξ. (1.51α') και (1.51γ') συναρτήσει των συντελεστών των πινάκων σκέδασης  $Q_{1\to2}$  και  $Q_{2\to3}$  των δύο διεπιφανειών.

όπως στη σκέδαση από δυναμικό πεπερασμένης εμβέλειας.

Ας θεωρήσουμε τώρα ότι, δεξιά της περιοχής δυναμικού  $V_2$ , υπάρχει μία τρίτη περιοχή δυναμικού  $V_3$ , στην οποία τα κύματα αναπτύσσονται ως προς τη θέση  $x_3$ . Τα συνολικά ανακλώμενα και διερχόμενα κύματα πιθανότητας μπορεί να θεωρηθεί ότι προκύπτουν από το άθροισμα όλων των άπειρων πιθανών ανακλάσεων από τις δύο διεπιφάνειες. Έστω ότι οι πίνακες σκέδασης από τις δύο διεπιφάνειες είναι  $Q_{1\to2}$  και  $Q_{2\to3}$  αντίστοιχα, με σημεία ανάπτυξης για την περιοχή δυναμικού  $V_2$  τα οποία ταυτίζονται. Τότε, βάσει της προηγούμενης παρατήρησης, οι ολικοί συντελεστές προκύπτουν ως μία γεωμετρική πρόοδος των συντελεστών των διεπιφανειών, η οποία τελικά δίνει

$$t_{tot}^+ = t_{1\to3}^+ = t_{2\to3}^+ (1 - r_{1\to2}^- r_{2\to3}^+)^{-1} t_{1\to2}^+, \quad (1.51\alpha')$$

$$r_{1\to3}^- = r_{2\to3}^- + t_{2\to3}^+ (1 - r_{1\to2}^- r_{2\to3}^+)^{-1} r_{1\to2}^- t_{2\to3}^-, \quad (1.51\beta')$$

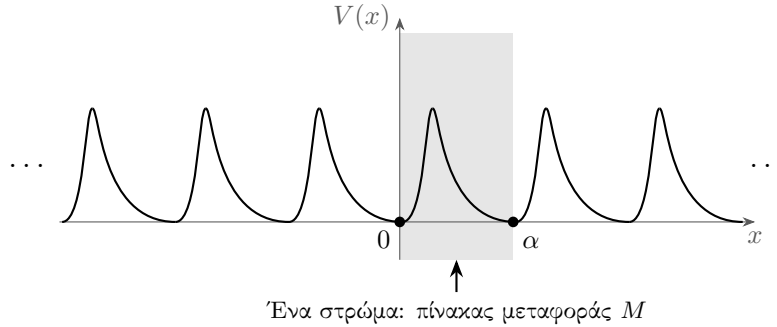
$$r_{1\to3}^+ = r_{1\to2}^+ + t_{1\to2}^- (1 - r_{2\to3}^+ r_{1\to2}^-)^{-1} r_{2\to3}^+ t_{1\to2}^+, \quad (1.51\gamma')$$

$$t_{1\to3}^- = t_{1\to2}^- (1 - r_{2\to3}^+ r_{1\to2}^-)^{-1} t_{2\to3}^-. \quad (1.51\delta')$$

Αυτοί είναι οι συντελεστές ολόκληρης της δομής, με κέντρα ανάπτυξης  $x_1$  και  $x_3$ . Προφανώς, η διαδικασία μπορεί να επαναληφθεί, με τους συντελεστές  $r_{1\to3}$ ,  $t_{1\to3}$  αυτήν τη φορά στη θέση των  $r_{1\to2}$ ,  $t_{1\to2}$ , αν προστεθούν διεπιφάνειες ή άλλες δομές, ώστε να αποκτήσουμε τον πίνακα σκέδασης μίας ολόκληρης πολυστρωματικής δομής.

## 1.4 Άπειρη περιοδική δομή–Κυματοσυναρτήσεις Bloch

Είναι λογικό από φυσικής σκοπιάς μία επαρκώς μεγάλη πεπερασμένη πολυστρωματική δομή να έχει παρόμοια συμπεριφορά με την αντίστοιχη άπειρη δομή, εφόσον βρισκόμαστε μακριά από τα άκρα της. Επομένως, έχει νόημα να εξετάσουμε την περίπτωση το δυναμικό  $V(x)$  της εξ. (1.1) να είναι μία περιοδική συνάρτηση (κι επομένως άπειρης εμβέλειας) με περίοδο  $a$ . Τότε οι λύσεις της εξ. (1.1) είναι



Σχήμα 1.5: Άπειρη περιοδική δομή με περίοδο  $\alpha$ . Μας ενδιαφέρει ο πίνακας μεταφοράς  $M$  ο οποίος περιγράφει τη σκέδαση από ένα μόνο στρώμα.

κυματοσυναρτήσεις Bloch, σύμφωνα με το ομώνυμο θεώρημα [18]

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad \text{με} \quad u_k(x + \alpha) = u_k(x). \quad (1.52)$$

Ο δείκτης  $k \in \mathbb{R}$  καθορίζει την αλλαγή φάσης της κυματοσυνάρτησης κατά μήκος μίας περιόδου

$$\psi_k(x + \alpha) = e^{ik\alpha} \psi_k(x), \quad (1.53)$$

αλλά δεν είναι αρκετός για να προσδιορίσει πλήρως την  $\psi_k$  και την ενέργεια  $E$ . Συνήθως, σε μία τιμή του  $k$  αντιστοιχούν άπειρες ενέργειες. Σκοπός μας είναι ο προσδιορισμός του ενεργειακού φάσματος  $E = E(k)$ , ή αλλιώς, γράφοντας  $E = \hbar\omega$ , τη σχέση διασποράς  $\omega = \omega(k)$  της δομής. Πρέπει να σημειωθεί ότι, λόγω της εμφάνισης του στο μιγαδικό εκθετικό, ο δείκτης  $k$  αρκεί να οριστεί στην πρώτη ζώνη Brillouin:  $-\pi/\alpha < k \leq \pi/\alpha$ . Η πρόσθεση στο  $k$  οποιουδήποτε ακεραίου πολλαπλασίου του  $2\pi/\alpha$  μας δίνει την ίδια αλλαγή φάσης.

Ο πίνακας μεταφοράς  $M$  μίας περιόδου και μόνο (π.χ. αυτός για το διάστημα  $[0, \alpha]$ ) θα μας φανεί κι εδώ χρήσιμος. Έστω ότι θέλουμε να λύσουμε την εξ. (1.1) για συγκεκριμένο  $E$ . Αρχικά, ας παρατηρήσουμε ότι η  $\psi_k$  είναι πλήρως καθορισμένη στο  $[0, \alpha]$  από τις αρχικές τιμές  $\psi_k(0)$  και  $\frac{d\psi_k(0)}{dx}$ . Υπάρχει μία και μόνο μία συνάρτηση  $\phi_- = C_- e^{iqx} + D_- e^{-iqx}$  τέτοια ώστε  $\phi_-(0) = \psi_k(0)$  και  $\frac{d\phi_-(0)}{dx} = \frac{d\psi_k(0)}{dx}$ . Κατά συνέπεια, οι  $\psi_k(\alpha)$  και  $\frac{d\psi_k(\alpha)}{dx}$  είναι αυτές οι οποίες θα ήταν αν υπήρχε μόνο το δυναμικό στο  $[0, \alpha]$  και στ' αριστερά η λύση ήταν η  $\phi_-$ . Με άλλα λόγια, ισούνται με τις  $\phi_+(\alpha)$  και  $\frac{d\phi_+(\alpha)}{dx}$ , όπου

$$\phi_+ = C_+ e^{iq(x-\alpha)} + D_+ e^{-iq(x-\alpha)}, \quad (1.54)$$

με

$$\begin{pmatrix} C_+ \\ D_+ \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} C_- \\ D_- \end{pmatrix}. \quad (1.55)$$

Λόγω της εξ. (1.53), παίρνουμε τελικά το πρόβλημα ιδιοτιμών

$$M \begin{pmatrix} C_- \\ D_- \end{pmatrix} = e^{ik\alpha} \begin{pmatrix} C_- \\ D_- \end{pmatrix}. \quad (1.56)$$

Για να είναι επιτρεπτή η συγκεκριμένη ενέργεια  $E$ , πρέπει ο  $M$  να έχει μιγαδικές ιδιοτιμές με μέτρο 1, δηλαδή πρέπει να εμπίπτει στην περίπτωση 1 της ενότητας 1.2.

Όπως προαναφέρθηκε, στην περίπτωση 1 ο  $M$  έχει δύο ιδιοτιμές οι οποίες είναι μιγαδικές συζυγείς. Κατά συνέπεια, σε κάθε επιτρεπτό  $E$  αντιστοιχούν δύο αντίθετες τιμές του  $k$ . Αντίστροφα, αν ο  $M$  εμπίπτει στην περίπτωση 1, η εξ. (1.1) έχει για συγκεκριμένο  $E$  δύο μόνο λύσεις για  $\pm k$  αντίστοιχα (τα δύο ιδιοδιανύσματα του  $M$ ) στο  $[0, a]$  οι οποίες να ικανοποιούν ταυτόχρονα την εξ. (1.53), ενώ αν εμπίπτει στην περίπτωση 2, η ενέργεια  $E$  δεν είναι επιτρεπτή και δεν υπάρχει αποδεκτή κυματοσυνάρτηση. Η κίνηση του  $f$  στο μιγαδικό επίπεδο καθώς αλλάζει η ενέργεια και η συνακόλουθη μετάβαση του από τη μία περίπτωση στην άλλη ευθύνεται για την εμφάνιση ενεργειακών ζωνών και ενεργειακών χάσμάτων ([16]-Κεφάλαιο III, Συμπλήρωμα N).

Πρέπει να αναφέρουμε ότι, παρότι στα ενεργειακά χάσματα δεν έχουμε επιτρεπτές καταστάσεις ενέργειας, τιμές του  $k$  μπορούν ακόμη να αποδοθούν σε κάθε  $E$ , επεκτείνοντας τον συμβολισμό  $\lambda_{\pm} = e^{ik\alpha}$  και για μιγαδικά  $k$ . Στα ενεργειακά χάσματα, λοιπόν, το  $k\alpha$  εμφανίζει ένα φανταστικό μέρος ίσο με  $\ln(|\lambda_{\pm}|)$ , συν ένα πραγματικό μέρος ίσο με  $\pi$  αν οι ιδιοτιμές είναι αρνητικές. Ας παρατηρήσουμε εδώ ότι, με τον συμβολισμό της περίπτωσης 2 της ενότητας 1.2, η ιδιοτιμή  $\lambda_+$  δεν αντιστοιχεί αναγκαστικά στην ιδιοτιμή  $\eta$  οποία είναι μεγαλύτερη του 1 κατ' απόλυτη τιμή. Συγκεκριμένα, αν επιστρέψουμε σε αυτήν ακριβώς την περίπτωση και θέσουμε  $|\text{Ref}| = \cosh \theta$  με  $\theta \geq 0$  (κάτι το οποίο μπορούμε να κάνουμε αφού  $|\text{Ref}| > 1$ ), τότε

$$\lambda_{\pm} = \begin{cases} \cosh \theta \pm \sinh \theta = e^{\pm\theta}, & \text{αν } \text{Ref} > 0 \\ -\cosh \theta \pm \sinh \theta = -e^{\mp\theta}, & \text{αν } \text{Ref} < 0 \end{cases}. \quad (1.57)$$

Όποιο κι αν είναι το πρόσημο του  $\text{Ref}$ , οι δύο ιδιοτιμές θα δώσουν δύο φανταστικά μέρη  $\pm\theta$  του  $k\alpha$  με αντίθετο πρόσημο, όπως στις ενεργειακές ζώνες παίρνουμε δύο τιμές του  $k\alpha$  με αντίθετο πρόσημο. Μάλιστα, επειδή το πραγματικό μέρος  $\pi$ , όταν υπάρχει, μπορεί ισοδύναμα να γραφεί και ως  $-\pi$ , μπορούμε να πούμε ότι και στα ενεργειακά χάσματα παίρνουμε δύο τιμές του  $k\alpha$  με αντίθετο πρόσημο.

Μέχρι στιγμής, εξετάσαμε τις ιδιοτιμές του  $M$  και την άμεση σύνδεση τους με τη σχέση διασποράς της δομής. Ας κοιτάξουμε τώρα και τα ιδιοδιανύσματα του, τα οποία, στη βάση των μιγαδικών εκθετικών  $e^{iqx}$  και  $e^{-iqx}$ , δίνονται από τις στήλες του πίνακα  $F$ . Αν πάρουμε ένα μόνο στρώμα της περιοδικής δομής με την κυματοσυνάρτηση στα αριστερά του να ισούται με το πρώτο ιδιοδιάνυσμα, τότε στα δεξιά του η κυματοσυνάρτηση έχει πάλι τη μορφή του ίδιου ιδιοδιανύσματος, αλλά πολλαπλασιασμένη με την ιδιοτιμή  $\lambda_+$

$$f_{11}e^{iqx} + f_{21}e^{-iqx} \rightarrow \lambda_+ \left[ f_{11}e^{iq(x-\alpha)} + f_{21}e^{-iq(x-\alpha)} \right]. \quad (1.58)$$

Στην περίπτωση της άπειρης δομής, η κυματοσυνάρτηση δεν έχει εν γένει μορφή καθαρών μιγαδικών εκθετικών λόγω της παρουσίας δυναμικού, αλλά στα άκρα του κάθε στρώματος μπορεί να θεωρηθεί ισοδύναμη με μία και μόνο μία τέτοια κυματοσυνάρτηση, όπως αναφέρθηκε προηγουμένως.

Είναι πλέον εύκολο να καταλάβουμε ότι οι καταστάσεις των ενεργειακών χάσμάτων είναι απαγορευμένες διότι δίνουν λύσεις οι οποίες αποκλίνουν εκθετικά προς το  $+\infty$  ή το  $-\infty$ . Στην άπειρη δομή, αυτές οι καταστάσεις είναι φυσικά απαγορευμένες, αλλά σε μία πεπερασμένη πολυστρωματική δομή αντιστοιχούν π. χ. στα φθίνοντα ηλεκτρομαγνητικά κύματα τα οποία εμφανίζονται κατά την πρόσπτωση ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας σε έναν αγωγό και πρέπει να λαμβάνονται υπ'

όψιν. Ανάλογα με το σε ποια κατεύθυνση φθίνουν, τα δύο ιδιοανύσματα αποκαλούνται εμπροσθοφθίνοντα ή οπισθοφθίνοντα κύματα Bloch. Η ταυτοποίηση του καθενός γίνεται εύκολα από το πρόσημο του  $\text{Im}(ka)$ .

Αν θελήσουμε να διαχωρίσουμε με τον ίδιο τρόπο τα ιδιοανύσματα στις επιτρεπόμενες ενεργειακές καταστάσεις, πρέπει να επικαλεστούμε το ρεύμα πιθανότητας, καθώς αυτήν τη φορά το πρόσημο του  $ka$  δεν μεταφέρει πληροφορία λόγω της απροσδιοριστίας κατά ακέραια πολλαπλάσια του  $2\pi$ . Αν έχουμε ροή πιθανότητας προς τα θετικά, το ιδιοάνυσμα αποκαλείται εμπροσθοδιαδιδόμενο κύμα Bloch. Αντίθετα, αν έχουμε ροή πιθανότητας προς τ' αρνητικά, το ιδιοάνυσμα αποκαλείται οπισθοδιαδιδόμενο κύμα Bloch. Εν γένει, ο υπολογισμός του ρεύματος πιθανότητας από την πλήρη μορφή της κυματοσυνάρτησης Bloch είναι δύσκολος, αλλά μπορεί να παρακαμφθεί χρησιμοποιώντας για άλλη μία φορά την ισοδυναμία της στα άκρα των στρωμάτων με καλά καθορισμένα αθροίσματα μιγαδικών εκθετικών. Λόγω της ανεξαρτησίας από τον χρόνο, το ρεύμα πιθανότητας θα είναι χωρικά σταθερό και ίσο με

$$J = \frac{\hbar q}{m} (|f_{11}|^2 - |f_{21}|^2), \quad (1.59)$$

για το πρώτο ιδιοάνυσμα. Επομένως, το πρόσημο της ποσότητας  $|f_{11}|^2 - |f_{21}|^2$  καθορίζει αν πρόκειται για εμπροσθοδιαδιδόμενο ή οπισθοδιαδιδόμενο κύμα Bloch. Όμοια συμπεράσματα έχουμε και για το δεύτερο ιδιοάνυσμα. Εκ πρώτης όψεως, κάποιος μπορεί να αναρωτηθεί αν σε κάθε περίπτωση το ένα ιδιοάνυσμα αντιστοιχεί σε εμπροσθοδιαδιδόμενο και το άλλο σε οπισθοδιαδιδόμενο κύμα, όπως θα έπρεπε για να επιτρέπεται η διάδοση και προς τις δύο κατευθύνσεις της δομής. Η απάντηση είναι ότι αυτό πράγματι ισχύει λόγω της συμμετρίας χρονικής αντιστροφής. Πρέπει να παρατηρήσουμε ότι η χρονική αντιστροφή του ενός ιδιοανύσματος δίνει (ίσως με μία ολική φάση) το άλλο ιδιοάνυσμα, διότι αλλάζει το πρόσημο του  $ka$  (μάλιστα, αυτή η ιδιότητα θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί εξαρχής για να αποδείξουμε ότι  $E(-k) = E(k)$ ). Με αυτόν τον τρόπο, εύκολα βρίσκουμε ότι  $|f_{11}| = |f_{22}|$  και  $|f_{21}| = |f_{12}|$ , απ' όπου συνεπάγεται ότι τα ρεύματα πιθανότητας των δύο καταστάσεων είναι ίσου μέτρου και αντίθετου προσήμου.

Το συμπέρασμα αυτό επιβεβαιώνεται κι από τις ταχύτητες ομάδος. Όπως είπαμε, λόγω της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου,  $E(-k) = E(k)$ . Κατά συνέπεια, αν θέλαμε να υπολογίσουμε την ταχύτητα ομάδος των δύο ιδιοανυσμάτων, θα βρίσκαμε, παραγωγίζοντας ως προς  $k$ , ότι  $u_g(-k) = -u_g(k)$ . Άρα, στο ένα ιδιοάνυσμα θα αντιστοιχεί μη αρνητική και στο άλλο μη θετική ροή πιθανότητας. Το ενδιαφέρον για την ταχύτητα ομάδος έγκειται στο ότι είναι εύκολο, κοιτώντας το διάγραμμα διασποράς, να καταλάβουμε ποιος από τους δύο κλάδους δίνει το εμπροσθοδιαδιδόμενο κύμα Bloch.

Η διάκριση ανάμεσα σε οπισθοδιαδιδόμενα και εμπροσθοδιαδιδόμενα κύματα έχει σημασία στο υποθετικό παράδειγμα της σκέδασης σωματιδίου από μία ημιάπειρη δομή, η οποία ξεκινάει, π. χ. στο  $x = 0$  και εκτείνεται μέχρι το  $+\infty$ . Αν έχουμε ένα σωματίδιο το οποίο προσπίπτει από τ' αριστερά της δομής, η λογική φυσική απαίτηση είναι στο εσωτερικό της δομής να μην υπάρχουν οπισθοδιαδιδόμενα κύματα Bloch. Αν υποθέσουμε ότι η  $\lambda_+$  αντιστοιχεί στο εμπροσθοδιαδιδόμενο κύμα, τότε έχουμε ότι

$$\begin{pmatrix} 1 \\ r_{\text{semiinf}}^+ \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} f_{11} \\ f_{21} \end{pmatrix} \Rightarrow r_{\text{semiinf}}^+ = \frac{f_{21}}{f_{11}} \Rightarrow R_{\text{semiinf}}^+ = \left| \frac{f_{21}}{f_{11}} \right|^2, \quad (1.60)$$

όπου ο δείκτης semiinf υποδηλώνει ότι αναφερόμαστε στον ημιάπειρο κρύσταλλο.

Προφανώς, τα συμπεράσματα μας για ανεξαρτησία του  $R$  από την κατεύθυνση προς την οποία κινείται το σωματίδιο στερούνται νοήματος εδώ.

Η παραπάνω ανάλυση ισχύει αν το προσπίπτον σωματίδιο έχει ενέργεια στο εσωτερικό κάποιας ενεργειακής ζώνης. Αν η ενέργεια του σωματιδίου βρίσκεται σε ενεργειακό χάσμα, η λογική απαίτηση θα ήταν να μην έχουμε οπισθοφθίνοντα κύματα Bloch. Εντούτοις, εδώ η χρονική αντιστροφή μεταφέρει ένα ιδιοάνυσμα στον εαυτό του, καθώς οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές, οπότε  $|f_{11}| = |f_{21}|$  και  $|f_{12}| = |f_{22}|$ . Επομένως, το ρεύμα πιθανότητας είναι, όπως λογικά αναμένουμε, μηδενικό και στις δύο ιδιοκαταστάσεις και ο συντελεστής ανάκλασης του ημιάπειρου κρυστάλλου ισούται με τη μονάδα.

## 1.5 Μονοδιάστατος τετραγωνικός φραγμός δυναμικού εύρους $\alpha$ και ύψους $V$

Έστω ότι έχουμε ένα τετραγωνικό φραγμό ύψους  $V$  στο διάστημα  $[0, \alpha]$ . Αναζητούμε λύση στη μορφή της εξ. (1.15), ώστε να υπολογίσουμε τους γενικευμένους συντελεστές  $r$  και  $t$ . Ορίζουμε

$$q = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{και} \quad \tilde{q} = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}}. \quad (1.61)$$

Τότε η λύση για πρόπτωση του σωματίου από αριστερά είναι

$$\phi = \begin{cases} e^{iqx} + r^+ e^{-iqx}, & \text{αν } x < 0 \\ E e^{i\tilde{q}x} + F e^{-i\tilde{q}x}, & \text{αν } 0 \leq x \leq \alpha \\ t^+ e^{iq(x-\alpha)}, & \text{αν } x > \alpha \end{cases}. \quad (1.62)$$

Απαιτώντας συνέχεια της  $\phi$  και της πρώτης της παραγώγου, βρίσκουμε ότι

$$r^+ = -i \frac{(q^2 - \tilde{q}^2) \sin(\tilde{q}\alpha)}{2q\tilde{q} \cos(\tilde{q}\alpha) - i(q^2 + \tilde{q}^2) \sin(\tilde{q}\alpha)}, \quad (1.63)$$

$$t^+ = \frac{2q\tilde{q}}{2q\tilde{q} \cos(\tilde{q}\alpha) - i(q^2 + \tilde{q}^2) \sin(\tilde{q}\alpha)}. \quad (1.64)$$

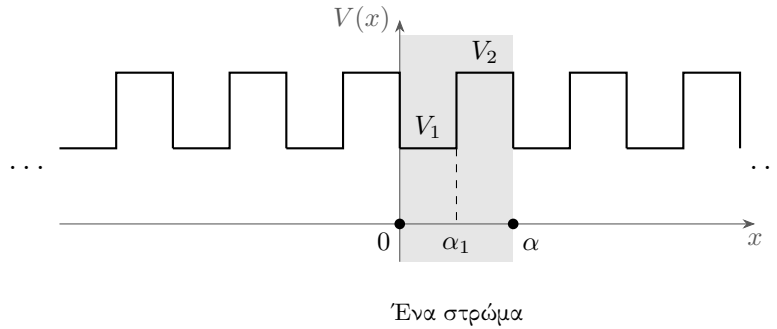
Έπειτα, αντιστρέφοντας τον χώρο ως προς την αρχή των αξόνων και μετατοπίζοντας κατά  $\alpha$ , παίρνουμε ότι

$$r^- = r^+ \quad \text{και} \quad t^- = t^+, \quad (1.65)$$

σε συμφωνία με το ότι οι  $R$  και  $T$  δεν εξαρτώνται από τη μεριά πρόπτωσης.

## 1.6 Πολυστρωματική δομή φραγμών δυναμικού

Ήρθε η ώρα να εξετάσουμε τη σκέδαση ενός σωματιδίου από μία πολυστρωματική δομή. Το κάθε στρώμα αποτελείται από δύο εφαπτόμενους τετραγωνικούς φραγμούς δυναμικού ύψους  $V_1$  και  $V_2$  αντίστοιχα, και πλάτους  $\alpha_1$  και  $\alpha_2$  αντίστοιχα (βλ. Σχήμα 1.6). Το συνολικό μήκος του στρώματος είναι  $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2$ . Ο συνολικός αριθμός των στρωμάτων είναι  $N$ . Αν για τους δύο φραγμούς χρησιμοποιηθούν οι συντελεστές της ενότητας 1.5, η εξ. (1.19) είναι έγκυρη για να βρούμε, καταρχάς, τον πίνακα μεταφοράς του ενός στρώματος από τους πίνακες



Σχήμα 1.6: Η περιοδική δομή διαδοχικών φραγμών δυναμικού την οποία εξετάζουμε στην ενότητα 1.6.

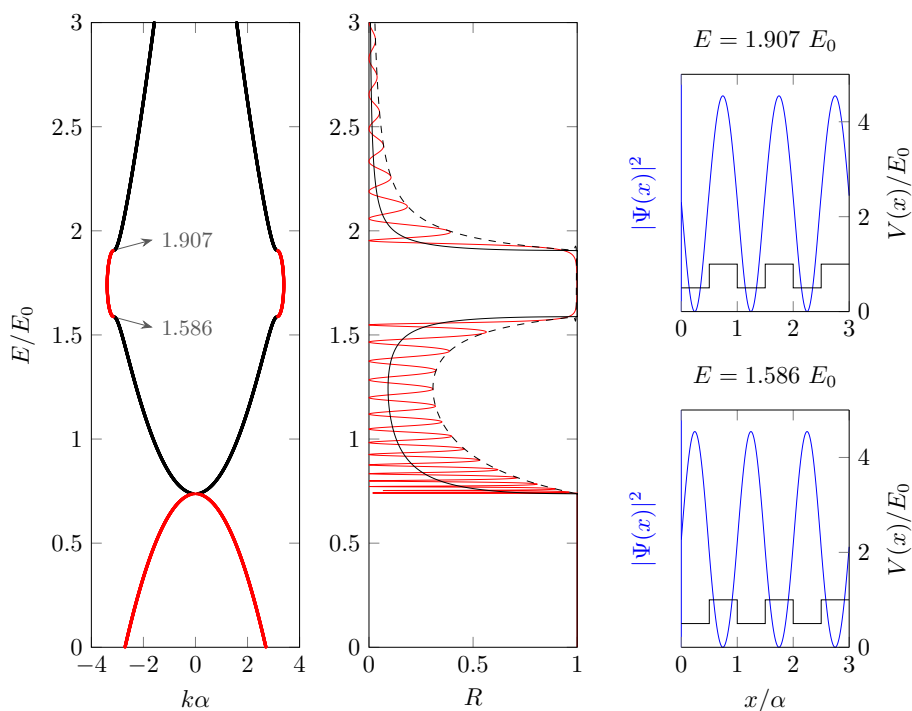
μεταφοράς των δύο φραγμών και, στη συνέχεια, για να υπολογίσουμε τον πίνακα μεταφοράς όλης της δομής (εναλλακτικά μπορεί να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος της ενότητας 1.3). Το πρόβλημα λύθηκε υπολογιστικά με τη βοήθεια του λογισμικού MATLAB. Η αδιαστατικοποίηση των ενεργειών έγινε θεωρώντας μία αυθαίρετη ενεργειακή στάθμη  $E_0 > 0$  και εκφράζοντας τις  $E$ ,  $V_1$  και  $V_2$  ως πολλαπλάσια αυτής. Το μήκος  $a$  εμφανίζεται μόνο πολλαπλασιασμένο με τον κυματάρημο  $q_0$  του σωματιδίου όταν αυτό έχει ενέργεια  $E_0$ . Στο Σχήμα 1.7 φαίνονται το ενεργειακό φάσμα της άπειρης περιοδικής δομής η οποία προκύπτει από την άπειρη επανάληψη ενός στρώματος και ο συντελεστής ανάκλασης  $R$  της πεπερασμένης πολυστρωματικής δομής, για ένα συγκεκριμένο σετ τιμών  $V_1$ ,  $V_2$ ,  $q_0 a$ ,  $\alpha_1/a$  και  $N$  το οποίο διευκρινίζεται στη λεζάντα του σχήματος.

Βλέπουμε ότι η περιοδικότητα του δυναμικού προκαλεί την αναμενόμενη εμφάνιση ενεργειακών ζωνών κι ενεργειακών χάσμάτων. Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 1.4, σε κάθε ενέργεια αντιστοιχούν δύο αντίθετες τιμές του  $k$  λόγω της συμμετρίας χρονικής αντιστροφής, ενώ σε κάθε ενεργειακή ζώνη το  $ka$  μεταβάλλεται από το 0 ως το  $\pi$  ή ανάποδα. Στα ενεργειακά χάσματα, η ανακλαστικότητα της πεπερασμένης δομής πλησιάζει τη μονάδα, όπως αναμένεται από την εξ. (1.35). Αντίθετα, στις ενεργειακές ζώνες, η ανακλαστικότητα είναι μικρότερη και μηδενίζεται  $N - 1$  φορές, σε συμφωνία με την εξ. (1.41), όπου  $\theta = ka$ . Ανάμεσα στους μηδενισμούς, ο συντελεστής ανάκλασης παρουσιάζει τοπικά μέγιστα, των οποίων η τιμή δίνεται από την εξ. (1.41) θέτοντας  $\sin(Nka) = 1$

$$R_{tot} = \frac{R}{T \sin^2(ka) + R} \quad (1.66)$$

Αυτή η εξίσωση δίνει τη διακεκομμένη γραμμή στο διάγραμμα της ανακλαστικότητας.

Η κόκκινη γραμμή στο ενεργειακό φάσμα αντιστοιχεί στο φανταστικό μέρος του  $ka$ . Στην περίπτωση όπου το  $ka$  έχει και πραγματικό μέρος  $\pi$ , οι δύο κλάδοι έχουν μετατοπιστεί κατά  $\pm\pi$  αντίστοιχα (οι δύο τιμές είναι ισοδύναμες διότι η διαφορά τους είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του  $2\pi$ ) με τρόπο ώστε να εξασφαλίζεται η συνέχεια των γραμμών. Η συνεχής μαύρη γραμμή δίνει την ανακλαστικότητα της αντίστοιχης ημιάπειρης δομής. Βλέπουμε ότι η μη ύπαρξη ανακλαστικής διεπιφάνειας στο άλλο άκρο της δομής εξαλείφει τις ταλαντώσεις του συντελεστή ανάκλασης, οι οποίες οφείλονται σε φαινόμενα συμβολής λόγω πολλαπλών ανακλάσεων στα άκρα μίας πεπερασμένης δομής (ταλαντώσεις Fabry-Perot).



Σχήμα 1.7: Αριστερά: Ενεργειακό φάσμα της άπειρης περιοδικής δομής για  $V_1 = 0.5 E_0$ ,  $V_2 = E_0$ ,  $g_0\alpha = \pi$ , και  $\alpha_1 = 0.5 \alpha$ . Η μαύρη γραμμή αντιστοιχεί στις ενεργειακές ζώνες και συνδέει το  $k\alpha$  από την εξ. (1.56) με την αντίστοιχη ενέργεια. Η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί στα ενεργειακά χάσματα και δίνει το φανταστικό μέρος του  $k\alpha$ . Τα άκρα  $k\alpha = \pi$  των ενεργειακών ζωνών έχουν σημειωθεί. Μέση: συντελεστής ανάκλασης  $R$  για την αντίστοιχη πολυστρωματική δομή με  $N = 16$ . Η διακεκομμένη γραμμή οριοθετεί τα μέγιστα του συντελεστή ανάκλασης σύμφωνα με την εξ. (1.66). Η συνεχής μαύρη γραμμή δίνει τον συντελεστή ανάκλασης της αντίστοιχης ημιάπειρης δομής. Δεξιά: πυκνότητες πιθανότητας των κυματοσυναρτήσεων Bloch στα άκρα των ενεργειακών ζωνών τα οποία αναγράφονται στο ενεργειακό φάσμα.

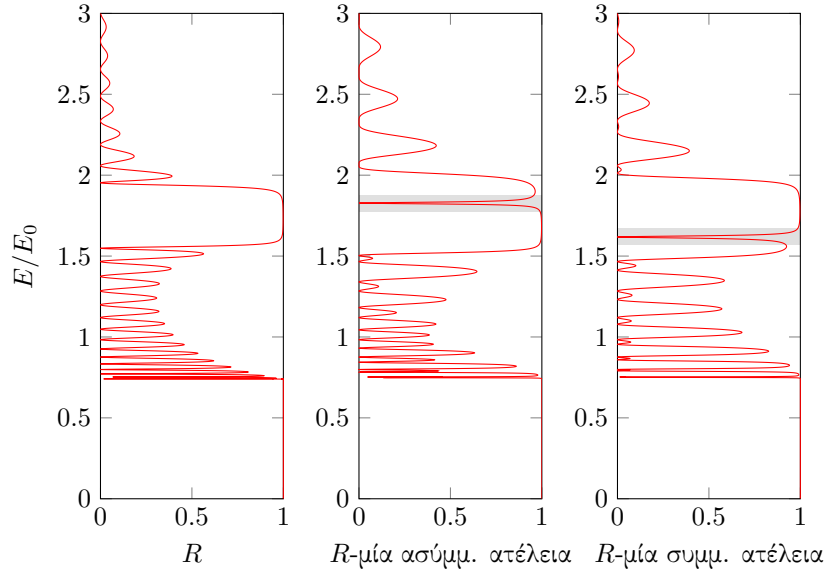
Είναι ενδιαφέρον να δούμε ποια είναι η μορφή των κυματοσυναρτήσεων Bloch στα άκρα  $k\alpha = \pi$  των ενεργειακών ζωνών. Λόγω της συνέχειας της ανακλαστικότητας του ημιάπειρου κρυστάλλου, εύκολα μπορούμε να καταλάβουμε ότι αυτές οι καταστάσεις αντιστοιχούν σε στάσιμα κύματα μηδενικής ροής πιθανότητας. Καθώς το  $k\alpha$  πλησιάζει στο  $\pi$ , το εμπροσθοδιαδιδόμενο και το οπισθοδιαδιδόμενο κύμα εκφυλίζονται σε ένα στάσιμο κύμα. Λύνοντας την εξ. (1.1) για ένα στρώμα, απαιτώντας τη συνέχεια της κυματοσυναρτήσεως και της πρώτης της παραγώγου και εφαρμόζοντας τη συνθήκη της εξ. (1.53), μπορούμε να βρούμε (πάντα με α-προσδιοριστία μίας πολλαπλασιαστικής σταθεράς) την κυματοσυνάρτηση για κάθε  $k$  και  $E(k)$ . Στο Σχήμα 1.7 φαίνονται οι πυκνότητες πιθανότητας για τα άκρα των δύο πρώτων ενεργειακών ζωνών. Παρατηρούμε ότι η κυματοσυνάρτηση της κάτω ζώνης είναι εντοπισμένη στην περιοχή μικρότερου δυναμικού, ενώ της άνω ζώνης είναι εντοπισμένη στην περιοχή υψηλότερου δυναμικού. Η διαφορά στη μέση τιμή του δυναμικού ανάμεσα στις δύο κυματοσυναρτήσεις είναι εμφανώς η κύρια αιτία της ενεργειακής τους διαφοράς.



Από την εξ. (1.35) και το γεγονός ότι, όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 1.4, στα ενεργειακά χάσματα το φανταστικό μέρος του  $k\alpha$  ισούται κατ' απόλυτη τιμή με τον εκθέτη  $\theta$  της εξ. (1.57), εξάγουμε την ακόλουθη σχέση για αρκετά μεγάλα  $N$

$$-\ln T = C + 2N|\text{Im}(k\alpha)|, \quad (1.67)$$

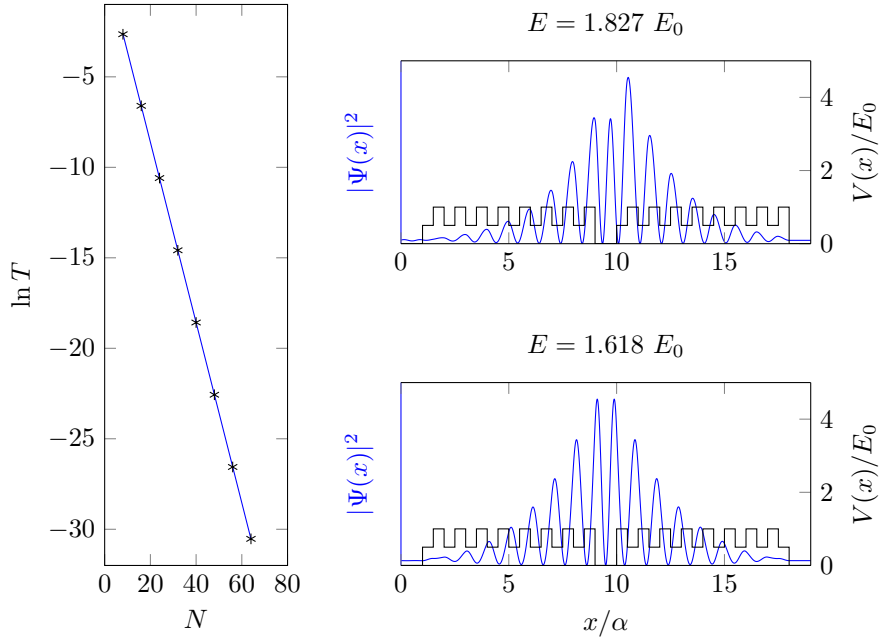
όπου  $C$  μία σταθερά. Η κλίση της ευθείας, υπολογισμένη με μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων, σε ένα γράφημα των μετρήσεων του  $\ln T$  συναρτήσει του  $2N$ , όπως το Σχήμα 1.9, μπορεί να μας δώσει άμεσα το  $\text{Im}(k\alpha)$ . Σε αυτό το διάγραμμα βλέπουμε επίσης ότι αρκεί  $N \geq 8$  για να ισχύει η εξ. (1.35).



Σχήμα 1.8: *Αριστερά:* Για να διευκολυνθεί η σύγκριση, επαναλαμβάνεται ο συντελεστής ανάκλασης από το Σχήμα 1.7. *Μέση:* Συντελεστής ανάκλασης συναρτήσει της ενέργειας του προσπίπτοντος σωματιδίου αν στο μέσο της δομής εισαχθεί μία ατέλεια με  $V_{imp} = 0$  και  $a_{imp} = \alpha$ . Επειδή η δομή δεν έχει συμμετρία ανάκλασης ως προς το κέντρο της ατέλειας και επειδή η ατέλεια έχει στα αριστερά της ένα φραγμό  $V_1$  και στα δεξιά της ένα φραγμό  $V_2$ , αυτή ονομάζεται καταχρηστικά «ασύμμετρη». Βλέπουμε την εμφάνιση μίας κατάστασης συντονισμού πρακτικά μηδενικής ανακλαστικότητας στο μέσο του ενεργειακού χάσματος. *Δεξιά:* Αντίστοιχο διάγραμμα του συντελεστή ανάκλασης για την ίδια ατέλεια, με τη διαφορά ότι η δομή έχει γίνει συμμετρική ως προς το κέντρο της ατέλειας αντιστρέφοντας τα στρώματα δεξιά της ατέλειας. Τώρα, η ατέλεια έχει κι από τις δύο πλευρές φραγμούς  $V_2$ . Ο αναγνώστης παραπέμπεται στο Σχήμα 1.9 για μία οπτική παρουσίαση του δυναμικού. Η κατάσταση συντονισμού έχει μετακινηθεί αλλά συνεχίζει να υπάρχει.

## 1.7 Καταστάσεις ατελειών

Θα δούμε τώρα τη συμπεριφορά της πολυστρωματικής δομής αν στο εσωτερικό της εισαχθούν μία ή περισσότερες ατέλειες. Οι ατέλειες τις οποίες θα εξετάσουμε είναι τετραγωνικοί φραγμοί εν γένει διαφορετικού ύψους  $V_{imp}$  και διαφορετικού μήκους  $a_{imp}$  από τους φραγμούς οι οποίοι απαρτίζουν την υπόλοιπη δομή. Οι

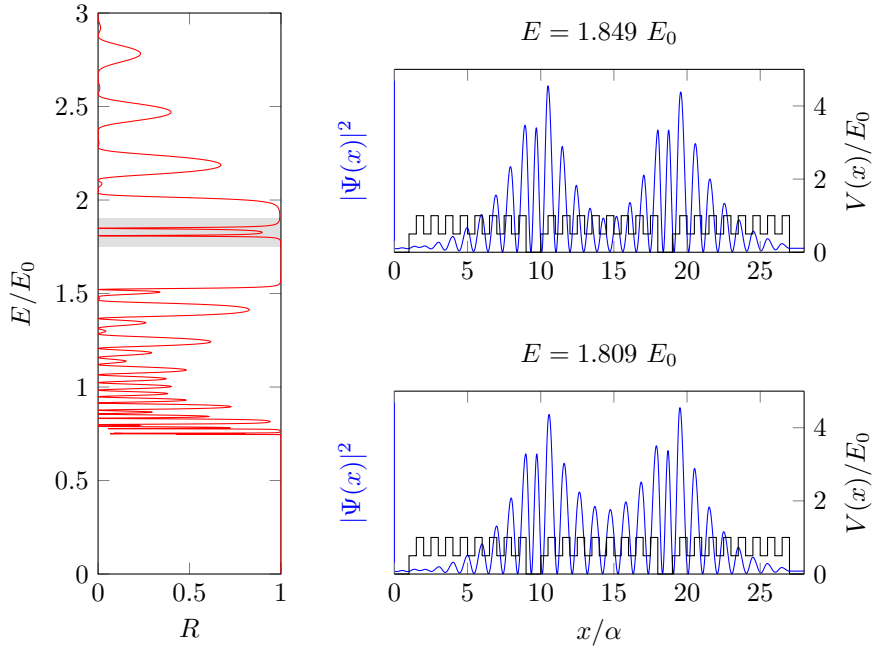


Σχήμα 1.9: Αριστερά: Αναπαράσταση του  $\ln T$  συναρτήσει του  $N$  στο μέσο  $E = 1.7465 E_0$  του ενεργειακού χάσματος καθώς αλλάζουμε τον αριθμό στρωμάτων στη δομή της ενότητας 1.6. Βλέπουμε ότι η εξάρτηση είναι γραμμική ακόμη κι όταν  $N = 8$ . Δεξιά πάνω: Πυκνότητα πιθανότητας της ιδιοκατάστασης σκέδασης  $E = 1.827 E_0$  με οριακή μορφή  $e^{ikx}$  για  $x \rightarrow +\infty$ . Για λόγους κατανόησης, η αντίστοιχη συνάρτηση δυναμικού αναπαρίσταται στο ίδιο διάγραμμα. Η ασυμμετρία της πυκνότητας οφείλεται στην ασυμμετρία του δυναμικού. Δεξιά κάτω: Πυκνότητα πιθανότητας της αντίστοιχης κατάστασης συντονισμού  $E = 1.618 E_0$  της συμμετρικής δομής με ατέλεια. Τώρα, η κυματοσυνάρτηση είναι πρακτικά συμμετρική.

συνέπειες της εισαγωγής μίας ατέλειας με  $\alpha_{imp} = \alpha$  και  $V_{imp} = 0$  στο μέσο της πολυστρωματικής δομής η οποία εξετάσθηκε στην ενότητα 1.6 φαίνονται στο Σχήμα 1.8.

Βλέπουμε ότι η συμπεριφορά του συντελεστή ανάκλασης είναι σε γενικές γραμμές η ίδια, αλλά μέσα στο άνω ενεργειακό χάσμα έχει εμφανιστεί μία κατάσταση συντονισμού  $E = 1.827 E_0$  με μηδενικό συντελεστή ανάκλασης. Σε αυτήν την κατάσταση, η ατέλεια οδηγεί στη μετατροπή ενός οπισθοφθίνοντος κύματος στο πρώτο μισό της δομής σε ένα εμπροσθοφθίνον κύμα στο δεύτερο μισό της δομής. Η κυματοσυνάρτηση καταλήγει να «μαζεύεται» γύρω από την ατέλεια, όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.9. Η πυκνότητα πιθανότητας υπολογίστηκε με επίδραση των αντιστρόφων πινάκων μεταφοράς στο άνυσμα  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  και εφαρμογή των συνθηκών συνέχειας της κυματοσυνάρτησης και της πρώτης της παραγώγου.

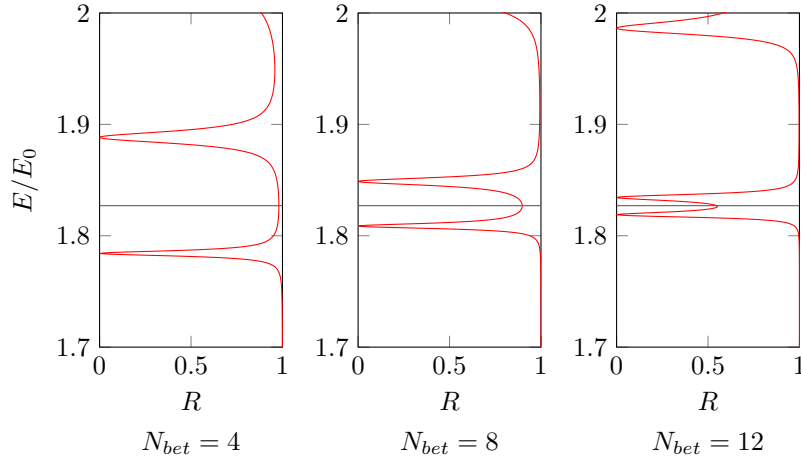
Η ασυμμετρία της κυματοσυνάρτησης ως προς το κέντρο της ατέλειας αντανακλά την αντίστοιχη ασυμμετρία του δυναμικού. Αν θέλουμε να πάρουμε μία συμμετρική κατάσταση ατέλειας, πρέπει να αντιστρέψουμε το δεύτερο μισό της δομής. Τα αποτελέσματα γι' αυτό το συμμετρικό δυναμικό φαίνονται στο Σχήμα 1.8 και στο Σχήμα 1.9.



Σχήμα 1.10: Αριστερά: Συντελεστής ανάκλασης συναρτήσει της ενέργειας όταν έχουμε εισάγει δύο ατέλειες με  $V_{imp}^{(1)} = V_{imp}^{(2)} = 0$ ,  $\alpha_{imp}^{(1)} = \alpha_{imp}^{(2)} = \alpha$  και  $N_{bet} = 8$  (βλ. κείμενο). Βλέπουμε την εμφάνιση δύο καταστάσεων συντονισμού στη μέση του ενεργειακού χάσματος, οι οποίες προέρχονται από τη διαταραχή των αντίστοιχων καταστάσεων μίας ατέλειας λόγω της μεταξύ τους αλληλεπίδρασης. Δεξιά: Πυκνότητες πιθανότητας των δύο καταστάσεων συντονισμού  $E = 1.809 E_0$  και  $E = 1.849 E_0$  με οριακή μορφή  $e^{ikx}$  για  $x \rightarrow +\infty$ . Για λόγους κατανόησης, η αντίστοιχη συνάρτηση δυναμικού αναπαρίστανται στο ίδιο διάγραμμα. Βλέπουμε ότι η κυματοσυνάρτηση είναι συγκεντρωμένη σχεδόν εξίσου και στις δύο ατέλειες.

Παρόμοια εικόνα έχουμε με την εισαγωγή δύο ατελειών. Παρακάτω εξετάζεται η εισαγωγή στη μέση της δομής με  $N$  στρώματα δύο ατελειών ύψους  $V_{imp}^{(1,2)}$  και μήκους  $\alpha_{imp}^{(1,2)}$  αντίστοιχα, ανάμεσα στις οποίες εισάγουμε άλλα  $N_{bet}$  στρώματα.

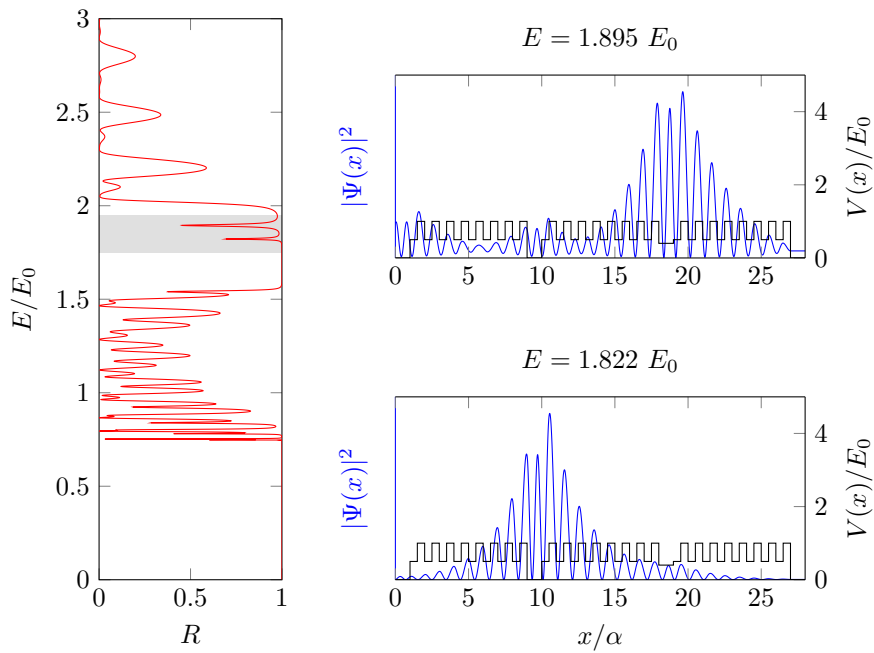
Καταρχάς, τοποθετούμε δύο ίδιες ατέλειες με  $V_{imp}^{(1)} = V_{imp}^{(2)} = 0$ ,  $\alpha_{imp}^{(1)} = \alpha_{imp}^{(2)} = \alpha$  και  $N_{bet} = 8$  στη δομή της ενότητας 1.6 (για την οποία υπενθυμίζεται ότι  $N = 16$ ,  $V_1 = 0.5 E_0$ ,  $V_2 = E_0$ ,  $q_0\alpha = \pi$  και  $\alpha_1 = 0.5 \alpha$ ). Ο συντελεστής ανάκλασης παρουσιάζεται στο Σχήμα 1.10. Στο ενεργειακό χάσμα έχουν εμφανιστεί δύο καταστάσεις συντονισμού οι οποίες δημιουργούνται από τη διαταραχή των αντίστοιχων καταστάσεων μίας ατέλειας. Η αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο καταστάσεων μίας ατέλειας οδηγεί στο σχηματισμό μίας «δεσμικής» και μίας «αντιδεσμικής» κατάστασης περιγραφόμενες χοντρικά από ένα γραμμικό συνδυασμό των δύο αδιατάρακτων καταστάσεων. Εν προκειμένω, οι αδιατάρακτες καταστάσεις έχουν την ίδια ενέργεια, οπότε υπεισέρχονται με περίπου το ίδιο βάρος -κατά μέτρο- στον γραμμικό συνδυασμό, κατ' αναλογία με τα μοριακά τροχιακά των ομοπυρηνικών διατομικών μορίων. Αν η χωρική απόσταση μεταξύ των δύο ατελειών μεγαλώσει, η αλληλεπίδραση τους μειώνεται, οπότε οι ενέργειες τους πλησιάζουν μεταξύ τους και συγκλίνουν στην  $E = 1.827 E_0$  της κατάστασης μίας



Σχήμα 1.11: Μεταβολή της ενέργειας των καταστάσεων ατελειών (όπως αυτή φαίνεται μέσω του συντελεστή ανάκλασης) με την αλλαγή του  $N_{bet}$ . Όσο οι ατέλειες απομακρύνονται, τόσο οι ενέργειες συγκλίνουν στην ενέργεια της κατάστασης μίας ατέλειας (γκρι γραμμή).

ατέλειας, όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.11.

Ύστερα, τοποθετούμε δύο διαφορετικές ατέλειες:  $V_{imp}^{(1)} = 0$ ,  $V_{imp}^{(2)} = 0.4 E_0$ ,  $\alpha_{imp}^{(1)} = \alpha_{imp}^{(2)} = \alpha$  και  $N_{bet} = 8$ . Τα αποτελέσματα φαίνονται στο Σχήμα 1.12. Όπως πριν, εμφανίζονται δύο καταστάσεις συντονισμού, οι οποίες όμως, όπως βλέπουμε από τη μορφή των κυματοσυναρτήσεων, συνδέονται η κάθε μία με μία μόνο από τις δύο ατέλειες. Αυτή η συμπεριφορά θυμίζει τα μοριακά τροχιακά δύο ετεροπυρηνικών διατομικών μορίων, όπου οι διαπλεκόμενες ατομικές ενεργειακές στάθμες απέχουν εξαρχής μεταξύ τους. Τότε, η αλληλεπίδραση προκαλεί πάλι την εμφάνιση δύο νέων καταστάσεων με μεγαλύτερη ενεργειακή διαφορά, αλλά η δεσμική κατάσταση έχει το ηλεκτρόνιο εντοπισμένο στο ηλεκτραρνητικότερο άτομο με το χαμηλότερο ενεργειακά ατομικό τροχιακό. Ομοίως, εδώ η κάτω κατάσταση συντονισμού  $E = 1.822 E_0$  έχει την κυματοσυνάρτηση συγκεντρωμένη γύρω από την πρώτη ατέλεια, της οποίας η αντίστοιχη κατάσταση μίας ατέλειας έχει την ελάχιστα μεγαλύτερη ενέργεια  $E = 1.827 E_0$ .



Σχήμα 1.12: Αριστερά: Συντελεστής ανάκλασης συναρτήσει της ενέργειας όταν έχουμε εισάγει δύο ατέλειες με  $V_{imp}^{(1)} = 0$ ,  $V_{imp}^{(2)} = 0.4 E_0$ ,  $\alpha_{imp}^{(1)} = \alpha_{imp}^{(2)} = \alpha$  και  $N_{bet} = 8$  (βλ. κείμενο). Βλέπουμε πάλι την εμφάνιση δύο καταστάσεων συντονισμού στη μέση του ενεργειακού χάσματος. Δεξιά: Πυκνότητες πιθανότητας των δύο καταστάσεων συντονισμού  $E = 1.822 E_0$  και  $E = 1.895 E_0$  με οριακή μορφή  $e^{ikx}$  για  $x \rightarrow +\infty$ . Για λόγους κατανόησης, η αντίστοιχη συνάρτηση δυναμικού αναπαρίσταται στο ίδιο διάγραμμα. Αυτή τη φορά, βλέπουμε ότι κάθε κατάσταση συγκεντρώνεται σε διαφορετική ατέλεια.



## Κεφάλαιο 2

### Σκέδαση σωματιδίου από περιοδικά χρονικά μεταβαλλόμενη δομή

#### 2.1 Σκέδαση σωματιδίου από ταλαντούμενη διεπιφάνεια

Στην ενότητα 1.3 έγινε αναφορά στο μονοδιάστατο πρόβλημα σκέδασης ενός σωματιδίου κατά τη μετάβασή του από μία περιοχή δυναμικού  $V_1$  σε μία άλλη περιοχή δυναμικού  $V_2$ . Θεωρήσαμε ότι η μεταβολή του δυναμικού γίνεται απότομα σε μία θέση, έστω τη  $x = 0$ , προσέγγιση η οποία, όπως προαναφέρθηκε, είναι έγκυρη εφόσον το μήκος κύματος του σωματιδίου είναι αρκετά μεγαλύτερο από το εύρος μέσα στο οποίο μεταβάλλεται στην πραγματικότητα με συνεχή τρόπο το δυναμικό.

Σε αυτήν την ενότητα, θα προσθέσουμε μία περιπλοκή σε αυτό το τετριμμένο πρόβλημα: θα επιτρέψουμε στην απότομη διεπιφάνεια να ταλαντώνεται αρμονικά με χρονική συχνότητα  $\Omega$  και πλάτος  $\xi$ . Σε αυτήν την περίπτωση έχουμε ένα χρονοεξαρτώμενο κβαντικό μονοδιάστατο σύστημα το οποίο περιγράφεται από το δυναμικό

$$V(x, t) = V_1 + (V_2 - V_1)\Theta[x - \xi \sin(\Omega t - \phi)] . \quad (2.1)$$

Καταλαβαίνει κανείς εύκολα ότι η φάση  $\phi$  θα μπορούσε να έχει απορροφηθεί στο  $t$  με κατάλληλο ορισμό της αρχής των χρονικών μετρήσεων, όμως θα διατηρηθεί εδώ για λόγους οι οποίοι θα φανούν στην ενότητα 2.4. Επίσης, ας αναφέρουμε ότι το πρόβλημα έχει λυθεί και στο [11].

Αναζητούμε τη λύση  $\psi(x, t)$  της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\psi(x, t) . \quad (2.2)$$

Λόγω της χρονικής περιοδικότητας, μπορούμε να επικαλεστούμε το θεώρημα του Floquet ([10] και [12]) για να γράψουμε την  $\psi(x, t)$  ως

$$\psi(x, t) = e^{-i\omega t} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} f_n(x) e^{in\Omega t} . \quad (2.3)$$

Αντικαθιστώντας στην εξ. (2.2), βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \\ &= e^{-i\omega t} \begin{cases} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [a_n e^{iq_1^n x} + b_n e^{-iq_1^n x}] e^{in\Omega t}, & \text{αν } x < -\xi \\ \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [c_n e^{iq_2^n x} + d_n e^{-iq_2^n x}] e^{in\Omega t}, & \text{αν } x > \xi \end{cases}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

με

$$\hbar(\omega - n\Omega) = \frac{\hbar^2(q_1^n)^2}{2m} + V_1 = \frac{\hbar^2(q_2^n)^2}{2m} + V_2. \quad (2.5)$$

Αν  $\hbar(\omega - n\Omega) \geq V_{1,2}$ , οι κυματάριθμοι  $q_{1,2}^n$  είναι πραγματικοί και επιλέγονται θετικοί. Αν  $\hbar(\omega - n\Omega) < V_{1,2}$ , οι κυματάριθμοι είναι φανταστικοί και δίνουν εκθετικά αύξουσες ή φθίνουσες συναρτήσεις του  $x$ . Αν επιλέξουμε το φανταστικό μέρος τους να είναι θετικό, για να εξασφαλίζεται η τετραγωνική ολοκληρωσιμότητα της κυματοσυνάρτησης πρέπει οι αντίστοιχοι συντελεστές  $a_n$  ή/και  $d_n$  να μηδενίζονται.

Για  $-\xi < x < \xi$ , η λύση είναι πιο δύσκολο να βρεθεί. Η γενική διαδικασία είναι η ανάλυση της κυματοσυνάρτησης και του δυναμικού σε σειρά Fourier ως προς τον χρόνο, η ομαδοποίηση των όρων με το ίδιο μιγαδικό εκθετικό της μορφής  $e^{in\Omega t}$  και η εξίσωσή τους, έτσι ώστε να πάρουμε ένα απειροδιάστατο σύστημα γραμμικών διαφορικών εξισώσεων ως προς  $x$  για τους συντελεστές των εκθετικών στο ανάπτυγμα της κυματοσυνάρτησης. Για να αποφύγουμε αυτήν τη διαδικασία, υποθέτουμε ότι η λύση (2.4) επεκτείνεται μέχρι τη διεπιφάνεια  $x = \xi \sin(\Omega t - \phi)$

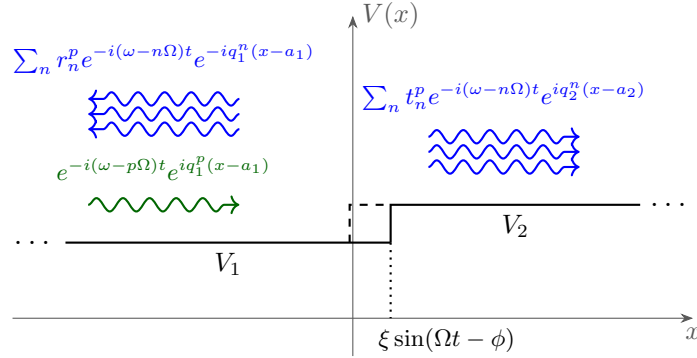
$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \\ &= e^{-i\omega t} \begin{cases} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [a_n e^{iq_1^n x} + b_n e^{-iq_1^n x}] e^{in\Omega t}, & \text{αν } x < \xi \sin(\Omega t - \phi) \\ \sum_{n=-\infty}^{+\infty} [c_n e^{iq_2^n x} + d_n e^{-iq_2^n x}] e^{in\Omega t}, & \text{αν } x > \xi \sin(\Omega t - \phi) \end{cases}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Με αυτόν τον τρόπο, η συνέχεια της κυματοσυνάρτησης και της πρώτης της παραγώγου εξασφαλίζεται παντού εκτός από τη διεπιφάνεια. Το γεγονός ότι, επιβάλλοντας αυτές τις συνθήκες και στη διεπιφάνεια, βρίσκουμε παρακάτω, έστω αριθμητικά, λύση της μορφής (2.6), μας δείχνει ότι η υπόθεση μας είναι σωστή.

Για τον ακριβή προσδιορισμό της λύσης, πρέπει να επιβληθούν οριακές συνθήκες οι οποίες να περιγράφουν το φυσικό σύστημα υπό εξέταση. Εμείς θα θεωρήσουμε ότι έχουμε ένα σωματίδιο το οποίο προσπίπτει από τ' αριστερά. Αν η ενέργεια του σωματιδίου στο  $-\infty$  είναι  $\hbar\omega$ , η εξ. (2.6) μας επιτρέπει να περιγράψουμε τη διαδικασία σκέδασης ως διαδικασία απορρόφησης ή εκπομπής κβάντων ενέργειας  $\hbar\Omega$  και συνακόλουθης διέλευσης ή ανάκλασης. Προφανώς, θα ισχύει ότι  $\hbar\omega - V_1 > 0$ . Σε μία τέτοια κατάσταση πρόσπτωσης, θα έχουμε  $a_n = \delta_{0n}$ ,  $b_n = r_n$ ,  $c_n = t_n$  και  $d_n = 0$ . Με άλλα λόγια, η κυματοσυνάρτηση σπάει σε τρία κομμάτια:

- Το εισερχόμενο κύμα  $\psi_{in} = e^{-i\omega t} e^{iq_1^0 x}$  για  $x < \xi \sin(\Omega t - \phi)$ .





Σχήμα 2.1: Σκένδαση από ταλαντούμενη διεπιφάνεια. Το εισερχόμενο κύμα σημαίνεται με πράσινο και τα εξερχόμενα με μπλε.

- Τα ανακλώμενα κύματα

$$\psi_{ref} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n e^{-iq_1^n x} e^{-i(\omega-n\Omega)t}$$

για  $x < \xi \sin(\Omega t - \phi)$ .

- Τα διερχόμενα κύματα

$$\psi_{tr} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n e^{iq_2^n x} e^{-i(\omega-n\Omega)t}$$

για  $x > \xi \sin(\Omega t - \phi)$ .

Οι συντελεστές  $r, t$  επιτρέπουν να ξεχωρίσουμε, όπως στη χρονοανεξάρτητη περίπτωση, το αν έχουμε ανακλώμενο ή διερχόμενο κύμα.

Την ίδια ακριβώς εικόνα έχουμε αν η ενέργεια του σωματιδίου στο  $-\infty$  είναι  $\hbar(\omega - p\Omega)$ , όπου  $p \in \mathbb{Z}$ , καθώς το μόνο το οποίο απαιτείται είναι η αλλαγή  $\omega \rightarrow \omega - p\Omega$ . Παρότι η αλλαγή αυτή μπορεί τη συγκεκριμένη στιγμή να φαίνεται ανούσια, γίνεται σημαντική αν στον χώρο υπάρχει και μία δεύτερη διεπιφάνεια η οποία ταλαντώνεται με την ίδια συχνότητα, αφού από αυτήν τη διεπιφάνεια θα προέλθουν κύματα τα οποία θα έχουν ήδη απορροφήσει ή εκπέμψει χβάντα. Για να φαίνεται το σε τι είδους εισερχόμενο κύμα αναφερόμαστε, προσθέτουμε ένα άνω δείκτη  $p$ :  $r_n^p$  και  $t_n^p$ .

Ακόμη, για να επιτρέψουμε την πρόσθεση διεπιφανειών με τρόπο ανάλογο μ' αυτόν ο οποίος περιγράφηκε στην ενότητα 1.3, αναπτύσσουμε τα κύματα αριστερά και δεξιά της διεπιφάνειας ως προς δύο σημεία  $a_1$  και  $a_2$  και ξαναγράφουμε την κυματοσυνάρτηση ως

$$\psi(x, t) = \begin{cases} e^{-i\omega t} e^{ip\Omega} e^{iq_1^p(x-a_1)} + e^{-i\omega t} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p e^{-iq_1^n(x-a_1)} e^{in\Omega t}, & \text{αν } x < \xi \sin(\Omega t - \phi) \\ e^{-i\omega t} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p e^{iq_2^n(x-a_2)} e^{in\Omega t}, & \text{αν } x > \xi \sin(\Omega t - \phi) \end{cases} \quad (2.7)$$

Το μόνο το οποίο μένει για την εύρεση των  $r_n^p$  και  $t_n^p$  είναι η απαίτηση συνέχειας της  $\psi$  και της  $\frac{\partial \psi}{\partial x}$  στο  $x = \xi \sin(\Omega t - \phi)$

$$\begin{aligned} & e^{ip\Omega} e^{-iq_1^p a_1} e^{iq_1^p \xi \sin(\Omega t - \phi)} + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p e^{iq_1^n a_1} e^{-iq_1^n \xi \sin(\Omega t - \phi)} e^{in\Omega t} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p e^{-iq_2^n a_2} e^{iq_2^n \xi \sin(\Omega t - \phi)} e^{in\Omega t} , \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} & q_1^p e^{ip\Omega} e^{-iq_1^p a_1} e^{iq_1^p \xi \sin(\Omega t - \phi)} - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p q_1^n e^{iq_1^n a_1} e^{-iq_1^n \xi \sin(\Omega t - \phi)} e^{in\Omega t} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p q_2^n e^{-iq_2^n a_2} e^{iq_2^n \xi \sin(\Omega t - \phi)} e^{in\Omega t} . \end{aligned}$$

Από την ταυτότητα των Jacobi-Anger [19](με την αλλαγή  $\theta \rightarrow \frac{\pi}{2} - \theta$ )

$$e^{ia \sin \theta} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(a) e^{im\theta} , \quad (2.8)$$

όπου  $J_m(a)$  οι συναρτήσεις Bessel πρώτου είδους, έχουμε

$$\begin{aligned} & e^{ip\Omega} e^{-iq_1^p a_1} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(q_1^p \xi) e^{im\Omega t} e^{-im\phi} + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p e^{iq_1^n a_1} e^{in\Omega t} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(-q_1^n \xi) e^{im\Omega t} e^{-im\phi} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p e^{-iq_2^n a_2} e^{in\Omega t} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(q_2^n \xi) e^{im\Omega t} e^{-im\phi} , \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} & q_1^p e^{ip\Omega} e^{-iq_1^p a_1} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(q_1^p \xi) e^{im\Omega t} e^{-im\phi} - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p q_1^n e^{iq_1^n a_1} e^{in\Omega t} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(-q_1^n \xi) e^{im\Omega t} e^{-im\phi} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p q_2^n e^{-iq_2^n a_2} e^{in\Omega t} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(q_2^n \xi) e^{im\Omega t} e^{-im\phi} e^{in\Omega t} . \end{aligned}$$

Αλλάζοντας τη μεταβλητή άθροισης από  $m$  σε  $k = m + n$  (ή  $m + p$  στην περίπτωση

του πρώτου όρου) κι έπειτα αλλάζοντας τη σειρά των αθροισμάτων, παίρνουμε

$$\begin{aligned} & \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-iq_1^p a_1} J_{k-p}(q_1^p \xi) e^{ik\Omega t} e^{i(p-k)\phi} + \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p e^{iq_1^n a_1} J_{k-n}(-q_1^n \xi) e^{ik\Omega t} e^{i(n-k)\phi} \\ &= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p e^{-iq_2^n a_2} J_{k-n}(q_2^n \xi) e^{ik\Omega t} e^{i(n-k)\phi}, \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} & \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-iq_1^p a_1} q_1^p J_{k-p}(q_1^p \xi) e^{ik\Omega t} e^{i(p-k)\phi} - \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p q_1^n e^{iq_1^n a_1} J_{k-n}(-q_1^n \xi) e^{ik\Omega t} e^{i(n-k)\phi} \\ &= \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p q_2^n e^{-iq_2^n a_2} J_{k-n}(q_2^n \xi) e^{ik\Omega t} e^{i(n-k)\phi}. \end{aligned}$$

Παρατηρούμε τώρα ότι κάθε σχέση, μεταφέροντας όλους τους όρους στο ένα μέλος, μπορεί να γραφεί ως ένα άθροισμα ως προς το  $k$  εκθετικών  $e^{ik\Omega t}$  επί κάποιους συντελεστές  $c_k$ , το οποίο είναι ταυτοτικά 0 για κάθε  $t$ . Ο μόνος τρόπος να συμβαίνει αυτό είναι αν  $c_k = 0$  για κάθε  $k \in \mathbb{Z}$ . Αν αναδιατάξουμε τους όρους και διώξουμε ένα εκθετικό  $e^{-ik\phi}$  το οποίο πολλαπλασιάζει ολικά το κάθε  $c_k$ , βρίσκουμε ότι

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p \left( e^{-iq_2^n a_2} J_{k-n}(q_2^n \xi) e^{in\phi} \right) + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p \left( -e^{iq_1^n a_1} J_{k-n}(-q_1^n \xi) e^{in\phi} \right) \\ &= e^{-iq_1^p a_1} J_{k-p}(q_1^p \xi) e^{ip\phi}, \end{aligned}$$

και

$$\begin{aligned} & \sum_{n=-\infty}^{+\infty} t_n^p \left( q_2^n e^{-iq_2^n a_2} J_{k-n}(q_2^n \xi) e^{in\phi} \right) + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} r_n^p \left( q_1^n e^{iq_1^n a_1} J_{k-n}(-q_1^n \xi) e^{in\phi} \right) \\ &= q_1^p e^{-iq_1^p a_1} J_{k-p}(q_1^p \xi) e^{ip\phi}. \end{aligned}$$

Για την επίλυση αυτού του απειροδιάστατου συστήματος, κάνουμε την εύλογη υπόθεση ότι, γενικά, η πιθανότητα απορρόφησης ή εκπομπής ενός αριθμού κβάντων μεγαλύτερο από ένα κατώφλι  $N_c$  ( $c$  από το cutoff) είναι πρακτικά μηδενική. Θα δούμε στις ενότητες 2.2 και 2.3 ότι τα αποτελέσματα θα δικαιώσουν αυτήν την υπόθεση και ότι η επιλογή  $N_c = 10$  -ή ακόμη και  $N_c = 5$  - επαρκεί για τις παρακάτω εφαρμογές. Για  $p = 0$  ή κοντά στο μηδέν, μπορούμε να περιορίσουμε τα  $k$  και  $n$  στις τιμές  $-N_c, -N_c + 1, \dots, N_c$ , για να πάρουμε ένα σύστημα  $2(2N_c + 1)$  γραμμικών εξισώσεων (έχουμε δύο είδη εξισώσεων, κάθε μία απαριθμούμενη από το  $k$ ) με  $2(2N_c + 1)$  αγνώστους ( $r^p$  και  $t^p$  απαριθμούμενοι από το  $n$ ). Συνοπτικά, έχουμε

$$\underbrace{\begin{pmatrix} A^I & A^{II} \\ A^{III} & A^{IV} \end{pmatrix}}_A \underbrace{\begin{pmatrix} D_t & 0 \\ 0 & D_r \end{pmatrix}}_D \begin{pmatrix} t_{-N_c}^p \\ t_{-N_c+1}^p \\ \vdots \\ t_{N_c}^p \\ r_{-N_c}^p \\ r_{-N_c+1}^p \\ \vdots \\ r_{N_c}^p \end{pmatrix} = e^{-iq_1^p a_1} e^{ip\phi} \underbrace{\begin{pmatrix} b_t \\ b_r \end{pmatrix}}_b, \quad (2.9)$$

όπου οι πίνακες  $A$  και  $D$  είναι πίνακες αποτελούμενοι από τους ακόλουθους τετραγωνικούς πίνακες  $2N_c + 1$  διαστάσεων

$$(A^I)_{kn} = J_{k-n}(q_2^n \xi), \quad (2.10\alpha')$$

$$(A^{II})_{kn} = -J_{k-n}(-q_1^n \xi), \quad (2.10\beta')$$

$$(A^{III})_{kn} = q_2^n J_{k-n}(q_2^n \xi), \quad (2.10\gamma')$$

$$(A^{IV})_{kn} = q_1^n J_{k-n}(-q_1^n \xi), \quad (2.10\delta')$$

και

$$(D_t)_{kn} = \delta_{kn} e^{in\phi} e^{-iq_2^n a_2}, \quad (2.11\alpha')$$

$$(D_r)_{kn} = \delta_{kn} e^{in\phi} e^{iq_1^n a_1}, \quad (2.11\beta')$$

ενώ ο πίνακας-στήλη  $b$  αποτελείται από δύο στήλες  $(2N_c + 1) \times 1$

$$(b_t)_k = J_{k-p}(q_1^p \xi), \quad (2.12\alpha')$$

$$(b_r)_k = q_1^p J_{k-p}(q_1^p \xi). \quad (2.12\beta')$$

Η αρίθμηση των στοιχείων ξεκινάει από το  $-N_c$  και φθάνει ως το  $+N_c$ . Αν θέλουμε την κλασσική αρίθμηση η οποία ξεκινάει από το 1, αρκεί να προσθέσουμε  $N_c + 1$  στους κάτω δείκτες.

Η επίλυση του συστήματος μπορεί να γίνει με τη βοήθεια υπολογιστή. Τα μόνα μεγέθη τα οποία εμφανίζονται στην εξ. (2.9) είναι (ή μπορούν να γίνουν πολλαπλασιάζοντας με ένα μήκος και τα δύο μέλη) αδιάστατα γινόμενα κυματαριθμών επί μήκη. Αν ορίσουμε τους αδιάστατους λόγους ενεργειών  $v_1 = V_1/\hbar\omega$ ,  $v_2 = V_2/\hbar\omega$  και  $\hbar\Omega/\hbar\omega = \sigma$ , τότε όλοι οι κυματάριθμοι μπορούν να συνδεθούν με τον  $q = \sqrt{2m\hbar\omega/\hbar^2}$

$$q_1^n = q\sqrt{1 - n\sigma - v_1} \quad \text{και} \quad q_2^n = q\sqrt{1 - n\sigma - v_2}. \quad (2.13)$$

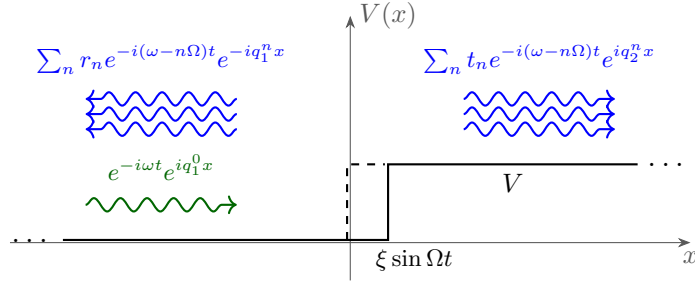
Επομένως, οι λόγοι  $v_1, v_2$  και  $\sigma$  και τα γινόμενα των μηκών  $a_{1,2}$  και  $\xi$  με τον  $q$  περιέχουν όλη την πληροφορία του συστήματος. Προφανώς, είναι προτιμητέο να προσδιορίζεται μόνο το γινόμενο ενός μήκους αναφοράς με τον  $q$  και τα υπόλοιπα μήκη να δίνονται ως πολλαπλάσια του μήκους αναφοράς.

Λύνοντας την εξ. (2.9), παίρνουμε ένα σετ συντελεστών  $r$  και  $t$ . Μένει ακόμη να συνδέσουμε αυτούς τους συντελεστές με τους κανονικούς συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης  $R$  και  $T$ . Επειδή εδώ η κυματοσυνάρτηση είναι χρονοεξαρτώμενη, το ρεύμα πιθανότητας δεν είναι σταθερό ούτε στον χώρο ούτε στον χρόνο. Για να ξεπεράσουμε αυτήν τη δυσκολία, παίρνουμε τον χρονικό μέσο όρο. Ενδεικτικά, θα υπολογίσουμε το ρεύμα πιθανότητας το οποίο αντιστοιχεί στα ανακλώμενα κύματα της εξ. (2.7)

$$\begin{aligned} J_{ref} &= \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left[ \psi_{ref}^* \frac{\partial \psi_{ref}}{\partial x} \right] \\ &= \frac{\hbar}{m} \sum_{n,m=-\infty}^{+\infty} \text{Im} \left[ -iq_1^n (r_m^p)^* r_n^p e^{i(q_1^m - q_1^n)(x-a_1)} e^{i(n-m)\Omega t} \right]. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Αν πάρουμε τον μέσο όρο  $\frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} dt(\dots)$  σε μία περίοδο  $T = 2\pi/\Omega$ , μόνο οι όροι  $n = m$  οι οποίοι δεν εξαρτώνται από τον χρόνο θα επιζήσουν

$$\langle J_{ref} \rangle = \frac{\hbar}{m} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \text{Im} [-iq_1^n |r_n^p|^2] = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left[ -\frac{\hbar}{m} \text{Re}(q_1^n) |r_n^p|^2 \right]. \quad (2.15)$$



Σχήμα 2.2: Σκέδαση από ταλαντούμενο σκαλοπάτι δυναμικού. Το εισερχόμενο κύμα σημαίνεται με πράσινο και τα εξερχόμενα με μπλε.

Οι συντελεστές  $R$  και  $T$  ορίζονται (με άνω δείκτες  $p$  για να σημαίνουμε το εισερχόμενο κύμα) ως

$$R^p = \left| \frac{\langle J_{ref} \rangle}{\langle J_{in} \rangle} \right| \quad \text{και} \quad T^p = \left| \frac{\langle J_{tr} \rangle}{\langle J_{in} \rangle} \right|, \quad (2.16)$$

όπου εύκολα βρίσκουμε ότι  $\langle J_{in} \rangle = \hbar q_1^p / m$ . Εν τέλει

$$R^p = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} R_n^p = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re}(q_1^n)}{q_1^p} |r_n^p|^2, \quad (2.17)$$

όπου  $R_n^p$  οι αποκαλούμενοι μερικοί συντελεστές ανάκλασης οι οποίοι αναφέρονται σε κάθε ένα από τα ανακλώμενα κύματα. Ομοίως

$$T^p = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} T_n^p = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re}(q_2^n)}{q_1^p} |t_n^p|^2, \quad (2.18)$$

όπου  $T_n^p$  οι αποκαλούμενοι μερικοί συντελεστές διέλευσης οι οποίοι αναφέρονται σε κάθε ένα από τα διερχόμενα κύματα.

## 2.2 Ταλαντούμενο σκαλοπάτι δυναμικού-Σύγκριση με την αδιαβατική προσέγγιση

Τα συμπεράσματα της ενότητας 2.1 θα εφαρμοσθούν σε αυτήν την ενότητα για μία απλή υποπερίπτωση της ταλαντούμενης διεπιφάνειας. Συγκεκριμένα, θα πάρουμε  $v_1 = 0$  και  $v_2 = v$ , έτσι ώστε το σωματίδιο να κινείται ελεύθερα στ' αριστερά. Θα εξετάσουμε μόνο την περίπτωση  $\hbar\omega > V_2$ . Αφού δε θα προσθέσουμε κάποια άλλη δομή στο σύστημα μας, δεν υπάρχει λόγος να θεωρήσουμε κάτι άλλο πέρα από  $\phi = 0$ ,  $a_1 = a_2 = 0$  και  $p = 0$ , εφόσον, με εξαίρεση το  $p$ , δεν αναμένουμε κάποια διαφορά στους  $R$  και  $T$  ακόμη κι αν έχουμε μη μηδενικές τιμές. Οι άνω δείκτες  $p$  θα παραλειφθούν για λόγους συντομίας. Πέρα από την εξαγωγή γενικών ποιοτικών χαρακτηριστικών της σκέδασης από ταλαντούμενες διεπιφάνειες, σκοπός αυτής της ενότητας είναι επίσης η σύγκριση με τα αποτελέσματα της αποκαλούμενης αδιαβατικής προσέγγισης.

Σύμφωνα με την αδιαβατική προσέγγιση, αν η ταλάντωση της διεπιφάνειας είναι επαρκώς αργή ( $\Omega \ll \omega$ ), η κυματοσυνάρτηση του σωματιδίου βλέπει την επιφάνεια ως πρακτικά στατική. Καθώς η διεπιφάνεια κινείται, η κυματοσυνάρτηση

ακολουθεί την κίνηση, αλλάζοντας στην αντίστοιχη στάσιμη κατάσταση την οποία θα είχαμε αν η διεπιφάνεια ήταν ακίνητη στην εκάστοτε θέση. Επομένως, το πρόβλημα ανάγεται στην κλασσική σκέδαση από στατικό σκαλοπάτι δυναμικού. Η λύση έχει τη μορφή

$$\psi(x) = e^{-i\omega t} \begin{cases} e^{iq_1 x} + r e^{-iq_1 x}, & \text{αν } x < \xi \sin(\Omega t) \\ t e^{iq_2 x}, & \text{αν } x > \xi \sin(\Omega t) \end{cases}. \quad (2.19)$$

Βρίσκουμε ότι

$$r = \frac{q_1 - q_2}{q_1 + q_2} e^{2i\xi \sin(\Omega t)}, \quad (2.20\alpha')$$

$$t = \frac{2q_1}{q_1 + q_2} e^{i(q_1 - q_2)\xi \sin(\Omega t)}. \quad (2.20\beta')$$

Χρησιμοποιώντας την εξ. (2.8), μπορούμε να γράψουμε κι εδώ το ανακλώμενο και το διερχόμενο μέρος της κυματοσυνάρτησης ως άπειρο άθροισμα κυμάτων διαφορετικής ενέργειας

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \\ &= e^{-i\omega t} \begin{cases} e^{iq_1 x} + e^{-iq_1 x} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{q_2 - q_1}{q_1 + q_2} J_n(2q_1 \xi) e^{in\Omega t}, & \text{αν } x < \xi \sin(\Omega t) \\ e^{iq_2 x} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{2q_1}{q_1 + q_2} J_n[(q_2 - q_1)\xi] e^{in\Omega t}, & \text{αν } x > \xi \sin(\Omega t) \end{cases}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Η γενική διαδικασία η οποία ακολουθείται είναι η ανάπτυξη κατά Fourier των συντελεστών, απλώς στη συγκεκριμένη περίπτωση η εξ. (2.8) μας επιτρέπει να παρακάμψουμε τον υπολογισμό ολοκληρωμάτων. Παρατηρούμε ότι στην αδιαβατική προσέγγιση όλα τα κύματα μίας κατηγορίας έχουν τον ίδιο κυματάρθρωμο. Οι συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης μπορούν να υπολογιστούν κανονικά από τους  $r$  και  $t$ , όπως σε κάθε παρόμοιο στατικό πρόβλημα, και προκύπτουν χρονοανεξάρτητοι. Ταυτόχρονα, ο υπολογισμός μπορεί να γίνει με τη χρήση των αθροισμάτων κυμάτων, κατ' αναλογία με τον υπολογισμό της ενότητας 2.1. Καταλήγουμε στις σχέσεις

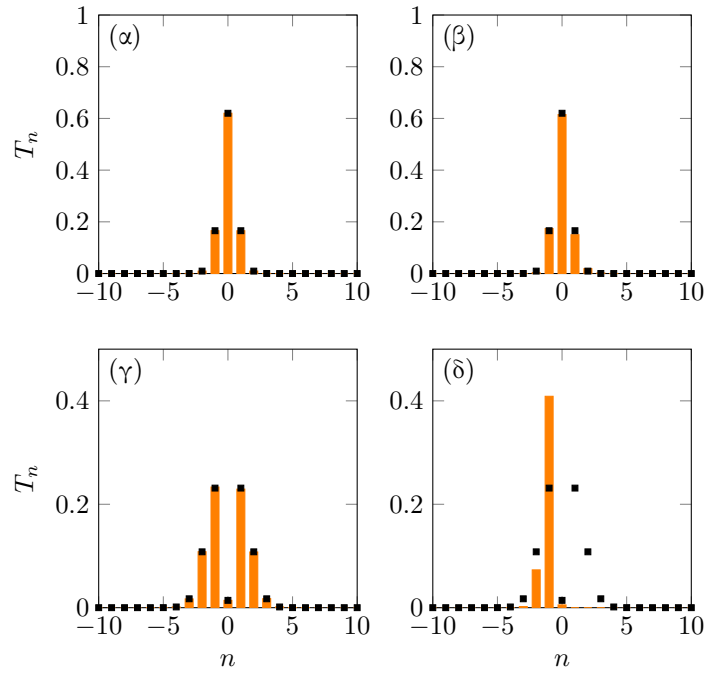
$$R^{ad} = \frac{(q_2 - q_1)^2}{(q_1 + q_2)^2} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} R_n^{ad} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{(q_2 - q_1)^2}{(q_1 + q_2)^2} |J_n(2q_1 \xi)|^2, \quad (2.22)$$

και

$$T^{ad} = \frac{4q_1 q_2}{(q_1 + q_2)^2} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} T_n^{ad} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{4q_1 q_2}{(q_1 + q_2)^2} |J_n[(q_2 - q_1)\xi]|^2. \quad (2.23)$$

Καθώς η συχνότητα ταλάντωσης τείνει στο μηδέν, αναμένουμε οι πραγματικοί  $R_n$  και  $T_n$  να τείνουν στους αντίστοιχους  $R_n^{ad}$  και  $T_n^{ad}$ .

Στο Σχήμα 2.3 φαίνονται οι  $T_n$  και  $T_n^{ad}$  για μερικές ενδεικτικές τιμές των  $v$ ,  $\sigma$  και  $q\xi = b$ . Καταρχάς, βλέπουμε ότι οι συντελεστές διέλευσης είναι μη μηδενικοί μόνο για περιορισμένες τιμές του  $n$  γύρω από το 0, κάτι το οποίο επιβεβαιώνει το



Σχήμα 2.3: Μερικοί συντελεστές διέλευσης  $T_n$  (πορτοκαλί μπάρες) και  $T_n^{ad}$  (μαύρα τετράγωνα) συναρτήσει του  $n$  για σκέδαση από την απλή ταλαντούμενη διεπιφάνεια την οποία πραγματεύεται η ενότητα 2.2. Όλα τα διαγράμματα αναφέρονται σε  $b = \pi$ , αλλά οι  $v$  και  $\sigma$  παίρνουν διαφορετικές τιμές: (α)  $v = 0.5$ ,  $\sigma = 0.001$ , (β)  $v = 0.5$ ,  $\sigma = 0.1$ , (γ)  $v = 0.9$ ,  $\sigma = 0.001$ , (δ)  $v = 0.9$ ,  $\sigma = 0.1$ .

«κόψιμο» των άπειρων σειρών στην ενότητα 2.1. Έπειτα, βλέπουμε ότι η εμφάνιση κυμάτων τα οποία έχουν απορροφήσει ή εκπέμψει κβάντα είναι ισχυρότερη όταν το σκαλοπάτι είναι ψηλότερο. Επίσης, το  $b$  πρέπει να είναι αρκούντως μεγάλο για να έχουμε έντονη μεταφορά ενέργειας, αν και εδώ δεν παρουσιάζεται κάποιο σχήμα για λόγους συντομίας. Μία πιθανή εξήγηση είναι ότι, όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια του σωματιδίου σε σχέση με το σκαλοπάτι, τόσο λιγότερο αντιλαμβάνεται το σκαλοπάτι, πόσο μάλλον την ταλάντωση του, και ότι αντίστοιχα το πλάτος της ταλάντωσης πρέπει να είναι συγκρίσιμο με το μήκος κύματος του σωματιδίου. Τα συμπεράσματα της ενότητας 2.4 δείχνουν προς μία άλλη πιθανή ερμηνεία: ότι το μέγεθος της ταλάντωσης, εννοούμενης ως διαταραχής του δυναμικού, πρέπει να είναι αρκετά μεγάλο.

Όσον αφορά την ισχύ της αδιαβατικής προσέγγισης, αυτή είναι πολύ καλή για μικρά  $\sigma$  και παραμένει καλή για μεγάλα  $\sigma$  εφόσον δεν έχουμε έντονα φαινόμενα μεταφοράς ενέργειας, αλλά καταρρέει όταν αυτά γίνουν σημαντικά. Συγκεκριμένα, σύμφωνα με την αδιαβατική προσέγγιση,  $T_{-n}^{ad} = T_n^{ad}$  όπως φαίνεται από τις εξ. (2.22) και (2.23). Αντίθετα, επιλύοντας δυναμικά το πρόβλημα, τα αρνητικά  $n$  προτιμώνται, τα οποία υπενθυμίζεται ότι με τις συμβάσεις της παρούσας εργασίας αντιστοιχούν σε απορρόφηση ενέργειας. Αυτό είναι προφανές, διότι τα κύματα με μεγαλύτερη ενέργεια έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να περάσουν το σκαλοπάτι. Σε όλα τα διαγράμματα υπάρχει αυτή η προτίμηση, όμως φαίνεται ξεκάθαρα στην περίπτωση  $v = 0.9$ ,  $\sigma = 0.1$ . Σε αυτό το διάγραμμα, κανένα από τα κύματα τα

οποία έχουν εκπέμψει κβάντα δεν περνούν το σκαλοπάτι, επειδή, όπως μπορεί να επαληθεύσει εύκολα κανείς, με την εκπομπή κβάντων η ενέργεια του προσπίπτοντος κύματος γίνεται μικρότερη από το δυναμικό του σκαλοπατιού, οπότε το διερχόμενο κύμα μετατρέπεται από διαδιδόμενο σε εκθετικά φθίνον.

### 2.3 Πολυστρωματική δομή με ταλαντούμενες διεπιφάνειες

Είμαστε πλέον έτοιμοι να εισάγουμε χρονική εξάρτηση στην πολυστρωματική δομή με την οποία ασχοληθήκαμε στο πρώτο κεφάλαιο. Συγκεκριμένα, θα ασχοληθούμε με τη δομή η οποία περιείχε δύο ατέλειες, πρώτα ισοδύναμες κι έπειτα διαφορετικές. Τα χαρακτηριστικά της δομής υπενθυμίζονται εδώ:  $N = 16$ ,  $N_{bet} = 8$ ,  $V_1 = 0.5 E_0$ ,  $V_2 = E_0$ ,  $q_0\alpha = \pi$  και  $\alpha_1 = 0.5 \alpha$ . Στη μία περίπτωση, για τις ατέλειες έχουμε  $V_{imp}^{(1)} = V_{imp}^{(2)} = 0$  και  $\alpha_{imp}^{(1)} = \alpha_{imp}^{(2)} = \alpha$ , ενώ στην άλλη  $V_{imp}^{(1)} = 0$ ,  $V_{imp}^{(2)} = 0.4 E_0$  και  $\alpha_{imp}^{(1)} = \alpha_{imp}^{(2)} = \alpha$ . Σκοπός αυτής της ενότητας είναι να επιτρέψουμε σε κάποιες από τις τέσσερις διεπιφάνειες οι οποίες οριοθετούν τις ατέλειες να ταλαντώνονται με συχνότητα  $\Omega$  και με πλάτος  $\xi$ . Η φάση  $\phi$  της κάθε διεπιφάνειας μπορεί να είναι διαφορετική και μία μεταβολή στις διαφορές φάσης οδηγεί εν γένει σε διαφορετικά αποτελέσματα.

Προς στιγμήν, επιστρέφουμε στη μία διεπιφάνεια της ενότητας 2.1. Επιλέγοντας ένα  $N_c$ , μπορούμε να βρούμε τους συντελεστές  $t_n^p$  και  $r_n^p$  και να σχηματίσουμε τους  $(2N_c + 1) \times (2N_c + 1)$  πίνακες

$$r^+ = \begin{pmatrix} r_{-N_c}^{-N_c} & r_{-N_c}^{-N_c+1} & \dots & r_{-N_c}^{N_c} \\ r_{-N_c+1}^{-N_c} & r_{-N_c+1}^{-N_c+1} & \dots & r_{-N_c+1}^{N_c} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ r_{N_c}^{-N_c} & r_{N_c}^{-N_c+1} & \dots & r_{N_c}^{N_c} \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

και

$$t^+ = \begin{pmatrix} t_{-N_c}^{-N_c} & t_{-N_c}^{-N_c+1} & \dots & t_{-N_c}^{N_c} \\ t_{-N_c+1}^{-N_c} & t_{-N_c+1}^{-N_c+1} & \dots & t_{-N_c+1}^{N_c} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{N_c}^{-N_c} & t_{N_c}^{-N_c+1} & \dots & t_{N_c}^{N_c} \end{pmatrix}, \quad (2.25)$$

δηλαδή τους πίνακες με στοιχεία (ξεκινώντας την αρίθμηση από το  $-N_c$ ) τα  $(r^+)_{np} = r_n^p$  και  $(t^+)_{np} = t_n^p$ . Το  $+$  έχει εισαχθεί για να φαίνεται ότι αυτοί οι συντελεστές αφορούν πρόπτωση από τ' αριστερά.

Αυτοί οι πίνακες είναι η γενίκευση των απλών συντελεστών  $r$  και  $t$  για την περίπτωση μας όπου έχουμε πολλά κύματα με διαφορετικές ενέργειες  $\hbar(\omega - n\Omega)$  διότι, αν υποθέσουμε ότι το προσπίπτον μέρος της κυματοσυνάρτησης είναι

$$e^{-i\omega t} \sum_{p=-N_c}^{+N_c} c_p e^{iq_1^p x} e^{ip\Omega t},$$



τότε οι συντελεστές των ανακλώμενων κυμάτων δίνονται με την επίδραση του πίνακα  $r^+$  στο διάνυσμα στήλης  $c$  με στοιχεία τους  $c_p$  ξεκινώντας από το  $p = -N_c$ . Το αντίστοιχο ισχύει και για τα διερχόμενα κύματα και τον πίνακα  $t^+$ . Αυτή η ιδιότητα είναι πολύ σημαντική επειδή μας επιτρέπει να γενικεύσουμε την πρόσθεση επιφανειών σύμφωνα με τη μέθοδο του πίνακα σκέδασης της ενότητας 1.3, αντικαθιστώντας τους συντελεστές με τους αντίστοιχους πίνακες. Παρατηρούμε, βέβαια, ότι απαιτείται και η γνώση των πινάκων  $r^-$  και  $t^-$  για πρόσπτωση από τα δεξιά, ενώ οι πράξεις της ενότητας 2.1 αφορούν πρόσπτωση από τ' αριστερά. Ευτυχώς, η πρόσπτωση από τα δεξιά μπορεί αντιστρέφοντας τον χώρο να αναχθεί σε πρόσπτωση από τ' αριστερά. Οι ακόλουθες μόνο αλλαγές πρέπει να διενεργηθούν στην εξ. (2.9)

$$V_1 \leftrightarrow V_2, \quad (2.26\alpha')$$

$$a_1 \rightarrow -a_2, \quad (2.26\beta')$$

$$a_2 \rightarrow -a_1, \quad (2.26\gamma')$$

$$\xi \rightarrow -\xi. \quad (2.26\delta')$$

Μπορούμε λοιπόν να ορίσουμε ένα  $2(2N_c + 1) \times 2(2N_c + 1)$  πίνακα σκέδασης

$$Q = \begin{pmatrix} t^+ & r^- \\ r^+ & t^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q^I & Q^{II} \\ Q^{III} & Q^{IV} \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Αν έχουμε δύο διεπιφάνειες με πίνακες σκέδασης  $Q_{1 \rightarrow 2}$  και  $Q_{2 \rightarrow 3}$  ανάμεσα σε τρεις περιοχές δυναμικού, με τα κέντρα ανάπτυξης στην ενδιάμεση περιοχή να ταυτίζονται, τότε για όλη τη δομή

$$Q_{1 \rightarrow 3}^I = Q_{2 \rightarrow 3}^I (1 - Q_{1 \rightarrow 2}^{II} Q_{2 \rightarrow 3}^{III})^{-1} Q_{1 \rightarrow 2}^I, \quad (2.28\alpha')$$

$$Q_{1 \rightarrow 3}^{II} = Q_{2 \rightarrow 3}^{II} + Q_{2 \rightarrow 3}^I (1 - Q_{1 \rightarrow 2}^{II} Q_{2 \rightarrow 3}^{III})^{-1} Q_{1 \rightarrow 2}^{II} Q_{2 \rightarrow 3}^{IV}, \quad (2.28\beta')$$

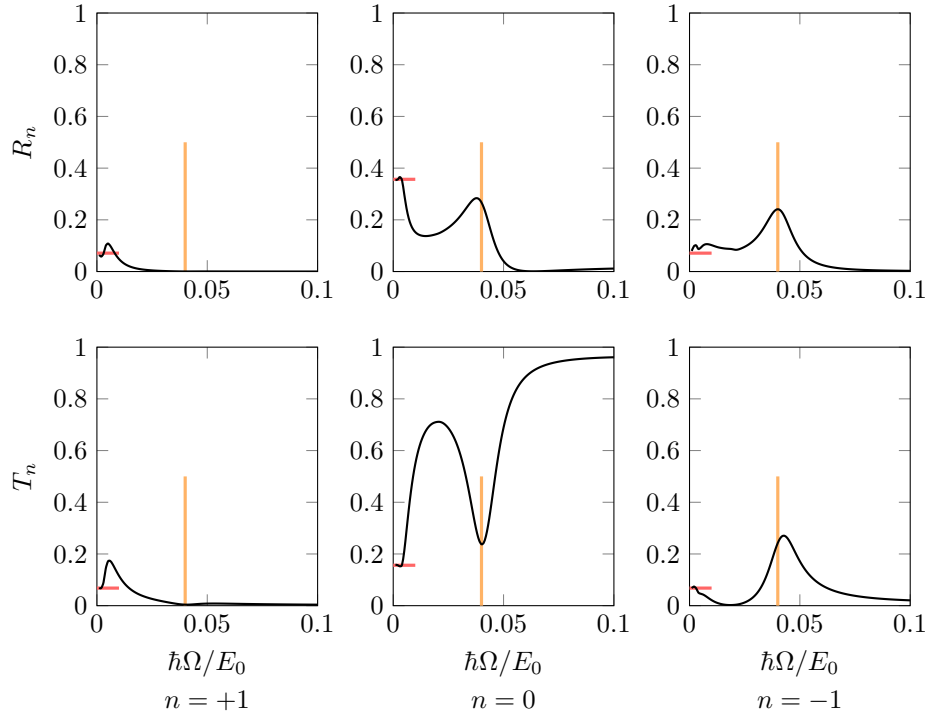
$$Q_{1 \rightarrow 3}^{III} = Q_{1 \rightarrow 2}^{III} + Q_{1 \rightarrow 2}^{IV} (1 - Q_{2 \rightarrow 3}^{III} Q_{1 \rightarrow 2}^{II})^{-1} Q_{2 \rightarrow 3}^{III} Q_{1 \rightarrow 2}^I, \quad (2.28\gamma')$$

$$Q_{1 \rightarrow 3}^{IV} = Q_{1 \rightarrow 2}^{IV} (1 - Q_{2 \rightarrow 3}^{III} Q_{1 \rightarrow 2}^{II})^{-1} Q_{2 \rightarrow 3}^{IV}. \quad (2.28\delta')$$

Επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία, μπορούμε να πάρουμε τον πίνακα σκέδασης της πολυστρωματικής δομής υπό εξέταση.

Αυτό ακριβώς έγινε για τη δομή με τις δύο ισοδύναμες ατέλειες, χρησιμοποιώντας το λογισμικό Matlab. Τα αποτελέσματα για ενδεικτικές τιμές φαίνονται στο Σχήμα 2.4. Προφανώς, όταν έχουμε υπολογίσει τον ολικό πίνακα σκέδασης της δομής, μας ενδιαφέρουν μόνο οι συντελεστές με  $p = 0$ , καθώς εξετάζουμε την πρόσπτωση ενός σωματιδίου με συγκεκριμένη ενέργεια ( $E = 1.809 E_0$ ). Κατά συνέπεια, οι άνω δείκτες  $p = 0$  θα παραλείπονται, όπως στην προηγούμενη ενότητα.

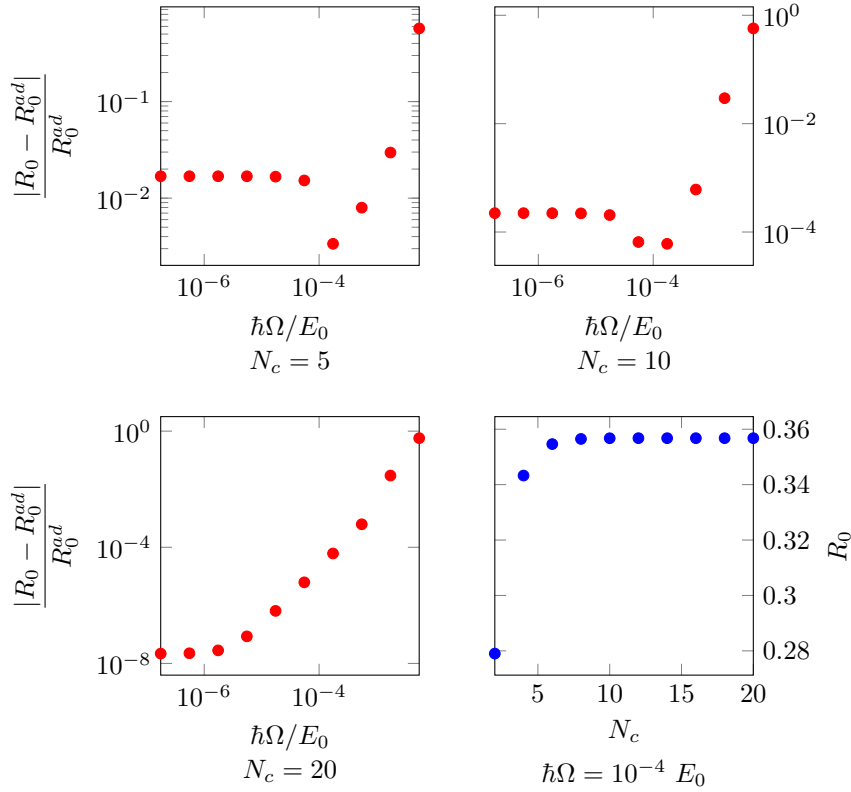
Υπενθυμίζεται ότι η συγκεκριμένη δομή έχει δύο καταστάσεις συντονισμού  $E_{down} = 1.809 E_0$  και  $E_{up} = 1.849 E_0$  μέσα στο ενεργειακό χάσμα. Αν στείλουμε ένα σωματίδιο με ενέργεια ίση με  $1.809 E_0$ , αναμένουμε μόνο τα κύματα τα οποία δεν έχουν ανταλλάξει ενέργεια να περάσουν από τη δομή, καθώς μόνο αυτά δε πέφτουν στο ενεργειακό χάσμα. Ωστόσο, αν η ενέργεια των χβάντων ισούται με την ενεργειακή διαφορά των σταθμών, παρουσιάζεται ένα δεύτερο ενδεχόμενο: το σωματίδιο να απορροφήσει ένα χβάντο και να μεταπηδήσει στην άνω κατάσταση συντονισμού, η οποία επίσης μπορεί να διέλθει σχεδόν ανεμπόδιστα από τη δομή. Επομένως, περιμένουμε, όταν  $\sigma = \hbar\Omega/E_0 = 0.040$ , να εμφανιστούν κύματα με



Σχήμα 2.4: Συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης για προσπίπτον σωματίδιο με ενέργεια ίση με την κάτω κατάσταση συντονισμού  $E = 1.809 E_0$  στη δομή με δύο ίδιες ατέλειες. Η διεπιφάνεια  $V_2 \rightarrow V_{imp}^{(2)}$  της δεύτερης ατέλειας (βλ. Σχήμα 2.6, δεύτερη διεπιφάνεια) ταλαντώνεται με πλάτος  $\xi = 0.05$  α και η υπόλοιπη δομή είναι ακίνητη. Δεδομένων των αποτελεσμάτων του Σχήματος 2.3, επιλέχθηκε  $N_c = 5$ . Για  $n = 0$ , έχουμε κύμα ίδιας ενέργειας με αυτήν του προσπίπτοντος σωματιδίου, για  $n = -1$  έχουμε απορρόφηση ενός κβάντου και για  $n = +1$  έχουμε εκπομπή ενός κβάντου. Βλέπουμε ότι, όταν η ενέργεια των κβάντων είναι κοντά στην διαφορά ενέργειας  $\Delta E = 0.040 E_0$  μεταξύ των δύο καταστάσεων ατελειών, είναι αρκετά πιθανό το σωματίο να ανακλασθεί ή να διέλθει έχοντας απορροφήσει ένα κβάντο. Αυτή η διαφορά ενέργειας σημαίνεται στα διαγράμματα με πορτοκαλί χρώμα. Με κόκκινο φαίνονται τα αποτελέσματα της αδιαβατικής προσέγγισης, στα οποία βλέπουμε ότι συγκλίνουν οι  $R$  και  $T$  όταν  $\Omega \rightarrow 0$ .

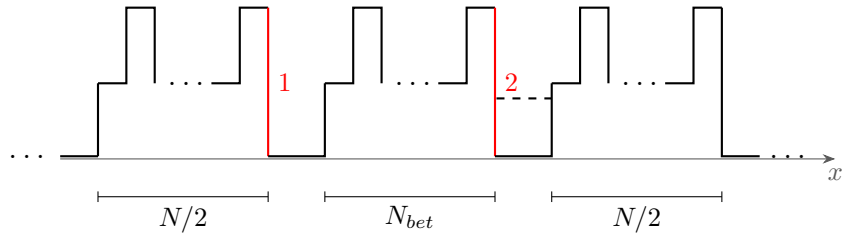
$n = -1$  τα οποία θα έχουν απορροφήσει ένα κβάντο. Αυτό επιβεβαιώνεται από το Σχήμα 2.4 όπου τα φαινόμενα ανταλλαγής ενέργειας διακρίνονται ξεκάθαρα στους  $R_{-1}$  και  $T_{-1}$ , αλλά και στον  $R_0$ . Για τα υπόλοιπα  $n$ , οι συντελεστές είναι σχεδόν παντού 0, οπότε δεν απεικονίζονται.

Οι κόκκινες γραμμές δείχνουν τα αποτελέσματα της αδιαβατικής προσέγγισης. Το γεγονός ότι σε χαμηλές συχνότητες όλοι οι  $R$  και  $T$  συγκλίνουν σε αυτά αποτελεί μία καλή επαλήθευση και της αδιαβατικής και της πλήρους δυναμικής προσέγγισης. Στο Σχήμα 2.5 αναπαρίσταται σε λογαριθμικούς άξονες το σχετικό σφάλμα μεταξύ των δύο μεθόδων για χαμηλές συχνότητες ( $\sigma \leq 10^{-2}$ ). Πριν σχολιάσουμε περαιτέρω τα διαγράμματα, πρέπει να επισημάνουμε ότι η περιοχή των χαμηλών συχνοτήτων παρουσιάζει ενδιαφέρον και για ένα ακόμη λόγο: επειδή (όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.4) τα φαινόμενα πολλαπλής σκέδασης είναι ισχυρότερα, το  $N_c$  πρέπει να είναι μεγαλύτερο απ' ότι συνήθως για να μπορέσει να



Σχήμα 2.5: Πάνω αριστερά, πάνω δεξιά και κάτω αριστερά: Σχετικό σφάλμα μεταξύ δυναμικής και αδιαβατικής προσέγγισης για χαμηλές συχνότητες και για τρία διαφορετικά  $N_c$ . Το φυσικό σύστημα το οποίο εξετάζουμε φαίνεται στο Σχήμα 2.6 και είναι ακριβώς το ίδιο με αυτό του Σχήματος 2.4. Κάτω δεξιά: Σύγκλιση του  $R_0$  ως προς το  $N_c$  για  $\sigma = 10^{-4}$ .

συμπεριλάβει όλους τους μη μηδενικούς συντελεστές. Συνεπώς, αν το  $N_c$  αρκεί για να περιγράψει την περιοχή χαμηλών συχνοτήτων, τότε αρκεί για να περιγράψει όλο το εύρος του  $\sigma$ . Έχουμε λοιπόν μία ευκαιρία να εξετάσουμε τη σύγκλιση των αποτελεσμάτων ως προς το  $N_c$ . Όπως μπορούμε να δούμε, η απόκλιση μεταξύ των δύο μεθόδων μειώνεται με τη συχνότητα ταλάτωσης μέχρι να φθάσει σε μία σταθερή τιμή, η οποία οφείλεται στο υπολογιστικό σφάλμα λόγω της αποκοπής των άπειρων σειρών στο  $N_c$ . Ωστόσο, αυτή η σταθερή τιμή είναι της τάξης του 1% μόλις για  $N_c = 5$  και πέφτει πολύ γρήγορα -εκθετικά- καθώς το  $N_c$  αυξάνεται. Στο Σχήμα 2.5 μπορούμε επίσης να δούμε τη σταθεροποίηση του  $R_0$  σε μία σταθερή τιμή καθώς το  $N_c$  πλησιάζει το 10. Εν τέλει, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι, παρά τις υπάρχουσες αποκλίσεις, η σύγκλιση της πλήρους δυναμικής προσέγγισης είναι πολύ καλή ακόμη και για σχετικά χαμηλά  $N_c$ , όπως  $N_c = 10$  ή ακόμη  $N_c = 5$ , ειδικά όταν, όπως εδώ, ενδιαφερόμαστε για τον ποιοτικό σχολιασμό των φαινομένων. Ταυτόχρονα, διαπιστώνουμε για άλλη μία φορά την ισχύ της αδιαβατικής προσέγγισης σε χαμηλές συχνότητες.



Σχήμα 2.6: Σχέδιο της δομής με δύο ατέλειες την οποία μελετάμε στις ενότητες 2.3 και 2.4. Με κόκκινο φαίνονται οι ταλαντούμενες διεπιφάνειες. Η συνεχής γραμμή δείχνει τη δομή με τις δύο ίδιες ατέλειες, ενώ η διακεκομμένη μαύρη γραμμή δείχνει τη διαφοροποίηση στη δεύτερη ατέλεια της δομής με τις δύο διαφορετικές ατέλειες.

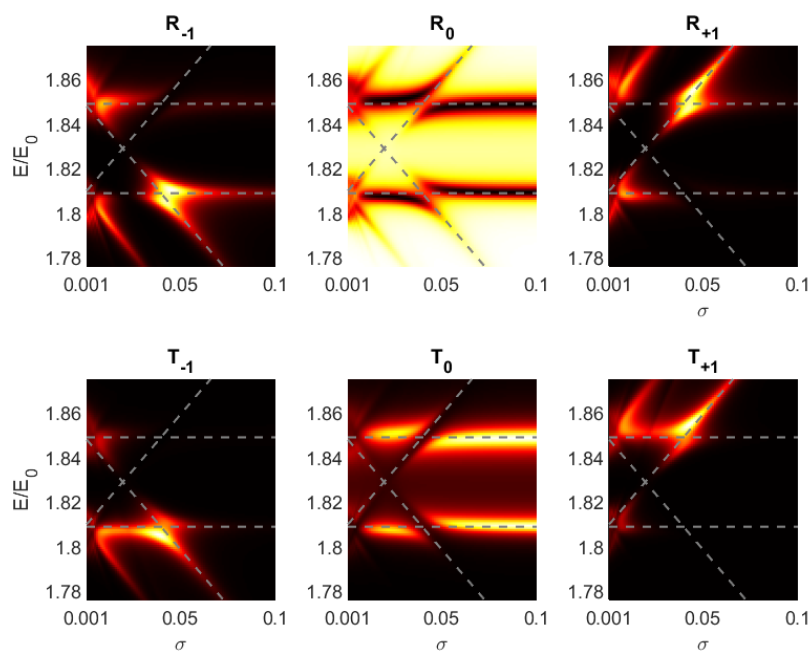
## 2.4 Επίδραση της διαφοράς φάσης μεταξύ της κίνησης των διεπιφανειών

Η πληροφορία την οποία μπορούμε να αντλήσουμε από διαγράμματα τα οποία περιγράφουν τη σκέδαση ενός σωματιδίου με μία μόνο ενέργεια πρόσπτωσης είναι περιορισμένη. Αν θέλουμε να σχηματίσουμε μία καλύτερη εικόνα για την επίδραση της ταλάντωσης στη διαδικασία σκέδασης, πρέπει να καταφύγουμε σε διδιάστατα χρωματικά διαγράμματα. Σε αυτά, ο ένας άξονας (εδώ ο οριζόντιος) αναπαριστά το  $\sigma = \hbar\Omega/E_0$  και ο άλλος την ενέργεια του προσπίπτοντος σωματιδίου, ενώ μία χρωματική κλίμακα χρησιμοποιείται για να απεικονιστούν οι τιμές των  $R_n$  και  $T_n$  σε κάθε σημείο. Τα χρωματικά διαγράμματα θα μας επιτρέψουν να μελετήσουμε καλύτερα τη σκέδαση αν έχουμε δύο ταλαντούμενες διεπιφάνειες: τη  $V_2 \rightarrow V_{imp}^{(1)}$  της πρώτης ατέλειας -την οποία θα αποκαλούμε πρώτη διεπιφάνεια- και τη  $V_2 \rightarrow V_{imp}^{(2)}$  της δεύτερης ατέλειας -την οποία θα αποκαλούμε δεύτερη διεπιφάνεια (βλ. Σχήμα 2.6). Συγκεκριμένα, αυτό το οποίο προκαλεί ελαφρά έκπληξη είναι η έντονη εξάρτηση της συμπεριφοράς των συντελεστών από τη διαφορά φάσης με την οποία ταλαντώνονται οι δύο διεπιφάνειες.

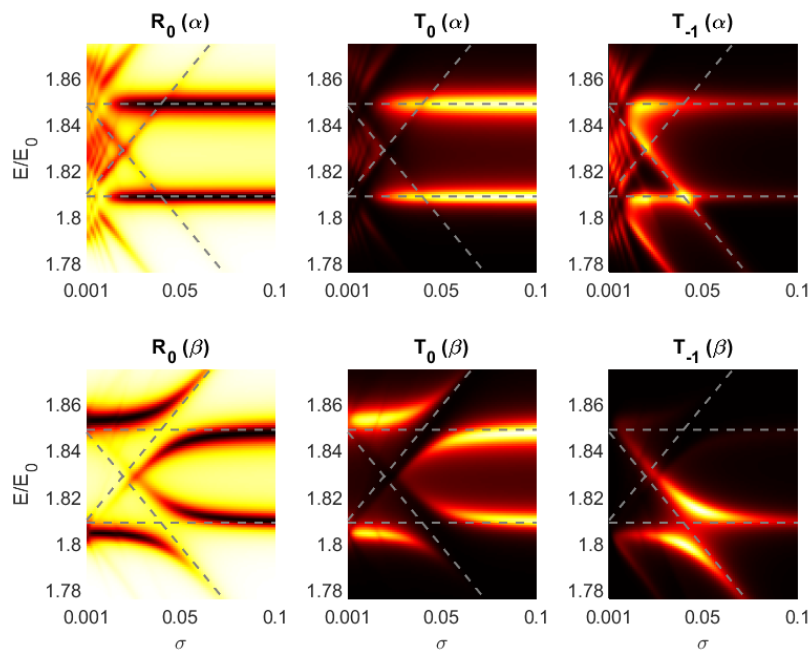
Στα Σχήματα 2.7-2.8 βλέπουμε τους  $R$  και  $T$  για  $n = -1, 0, 1$  για τις δύο ίδιες ατέλειες και  $\xi = 0.07 \alpha$ . Πρέπει να είναι ξεκάθαρο ότι η χρωματική κλίμακα είναι διαφορετική σε κάθε διάγραμμα και ότι, κατά συνέπεια, τα σχήματα έχουν ποιοτικό χαρακτήρα. Για λόγους συντομίας, δεν παρουσιάζονται αποτελέσματα από την ταλάντωση της δεύτερης μόνο διεπιφάνειας διότι, εν προκειμένω, δεν διαφέρουν ουσιαστικά από τα αποτελέσματα της ταλάντωσης της πρώτης διεπιφάνειας.

Ας θεωρήσουμε τις δύο οριζόντιες ευθείες  $E = E_{down} = 1.809 E_0$ ,  $E = E_{up} = 1.849 E_0$  και τις δύο λοξές ευθείες  $E = E_{down} + \hbar\Omega$ ,  $E = E_{up} - \hbar\Omega$ . Οι τομές των οριζόντιων με τις λοξές ευθείες είναι τα σημεία όπου αναμένουμε να έχουμε έντονη ανταλλαγή ενέργειας κι αύξηση των  $R_{\pm 1}$ ,  $T_{\pm 1}$ . Μακριά από αυτά τα σημεία, έχουμε μία συμπεριφορά η οποία θυμίζει το χρονοανεξάρτητο πρόβλημα, καθώς έχουμε διέλευση μόνο στις δύο ενέργειες συντονισμού. Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

- Για  $\hbar\Omega \rightarrow \Delta E = 0.040 E_0$ , έχουμε μία πιο ανώμαλη συμπεριφορά και εν γένει έχουμε φαινόμενα ανταλλαγής ενέργειας. Ωστόσο, η μεγιστοποίηση των  $R_{\pm 1}$ ,  $T_{\pm 1}$  δεν επέρχεται ακριβώς στα σημεία τομής, διότι οι οριζόντιες «λωρίδες διελυσσιμότητας» οι οποίες έρχονται από μεγάλες και από μικρές συχνότητες φαίνεται να απωθούνται. Αυτή η κατάσταση φέρνει στο μυα-



Σχήμα 2.7:  $V_{imp}^{(1)} = V_{imp}^{(2)} = 0$  - Συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης για ταλάντωση μόνο της πρώτης διεπιφάνειας (βλ. Σχήμα 2.6).



Σχήμα 2.8:  $V_{imp}^{(1)} = V_{imp}^{(2)} = 0$  - Συντελεστές ανάκλασης και διέλευσης για ταλάντωση και των δύο διεπιφανειών με (α) μηδενική διαφορά φάσης και (β) διαφορά φάσης  $\pi$ .

λό την αποφυγή διασταύρωσης όπως συναντάται και στη χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger. Στην περίπτωση που η χρονοανεξάρτητη Χαμιλτονιανή εξαρτάται από μία παράμετρο  $\lambda$ , οι ιδιοτιμές ενέργειας οι οποίες προκύπτουν εξαρτώνται κι αυτές από την παράμετρο. Αν δοκιμάσουμε να απεικονίσουμε την εξέλιξη των ιδιοτιμών καθώς μεταβάλλεται η  $\lambda$ , υπάρχει η πιθανότητα οι γραφικές παραστάσεις δύο ιδιοτιμών να τείνουν να τμηθούν. Τότε, αν το στοιχείο πίνακα της Χαμιλτονιανής ανάμεσα στις εν λόγω κυματοσυναρτήσεις είναι μη μηδενικό ([16]-Κεφάλαιο IV), οι ιδιοτιμές «απωθούνται» κι ο εκφυλισμός αποφεύγεται. Εν τέλει, προσπερνώντας το επίμαχο σημείο, οι ιδιοτιμές ανταλλάσσουν συμπεριφορά. Αντιστοιχίζοντας από μία κυματοσυναρτηση στις οριζόντιες και στις λοξές ευθείες, η ομοιότητα γίνεται προφανής. Μάλιστα, για μεγαλύτερα  $\xi$  είναι δυνατό να παρατηρηθεί αποφυγή διασταύρωσης ανάμεσα στις οριζόντιες ευθείες και τις ευθείες  $E = E_{down/up} \pm 2\hbar\Omega^1$ . Το ενδιαφέρον είναι ότι το φαινόμενο γίνεται πιο έκδηλο όταν οι διεπιφάνειες ταλαντώνονται με την ίδια φάση αλλά εξαφανίζεται όταν ταλαντώνονται με αντίθετη φάση.

- Για μικρά  $\sigma$ , η κάθε οριζόντια λωρίδα δίνει τη θέση της σε ένα πιο περίεργο «ακτινωτό» σχήμα. Η κάθε ακτίνα αντιστοιχεί σε μία ευθεία  $E = E_{down/up} + n\hbar\Omega$ . Πλησιάζοντας στο κέντρο σύγκλισης των ακτίνων, οι ευθείες λωρίδες ατονούν και, όπως εύκολα διαπιστώνει κανείς, το κέντρο μπορεί να περιγραφεί μέσω της αδιαβατικής προσέγγισης. Όμως, σε αντίθεση με πριν, όταν οι δύο διεπιφάνειες ταλαντώνονται συμφασικά, το ακτινωτό σχήμα φαίνεται πιο έντονο απ' ό,τι όταν ταλαντώνεται η μία διεπιφάνεια, ενώ όταν οι δύο διεπιφάνειες ταλαντώνονται με αντίθετη φάση, εξαφανίζεται πλήρως.

Τα παραπάνω αφορούν μία δομή στην οποία οι κυματοσυναρτήσεις συντονισμού είναι εντοπισμένες και στις δύο ατέλειες. Αν έχουμε δύο διαφορετικές ατέλειες, οι καταστάσεις συντονισμού είναι, όπως είδαμε στην ενότητα 1.7, εντοπισμένες η κάθε μία σε διαφορετική ατέλεια. Αυτό συνεπάγεται κάποιες διαφορές στα αντίστοιχα χρωματικά διαγράμματα οι οποίες μας επιτρέπουν να αποκτήσουμε μία καλύτερη κατανόηση.

Στο Σχήμα 2.9 βλέπουμε τον  $R_0$  για τις δύο διαφορετικές ατέλειες και  $\xi = 0.07$  α. Βλέπουμε ότι:

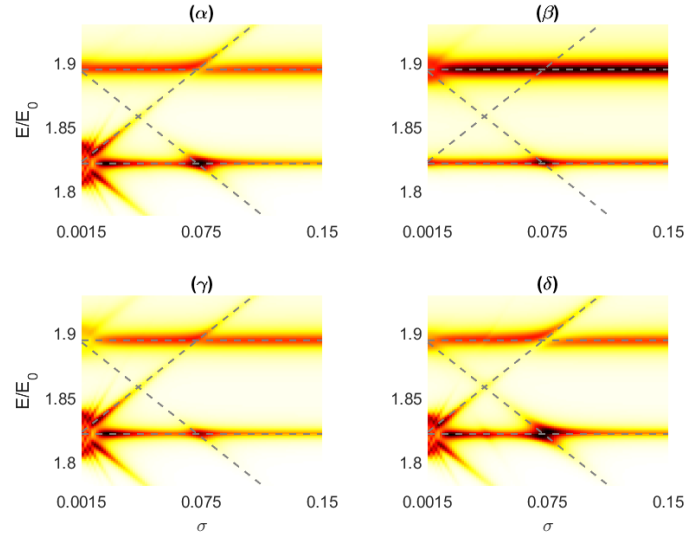
- Εδώ, έχει σημασία το ποια από τις δύο διεπιφάνειες ταλαντώνεται. Το ακτινωτό σχήμα εμφανίζεται μόνο στη λωρίδα της κατάστασης η οποία είναι εντοπισμένη στην ατέλεια της οποίας το όριο ταλαντώνεται.
- Η μεταβολή την οποία επάγει η αλλαγή της φάσης είναι πολύ μικρότερη.

Για να εξηγήσουμε παραπάνω, θα χρειαστεί να χρησιμοποιήσουμε τον φορμαλισμό Floquet, περιγραφή του οποίου μπορεί να βρεθεί στο [12]. Εκεί, βέβαια, η ανάλυση αναφέρεται σε διακριτό φάσμα, ωστόσο το κριτήριο με το οποίο ξεχωρίζουμε τις λωρίδες στα διαγράμματα μας, δηλαδή το μην έχουμε  $R_0 \simeq 1$ , δρα, τουλάχιστον μέσα στο ενεργειακό χάσμα, ως μία συνοριακή συνθήκη η οποία επιφέρει μία «ψευδοκβάντωση».

Συνοπτικά, οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger για το δικό μας μονοδιάστατο πρόβλημα είναι

$$\psi_\alpha(x, t) = e^{-i\omega_\alpha t} \phi_\alpha(x, t), \quad (2.29)$$

<sup>1</sup> Δεν παρατίθενται διαγράμματα για λόγους συντομίας.



Σχήμα 2.9:  $V_{imp}^{(1)} = 0$  και  $V_{imp}^{(2)} = 0.4 E_0$  - Συντελεστές ανάκλασης  $R_0$  για (α) ταλάντωση μόνο της πρώτης διεπιφάνειας, (β) ταλάντωση μόνο της δεύτερης διεπιφάνειας, (γ) ταλάντωση και των δύο διεπιφανειών με ίδια φάση και (δ) ταλάντωση και των δύο διεπιφανειών με αντίθετη φάση.

όπου  $\hbar\omega_\alpha = \epsilon_\alpha$  η αποκαλούμενη ψευδοενέργεια της κατάστασης και  $\phi_\alpha(x, t)$  μία συνάρτηση περιοδική ως προς τον χρόνο. Μπορούμε να ξαναγράψουμε την παραπάνω εξίσωση ως

$$\psi_\alpha(x, t) = e^{-i\omega_\alpha t - in\Omega t} e^{in\Omega t} \phi_\alpha(x, t) = e^{-i\omega_\alpha^n t} \phi_\alpha^n(x, t), \quad (2.30)$$

όπου  $\epsilon_\alpha^n = \hbar\omega_\alpha = \epsilon_\alpha + n\hbar\Omega$  και η  $\phi_\alpha^n(x, t) = e^{in\Omega t} \phi_\alpha(x, t)$  είναι πάλι μία συνάρτηση περιοδική ως προς τον χρόνο. Άρα, η ψευδοενέργεια είναι ορισμένη μόνο μέσα σε μία ζώνη Brillouin στο χώρο των  $\omega$ . Μπορούμε να θεωρήσουμε ότι ο δείκτης  $\alpha$  απαριθμεί τις ψευδοενέργειες  $\epsilon_\alpha^0$  μέσα στην επιλεγθείσα ζώνη Brillouin, ή μπορούμε να αντιστοιχίσουμε τις  $\epsilon_\alpha^0$  με τις ιδιοτιμές της χρονοανεξάρτητης Χαμιλτονιανής με τέτοιο τρόπο ώστε στο όριο που η χρονικά περιοδική διαταραχή σβήνει να ανακτούμε τις ιδιοτιμές (και τις κυματοσυναρτήσεις) του χρονοανεξάρτητου προβλήματος. Στην προκειμένη περίπτωση θα κάνουμε το δεύτερο, συνδέοντας τις με τις καταστάσεις συντονισμού  $\phi_1(x)$  (κάτω) και  $\phi_2(x)$  (άνω).

Αν  $H(x, t)$  η Χαμιλτονιανή του συστήματος, τότε

$$\left[ H(x, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \phi_\alpha^n(x, t) = \epsilon_\alpha^n \phi_\alpha^n(x, t). \quad (2.31)$$

Ορίζοντας τον νέο τελεστή  $\tilde{H}(x, t) = H(x, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ , παίρνουμε μία εξίσωση φορμαλιστικά ίδια με τη χρονοανεξάρτητη εξίσωση Schrödinger για τις  $\phi_\alpha^n(x, t)$ . Ορίζοντας το εσωτερικό γινόμενο

$$(f, g) = \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx f^*(x, t) g(x, t), \quad (2.32)$$

μπορεί ναδειχθεί ότι ο  $\tilde{H}(x, t)$  είναι ερμιτιανός και ότι, ως επακόλουθο, οι  $\phi_\alpha^n(x, t)$  αποτελούν μία πλήρη ορθογώνια βάση στον χώρο των περιοδικών ως προς τον χρόνο συναρτήσεων. Από τα παραπάνω, προκύπτει ότι η θεωρία για την αποφυγή διασταύρωσης μπορεί να μεταφερθεί αυτούσια στις  $\phi_\alpha^n(x, t)$ , υποδεικνύοντας ότι, για να έχουμε αλληλεπίδραση μεταξύ δύο καταστάσεων, πρέπει το  $(\phi_\alpha^m, \tilde{H}\phi_\alpha^n)$  να είναι μη μηδενικό.

Ας εφαρμόσουμε τα προηγούμενα για το δικό μας σύστημα. Για τους δείκτες  $\alpha$  έχουμε δύο επιλογές: *up* και *down*. Στις οριζόντιες ευθείες αντιστοιχούν οι συναρτήσεις  $\phi_{up/down}^0$  και στις λοξές οι  $\phi_{up/down}^{\pm 1}$ . Για να εκτιμήσουμε το στοιχείο πίνακα μεταξύ τους, παρατηρούμε ότι, στο όριο που το χρονοεξαρτώμενο μέρος του δυναμικού σβήνει, δηλαδή όταν  $\xi \rightarrow 0$ , ισχύει

$$\phi_{up}^0(x, t) \rightarrow \phi_2(x), \quad (2.33\alpha')$$

$$\phi_{up}^{-1}(x, t) \rightarrow e^{-i\Omega t}\phi_2(x), \quad (2.33\beta')$$

$$\phi_{down}^0(x, t) \rightarrow \phi_1(x), \quad (2.33\gamma')$$

$$\phi_{down}^{+1}(x, t) \rightarrow e^{+i\Omega t}\phi_1(x). \quad (2.33\delta')$$

Χωρίζοντας τη Χαμιλτονιανή  $H(x, t)$  σε δύο κομμάτια, την  $H_0(x)$  της στατικής δομής της ενότητας 1.7 και του δυναμικού «διαταραχής»  $V_{per}(x, t)$ , βρίσκουμε τελικά ότι

$$A = (\phi_{up}^0, \tilde{H}\phi_{down}^{+1}) = (\phi_{up}^{-1}, \tilde{H}\phi_{down}^0) = \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{+i\Omega t} \phi_2^* V_{per} \phi_1, \quad (2.34)$$

εφόσον οι  $\phi_1, \phi_2$  είναι ορθογώνιες ιδιοκαταστάσεις της  $H_0(x)$ .

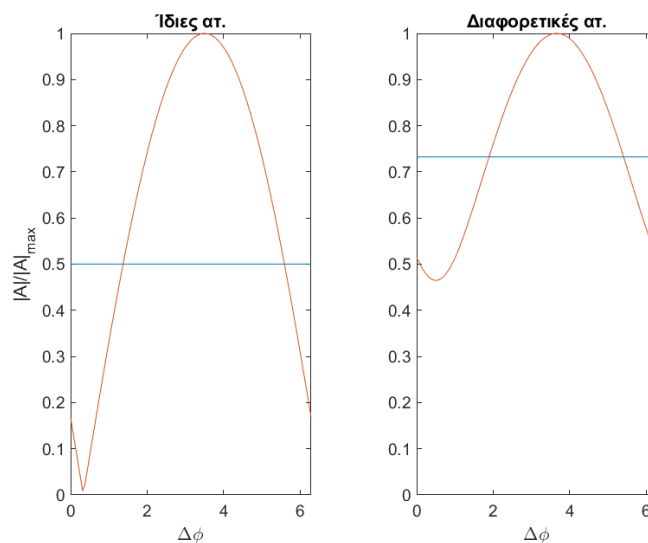
Στο Σχήμα 2.10 απεικονίζεται το μέτρο του  $A = A(\phi)$  συναρτήσεως της διαφοράς φάσης όταν έχουμε και τις δύο διεπιφάνειες να ταλαντώνονται. Για σύγκριση, απεικονίζονται ως οριζόντιες γραμμές τα αντίστοιχα μέτρα για την ταλάντωση της πρώτης μόνο διεπιφάνειας. Στην περίπτωση των ίδιων ατελειών, είναι εμφανές ότι η εμφάνιση ισχυρής αποφυγής διασταύρωσης συμπίπτει με τις περιοχές μεγάλου  $|A|$ . Επίσης, βλέπουμε ότι όταν έχουμε διαφορετικές ατέλειες, η διακύμανση του  $|A|$  είναι μικρότερη, κάτι το οποίο εξηγεί την πολύ μικρότερη εξάρτηση από τη διαφορά φάσης.

Τέλος, αναφορικά με το «ακτινωτό» μοτίβο, είναι λογικό να σκεφτούμε ότι προκύπτει από την αλληλεπίδραση ανάμεσα στα μέλη της οικογένειας των  $\phi_{up}^n$  (και αντίστοιχα των  $\phi_{down}^n$ ) για κάθε  $n$ . Έχουμε, λοιπόν, για κάθε οριζόντια λωρίδα, μία οικογένεια ολοκληρωμάτων:

$$\tilde{A}_{1,2}^n = \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{in\Omega t} V_{per} |\phi_{1,2}|^2. \quad (2.35)$$

Για αυτά τα ολοκληρώματα μπορούμε να βγάλουμε συμπεράσματα και χωρίς αναλυτικούς υπολογισμούς. Πρώτον, όταν έχουμε τις πανομοιότυπες ατέλειες, κάθε μία διεπιφάνεια έχει περίπου την ίδια συνεισφορά στο ολοκλήρωμα λόγω της, στο περίπου, ισοκατανομής των κυματοσυναρτήσεων στις δύο ατέλειες. Είναι εύκολο να καταλάβει κάποιος ότι, όταν οι διεπιφάνειες ταλαντώνονται με ίδια φάση, οι δύο συνεισφορές έχουν το ίδιο πρόσημο και αθροίζονται ενισχυτικά, ενώ όταν ταλαντώνονται με αντίθετη φάση, αθροίζονται αποσβεστικά. Κατά συνέπεια, η ύπαρξη του ακτινωτού σχήματος είναι ισοδύναμη με την ενισχυτική άθροιση των συνεισφορών στο στοιχείο πίνακα. Αντίθετα, στις δύο διαφορετικές ατέλειες, κάθε





Σχήμα 2.10: Εξάρτηση του μέτρου του στοιχείου πίνακα  $A$  (κανονικοποιημένο ως προς τη μέγιστη τιμή) του δυναμικού διαταραχής από τη διαφορά φάσης στην ταλάντωση των δύο διεπιφανειών. Για σύγκριση, με μπλε φαίνεται το μέτρο του  $A$  όταν έχουμε την ταλάντωση της πρώτης μόνο διεπιφάνειας.

κατάσταση είναι συνδεδεμένη με μία από τις δύο ατέλειες, η διεπιφάνεια της οποίας πρέπει να ταλαντώνεται για να έχουμε σημαντική συνεισφορά στο  $|\dot{A}|$ .

Συνοψίζοντας, βλέπουμε ότι το «γενικευμένο» στοιχείο πίνακα μεταξύ δύο κυματοσυναρτήσεων Floquet, έστω στο όριο του στατικού προβλήματος, παρέχει έναν αξιόπιστο τρόπο για να προβλέψουμε την αλληλεπίδραση μεταξύ τους στην περίπτωση πιθανού εκφυλισμού.

## 2.5 Συμπεράσματα-Προοπτικές

Εν κατακλείδι, είδαμε το πώς η εισαγωγή μίας απλής χρονικής εξάρτησης σε ένα σχετικά συνηθισμένο πρόβλημα σχεδίασης επηρεάζει δραστικά το φυσικό πρόβλημα το οποίο αντιμετωπίζουμε. Η εισαγωγή της χρονικής εξάρτησης σημαίνει ότι πλέον η ενέργεια δεν είναι μία διατηρούμενη ποσότητα κι ότι επομένως το σχεδιαζόμενο σωματίδιο μπορεί να μετρηθεί στην άλλη μεριά της δομής με διαφορετική ενέργεια.

Δεν πρέπει να υποτιμούμε καθόλου την χρησιμότητα μίας ικανού μεγέθους πολυστρωματικής δομής στην εμφάνιση ισχυρής ενεργειακής μετάβασης. Σε πρώτη φάση, η πολυστρωματική δομή με ατέλειες μας δίνει απομονωμένες καταστάσεις συντονισμού μέσα στο ενεργειακό χάσμα. Χωρίς αυτήν την απομόνωση, η αλληλεπίδραση μεταξύ των διαφόρων καταστάσεων Floquet με έναν ικανό συντελεστή διέλευσης θα ήταν χαοτική. Σε δεύτερη φάση, η δομή ενισχύει με εκθετικό τρόπο (αν θυμηθούμε τις ιδιοτιμές του πίνακα μεταφοράς) τα φαινόμενα μετάβασης ενέργειας, των οποίων η ισχύς, αν αναλογιστούμε τη σχεδίαση από ταλαντούμενο σκαλοπάτι, δε θα έπρεπε να ήταν τόσο μεγάλη από την ταλάντωση και μόνο των διεπιφανειών.

Είναι αρκετά πιθανό αυτές οι μεταβάσεις να μπορούν να παρατηρηθούν πειρα-

ματικά σε κάποια μεσοσκοπική διάταξη. Ωστόσο, είναι δύσκολο να υλοποιήσουμε κάποια διάταξη στην οποία η ταλάντωση να περιορίζεται σε ένα μικρό αριθμό διεπιφανειών. Ένα πιο ρεαλιστικό μοντέλο θα ήταν η ταλάντωση όλων των διεπιφανειών, σαν να είχαμε τη διάδοση ενός ηχητικού κύματος μέσα στη δομή. Παρ' όλα αυτά, είναι λογικό τα βασικά αποτελέσματα αυτής της εργασίας να συνεχίσουν να ισχύουν και σε αυτό το μοντέλο, καθώς η συγκέντρωση των κυματοσυναρτήσεων στις ατέλειες και η μεγαλύτερη μεταβολή στο δυναμικό δίνουν στις δύο κόκκινες διεπιφάνειες του Σχήματος 2.6 μία ξεχωριστή θέση στο σύστημα μας.

# Βιβλιογραφία

- [1] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering 3 (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [2] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Mesoscopic Physics and Nanotechnology 1 (Oxford University Press, New York, Oxford, 1997), pp. 3–11.
- [3] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, “Quantized Conductance of Point Contacts in a Two-dimensional Electron Gas”, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848–850 (1988).
- [4] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, “One-dimensional Transport and the Quantisation of the Ballistic Resistance”, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **21**, L209–L214 (1988).
- [5] R. A. Webb, S. Washburn, C. P. Umbach, and R. B. Laibowitz, “Observation of  $\frac{h}{e}$  Aharonov-Bohm Oscillations in Normal-Metal Rings”, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2696–2699 (1985).
- [6] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, “Generalized Many-Channel Conductance Formula with Application to Small Rings”, *Phys. Rev. B* **31**, 6207–6215 (1985).
- [7] M. Büttiker, “Four-Terminal Phase-Coherent Conductance”, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761–1764 (1986).
- [8] Y. Gefen, Y. Imry, and M. Y. Azbel, “Quantum Oscillations and the Aharonov-Bohm Effect for Parallel Resistors”, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 129–132 (1984).
- [9] R. Landauer, “Conductance from Transmission: Common Sense Points”, *Phys. Scr.* **T42**, 110–114 (1992).
- [10] M. V. Moskalets, *Scattering Matrix Approach to Non-Stationary Quantum Transport* (Imperial College Press, 2012).
- [11] J. Felber, R. Gähler, C. Rausch, and R. Golub, “Matter Waves at a Vibrating Surface: Transition from Quantum-mechanical to Classical Behavior”, *Phys. Rev. A* **53**, 319–328 (1996).
- [12] M. Grifoni and P. Hänggi, “Driven Quantum Tunneling”, *Phys. Rep.* **304**, 229–354 (1998).

- [13] Σ. Κανταρέλης, *Ακουστικά Κύματα σε Χωροχρονικά Μεταβαλλόμενα Μέσα* (Εθνικόν και Καποδιστριακόν Πανεπιστήμιον Αθηνών, Τμήμα Φυσικής, 2020).
- [14] J. C. Slater, “Interaction of Waves in Crystals”, *Rev. Mod. Phys.* **30**, 197–222 (1958).
- [15] N. Stefanou, V. Yannopoulos, and A. Modinos, “Heterostructures of Photonic Crystals: Frequency Bands and Transmission Coefficients”, *Computer Phys. Commun.* **113**, 49–77 (1998).
- [16] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics, Volume 1: Basic Concepts, Tools and Applications* (Wiley-VCH, 1977).
- [17] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 10th printing, with corrections (United States Department of Commerce, National Bureau of Standards, Washington, 1972).
- [18] G. Iadonisi, G. Cantele, and M. L. Chiofalo, *Introduction to Solid State Physics and Crystalline Nanostructures*, UNITEXT for Physics (Springer, Milano, 2014).
- [19] A. A. Cuyt, V. Petersen, B. Verdonk, H. Waadeland, and W. B. Jones, *Handbook of Continued Fractions for Special Functions* (Springer, Dordrecht, 2008).