

Εξαναγκασμένες ταλαντώσεις μορίων

Θα εξετάσουμε τώρα τη συμπεριφορά ενός συστήματος του οποίου οι μικρές κινήσεις διεγείρονται από χρονοεξαρτώμενα εξωτερικά αίτια και θεωρήσουμε αρχικά ότι η εξωτερική διέγερση είναι μία αρμονική συνάρτηση του χρόνου. Το παράδειγμα αυτό έχει εξαιρετική φυσική σημασία¹. Αν προσπέσει σε ένα υλικό ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία το παλώμενο ηλεκτρικό πεδίο $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$ ασκεί αρμονική δύναμη $-e\vec{E}$ στα ηλεκτρόνια του ατόμου και τα εξαναγκάζει σε ταλάντωση. Θα αναρωτηθείτε τι σχέση έχουν οι ταλαντώσεις στο πρόβλημα της κίνησης των ηλεκτρονίων. Αν έχετε τη Νευτώνεια πλανητική εικόνα για τη κίνηση των ηλεκτρονίων γύρω από τον πυρήνα θα πιστεύατε ότι είναι φυσικότερο να μελετήσετε τη επίπτωση που έχει μία διαταρακτική αρμονική δύναμη στη ελλειπτική κίνηση των ηλεκτρονίων στο κεντρικό δυναμικό της δύναμης Coulomb που ασκείται από τον πυρήνα στα ηλεκτρόνια. Αλλά γνωρίζουμε σήμερα ότι η εικόνα αυτή δεν είναι η κατάλληλη. Η κβαντομηχανική περιγραφή δείχνει ότι όταν τα ηλεκτρόνια αλληλεπιδρούν με το φως, τα ηλεκτρόνια συμπεριφέρονται σαν να ήταν συνδεδεμένα με απλά ελατήρια με τον πυρήνα. Η μελέτη αυτή της ταλάντωσης αποτελεί τη βάση για την εξήγηση του δείκτη διάθλασης του φωτός στα υλικά, της απορρόφησης της ακτινοβολίας και τη δημιουργία φασματικών γραμμών, καθώς και της σκέδασης του φωτός, που είναι μεταξύ των άλλων η αιτία για το μπλέ χρώμα του ουρανού και για το χρώμα του ουρανού κατά τη δύση του ηλίου. Όλα αυτά τα φαινόμενα έχουν ως βάση τους τις εξαναγκασμένες ταλαντώσεις. Εμείς εδώ θα μελετήσουμε το παράδειγμα εξαναγκασμένων ταλαντώσεων πολωμένων μορίων.

Είναι καταπληκτικό ότι ένα καθαρά κβαντικό φαινόμενο όπως αυτό της αλληλεπίδρασης ενός ατόμου ή μορίου με το φως μπορεί να δεχθεί ακριδή ανάλυση με τις μεθόδους της κλασσικής μηχανικής. Όταν το σύστημα βρίσκεται σε μία ενεργειακή στάθμη και το φωτίσουμε διαταράσσεται και αποκτά μία ταλαντούμενη διπολική ροπή. Στη κβαντική μηχανική ενώ δεν μπορούμε να γνωρίσουμε την ακριδή διπολική ροπή του συστήματος, γνωρίζουμε τη μέση διπολική ροπή πολλών πανομοιοτύπων συστημάτων. Στην ουσία μόνο αυτή η πληροφορία μας είναι χρήσιμη, διότι όταν φωτίζουμε ένα υλικό δεν φωτίζουμε μόνο ένα μόριο του υλικού αλλά πληθώρα πανομοιοτύπων μορίων, και αυτό που έχει φυσική σημασία είναι η μέση συμπεριφορά όλων των μορίων. Η μέση συμπεριφορά των μορίων όμως μπορεί να περιγραφεί με τις μεθόδους της κλασσικής μηχανικής². Επιπλέον, όπως ήδη είπαμε, η επίλυση του κβαντομηχανικού προβλήματος δείχνει ότι η συμπεριφορά του μορίου στην αλληλεπίδραση στο φως είναι η ίδια με την εξέλιξη ενός εξαναγκασμένου αρμονικού ταλαντωτή. Θεωρούμε λοιπόν ένα πολωμένο διατομικό μόριο, σαν το μόριο του αζώτου, του οξυγόνου ή του υδρογόνου, το οποίο μελετούμε ως δύο άτομα, μάζας m , που αλληλεπιδρούν με ελαστικές δυνάμεις, σαν να υπήρχε ένα ελατήριο σταθεράς k που συνέδεε τα άτομα. Η σταθερά k δεν μας είναι γνωστή και διαφέρει από μόριο σε μόριο, αλλά αλλά θα δούμε πως μπορούμε να την υπολογίσουμε. Το μόριο είναι πολωμένο

¹ Αξίζει να διαβάσετε τα εξαιρετικά Κεφάλαια 31 και 32 του πρώτου τόμου των *Feynman Lectures on Physics*.

² Αυτό πηγάζει από το θεώρημα του Ehrenfest για συστήματα που περιγράφονται με Χαμιλτονιανές τετραγωνικής μορφής, όπως αυτή του ελευθέρου σωματιδίου ή του αρμονικού ταλαντωτή, κ.λ.π..

και το ένα άτομο έχει θετικό φορτίο q ενώ το άλλο φορτίο $-q$. Θα απλουστεύσουμε τη παρουσίαση θεωρώντας ότι το μόριο είναι εμφυτευμένο σε κάποιο κρυσταλλικό πλέγμα και εκτελεί μόνο μονοδιάστατες κινήσεις κατά την ευθεία που ενώνει τα δύο άτομα, χωρίς να μπορεί να στραφεί. Υπο αυτές τις προϋποθέσεις η δυναμική κατάσταση του μορίου περιγράφεται από τη μετατόπιση του πρώτου ατόμου από το σημείο ισορροπίας, x_1 , και από τη μετατόπιση του δεύτερου ατόμου, x_2 , δηλαδή η κατάσταση του μορίου προσδιορίζεται από την $x = [x_1, x_2]^T$. Μικρές κινήσεις του μορίου διέπονται από τη δυναμική εξίσωση:

$$\mathbf{M}\ddot{x} + \mathbf{K}x = 0, \quad (1)$$

όπου ο πίνακας το μαζών είναι $\mathbf{M} = m\mathbf{I}$, όπου $\mathbf{I}$ ο μοναδιαίος πίνακας στις δύο διαστάσεις και όπως εύκολα μπορείτε να διαπιστώσετε ο πίνακας της δυναμικής ενέργειας είναι

$$\mathbf{K} = k \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Οι χαρακτηριστικές συχνότητες ταλάντωσης είναι:

$$\omega_1 = 0 \quad \text{και} \quad \omega_2 = \sqrt{\frac{2k}{m}}. \quad (3)$$

Η πρώτη αναφέρεται στη εύθυγραμμη ισοταχή κίνηση του κέντρου μάζας του συστήματος ενώ η δεύτερη στη αναμενόμενη ταλάντωση της σχετικής απόστασης των ατόμων. Ο αντίστοιχος πίνακας των χαρακτηριστικών τρόπων ταλάντωσης είναι:

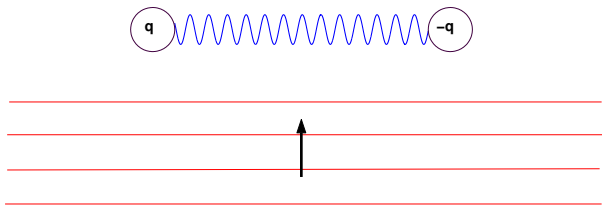
$$\mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Έχοντας προσδιορίσει τις χαρακτηριστικές συχνότητες και χαρακτηριστικούς τρόπους ταλάντωσης μπορούμε με σαφήνεια να αναλύσουμε τη διέγερση του μορίου όταν προσπέσει ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα. Επειδή το μόριο έχει τόσο μικρές διαστάσεις μπορεί να θεωρήσουμε ότι το ηλεκτρομαγνητικό κύμα που προσπίπτει είναι επίπεδο στη άμεση περιοχή του μορίου. Αναλύουμε πρώτα τη περίπτωση κύματος με ισοφασικά επίπεδα παράλληλα στην ευθεία που ορίζουν τα άτομα του μορίου (βλ. Σχήμα 1). Το ηλεκτρικό πεδίο κείται επι του ισοφασικού επιπέδου και το λαμβάνουμε παράλληλο στην ευθεία που ενώνει τα άτομα και είναι της μορφής $E = E_0 e^{i(l y - \omega t)}$, όπου y η διεύθυνση κατά τη μετάδοση του κύματος (το βέλος στο σχήμα), ω η συχνότητα του κύματος και l ο κυματαριθμός του κύματος. Το μαγνητικό πεδίο του κύματος είναι κάθετο στο επίπεδο του σχήματος. Η εξίσωση κίνησης του μορίου είναι:

$$\mathbf{M}\ddot{x} + \mathbf{K}x = F(t), \quad (5)$$

$$F(t) = qE_0 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-i\omega t}, \quad (6)$$

όπου έχουμε λάβει ότι $y = 0$ στο επίπεδο του μορίου (αλλιώς πολλαπλασιάζεται η λύση με μία σταθερά). Παρατηρείστε ότι έχουμε αμελήσει στη δύναμη που ασκείται στα μόρια τη δύναμη από το μαγνητικό πεδίο του κύματος επειδή θεωρούμε ότι οι ταχύτητες



Σχήμα 1: Επίπεδα ηλεκτρομαγνητικό κύμα με ισοφασικά επίπεδα παράλληλα στην ευθεία που ενώνει τα άτομα ενός πολωμένου μορίου ασκεί δυνάμεις στα άτομα του μορίου. Το ηλεκτρικό πεδίο είναι παράλληλο στις ισοφασικές γραμμές του σχήματος ενώ το μαγνητικό πεδίο κάθετο στο επίπεδο του σχήματος. Η δύναμη που ασκείται στα άτομα είναι κατά την ευθεία της κίνησης. Υποθέτουμε ότι οι ταχύτητες που αναπτύσσονται είναι πολύ μικρότερες από τη ταχύτητα του φωτός και μπορεί να αμελήσουμε τη δύναμη που ασκείται από το μαγνητικό πεδίο στα άτομα.

των ατόμων είναι πολύ μικρότερη από τη ταχύτητα του φωτός: $\dot{x} \ll c = \omega/l$. Περαιτέρω υπό αυτή την έννοια είναι λογικό να περιγράψουμε τη κίνηση με μη σχετικιστικές εξισώσεις. Η επίπτωση του ηλεκτρομαγνητικού κύματος φαίνεται καθαρά αν γράψουμε το πρόβλημα στις χαρακτηριστικές συντεταγμένες, Q , που δίδονται συναρτήσει των αρχικών συντεταγμένων από τη σχέση: $x = \mathbf{A}Q$. Επειδή $\mathbf{A}^T \mathbf{M} \mathbf{A} = \mathbf{I}$ και $\mathbf{A}^T \mathbf{K} \mathbf{A} = \Omega^2$, όπου Ω^2 ο διαγώνιος πίνακας των αντιστοιχών με τις κολώνες του πίνακα $\mathbf{A}$ χαρακτηριστικές συχνότητες:

$$\Omega^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \omega_2^2 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

πολλαπλασιάζοντας την (5) από αριστερά με τον πίνακα $\mathbf{A}^T$ έχουμε:

$$\ddot{Q} + \Omega^2 Q = \mathbf{A}^T F(t), \quad (8)$$

η οποία αμέσως προσδιορίζει τις ανεξάρτητες εξαναγκασμένες κινήσεις των δύο χαρακτηριστικών τρόπων ταλάντωσης. Οι συντεταγμένες της εξωτερικής διέγερσης στις χαρακτηριστικές συντεταγμένες είναι $\mathbf{A}^T F$ (όταν ο πίνακας $\mathbf{A}^T$ δρά σε ένα άνυσμα το άνυσμα που προκύπτει είναι οι συντεταγμένες του ανύσματος στις χαρακτηριστικές συντεταγμένες). Στη προκειμένη περίπτωση

$$\mathbf{A}^T F = \frac{qE_0}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-i\omega t} = \frac{2qE_0}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\omega t}. \quad (9)$$

Παρατηρείτε ότι όταν το κύμα προσπίπτει με αυτό το τρόπο διεγείρει μόνο τη δεύτερη χαρακτηριστική συντεταγμένη. Αυτό βεβαίως είναι προφανές διότι η συνολική δύναμη που ασκείται στο μόριο είναι μηδενική και συνεπώς το κέντρο μάζας του συστήματος δεν αλλάζει κίνηση, και διεγείρεται μόνο η ταλαντωτική κίνηση. Οπότε η απόκριση του συστήματος (αμελώντας την ελεύθερη ταλάντωση) είναι:

$$Q_1 = 0, Q_2 = \frac{qE_0}{\sqrt{m}} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_2^2 - \omega^2}, \quad (10)$$

ή στις αρχικές συντεταγμένες:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \end{pmatrix} = \frac{qE_0}{m} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_2^2 - \omega^2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

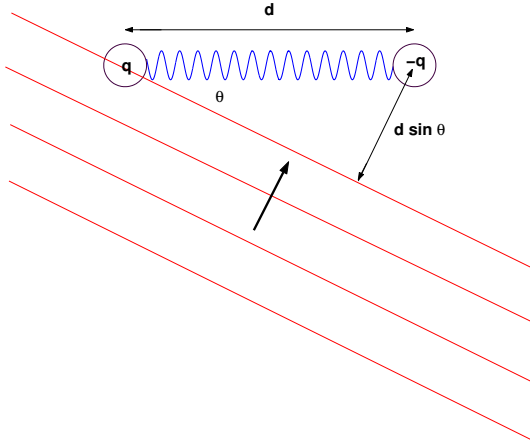
και η φυσική λύση είναι το πραγματικό μέρος.

Ας θεωρήσουμε τώρα ότι το ηλεκτρομαγνητικό κύμα προσπίπτει υπό γωνία όπως στο Σχήμα 2. Σε αυτή τη περίπτωση το ηλεκτρικό πεδίο έχει διαφορετική φάση στο ένα άτομο από το άλλο. Η διαφορά φάσης είναι ίση με $\delta = ld \sin \theta$, και η δύναμη που ασκείται στα άτομα στις αρχικές συντεταγμένες είναι:

$$F(t) = qE_0 \cos \theta \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\delta} \end{pmatrix} e^{-i\omega t}. \quad (12)$$

Στις χαρακτηριστικές συντεταγμένες η δύναμη έχει συντεταγμένες

$$\mathbf{A}^T F = \frac{qE_0 \cos \theta}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\delta} \end{pmatrix} e^{-i\omega t} = \frac{2qE_0 \cos \theta e^{i\delta/2}}{\sqrt{m}} \begin{pmatrix} -i \sin(\delta/2) \\ \cos(\delta/2) \end{pmatrix} e^{-i\omega t}. \quad (13)$$



Σχήμα 2: Επίπεδο ηλεκτρομαγνητικό κύμα με ισοφασικές γραμμές υπο γωνία θ στην ευθεία που ενώνει τα άτομα ενός πολωμένου μορίου.

Οπότε η εξαναγκασμένη απόκριση του συστήματος, αμελώντας και πάλι την ελεύθερη κίνηση, είναι:

$$Q_1 = \frac{2iqE_0 \cos \theta e^{i\delta/2} \sin(\delta/2)}{\sqrt{m}} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega^2} , \quad (14)$$

$$Q_2 = \frac{2qE_0 \cos \theta e^{i\delta/2} \cos(\delta/2)}{\sqrt{m}} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega_2^2 - \omega^2} , \quad (15)$$

$$x_1 = \frac{Q_1 + Q_2}{\sqrt{m}} , \quad x_2 = \frac{Q_1 - Q_2}{\sqrt{m}} \quad (16)$$