ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΕΚΕΦΕ «ΔΗΜΟΚΡΙΤΟΣ»

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΝΑΝΟΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ

ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΚΑΙ ΣΩΜΑΤΙΔΙΑΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών

«Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές»

Ενίσχυση της κβαντικής συμβολής σε τρισταθμικούς κβαντικούς εκπομπούς υπό την επίδραση διμερών μικροσωματιδίων από διχαλκογενίδια βισμουθίου

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

του Νικόλαου Κυβέλου

Επιβλέπων:

Βασίλειος Γιαννόπαπας

Αθήνα, Μάρτιος, 2022

Περίληψη

Αντικείμενο της παρούσας εργασίας είναι η ενίσχυση του βαθμού της κβαντικής συμβολής τρισταθμικού κβαντικού εκπομπού, τοποθετημένου ανάμεσα σε διμερές σύστημα μικροσωματιδίων διχαλκογενιδίων βισμουθίου (Bi_2Te_3, Bi_2Se_3) μέσω του ανισοτροπικού φαινομένου Purcell. Αρχικά, διατυπώνεται το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο των εξεταζομένων φαινομένων και αναφέρεται η υπολογιστική μέθοδος που αξιοποιήθηκε μέσω του λογισμικού Comsol multyphysics. Έπειτα, παρατίθενται οι παράγοντες Purcell με τα αντίστοιχα αποτελέσματα της ενίσχυσης του βαθμού της κβαντικής συμβολής και η δυναμική πληθυσμού για συγκεκριμένους βαθμούς κβαντικής συμβολής. Τέλος, αναφέρονται τα συμπεράσματα της παρούσας εργασίας.

Abstract

The object of the present master thesis is to enhance the degree of quantum interference of a V-type quantum emitter, placed between bipartite system of bismuth microparticles (Bi_2Te_3, Bi_2Se_3) via the anisotropic Purcell effect. First, the necessary theoretical background of the examined phenomena is formulated and the computational method used through the software Comsol multyphysics is mentioned. Next, the Purcell factors are listed with the corresponding results of the degree of quantum interference enhancement and the population dynamics for specific degrees of quantum interference. Finally, the conclusions of the present work are reported.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα της μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας μου, τον κ. Βασίλειο Γιαννόπαπα, για τη διδασκαλία και την καθοδήγησή του καθόλη την διάρκεια του διατμηματικού προγράμματος μεταπτυχιακών σπουδών "Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές" και για την άμεση ανταπόκρισή του κάθε φορά που χρειάστηκα την βοήθειά του σε ερευνητικό αλλά και σε προσωπικό επίπεδο. Η μεταδοτικότητά του και οι γνώσεις του ήταν καθοριστικές για την διεκπεραίωση της μεταπτυχιακής διπλωματικής εργασίας και οι συμβουλές του ήταν πολύτιμες για την επιστημονική μου εξέλιξη. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον κ. Εμμανουήλ Πασπαλάκη για τις σημαντικές παρατηρήσεις του, για την ενθάρρυνσή του στα ζητήματα της εργασίας και για τη συμμετοχή του στην τριμελή εξεταστική επιτροπή. Ακόμα, ευχαριστώ πολύ τον κ. Γεώργιο Τσιγαρίδα, μέλος της τριμελούς εξεταστικής επιτροπής, για την υποστήριξή του και για την συνεργασία του σε υπολογιστικά ζητήματα κατά την εκπόνηση της παρούσας εργασίας.

Τέλος, επιθυμώ να δηλώσω την ευγνωμοσύνη μου στους γονείς μου και τα αδέρφια μου για τη συμπαράστασή τους και που πίστεψαν σε μένα.

Από τότε που κουράστηκα να ψάχνω, έμαθα να βρίσκω. Κι από τότε που ο άνεμος μου εναντιώθηκε, έμαθα να σαλπάρω με όλους τους ανέμους. - Friedrich Nietzsche

Περιεχόμενα

1 Εισαγωγή

Τα τελευταία χρόνια λαμβάνει χώρα η λεγόμενη δεύτερη κβαντική επανάσταση. Από τους πρώτους που πρότειναν την ιδέα να εκμεταλλευτούμε την υπολογιστική ισχύ που διαχειρίζεται η ίδια η φύση και που υποστήριξε πως κβαντικά συστήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε υπολογιστικές διαδικασίες ήταν ο Richard Feynman [1], δίνοντας το έναυσμα για τη προσπάθεια δημιουργίας κβαντικών υπολογιστών. Η αιτία των παραπάνω σκέψεων ήταν η παρατήρηση ότι ενώ ο Νόμος του Moore δήλωνε πως κάθε δύο χρόνια θα διπλασιάζεται ο αριθμός των τρανζίστορ ενός πυκνού ολοκληρωμένου κυκλώματος, κάποια στιγμή η τεχνολογία θα κατέληγε να επεξεργάζεται σημεία διαστάσεων λίγων ατόμων σε τσιπ πυριτίου και τότε θα ερχόταν αντιμέτωπη με την αρχή της απροσδιοριστίας και γενικότερα με κβαντικά φαινόμενα. Η κβαντική υπολογιστική και η κβαντική πληροφορία βρίσκεται σε ραγδαία πρόοδο και αναζητούνται τεχνολογικές κατασκευές που θα μπορούν να φιλοξενήσουν τους φορείς-σωματίδια της πληροφορίας, θα διατηρείται ο εναγκαλισμός (quantum entanglement) [5, 6] μεταξύ τους και θα παρέχουν προστασία από τη κβαντική αποσυμφωνία, δηλαδή την καταστροφή μιας κβαντικής κατάσταση που προκαλείται από τους θορύβους του περιβάλλοντος. Σε έναν συμβατικό ψηφιακό υπολογιστή, στοιχειώδης μονάδα πληροφορίας είναι το bit, ενώ σε έναν κβαντικό υπολογιστή το qubit. Πέρα από τη ταχύτερη επεξεργασία πληροφοριών, ο στόχος της δημιουργίας κβαντικών υπολογιστών είναι η περιβόητη κβαντική υπεροχή, δηλαδή η επίτευξη σκοπών που οι κλασσικοί υπολογιστές είναι αδύνατον να πετύχουν όσος χρόνος και αν διατίθεται.

Για επικοινωνία μακρινών αποστάσεων το σήμα εξασθενεί λόγω των θορύβων στο κανάλι επικοινωνίας και για το λόγο αυτό χρησιμοποιούνται επανεκπομποί για ενίσχυση του σήματος στην ενδιάμεση απόσταση μεταξύ πομπού και δέκτη. Εντούτοις, στα κανάλια κβαντικής επικοινωνίας το θεώρημα μη κλονοποίησης φαίνεται να απαγορεύει την μετάδοση κβαντικής πληροφορίας, αλλά είναι εφικτό να πραγματοποιηθούν κβαντικοί επανεκπομποί, όπως στην κλασσική επικοινωνία, μέσω ισχυρής αλληλεπίδρασης ύλης - φωτός. Κλασσικά η διαχείριση των bit γίνεται μέσω ηλεκτρομαγνητικών (ΗΜ) κυμάτων, αλλά σε φωτονικά ολοκληρωμένα κυκλώματα ο έλεγχος της κβαντικής πληροφορίας απαιτεί διαχείριση μεμονομένων φωτονίων, τα οποία επιδιώκεται να αποτελέσουν τα κβαντικά bit(qubit). Ο έλεγχος της αλληλεπίδρασης ύλης-φωτός είναι δυνατόν να οδηγήσει σε συσκευές που θα συνδυάζουν ηλεκτρονικά και φωτονικά κυκλώματα και η ισχυρή σύζευξη (strong coupling) υπόσχεται καινοτομίες για υλοποίηση κβαντικών επικοινωνιών και δημιουργία κβαντικού ίντερνετ.

Ο έλεγχος της αυθόρμητης εκπομπής ενός κβαντικού εκπομπού είναι υψίστης σημασίας για την ανάπτυξη κβαντικών τεχνολογιών. Ένας κβαντικός εκπομπός μπορεί να είναι ένα άτομο, ένα μόριο ή μία κβαντική τέλεια και είναι ένα σύστημα με διακριτά επίπεδα ενέργειας. Η αυθόρμητη εκπομπή συμβαίνει ακόμα και όταν ο κβαντικός εκπομπός είναι στο κενό, δηλαδή δεν αλληλεπιδρά με κάποιο άλλο σύστημα. Αυτό το φαινόμενο δεν συμβαδίζει με την κλασική φυσική, καθώς ο κβαντικός εκπομπός θα έπρεπε να βρίσκεται για πάντα στην διεγερμένη κατάσταση και να μην μεταπίπτει στην θεμελιώδη κατάστασή του εκπέμποντας φωτόνια. Η αυθόρμητη εκπομπή συμβαίνει λόγω της σύζευξης του κβαντικού εκπομπού με το κβαντισμένο ΗΜ πεδίο στο κενό, το οποίο μέσω των διακυμάνσεων του προκαλεί αποδιέγερση του κβαντικού εκπομπού. Το 1917 ο Einstein ανέπτυξε τη θεωρία του για την ακτινοβολία στην οποία υποστήριζε ότι η ανταλλαγή ενέργειας μεταξύ ύλης και φωτός συμβαίνει με τρεις διαδικασίες, την αυθόρμητη εκπομπή, την εξαναγκασμένη εκπομπή και την απορρόφηση. Ωστόσο η αυθόρμητη εκπομπή δεν γινόταν να περιγραφτεί με κλασικούς όρους. Η κλασσική ηλεκροδυναμική περιγράφει την αλληλεπίδραση φορτισμένων σωματιδίων και του ΗΜ πεδίου, αλλά η ανακάλυψη ότι το φως αποτελείται από κβάντα ενέργειας, τα λεγόμενα φωτόνια, οδήγησε στην ανάγκη κβάντωσης του ΗΜ πεδίου για την θεμελίωση της αυθόρμητης εκπομπής. Η κβαντική ηλεκτροδυναμική (QED) είναι η πιο πετυχημένη θεωρία αλληλεπίδρασης ύλης φωτός και θεμελιώθηκε από τους Paul Dirac, J.Schwinger, S.Tomonaga, R.Feynman, F.Dyson και P.Ward. Σκοπός της QED ήταν να ενσωματωθούν οι αρχές της κβαντικής θεωρίας και της σχετικότητας με τον ηλεκτρομαγνητισμό σε μια ενιαία θεωρία αλληλεπίδρασης φωτός-ύλης. Η QED αποτελεί βάση για τις κβαντικές θεωρίες πεδίου, καθώς αντιμετωπίζει τις ΗΜ δυνάμεις ως αποτέλεσμα ανταλλαγής εικονικών φωτονίων, τα οποία πηγάζουν από διαταραχές των ΗΜ πεδίων στο χώρο και δεν είναι ανιχνεύσιμα.

Η φωτονική είναι ο κλάδος ο οποίος μελέτα σχεδιάζει και εφαρμόζει αλληλεπιδράσεις φωτός-ύλης, ώστε να δημιουργηθούν οπτικές συσκευές. Η νανοφωτονική έχει ως στόχο να εφαρμοστούν τα παραπάνω στην νανοκλίμακα και πραγματεύεται αλληλεπιδράσεις κλασικών πηγών φωτός με νανοσυστήματα, όπου οι πηγές εμπεριέχουν πολλά φωτόνια και είναι δυνατόν να αντιμετωπιστούν μέσω κλασικής οπτικής. Η μελέτη αλληλεπιδράσεων μεμονωμένων φωτονίων με κβαντικά συστήματα απαιτεί τη χρήση της κβαντικής οπτικής ώστε να μελετηθεί η οπτική απόκριση και ο έλεγχος της παγιδευμένης, ενισχυμένης ΗΜ ακτινοβολίας σε δομημένο φωτονικό περιβάλλον διαφόρων γεωμετριών και υλικών. Η σύζευξη της κβαντικής οπτικής με την νανοφωτονική έχει ως απόρροια πολλά νέα εντυπωσιακά φαινόμενα με εφαρμογή στην οπτικοηλεκτρονική, στις τηλεπικοινωνίες, στα φωτοβολταικά, σε βιοϊατρικές τεχνολογίες και σε διαδικασίες κβαντικής πληροφορικής.

Ο έλεγχος αλληλεπίδρασης ύλης-φωτός γέννησε την κβαντική ηλεκτροδυναμική κοιλότητας (cavity QED), όπου χρησιμοποιούνται κοιλότητες με δομημένο φωτονικό περιβάλλον για την ενίσχυση των διαθέσιμων φωτονικών καταστάσεων και τον έλεγχο της αποδιέγερσης των ατόμων. Η επαναλαμβανόμενη σκέδαση των παγιδευμένων φωτονίων μέσα στην κοιλότητα έχει ως αποτέλεσμα την αλληλεπίδραση των κβαντικών συστημάτων (κβαντικών εκπομπών) και των διαθέσιμων ΗΜ καταστάσεων.

Τα πλεονεκτήματα της αξιοποίησης των φωτονίων ως qubits έγκειται στο γεγονός πως διατηρούν για περισσότερη χρονική διάρκεια και για μακρινές αποστάσεις την κβαντική κατάστασή τους, σε σχέση με τα υπεραγώγιμα qubits, τα οποία απαιτούν επιπλέον, θερμοκρασίες κοντά στα απόλυτο μηδέν. Ακόμα, μέσω των φωτονίων πραγματοποιούνται πιο γρήγορα διαδικασίες κβαντικής πληροφορίας λόγω του ότι έχουν τη μέγιστη ταχύτητα που υπάρχει, την ταχύτητα του φωτός. Εντούτοις, σε φωτονικά κυκλώματα τα μειονεκτήματα είναι η ύπαρξη οπτικών απωλειών και το γεγονός ότι τα φωτόνια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους επειδή δεν έχουν ηλεκτρικό φορτίο και λόγω του ότι καταλαμβάνουν την ίδια κβαντική κατάσταση ως μποζόνια. Επίσης, τα φωτόνια αλληλεπιδρούν ασθενώς και με την ύλη (φερμιόνια).

Ο γενικότερος σκοπός της παρούσας εργασίας είναι να προταθούν τρόποι μείωσης των οπτικών απωλειών και ενίσχυσης της αλληλεπίδρασης φωτός-κβαντικών συστημάτων στο όριο ασθενούς σύζευξης και στο όριο ισχυρής σύζευξης. Ειδικά, σκοπός της εργασίας είναι η ενίσχυση του βαθμού της κβαντικής συμβολής τρισταθμικού κβαντικού εκπομπού, τοποθετημένου ανάμεσα σε διμερές σύστημα μικροσωματιδίων από διχαλκογενίδια βισμουθίου (Bi_2Te_3 ,Bi_2Se_3), ως συνάρτηση της συχνότητας και της απόστασης μεταξύ τους, τροποποιώντας και ελέγχοντας το ρυθμό αυθόρμητης εκπομπής μέσω του ανισοτροπικού φαινομένου Purcell. Ο έλεγχος αυτός θα μας επιτρέψει την εξέταση του φαινομένου της παγίδευσης πληθυσμού για υψηλούς βαθμούς κβαντικής συμβολής.

2 Οπτική απόκριση των υλικών μέσω κλασικής ηλεκτροδυναμικής

Απαιτείται πολύ υψηλότερος βαθμός φαντασίας για να κατανοήσεις τα ηλεκτρομαγνητικά πεδία από αυτή που απαιτείται για να κατανοήσεις αόρατους αγγέλους.-Richard Feynman

Η έρευνα οπτικών ιδιοτήτων των υλικών είναι άμεσα συνυφασμένη με την ηλεκτροδυναμική. Ωστόσο, η ηλεκτρομαγνητική θεωρία του Maxwell πέρα από την περιγραφή της διάδοσης των ηλεκτρομαγνητικών πεδίων στο χώρο, αδυνατεί να εξηγήσει φαινόμενα αλληλεπίδρασης τους με την ύλη χωρίς την χρήση στοιχείων, παραμέτρων και ιδιοτήτων της φυσικής στερεάς κατάστασης. Για παράδειγμα, η διηλεκτρική συνάρτηση ϵ, η οποία παίζει καθοριστικό ρόλο τις οπτικές ιδιότητες των υλικών, προσδιορίζεται πειραματικά ή θεωρητικά μέσω της φυσικής στερεάς κατάστασης. Παραδοσιακά αναφέρονται ως διηλεκτρικές ιδιότητες οι αποκρίσεις των υλικών σε ΗΜ κύματα στο φάσμα των χαμηλών συχνοτήτων, ενώ για συχνότητες από το υπέρυθρο φάσμα (THz) και πέρα καλούνται οπτικές ιδιότητες.

Η παρούσα εργασία έχει ως βάση την κβαντική οπτική, αλλά για υπολογισμούς σε φαινόμενα που εξηγούνται μέσω κλασικής ηλεκτροδυναμικής, αξιοποιείται η κλασσική μακροσκοπική ανάλυση της δομής των υλικών, μέσω του λογισμικού Comsol, χρησιμοποιούνται αριθμητικές μέθοδοι για την επίλυση των κλασικών ΗΜ εξισώσεων. Η μελέτη των πολαριτονικών διεργέσεων είναι ακριβής ακόμα και για σωματιδία με διαστάσεις ελάχιστων νανομέτρων, διότι η κλασσική προσέγγιση δικαιολογείται από το γεγονός ότι το φως που προσπίπτει στα νανοσωματίδια ή μικροσωματίδια, αποτελείται από πολύ μεγάλο αριθμό φωτονίων και έχει ως αποτέλεσμα να μην είναι δυνατόν οι ανιχνευτικές συσκευές να διακρίνουν ξεχωριστά τα φωτόνια. Στη συγκεκριμένη προσέγγιση δεν λαμβάνονται υπόψιν λεπτομέρειες της ατομικής κλίμακας: η οπτική απόκριση περιγράφεται ως τοπική επαγώμενη πόλωση του σωματιδίου από εξωτερικά εφαρμοζόμενα πεδία και εξαρτάται από τις διαστάσεις, τις επιφάνειες και τη γεωμετρία της νανοδομής-μικροδομής.

2.1 Κλασική ηλεκτροδυναμική

Εφόσον είναι γνωστή η μακροσκοπική διηλεκτρική απόκριση του υλικού, τότε η οπτική απόκριση του υλικού είναι εφικτό να προσδιοριστεί μέσω των μακροσκοπικών εξισώσεων Maxwell [18].

Εξισώσεις Maxwell(SI):

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \tag{2.1}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \mathbf{j}(\mathbf{r}, t). \tag{2.2}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t), \tag{2.3}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \tag{2.4}$$

όπου $\rho(\mathbf{r}, t)$ είναι η πυκνότητα φορτίου, $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$, η πυκνότητα ρεύματος, $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ το ηλεκτρικό πεδίο, $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ το μαγνητικό πεδίο, $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ η διηλεκτρική μετατόπιση και $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$, η μαγνητική επαγωγή.

Τα παραπάνω τέσσερα πεδία συνδέονται με την μαγνήτιση $\mathbf{M}$ και την πόλωση $\mathbf{P}$ ως εξής:

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P} \tag{2.5}$$

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{B}}{\mu_0} - \mathbf{M}, \tag{2.6}$$

με την ηλεκτρική διαπερατότητα και την μαγνητική διαπερατότητα του υλικού να συμβολίζονται ϵ_0 και μ_0 αντίστοιχα.

Η πόλωση δίνεται και από την σχέση

$$\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}, \tag{2.7}$$

με το χ να συμβολίζει την ηλεκτρική επιδεκτικότητα και ισχύει $\epsilon_r = \epsilon/\epsilon_0 = 1 + \chi$, όπου ϵ είναι η διηλεκτρική σταθερά.

Ωστόσο, δεν υπάρχει άμεση απόκριση του υλικού στο εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό πεδίο διότι τα υλικά έχουν πεπαρασμένο χρόνο ανταπόκρισης και ως εκ τούτου θα υπάρχει εξάρτηση από τη συχνότητα στα μεγέθη ϵ, σ, χ. Επομένως, για την διηλεκτρική μετατόπιση θα ισχύει

$$\mathbf{D}(\omega) = \epsilon(\omega) \mathbf{E}(\omega). \tag{2.8}$$

Η διηλεκτρική συνάρτηση $\epsilon(\omega)$ είναι εν γένει μιγαδική και γράφεται στην εξής μορφή:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega). \tag{2.9}$$

Είναι μια ποσότητα ύψιστης σημασίας, διότι παρέχει πληροφορία για την οπτική απόκριση των υλικών και από τη συμπεριφορά της στα ευγενή μέταλλα και στα διχαλκογενίδια βισμουθίου, πηγάζουν οι ιδιαίτερες πλασμονικές και πολαριτονικές διεγέρσεις αντίστοιχα.

Αντίστοιχα, η σχέση που συνδέει το μαγνητικό πεδίο και την μαγνητική επαγωγή είναι

$$\mathbf{B} = \mu\mu_0\mathbf{H}. \tag{2.10}$$

Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με μη μαγνητικά υλικά και, ως εκ τούτου, ισχύει μ≈ 1.

Επιπλέον, ισχύει η σχέση

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E} \tag{2.11}$$

, όπου σ δηλώνει την αγωγιμότητα.

Από τις εξισώσεις Maxwell και τις (2.7), (2.10), (2.11) για μέσο χωρίς ελεύθερα φορτία και θεωρώντας αρμονικά πεδία, προκύπτουν οι παρακάτω εξισώσεις

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot (\epsilon\mathbf{E}) = 0, \tag{2.12}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0, \tag{2.13}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H} = -i\omega\epsilon\mathbf{E}, \tag{2.14}$$

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} = +i\omega\mu\mathbf{H}. \tag{2.15}$$

Για ισοτροπικό και ομοιογενές μέσο οι παραπάνω σχέσεις είναι ανεξάρτητες της θέσης και της διεύθυνσης και, αν είναι και γραμμικό το μέσο, θα είναι ανεξάρτητες των πεδίων.

Οι εξισώσεις του Maxwell για χρονικά αρμονικά και γραμμικά πεδία έχουν ως απόρροια το ακόλουθο θεώρημα Poynting, το οποίο αναπαριστά τη ροή ενέργειας ενός ηλεκτρομαγνητικού πεδίου:

$$\overline{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{n}da = -\frac{1}{2}\int_V Re(\mathbf{j}^* \cdot \mathbf{E})dV, \tag{2.16}$$

$$\overline{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\int_V Re(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*), \tag{2.17}$$

όπου $\overline{\mathbf{S}}$ η μέση χρονική τιμή του διανύσματος Poynting, $\mathbf{n}$ είναι κανονικοποιημένο διάνυσμα κάθετο στην κλειστή επιφάνεια S του χώρου V. Επομένως, η ισχύς που διέρχεται από την επιφάνεια S είναι ίση με την ισχύ που παράγεται από το ρεύμα j.

2.1.1 Διπολική προσέγγιση

Η γενική μορφή ενός κλασικού αρμονικού πεδίου με διεύθυνση κατά το μοναδιαίο διάνυσμα $\hat{\epsilon}$ μέσω της αρχής της επαλληλίας είναι

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \hat{\epsilon} E_0 e^{-i\omega t} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{\epsilon} E_0^* e^{+i\omega t} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \tag{2.18}$$

Ο ορισμός του ηλεκτρικού πεδίου μέσω μιγαδικών όρων και ο χωρισμός αυτών των όρων γίνεται για μαθηματική διευκόλυνση. Στην πραγματικότητα το ηλεκτρικό πεδίο είναι πραγματικό φυσικό μέγεθος και για αυτό λαμβάνεται υπόψιν το πραγματικό μέρος. Ωστόσο, η γνώση του μιγαδικού του μέρους χρειάζεται σε πολλές περιπτώσεις όπως θα αποδειχθεί παρακάτω. Όταν το μήκος κύματος της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας είναι πολύ μεγαλύτερο της ακτίνας του ατόμου ή του σωματιδίου, τότε το ηλεκτρικό πεδίο θεωρείται ότι είναι ομογενές στον χώρο που καταλαμβάνει το άτομο ή το σωματιδίου και ισχύει $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$, δηλαδή στο ανάπτυγμα Taylor όλοι οι όροι θεωρούνται αμελητέοι εκτός από τον πρώτο όρο. Σε αυτές τις περιπτώσεις ισχύει η διπολική προσέγγιση και τα πεδία θα είναι χωρικά ανεξάρτητα έχοντας τη μορφή:

$$\mathbf{E}(t) = \hat{\epsilon} E_0 e^{-i\omega t} + \hat{\epsilon} E_0^* e^{+i\omega t}. \tag{2.19}$$

Αξιοποιώντας τις εξισώσεις Maxwell στις εξισώσεις Hamilton στο πλαίσιο της κλασικής φυσικής προκύπτει [28] πως είναι εύλογο να θεωρηθεί ότι τα πεδία ακτινοβολίας αλληλεπιδρούν με ένα ηλεκτρικό δίπολο. Σε αυτή την περίπτωση Χαμιλτονιανή που εκφράζει την αλληλεπίδραση του ατόμου-κβαντικού συστήματος με το πεδίο θα είναι

$$H_{int} = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(t) = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t), \tag{2.20}$$

με τη διπολική ροπή να εκφράζεται ως $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$, όπου e είναι το ηλεκτρικό φορτίο ηλεκτρονίου.

Στην παρούσα εργασία για τα κβαντικά συστήματα (κβαντικοί εκπομποί) θεωρείται ότι οι διαστάσεις τους είναι πολύ μικρότερες από το μήκος κύματος των ΗΜ πεδίων, κάτι το οποίο ισχύει για τις περισσότερες περιπτώσεις αυθόρμητης εκπομπής ατόμων. Για αυτό το λόγο εφαρμόζεται η διπολική προσέγγιση κατά την οποία μοντελοποιείται ένα άτομο ή ένα μόριο ή μια κβαντική τελεία ως ένα αρμονικά ταλαντευόμενο ηλεκτρικό δίπολο. Συνεπώς, στη κλασική εικόνα αλληλεπίδρασης φωτός-ύλης υποτίθεται πως το προσπίπτον φως στο άτομο προκαλεί διπολικές ταλαντώσεις, οι οποίες πυροδοτούν επανεκπομπή ακτινοβολίας. Όταν η συχνότητα του ΗΜ κύματος-φωτός συμπίπτει με την ιδιοσυχνότητα συντονισμού του ηλεκτρικού διπόλου-ατόμου, τότε η αλληλεπίδραση φωτός-ατόμου είναι ισχυρή. Σε διαφορετική περίπτωση οι διπολικές ταλαντώσεις είναι μικρές και η αλληλεπίδραση φωτός-ατόμου είναι ασθενή.

2.1.2 Ακτινοβολία σημειακής πηγής

Τα στάσιμα φορτία δημιουργούν στατικό ΗΜ πεδίο, όμως δεν ακτινοβολούν. Η ΗΜ ακτινοβολία δεν επάγεται από στάσιμα φορτία ή ρεύματα αλλά από επιταχυνόμενα φορτία ή ρεύματα. Ένα ηλεκτρικό δίπολο αποτελεί την στοιχειώδη μονάδα ακτινοβολίας ως σημειακή πηγή και η απόκριση του φυσικού συστήματος περιγράφεται από τη συνάρτηση Green, η οποία ενσωματώνει την συνάρτηση δέλτα που απαιτείται στη λύση των ΗΜ εξισώσεων για σημειακή πηγή. Μια πηγή πεπερασμένων διαστάσεων είναι εφικτό να θεωρηθεί ότι αποτελείται από απειροστά τμήματα με συγκεκριμένο ρεύμα που περιγράφονται μέσω της συνάρτησης δέλτα.

Η διπολική ροπή εκφράζεται ως

$$\mathbf{d(t)} = q(t)d\mathbf{s}, \tag{2.21}$$

όπου q αντιστοιχεί στα φορτία και $d\mathbf{s} = \mathbf{n_s}ds$ η απειροστή απόσταση μεταξύ των φορτίων. Η χρονική μεταβολή της διπολικής ροπής θα είναι

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{d(t)} = \Big(\frac{q(t)}{\partial t}\mathbf{n_s}\Big)ds = (\mathbf{j_o}da)ds = \mathbf{j_0}dV, \tag{2.22}$$

όπου j_0 το ρεύμα που διέρχεται από την απειροστή διατομή μεταξύ των φορτίων και dV είναι ο απειροστός όγκος της πηγής. Συνεπώς, αθροίζοντας όλα τα επιμέρους ρεύματα της πηγής, η πυκνότητα ρεύματος θα είναι

$$\mathbf{j_0}(\mathbf{r}, t) = \int_V \mathbf{j_0}(\mathbf{r}', t)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')dV', \tag{2.23}$$

Από την σχέση (2.22) προκύπτει η πυκνότητα ρεύματος για ηλεκτρικό δίπολο στο σημείο $\mathbf{r_0}$:

$$\mathbf{j_0}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t}\mathbf{d(t)}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_0}). \tag{2.24}$$

Τέλος, θεωρώντας τις χρονικά αρμονικές λύσεις $\mathbf{j_0}(\mathbf{r}, t) = Re[\mathbf{j_0}(\mathbf{r})e^{-i\omega t}]$,$\mathbf{p}(t) = Re[\mathbf{d}e^{-i\omega t})]$ η πυνότητα ρεύματος θα είναι

$$\mathbf{j_0}(\mathbf{r}) = -i\omega\mathbf{d}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_0}). \tag{2.25}$$

Η μέση ισχύς της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας ενός ηλεκτρικού διπόλου που είναι τοποθετημένο στη θέση $\mathbf{r_0}$, υπολογίζεται μέσω του θεωρήματος Poynting θεωρώντας μια νοητή σφαιρική επιφάνεια, η οποία περικλείει το ηλεκτρικό δίπολο και η θέση του ταυτίζεται με το κέντρο της σφαίρας. Από τη σχέση (2.17) η χρονικά μέση τιμή του διανύσματος Poynting προκύπτει ότι είναι

$$\overline{P} = \frac{\omega}{2}Im\{\mathbf{d}^* \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r_0})\}. \tag{2.26}$$

2.2 Πολαριτονικές διεγέρσεις σε διχαλκογενίδια βισμουθίου

Το πολαριτόνιο αντιπροσωπεύει τις θεμελιώδεις διεγέρσεις, ή τους θεμελιώδεις τρόπους ταλάντωσης του ΗΜ πεδίου σε επιφάνεια υλικού. Πολαριτονικές διεγέρσεις εμφανίζονται σε συχνότητες που αντιστοιχούν σε υπέρυθρη ακτινοβολία. Τα πολαριτόνια είναι οιονεί σωματίδια, αποτελούν ιδιοκαταστάσεις του ΗΜ πεδίου και είναι κβαντισμένα καθώς έχουν διακριτούς τρόπους ταλάντωσης. Το επαγώμενο ηλεκτρικό πεδίο γύρω από νανοδομές, κατά τον πολαριτονικό συντονισμό, είναι πολύ μεγαλύτερο από εκείνο της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Συγκεκριμένα, παρατηρείται συγκέντρωση γιγαντιαίων ποσών ηλεκτρικής ενέργειας σε πολύ μικρές περιοχές, κάτι το οποίο οδηγεί σε μη γραμμικά φαινόμενα, τα οποία εξαρτώνται από την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου. Αυτή η ιδιότητα μπορεί να αξιοποιηθεί για έλεγχο του φωτός και των ηλεκτρονίων στη νανοκλίμακα ξεπερνώντας τα όρια ανάλυσης και ευαισθησίας της κλασσικής οπτικής, διότι είναι εφικτό να μελετούμε φαινόμενα της νανοφωτονικής σε νανοδομές με διαστάσεις πολύ μικρότερες από το μήκος κύματος του προσπίπτοντος φωτός.

Τα πολαριτόνια είναι επιφανειακές καταστάσεις του ΗΜ πεδίου που δημιουργούνται στην εξωτερική επιφάνεια στερεών υλικών ή στη διεπιφάνεια υλικών διαφορετικής χημικής σύστασης. Θεωρώντας ένα ημιάπειρο τμήμα ενός στερεού στο κενό ή τον αέρα, με επιφάνεια παράλληλη στο επίπεδο xy, αποδεικνύεται πως για συγκεκριμένη συχνότητα, παρατηρούνται δέσμιες επιφανειακές καταστάσεις του ΗΜ πεδίου, δηλαδή ΗΜ καταστάσεις που φθίνουν εκθετικά κατά μήκος της διεύθυνσης που είναι κάθετη στην επιφάνεια.

Όταν το μήκος κύματος του προσπίπτοντος ΗΜ κύματος σε σωματίδιο είναι μεγαλύτερο της διαμέτρου του, τότε ισχύει η λεγόμενη ημιστατική προσέγγιση και, επομένως, από τους νόμους του Faraday και του Gauss προκύπτει:

$$\nabla \times \mathbf{E} \approx 0, \tag{2.27}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0. \tag{2.28}$$

Συνεπώς, υπάρχει ηλεκτροστατικό δυναμικό $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ που ικανοποιεί την εξίσωση Laplace

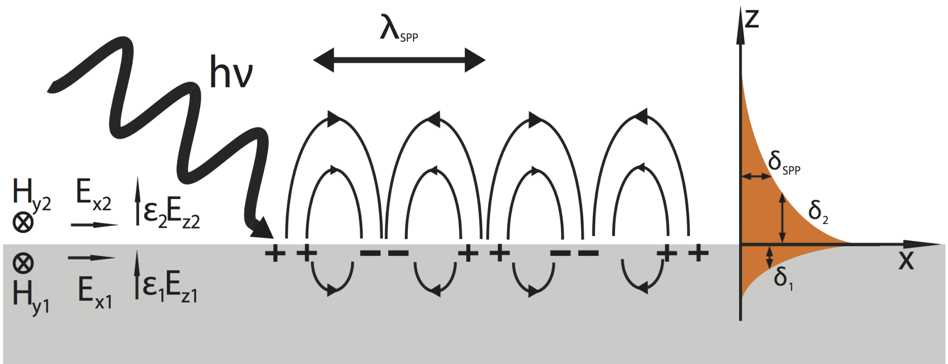
$$\nabla^2\phi = 0, \tag{2.29}$$

εντός και εκτός του υλικού.

Οι επιφανειακές λύσεις της εξίσωσης Laplace θα πρέπει να έχουν την εξής μορφή

$$\phi = \phi_0 e^{-k|z|} e^{i(kx-\omega t)}, \tag{2.30}$$

δηλαδή να έχουν κυματικό χαρακτήρα κατά τον άξονα x και εκθετική φθίνουσα συμπεριφορά κατά τον κάθετο άξονα z της επιφάνειας. Οι συνοριακές συνθήκες



Σχήμα 1: Επιφανειακά πολαριτόνια.

στην επιφάνεια του υλικού απαιτούν την συνέχεια της κάθετης συνιστώσας της διηλεκτρικής μετατόπισης:

$$D_z|_{z\to 0^+} = \epsilon(\omega)\epsilon_0 E_z = \epsilon(\omega)\epsilon_0 \frac{\partial \phi}{\partial z}|_{z\to 0^+}, \tag{2.31}$$

$$D_z|_{z\to 0^-} = \epsilon_0 \frac{\partial \phi}{\partial z}|_{z\to 0^-}. \tag{2.32}$$

Από τις επιφανειακές λύσεις της σχέσης (2.30) προκύπτει

$$D_z|_{z\to 0^+} = \epsilon(\omega)\epsilon_0(-k\phi_0 e^{-kz} e^{i(kx-\omega t)})|_{z\to 0^+}, \tag{2.33}$$

$$D_z|_{z\to 0^-} = \epsilon_0(k\phi_0 e^{kz} e^{i(kx-\omega t)})|_{z\to 0^-}. \tag{2.34}$$

Η συνθήκη συνέχειας της κάθετης συνιστώσας της διηλεκτρικής σταθεράς υποδεικνύει την συνθήκη για τη δημιουργία δέσμιας επιφανειακής κατάστασης του ΗΜ πεδίου στην επιφάνεια ενός υλικού, το οποίο βρίσκεται στο κενό ή τον αέρα:

$$\epsilon(\omega) = -1. \tag{2.35}$$

Για μονωτές και ιοντικούς κρυστάλλους λαμβάνεται υπόψιν η διηλεκτρική συνάρτηση που πηγάζει από το πρότυπο Lorentz. Για απλοποίηση της λύσης υποθέτουμε ότι οι απώλειες είναι αμελητέες ($\gamma \to 0$), άρα η διηλεκτρική συνάρτηση εμπεριέχει μόνο το πραγματικό μέρος της, και θα ισχύει

$$\epsilon_\infty + \frac{\omega_t^2(\epsilon_{st} - \epsilon_\infty)}{\omega_t^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} = -1$$

$$\omega = \omega_t \sqrt{\frac{1+\epsilon_{st}}{1+\epsilon_\infty}}, \tag{2.36}$$

όπου $\epsilon_{st} = \epsilon(\omega = 0)$ είναι η στατική διηλεκτρική σταθερά και $\epsilon_\infty = \epsilon(\omega = \infty)$ είναι η διηλεκτρική σταθερά υψηλών συχνοτήτων. Επομένως, για την ύπαρξη επιφανειακής κατάστασης του ΗΜ πεδίου στην επιφάνεια ενός μονωτή, δηλαδή πολαριτονική διέγερση, επιβάλλεται το προσπίπτον ΗΜ πεδίο να έχει τη συγκεκριμένη συχνότητα με αυστηρή ακρίβεια, κάτι το οποίο είναι περιοριστικό.

Για οπτικές συχνότητες οι επιφανειακές καταστάσεις ονομάζονται πλασμόνια και εμφανίζονται σε επιφάνειες/διεπιφάνειες και σωματίδια από ευγενή μέταλλα όπως ο άργυρος και ο χρυσός. Τα τελευταία χρόνια έχει μελετηθεί εκτενώς αλληλεπίδραση φωτός-ύλης σε κοιλότητες με μεταλλικά νανοσωματίδια τα οποία παγιδεύουν στις επιφάνειες τους το φως, ενισχύοντας της ένταση μέσω των εντοπισμένων επιφανειακών πλασμονίων. Η συχνότητα που πρέπει να έχει το προσπίπτον πεδίο σε διεπιφάνεια αέρα και μετάλλου, ώστε να εμφανιστούν πλασμόνια πηγάζει από την παραπάνω μέθοδο, αλλά αντικαθιστώντας την ακόλουθη διηλεκτρική συνάρτηση τύπου Drude (υποθέτοντας μηδενικές απώλειες)

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \tag{2.37}$$

όπου ω_p είναι η συχνότητα πλάσματος του υλικού.

Τελικά, η απαιτούμενη συχνότητα θα ισούται με

$$\epsilon(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\sqrt{2}}. \tag{2.38}$$

Παρά τα εξωτικά φαινόμενα που προκαλούν τα πολαριτόνια και τα πλασμόνια, η περιγραφή τους αναλύεται μέσω κλασσικής φυσικής και τις ηλεκτρομαγνητικές εξισώσεις του Maxwell. Βέβαια, ο κλασικός ηλεκτρομαγνητισμός του 19ου αιώνα, αδυνατεί να εξηγήσει πλήρως την αλληλεπίδραση ύλης-φωτός, καθώς δεν ήταν γνωστές τότε οι εσωτερικές δομές των υλικών. Οι σύχρονοι κλάδοι της νανοφωτονικής και κβαντικής οπτικής μας επιτρέπουν να κατασκευάζουμε πολύπλοκα νανοϋλικά. Το πεδίο της νανοφωτονικής αναπτύσσεται ραγδαία, καθώς οι θεωρίες σκέδασης των προηγουμένων δεκαετιών είναι εφικτό να εφαρμοστούν και να μελετηθούν ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα στο εγγύς πεδίο (near field) είτε αναλυτικά είτε με αριθμητικές μεθόδους και υπολογιστικά προγράμματα.

Τα διχαλκογενίδια βισμουθίου, τελουριούχο βισμούθιο (Bi_2Te_3) και σεληνιούχο βισμούθιο (Bi_2Se_3), είναι νέα κατηγορία υλικών στο πεδίο της κβαντικής οπτικής καθώς δεν έχει μελετηθεί η οπτική τους απόκριση σε δομημένο φωτονικό περιβάλλον μέχρι σήμερα [13]. Τα συγκεκριμένα υλικά είναι τοπολογικοί μονωτές και φιλοξενούν στην επιφάνεια τους ενισχυμένα παγιδευμένα πεδία λόγω των πολαριτονικών διεγέρσεων για ΗΜ ακτινοβολία στην περιοχή των THz και το πλεονεκτημά τους, συγκριτικά με μεταλλικά υλικά, είναι το χαμηλό ποσοστό ωμικών απωλειών τους. Οι τοπολογικές ιδιότητες τους αναδύονται για σωματιδία με νανοδιαστάσεις και περιπλέκεται η εικόνα λόγω των επιφανειακών καταστάσεων που πηγάζουν από τοπολογικές φάσεις των συγκεκριμένων υλικών. Στη παρούσα εργασία θα μελετηθούν σωματίδια με διαστάσεις μικρομέτρων όπου δεν παρουσιάζονται τοπολογικά φαινόμενα.

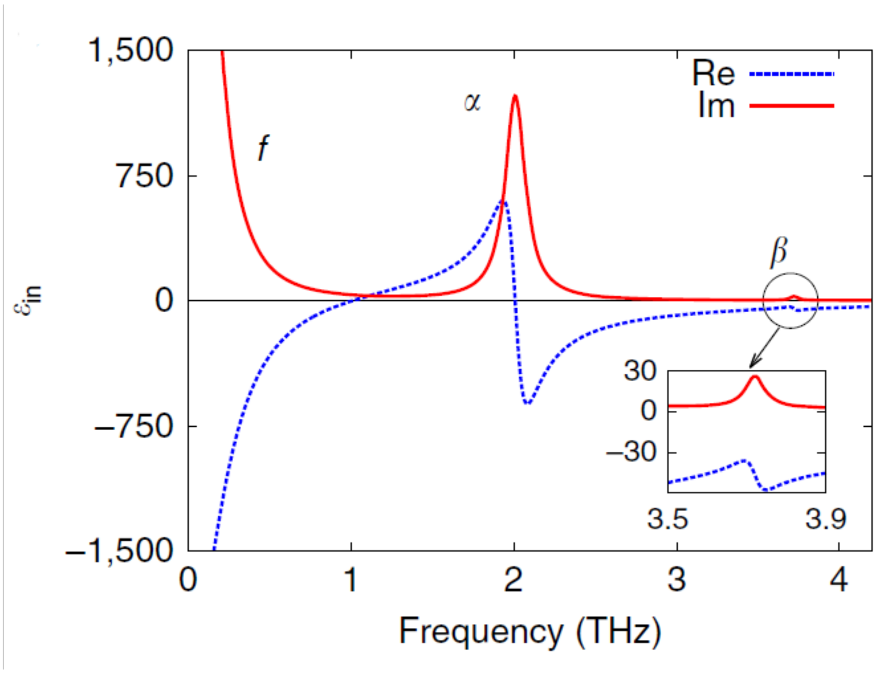
Τα διχαλκογενίδια βισμουθίου υποστηρίζουν ισχυρούς φωνονικούς συντονισμούς στην περιοχή του υπέρυθρου φάσματος συχνοτήτων, στους οποίους οφείλονται οι πολύ υψηλές τιμές της διηλεκτρική τους συνάρτησης (βλ. Σχήμα 2). Οι τεράστιες τιμές της διηλεκτρικής συνάρτησης που απεικονίζονται στο Σχήμα 2 έχουν ως αποτέλεσμα να μην επιτρέπεται διείσδυση της ΗΜ ακτινοβολίας στο εσωτερικό των σωματιδίων και για αυτό έχουν πολύ μικρότερο ποσοστό ωμικών απωλειών σε σχέση με τα μεταλλικά σωματίδια. Όταν η συχνότητα του προσπίπτοντος πεδίου ταυτίζεται με την συχνότητα πολαριτονικού συντονισμού τους, τότε τα πολαριτόνια προκαλούν τεράστια ενίσχυση του ηλεκτρικού πεδίου γύρω από τις επιφάνειες των σωματιδίων. Η διηλεκτρική συνάρτηση των διχαλκογενιδίων βισμουθίου αποτελείται από το άθροισμα δύο διηλεκτρικών συναρτήσων τύπου Lorentz για τις συνεισφορές από α, β φωνόνια και μια διηλεκτρική συνάρτηση τύπου Drude για τους φορείς φορτίου f. Συνεπώς, η διηλεκτρική συνάρτηση των μικροσφαιρών περιγράφεται από την παρακάτω σχέση:

$$\epsilon(\omega) = \sum_{j=\alpha,\beta,f} \frac{\omega_{pj}^2}{\omega_{0j}^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega}, \tag{2.39}$$

όπου ω_{0j} αντιστοιχεί στην συχνότητα συντονισμού, ω_{pj} εκφράζει το εύρος της συχνότητας συντονισμού και γ_j είναι ο συντελεστής απόσβεσης.

Η διηλεκτρική συνάρτηση τους είναι τανυστής δεύτερης τάξης με διαγώνια στοιχεία $\epsilon_\perp$, $\epsilon_\perp$, $\epsilon_\parallel$ και μηδενικά τα υπόλοιπα στοιχεία του πίνακα. Ο όρος $\epsilon_\parallel$ αφορά την διηλεκτρική συνάρτηση κατά τον c άξονα και $\epsilon_\perp$ την διηλεκτρική συνάρτηση για τους κάθετους άξονες στον c άξονα.

Τα πειραματικά δεδομένα προκύπτουν από πρόσπτωσή ΗΜ ακτινοβολίας στη περιοχή των THz κατά τον άξονα c του υλικού σε θερμοκρασία 300 K. Λόγω της απουσίας πειραματικών δεδομένων για τον $\epsilon_\perp$, η διηλετρική συνάρτηση λαμβάνεται ισοτροπική με διαγώνια στοιχεία $\epsilon_\parallel$ [11, 12].



Σχήμα 2: Διηλεκτρική συνάρτηση του Bi_2Te_3 (bulk). Πηγή [11]

Πίνακας 1 | Παράμετροι της διηλεκτρικής συνάρτησης για Bi_2Te_3.

j	ω_{pj} (THz)	ω_{0j} (THz)	γ_j (THz)
α	21	1.56	0.18
β	4.0	2.85	0.2
f	11.0	0	0.24

Πίνακας 2 | Παράμετροι της διηλεκτρικής συνάρτησης για Bi_2Se_3.

j	ω_{pj} (THz)	ω_{0j} (THz)	γ_j (THz)
α	19.2	2.0	0.15
β	2.3	3.72	0.06
f	11.5	0	0.24

3 Κβαντική οπτική

Τα κβαντικά φαινόμενα δε συμβαίνουν στο χώρο Χίλμπερτ. Συμβαίνουν στο εργαστήριο. - Asher Peres

3.1 Αναπαράσταση κβαντικών καταστάσεων μέσω του πίνακα πυκνότητας

Ο προσδιορισμός των κβαντικών καταστάσεων είναι άρρηκτα συνυφασμένος με τις στατιστικές κατανομές πιθανοτήτων που είναι απόρροια του στατιστικού συνόλου προετοιμασίας των κβαντικών συστημάτων. Ουσιαστικά είναι απαραίτητη η δημιουργία ενός στατιστικού συνόλου ώστε να προσδιοριστούν οι πιθανότητες των παρατηρήσιμων μεγεθών, διότι η διαδικασία της μέτρησης ενός μόνο κβαντικού συστήματος έχει ως αποτέλεσμα την κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης $|\psi\rangle$ καθώς θα βρεθεί σε συγκεκριμένη ιδιοκατάσταση. Επομένως, η διαδικασία της μέτρησης πρέπει να επαναληφθεί σε μεγάλο στατιστικό σύνολο πανομοιότυπης προετοιμασίας, ώστε να προσδιοριστούν οι πιθανότητες όλων των ενδεχομένων και να αποκτήσουμε τη μέγιστη δυνατή πληροφορία του κβαντικού συστήματος, δηλαδή το καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$.

Οι καθαρές καταστάσεις προκύπτουν από μια συλλογή κβαντικών συστημάτων, τα οποία περιγράφονται εξ΄ ολοκλήρου από την ίδια κβαντική κατάσταση, η οποία περιγράφεται από το καταστατικό διάνυσμα $|\psi\rangle$ στο χώρο Χίλμπερτ. Ουσιαστικά πρόκειται για καταστάσεις, οι οποίες είναι κατάλληλα προετοιμασμένες ώστε να έχουμε τη μέγιστη δυνατή πληροφορία για τη κατάσταση του συστήματος και να είναι γνωστές οι τιμές των παρατηρήσιμων μεγεθών. Παράδειγμα καθαρής κατάστασης είναι δισταθμικό κβαντικό σύστημα που η καταστατικό διάνυσμα του έχει την μορφή

$$|\Psi\rangle = c_1 |\psi_1\rangle + c_2 |\psi_2\rangle \,, \tag{3.1}$$

σημαίνει ότι το σύστημα μπορεί βρίσκεται σε οποιαδήποτε κατάσταση επιτρέπει ο παραπάνω γραμμικός συνδυασμός των καταστάσεων $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$, όπου οι μιγαδικοί συντελεστές c_1, c_2 είναι τα πλάτη πιθανότητας για τα οποία ισχύει

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \tag{3.2}$$

Οι μικτές καταστάσεις περιγράφονται από επιμέρους καθαρές συλλογές με διαφορετκές πιθανότητες να αντιστοιχούν στην κάθε στατιστική κατανομή που εκπροσωπούν οι συλλογές. Η στατιστική μίξη οφείλεται στη μέθοδο προετοιμασίας των καταστάσεων όπου η κάθε συλλογή αντιστοιχεί σε συγκεκριμένη και ξεχωριστή κατάσταση $|\psi_i\rangle$. Οι μικτές καταστάσεις δεν περιγράφονται από καταστατικά διανύσματα του χώρου Χίλμπερτ, αλλά αναπαρίστανται από τον πίνακα πυκνότητας ρ.

Η γενικότερη δυνατή έννοια κατάστασης στην κβαντική θεωρία αντιστοιχίζεται πλήρως μαθηματικά με έναν πίνακα πυκνότητας [16]. Ο πίνακας πυκνότητας είναι ένας τελεστής που ικανοποιεί τις παρακάτω ιδιότητες:

1)Είναι αυτοσυζυγής τελεστής, δηλαδή ισχύει $\rho = \rho^\dagger$

2)Είναι θετικός τελεστής, δηλαδή όλες οι ιδιοτιμές του είναι μη αρνητικές.

3)$Tr[\rho] = 1$ λόγω της βασικής συνθήκης των πιθανοτήτων (το άθροισμα των πιθανοτήτων ισούται με 1).

Τέλος, μια κατάσταση ρ είναι καθαρή αν ισχύει

$$Tr\rho = Tr\rho^2. \tag{3.3}$$

Για μια καθαρή κατάσταση ψ ορίζεται ο προβολικός τελεστής ως

$$\rho = |\psi\rangle \langle\psi| = \sum_i c_i c_j^* |\psi_i\rangle \langle\psi_j| , \tag{3.4}$$

όπου η ψ γράφτηκε σαν υπέρθεση των διανυσμάτων της βάσης ψ_i. Η αναπαράσταση υπό μορφή πίνακα στη περίπτωση $n \times m$ διαστάσεων είναι ως εξής:

$$\begin{pmatrix} c_1c_1^* & c_1c_2^* & .... & c_1c_m^* \\ c_2c_1^* & c_2c_2^* & .... & c_2c_m^* \\ ... & ... & ... & ... \\ c_nc_1^* & c_1c_2^* & .... & c_nc_m^* \end{pmatrix} \tag{3.5}$$

Τα κβαντικά φαινόμενα οφείλονται στους μη διαγώνιους όρους, τους λεγόμενους όρους συμβολής, διότι αυτοί δηλώνουν την επιτρεπόμενη κβαντική υπέρθεση των καταστάσεων.

Ειδάλλως, αν ισχύει

$$Tr\rho^2 < 1 \tag{3.6}$$

τότε η κατάσταση είναι μικτή και τα δυνατά ενδοχόμενα της κβαντικής κατάστασης περιγράφονται από περισσότερα από δύο στατιστικά σύνολα, δηλαδή έχουμε στατιστική μίξη. Η μικτή κατάσταση περιγράφεται από τον πίνακα πυκνότητας

$$\rho = \sum_k p_k \left|\psi_k\right\rangle \left\langle\psi_k\right| , \tag{3.7}$$

όπου $\sum_k p_k = 1$ και p_k η αντίστοιχη πιθανότητα για το καταστατικό διάνυσμα $|\psi_k\rangle$, δηλαδή η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα σε μια συγκεκριμένη καθαρή κατάσταση. Οι πιθανότητες αυτές εκφράζουν την άγνοια μας για την προετοιμασία του συστήματος και του καταστατικού διανύσματος. Επίσης, οι μικτές καταστάσεις δημιουργούνται λόγω θορύβων (π.χ. ΗΜ ακτινοβολία, θερμότητα), τα αποτελέσματα των οποίων εισάγουν την άγνοια στη γνώση μας για μια κβαντική κατάσταση. Ακόμα, η αναγκαιότητα περιγραφής μιας κατάστασης ως μικτής, μπορεί να προκύψει όταν διαγράψουμε το αρχείο που περιέχει τα αποτελέσματα των καταστάσεων του συστήματος με τις αντίστοιχες πιθανότητες των παρατηρήσιμων μεγεθών.

3.1.1 Σύνθεση κβαντικών συστημάτων

Ο καταστατικός χώρος ενός σύνθετου κβαντικού συστήματος, όπως συστήματα πολλών σωματιδίων, είναι το τανυστικό γινόμενο των καταστάσεων των επιμέρους συστημάτων. Έστω τα διανύσματα $|\phi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \dots \\ \phi_n \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^n$ και $|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_m \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^m$, τότε το τανυστικό γινόμενο τους αναπαριστάται ως εξής:

$$|\psi\rangle \otimes |\phi\rangle = |\psi, \phi\rangle = \begin{pmatrix} \phi_1\psi_1 \\ \phi_1\psi_2 \\ \dots \\ \phi_1\psi_m \\ \phi_2\psi_1 \\ \phi_2\psi_2 \\ \dots \\ \phi_2\psi_m \\ \dots \\ \dots \\ \phi_n\psi_1 \\ \phi_n\psi_2 \\ \dots \\ \phi_n\psi_m \end{pmatrix} \tag{3.8}$$

Συνεπώς, για πεπερασμένες διαστάσεις ο χώρος Χίλμπερτ $\mathbf{C}^n \otimes \mathbf{C}^m$ είναι ισομορφικός με τον $\mathbf{C}^{nm}$, δηλαδή

$$\mathbf{C}^n \otimes \mathbf{C}^m = \mathbf{C}^{nm}. \tag{3.9}$$

Ο φορμαλισμός του τανυστικού γινομένου παίζει καθοριστικό ρόλο στη μαθηματική διατύπωση των καταστάσεων Fock κατά την διαδικασία κβάντωσης του ΗΜ πεδίου.

Για παράδειγμα το τανυστικό γινόμενο των μητρών Pauli σ_2 και σ_3 θα είναι

$$\sigma_2 \otimes \sigma_3 = \begin{pmatrix} 0 \cdot \sigma_3 & -i \cdot \sigma_3 \\ i \cdot \sigma_3 & 0 \cdot \sigma_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{3.10}$$

3.2 Κβάντωση ηλεκτρομαγνητικού πεδίου

Μέχρι τώρα το ΗΜ πεδίο αντιμετωπίστηκε ως κλασσικό πεδίο, το οποίο προσδιορίζεται πλήρως από τις εξισώσεις του Maxwell και με συνδυασμό με θεωρίες της φυσικής συμπυκνωμένης ύλης είναι εφικτό να εξηγηθούν πολλά φαινόμενα που πηγάζουν από την αλληλεπίδραση ύλης-φωτός. Όμως, φαινόμενα όπως η αυθόρμητη εκπομπή ερμηνεύονται μόνο μέσω της κβάντωσης του ΗΜ πεδίου. Εισάγοντας την βαθμίδα Coulomb

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0, \tag{3.11}$$

είναι εφικτό να οριστεί το ηλεκτρικό και το μαγνητικό πεδίο μέσω του διανυσματικού δυναμικού $\mathbf{A}$ ως

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, \mathbf{t}), \tag{3.12}$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \tag{3.13}$$

Συνεπώς, το διανυσματικό δυναμικό $\mathbf{A}$ περιέχει όλες τις πληροφορίες για το ΗΜ πεδίο του φυσικού συστήματος. Από τα παραπάνω προκύπτει πως το διανυσματικό δυναμικό υπακούει την παρακάτω κυματική εξίσωση:

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} = 0. \tag{3.14}$$

Η λύση της κυματικής εξίσωσης γίνεται να έχει την μορφή επιπέδων κυμάτων ως εξής:

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k},a} = \epsilon_{\mathbf{k},a} A_{\mathbf{k},a} e^{i(\mathbf{kr} - \omega_k t)}, \tag{3.15}$$

όπου $\epsilon_{\mathbf{k},a}$ είναι το διάνυσμα πόλωσης, a είναι η συνιστώσα της πόλωσης του πεδίου ακτινοβολίας με δύο δυνατές διευθύνσεις (κάθετες στο κυματάνυσμα $\mathbf{k}$), ο μιγαδικός όρος $A_{\mathbf{k},a}$ εκφράζει το πλάτος του πεδίου, $\mathbf{k}$ είναι το κυματάνυσμα και $\omega_k = ck$ είναι η συχνότητα του πεδίου ακτινοβολίας.

Στον άπειρο χώρο οι τιμές του διανύσματος $\mathbf{k}$ αποτελούν ένα συνεχές φάσμα τιμών. Η κβάντωση στην φύση πηγάζει από τις συνοριακές συνθήκες που επιβάλλονται στα φυσικά συστήματα. Για παράδειγμα, σε κλασικό φυσικό σύστημα όπως μια κιθάρα, οι τρόποι ταλάντωσης των χορδών της είναι διακριτοί λόγω των δεσμών στα άκρα τους. Για κβαντικά συστήματα όπως για ένα ηλεκτρόνιο σε πηγάδι δυναμικού, το φάσμα ιδιοενεργειών του σωματιδίου είναι διακριτό λόγω των συνοριακών συνθηκών που θέτει το δυναμικό στα τοιχώματά του. Περιορίζοντας το ΗΜ πεδίο σε μια πεπερασμένη κυβική κοιλότητα με όγκο Ω και πλευρές μήκους L, από τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες συνεπάγονται επιτρεπόμενες ΗΜ καταστάσεις που αντιστοιχούν σε διακριτές τιμές κυματανύσματος

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, k_z = \frac{2\pi}{L} n_z, \tag{3.16}$$

όπου n_x, n_y, n_z είναι ακέραιοι αριθμοί. Η συμμετρία της κοιλότητας καθορίζει ότι οι επιτρεπτές λύσεις των πεδίων είναι ίδιες για τις απέναντι έδρες του κύβου. Συνεπώς, το διανυσματικό δυναμικό γράφεται ως άθροισμα διακριτών κυματανυσμάτων και ορίζεται ως

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},a} \epsilon_{\mathbf{k},a} \Big(A_{\mathbf{k},a} e^{i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} + A^*_{\mathbf{k},a} e^{-i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} \Big). \tag{3.17}$$

Τα προαναφερθέντα μεγέθη, δηλαδή τα κυματανύσματα και τα διανύσματα πόλωσης, μαζί συνιστούν τις διαθέσιμες ΗΜ καταστάσεις (modes) του πεδίου. Το ηλεκτρικό πεδίο και το μαγνητικό πεδίο μέσω του διανυσματικού δυναμικού θα είναι

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},a} i \epsilon_{\mathbf{k},a} \omega_k \Big(A_{\mathbf{k},a} e^{i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} - A^*_{\mathbf{k},a} e^{-i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} \Big), \tag{3.18}$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k},a} i (\mathbf{k} \times \epsilon_{\mathbf{k},a}) \Big(A_{\mathbf{k},a} e^{i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} - A^*_{\mathbf{k},a} e^{-i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} \Big). \tag{3.19}$$

Η συνολική ενέργεια του ΗΜ πεδίου ισούται με

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int_V \Big(\epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)^2 + \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)^2 \Big) \\ &= \sum_{\mathbf{k},a} \epsilon_0 V \omega_k^2 \Big(A_{\mathbf{k},a} A^*_{\mathbf{k},a} + A^*_{\mathbf{k},a} A_{\mathbf{k},a} \Big). \end{aligned} \tag{3.20}$$

Για την κβάντωση του ΗΜ πεδίου θεωρείται ότι σε κάθε επιτρεπόμενη ΗΜ κατάσταση του πεδίου αντιστοιχεί ένας κβαντικός αρμονικός ταλαντωτής και κάθε φωτόνιο μεταφράζεται ως διέγερση κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή που σχετίζεται με την ιδιοσυχνότητά του. Παραλείποντας τον δείκτη που αντιστοιχεί στην πόλωση των ΗΜ καταστάσεων για διευκόλυνση των συμβολισμών, η δημιουργία και η εξαφάνιση ενός φωτονίου στην κβαντομηχανική απεικονίζεται μέσω της δράσης των τελεστών καταστροφής $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ και δημιουργίας $\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}$ στις ιδιοκαταστάσεις κβαντικού αρμονικού ταλαντωτή που αντιστοιχούν σε φωτονικές κατάστασης $\mathbf{k}$ και $|n_{\mathbf{k}}\rangle$ δηλώνει τον αριθμό των καταστάσεων που είναι κατειλημμένες από φωτόνια. Η δράση των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής έχουν ως αποτέλεσμα να αυξάνουν και να μειώνουν αντίστοιχα τον αριθμό φωτονίων που αντιστοιχούν στην ΗΜ κατάσταση $\mathbf{k}$ ως εξής:

$$\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}} = \sqrt{n_{\mathbf{k}}}|n_{\mathbf{k}} - 1\rangle, \tag{3.21}$$

$$\hat{a}_{\mathbf{k}} = \sqrt{n_{\mathbf{k}} + 1}|n_{\mathbf{k}} + 1\rangle. \tag{3.22}$$

Το πλήθος των φωτονίων που ανήκουν στην κατάσταση $\mathbf{k}$ προκύπτει από την ακόλουθη δράση του τελεστή $\hat{n}_{\mathbf{k}}$ (number operator)

$$\hat{n}_{\mathbf{k}}|n_{\mathbf{k}}\rangle, \tag{3.23}$$

όπου ισχύει

$$\hat{n}_{\mathbf{k}} = \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}. \tag{3.24}$$

Η αναγωγή του διανυσματικού δυναμικού από την κλασική στην κβαντική του μορφή λαμβάνει χώρα μέσω των σχέσεων

$$A_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 V \omega_k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}, \tag{3.25}$$

$$A^{*}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 V \omega_k}}\hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}. \tag{3.26}$$

Επομένως, το διανυσματικό δυναμικό ορίζεται ως τελεστής

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_{\mathbf{k}}\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0 V \omega_k}}\Big(\hat{a}_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} + \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}e^{-i(\mathbf{kr} - \omega_k t)}\Big) \tag{3.27}$$

και οι αντίστοιχοι τελεστές για το ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο θα είναι

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) = i\sum_{\mathbf{k}}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_0 V}}\epsilon_{\mathbf{k}}\Big(\hat{a}_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} - \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}e^{-i(\mathbf{kr} - \omega_k t)}\Big), \tag{3.28}$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = i\sum_{\mathbf{k}}(\mathbf{k} \times \epsilon_{\mathbf{k}})\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{2\epsilon_0 V}}\epsilon_{\mathbf{k}}\Big(\hat{a}_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{kr} - \omega_k t)} - \hat{a}^{\dagger}_{\mathbf{k}}e^{-i(\mathbf{kr} - \omega_k t)}\Big). \tag{3.29}$$

Το μαγνητικό πεδίο είναι ασθενέστερο από το ηλεκτρικό πεδίο κατά ένα παράγοντα c και για αυτό στην κβαντική οπτική πολλές φορές το ενδιαφέρον βρίσκεται στο ηλεκτρικό πεδίο. Επίσης, συνήθως θεωρείται αμελητέα η μαγνητική σύζευξη λόγω των σπιν μεταξύ δύο e^- σε σχέση με την αλληλεπίδραση δύο ηλεκτρικών διπόλων.

Με βάση τα παραπάνω η Χαμιλτονιανή του ΗΜ πεδίου θα οριστεί ως

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_k}{2}(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_k(\hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_k(\hat{n}_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2}). \qquad (3.30)\end{aligned}$$

Επομένως, όσα περισσότερα φωτόνια υπάρχουν στο σύστημα τόσο μεγαλύτερη είναι η ενέργειά του. Ακόμα, η ελάχιστη ενεργειακή κατάσταση του συστήματος αντιστοιχεί στη θεμελιώδη κατάσταση $|0\rangle$ και από την δράση του τελεστή της Χαμιλτονιανής

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle = E_0|0\rangle, \qquad (3.31)$$

συνεπάγεται πως η ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης είναι

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega. \qquad (3.32)$$

Συστήματα με μεταβλητό αριθμό σωματιδίων περιγράφονται μέσω του χώρου Fock. Η δομή του χώρου Fock αποτελείται από επιμέρους χώρους Hilbert, όπου καθένας περιγράφει απροσδιόριστο αριθμό σωματιδίων και η ένωσή τους επιτυγχάνεται μέσω ευθέος αθροίσματος. Ειδικά, θα πρέπει για σύστημα με N σωματίδια, να προκύψει το ευθύ άθροισμα του χώρου Hilbert που περιγράφει 0 σωματίδια, με τον χώρο Hilbert που περιφράφει 1 σωματίδιο, με τον χώρο Hilbert που περιφράφει 2 σωματίδια και ούτω καθεξής μέχρι N σωματίδια. Στα ΗΜ πεδία τα σωματίδια είναι τα φωτόνια ενώ οι καταστάσεις Fock, οι οποίες περιγράφουν όλες τις διαθέσιμες ΗΜ καταστάσεις στον χώρο, ορίζονται ως τανυστικό γινόμενο:

$$\begin{aligned}|n\rangle &= |n_{\mathbf{k_1}}\rangle \otimes |n_{\mathbf{k_2}}\rangle ..... \otimes |n_{\mathbf{k_i}}\rangle \\ &= |n_{\mathbf{k_1}}, n_{\mathbf{k_2}}, ..., n_{\mathbf{k_i}}\rangle. \qquad (3.33)\end{aligned}$$

Στην κατάσταση του κενού

$$|n\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle .... \otimes |0\rangle, \qquad (3.34)$$

δεν θα είναι κατηλειμμένη καμία ΗΜ κατάσταση από φωτόνια. Όμως, παρότι δεν υπάρχουν φωτόνια στο σύστημα, η ενέργεια είναι μη μηδενική και μάλιστα απειρίζεται

$$E_0 = \sum_k \frac{1}{2}\hbar\omega_k \to \infty. \tag{3.35}$$

Η συνολική ενέργεια απειρίζεται, διότι υπάρχουν άπειρες διαθέσιμες ΗΜ καταστάσεις στον χώρο. Για τις περισσότερες περιπτώσεις δεν δημιουργεί πρόβλημα ο απειρισμός λόγω του ότι στην κβαντική ηλεκτροδυναμική συνήθως σημασία έχει η διαφορά μεταξύ των ενεργειών. Επιπλέον, άλλοι απειρισμοί που προκύπτουν στην κβαντική ηλεκτροδυναμική διορθώνονται μέσω της λεγόμενης επανακανονικοποίησης, όμως ο προαναφερόμενος όρος δεν επιδέχεται επανακανονικοποίηση και παραμένει ανοιχτό πρόβλημα.

Για κβαντικά συστήματα όπου οι διαθέσιμες ΗΜ καταστάσεις αντιστοιχούν σε μονοχρωματικό πεδίο (single mode field), δηλαδή εμπλέκονται κβαντικοί αρμονικοί ταλαντωτές με μοναδική συχνότητα και πόλωση, δεν χρειάζεται να γράφεται ο δείκτης k και το ηλεκτρικό, το μαγνητικό πεδίο και η ενέργεια δεν θα είναι σε μορφή αθροίσματος. Η διακύμανση των φωτονίων για μια κατάσταση θα είναι

$$(\Delta n)^2 = \langle n|(\hat{n} - \langle\hat{n}\rangle)^2|n\rangle = 0, \tag{3.36}$$

το οποίο είναι αναμενόμενο γιατί ο αριθμός των φωτονίων είναι συγκεκριμένος για καταστάσεις Fock.

Για το ηλεκτρικό πεδίο η αναμενόμενη τιμή και οι διακυμάνσεις του προκύπτει πως είναι

$$\langle n|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r},t)|n\rangle = 0, \tag{3.37}$$

$$\begin{aligned}(\Delta\mathbf{E}(\mathbf{r},t))^2 &= \langle n|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r},t)^2|n\rangle - \Big(\langle n|\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r},t)|n\rangle\Big)^2 \\ &= \frac{\hbar\omega}{\epsilon_0 V}\Big(n+\frac{1}{2}\Big) = 2E_{vac}^2\Big(n+\frac{1}{2}\Big).\end{aligned} \tag{3.38}$$

Ο όρος

$$E_{vac} = \sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0\Omega}} \tag{3.39}$$

αντιπροσωπεύει την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου του κενού και σε μικρές κοιλότητες λαμβάνει υψηλή τιμή. Αν μια οπτική κοιλότητα έχει θερμοκρασία τέτοια ώστε $k_BT << \hbar\omega$, όπου k_B είναι η σταθερά του Boltzmann και $\hbar\omega$ η ενεργειακή διαφορά των σταθμών του ατόμου, τότε οι φωτονικές καταστάσεις καθορίζονται μόνο από τα πεδία του κενού και η διαδικασία της αυθόρμητης εκπομπής επηρεάζεται από τις διακυμάνσεις τους.

Είναι αξιοσημείωτο το γεγονός ότι οι καταστάσεις Fock εμπεριέχουν τεράστιο αριθμό φωτονίων αλλά η αναμενόμενη τιμή του ηλεκτρικού πεδίου είναι μηδενική ενώ οι διακυμάνσεις του ηλεκτρικού πεδίου αυξάνονται με τον αριθμό των φωτονίων. Επιπλέον για τη θεμελιώδη κατάσταση $|0\rangle$ ($n = 0$), το ηλεκτρικό πεδίο χαρακτηρίζεται από διακυμάνσεις απουσία φωτονίων. Συνεπώς, στο κενό εμπεριέχεται ενέργεια και οι διακυμάνσεις των πεδίων πυροδοτούν την αυθόρμητη εκπομπή των κβαντικών εκπομπών. Οι διακυμάνσες του κενού είναι υπεύθυνες και για άλλα πολλά φαινόμενα της κβαντικής οπτικής, όπως η μετατόπιση Lamb στα ενεργειακά επίπεδα του ατόμου του υδρογόνου, η ακτινοβολία μέλανος σώματος, οι δυνάμεις Casimir - van der Waals, κ.α.

3.3 Cavity QED

Ένα φυσικό σύστημα τείνει να καταλήγει στην μικρότερη ενεργειακή κατάσταση, την θεμελιώδη κατάσταση. Η αυθόρμητη εκπομπή ενός κβαντικού εκπομπού, όπως ενός ατόμου ή μορίου ή κβαντικής τελείας, είναι η διαδικασία κατά την οποία εκπέμπεται ένα φωτόνιο κατά την μετάπτωση από ένα επίπεδο ενέργειας σε κατώτερο επίπεδο ενέργειας όπως η θεμελιώδης κατάσταση, χωρίς την παρουσία προσπίπτοντος πεδίου. Η αποδιέγερση ενός ατόμου μπορεί να συμβεί και χωρίς εκπομπή φωτονίου, όπως για παράδειγμα σε μεταπτώσεις δονητικών ενεργειακών σταθμών. Η θεωρία του Einstein για την αυθόρμητη εκπομπή δηλώνει πως ο ρυθμός εκπομπής και απορρόφησης φωτονίων από το ατόμο έχει τυχαίο χαρακτήρα και καθορίζεται από τους λεγόμενους συντελεστές Einstein βάσει πιθανοτήτων. Το άτομο απορροφά ή εκπέμπει ένα φωτόνιο ενέργειας ίσης με τη διαφορά των ενεργειακών του σταθμών

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \hbar\omega_0 \tag{3.40}$$

και μεταβαίνει στην αντίστοιχη ενεργειακή κατάσταση που επιβάλλει η αρχή διατήρησης ενέργειας. Η συχνότητα

$$\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \tag{3.41}$$

καλείται συχνότητα μετάβασης. Παρ΄ όλα αυτά, η αυθόρμητη εκπομπή είναι εφικτό να εξηγηθεί ακριβέστερα μέσω της αλληλεπίδρασης των ατόμων με εικονικά φωτόνια των ΗΜ πεδίων του κενού.

Η ανακάλυψη του Planck για το διακριτό φάσμα ενεργειών που αντιστοιχεί στο μέλαν σώμα είναι συνυφασμένη με τις κοιλότητες της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής. Οι συνοριακές συνθήκες που επιβάλλουν τα τοιχώματα της κοιλότητας προκαλούν κβάντωση του ΗΜ πεδίου σε συγκεκριμένες διακριτές ιδιοσυχνότητες. Μέσω των κοιλοτήτων είναι εφικτό να ενισχυθεί η αλληλεπίδραση φωτός-ύλης και να τροποποιηθεί ο ρυθμός της αυθόρμητης εκπομπής των ατόμων που βρίσκονται στην οπτική κοιλότητα, όταν η συχνότητα αποδιέγερσης του ατόμου ταυτίζεται με τις συχνότητες των διαθέσιμων φωτονικών καταστάσεων που προσφέρει η κοιλότητα. Ακόμα, κοιλότητες θεωρούνται στη Cavity QED και σωμάτια όπου παγιδεύουν το φως στις επιφανειές τους μέσω πλασμονικών ή πολαριτονικών διεγέρσεων. Η αλληλεπίδραση φωτός-ύλης σε οπτικές κοιλότητες χωρίζεται σε δύο κύριες κατηγορίες, στην ασθενή σύζευξη (weak coupling) και στην ισχυρή σύζευξη (strong coupling).

3.3.1 Κβαντικοί εκπομποί σε οπτικές κοιλότητες

Για να μελετηθεί η χρονική εξέλιξη ενός κβαντικού συστήματος δύο επιπέδων, το οποίο αλληλεπιδρά με φως συχνότητας ω, χρειάζεται να λυθεί πρώτα από όλα η εξίσωση Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}. \tag{3.42}$$

Μέσω της θεωρίας διαταραχών είναι εφικτό να γραφτεί η Χαμιλτονιανή του συστήματος ως

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + \hat{V}(t), \tag{3.43}$$

με τον όρο $\hat{H}_0(\mathbf{r})$ να αποτελεί την αδιατάρακτη Χαμιλτονιανή και τον όρο $\hat{V}(t)$ να αντιστοιχεί στην διαταραχή του συστήματος λόγω της αλληλεπίδρασής του με το φως. Η κυματοσυνάρτηση του συστήματος που πηγάζει από την λύση του αδιατάρακτου συστήματος θα έχει την μορφή

$$\Psi(\mathbf{r},t) = c_1(t)\psi_1(\mathbf{r})e^{-i\frac{E_1 t}{\hbar}} + c_1(t)\psi_2(\mathbf{r})e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}. \tag{3.44}$$

Αντικαθιστώντας την λύση για το αδιατάρακτο μέρος της Χαμιλτονιανής στην εξίσωση (3.43) προκύπτει

$$\dot{c}_1(t) = -\frac{i}{h}\Big(c_1(t)V_{11} + c_2(t)V_{21}e^{-i\omega_0 t}\Big), \tag{3.45}$$

$$\dot{c}_2(t) = -\frac{i}{h}\Big(c_1(t)V_{21}e^{i\omega_0 t} + c_2(t)V_{22}\Big), \tag{3.46}$$

όπου ισχύει

$$V_{11}(t) = \langle 1| \hat{V}(t) |1\rangle = \int \psi_1^* \hat{V}(t) \psi_1 d\mathbf{r} \tag{3.47}$$

$$V_{12}(t) = \langle 1| \hat{V}(t) |2\rangle = \int \psi_1^* \hat{V}(t) \psi_2 d\mathbf{r} \tag{3.48}$$

$$V_{21}(t) = \langle 1| \hat{V}(t) |1\rangle = \int \psi_2^* \hat{V}(t) \psi_1 d\mathbf{r} \tag{3.49}$$

$$V_{22}(t) = \langle 1| \hat{V}(t) |1\rangle = \int \psi_2^* \hat{V}(t) \psi_2 d\mathbf{r}. \tag{3.50}$$

Στην ημι-κλασική προσέγγιση, αξιοποιείται η σχέση για ηλεκτρικό δίπολο σε ηλεκτρικό πεδίο (2.20) όπου θεωρούμε πολωμένο ηλεκτρικό πεδίο κατά τον άξονα z με πλάτος έντασης E_0

$$\mathbf{E_0}(t) = E_0 \cos(\omega t) \hat{z}. \tag{3.51}$$

Η διαταραχή καταλήγει στη σχέση

$$\hat{V}(t) = d \cdot E_0 \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}. \tag{3.52}$$

Τα στοιχεία του πίνακα της διαταραχής γράφονται ως

$$V_{ij}(t) = eE_0 \Big(\frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}\Big) \int \psi_i^* z \psi_j^* d^3\mathbf{r}, \tag{3.53}$$

όπου $\{i, j\} = 1, 2$. Επιπλέον, αν ο ατομικός διπολικός πίνακας γραφτεί ως

$$d_{ij} = -e \int \psi_i^* z \psi_j^* d^3\mathbf{r} = -e \langle i| z |j\rangle \tag{3.54}$$

τότε η σχέση (3.53) καταλήγει στη παρακάτω μορφη:

$$V_{ij}(t) = eE_0 \Big(\frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}\Big) d_{ij}. \tag{3.55}$$

Για τα στοιχεία d_{ij} ισχύουν τα εξής: Έστω για παράδειγμα ότι ένα δισταθμικό άτομο είναι στη κατάσταση $|1\rangle$ και η χρονική εξέλιξη της κατάστασης του απουσία πεδίων είναι $|1\rangle (t) = e^{-i\omega_0 t} |1\rangle$. Τότε οι αναμενόμενες τιμές του διπολικού τελεστή θα είναι

$$\mathbf{d}(t) = \langle 1| e^{i\omega_0 t} \hat{\mathbf{d}} e^{-i\omega_0 t} |1\rangle = \langle 1| \hat{\mathbf{d}} |1\rangle = -e \langle 1| \hat{\mathbf{r}} |1\rangle, \tag{3.56}$$

$$-e \langle 1| \hat{\mathbf{r}} |1\rangle = -e \langle 1| \hat{P} \hat{P}^{-1} \hat{\mathbf{r}} \hat{P} \hat{P}^{-1} |1\rangle = +e \langle 1| \hat{\mathbf{r}} |1\rangle, \tag{3.57}$$

όπου $\hat{P}$ είναι ο τελεστής αντιστροφής χώρου (parity operator) για τον οποίο ισχύουν οι παρακάτω ιδιότητες:

1. $\hat{P}^2\psi(x) = \hat{P}\psi(-x) = \psi(x)$

2. $\hat{P}\hat{P}^{-1} = \mathbb{I}$

3. $\hat{P}\hat{\mathbf{r}}\hat{P}^{-1} = -\hat{\mathbf{r}}$

Για να ισχύουν ταυτόχρονα οι σχέσεις για την αναμενόμενη τιμή του τελεστή θέσης, θα πρέπει

$$\langle 1|\, \hat{\mathbf{r}}\, |1\rangle = 0. \tag{3.58}$$

Το ίδο αποτέλεσμα ισχύει και για την υπόθεση που αφορά την κατάσταση $|2\rangle$:

$$\langle 2|\, \hat{\mathbf{r}}\, |2\rangle = 0. \tag{3.59}$$

Συνεπώς, το σύστημα είναι συμμετρικό ως προς το κέντρο του και δεν υπάρχουν μόνιμα δίπολα. Επίσης, ισχύει ότι $d_{12} = d_{21}$ διότι τα συγκεκριμένα στοιχεία είναι συνυφασμένα με παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη ($d_{12} = d_{21}^*$).

Τελικά, καταλήγουμε στις εξισώσεις που προσδιορίζουν τη χρονική εξέλιξη του ατόμου σε ηλεκτρικό πεδίο:

$$\dot{c}_1(t) = i\frac{E_0 d_{12}}{2\hbar}\Big(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t}\Big)c_2(t), \tag{3.60}$$

$$\dot{c}_2(t) = i\frac{E_0 d_{12}}{2\hbar}\Big(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t}\Big)c_1(t). \tag{3.61}$$

Ο όρος $\delta\omega = \omega - \omega_0$ καλείται συχνότητα αποσυντονισμού. Ορίζοντας την συχνότητα Rabi ως

$$\Omega_R = \frac{E_0 d_{12}}{\hbar}, \tag{3.62}$$

καταλήγουμε στις παρακάτω εξισώσεις:

$$\dot{c}_1(t) = \frac{i}{2}\Omega_R\Big(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t}\Big)c_2(t), \tag{3.63}$$

$$\dot{c}_2(t) = \frac{i}{2}\Omega_R\Big(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t}\Big)c_1(t). \tag{3.64}$$

Η συχνότητα Rabi χαρακτηρίζει το μέτρο της αλληλεπίδρασης του φωτός με την ύλη σε κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων.

Συνήθως στην κβαντική οπτική εφαρμόζεται η προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος (Rotating Wave Approximation) κατά την οποία θεωρείται πως σε περιπτώσεις πεδίων που αντιστοιχούν σε συχνότητα πλησίον της συχνότητας συντονισμού του ατόμου, δηλαδή $\delta\omega \to 0$, ο όρος $\omega+\omega_0$ είναι πολύ μεγαλύτερος από τον όρο της συχνότητα αποσυντονισμού $\omega - \omega_0$. Για το λόγο αυτό μηδενίζονται οι αντίστοιχοι όροι λόγω της πολύ γρήγορης ταλάντωσης τους συγκριτικά με τους όρους που έχουν ως εκθετικό τη συχνότητα αποσυντονισμού.

Στην περίπτωση που το ηλεκτρικό πεδίο είναι χαμηλής έντασης, η διαταραχή είναι μικρή και η αλληλεπίδραση του φωτός με την ύλη θα ανήκει στο όριο της ασθενούς σύζευξης. Στην ασθενή σύζευξη, υποθέτωντας ως αρχική συνθήκη ότι όλος ο πληθυσμός είναι στη κατάσταση $|1\rangle$ που σημαίνει $c_1(0) = 1$, $c_2(0) = 0$, οι ατομικές μεταβάσεις θα είναι αμελητέες και οι εξισώσεις (3.63, 3.64) προσεγγιστικά καταλήγουν στη μορφή:

$$\dot{c}_1(t) = 0, \tag{3.65}$$

$$\dot{c}_2(t) = \frac{i}{2}\Omega_R\Big(e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{i(\omega+\omega_0)t}\Big), \tag{3.66}$$

όπου θεωρήθηκε $c_1(t) \approx 1$, $c_2(t) \approx 0$ για όλες τις χρονικές στιγμές. Με βάση τα παραπάνω και λαμβάνοντας υπόψιν την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος, η πιθανότητα του ατόμου να βρεθεί στην κατάσταση $|2\rangle$ καθορίζεται από την εξίσωση:

$$|c_2(t)|^2 = \Big(\frac{\Omega_R}{2}\Big)\left(\frac{\frac{\sin\delta\omega t}{2}}{\frac{\delta\omega}{2}}\right) \tag{3.67}$$

Αν η συχνότητα αποσυντονισμού $\delta\omega \to 0$ τότε καταλήγουμε στη παρακάτω εξίσωση που δηλώνει την μη γραμμική αύξηση της πιθανότητας της μετάβασης του ατόμου στην κατάσταση $|2\rangle$ συναρτήσει του χρόνου:

$$|c_2(t)|^2 = \Big(\frac{\Omega_R}{2}\Big)t^2. \tag{3.68}$$

Όταν η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου είναι υψηλή, τότε επάγεται ισχυρή αλληλεπίδραση ύλης-φωτός και ο πληθυσμός της κατάστασης $|2\rangle$ δεν είναι αμελητέος. Όπως και προηγουμένως, με τις ίδιες αρχικές συνθήκες, με τη χρήση της προσέγγισης περιστρεφόμενου κύματος και για $\delta\omega = 0$ προκύπτει

$$\dot{c}_1(t) = \frac{i}{2}\Omega_R c_2(t), \tag{3.69}$$

$$\dot{c}_2(t) = \frac{i}{2}\Omega_R c_1(t). \tag{3.70}$$

Οι λύσεις των παραπάνω εξισώσεων δίνουν τις σχέσεις

$$c_1(t) = \cos\Big(\frac{\Omega_R t}{2}\Big), \tag{3.71}$$

$$c_2(t) = i\sin\Big(\frac{\Omega_R t}{2}\Big), \tag{3.72}$$

από τις οποίες προσδιορίζονται τα αντίστοιχα πλάτη πιθανοτήτων

$$|c_1(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right), \tag{3.73}$$

$$|c_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right). \tag{3.74}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις δηλώνουν το φαινόμενο των ταλαντώσεων Rabi (Rabi oscillations), λόγω της ταλαντωτικής μορφής που λαμβάνουν. Ουσιαστικά ο πληθυσμός των καταστάσεων εναλλάσσεται με περιοδικό τρόπο που χαρακτηρίζεται από τη γωνιακή συχνότητα $\frac{\Omega_R}{2\pi}$. Πρέπει να τονιστεί πως τα προαναφερθέντα ισχύουν μόνο όταν αμελούνται διαδικασίες απόσβεσης.

Από την ημικλασσική προσέγγιση (διπολική προσέγγιση) ισχύει ότι η αλληλεπίδραση ατόμου-φωτός μεταξύ ηλεκτρικού διπόλου και του ηλεκτρικού πεδίου του φωτός δίνεται από τη σχέση (2.20). Επομένως, η ενέργεια αλληλεπίδρασης του ατόμου και του κενού στη κοιλότητα θα είναι

$$\Delta E = |d_{12} E_{vac}|. \tag{3.75}$$

Θέτοντας $\Delta E = \hbar g_0$ προκύπτει η λεγόμενη σταθερά σύζευξης στην Cavity QED:

$$g_0 = \sqrt{\frac{d_{12}^2 \omega}{2\hbar \epsilon_0 \Omega}}, \tag{3.76}$$

όπου Ω ο όγκος της κοιλότητας.

Σε οπτικές κοιλότητες θεωρείται πως το ατόμο εκπέμπει φωτόνια μέσω αυθόρμητης εκπομπής και απορροφά φωτόνια από τις διαθέσιμες φωτονικές καταστάσεις. Ο σκοπός είναι να επιτευχθεί σύζευξη του ατόμου με καταστάσεις που αντιστοιχούν στη συχνότητα αποδιέγερσης του και με αυτό το τρόπο το άτομο να ανταλάσσει φωτόνια με τη κοιλότητα συντονισμένα. Στο όριο της ασθενούς σύζευξης για τη σταθερά σύζευξης ατόμου-κοιλότητας ισχύει

$$g_0 << (\kappa, \gamma) \tag{3.77}$$

όπου κ χαρακτηρίζει το ρυθμό αποδιέγερσης καναλιών της κοιλότητας και ορίζεται ως

$$\kappa = \frac{\omega}{Q}. \tag{3.78}$$

Ο όρος Q καλείται παράγοντας ποιότητας και ισούται με

$$Q = \frac{\omega}{\Delta\omega}, \tag{3.79}$$

με $\Delta\omega$ να χαρακτηρίζει το πλάτος εύρους των συχνοτήτων συντονισμού για τις διαθέσιμες φωτονικές καταστάσεις στην κοιλότητα. Ακόμα, το γ αφορά το ρυθμό αποδιέγερσης σε φωτονικές καταστάσης εκτός κοιλότητας. Σε αυτή τη περίπτωση επικρατούν μαρκοβιανά φαινόμενα καθώς η εκπομπή φωτονίων είναι μη αντιστρεπτή διαδικασία, όπως η αυθόρμητη εκπομπή στο κενό.

Στο όριο της ασθενούς σύζευξης για τη σταθερά σύζευξης ατόμου-κοιλότητας ισχύει

$$g_0 >> (\kappa, \gamma) \tag{3.80}$$

και η αλληλεπίδραση ατόμου-φωτός είναι πιο γρήγορη από τις διαδικασίες που είναι συνυφασμένες με διαφυγή φωτονίων από τις φωτονικές καταστάσεις της κοιλότητας. Η ισχυρή σύζευξη έχει ως αποτέλεσμα να εμφανίζονται μη Μαρκοβιανά φαινόμενα [34], δηλαδή αντιστρεπτές διαδικασίες. Ειδικότερα, η διαδικασία εκπομπής φωτονίου από το άτομο είναι μη μαρκοβιανή, διότι το εκπεμπόμενο φωτόνιο απορροφάται από το άτομο ξανά πριν να διαφύγει από την κοιλότητα.

3.3.2 Μοντέλο Jaynes-Cummings

Η αυθόρμητη εκπομπή είναι ένα αμιγώς κβαντικό φαινόμενο, καθώς εξαρτάται από την σύζευξη του κβαντικού εκπομπού με τις διακυμάνσεις των ΗΜ πεδίων στο κενό. Αν δεν ληφθεί υπόψιν η σύζευξη ενός ατόμου με το ΗΜ πεδίο στο κενό, τότε θα παρέμενε σε διεγερμένη κατάσταση για πάντα, διότι αποτελεί ιδιοκατάσταση της Χαμιλτονιανής του. Σύμφωνα με τη QED, το ΗΜ πεδίο στο κενό δεν είναι μηδενικό, διότι έχει διακυμάνσεις, αλλά η μέση τιμή του είναι μηδενική. Μέχρι τώρα έχει χρησιμοποιηθεί ημικλασσική προσέγγιση επειδή χρησιμοποιήθηκαν οι εξισώσεις του Maxwell για την κβάντωση του ΗΜ πεδίου (κβαντισμένα ΗΜ κύματα). Ωστόσο, για να εξηγηθούν πλήρως πολλά φαινόμενα, όπως η αυθόρμητη εκπομπή στην οποία βασίζεται η παρούσα εργασία, απαιτείται η παρακάτω κβαντική προσέγγιση.

Η πρώτη περιγραφή αλληλεπίδρασης ατόμου και ΗΜ καταστάσεων κοιλότητας πραγματοποιήθηκε το 1963 από τους Jaynes-Cummings. Το μοντέλο Jaynes-Cummings υποστηρίζει πως για άτομο με δύο ενεργειακές καταστάσεις, την θεμελιώδη κατάσταση $|g\rangle$ και την διεγερμένη κατάσταση $|e\rangle$ με συχνότητα μεταβίβασης ω_0, δηλαδή κβαντικό σύστημα δύο επιπέδων, σε οπτική κοιλότητα με διαθέσιμες ΗΜ κατάστασεις μοναδικής συχνότητας ω (single mode), η μη συζευγμένη Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης ατόμου-πεδίου θα είναι

$$\hat{H}_{photon} + \hat{H}_{atom} = \hbar\omega_0 |e\rangle\langle e| + \hbar\omega(\alpha^\dagger\alpha + \frac{1}{2}). \tag{3.81}$$

Η Χαμιλτονιανή που εκφράζει την αλληλεπίδραση ατόμου-πεδίου στη διπολική προσέγγιση είναι

$$\hat{H}_{int} = -\mathbf{d}\cdot\mathbf{E} = \hbar g(\hat{\sigma}\alpha^{\dagger} + \hat{\sigma}^{\dagger}\alpha), \tag{3.82}$$

με τον ατομικό διπολικό τελεστή να ορίζεται ως

$$\hat{\mathbf{d}} = \langle g|\hat{\mathbf{d}}|e\rangle\Big(\,|g\rangle\langle e| + |e\rangle\langle g|\,\Big) = \mathbf{d}_{ge}(\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^{\dagger}). \tag{3.83}$$

Στην σχέση (3.83) ο όρος $\hat{\sigma} = |g\rangle\langle e|$ καλείται τελεστής καταβίβασης του κβαντικού εκπομπού, ο όρος $\hat{\sigma^{\dagger}} = |e\rangle\langle g|$ καλείται τελεστής αναβίβασης του κβαντικού εκπομπού και ο όρος $\mathbf{d}_{ge}$ είναι το διπολικό στοιχείο πίνακα της ατομικής μετάπτωσης που εκφράζει την μετάτπωση μεταξύ των καταστάσεων $|g\rangle, |e\rangle$. Επιπλέον, μέσω των συναρτήσεων $f(r)$, οι οποίες περιγράφουν τις κανονικοποιημένες ΗΜ καταστάσεις της κοιλότητας συντονισμού, το ηλεκτρικό πεδίο γράφεται ως

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = -\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0}}\Big(\mathbf{f}(\mathbf{r})a(t) + \mathbf{f}^{*}(\mathbf{r})a^{\dagger}(t)\Big), \tag{3.84}$$

και η Χαμιλτονιανή για την αλληλεπίδραση θα είναι

$$\begin{aligned}\hat{H}_{int} &= -\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0}}(\sigma + \sigma^{\dagger})\Big(\mathbf{f}(\mathbf{r})a + \mathbf{f}^{*}(\mathbf{r})a^{\dagger}\Big)\\ &= \hbar(\sigma + \sigma^{\dagger})\Big(g(\mathbf{r})a + g^{*}(\mathbf{r})a^{\dagger}\Big).\end{aligned} \tag{3.85}$$

Ο όρος g είναι η σταθερά σύζευξης και ισούται με

$$g = -\hat{\epsilon}\mathbf{d}_{ge}\sqrt{\frac{\omega}{2\epsilon_0\hbar\Omega}}, \tag{3.86}$$

όπου $\hat{\epsilon}$ είναι το διάνυσμα πόλωσης του πεδίου και αντιστοιχεί στο σημείο που βρίσκεται το άτομο. Επιλέγοντας την κατάλληλη φάση, για οποιοδήποτε σημείο στο χώρο, η σταθερά σύζευξης είναι θετική και λαμβάνει πραγματική τιμή που σημαίνει πως ισχύει

$$g(\mathrm{r}) = g^{*}(\mathrm{r}) = g. \tag{3.87}$$

και λαμβάνοντας υπόψιν την προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος, οι όροι $\sigma\alpha, \sigma^{\dagger}\alpha^{\dagger}$ θεωρούνται αμελητέοι.

Τελικά, για κβαντικό εκπομπό δύο επιπέδων με θεμελιώδη κατάσταση $|g\rangle$, διεγερμένη κατάσταξση $|e\rangle$ και συχνότητα μεταβίβασης ω_0, ο οποίος έχει διαθέσιμη ΗΜ καταστάση συχνότητας ω, περιγράφεται από την Χαμιλτονιανή Jaynes-Cummings:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_{photon} + \hat{H}_{atom} + \hat{H}_{int}\\ &= \hbar\omega\hat{\alpha}^{\dagger}\hat{\alpha} + \hbar\omega_0\hat{\sigma}^{\dagger}\hat{\sigma} + \hbar g(\hat{\sigma}\hat{\alpha}^{\dagger} + \hat{\sigma}^{\dagger}\hat{\alpha}).\end{aligned} \tag{3.88}$$

Γενικότερα, η περιγραφή αλληλεπίδρασης φωτός και ατόμων πολλών ενεργειακών σταθμών, πραγματοποιείται εφαρμόζοντας την προσέγγιση ατόμων δύο επιπέδων (δισταθμικά άτομα), δηλαδή το άτομο αλληλεπιδρά με φωτόνια συχνότητας που ταυτίζεται με διαφορά δύο συγκεκριμένων ενεργειακών καταστάσεων, αμελώντας τις μεταβιβάσεις που αντιστοιχούν στις υπόλοιπες ενεργειακές καταστάσεις.

3.3.3 Αυθόρμητη εκπομπή

Για την αναλυτική φυσική ερμηνεία της αυθόρμητης εκπομπής απαιτείται η περιγραφή της σύζευξης του κβαντικού εκπομπού με το κενό μέσω της προσέγγισης των Wigner-Weisskopf. Θεωρείται η γενικότερη περίπτωση όπου, στην υπό μελέτη οπτική κοιλότητα, βρίσκεται ένας κβαντικός εκπομπός και υπάρχει μεγάλος αριθμός διαθέσιμων φωτονικών καταστάσεων. Τελικά, για κβαντικό εκπομπό δύο επιπέδων με θεμελιώδη κατάσταση $|g\rangle$, διεγερμένη κατάσταση $|e\rangle$ και συχνότητα μεταβίβασης ω_0, ο οποίος έχει διαθέσιμες ΗΜ καταστάσεις από το φωτονικό του περιβάλλον για συχνότητες $\omega_{\mathbf{k}}$, η Χαμιλτονιανή του συστήματος θα είναι η εξής:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_{photon} + \hat{H}_{atom} + \hat{H}_{int} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{\mathbf{k}}(\hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{\alpha_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{2}) + \hbar\omega_0\hat{\sigma}^{\dagger}\hat{\sigma} + \sum_{\mathbf{k}} \hbar g_{\mathbf{k}}(\hat{\sigma}\hat{\alpha_{\mathbf{k}}}^{\dagger} + \hat{\sigma}^{\dagger}\hat{\alpha_{\mathbf{k}}}),\end{aligned} \tag{3.89}$$

όπου $\hat{\alpha_{\mathbf{k}}}, \hat{\alpha}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ είναι οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής για φωτόνια που αντιστοιχούν στην κατάσταση $\mathbf{k}$. Συγκεκριμένα, ο όρος $\hat{\sigma}^{\dagger}\hat{\alpha_{\mathbf{k}}}$ περιγράφει την απορρόφηση ενός φωτονίου και οδήγηση του ατόμου στην διεγερμένη κατάσταση, ενώ ο συζυγής όρος αντιστοιχεί στην αντίστορφη διαδικασία, δηλαδή την αποδιέγερση του ατόμου. Ο συντελεστής σύζευξης του κβαντικού εκπομπού και των διαθέσιμων ΗΜ καταστάσεων ισούται με

$$g_{\mathbf{k}}(\mathbf{r_0}) = \frac{i\mathbf{d}}{\hbar}\hat{\mathbf{E}}_{\mathbf{k}}^{*}(\mathbf{r_0}), \tag{3.90}$$

όπου $\mathbf{r_0}$ είναι η θέση του κβαντικού εκπομπού.

Για ασθενή αλληλεπίδραση ύλης-φωτός (weak coupling), εφαρμόζοντας τον χρυσό κανόνα του Fermi (Fermi Golden Rule)[33], ο ρυθμός αποδιέγερσης ενός κβαντικού εκπομπού υπολογίζεται ως

$$\Gamma = \frac{dP_{e\rightarrow g}}{dt} = 2\pi\frac{|\langle \mathbf{d_{ge}} \cdot \mathbf{E}\rangle|^2}{\hbar^2}\rho(\omega) = 2\pi g^2(\omega)\rho(\omega), \tag{3.91}$$

όπου $dP_{e\rightarrow g}$ είναι η πιθανότητα μετάπτωσης του ατόμου στην θεμελιώδη κατάσταση. $\rho(\omega)$ είναι η πυκνότητα καταστάσεων η οποία δηλώνει τον αριθμό των καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας με συχνότητα ω που είναι δυνατόν να καταλήξει το άτομο κατά την αποδιέγερσή του, λαμβάνοντας υπόψιν και διεύθυνση της διπολικής μετάπτωσης σε σχέση με την πόλωση των καταστάσεων. Εντούτοις, ο χρυσός κανόνας του Fermi ισχύει για μικρά χρονικά διαστήματα, καθώς δεν λαμβάνεται υπόψιν ότι ο αρχικός πληθυσμός της διεγερμένης κατάστασης φθίνει εκθετικά με την πάροδο του χρόνου. Ο προσδιορισμός του ρυθμού αποδιέγερσης για μεγαλύτερα χρονικά διαστήματα, επιτυχώς πραγματοποιείται μέσω της θεωρίας που αναπτύχθηκε το 1930 από τους Weisskopf και Wigner [35] και για τον κενό χώρο προκύπτει ως εξής:

$$\Gamma_0 = \frac{\omega^3 d_{ge}^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3}. \tag{3.92}$$

Ο όρος $\hbar\omega$ είναι η ενεργειακή διαφορά μεταξύ των δύο ενεργειακών επιπέδων κατά την αποδιέγερση του εκπομπού μέσω ενός φωτονίου με ενέργεια ίση με την προαναφερθείσα διαφορά. Ο παραπάνω ρυθμός εκπομπής είναι αντιστρόφως ανάλογος του χρόνου ζωής της διεγερμένης κατάστασης του εκπομπού, ο οποίος ορίζεται ως

$$\tau = \frac{1}{\Gamma}. \tag{3.93}$$

Η θεωρία των Weisskopf και Wigner για εκπομπό παρουσία φωτονικού περιβάλλοντος, υποστηρίζει πως ο ρυθμός αυθόρμητης εκπομπής τροποποιείται ως

$$\Gamma = \frac{2\pi d_{ge} E_0^2}{\hbar^2}\rho(\omega), \tag{3.94}$$

όπου E_0 είναι το ηλεκτρικό πεδίο που πηγάζει από ένα φωτόνιο, ακριβώς στην θέση του εκπομπού.

3.4 Τανυστής Green

Οι συναρτήσεις Green [17] αποτελούν μια αποτελεσματική και χρήσιμη μέθοδο επίλυσης διαφορικών εξισώσεων, όπως της κυματικής εξίσωσης σε ΗΜ προβλήματα. Οι περισσότερες θεωρητικές προσεγγίσεις για αλληλεπίδραση φωτόςύλης απαιτούν την γνώση του τανυστή Green. Ο τανυστής Green $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ στην ηλεκτροδυναμική απεικονίζει στη θέση $\mathbf{r}$ το ηλεκτρικό πεδίο $\mathbf{E}$ που έχει ως αίτιο ηλεκτρικό δίπολο-σημειακή πηγή, με διπολική ροπή $\mathbf{d}$, που βρίσκεται στη θέση $\mathbf{r}'$ και ισχύει

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2 \mu_0 \mu \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\mathbf{d}. \tag{3.95}$$

Ο υπολογισμός του τανυστή Green εμπεριέχει απαιτητικούς αριθμητικούς υπολογισμούς, ειδικά για μη τετριμμένες γεωμετρίες και ανισότροπα υλικά, αλλά με την ανάκτησή του συνεπάγεται η δυνατότητα υπολογισμού του ρυθμού αποδιέγερσης ενός κβαντικού εκπομπού[37].

Η κυματική εξίσωση Helmholtz για αρμονικά ταλαντευόμενο ηλεκτρικό δίπολο θα είναι

$$\mathbf{\nabla} \times \mathbf{\nabla} \times \mathbf{E} - \mathbf{k^2 E} = \mathbf{d}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_0}) \tag{3.96}$$

και περιγράφει την απόκριση του συστήματος στην σημειακή πηγή, δηλαδή την εκπεμπόμενη ακτινοβολία που πηγάζει από το ηλεκτρικό δίπολο. Το ηλεκτρικό πεδίο στον χώρο προκύπτει [10] ότι είναι

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E_0}(\mathbf{r}) + \int \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'})\mathbf{d}\delta(\mathbf{r}^{'} - \mathbf{r_0})d\mathbf{r}^{'}. \tag{3.97}$$

Η σχέση (3.97) δηλώνει ότι το ολικό ηλεκτρικό πεδίο στο χώρο θα είναι το άθροισμα της ομογενούς λύσης (ηλεκτρικό πεδίο στο κενό) και της συνέλιξης της συνάρτησης Green με τη διπολική ροπή. Η σχέση (3.97) μεταξύ του ηλεκτρικού πεδίου και της διπολικής ροπής εκφράζεται μέσω της τανυστικής μορφής της συνάρτησης Green

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'}) = \begin{bmatrix} G_{xx} & G_{xy} & G_{xz} \\ G_{yx} & G_{yy} & G_{yz} \\ G_{zx} & G_{zy} & G_{zz} \end{bmatrix}. \tag{3.98}$$

Συγκεκριμένα η αναγωγή του διανύσματος του ηλεκτρικού πεδίου μέσω του τανυστή Green θα έχει τη μορφή

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{xx} & G_{xy} & G_{xz} \\ G_{yx} & G_{yy} & G_{yz} \\ G_{zx} & G_{zy} & G_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_x \\ d_y \\ d_z \end{bmatrix} \tag{3.99}$$

όπου d_x, d_y, d_z είναι οι συνιστώσες της διπολικής ροπής του ηλεκτρικού διπόλου και $G_{ij}(\mathbf{r}, \mathbf{r_0})$ είναι η συνιστώσα i του ηλεκτρικού πεδίου στο σημείο $\mathbf{r}$ που προκύπτει λόγω ηλεκτρικού διπόλου στην θέση $\mathbf{r_0}$ με διεύθυνση διπολικής ροπής κατά τον άξονα j. Για παράδειγμα, για ηλεκτρικό δίπολο με διεύθυνση διπολικής ροπής $\mathbf{d} = d_x\hat{\mathbf{x}}$ θα ισχύει

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'}) = \mathbf{G_x} = \begin{bmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{xx} \\ G_{yx} \\ G_{zx} \end{bmatrix}. \tag{3.100}$$

Για αρμονικά πεδία το μαγνητικό πεδίο θα είναι ανάλογο του στροβιλισμού του ηλεκτρικού πεδίου σύμφωνα με την εξίσωση του Maxwell (2.1).

Για την εύρεση του τανυστή Green σε ομογενές περιβάλλον λύνεται η κυματική εξίσωση

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{G} - \mathbf{k^2}\mathbf{G} = \mathbb{I}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_0}), \tag{3.101}$$

με $\mathbb{I}$ να συμβολίζει τον ταυτοτικό πίνακα και $\mathbf{k}$ να εμπεριέχει τις πληροφορίες σχετικά με την ηλεκτρική και μαγνητική διαπερατότητα του υλικού. Ο τανυστής Green θα έχει την μορφή

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r_0}) = (\mathbb{I} + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{k^2}}\nabla \otimes \nabla)\mathbf{G_0}(\mathbf{r}, \mathbf{r_0}) \tag{3.102}$$

όπου

$$\nabla \otimes \nabla = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x^2} & \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \\ \frac{\partial^2}{\partial y \partial y} & \frac{\partial^2}{\partial y^2} & \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} & \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} & \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{bmatrix} \tag{3.103}$$

και

$$\mathbf{G_0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \tag{3.104}$$

Για ομογενές περιβάλλον ο τανυστής Green σε καρτεσιανές συντεταγμένες λαμβάνει τη μορφή

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r_0}) = \frac{exp(ikR)}{4\pi R}\Big[\Big(1 + \frac{ikR - 1}{R^2k^2}\Big)\mathbb{I} + \frac{3 - 3ikR - k^2R^2}{k^2R^2}\frac{\mathbf{R} \otimes \mathbf{R}}{R^2}\Big], \tag{3.105}$$

όπου $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r_0}$ και $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r_0}|$.

Από την σχέση (3.105) είναι εφικτό να υπολογιστεί αναλυτικά το ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται από ηλεκτρικό δίπολο, το οποίο βρίσκεται στο σημείο $\mathbf{r} = \mathbf{r_0}$ με αυθαίρετα ορισμένη διεύθυνση διπολικής ροπής, σε οποιοδήποτε σημείο στο χώρο. Με βάση τα παραπάνω αποδεικνύεται [26] πως η εκπεμπόμενη ακτινοβολία ενός αρμονικά ταλαντευόμενου ηλεκτρικού διπόλου σε ομογενές περιβάλλον υπολογίζεται ολοκληρώνοντας το διάνυσμα Poynting $\mathbf{S}(t)$ σε κλειστή επιφάνεια που περικλείει το ηλεκτρικό δίπολο

$$P(t) = \int_{\partial V} \mathbf{S} \cdot da = \frac{2n^3}{4\pi\epsilon\epsilon_0 3c^3}\left(\frac{d^2|\mathbf{d}^2|}{dt^2}\right)^2 \tag{3.106}$$

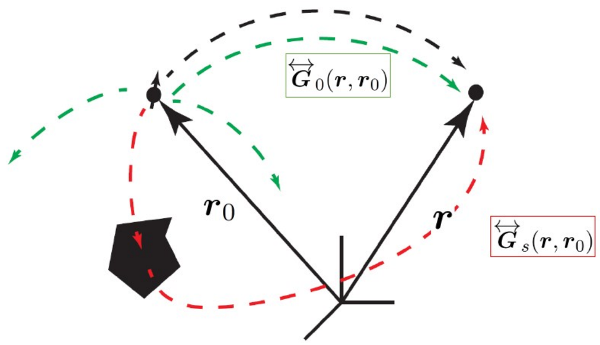
ενώ η μέση τιμή της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας του υπολογίζεται ολοκληρώνοντας τη μέση χρονική τιμή του διανύσματος Poynting. Άρα η μέση εκπεμπόμενη ισχύς (2.26) μέσω του τανυστή Green ορίζεται ως

$$\overline{P} = \frac{\omega^3|\mathbf{d}|^2}{2c^2\epsilon_0\epsilon}\Big[\mathbf{n_d} \cdot Im\{\mathbf{G}(\mathbf{r_0}, \mathbf{r_0})\} \cdot \mathbf{n_d}\Big]. \tag{3.107}$$

Τελικά, υπολογίζεται πως η μέση εκπεμπόμενη ισχύς ισούται με

$$P = \frac{\omega^4 |\mathbf{d}^2| n^3}{12\pi\epsilon\epsilon_0 c^3}, \tag{3.108}$$

με n να συμβολίζει το δείκτη διάθλασης. Η σχέση (3.107) δηλώνει πως το φωτονικό πειρβάλλον καθορίζει την ισχύ της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας μέσω του μιγαδικού μέρους της συνάρτησης Green.



Σχήμα 3: Τανυστής Green σε μη ομογενές περιβάλλον

.

Για μη ομογενή φωτονικό περιβάλλον ο τανυστής Green, λόγω της γραμμικότητας των εξισώσεων Maxwell, γράφεται ως άθροισμα των όρων που αντιστοιχούν στη συνεισφορά του πεδίου στο κενό χώρο $\mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'})$ και του σκεδαζόμενου πεδίου από το φωτονικό περιβάλλον $\mathbf{G}_s(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'})$:

$$\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'}) = \mathbf{G}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'}) + \mathbf{G}_s(\mathbf{r}, \mathbf{r}^{'}). \tag{3.109}$$

Στην κβαντική οπτική ο τανυστής Green εκφράζει την πιθανότητα να φτάσει ένα φωτόνιο σε συγκεκριμένο σημείο για δεδομένη πηγή, συμπεριλαμβάνοντας όλα τα πιθανά γεγονότα σκέδασης.

3.5 Φωτονικές καταστάσεις

Η τοπική πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων εκφράζει τις διαθέσιμες φωτονικές καταστάσεις σε συγκεκριμένα σημεία στον χώρο και όχι τον αριθμό εκ των οποίων είναι κατειλημμένες από φωτόνια. Συγκεκριμένα, η πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων καθορίζει τον ρυθμό με τον οποίο ένα άτομο ή μόριο μεταπίπτει αυθόρμητα από μια διεγερμένη κατάσταση στη θεμελιώδη, εκπέμποντας ένα φωτόνιο. Η πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων εκφράζει το πόσο εύκολα μια οποιαδήποτε διαδικασία αποδιέγερσης μπορεί να συμβεί, εξαρτάται από την σύζευξη του κβαντικού εκπομπού με τα ΗΜ πεδία στον χώρο και πρακτικά ποσοτικοποεί τον αριθμό των διαθέσιμων ΗΜ κυμάτων μέσω των οποίων μπορεί να συμβεί εκπομπή φωτονίων. Για ακριβέστερη περιγραφή των φωτονικών καταστάσεων ορίζουμε τις ποσότητες $\rho(\omega)$, $\rho(\mathbf{r},\omega)$, $\rho(\mathbf{n_d},\mathbf{r},\omega)$.

Ο όρος $\rho(\omega)$ καλείται πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων (Density of states - DOS) και ποσοτικοποιεί τον αριθμό των διαθέσιμων φωτονικών καταστάσεων του συστήματος ανά συχνότητα και ανά όγκο και δεν εμπεριέχει πληροφορίες για την χωρική εξάρτηση των καταστάσεων.

Ο όρος $\rho(\mathbf{r},\omega)$ καλείται τοπική πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων (Local density of states - LDOS) και εκφράζει ότι η DOS και επιπλέον λαμβάνει υπόψιν και τη διαθεσιμότητα των φωτονικών καταστάσεων σε κάθε σημείο του συστήματος.

Τέλος, ο όρος $\rho(\mathbf{n_d},\mathbf{r},\omega)$ ονομάζεται μερική τοπική πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων (Partial local density of states - PLDOS) εμπεριέχει τις πληροφορίες των προαναφερθέντων όρων, αλλά και την εξάρτηση του μοναδιαίου διανύσματος πόλωσης $\mathbf{n_d}$ του ηλεκτρικού διπόλου στη σύζευξη με τις φωτονικές καταστάσεις.

Η DOS προκύπτει από την ολοκλήρωση της LDOS ως προς όλες τις θέσεις στο χώρο, η LDOS προκύπτει από ολοκλήρωση της PLDOS ως προς όλες τις διευθύνσεις της διπολικής ροπής και έχουν την παρακάτω μορφή:

$$\rho(\mathbf{n_d},\mathbf{r},\omega) = \sum_k \delta(\omega-\omega_k)|\mathbf{n_d}\cdot\mathbf{E_k}(\mathbf{r})|^2 \tag{3.110}$$

$$\rho(\mathbf{r},\omega) = \sum_{\mathbf{n_d}} \rho(\mathbf{n_d},\mathbf{r},\omega) = \sum_k \delta(\omega-\omega_k)|\mathbf{E_k}(\mathbf{r})|^2 d\omega \tag{3.111}$$

$$\rho(\omega) = \frac{1}{\Omega}\int_\Omega \rho(\mathbf{r},\omega)d^3\mathbf{r}, \tag{3.112}$$

όπου $\mathbf{n_d}$ εφράζει το μοναδιαίο διάνυσμα στη διεύθυνση της διπολικής ροπής, Ω είναι ο όγκος του συστήματος , όπου, όταν $\Omega\to\infty$ τότε καταλήγουμε στο θερμοδυναμικό όριο που οι φωτονικές καταστάσεις θα αποτελούν ένα συνεχές φάσμα. Ο όρος $|\mathbf{n_d}\cdot\mathbf{E_k}(\mathbf{r})|^2$ εκφράζει την αλληλεπίδραση του κβαντικού εκπομπού για συγκεκριμένη θέση και διεύθυνση διπολικής δοπής με ΗΜ κατάσταση που αντιστοιχεί σε κυματάνυσμα $\mathbf{k}$. Οι παραπάνω σχέσεις τονίζουν πως οι φωτονικές καταστάσεις είναι ανάλογες της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου και ο γενικότερος τρόπος για τη περιγραφή του ηλεκτρικού πεδίου είναι ο τανυστής Green. Οι πυκνότητες φωτονικών καταστάσεων αποτυπώνονται μέσω του μιγαδικού μέρους του τανυστή Green για το σημείο που βρίσκεται ο κβαντικός εκπομπός με την εξής μορφή [22]:

$$\rho(\mathbf{n_d}, \mathbf{r}, \omega) = \frac{6\omega}{\pi c^2} \mathbf{n_d} \cdot Im\{\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)\} \cdot \mathbf{n_d} \tag{3.113}$$

$$\rho(\mathbf{r}, \omega) = \frac{6\omega}{\pi c^2} Tr\Big[Im\{\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)\}\Big] \tag{3.114}$$

$$\rho(\omega) = \frac{6\omega}{\pi c^2} \int_\Omega Tr\Big[Im\{\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)\}\Big] d^3\mathbf{r}. \tag{3.115}$$

Η κατάληλλη περιγραφή της πυκνότητας φωτονικών καταστάσεων σε κοιλότητες με διασπορά της ΗΜ ακτινοβολίας, γίνεται μέσω του μιγαδικού μέρους του τανυστή Green καθώς σε αυτές τις περιπτώσεις οι ιδιοκαταστάσεις του ΗΜ πεδίου δεν είναι ορθοκανονικές και δεν είναι εφικτός ο προσδιορισμός των φωτονικών καταστάσεων μέσω της συνάρτησης δέλτα που εμπεριέχουν οι σχέσεις (3.110), (3.111), (3.112). Στο θερμοδυναμικό όριο ($\Omega \to \infty$) καταλήγουμε στο ότι οι διαθέσιμες φωτονικές καταστάσεις στο κενό χώρο, δηλαδή απουσία φωτονικού περιβάλλοντος, θα ποσοτικοποιούνται από τη παρακάτω σχέση

$$\rho_0(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \tag{3.116}$$

Κατά συνέπεια η πυκνότητα καταστάσεων εξαρτάται από το ηλεκτρικό πεδίο που παράγεται από τον κβαντικό εκπομπό ακριβώς στο σημείο που βρίσκεται. Το μιγαδικό μέρος του τανυστή Green είναι υψίστης σημασίας και η ανάκτηση του δίνει τη δυνατότητα να υπολογιστούν πολλά φυσικά φαινόμενα της νανοφωτονικής και της κβαντικής οπτικής. Όμως, η εύρεση του τανυστή Green σε μη ομογενές περιβάλλον είναι περίπλοκη γιατί δεν υπάρχουν αναλυτικές λύσεις για μη τετριμμένες γεωμετρίες και ανισότροπα υλικά. Για το λόγο αυτό αξιοποιούνται αριθμητικές μέθοδοι όπως η Μέθοδος Πεπερασμένων στοιχείων και η Μέθοδος των Πεπερασμένων Διαφορών στο Πεδίο του Χρόνου.

4 Ενίσχυση κβαντικής συμβολής μέσω του ανισοτροπικού φαινομένου Purcell

"Καμία γνωστή θεωρία δεν μπορεί να παραμορφωθεί κατά τέτοιο τρόπο ώστε να αποδώσει καν μία προσεγγιστική εξήγηση του δυϊσμού σωματιδίου-κύματος. Πρέπει να υπάρχει κάτι που αγνοούμε και του οποίου η ανακάλυψη θα φέρει επανάσταση στις απόψεις μας για τις σχέσεις μεταξύ των κυμάτων, του αιθέρα και της ύλης. Για την ώρα πρέπει να δουλεύουμε και με τις δύο θεωρίες. Δευτέρες, Τετάρτες και Παρασκευές χρησιμοποιούμε την κυματική θεωρία. Τρίτες, Πέμπτες και Σάββατα σκεφτόμαστε με όρους ιπτάμενων κβάντων ενέργειας ή σωματιδίων."-Lawrence Bragg

Το 1946 ο Purcell, απέδειξε ότι αυθόρμητη εκπομπή δεν είναι εγγενές χαρακτηριστικό του κβαντικού εκπομπού, αλλά εξαρτάται από το περιβάλλον του. Η αλληλεπίδραση φωτός-ύλης ενισχύεται από τη σύζευξη εκπομπών με το φωτονικό του περιβάλλον, το οποίο σπάει τη συμμετρία των διακυμάνσεων του κενού και μεταβάλλει το ρυθμό αυθόρμητης εκπομπής μέσω της αλλαγής της πυκνότητας φωτονικών καταστάσεων για τον κβαντικό εκπομπό. Η τροποποίηση του ρυθμού αποδιέγερσης ενός κβαντικού εκπομπού εξαιτίας της σύζευξής του με το φωτονικό του περιβάλλον, ονομάζεται φαινόμενο Purcell. Οι πρώτες έρευνες για το φαινόμενο Purcell πραγματοποιήθηκαν από τον Drexhage [4] την δεκαετία του 1970, όπου αποδείχθηκε ότι η θέση και η διεύθυνση της διπολικής ροπής των ατόμων παίζει καθοριστικό ρόλο στο ρυθμό αποδιέγερσής τους. Ειδικότερα, οι διαφορετικές θέσεις και οι διαφορετικές διευθύνσεις διπολικών ροπών γεννούν διαφορετικούς συνδυασμούς ΗΜ πεδίων στην επιφάνεια του δομημένου περιβάλλοντος, τα οποία σκεδάζονται και αλληλεπιδρούν με τον κβαντικό εκπομπό επιστρέφοντας στο σημείο που είναι τοποθετημένος.

Για κβαντικό εκπομπό που μοντελοποιείται ως σημειακή πηγή, όπως ένα αρμονικά ταλαντευόμενο ηλεκτρικό δίπολο με συγκεκριμένη διπολική ροπή, επάγεται ΗΜ πεδίο λόγω της μεταβολής ρεύματος από τη σημειακή πηγή. Το επαγόμενο ΗΜ πεδίο επιδρά στη σημειακή πηγή, και παράγεται έργο στο αρμονικά μεταβαλλόμενο ρεύμα καθορίζοντας την ισχύ ακτινοβολίας. Η ισχύς της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας εξαρτάται από τις διαθέσιμες ΗΜ καταστάσεις, δηλαδή τη LDOS, οι οποίες είναι άμεσα συνυφασμένες με το φωτονικό περιβάλλον του κβαντικού εκπομπού. Η εκπεμπόμενη ακτινοβολία αυξάνεται με την αύξηση των διαθέσιμων ΗΜ καταστάσεων.

Η παραπάνω προσέγγιση προκύπτει μέσω κλασσικής ηλεκτροδυναμικής, αλλά ταυτίζεται με την κβαντομηχανική προσέγγιση καθώς οι επιτρεπόμενες ΗΜ καταστάσεις είναι ίδιες. Βέβαια, η διαφορά έγκειται στο ότι στην κβαντομηχανική, ακόμα και στο κενό, υπάρχουν διακυμάνσεις του ΗΜ πεδίου, οι οποίες παρέχουν πάντα διαθέσιμες φωτονικές καταστάσεις, διότι το κενό είναι γεμάτο ενέργεια λόγω της αρχής της απροσδιοριστίας. Επιπλέον, ένας κβαντικός εκπομπός εκπέμπει μεμονομένα φωτόνια μέσω πιθανοκρατικού μηχανισμού και όχι συνεχή εκπεμπόμενη ακτινοβολία όπως προβλέπεται από τον κλασσικό ηλεκτρομαγνητισμό. Τουτέστιν, η πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων καθορίζει τον ρυθμό αποδιέγερσης ενός κβαντικού εκπομπού και όσο αυξάνεται ο αριθμός των διαθέσιμων φωτονικών καταστάσεων τόσο αυξάνεται και η πιθανότητα εκπομπής φωτονίου.

4.1 Παράγοντας Purcell

Η ποσοτικοποίηση της ενίσχυσης του ρυθμού αυθόρμητης εκπομπής συναρτήσει φωτονικού περιβάλλοντος γίνεται μέσω του παράγοντα Purcell. Θεωρώντας πως η οπτική κοιλότητα παρέχει μία μόνο φωτονική ιδιοκατάσταση συχνότητας ω_c με μεγαλύτερο εύρος φάσματος από του εκπομπού και επιπλέον, ότι η συχνότητα αποδιέγερσης του εκπομπού ταυτίζεται με αυτή ($\omega = \omega_c$), τότε ο παράγοντας Purcell μέσω των σχέσεων (3.92), (3.94) ορίζεται ως

$$F_p = \frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \frac{3Q\lambda^3}{4\pi^2\Omega}, \tag{4.1}$$

όπου Γ_0, Γ αναπαριστούν, τους ρυθμούς αποδιέγερσης του κβαντικού εκπομπού στο κενό και παρουσία φωτονικού περιβάλλοντος αντίστοιχα. λ είναι το μήκος κύματος της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας. Η σχέση (4.1) δηλώνει πως η ενίσχυση του ρυθμού αποδιέγερσης απαιτεί οπτικές κοιλότητες μικρών διαστάσεων, οι οποίες εγκλωβίζουν το φως για μεγάλο χρονικό διάστημα.

Στην παρούσα εργασία θεωρείται πως ο παράγοντας Purcell εκφράζει την συνολική τροποποίηση της αυθόρμητης εκπομπής [43] και όχι την τροποποίηση της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας στο μακρινό πεδίο (far field) όπως μεταφράζεται κάποιες φορές στη βιβλιογραφία. Ο παράγοντας Purcell είναι το άθροισμα των ρυθμών αποδιέγερσης που αντίστοιχούν σε εκπεμπόμενη ακτινοβολία που καταλήγει στο κενό και σε μη εκπεμπόμενη ακτινοβολία που καταλήγει στο φωτονικό περιβάλλον μέσω ωμικών απωλειών, δηλαδή ισχύει

$$F_p = \frac{\Gamma_{rad} + \Gamma_{nonrad}}{\Gamma_0} = \frac{P_{rad} + P_{nonrad}}{P_{0,rad}}. \tag{4.2}$$

Η αποδιέγερση ενός ατόμου μέσω μη εκπεμπόμενης ακτινοβολίας λαμβάνει χώρα και μέσω εσωτερικών βαθμών ελευθερίας, όμως οι συγκεκριμένοι ρυθμοί αποδιέγερσης είναι εγγενές χαρακτηριστικό των ατόμων και δεν επηρεάζονται από το φωτονικό περιβάλλον.

Στα μεταλλικά υλικά, όπως τα ευγενή μέταλλα (π.χ. χρυσός, άργυρος), οι επιφανειακές καταστάσεις που συσσωρεύουν ενισχυμένα πεδία είναι οι πλασμονικές διεγέρσεις που αντιστοιχούν σε συλλογικά ταλαντώμενα ελεύθερα ηλεκτρόνια (πλάσμα) συζευγμένα με προσπίπτοντα ΗΜ πεδία στην επιφάνεια των υλικών. Η ενίσχυση των πεδίων σημαίνει αύξηση του παράγοντα Purcell, καθώς αυξάνεται η τοπική πυκνότητα καταστάσεων στο κοντινό πεδίο του κβαντικού εκπομπού, αλλά η σύζευξη κβαντικού εκπομπού με το φωτονικό του περιβάλλον δεν είναι πάντα ισχυρή λόγω των ωμικών απωλειών που συνεισφέρουν σε μη ακτινοβολούμενα κανάλια αποδιέγερσης.

Ο έλεγχος και η τροποποίηση της αυθόρμητης εκπομπής επιδιώκεται μέσω του φαινομένου Purcell. Τα τελευταία χρόνια οι έρευνες επικεντρώνονται σε μεταλλικά νανοσωματίδια [41] όπου στις επιφάνειές τους φιλοξενούν πλασμονικές διεγέρσεις, οι οποίες ενισχύουν τα πεδία και τα παγιδεύουν σε πολύ μικρές διαστάσεις, ανάλογες των διαστάσεων των νανοσωματιδίων, με αποτέλεσμα τα εντοπισμένα επιφανειακά πλασμόνια να αυξάνουν τον παράγοντα Purcell. Πάντως, τα μεταλλικά νανοσωματίδια πετυχαίνουν τον εγκλωβισμό φωτός σε πολύ μικρές χωρικές διαστάσεις , αλλά παρουσιάζουν υψηλές οπτικές απώλειες μέσω θερμότητας (ωμικές απώλειες), οι οποίες είναι μειονέκτημα για την ενίσχυση του παράγοντα Purcell. Ως εκ τούτου είναι είναι ανεπιθύμητες για τις εφαρμογές της νανοφωτονικής-κβαντικής οπτικής και γενικότερα για τις κβαντικές τεχνολογίες. Στην παρούσα εργασία προτείνουμε μικροδομές διχαλκογενιδίων βισμουθίου όπου το ποσοστό ωμικών απωλειών τους είναι πολύ μικρότερο συγκριτικά με τα πλασμονικά νανοσωματίδια, έχοντας πολύ υψηλή ενίσχυση του παράγοντα Purcell χωρίς να επηρεάζεται αρκετά ο ρυθμός αποδιέγερσης από διαδικασίες μη εκπεμπόμενης ακτινοβολίας.

4.2 Κβαντική συμβολή

Η κβαντική συμβολή παρουσιάζεται σε κανάλια αποδιέγερσης μεταξύ κοντινών επιπέδων ενέργειας ενός κβαντικού εκπομπού που συμμετέχουν στην αυθόρμητη εκπομπή, μεταπίπτοντας σε κοινό κατώτερο επίπεδο ενέργειας.

Για τρισταθμικό κβαντικό εκπομπό (V-type), με δύο κοντινά επίπεδα διεγερμένης ενεργειακής κατάστασης $|2\rangle$, $|3\rangle$ και τη θεμελιώδη κατάσταση $|1\rangle$, η ύπαρξη και μόνο του επιπέδου ενέργειας $|3\rangle$, ακόμα και αν ο πληθυσμός του είναι μηδενικός, επηρεάζει τον ρυθμό εκπομπής του κβαντικού εκπομπού από την κατάσταση $|2\rangle$ στην $|1\rangle$. Η κβαντική συμβολή συμβαίνει για μη ορθογώνιες διεγερμένες καταστάσεις που μεταπίπτουν σε κοινό επίπεδο ενέργειας, όμως σε ρεαλιστικά συστήματα οι καταστάσεις είναι ορθογώνιες. Ο Agarwal το 2000 πρότεινε ένα τρόπο προσομοίωσης της κβαντικής συμβολής [8] για ορθογώνιες καταστάσεις σε ανισοτροπικό περιβάλλον [8]. Όταν δύο ορθογώνιες ατομικές διπολικές ροπές έχουν μεγάλη διαφορά ως προς το ρυθμό αυθόρμητης εκπομπής του κβαντικού εκπομπού, τότε έχουμε το φαινόμενο της ενίσχυσης της κβαντικής συμβολής εξαιτίας της αύξησης της ανισοτροπίας του κενού. Ο Agarwal απέδειξε πως η ανισοτροπία του κβαντικού κενού οδηγεί σε κβαντική συμβολή μεταξύ των καναλιών αποδιέγερσης κοντινών ενεργειακών επιπέδων. Επιπλεόν, αν οι ρυθμοί αποδιέγερσης των ορθογώνιων διπολικών ροπών έχουν μεγάλη διαφορά μεταξύ τους, τότε ο βαθμός της κβαντικής συμβολής είναι υψηλός. Τουτέστιν, ο μηχανισμός της κβαντικής συμβολής ενισχύει ή μειώνει τον ρυθμό αυθόρμητης εκπομπής. Το φαινόμενο της κβαντικής συμβολής μπορεί να πυροδοτήσει εξωτικά φαινόμενα στην κβαντική οπτική, όπως παγίδευση πληθυσμών, τα λέιζερ χωρίς αναστροφή, οπτική διαφάνεια και αργό φως, υπέρ-στενές φασματικές γραμμές, ενισχυμένες μη γραμμικότητες τύπου Kerr, κ.α.

Στην παρούσα εργασία παρουσιάζονται αποτελέσματα για την ενίσχυση της κβαντικής συμβολής μέσω της τροποποίησης και του ελέγχου της αυθόρμητης εκπομπής τρισταθμικού κβαντικού εκπομπού τοποθετημένου ακριβώς στη μέση του νανοκενού που δημιουργεί διμερές σύστημα μικροσφαιρών από διχαλκογενίδια βισμουθίου. Η παρεμβολή του διμερούς συστήματος μικροσωματιδίων στην περιοχή του κβαντικού εκπομπού μεταβάλλει την τοπική πυκνότητα των φωτονικών καταστάσεων, και επομένως και το ρυθμό αποδιέγερσης του κβαντικού εκπομπού.

Στο Σχήμα 4 απεικονίζεται ένα τρισταθμικό κβαντικό σύστημα που αντιπροσωπεύει ένα γενικό μοντέλο κβαντικού εκπομπού. Στην παρούσα εργασία θεωρείται ότι ο τρισταθμικός κβαντικός εκπομπός έχει εφυλισμένα τα δύο ενεργειακά επίπεδα (διεγερμένες καταστάσεις) $|2\rangle$, $|3\rangle$ λόγω του φαινομένου Zeeman. Ο ατομικός διπολικός τελεστής στο συγκεκριμένο σύστημα ορίζεται ως

$$\mathbf{d} = d(|2\rangle\langle 1|\hat{\varepsilon}_- + |3\rangle\langle 1|\hat{\varepsilon}_+) + H.c., \tag{4.3}$$

όπου ισχύει

$$\hat{\varepsilon}_\pm = 1/\sqrt{2}(\mathbf{e}_z \pm i\mathbf{e}_x) \tag{4.4}$$

. $\hat{\varepsilon}_+$ είναι ο δεξιόστροφος όρος , $\hat{\varepsilon}_-$ είναι ο αριστερόστροφος όρος και d έχει πραγματική τιμή. Ακόμα, θεωρείται πως και στις δύο διεγερμένες καταστάσεις $|2\rangle$ και $|3\rangle$ λαμβάνει χώρα αυθόρμητη αποδιέγερση στη θεμελιώδη κατάσταση, αλλά με διαφορετικούς ρυθμούς $2\gamma_2$, $2\gamma_3$, αντίστοιχα. Η δυναμική της αυθόρμητης αποδιέγερσης του κβαντικού συστήματος περιγράφεται μέσω της προσέγγισης του πίνακα πυκνότητας λαμβάνοντας υπόψιν μόνο φαινόμενα αυθόρμητης εκπομπής, την προσέγγιση Wigner-Weisskopf και την προσέγγιση του περιστρεφόμενου κύματος. Οι χρονοεξαρτημένες εξισώσεις που ανταποκρίνονται στην περιγραφή της αλληλεπίδρασης του κβαντικού εκπομπού με το φωτονικό του περιβάλλον γράφονται ως [39]

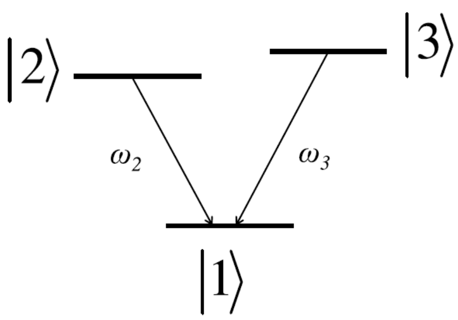
$$\dot{\rho}_{22} = -2\gamma_2\rho_{22} - \kappa_3\rho_{23} - \kappa_3\rho_{32}\,, \tag{4.5}$$
$$\dot{\rho}_{33} = -2\gamma_3\rho_{33} - \kappa_2\rho_{32} - \kappa_2\rho_{23}\,, \tag{4.6}$$
$$\dot{\rho}_{23} = -[\gamma_2 + \gamma_3 + \mathrm{i}(\omega_2 - \omega_3)]\rho_{23} - \kappa_2\rho_{22} - \kappa_3\rho_{33}\,, \tag{4.7}$$

όπου τα διαγώνια στοιχεία του πίνακα πυκνότητας ακολουθούν τον κανόνα των πιθανοτήτων

$$\rho_{11} + \rho_{22} + \rho_{33} = 1 \tag{4.8}$$

και

$$\rho_{nm} = \rho^*_{mn}. \tag{4.9}$$



Σχήμα 4: Τρισταθμικός κβαντικός εκπομπός.

Η ανισοτροπία του κενού που δημιουργείται εξαιτίας του φωτονικού περιβάλλοντος οδηγεί στην εμφάνιση των όρων κ_1 και κ_2 όπου ονομάζονται συντελεστές κβαντικής συμβολής και δηλώνουν την εμφάνιση του φαινομένου της κβαντικής συμβολής μεταξύ των καναλιών μετάπτωσης $|2\rangle \to |1\rangle$, $|3\rangle \to |1\rangle$ κατά τη διαδικασία της αυθόρμητης εκπομπής. Οι συντελεστές της κβαντικής συμβολής αυξάνονται όταν αυξάνεται και η ανισοτροπία της οπτικής κοιλότητας. Οι ορθογώνιες καταστάσεις προσομοιώνονται μέσω των δύο ορθογώνιων διπολικών ροπών, όπου η μία διεύθυνση αντιστοιχεί για το κανάλι μετάπτωσης $|2\rangle \to |1\rangle$ και η άλλη διεύθυνση για το κανάλι μετάπτωσης $|3\rangle \to |1\rangle$. Οι ρυθμοί αυθόρμητης εκπομπής θα είναι

$$\gamma_{2,3} = d^2\omega_{2,3}\mathrm{Im}[G_\perp(\mathbf{r},\mathbf{r};\omega_{2,3}) + G_\parallel(\mathbf{r},\mathbf{r};\omega_{2,3})] \tag{4.10}$$

όπου το $\perp$ αφορά την κάθετη διεύθυνση στην επιφάνεια των σωμάτιων, το $\parallel$ αφορά την παράλληλη διεύθυνση στην επιφάνεια των σωμάτιων, d είναι η διπολική ροπή. Οι όροι $G_\perp$, $G_\parallel$ αντιστοιχούν στον τανυστή Green για τις ορθογώνιες ατομικές διπολικές καταστάσεις στο σημείο που ταυτίζεται με τη θέση του κβαντικού εκπομπού. Οι συντελεστές κβαντικής συμβολής ορίζονται ως

$$\kappa_{2,3} = d^2\omega_{2,3}\mathrm{Im}[G_{\perp}(\mathbf{r},\mathbf{r};\omega_{2,3}) - G_{\parallel}(\mathbf{r},\mathbf{r};\omega_{2,3})]. \tag{4.11}$$

Επειδή οι καταστάσεις $|2\rangle$ και $|3\rangle$ θεωρούνται εκφυλισμένες λόγω φαινομένου *Zeeman*, θα ισχύει $\omega_2 \approx \omega_3 = \omega_0$ και

$$\gamma_2 \approx \gamma_3 = \gamma = \Gamma_{\perp} + \Gamma_{\parallel}, \tag{4.12}$$

$$\kappa_2 \approx \kappa_3 = \kappa = \Gamma_{\perp} - \Gamma_{\parallel}, \tag{4.13}$$

$$\Gamma_{\perp} = d^2\omega_0\mathrm{Im}[G_{\perp}(\mathbf{r},\mathbf{r};\omega_0)], \tag{4.14}$$

$$\Gamma_{\parallel} = d^2\omega_0\mathrm{Im}[G_{\parallel}(\mathbf{r},\mathbf{r};\omega_0)]. \tag{4.15}$$

Σύμφωνα με τα παραπάνω ο βαθμός κβαντικής συμβολής ορίζεται ως [39]

$$p = \frac{\Gamma_{\perp} - \Gamma_{\parallel}}{\Gamma_{\perp} + \Gamma_{\parallel}}. \tag{4.16}$$

Μεγιστοποίηση του βαθμού κβαντικής συμβολής σημαίνει $p \to 1$, ενώ για $p = 0$ το φαινόμενο της κβαντικής συμβολής είναι ανύπαρκτο. Το φαινόμενο της κβαντικής συμβολής σε τρισταθμικό κβαντικό εκπομπό οδηγεί στο φαινόμενο της παγίδευσης πληθυσμού.

4.3 Υπολογιστική μέθοδος υπολογισμού ρυθμών αποδιέγερσης

Η Μεθόδος Πεπερασμένων Στοιχείων (FEM) αξιοποιεί δισδιάστατα και τρισδιάστατα στοιχεία για την προσομοίωση συνεχών μέσων και με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή αξιοποιείται για αριθμητικές επιλύσεις ΗΜ προβλημάτων όπου δεν υπάρχουν αναλυτικές λύσεις. Το σύστημα διαφορικών ή και ολοκληρωτικών εξισώσεων που περιγράφουν ένα ΗΜ πρόβλημα εμπεριέχουν τις εξισώσεις του Maxwell αλλά οι λύσεις τους είναι περίπλοκες για πολλά φυσικά συστημάτα. Η μοντελοποίηση της κατασκευής του υπό μελέτη συστήματος αποτελείται από αριθμό στοιχείων διαφόρων γεωμετριών που συνδέονται με τα γειτονικά τους με κοινούς κόμβους, οι οποίοι έχουν συγκεκριμένους βαθμούς ελευθέριας ανάλογα με το πεδίο φυσικής του προβλήματος και το είδος του στοιχείου. Το αρχικά μεγάλο και πολύπλοκο πρόβλημα διαμορφώνεται μέσω πλεγμάτων (mesh) αποτελούμενων από πεπερασμένα στοιχεία σε μικρότερες περιοχές. Σε αυτές τις μικρές περιοχές η πραγματική λύση, το ηλεκτρικό πεδίο, υπολογίζεται με απλούστερες συναρτήσεις. Ο φυσικός χώρος του προβλήματος διαιρείται σε επιμέρους στοιχεία και θεωρείται ότι το ηλεκτρικό πεδίο μεταβάλλεται γραμμικά σε αυτήν την περιοχή (τριγωνικά στοιχεία πρώτης τάξης). Η λύση έχει μεγαλύτερη ακρίβεια όσο το πλέγμα γίνεται πυκνότερο, δηλαδή όταν αποτελείται από μικρότερα στοιχεία. Όμως, όσο πυκνότερο είναι το πλέγμα τόσο περισσότερη υπολογιστική ισχύς απαιτείται. Η μέθοδος αυτή έχει ως αποτέλεσμα το αρχικό σύστημα των διαφορικών εξισώσεων να μετατραπεί σε ένα πρόβλημα αλγεβρικών εξισώσεων, αλλά με περισσότερους αγνώστους.

Θεωρούμε τη διαφορική εξίσωση της μορφής

$$\Lambda u = f(u, r), \tag{4.17}$$

όπου Λ είναι διαφορικός τελεστής, u είναι η εξαρτημένη μεταβλητή και $\mathbf{r} \in \mathbf{R^d}$ είναι διάνυσμα d ανεξάρτητων μεταβλητών. Στη Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων θεωρείται πως χωρίζεται το σύνολο $\mathbf{r} \in \mathbf{R^n d}$ σε υποσύνολα $r_i \in T^d$ και ο υπόχωρος T^d καλείται πλέγμα (mesh). Έπειτα βρίσκοντας βάσεις οι οποίες προσεγγίζουν τις τιμές $u(r_i)$, μετατρέπουμε το διαφορικό τελεστή σε άθροισμα μέσω των βάσεων και καταλήγουμε σε γραμμικό σύστημα εξισώσεων. Η μέθοδος Galerkin [45] υποδεικνύει πως οι βάσεις ορίζονται ως

$$u_i = \sum_j A_{ij} e_{ji}, \tag{4.18}$$

όπου e_{ji} είναι ορθοκανονικές συναρτήσεις, i αντιστοιχεί σε στοιχείο πλέγματος και j σαρώνει τις ορθοκανονικές συναρτήσεις. Ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας του στοιχείου πλέγματος καθορίζεται από τον όρο e_{ij} και η σύγκλιση της λύσης εξαρτάται από το μέγεθος του στοιχείου.

Οι υπολογισμοί των ρυθμών αυθόρμητης εκπομπής πραγματοποιήθηκαν με τη Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων μέσω του λογισμικού Comsol multiphysics στη κατηγορία μοντέλων wave optics για τρισδιάστατες γεωμετρίες στη περιοχή των συχνοτήτων (frequency domain). Η φυσική περιοχή προσομοίωσης είναι σφαιρική με ακτίνα λ (μήκος κύματος εκπεμπόμενης ακτινοβολίας) και αποτελείται από αέρα, τον κβαντικό εκπομπό και τις μικροσφαίρες από διχαλκογενίδια βισμουθίου με ακτίνα $2\mu m$. Ο κβαντικός εκπομπός μοντελοποιήθηκε ως σημειακή πηγή-ηλεκτρικό δίπολο τοποθετημένο ακριβώς στο κέντρο του φυσικού χώρου προσομοίωσης, και συγκεκριμένα ταλαντώνεται αρμονικά με συχνότητα ίση με την συχνότητα αποδιέγερσής του. Επιπλέον, χρησιμοποιήθηκε τέλεια προσαρμοσμένο στρώμα, το λεγόμενο Perfectly Matched Layer (PML), με πάχος $\lambda/2$, το οποίο αποτελείται απο 10 υποστρώματα πλέγματος. Το PML είναι είναι απαραίτητο για την ικανοποίηση των συνοριακών συνθηκών στο άπειρο. Με το PML είναι εφικτό να πραγματοποιηθεί προσομοίωση ανοιχτού συστήματος σε απειροδιάστατο χώρο. Η σκεδαζόμενη ακτινοβολία από το δομημένο φωτονικό περιβάλλον φτάνοντας στο PML απορροφάται, για όλα τα είδη της ακτινοβολίας (σφαιρικά, επίπεδα κύματα, κλπ.). Με αυτό τον τρόπο αποφεύγονται ανακλάσεις προς το φυσικό χώρο προσομοίωσης.

Επειδή κοντά στην πηγή το ηλεκτρικό πεδίο αποκλίνει, μοντελοποιήθηκε σφαιρική περιοχή , η οποία περικλείει το ηλεκτρικό δίπολο με πιο μικρά στοιχεία που βελτιώνουν την ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Γενικά, η αξιοπιστία των αποτελεσμάτων στη Μέθοδο Πεπερασμένων Στοιχείων βασίζεται στην διαμόρφωση του πλέγματος στοιχείων. Αρχικά, υπολογίζονται οι επιθυμητές ΗΜ ποσότητες του μοντέλου με σχετικά μεγάλα στοιχεία για ορισμένο πλέγμα. Έπειτα, οι προσομοιώσεις πραγματοποιούνται με μικρότερα στοιχεία πλέγματος, που σημαίνει πυκνότερο πλέγμα και περισσότερα στοιχεία καθώς ο όγκος και η δομή του φυσικού χώρου προσομοίωσης παραμένουν ίδια. Η συγκεκριμένη διαδιασία επαναλαμβάνεται μέχρι τα αποτελέσματα των υπολογισμένων ΗΜ φυσικών μεγεθών να μην μεταβάλλονται οπότε και τότε θα έχει επιτευχθεί η επιθυμητή σύγκλιση του ΗΜ προβλήματος. Για ΗΜ μεγέθη που ύπαρχουν αναλυτικές σχέσεις στην βιβλιογραφία, όπως η εκπεμπόμενη ισχύς ηλεκτρικού διπόλου στο κενό, τα αποτελέσματα των υπολογισμών στο Comsol συγκρίθηκαν με τα αποτελέσμτα των αναλυτικών σχέσεων.

Το μείζον ζήτημα της παρούσας εργασίας είναι ο υπολογισμός του παράγοντα Purcell μέσω της σχέσης (4.1). Ο παράγοντας Purcell εξαρτάται από τους ρυθμούς αποδιέγερσεις του κβαντικού εκπομπού και όπως αποδείχθηκε στις προηγούμενες ενότητες, η αυθόρμητη εκπομπή, και η τροποποίησή της, είναι αμιγώς κβαντομηχανικά φαινόμενα. Εντούτοις, το λογισμικό Comsol εφαρμόζει την θεωρία της κλασικής ηλεκτροδυναμικής και δεν επεξεργάζεται μεμονομένα φωτόνια, αλλά ΗΜ κύματα. Η αναγωγή φυσικών μεγεθών της κβαντικής οπτικής σε όρους κλασικού ηλεκτρομαγνητισμού, επιτυγχάνεται μέσω του παρακάτω λόγου λαμβάνοντας υπόψιν ότι ισχύει

$$\Gamma = \frac{P}{\hbar\omega}, \tag{4.19}$$

παρουσία φωτονικού περιβάλλοντος και

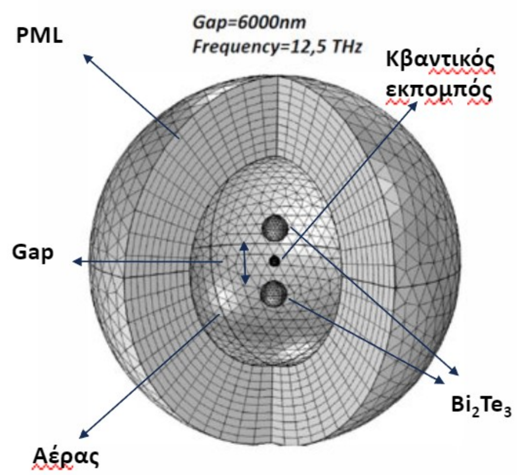
$$\Gamma_0 = \frac{P_0}{\hbar\omega} \tag{4.20}$$

απουσία φωτονικού περιβάλλοντος:

$$F_p = \frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \frac{P}{P_0}. \tag{4.21}$$

Με αυτό τον τρόπο απαλείφεται ο κβαντικός όρος $\hbar\omega$ που αντιστοιχεί στο κβάντο ενέργειας των φωτονίων και καταλήγουμε σε μια σχέση με όρους κλασικής φυσικής.

Ο υπολογισμός της εκπεμπόμενης ισχύς του ηλεκτρικού διπόλου πραγματοποιείται μέσω του υπολογισμού της μέσης τιμής του διανύσματος Poynting (2.17), όπου η ολοκλήρωση γίνεται σε σφαιρική επιφάνεια που περικλείει μόνο το ηλεκτρικό δίπολο. Για την περίπτωση του κενού τα υπολογιστικά αποτελέσματα στις προσομοιώσεις του Comsol για την εκπεμπόμενη ισχύ εξακριβώνονται με τα αναλυτικά αποτελέσματα που συνεπάγονται από την σχέση (3.108). Συγκεκριμένα, υπολογίζεται η εκπεμπόμενη ισχύς σε συνάρτηση της συχνότητας για το κενό (απουσία μικροδομής) και , κατόπιν, παρουσία των μικροσφαιρών, για εύρος από 5 THz έως 16.5 THz. Ο λόγος τους καθορίζει τον παράγοντα Purcell.



Σχήμα 5: Προσομοίωση στο Comsol για κενό 5000 nm και 16 THz συχνότητα εκπομπής της σημειακής πηγής.

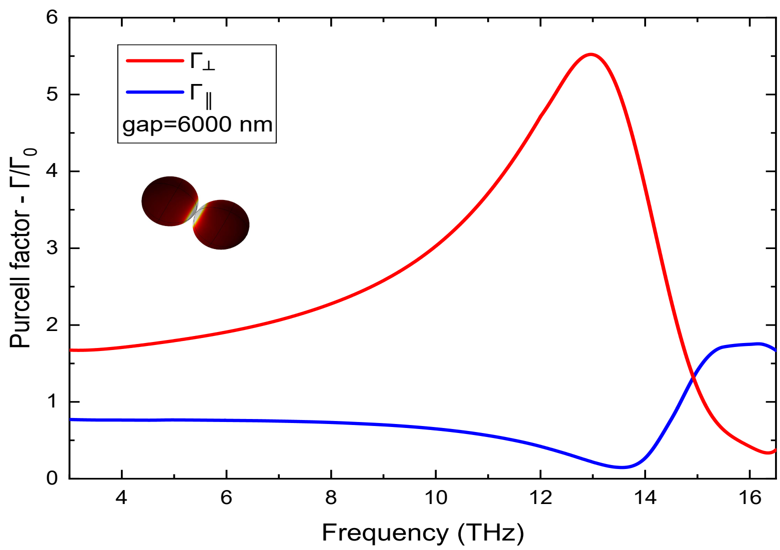
Η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβάνεται για τα κενά 50 nm, 100 nm, 400 nm, 4000 nm, 5000 nm, 6000 nm του διμερούς συστήματος. Με την σταδιακή μείωση των νανοκενών απαιτείται αυστηρότερη διάταξη πλέγματος, διότι πρέπει να μειωθούν οι διαστάσεις την σφαιρικής περιοχής που περικλείει το ηλεκτρικό δίπολο στις προσομοιώσεις για να μην εφάπτεται με τις μικροσφαίρες. Η μείωση αυτή οδηγεί σε αναγκαστική μείωση των διαστάσεων των στοιχείων του πλέγματος που συνιστούν την συγκεκριμένη σφαίρα για να είναι επιτευχθεί η επιθυμητή σύγκλιση στις προσομοιώσεις. Λόγω του ότι απαιτείται να υπάρχει σταδιακή και ομοιόμορφη αύξηση των διαστάσεων των στοιχείων μεταξύ των στοιχείων των τμημάτων στο φυσικό χώρο προσομοίωσης, ο συνολικός αριθμός των στοιχείων αυξάνεται με αποτέλεσμα την αύξηση του υπολογιστικού χρόνου. Πριν από κάθε προσομοίωση στο Comsol ελέγχεται η στατιστική του πλέγματος, όπου αναγράφεται η ποιότητα των στοιχείων του πλέγματος και ο συνολικός αριθμός τους. Όλες οι προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν με τετράεδρα στοιχεία για τα τμήματα του φυσικού χώρου προσομοίωσης και η ελάχιστη ποιότητα στοιχείου είχε τιμή μεγαλύτερη από 0.1. Επιπλεόν, οι συντελεστές κυρτότητας θέτονται για τιμές χαμηλότερες από 0.3 και ο μέγιστος ρυθμός αύξησης των στοιχείων λαμβάνει τιμές μικρότερες από 1.3.

Η οπτική απόκριση του τελλουριούχου βισμουθίου και σεληνιούχου βισμουθίου στις προσομοιώσεις προκύπτουν από την σχέση (2.39) και τις τιμές των πινάκων 1, 2.

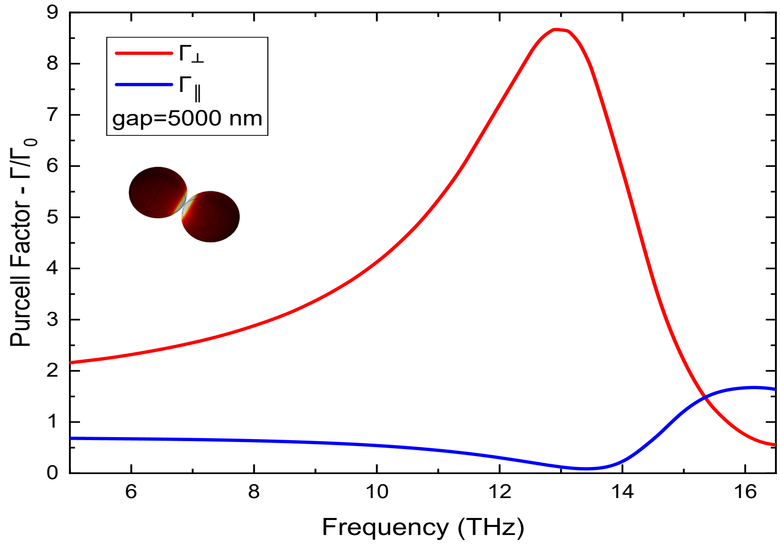
5 Αποτελέσματα της ενίσχυσης της κβαντικής συμβολής και η επίδραση της στη δυναμική πληθυσμού

5.1 Κβαντική συμβολή σε διμερές σύστημα μικροσφαιρών Bi_2Te_3

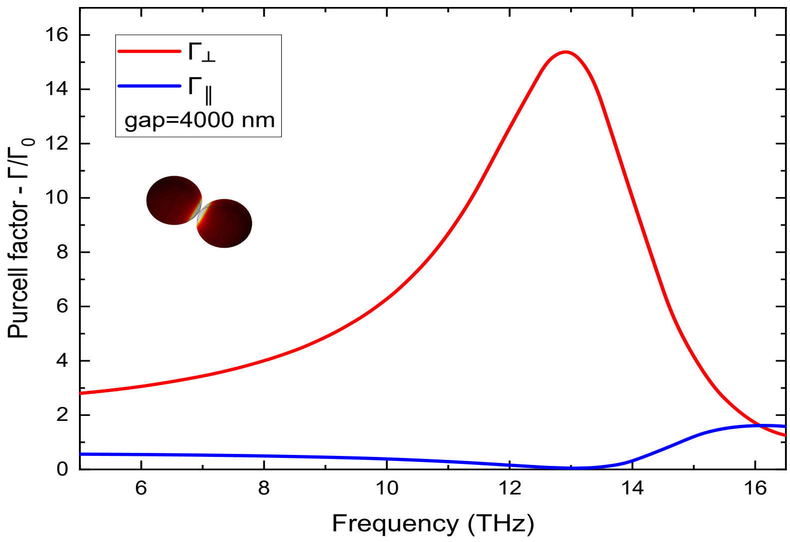
Αρχικά, εξετάζεται ο παράγοντας Purcell για διμερές σύστημα μικροσφαιρών Bi_2Te_3 για κενά 6000 nm, 5000 nm, 4000 nm και για εύρος συχνοτήτων 5 THz - 16.5 THz. Τα προαναφερόμενα κενά θεωρούνται μεγάλες αποστάσεις στην νανοτεχνολογία. Τα αποτελέσματα παρατίθενται παρακάτω:



Σχήμα 6: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη (⊥) και παράλληλη (∥) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Te_3 για κενό 6000 nm.



Σχήμα 7: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη (⊥) και παράλληλη (∥) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Te_3 για κενό 5000 nm.

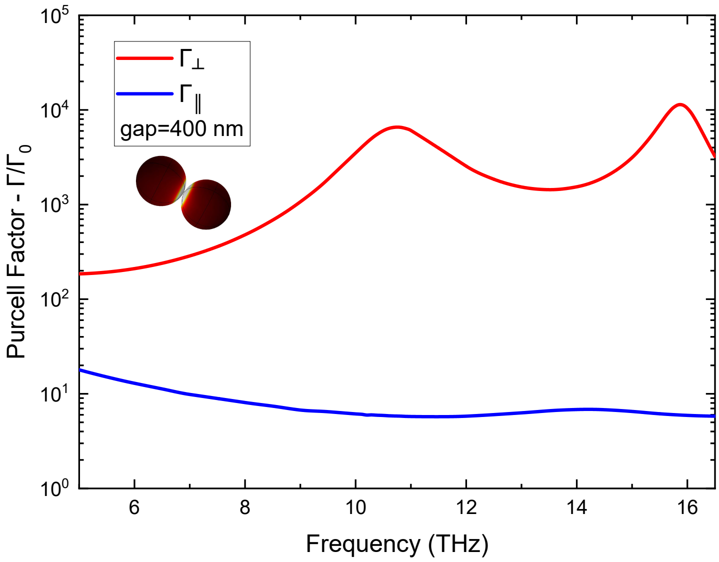


Σχήμα 8: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη (⊥) και παράλληλη (∥) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Te_3 για κενό 4000 nm.

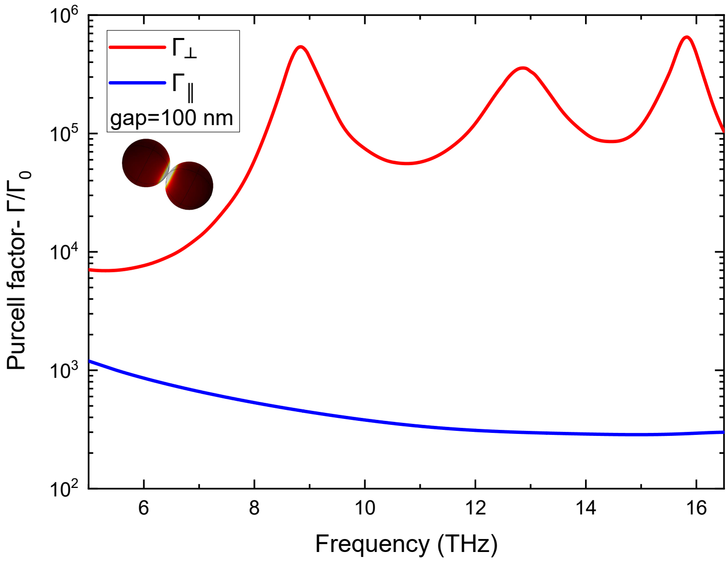
Στα παραπάνω σχήματα παρατηρείται ότι ο παράγοντας Purcell αυξάνεται για διπολική ροπή με διεύθυνση κάθετη στις επιφάνειες των μικροσφαιρών, ενώ για διπολική ροπή με διεύθυνση παράλληλη στις επιφάνειες των μικροσφαιρών ο παράγοντας Purcell μειώνεται. Η μεγιστοποίηση της διαφοράς τους συμβαίνει για συχνότητες κοντά στα 13 THz, όπου λαμβάνει χώρα ο πολαριτονικός συντονισμός και οφείλεται στο γεγονός ότι το διάνυσμα της πόλωσης των πολαριτονικών καταστάσεων είναι ακτινικό.

Σύμφωνα με τη σχέση (4.16) η κβαντική συμβολή αναμένεται να ενισχύεται κοντά στις συχνότητες όπου υπάρχει μέγιστη μείωση του ρυθμού αποδιέγερσης $\Gamma_\parallel$. Η τιμή του $\Gamma_\parallel$ μειώνεται σε πολύ μεγάλο βαθμό για συχνότητες 13.5 THz, 13.3 THz, 13.1 THz όπου οι παράγοντες Purcell $\frac{\Gamma_\parallel}{\Gamma_0}$ λαμβάνουν τις τιμες $\mathrm{F_p} = 0.1046$, $\mathrm{F_p} = 0.0888$, $\mathrm{F_p} = 0.0461$, για τα κενά 6000 nm, 5000 nm, 4000 nm αντίστοιχα.

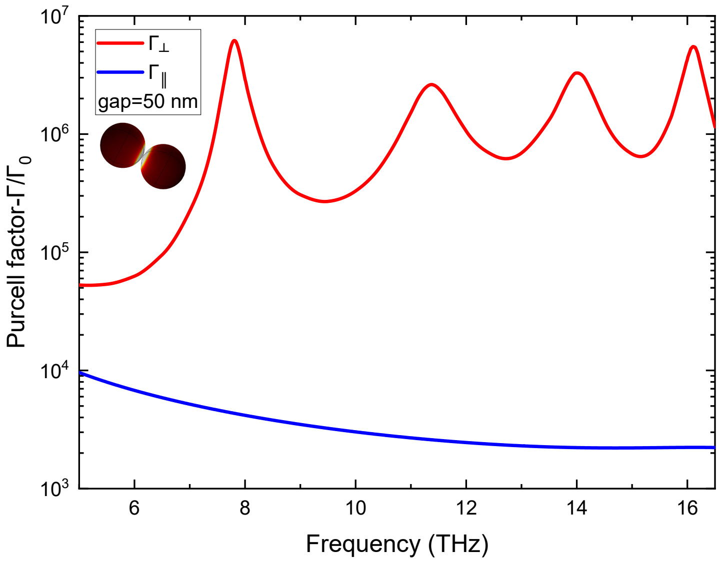
Έπειτα, εξετάζεται ο παράγοντας Purcell για μικρότερα κενά μεταξύ των μικροσφαιρών 400 nm, 100 nm, 50 nm και παρατίθενται παρακάτω οι αντίστοιχες γραφικές παραστάσεις.



Σχήμα 9: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη ($\perp$) και παράλληλη ($\parallel$) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Te_3 για κενό 400 nm.



Σχήμα 10: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη (⊥) και παράλληλη (∥) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Te_3 για κενό 100 nm.

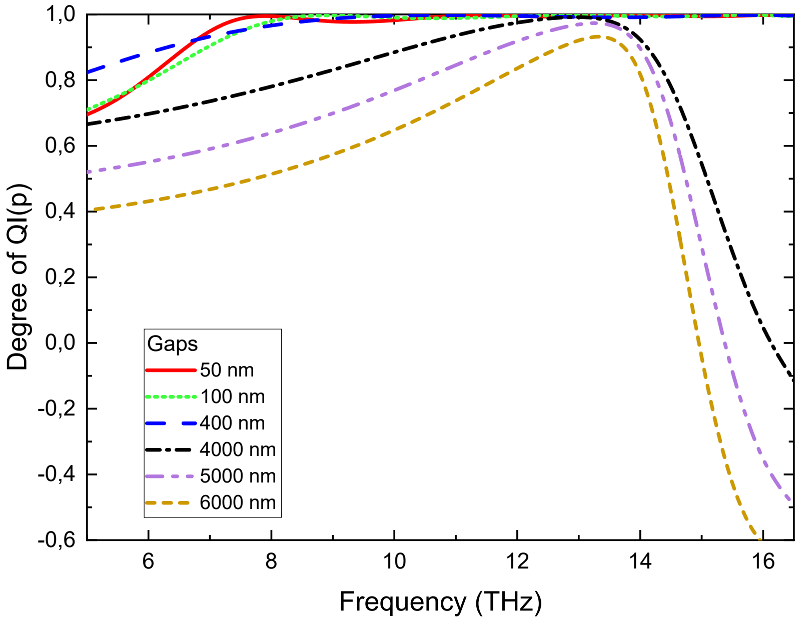


Σχήμα 11: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη (⊥) και παράλληλη (∥) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Te_3 για κενό 50 nm.

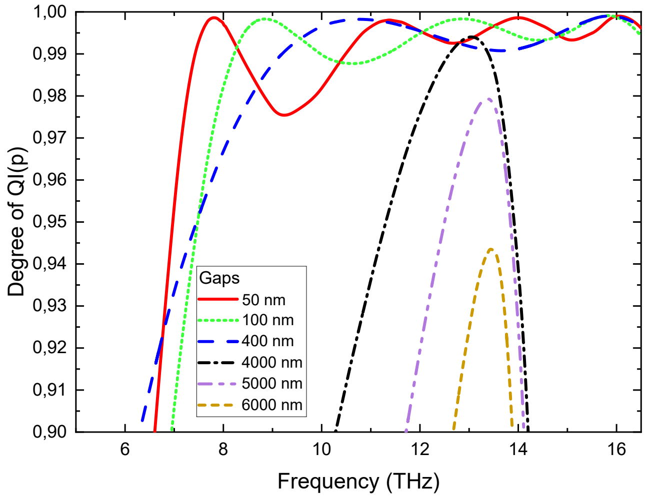
Για μικρότερα κενά ο παράγοντας Purcell αυξάνεται ραγδαία και κυμαίνεται σε τιμές τάξης μεγέθους μεταξύ $10^6 - 10^7$, διότι προκαλείται ισχυρή αλληλεπίδραση (strong coupling) των ηλεκτρομαγνητικών καταστάσεων στο κενό μεταξύ των σωματιδίων. Συγκεκριμένα, λόγω της σύζευξης των παγιδευμένων ενισχυμένων πεδίων στις επιφάνειες των μικροσφαιρών από τις πολαριτονικές διεγέρσεις και εξαιτίας της μείωσης του όγκου της κοιλότητας που δημιουργεί το διμερές σύστημα μικροσφαιρών, δεν διαφεύγουν γρήγορα φωτόνια σε φωτονικές καταστάσεις εκτός κοιλότητας κατά την αυθόρμητη εκπομπή ($g >> \gamma$). Επιπλέον η υψηλή ανταναχλαστικότητα των διχαλκογενιδίων βισμουθίου έχει ως αποτέλεσμα να σκεδάζονται επανειλημμένα από τη μια μικροσφαίρα στην άλλη ($g >> \kappa$). Η ισχυρή σύζευξη δικαιολογείται από το γεγονός ότι εμφανίζονται περισσότερες κορυφές συντονισμού λόγω φαινομένου Rabi splitting [48] σε συχνότητες που πριν αντιστοιχούσε μοναδική κορυφή, με τεράστιες ενισχύσεις των ρυθμών αποδιέγερσης. Επιπλέον, αυξάνεται και ο ρυθμός αποδιέγερσης και για διπολική ροπή παράλληλη στις επιφάνειες του διμερούς συστήματος, αλλά η διαφορά μεταξύ των ορθογώνιων διπολικών ροπών είναι μεγαλύτερη από τις περιπτώσεις με μικρότερα κενά που σημαίνει μεγαλύτεροι βαθμοί κβαντικής συμβολής.

Ο λόγος που επιτυγχάνονται τόσο υψηλοί παράγοντες Purcell για όλα τα κενά είναι το χαμηλό ποσοστό ωμικών απωλειών. Τα διχαλκογενίδια βισμουθίου απορροφούν ελάχιστο ποσοστό της προσπίπτουσας ακτινοβολίας (ανακλαστικές επιφάνειες) καθώς η διηλεκτρική τους συνάρτηση λαμβάνει κολοσιαίες τιμές στην περιοχή των THz με αποτέλεσμα η σκεδαζόμενη ακτινοβολία επιστρέφει στη περιοχή του κβαντικού εκπομπού επηρεάζοντας το ρυθμό αποδιέγερσής του. Το γεγονός ότι όσο περισσότερο πλησιάζουμε τις μικροσφαίρες τόσο αυξάνεται και ο παράγοντας Purcell οφείλεται στη δημιουργία νέων διαθέσιμων φωτονικών καταστάσεων, δηλαδή αύξησης της LDOS. Για μικρά κενά προκαλείται ισχυρή αλληλεπίδραση των ΗΜ καταστάσεων στο κενό μεταξύ των σωματιδίων, λόγω της ισχυρής αλληλεπίδρασης των παγιδευμένων ενισχυμένων πεδίων στις επιφάνειες των μικροσφαιρών με τον κβαντικό εκπομπό.

Λαμβάνοντας υπόψιν τους παραπάνω παράγοντες Purcell, η ενίσχυση της κβαντικής συμβολής απεικονίζεται παρακάτω.



(α΄) Βαθμός κβαντικης συμβολής για κενά 50 nm, 100 nm, 400 nm, 4000 nm, 5000 nm, 6000 nm.

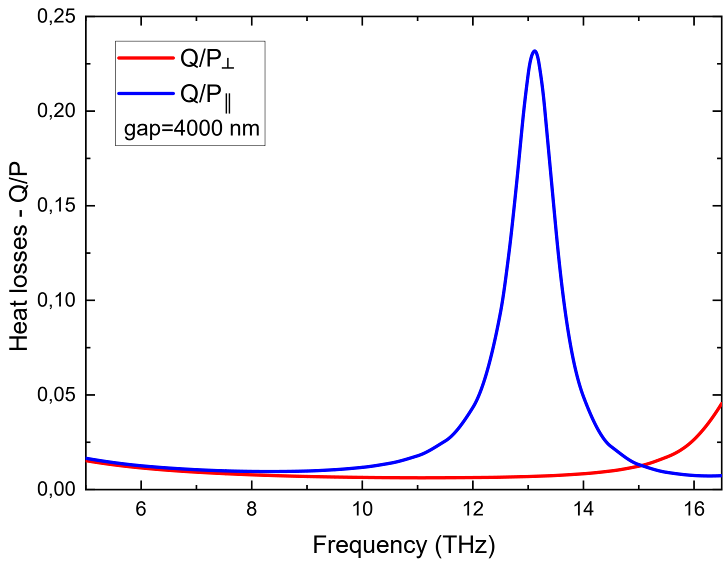


(β΄) Μεγέθυνση διαγράμματος κβαντικής συμβολής για τιμές $p = 0.9$ έως $p = 1$.

Σχήμα 12: Βαθμός κβαντικης συμβολής-QI(p) για διμερές σύστημα μικροσφαιρών Bi_2Te_3 ακτίνας 2 μm.

Ο βαθμός κβαντικής συμβολής λαμβάνει την μέγιστη τιμή ($p \rightarrow 1$) για μεγάλο εύρος συχνοτήτων και αποστάσεων μεταξύ των μικροσφαιρών. Ειδικά, για τα μεγάλα κενά με διαστάσεις 6000 nm, 5000 nm, 4000 nm ο βαθμός κβαντικής συμβολής λαμβάνει μέγιστη τιμή p = 0.9159 στα 13.5 THz p = 0.9792 στα 13.3 THz, p = 0.9939 στα 13.1 THz για τις αντίστοιχες αποστάσεις. Για τα μικρά κενά με διαστάσεις 400 nm, 100 nm, 50 nm ο βαθμός κβαντικής συμβολής στο μεγαλύτερο εύρος συχνοτήτων έχει πολύ υψηλές τιμές που κυμαίνονται μεταξύ p = 0.98 και p = 1.

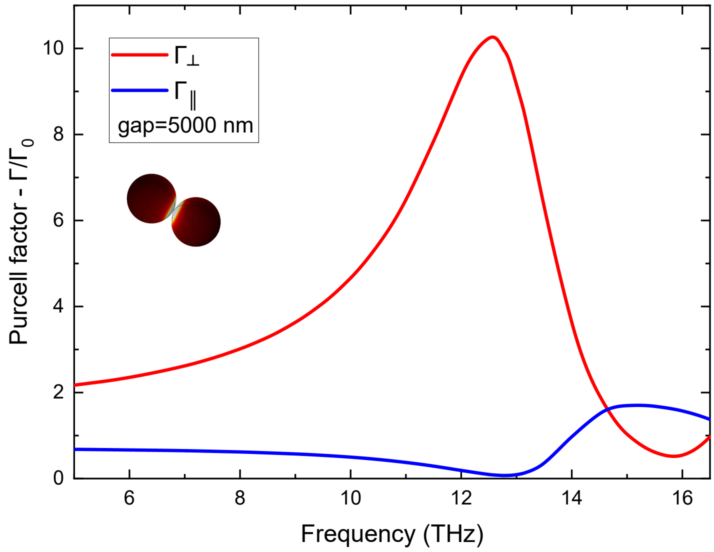
Η επίτευξη τόσο υψηλών βαθμών κβαντικής συμβολής συμβαίνει λόγω του ότι για $\Gamma_{\perp}$ το ποσοστό των ωμικών απωλείων, το οποίο υπολογίζεται μέσω του λογισμικού Comsol, είναι ελάχιστο με αποτέλεσμα η ΗΜ ακτινοβολία να καταλήγει στο κενό αυξάνοντας τις διαθέσιμες φωτονικές καταστάσεις . Αντίθετα, στην περίπτωση $\Gamma_{\parallel}$ το ποσοστό απωλειών μέσω θερμότητας αυξάνεται με αποτέλεσμα η ΗΜ ακτινοβολία να καταλήγει σε βαθμούς ελευθερίας που σχετίζεται με απώλειες μέσω θερμότητας. Στο Σχήμα 13 απεικονίζεται το ποσοστό των απωλειών μέσω θερμότητας της συνολικής εκπεμπόμενης ακτινοβολίας του ηλεκτρικού διπόλου για την περίπτωση κενού 4000 nm, όπου είναι φανερό πως η μεγάλη μείωση του ρυθμού αυθόρμητης εκπομπής στο Σχήμα 8 για διπολική ροπή παράλληλη στις επιφάνειες των υλικών, συμβαίνει στο εύρος συχνοτήτων που προκύπτουν οι μεγαλύτερες ωμικές απώλειες.



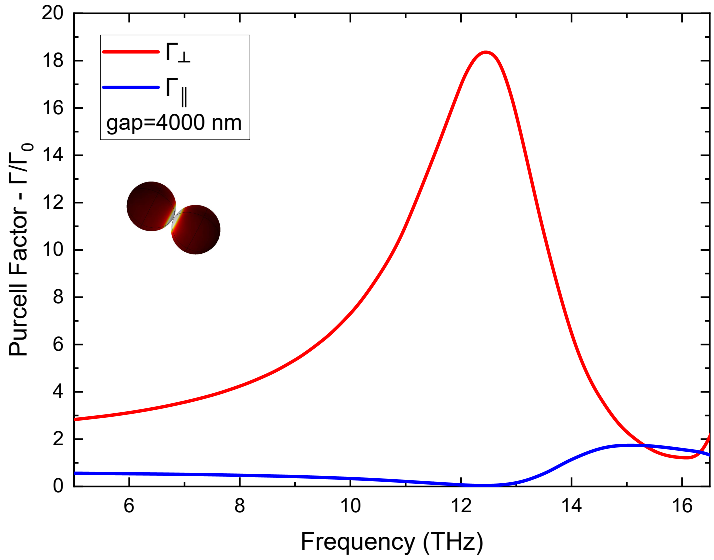
Σχήμα 13: Ποσοστό απωλειών της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας μέσω θερμότητας για κενό 4000 nm σε διμερές σύστημα μικροσφαιρών Bi_2Te_3.

5.2 Κβαντική συμβολή σε διμερές σύστημα μικροσφαιρών Bi_2Se_3

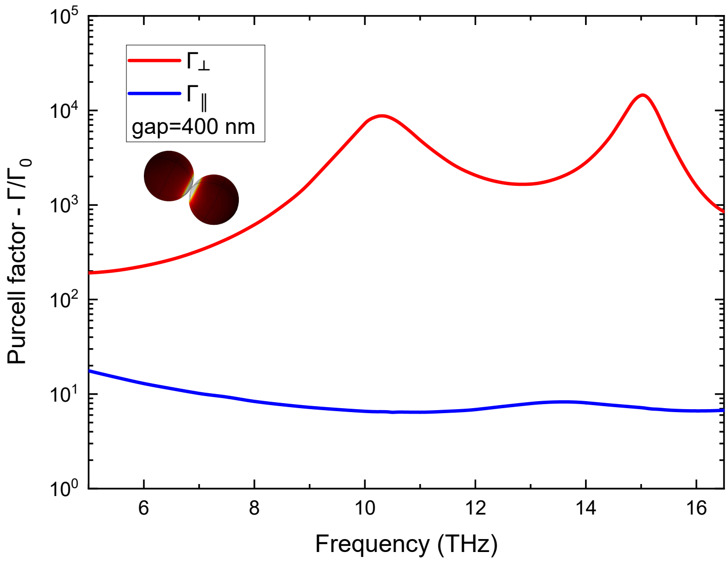
Στη συνέχεια υπολογίστηκε ο παράγοντας Purcell για διμερές σύστημα μικροσφαιρών Bi_2Se_3, για κενά μεταξύ των 5000 nm, 4000 nm, 400 nm, 50 nm και για εύρος συχνοτήτων 5 THz - 16.5 THz με τα αποτελέσματα να απεικονίζονται στα παρακάτω σχήματα.



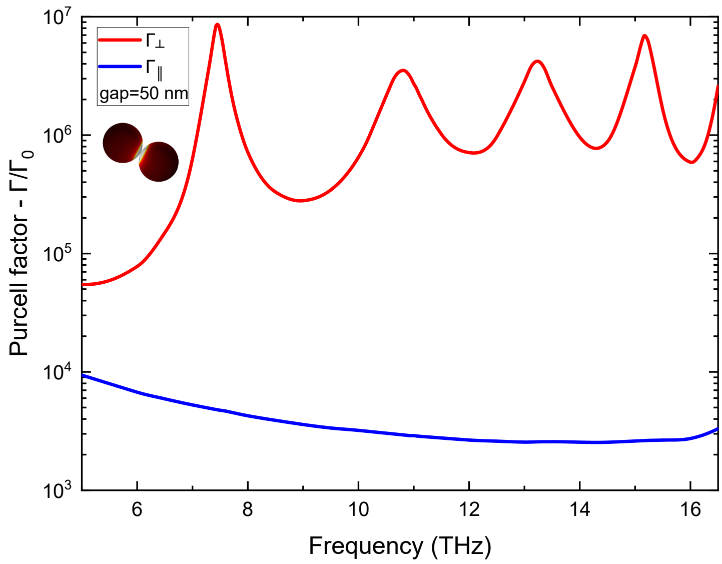
Σχήμα 14: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη (⊥) και παράλληλη (∥) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Se_3 για κενό 5000 nm.



Σχήμα 15: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη (⊥) και παράλληλη (∥) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Se_3 για κενό 4000 nm.



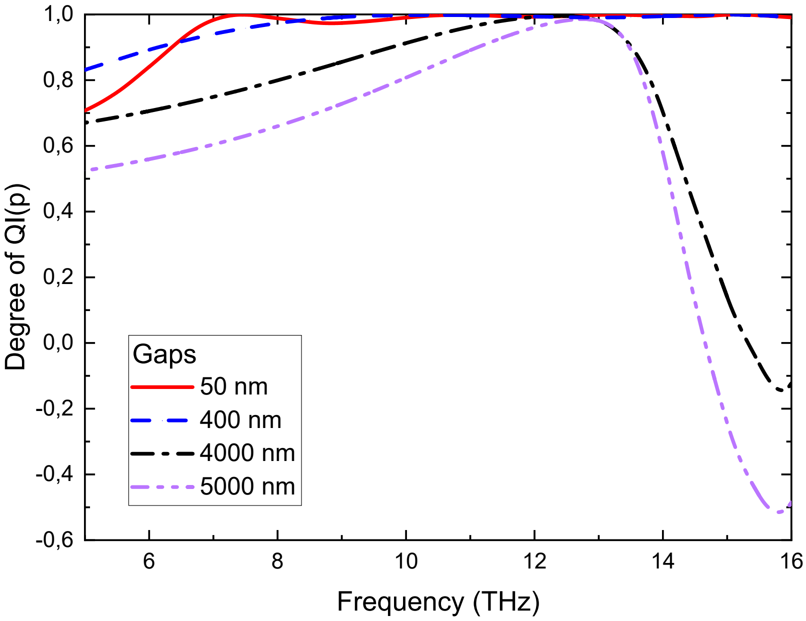
Σχήμα 16: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη (⊥) και παράλληλη (∥) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Se_3 για κενό 400 nm.



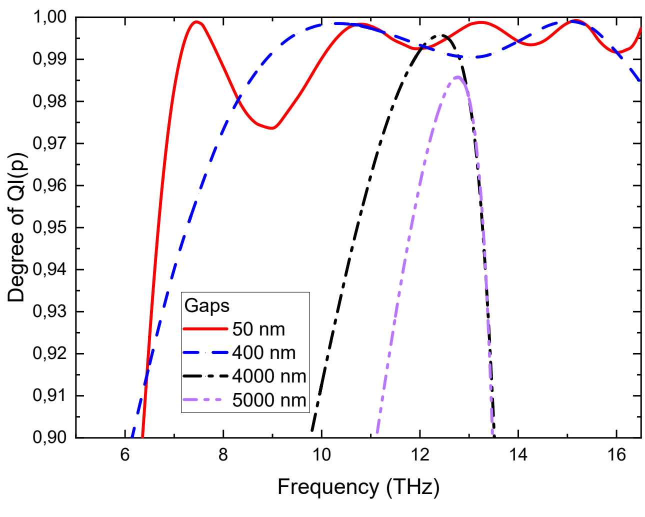
Σχήμα 17: Παράγοντας Purcell για διπολική ροπή κάθετη ($\perp$) και παράλληλη ($\parallel$) στις επιφάνειες των μικροσφαιρών Bi_2Se_3 για κενό 50 nm.

Ο παράγοντας Purcell, όπως και στην περίπτωση των μικροσφαιρών Bi_2Te_3, αυξάνεται για διπολική ροπή με διεύθυνση κάθετη στις επιφάνειες των μικροσφαιρών, ενώ για διπολική ροπή με διεύθυνση παράλληλη στις επιφάνειες των μικροσφαιρών ο παράγοντας Purcell μειώνεται. Οι πολαριτονικοί συντονισμοί είναι μετατοπισμένοι προς χαμηλότερες συχνότητες συγκριτικά με το διμερές σύστημα Bi_2Te_3, διότι η μεγιστοποιήση της διαφοράς των ρυθμών αποδιέγερσης $\Gamma_\perp$, $\Gamma_\parallel$ συμβαίνει για συχνότητες κοντά στα 12.5 THz οπότε ο ρυθμός αποδιέγερσης $\Gamma_\parallel$ του κβαντικού εκπομπού μειώνεται ακόμα περισσότερο. Συγκεκριμένα, στις συχνότητες 12.8 THz, 12.4 THz οι παράγοντες Purcell $\frac{\Gamma_\parallel}{\Gamma_0}$ λαμβάνουν τις τιμες $F_p = 0.0714$, $F_p = 0.0393$, για τα κενά 5000 nm, 4000 nm αντίστοιχα.

Τα μικροσωματίδια σεληνιούχου βισμουθίου και τα μικροσωματίδια τελουριούχου βισμουθίου έχουν φάσμα ρυθμών αυθόρμητης εκπομπής παρόμοιας μορφής αλλά στο διμερές σύστημα σεληνιούχου βισμουθίου παρουσιάζονται λίγο υψηλότεροι βαθμοί κβαντικής συμβολής λόγω των σχετικά ισχυρότερων πολαριτονικούς συντονισμών, οι οποίοι είναι μετατοπισμένοι προς χαμηλότερες τιμές στο φάσμα των συχνοτήτων.



(α΄) Βαθμός κβαντικης συμβολής για κενά 50 nm, 400 nm, 4000 nm, 5000 nm.



(β΄) Μεγέθυνση διαγράμματος κβαντικής συμβολής για τιμές $p = 0.9$ έως $p = 1$

Σχήμα 18: Βαθμός κβαντικης συμβολής-QI(p) για διμερές σύστημα μικροσφαιρών Bi_2Se_3 ακτίνας 2 μm.

5.3 Δυναμική πληθυσμού για μικροσφαίρες Bi_2Te_3

Οι υψηλοί βαθμοί κβαντικής συμβολής που επιτεύχθηκαν στο διμερές σύστημα μικροσωματιδίων από διχαλκογενίδια βισμουθίου υποδηλώνουν ότι θα παρουσιάζεται το φαινόμενο της παγίδευσης πληθυσμού. Για τα κενά 6000 nm, 5000 nm, 4000 nm προκύπτει η περίπτωση της ασθενούς σύζευξης και χρησιμοποιείται η προσέγγιση περιστρεφόμενου κύματος καθώς και η Μαρκοβιανή προσέγγιση Wigner – Weisskopf για τη Χαμιλτονιανή του συστήματος, οι οποίες μέσω της κβαντικής εξίσωσης Liouville, μας οδηγούν στην επίλυση των συζευγμένων διαφορικών εξισώσεων του πίνακα πυκνότητας. Οι εξισώσεις του πίνακα πυκνότητας λύνονται είτε αναλυτικά, είτε αριθμητικά και μας δίνουν τα στοιχεία του πίνακα πυκνότητας. Για την περίπτωση των νανοκενών 50 nm, 100 nm, 400 nm οι παραπάνω προσεγγίσεις δεν ισχύουν γιατί βρισκόμαστε στο όριο της ισχυρής σύζευξης και πρέπει να επιλυθεί από πρώτες αρχές η μη Μαρκοβιανή δυναμική των κυματοσυναρτήσεων των κβαντικών συστημάτων. Σε μελλοντική εργασία θα μελετηθούν τα προαναφερόμενα νανοκενά με τη μέθοδο της Διαφορικής Εξίσωσης Ενεργών Καταστάσεων (Effective Mode Differential Equation) [50] η οποία είναι μια αριθμητική μέθοδος που έχει εφαρμοστεί με επιτυχία σε κβαντικά συστήματα που ακολουθούν μη Μαρκοβιανή δυναμική.

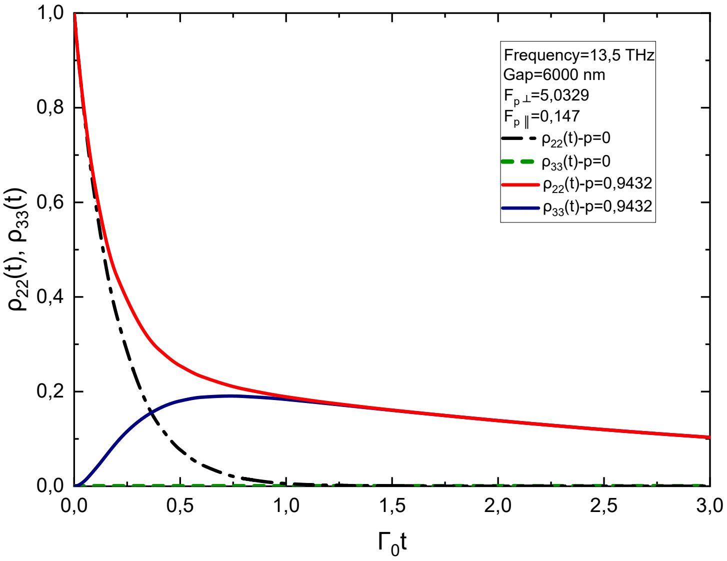
Παρατίθενται παρακάτω οι γραφικές παραστάσεις για τα κενά 6000 nm, 5000 nm, 4000 nm στο διμερές σύστημα Bi_2Te_3 που απεικονίζουν τη δυναμική του πληθυσμού για συχνότητες που συμπίπτουν με τους πολαριτονικούς συντονισμούς και τη μεγιστοποίηση του βαθμού της κβαντικής συμβολής. Επιπρόσθετα, θεωρείται η περίπτωση που εμφανίζεται το φαινόμενο της κβαντικής συμβολής καθώς και η περίπτωση που δεν υπάρχει κβαντική συμβολή, με αρχική συνθήκη ο πληθυσμός να είναι μόνο στην κατάσταση $|2\rangle$ και να μην έχει καθόλου πληθυσμό η κατάσταση $|3\rangle$, δηλαδή $\rho_{22}(t) = 1, \rho_{33}(t) = 0$. Από τις σχέσεις (4.5), (4.6), (4.7) υποθέτοντας ότι η μία μόνο διεγερμένη κατάσταση έχει πληθυσμό, προκύπτουν οι παρακάτω εξισώσεις [41]

$$\rho_{22}(t) = \frac{1}{4}\Big(e^{-\Gamma_{\parallel}t} + e^{-\Gamma_{\perp}t}\Big)^2 \tag{5.1}$$

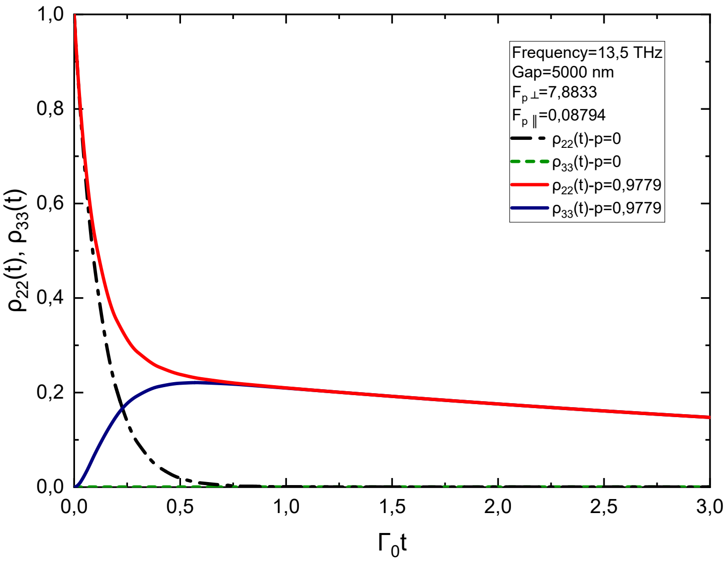
$$\rho_{33}(t) = \frac{1}{4}\Big(e^{-\Gamma_{\parallel}t} - e^{-\Gamma_{\perp}t}\Big)^2. \tag{5.2}$$

Αν δεν ληφθεί υπόψιν η κβαντική συμβολή ($p = k = 0$) τότε θα ισχύει

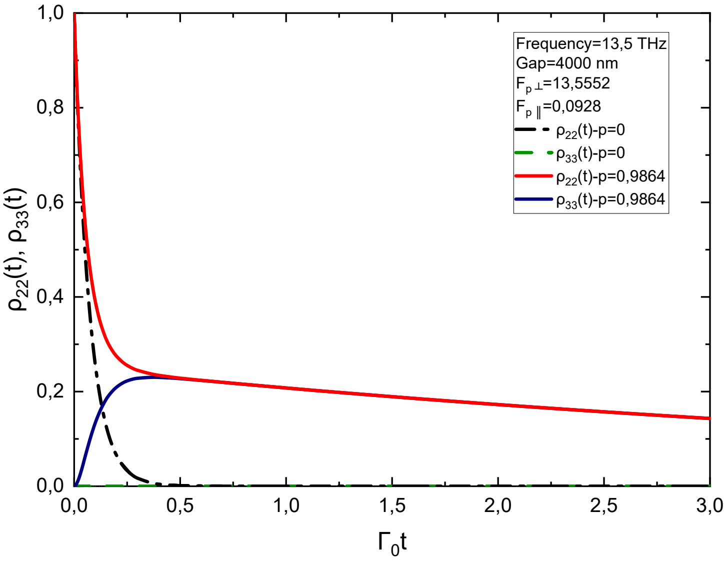
$$\rho_{22}(t) = e^{-(\Gamma_{\parallel}+\Gamma_{\perp})t}. \tag{5.3}$$



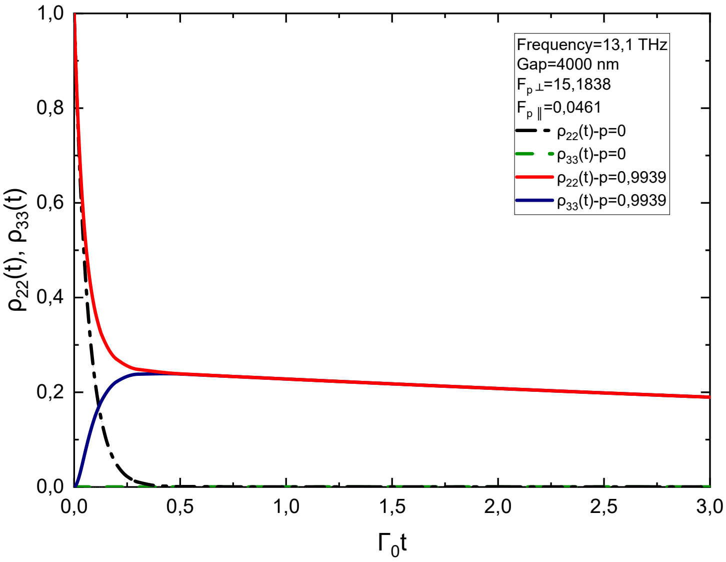
Σχήμα 19: Δυναμική πληθυσμού για συχνότητα εκπομπής 13.5 THz σε κενό 6000 nm μεταξύ μικροσφαιρών Bi_2Te_3.



Σχήμα 20: Δυναμική πληθυσμού για συχνότητα εκπομπής 13.5 THz σε κενό 5000 nm μεταξύ μικροσφαιρών Bi_2Te_3.



Σχήμα 21: Δυναμική πληθυσμού για συχνότητα εκπομπής 13.5 THz σε κενό 4000 nm μεταξύ μικροσφαιρών Bi_2Te_3.



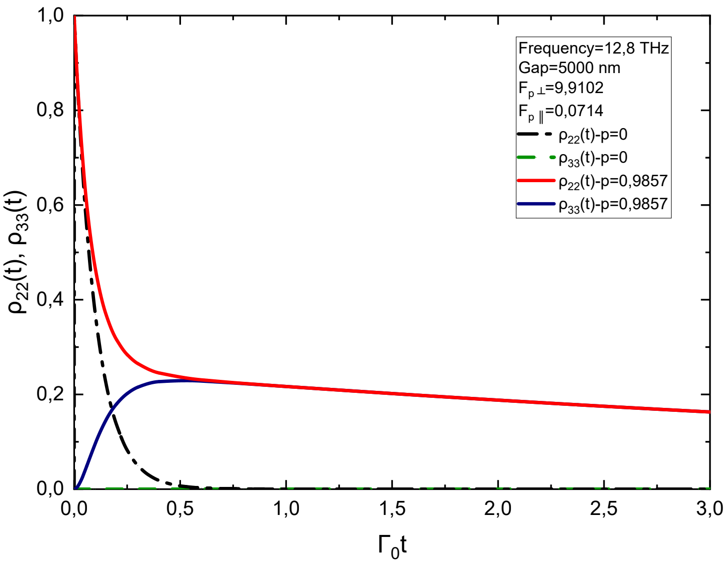
Σχήμα 22: Δυναμική πληθυσμού για συχνότητα εκπομπής 13.1 THz σε κενό 4000 nm μεταξύ μικροσφαιρών Bi_2Te_3.

Από τις γραφικές παραστάσεις φαίνεται πως όταν δεν υπάρχει το φαινόμενο της κβαντικής συμβολής ($p = 0$) η μείωση του πληθυσμού για την κατάσταση $|2\rangle$ είναι εκθετική με ρυθμό ανάλογο του αθροίσματος των ρυθμών αποδιέγερσης $\Gamma_\perp + \Gamma_\parallel$. Επιπρόσθετα, για $p = 0$ η κατάσταση $|3\rangle$ δεν εμφανίζει πληθυσμό. Όταν η κβαντική συμβολή είναι παρούσα, προκαλεί εμφάνιση πληθυσμού για την κατάσταση $|3\rangle$ και εκδηλώνεται το φαινόμενο της παγίδευσης πληθυσμού κατά το οποίο ο πληθυσμός των δύο διεγερμένων καταστάσεων είναι ίσος. Έπειτα από την παγίδευση του πληθυσμού τους, οι πληθυσμοί των διεγερμένων καταστάσεων του τρισταθμικού κβαντικού εκπομπού είναι ίσοι σε όλες τις μεταγενέστερες χρονικές στιγμές και παρουσιάζεται πολύ αργή μείωση του πληθυσμού τους, η οποία εξαρτάται από τον όρο $2\Gamma_\parallel$. Επιπλέον, παρατηρείται πως όσο πιο υψηλός είναι ο βαθμός της κβαντικής συμβολής τόσο πιο γρήγορα συμβαίνει η παγίδευση πληθυσμών αλλά και τόσο πιο αργά μειώνεται ο πληθυσμών των ενεργειακών σταθμών καθώς ο ρυθμός αποδιέγερσης που αντιστοιχεί σε ατομική διπολική ροπή κάθετη στις επιφάνειες των μικροσφαιρών μεγιστοποιείται και ο ρυθμός αποδιέγερσης που αντιστοιχεί σε ατομική διπολική ροπή παράλληλη στις επιφάνειες των μικροσφαιρών ελαχιστοποιείται. Η συγκεκριμένη παρατήρηση επαληθεύεται συγκρίνοντας το Σχήμα 21 με το Σχήμα 22 όπου διαπιστώνεται πως για διμερές μικροσφαίρες με κενό μεταξύ τους 4000 nm, σε συχνότητα 13.1 THz, ο βαθμός κβαντικής συμβολής είναι λίγο μεγαλύτερος απ΄ ότι στα 13.5 nm για το ίδιο κενό.

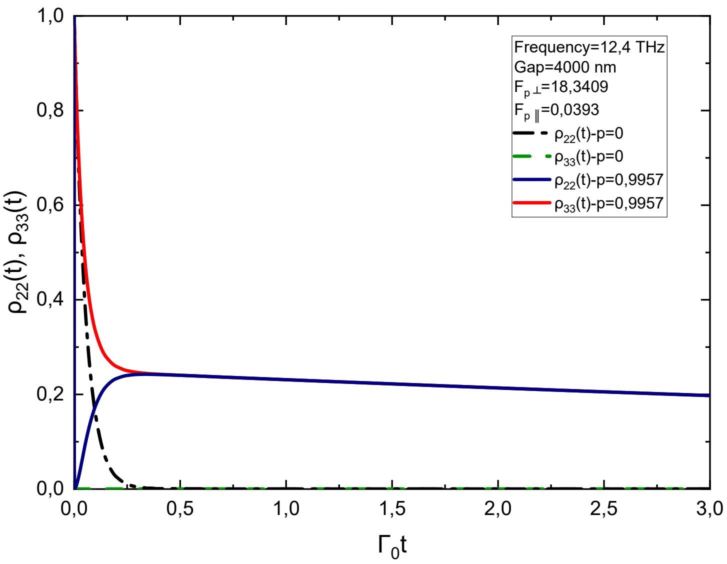
5.4 Δυναμική πληθυσμού για μικροσφαίρες Bi_2Se_3

Για τα κενά 4000 nm, 5000 nm στο διμερές σύστημα Bi_2Se_3, η δυναμική του πληθυσμού για συχνότητες που συμπίπτουν με την μεγιστοποίηση του βαθμού της κβαντικής συμβολής και με την υπόθεση ότι η μία μόνο διεγερμένη κατάσταση έχει πληθυσμό, όπως θεωρήθηκε και στην περίπτωση του Bi_2Te_3, τα αποτελέσμτα απεικονίζεται στα παρακάτω σχήματα.

Η χρονική εξέλιξη των καταστάσεων και το φαινόμενο της παγίδευσης πληθυσμού έχουν τον ίδιο χαρακτήρα με την περίπτωση του διμερούς συστήματος Bi_2Te_3, αλλά λόγω του υψηλότερου βαθμού κβαντικής συμβολής που παρουσιάζεται στις μικροσφαίρες Bi_2Se_3, η παγίδευση πληθυσμού συμβαίνει σε μικρότερο χρονικό διάστημα ενώ στη συνέχεια ο πληθυσμός των καταστάσεων φθίνει πιο αργά σε σχέση με τη μικροδομή των Bi_2Te_3.



Σχήμα 23: Δυναμική πληθυσμού για συχνότητα εκπομπής 12.8 THz σε κενό 5000 nm μεταξύ μικροσφαιρών Bi_2Se_3.



Σχήμα 24: Δυναμική πληθυσμού για συχνότητα εκπομπής 12.4 THz σε κενό 4000 nm μεταξύ μικροσφαιρών Bi_2Se_3.

Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία παρατηρήσαμε ότι το φάσμα της αυθόρμητης εκπομπής τρισταθμικού κβαντικού εκπομπού στο κενό μεταβάλλεται ραγδαία με ταυτόχρονη μεγιστοποίηση της κβαντικής συμβολής, μέσω του ανισοτροπικού φαινομένου Purcell, παρουσία μικροδομών απλής γεωμετρίας (σφαίρες) από διχαλκογενίδια βισμουθίου. Οι μικροσφαίρες διχαλκογενιδίων βισμουθίου προκαλούν ισχυρή αλληλεπίδραση ύλης-φωτός, διότι έχουν ανακλαστικές επιφάνειες με μικρές ωμικές απώλειες και ενισχύουν την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου ενισχύοντας έτσι την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου καθώς και τις διαθέσιμες ΗΜ καταστάσεις μέσω των ακτινικά πολωμένων πολαριτονικών διεγέρσεων στις επιφάνειες τους, στην περιοχή της υπέρυθρης ΗΜ ακτινοβολίας. Εύλογο είναι το συμπέρασμα πως το διμερές σύστημα μικροσφαιρών τελουριούχου βισμουθίου και σεληνιούχου βισμουθίου είναι ιδανικά για την ενίσχυση της κβαντικής συμβολής καθώς δεν είναι ευαίσθητα ως προς τις αποστάσεις και συχνότητες. Με άλλα λόγια, είναι εύκολη η πειραματική υλοποίηση των μικροσυστημάτων της παρούσας εργασίας, διότι ο βαθμός της κβαντικής συμβολής είναι υψηλός για μεγάλος εύρος συχνοτήτων και για μεγάλες αποστάσεις των μικροσφαιρών από τον κβαντικό εκπομπό. Συγκεκριμένα, για όλες τις εξεταζόμενες αποστάσεις μεταξύ των μικροσφαιρών υπάρχουν πολαριτονικοί συντονισμού που οδηγούν σε ενίσχυση της κβαντικής συμβολής ενώ η συχνότητα του κβαντικού εκπομπού δεν χρειάζεται να είναι αυστηρά προσδιορισμένη. Επίσης, αποδείχθηκε ότι ο ρυθμός αυθόρμητης εκπομπής εξαρτάται από τη διεύθυνση της διπολικής ροπής του κβαντικού εκπομπού καθώς τα διμερή συστήματα διχαλκογενιδίων βισμουθίου δημιουργούν μεγάλη ανισοτροπία σε οπτικές κοιλότητες. Εν κατακλείδι, παραρατηρήθηκε ότι η κβαντική συμβολή καθορίζει την δυναμική πληθυσμού τρισταθμικού κβαντικού εκπομπού και προκαλεί το φαινόμενο της παγίδευσης πληθυσμού.

Παράρτημα Α΄

Φωτονική πυκνότητα καταστάσεων

Υποθέτοντας ότι μελετούμε ΗΜ πεδίο σε πεπερασμένο κυβικό όγκο διαστάσεων $V = L^3$, όπου L αρκετά μεγάλο τέτοιο ώστε να διευκολύνει τον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων, η λύση για το ΗΜ πεδίο μπορεί να έχει τη μορφή επιπέδων κυμάτων ως εξής:

$$\mathbf{E_k(r,t)} = \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{E_k e^{i(kr-\omega_k t)}}. \tag{5.4}$$

Τα επίπεδα κύματα θα πρέπει να είναι εγκάρσια διότι στο κενό χώρο λόγω της εξίσωσης Maxwell (2.12) ισχύει

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{E_k} = 0. \tag{5.5}$$

Μέσω αναπτύγματος Fourier είναι εφικτό να γραφτεί το ΗΜ πεδίο ως

$$\mathbf{E_k}(\mathbf{r}, t) = \sum_{k_x,k_y,k_z} \mathbf{E_k} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t}. \tag{5.6}$$

Οι δυνατές τιμές των κυματανυσμάτων πηγάζουν από τις περιοδικές συνοριακές συνθήκες, και ως εκ τούτου, οι επιτρεπόμενες ΗΜ καταστάσεις αντιστοιχούν στις διακριτές τιμές κυματανύσματος

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, k_z = \frac{2\pi}{L} n_z. \tag{5.7}$$

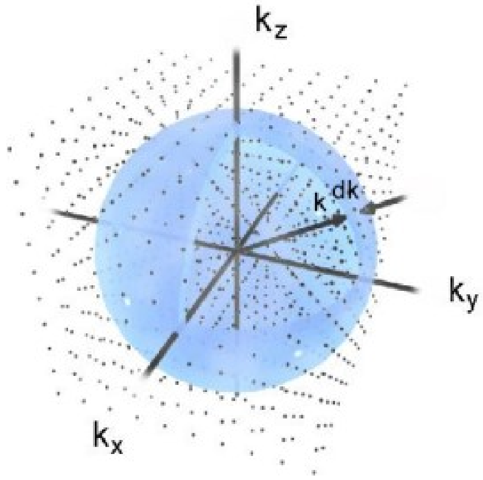
Δεδομένου ότι n_x, n_y, n_z είναι ακέραιοι αριθμοί, οι διακριτές τιμές κυματανύσματος γράφονται ως

$$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y, n_z). \tag{5.8}$$

Οι φωτονικές καταστάσεις απεικονίζονται από τρισδιάστατο πλέγμα στο οποίο κάθε σημείο αντιστοιχεί σε συγκεκριμένη τιμή κυματανύσματος. Τα διαδοχικά σημεία απέχουν μεταξύ τους $\frac{2\pi}{L}$ και κάθε επιτρεπόμενη κατάσταση καταλαμβάνει όγκο $(\frac{2\pi}{L})^3$.

Ο αριθμός των επιτρεπόμενων φωτονικών καταστάσεων μεταξύ των τιμών k και $k + dk$ υπολογίζεται ως εξής:

$$g_{3D}(k)dk = \frac{4\pi dk}{(2\pi/L)^3} = L^3 \frac{k^2}{2\pi^2} dk. \tag{5.9}$$



Σχήμα 25: Επιτρεπόμενες καταστάσεις στο χώρο των $\mathbf{k}$.

Μέσω κανονικοποίησης ως προ L^3 καταλήγουμε στο ότι η πυκνότητα φωτονικών καταστάσεων στο χώρο των $\mathbf{k}$ θα είναι

$$g(k) = \frac{k^2}{2\pi^2}. \tag{5.10}$$

Ουσιαστικά με αυτό τον τρόπο υπολογίζεται το πλήθος των καταστάσεων οι οποίες εμπεριέχονται μεταξύ σφαιρικών φλοιών με ακτίνα k και $k + dk$.

Για τον υπολογισμό του πλήθους καταστάσεων συναρτήσει συχνοτήτων, λαμβάνουμε υπόψιν ότι σε κάθε κατάσταση $\mathbf{k}$ υπάρχουν δύο βαθμοί ελευθερίας ως προς τη πόλωση των φωτονίων. Μετατρέποντας τις τιμές k και $k + dk$ στις αντίστοιχες συχνότητες ω και $\omega + d\omega$ προκύπτει

$$g(\omega) = \frac{2g(k)}{d\omega/dk} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \tag{5.11}$$

Αναφορές

[1] R. P. Feynman, Simulating physics with computers. Int. J. Theor. Phys. **21**, 467–488 (1982).

[2] T. Purcell, E. M. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies, *Phys. Rev.* **69**, 681 (1946).

[3] K. H. Drexhage, Influence of a dielectric interface on fluorescence decay time, *J. Luminesc.* **1**, 693–701 (1970).

[4] K. H. Drexhage, Interaction of light with monomolecular dye lasers, *Prog. Opt.* **12**, 163–232 (1974).

[5] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki and K. Horodecki, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 865 (2009).

[6] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, 2000).

[7] T. Yu and J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 140404 (2004).

[8] G. S. Agarwal, Anisotropic Vacuum-Induced Interference in Decay Channels, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5500 (2000).

[9] R. Feynman, There's plenty of room at the bottom, *Caltech Eng. Sci.*, **23(5)** 22–36, (1960).

[10] U. Hohenester, *Nano and Quantum Optics* (Springer, 2020).

[11] G. Siroki, D. Lee, P. Haynes, Single-electron induced surface plasmons on a topological nanoparticle, *Nat. Commun.* **7**, 12375 (2016).

[12] M. S. Rider, M. Sokolikova, S. M. Hanham, M. Navarro-Cia, P. D. Haynes, D. K. K. Lee, M. Daniele, M. C. Guidi, C. Mattevi, S. Lupi, and V. Giannini, Experimental signature of a topological quantum dot, *Nanoscale* **12**, 22817–22825 (2020).

[13] D. Karaoulanis, E. Paspalakis, and V. Yannopapas, Quantum interference near bismuth-chalcogenide microstructures, *J. Opt. Soc. Am. B* **38**, 3301-3308 (2021).

[14] G. D. Chatzidakis and V. Yannopapas, Strong electromagnetic coupling in dimers of topological-insulator nanoparticles and quantum emitters, *Phys. Rev. B* **101**, 165410 (2020).

[15] E. Paspalakis, S.-Q. Gong, and P. L. Knight, Spontaneous emission induced coherent effects in absorption and dispersion of a V-type three-level atom, *Opt. Commun.* **152**, 293–298 (1998).

[16] A. M. Gleason, Measures on the Closed Subspaces of a Hilbert Space, *J. Math. Mech.* **6**, 885 (1957).

[17] C. T. Tai, *Dyadic Green Functions in Electromagnetic Theory*, 2nd ed. (IEEE Press, 1994).

[18] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 3rd ed. (Wiley, 1999).

[19] M. Born, E. Wolf, *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*, 7th ed. (Cambridge University Press, 1999).

[20] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, L. P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media*, 2nd ed. (Elsevier, 1984).

[21] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics (Holt-Saunders, 1976).

[22] P. Anger, P. Bharadwaj, L. Novotny, Enhancement and quenching of single-molecule fluorescence, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 113002 (2006).

[23] J. A. Stratton, Electromagnetic Theory (McGraw-Hill Companies, 1941)

[24] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupond-Roc, and G. Grynberg, *Photons and Atoms* (Wiley, 1997).

[25] U. Fano, Description of States in Quantum Mechanics by Density Matrix and Operator Techniques, *Reviews of Modern Physics* **29**, 74-93 (1957).

[26] L. Novotny and B. Hecht, *Principles of Nano-Optics* (Cambridge University Press, 2012).

[27] W. Barnes, S. Horsley, W. Vos, Classical antennae, quantum emitters, and densities of optical states, *J. Opt.* **22**, 073501 (2019).

[28] Pierre Meystre and Murray Sargent, *Elements of Quantum Optics* (Springer-Verlag, 2007).

[29] E. T. Jaynes and F. W. Cummings, Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser, *in Proceedings of the IEEE* **51**, 89-109 (1963).

[30] B. Shore, *Manipulating Quantum Structures Using Laser Pulses* (Cambridge University Press, 2011).

[31] P. Lambropoulos and D. Petrosyan, *Fundamentals of quantum optics and quantum information: An introduction* (Springer-Verlag, 2006).

[32] R. Loudon, T*he Quantum Theory of Light* (Oxford University Press, 1983).

[33] M. Le Bellac, *Quantum Physics*, pp. 573 - 577, (Cambridge University Press, 2006).

[34] H. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, 2002).

[35] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd edn (Wiley, 1997).

[36] S.-Y. Zhu and M. O. Scully, Spectral line elimination and spontaneous emission cancellation via quantum interference, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 388 (1996).

[37] V. Yannopapas and N. V. Vitanov, Spontaneous emission of two-level atoms placed within clusters of metallic nanoparticles, *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 096210 (2007).

[38] V. Yannopapas and N. V. Vitanov, Electromagnetic Green's tensor and local density of states calculations for collections of spherical scatterers, *Phys. Rev. B* **75**, 115124 (2007).

[39] V. Yannopapas, E. Paspalakis, and N. V. Vitanov, Plasmon-induced enhancement of quantum interference near metallic nanostructures, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 063602 (2009).

[40] E. Paspalakis, C. H. Keitel, and P. L. Knight, Fluorescence control through multiple interference mechanisms, *Phys. Rev. A* **58**, 4868 (1998).

[41] S. Evangelou, V. Yannopapas, and E. Paspalakis, Simulating quantum interference in spontaneous decay near plasmonic nanostructures: population dynamics, *Phys. Rev. A* **83**, 055805 (2011).

[42] S. Evangelou, V. Yannopapas, and E. Paspalakis, Modifying free-space spontaneous emission near a plasmonic nanostructure, *Phys. Rev. A* **83**, 023819 (2011).

[43] M. Pelton, Modified spontaneous emission in nanophotonic structures, *Nature Photon* **9**, 427–435 (2015).

[44] H. Leng, B. Szychowski, MC. Daniel, M. Pelton, Strong coupling and induced transparency at room temperature with single quantum dots and gap plasmons, *Nat Commun* **9**, 4012 (2018).

[45] A. Ern, J.L. Guermond, *Theory and practice of finite elements* (Springer, 2004).

[46] M. Fox, *Quantum optics: an introduction*, (Oxford University Press, 2006).

[47] G. S. Agarwal, Spectroscopy of strongly coupled atom–cavity systems: a topical review, *J. Mod. Opt.* **45**, 449–470 (1998).

[48] D. S. Dovzhenko, a S. V. Ryabchuk, a Yu. P. Rakovich a,b,c and I. R. Nabiev, Light–matter interaction in the strong coupling regime: configurations, conditions, and applications, *Nanoscale* **10**, 3589 (2018).

[49] N. Iliopoulos, A. F. Terzis, V. Yannopapas, and E. Paspalakis, Prolonging entanglement dynamics near periodic plasmonic nanostructures, *Phys. Rev. B* **96**, 075405 (2017).

[50] I. Thanopulos, V. Yannopapas and E. Paspalakis, Non-Markovian dynamics in plasmon-induced spontaneous emission interference, *Phys. Rev. B* **95**, 075412 (2017).