

**Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο**  
**Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών**  
**Τομέας Φυσικής**



**ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**Φάσμα Αυθόρμητης Εκπομπής Φωτός Από Τετρασταθμικά Από Παρουσία  
Τοπολογικού Νανোসωματιδίου - Θεωρητική Μελέτη**

Στην επιστημονική περιοχή: Κβαντική Τεχνολογία

Μαργαρίτα - Γεωργία Παπαδάκη

Επιβλέπων: Βασίλειος Γιαννόπουλος - Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα , Σεπτέμβριος 2022



## Ευχαριστίες

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε κατά το ακαδημαϊκό έτος 2021-2022 στα πλαίσια του προγράμματος σπουδών της σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου.

Ευχαριστώ θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή κ. Βασίλειο Γιαννόπαπα για την ανάθεση της παρούσας εργασίας, αλλά και τις πολύτιμες γνώσεις που μου έδωσε για την ολοκλήρωσή της.

Ακόμη ευχαριστώ πολύ τους συμμετέχοντες στην εξεταστική επιτροπή, κ. Γεώργιο Τσιγαρίδα και κ. Ιωάννη Κομίνη.

Τέλος, ευχαριστώ τους γονείς και τον αδερφό μου Κωνσταντίνο, η επιστημονική καθοδήγηση του οποίου ήταν καθοριστική κατά τη διάρκεια των σπουδών μου.

Μαργαρίτα- Γεωργία Παπαδάκη © (2022) Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο. All rights Reserved. Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς το συγγραφέα. Οι απόψεις και τα συμπεράσματα που περιέχονται σ' αυτό το έγγραφο εκφράζουν το συγγραφέα και δεν πρέπει να ερμηνευτεί ότι αντιπροσωπεύουν τις επίσημες θέσεις του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

## Περίληψη

Σκοπός της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η μελέτη και ο υπολογισμός του φάσματος εκπομπής ενός τετρα-καταστασιακού κβαντικού εκπομπού (ΚΕ), όταν δίπλα σε αυτόν τοποθετηθεί μια σφαίρα υλικού  $Bi_2Te_3$  και νάνο-διαστάσεων .

Η εργασία χωρίζεται σε τρία τμήματα. Στο πρώτο, παρουσιάζεται το θεωρητικό υπόβαθρο που αφορά την αυθόρμητη εκπομπή και τα φαινόμενα που παρατηρούνται. Αναλύεται το φαινόμενο Purcell, η προσέγγιση του δισταθμικού ατόμου και σε πρώτη φάση, γίνεται συνοπτικός υπολογισμός του τανυστή Green του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, για μια σειρά απο σφαίρες.

Το δεύτερο τμήμα εστιάζει στις νανοδομές από χαλκογενίδια βισμούθιου και παρουσιάζεται το θεωρητικό μοντέλο ΚΕ- νάνο-σφαίρας, το οποίο υιοθετήθηκε.

Τέλος, στο τρίτο τμήμα περιλαμβάνονται τα αποτελέσματα που προέκυψαν από κώδικα, ο οποίος σχεδιάστηκε για τη συγκεκριμένη εργασία, προκειμένου να γίνουν οι απαραίτητοι υπολογισμοί και τα φάσματα εκπομπής.

Λέξεις Κλειδιά

εκπομπός, Green , νάνο-σφαίρα , Purcell

## Abstract

The purpose of this thesis is to study and present the results regarding the quantum effects that arise when a plasmonic nanostructure is placed next to a four-level quantum emitter.

This work is divided into three parts. The first focuses on the theoretical background of the spontaneous emission and the observed phenomena. The Purcell effect and the approximation of the two-level system are analyzed and a brief calculation of the Green's tensor of the electromagnetic field is initially made for a series of spheres.

The second part includes the properties of bismuth-chalcogenides materials and the theoretical background of the nanosphere- quantum emitter system is presented.

Finally, the last part includes the results obtained from a code, specifically developed for this work, in order to make the necessary calculations leading to the results demonstrated in the figures in this work.

### Keywords

emitter, Green, nanosphere, Purcell

## Περιεχόμενα

1.1 Εισαγωγή .....	7
1.2 Συντελεστές Einstein .....	9
1.3 Ρυθμοί ακτινοβολητικών μεταβάσεων .....	13
1.4 Ρυθμός αυθόρμητης εκπομπής στο κενό .....	15
1.5 Προσέγγιση δισταθμικού ατόμου .....	15
1.6 Φαινόμενο Purcell .....	21
1.7 Τανυστής ηλεκτρομαγνητικού πεδίου Green .....	23
2.1 Νανοδομές από χαλκογενίδια Βισμούθιου.....	27
2.2 Μοντέλο κβαντικού εκπομπού - Νανόςφαιρας.....	30
3.1 Αποτελέσματα .....	36
3.2 Συμπεράσματα .....	56

## 1.1 Εισαγωγή

Η αυθόρμητη εκπομπή δεν μπορεί να εξηγηθεί από την κλασική ηλεκτρομαγνητική θεωρία και είναι βασικά μια κβαντική διαδικασία. Σύμφωνα με την Αμερικανική Φυσική Εταιρεία, το φαινόμενο της αυθόρμητης εκπομπής προβλέφθηκε σωστά από τον Albert Einstein σε μια σειρά άρθρων που ξεκίνησε το 1916, με αποκορύφωμα αυτό που σήμερα ονομάζεται συντελεστής A του Einstein. Η κβαντική θεωρία της ακτινοβολίας του Einstein προέβλεψε ιδέες οι οποίες εκφράστηκαν αργότερα στην κβαντική ηλεκτροδυναμική και την κβαντική οπτική για αρκετές δεκαετίες. Αργότερα, μετά την επίσημη ανακάλυψη της κβαντικής μηχανικής το 1926, ο ρυθμός της αυθόρμητης εκπομπής περιγράφηκε με ακρίβεια από πρώτες αρχές από τον Dirac στην κβαντική θεωρία της ακτινοβολίας, τον πρόδρομο της θεωρίας που αργότερα ονόμασε κβαντική ηλεκτροδυναμική. Οι σύγχρονοι φυσικοί, όταν τους ζητείται να δώσουν μια φυσική εξήγηση για την αυθόρμητη εκπομπή, γενικά επικαλούνται την ενέργεια μηδενικού σημείου του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Το 1963, αναπτύχθηκε το μοντέλο των Jaynes-Cummings το οποίο περιγράφει το σύστημα ενός ατόμου δύο επιπέδων που αλληλεπιδρά με ένα σύντομο τρόπο οπτικής κοιλότητας, δηλαδή την αλληλεπίδραση ατόμου με ένα κβαντωμένο πεδίο φωτός, με μικρό πλήθος φωτονίων. Αυτά τα πειράματα οδήγησαν στην κβαντική ηλεκτροδυναμική κοιλότητας (QED), τη μελέτη δηλαδή, των αντιστρεπτών αλληλεπιδράσεων φωτός-ατόμου.

Γνωρίζοντας πλέον, ότι η αυθόρμητη εκπομπή των ατόμων δεν είναι μια αμετάβλητη διαδικασία που τα χαρακτηρίζει, έχει

ανακαλυφθεί ότι αυτή μπορεί να τροποποιηθεί ουσιαστικά μέσω δύο διαφορετικών μηχανισμών. Ο πρώτος μηχανισμός περιλαμβάνει την τροποποίηση της εσωτερικής δυναμικής του ατόμου, όπως για παράδειγμα, μέσω της κβαντικής συμβολής μεταξύ των διαφορετικών καναλιών αποδιέγερσης του ατόμου, η οποία μπορεί να επηρεάσει σε μεγάλο βαθμό το ρυθμό αυθόρμητης εκπομπής. Ο δεύτερος κύριος μηχανισμός “ελέγχου” του ρυθμού αυτού, είναι μέσω της σύζευξης ατόμου-κοιλότητας[1]. Τοποθετώντας το άτομο μέσα σε μια κοιλότητα, ουσιαστικά επιτυγχάνεται η τροποποίηση των συνοριακών ηλεκτρομαγνητικών συνθηκών, λ.χ μέσω αρνητικού δείκτη διάθλασης[2].

Η παρούσα ερευνητική εργασία μελετά το πώς η παρουσία μιας πλασματικής νανοδομής επηρεάζει την αυθόρμητη εκπομπή στο κενό, όταν τοποθετηθεί κοντά σε ένα κβαντικό σύστημα. Οι δύο καταστάσεις αυτού του συστήματος αλληλεπιδρούν με το κενό ενώ οι μεταβάσεις των άλλων δύο καταστάσεων επηρεάζονται από την παρουσία μιας νανόσφαιρας. Τα δυο “κανάλια” εκπομπής εμφανίζουν κβαντική συμβολή , η οποία όταν προσεγγίσει τη μονάδα αποκαλύπτει τη μαγεία της κβαντικής μηχανικής !



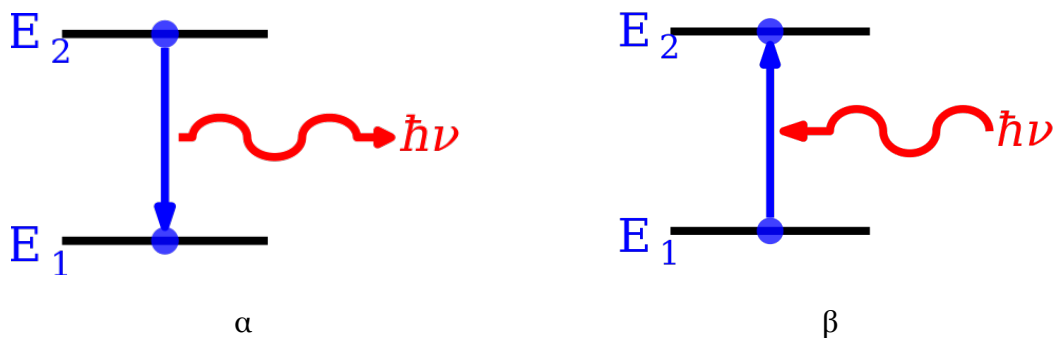
## 1.2 Συντελεστές Einstein

Στην κβαντική θεωρία της ακτινοβολίας, θεωρούμε ότι κάθε φορά που ένα άτομο εκτελεί μία μετάβαση ανάμεσα σε δύο κβαντικές καταστάσεις έχουμε εκπομπή ή απορρόφηση φωτός[3]. Η απορρόφηση συμβαίνει όταν το άτομο μεταβαίνει σε υψηλότερη στάθμη, ενώ η εκπομπή αντιστοιχεί στην διεργασία όπου εκπέμπεται ένα φωτόνιο καθώς το άτομο μεταπίπτει σε χαμηλότερη στάθμη. Η διατήρηση της ενέργειας απαιτεί η γωνιακή συχνότητα  $\omega$  του φωτονίου να ικανοποιεί την σχέση:

$$\hbar\nu = E_2 - E_1, (1)$$

όπου  $E_1$  και  $E_2$ , η ενέργεια χαμηλότερης και υψηλότερης στάθμης, αντίστοιχα .

Η ακτινοβολητική διεργασία κατά την οποία ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται σε μία υψηλή στάθμη πέφτει σε μία χαμηλή ονομάζεται αυθόρμητη εκπομπή. Το κάθε είδος ατόμου έχει ένα ιδιαίτερο, χαρακτηριστικό φάσμα αυθόρμητης εκπομπής, το οποίο καθορίζεται από τις ενεργειακές του στάθμες. Οι παραπάνω διεργασίες απεικονίζονται στο παρακάτω σχήμα 1:



Σχ.1: Οπτικές μεταβάσεις ανάμεσα σε δυο ενεργειακές καταστάσεις ατόμου :  
α) αυθόρμητη εκπομπή και β)απορρόφηση.

Ο ρυθμός με τον οποίο συντελείται η αυθόρμητη εκπομπή διέπεται από τον συντελεστή  $A_{21}(s^{-1})$  του Einstein για τη μετάβαση, ο οποίος εκφράζει την πιθανότητα ανά μονάδα χρόνου, ένα ηλεκτρόνιο που βρίσκεται στην υψηλότερη στάθμη να πέσει στην χαμηλότερη στάθμη, εκπέμποντας ένα φωτόνιο. Επομένως, ο ρυθμός εκπομπής φωτονίων είναι ανάλογος του πλήθους των ατόμων στην διεγερμένη κατάσταση και του συντελεστή  $A_{21}$  για την μετάβαση. Λόγω της αρχής αβεβαιότητας ενέργειας-χρόνου, η μετάβαση στην πραγματικότητα παράγει φωτόνια μέσα σε ένα στενό εύρος συχνοτήτων, το οποίο ονομάζεται φασματικό εύρος γραμμής. Εάν  $n_i$  είναι η πυκνότητα αριθμού των ατόμων στην κατάσταση  $i$ , τότε η μεταβολή στην πυκνότητα αριθμού των ατόμων στην κατάσταση 2 ανά μονάδα χρόνου λόγω αυθόρμητης εκπομπής θα είναι[4]:

$$\left(\frac{dn_2}{dt}\right)_{spontaneous} = -A_{21}n_2 \quad (2)$$

και ομοίως, ο πληθυσμός της στάθμης 1 θα αυξηθεί σύμφωνα με τη σχέση:

$$\left(\frac{dn_1}{dt}\right)_{spontaneous} = A_{21}n_1 \quad (3)$$

Αντίθετα, η διαδικασία της απορρόφησης, όταν δηλαδή το άτομο ανέρχεται από την χαμηλότερη στάθμη στη διεγερμένη κατάσταση απορροφώντας την απαιτούμενη ενέργεια από ένα φωτόνιο, δε θεωρείται αυθόρμητη. Το ηλεκτρόνιο δεν μπορεί να μεταπηδήσει στη διεγερμένη κατάσταση, παρά μόνο αν λάβει την απαιτούμενη

ενέργεια από ένα προσπίπτον φωτόνιο. Ακολουθώντας την πραγμάτευση του Einstein, έχουμε:

$$\left(\frac{dn_1}{dt}\right)_{absorption} = -B_{12}n_1\rho(\nu), \quad (4)$$

όπου  $\rho(\nu)$  είναι η φασματική πυκνότητα ενέργειας του ηλεκτρομαγνητικού κύματος σε γωνιακή συχνότητα  $\nu$ .

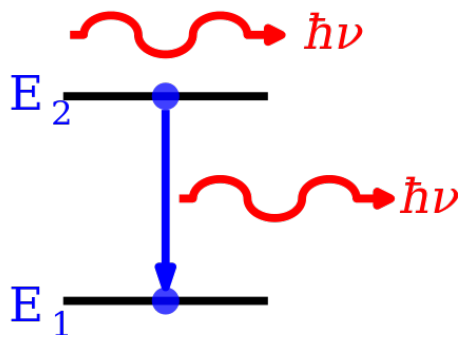
Τέλος, ο Einstein εισήγαγε ένα τρίτο είδος μετάβασης, τη λεγόμενη εξαναγκασμένη εκπομπή (Σχ.2). Στη διεργασία αυτή, το προσπίπτον φωτονιακό πεδίο μπορεί να προκαλέσει όχι μόνο ανωφερείς μεταβάσεις απορρόφησης, αλλά και κατωφερείς μεταβάσεις εκπομπής, σύμφωνα με τη σχέση :

$$\left(\frac{dn_1}{dt}\right)_{st.emission} = B_{21}n_2\rho(\nu) \quad (5)$$

Η εξαναγκασμένη εκπομπή είναι ένα σύμφωνο κβαντομηχανικό φαινόμενο, στο οποίο τα εκπεμπόμενα φωτόνια βρίσκονται σε φάση με εκείνα που προκαλούν την μετάβαση. Οι τρεις συντελεστές του Einstein συνδέονται μεταξύ τους: εάν γνωρίζουμε τον έναν από αυτούς, μπορούμε να υπολογίσουμε τους άλλους δύο:

$$0 = A_{21}n_2 + B_{21}n_2\rho(\nu) - B_{12}n_1\rho(\nu), \quad (6)$$

αφού σε θερμοδυναμική ισορροπία, η καθαρή μεταβολή στον αριθμό των διεγερμένων ατόμων είναι μηδέν, εξισορροπούμενη από την απώλεια και το κέρδος λόγω όλων των διεργασιών.



Σχ.2: Μετάβαση εξαναγκασμένης εκπομπής ανάμεσα σε δύο στάθμες ενός ατόμου παρουσία ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.

Δεδομένου ότι τα άτομα βρίσκονται σε θερμική ισορροπία με το πεδίο ακτινοβολίας σε θερμοκρασία  $T$ , η κατανομή τους στις διάφορες ενεργειακές στάθμες θα διέπεται από τους νόμους της θερμοδυναμικής. Από την κατανομή Boltzmann, για τον αριθμό των διεγερμένων ατόμων  $i$ , έχουμε:

$$\frac{n_i}{n} = \frac{g_i e^{-E_i/kT}}{Z} \quad (7)$$

όπου  $n$  είναι η ολική πυκνότητα αριθμού των ατόμων, διεγερμένων και μη,  $k$  είναι η σταθερά του Boltzmann,  $T$  είναι η θερμοκρασία,  $g_i$  είναι ο εκφυλισμός της κατάστασης  $i$  και  $Z$  είναι η συνάρτηση κατανομής.

Από τον νόμο του Planck για την ακτινοβολία μέλανος σώματος στη θερμοκρασία  $T$  για τη φασματική ακτινοβολία στη συχνότητα  $\nu$ , έχουμε:

$$\rho_\nu(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \cdot (8)$$

Επαγωγικά, οι παραπάνω σχέσεις δίνουν :

$$g_1 B_{12} = g_2 B_{21} \quad \text{και} \quad A_{21} = \frac{\hbar\nu^3}{\pi^2 c^3} B_{21} \quad (9),(10)$$

### 1.3 Ρυθμοί ακτινοβολητικών μεταβάσεων

Η αλληλεπίδραση φωτός - ύλης περιγράφεται μέσω των πιθανοτήτων μετάβασης (θεωρία χρονοεξαρτημένων διαταραχών), οι οποίες στην περίπτωση της αυθόρμητης εκπομπής μπορούν να υπολογιστούν με χρήση του χρυσού κανόνα του Fermi. Σύμφωνα με αυτόν τον κανόνα, ο ρυθμός μεταβολής της δίνεται από τον τύπο:

$$W_{1 \rightarrow 2} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |M_{12}|^2 g(\omega) \quad (11),$$

όπου  $M_{12}$  είναι το στοιχείο μήτρας για την μετάβαση, και  $g(\omega)$  είναι η πυκνότητα καταστάσεων[5]. Για την πυκνότητα καταστάσεων χρησιμοποιούμε τον συνήθη τύπο για τους φωτονιακούς τρόπους στον κενό χώρο:

$$g(\omega) = \frac{\omega^2 V}{\pi^2 c^3} \quad (12)$$

, όπου  $V$  ο όγκος της κοιλότητας στην οποία εκπέμπει το άτομο, ενώ για το στοιχείο μήτρας  $M_{12}$  χρησιμοποιούμε την ηλεκτροδιπολική αλληλεπίδραση:

$$M_{12} = \langle p \cdot E \rangle \quad (13)$$

, όπου  $p$  η ατομική διπολική ροπή και  $E$  το πεδίο του κενού .

Κατόπιν, μπορούμε μέσω του χρυσού κανόνα του Fermi να υπολογίσουμε τον ρυθμό μετάβασης ανά άτομο, ο οποίος μπορεί να εξισωθεί με την πιθανότητα μετάβασης  $B_{12}\rho(\nu)$ . Συγκεκριμένα, ο ρυθμός αυθόρμητης εκπομπής δίνεται από το συντελεστή  $A$  του Einstein, ως:

$$W = A_{21} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3} B_{21} \quad (14)$$

Στο επίπεδο της προσέγγισης του Einstein λοιπόν, η διαδικασία αυτή της αυθόρμητης εκπομπής αντιμετωπίζεται σαν ένα καθαρά τυχαίο συμβάν που διέπεται από κάποιες πιθανότητες αποδιέγερσης. Σε βαθύτερο επίπεδο ωστόσο, μπορεί να θεωρηθεί σαν διαδικασία εξαναγκασμένης εκπομπής η οποία πυροδοτείται από ένα φωτόνιο του κενού. Συνεπώς, η τυχαιότητα αποδίδεται στον κβαντικό θόρυβο των διακυμάνσεων μηδενικού σημείου του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου.

#### **1.4 Ρυθμός αυθόρμητης εκπομπής στο κενό**

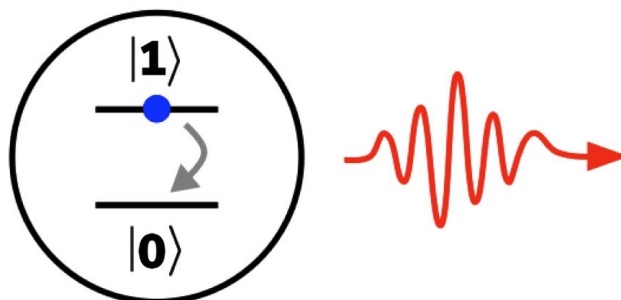
Σήμερα είναι γνωστό, πως η αυθόρμητη εκπομπή δεν είναι εγγενής ιδιότητα ενός φωτονιακού υλικού. Στην πραγματικότητα, προκύπτει λόγω της αλληλεπίδρασης μεταξύ του υλικού και του τοπικού ηλεκτρομαγνητικού του περιβάλλοντος και συνεπώς η τυχαιότητα αποδίδεται στον κβαντικό θόρυβο των διακυμάνσεων μηδενικού σημείου του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου[6]. Η αλλαγή του περιβάλλοντος μπορεί επομένως, να αλλάξει το ρυθμό εκπομπής. Οι σημαντικές αυξήσεις στον ρυθμό εκπομπής απαιτούν έναν οπτικό συντονιστή που αποθηκεύει το φως σε όσο το δυνατόν μικρότερο όγκο, για όσο το δυνατόν περισσότερο. Αυτό επιτυγχάνεται επί του παρόντος χρησιμοποιώντας δύο κύρια συστήματα: μικροκοιλότητες φωτονικών κρυστάλλων και νανοσωματίδια πλασμονικού μετάλλου. Αυτά τα δύο συστήματα έχουν αναπτυχθεί σε μεγάλο βαθμό ανεξάρτητα, αλλά οι υποκείμενοι φυσικοί μηχανισμοί είναι οι ίδιοι.

#### **1.5 Προσέγγιση δισταθμικού ατόμου**

Το άτομο έχει πολλές κβαντικές στάθμες, μεταξύ των οποίων υπάρχουν πολλές δυνατές οπτικές μεταβάσεις. Στην προσέγγιση του δισταθμικού ατόμου όμως, εξετάζουμε μόνο τη συγκεκριμένη μετάβαση που ικανοποιεί την εξίσωση [1] και αγνοούμε τις άλλες στάθμες. Η φυσική βάση της δισταθμικής προσέγγισης είναι το γεγονός ότι η διαδικασία που μελετάμε, αποτελεί ένα φαινόμενο συντονισμού. Με άλλα λόγια, όταν η γωνιακή συχνότητα του φωτός

συμπίπτει με μία από τις οπτικές μεταβάσεις του ατόμου, έχουμε μία αλληλεπίδραση συντονισμού ανάμεσα σε αυτή τη μετάβαση και το πεδίο του φωτός. Μπορούμε επομένως να αγνοήσουμε τις άλλες στάθμες του ατόμου, οι οποίες αλληλεπιδρούν με το φως ασθενώς, καθώς είναι εκτός συντονισμού[7] .

Θεωρούμε δισταθμικό άτομο με θεμελιώδη και διεγερμένη στάθμη  $|0\rangle$  και  $|1\rangle$  , αντίστοιχα . Θα υπολογίσουμε το ρυθμό με τον οποίο το άτομο αποδιεγείρεται αυθόρμητα στη χαμηλότερη ενεργειακά στάθμη, με εκπομπή ενός φωτονίου [8].



Σχ.3: Εκπομπή φωτονίου κατά την αυθόρμητη αποδιέγερση δισταθμικού ατόμου .

Έστω η κυματοσυνάρτηση που περιγράφει την αρχική κατάσταση,  $|\psi(0)\rangle = |1, [0]\rangle$  .

Το άτομο ξεκινά από τη διεγερμένη κατάσταση  $|1\rangle$  , ενώ το πεδίο ακτινοβολίας αποτελείται από ένα συνεχές φάσμα τρόπων, τους οποίους εκλαμβάνουμε ως κοιλότητα άπειρων διαστάσεων [9]. Το πεδίο ακτινοβολίας ξεκινά από την κατάσταση  $|[0]\rangle$  .



Η τελική κατάσταση θα είναι η  $|\psi(\infty)\rangle = |0,1_{\vec{k}}\rangle$ , αφού εν τελεί το άτομο θα αποδιεγερθεί στη θεμελιώδη κατάσταση εκπέμποντας ένα φωτόνιο με τρόπο  $\vec{k}$ .

Ο γραμμικός συνδυασμός της αρχικής και τελικής κατάστασης θα δώσει και ολοκληρωμένη βάση που θα περιγράψει την χρονοεξαρτημένη κατάσταση του συστήματος :

$$|\psi(t)\rangle = C_0^1(t)e^{-i\omega_0 t} |1,[0]\rangle + \sum_{\vec{k}} C_{1\vec{k}}^0(t)e^{-i\omega_k t} |0,1_{\vec{k}}\rangle \quad (15)$$

- Θεωρία Wigner-Weisskopf

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος είναι [10]:

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_F + \hat{H}_I \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \hat{H} = \hbar\omega_0 |e\rangle \langle e| + \sum_{\vec{k}} \hbar\omega_k \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + \\ + \sum_{\vec{k}} \hbar g_k (|e\rangle \langle g| \hat{a}_{\vec{k}} + |g\rangle \langle e| \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger) \end{aligned}$$

όπου η σταθερά ζεύξης ατόμου- πεδίου :

$$g_{\vec{k}} = i \sqrt{\frac{\omega_k}{2\hbar\epsilon_0 V}} (\vec{d} \cdot \vec{e}_{\vec{k}})$$

- Εξίσωση Schrödinger : Χρονική εξέλιξη του συστήματος

$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} \quad (17)$$

Αν την προβάλλουμε στις καταστάσεις  $\langle 1, [0] |$  και  $\langle 0, 1_{\vec{k}} |$ ,

τότε :

$$\frac{\partial}{\partial t} C_0^1(t) = i \sum_{\vec{k}} g_{\vec{k}} e^{-i(\omega_k - \omega_0)t} C_{1\vec{k}}^0(t) \quad (A)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{1\vec{k}}^0(t) = i g_{\vec{k}}^* e^{i(\omega_k - \omega_0)t} C_0^1(t) \quad (B)$$

Ολοκληρώνοντας τη (B), παίρνουμε :

$$C_{1\vec{k}}^0(t) = i g_{\vec{k}}^* \int_0^t dt' e^{i(\omega_k - \omega_0)t'} C_0^1(t')$$

Και αντικαθιστούμε στην (A):

$$\frac{\partial}{\partial t} C_0^1(t) = - \sum_{\vec{k}} |g_{\vec{k}}|^2 \int_0^t dt' e^{i(\omega_k - \omega_0)(t-t')} C_0^1(t')$$

- Μετάβαση από το διακριτό στο συνεχές φάσμα

Για  $V \rightarrow \infty$  έχουμε :

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow 2 \int d^3k D(k) \Rightarrow \sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{2V}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^\infty k^2 dk$$

Όμως ,

$$\sum_{\vec{k}} |g_{\vec{k}}|^2 \rightarrow \int_0^\infty dk k^2 \frac{\omega_k}{(2\pi)^3 \hbar \epsilon_0} \left[ \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi (\vec{d} \cdot \vec{e}_{\vec{k}})^2 \right]$$

και αφού  $\omega_k = ck$ ,

$$\sum_{\vec{k}} |g_{\vec{k}}|^2 \rightarrow \frac{|\vec{d}|^2}{6\pi^2 \hbar \epsilon_0 c^3} \int_0^\infty \omega_k^3 d\omega_k \quad (18)$$

- Προσέγγιση Wigner-Weisskopf

Εξετάζουμε το ολοκλήρωμα  $\int_0^t dt' e^{i(\omega_k - \omega_0)(t-t')} C_0^1(t')$ . Θεωρούμε

ότι ο όρος  $C_0^1(t)$  παίρνει τιμές σε μια χρονική κλίμακα για  $\Gamma \ll \omega_0$ ,

$C_0^1(t') \rightarrow C_0^1(t)$ , οπότε και εξέρχεται από το ολοκλήρωμα :

$$C_0^1(t) \int_0^t dt' e^{i(\omega_k - \omega_0)(t-t')}$$

,δηλαδή το σύστημα δεν έχει μνήμη του παρελθόντος (προσέγγιση Markov).

Για τις χρονικές κλίμακες  $t \gg \frac{1}{\omega_0}$  που μας ενδιαφέρουν ,

$$\int_0^t \rightarrow \int_0^\infty \text{ και άρα}$$

$$\int_0^\infty dt' e^{i(\omega_k - \omega_0)(t-t')} = \pi \delta(\omega_k - \omega) - iP\left(\frac{1}{\omega_k - \omega}\right)$$

,όπου P είναι το κύριο μέρος κατά Cauchy.

$$\text{Επαγωγικά , } \frac{\partial}{\partial t} C_0^1(t) = - \sum_{\vec{k}} |g_{\vec{k}}|^2 \int_0^t dt' e^{i(\omega_k - \omega_0)(t-t')} C_0^1(t') \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_0^1(t) = \frac{|\vec{d}|^2}{6\pi^2 \hbar \epsilon_0 c^3} \int_0^\infty d\omega_k \omega_k^3 \pi \delta(\omega_k - \omega_0) C_0^1(t) \quad (20)$$

Για τη χρονική εξέλιξη της διεγερμένης κατάστασης προκύπτει λοιπόν:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_0^1(t) = \frac{-\Gamma}{2} C_0^1(t) \quad \mu\epsilon \quad \Gamma = \frac{|\vec{d}|^2 \omega_0^3}{6\pi^2 \hbar \epsilon_0 c^3} \Rightarrow C_0^1(t) = e^{-\frac{\Gamma}{2}t} C_0^1(0) \quad (21)$$

Συμπεραίνουμε ότι το μέτρο της διεγερμένης κατάστασης αποδιεγείρεται εκθετικά με ρυθμό  $\Gamma$ , δηλαδή συντελεστή A Einstein .

- Φάσμα του εκπεμπόμενου φωτός

Λύνοντας τώρα την εξίσωση (B):

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{1\vec{k}}^0(t) = ig_{\vec{k}}^* e^{i(\omega_k - \omega_0)t} e^{-\frac{\Gamma}{2}t} C_0^1(0) \quad (22)$$

Αυτή η διαδικασία έχει άπειρο χρόνο ολοκλήρωσης .  
Ολοκληρώνοντας:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |C_{1\vec{k}}^0(t)| = \frac{|ig_{\vec{k}}|}{\frac{\Gamma^2}{4} + (\omega_k - \omega_0)^2} \quad (23)$$

,δηλαδή το φάσμα είναι Λορεντζιανό.

## 1.6 Το φαινόμενο Purcell

Το φαινόμενο Purcell [11] είναι η ενίσχυση του ρυθμού αυθόρμητης εκπομπής ενός κβαντικού συστήματος από το περιβάλλον του. Στη δεκαετία του 1940 ο Edward Mills Purcell ανακάλυψε την ενίσχυση των ρυθμών αυθόρμητης εκπομπής των

ατόμων, όταν αυτά ενσωματώνονται σε μια κοιλότητα συντονισμού, στο όριο της ασθενούς σύζευξης. Θεωρούμε μονοτροπική κοιλότητα, δηλαδή ότι υπάρχει μόνο ένας σύντονος τρόπος της κοιλότητας ο οποίος να βρίσκεται κοντά στην συχνότητα εκπομπής του ατόμου.

Το μέγεθος της ενίσχυσης σε ακριβή συντονισμό, όταν τα δίπολα είναι προσανατολισμένα στην κατεύθυνση του πεδίου, δίνεται από τον παράγοντα Purcell:

$$F_p = \frac{3}{4\pi^2} \left( \frac{\lambda_{free}}{n} \right)^3 \left( \frac{Q}{V} \right) \quad (24)$$

,όπου  $\lambda_{free}/n$  είναι το μήκος κύματος εντός της κοιλότητας με δείκτη διάθλασης  $n$  και  $Q, V$  είναι ο ποιοτικός παράγοντας και ο όγκος της κοιλότητας, αντίστοιχα. Παράγοντας Purcell μεγαλύτερος της μονάδας σημαίνει ότι ο ρυθμός αυθόρμητης εκπομπής αυξάνεται μέσω της κοιλότητας, ενώ  $F_p < 1$  σημαίνει ότι κοιλότητα εμποδίζει την εκπομπή.

## 1.7 Τανυστής ηλεκτρομαγνητικού πεδίου Green

Ξεκινώντας από μια κλασική προσέγγιση, ο τανυστής Green του ηλεκτρομαγνητικού (HM) πεδίου δίνεται από την μη-ομογενή εξίσωση του Helmholtz[42],[21]:

$$[\nabla \times \frac{1}{\mu(\mathbf{r}, \omega)} \nabla \times - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega)] \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (26)$$

μαζί με την οριακή συνθήκη  $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \rightarrow \mathbf{0}$  όταν  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ ,

$$\text{ή εισάγοντας τον τελεστή } \mathbf{\Lambda}(\mathbf{r}) = \frac{c_0^2}{\varepsilon(\mathbf{r})\mu(\mathbf{r})} \nabla \times \nabla \times \quad (27) :$$

$$\sum_i [\omega^2 \delta_{ii} - \Lambda_{ii}(\mathbf{r})] G_{ii'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \delta_{ii'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (28)$$

όπου  $c_0$  είναι η ταχύτητα του φωτός στο κενό και  $\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)$ ,  $\mu(\mathbf{r}, \omega)$  η σχετική ηλεκτρική επιτρεπτότητα και μαγνητική διαπερατότητα, αντίστοιχα .

Για ομογενές μέσο, η συνάρτηση Green γράφεται [21]:

$$g_{ii'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega^2) = \frac{\rho V}{(2\pi)^3} \int d^3 q \sum_p \frac{u_{pq;i}(\mathbf{r}) u_{pq;i'}^*(\mathbf{r}')}{\omega^2 - \omega_{pq}^2} \quad (29)$$

,με  $\rho=1$  για διαμήκη κύματα και  $\rho=2,3$  για εγκάρσιους τρόπους διάδοσης και  $q$  το κυματόνισμα. Οι συναρτήσεις  $u$  ικανοποιούν τις παρακάτω σχέσεις[22]:

$$\sum_{\alpha} \sqrt{\rho(\mathbf{r})} u_{\alpha;i}^*(\mathbf{r}) \sqrt{\rho(\mathbf{r}')} u_{\alpha;i}(\mathbf{r}') = \delta_{ii'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (30\alpha)$$

$$\sum_i \int_V d^3r \rho(\mathbf{r}) u_{\alpha;i}^*(\mathbf{r}) u_{\alpha';i}(\mathbf{r}) = \delta_{\alpha\alpha'} \quad (30\beta)$$

,εξασφαλίζοντας ότι ο  $\Lambda(\mathbf{r})$  είναι ερμιτιανός. Ο δείκτης  $\alpha$  αντιπροσωπεύει τις ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις του.

Ακόμη, το πεδίο ικανοποιεί την παρακάτω αδιάστατη εξίσωση :

$$\sqrt{\rho} \nabla \mathbf{u}_{pq}(\mathbf{r}) = \exp[i\mathbf{q}\mathbf{r}] \hat{e}_p(\mathbf{q}) \quad (31)$$

,απ' όπου προσδιορίζονται οι ιδιοσυναρτήσεις  $\sqrt{\rho} u_{pq}(\mathbf{r})$  του πεδίου .

Για μια συλλογή από  $N_s$  σφαίρες σε θέσεις  $\mathbf{R}_n$  σε ομογενές μέσο, το εξερχόμενο σφαιρικό κύμα στη θέση  $\mathbf{R}'_n$  μπορεί να αναπτυχθεί ως εξής :

$$\mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}'_n) = \sum_L \Omega_{LL'}^{nn'} \mathbf{J}_L(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (32)$$

,όπου οι όροι  $\Omega_{LL'}^{nn'}$  για το κενό χώρο, δίνονται παρακάτω .

Το εξερχόμενο σφαιρικό κύμα στη θέση  $\mathbf{R}'_n$  μπορεί να γράφει ως εισερχόμενο σφαιρικό κύμα στη θέση  $\mathbf{R}_n$ :



$$\sum_{L'} b_{L'}^{+n'} \mathbf{H}_{L'}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{n'}) \rightsquigarrow \sum_L b_L^{n'} \mathbf{J}_L(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \quad (33)$$

$$\text{, με } b_L^{n'} = \sum_{L'} \Omega_{LL'}^{nn'} b_{L'}^{+n'}$$

Η τελική έκφραση για τον ταυστή Green προκύπτει ύστερα από αναλυτικούς υπολογισμούς[21] :

$$\begin{aligned} G_{ii'}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_{n'} + \mathbf{r}'_{n'}) &= g_{ii'}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_{n'} + \mathbf{r}'_{n'}) \\ &+ \sum_{n''} \int d^3 r''_{n''} \sum_{kk'} g_{ik}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_{n''} + \mathbf{r}''_{n''}) \\ &\times \Gamma_{kk'}^{n''}(\mathbf{r}''_{n''}) G_{k'i'}(\mathbf{R}_{n''} + \mathbf{r}''_{n''}, \mathbf{R}_{n'} + \mathbf{r}'_{n'}) \quad [34] \end{aligned}$$

$$\text{, για } \hat{\Gamma} = \hat{\Lambda} - \hat{\Lambda}_0 \text{ και } \Gamma_{ii'}^{n''}(\mathbf{r}_n) = \Gamma_{ii'}(\mathbf{R}_n + \mathbf{r}_n).$$

Για τους όρους  $\Omega_{LL'}^{nn'}$  διανυσματικού πεδίου έχουμε :

$$\begin{aligned} \Omega_{Elm;El'm'}^{nn'} &= \Omega_{Hlm;Hl'm'}^{nn'} \\ &= (\psi_l \psi_{l'})^{-1} [2a_l^{-m} a_{l'}^{-m'} G_{l'm'-1;l m-1}(\mathbf{R}_{nn'}; q_h) + m m' G_{l'm';l m}(\mathbf{R}_{nn'}; q_h) \\ &+ 2a_l^m a_{l'}^{m'} G_{l'm'+1;l m+1}(\mathbf{R}_{nn'}; q_h)] \quad (35) \text{ και} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Omega_{Hlm;El'm'}^{nn'} &= -\Omega_{Elm;Hl'm'}^{nn'} \\ &= (2l+1)(\psi_l \psi_{l'})^{-1} \times [-2a_{l'}^{-m'} \gamma_l^m G_{l'm'-1;l-1 m-1}(\mathbf{R}_{nn'}; q_h) + m' \zeta_l^m G_{l'm';l-1 m}(\mathbf{R}_{nn'}; q_h) \\ &+ 2a_{l'}^{m'} \gamma_l^{-m} G_{l'm'+1;l-1 m+1}(\mathbf{R}_{nn'}; q_h)] \quad (36) \end{aligned}$$

$$\text{όπου } \psi_l = \sqrt{l(l+1)},$$

$$a_l^m = \frac{1}{2}[(l-m)(l+m+1)]^{1/2}, \quad (37\alpha)$$

$$\gamma_l^m = \frac{1}{2}[(l+m)(l+m+1)]^{1/2}/[(2l-1)(2l+1)]^{1/2} \quad (37\beta) \text{ και}$$

$$\zeta_l^m = [(l+m)(l-m)]^{1/2}/[(2l-1)(2l+1)]^{1/2} \quad (37\gamma)$$

$$\begin{aligned} \text{Τέλος, } G_{lm;l'm'}(\mathbf{R}_{nn'}; q_h) &= 4\pi \sum_{l''m''} (-1)^{(l-l'-l'')/2} (-1)^{m'+m''} \\ &\times B_{lm}(l''m''; l'm') h_{l''}^+(q_h R_{nn'}) Y_{l''-m''}(\hat{R}_{nn'}) \end{aligned} \quad (38)$$

$$\text{με } B_{lm}(l''m''; l'm') = \int d\Omega Y_{lm}(\hat{r}) Y_{l'-m'}(\hat{r}) Y_{l''m''}(\hat{r}) \quad (39)$$

όπου  $Y_{lm}(\hat{r})$  οι γνωστές σφαιρικές αρμονικές .

## 2.1 Νανοδομές από χαλκογενίδια Βισμούθιου

Το φαινόμενο της κβαντικής συμβολής στο οποίο βασίζεται η παρούσα έρευνα προϋποθέτει ένα ανισοτροπικό φαινόμενο Purcell, τέτοιο ώστε ένας από τους δυο κατευθυντικούς ρυθμούς αποδιέγερσης (κάθετος ή παράλληλος διπολικός προσανατολισμός ως προς την επιφάνεια της νανόσφαιρας), να “συμπιέζεται” ως προς τον άλλο [12]. Αυτό οδηγεί σε μεγάλο βαθμό συμβολής και σε εντυπωσιακά κβαντικά φαινόμενα, όπως την αλλαγή στο φάσμα εκπομπής[13]. Η επιλογή λοιπόν, του υλικού αλλά και της γεωμετρίας της νανοδομής που χρησιμοποιείται για αυτό το θεωρητικό πείραμα, θα επηρεάσει σημαντικά το βαθμό συμβολής. Πιο συγκεκριμένα, επιλέχθηκε νανοδομή υλικού  $Bi_2Te_3$ , ώστε οι πολύ μεγάλες τιμές της διηλεκτρικής σταθεράς που τη χαρακτηρίζουν, να εξασφαλίσουν ισχυρή αλληλεπίδραση φωτός-ύλης και να ενισχύσουν σημαντικά τον έναν από τους δύο κατευθυντικούς ρυθμούς αποδιέγερσης. Ακόμη, παρατηρήθηκε ότι μια σφαιρική δομή οδηγεί σε ισχυρότερα αποτελέσματα έναντι μιας επίπεδης επιφάνειας[14]. Η συγκεκριμένη διπλωματική εργασία έχει ως στόχο να μελετήσει μια τέτοια δομή στη νανοκλίμακα, η οποία θα απλούστευε σημαντικά τις προϋποθέσεις για την επίτευξη ενός βαθμού κβαντικής συμβολής κοντά στη μονάδα, μιας και αλλά φωτονικά υλικά που έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν γι' αυτό το στόχο, λ.χ υλικά με αρνητική διηλεκτρική συνάρτηση, μεταϋλικά, ημιαγωγικές μικροκοιλότητες, και τα λοιπά, είναι πιο σύνθετα.

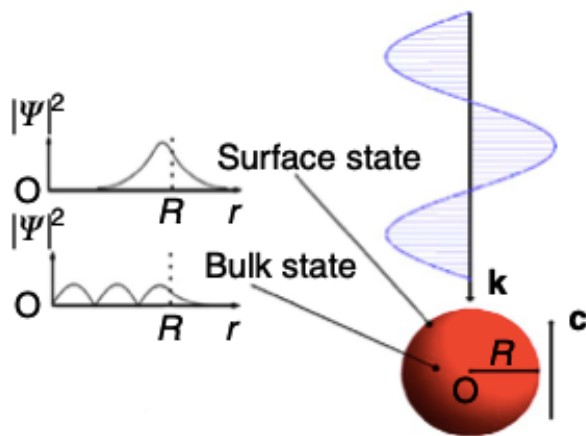
Επιπλέον, η σφαίρα  $Bi_2Te_3$  μπορεί να θεωρηθεί τοπολογικός μονωτής (TINP), δηλαδή ότι δεν άγει το ρεύμα εσωτερικά, καθώς αυτό διέρχεται μόνο στην επιφάνεια της [15]. Η συγκεκριμένη αλλόκοτη συμπεριφορά παρατηρήθηκε πρώτη φορά τη δεκαετία του 1970, σε υλικά υπό την παρουσία ισχυρού μαγνητικού πεδίου και σε χαμηλές θερμοκρασίες, και εξηγήθηκε με το κβαντικό φαινόμενο Hall, για το οποίο κέρδισε το βραβείο Nobel Φυσικής του 1985 ο von Klitzing.

Στους τοπολογικούς μονωτές το φάσμα των επιφανειακών καταστάσεων δεν είναι συνεχές αλλά διακριτό [16], παρομοίως με τις συνηθισμένες κβαντικές τελείες [17],[18] με τη σημαντική διαφορά ωστόσο, ότι τα ηλεκτρόνια μετατοπίζονται στην επιφάνεια. Αυτό οδηγεί σε ποιοτικά διαφορετική συμπεριφορά. Παραδόξως, ακόμη και ένα μεμονωμένο ηλεκτρόνιο σε τοπολογικά προστατευμένη επιφανειακή κατάσταση μπορεί να οδηγήσει σε πυκνότητα επιφανειακού φορτίου που επηρεάζει ολόκληρο το νανοσωματίδιο. Ένα τέτοιο ηλεκτρόνιο, προφυλάσσει το σώμα του νανοσωματιδίου από το εξωτερικό πεδίο για ορισμένες συχνότητες και επιπλέον, μεσολαβεί στην αλληλεπίδραση μεταξύ ενός φωνονίου και του φωτός με τρόπο, ο οποίος πιθανώς, δεν υπήρχε προηγουμένως.

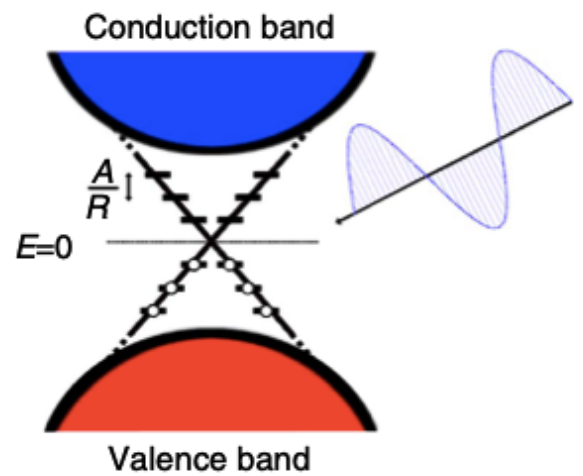
Ακόμη, η ενεργός διατομή απορρόφησης του νανοσωματιδίου τροποποιείται από τις κατειλημμένες τοπολογικά προστατευμένες επιφανειακές καταστάσεις και δίνεται από τον τύπο [19] :

$$\sigma_{abs} = 4\pi R^3 \frac{2\pi}{\lambda} \text{Im} \left[ \frac{\epsilon_{in} + \delta_R - 1}{\epsilon_{in} + \delta_R + 2} \right], \quad (25)$$

όπου  $\epsilon_{in}$  είναι η διηλεκτρική συνάρτηση της σφαίρας, ενώ όρος  $\delta_R$  προκύπτει λόγω των μεταβάσεων μεταξύ των απεντοπισμένων τοπολογικά επιφανειακών καταστάσεων, εξαιτίας της τυχούσας αλληλεπίδρασης με προσπίπτον φως.[20]



Σχ. 4α: Αλληλεπίδραση φωτός -τοπολογικού μονωτή : Η συλλογική απόκριση των "εσωτερικών" καταστάσεων περιγράφεται χρησιμοποιώντας τη διηλεκτρική συνάρτηση  $\epsilon_{in}$ , ενώ οι επιφανειακές καταστάσεις αντιμετωπίζονται κβαντομηχανικά.

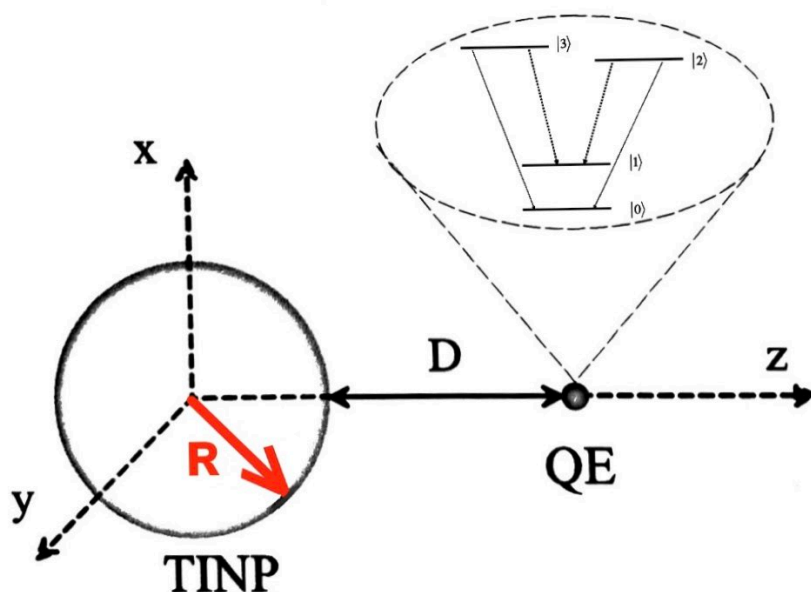


Σχ. 4β: Στο νανοσωματίδιο, ο επιφανειακός κώνος Dirac αποτελείται από διακριτά επίπεδα συμμετρικά τοποθετημένα σε σχέση με το σημείο Dirac ( $E=0$ ).

Αν θεωρήσουμε  $\delta_R = 0$ , η εξίσωση [25] οδηγεί στο κλασικό αποτέλεσμα μιας διηλεκτρικής σφαίρας εντός ομογενούς πεδίου. Τέλος, χωρίς τις επιφανειακές καταστάσεις το σωματίδιο δρα ως συνηθισμένος μονωτής.

## 2.2 Μοντέλο κβαντικού εκπομπού - Νανόςφαιρας

Θεωρούμε τετρασθμικό άτομο σε απόσταση  $D$  από την επιφάνεια νανόςφαιρας  $Bi_2Te_3$ , ακτίνας  $R$ , όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα .



Σχ. 5 : Θεωρητικό μοντέλο τετρασθμικού κβαντικού εκπομπού(ΚΕ) και νάνο-σφαίρας ακτίνας  $R$  (τοπολογικός μονωτής), σε απόσταση  $D$ .

Μελετάμε το πεδίο στην περιοχή του κβαντικού εκπομπού (ΚΕ) και σε αποστάσεις  $D$  από το νανοσωματίδιο, τέτοιες ώστε να είναι πολύ μικρότερες του χαρακτηριστικού μήκους κύματος  $\lambda$  αυθόρμητης εκπομπής του ΚΕ . Έτσι, είναι εφικτή η ηλεκτροστατική προσέγγιση [23].

Ο ΚΕ είναι ένα σύστημα 4 επιπέδων [24],[25] και αποτελείται από 2 κοντινές άνω στάθμες  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$  και δυο χαμηλότερες  $|1\rangle$  και  $|0\rangle$ . Θεωρούμε ότι και οι δύο διεγερμένες άνω στάθμες αποδιεγείρονται αυθόρμητα στις δύο χαμηλότερες με ρυθμούς  $2\gamma'_2$  και  $2\gamma'_3$  αντίστοιχα ,στην κατάσταση  $|0\rangle$  και ρυθμούς  $2\gamma_2$  και  $2\gamma_3$  αντίστοιχα, προς την κατάσταση  $|1\rangle$  .[26],[27]

Ακόμη, θεωρούμε ότι η αποδιέγερση των άνω σταθμών γίνεται σε ενέργειες που επηρεάζονται από την νανο-σφαίρα [28], ενώ οι μεταβάσεις προς τη θεμελιώδη κατάσταση, μπορούν να μελετηθούν ως αυθόρμητες εκπομπές προς το κενό (free-space spontaneous decay)[29],[30].

Σε αυτήν την περίπτωση του τετρασταθμικού ΚΕ, ο τελεστής διπολικής ροπής έχει την εξής μορφή :

$$\vec{\mu} = \mu'(|2\rangle\langle 0|\hat{\epsilon}_- + |3\rangle\langle 0|\hat{\epsilon}_+) + \mu(|2\rangle\langle 1|\hat{\epsilon}_- + |3\rangle\langle 1|\hat{\epsilon}_+) + H.c$$

, όπου  $\hat{\epsilon}_{\pm} = 1/\sqrt{2}(\mathbf{e}_z \pm i\mathbf{e}_x)$  οι δεξιο - αριστερόστροφοι τανυστές  
H.c : Ερμιτιανή συζυγία, εξασφαλίζει ότι η Χαμιλτονιανή είναι Ερμιτιανή και επαγωγικά αναμένουμε πραγματικές ιδιοτιμές και  $\mu, \mu' \in R$ .

Οι παράγοντες σύζευξης  $\kappa_2, \kappa_3$  (όροι κβαντικής συμβολής ) και οι τιμές  $\gamma_2, \gamma_3$ , υπολογίζονται ως εξής:

$$\begin{aligned}\gamma_2 &= \frac{1}{2}\mu^2\omega_{21}^2 \text{Im}[G_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega_{21}) + G_{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega_{21})] = \frac{1}{2}(\Gamma_{\perp}^{\omega_{21}} + \Gamma_{\parallel}^{\omega_{21}}) \\ \gamma_3 &= \frac{1}{2}\mu^2\omega_{31}^2 \text{Im}[G_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega_{31}) + G_{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega_{31})] = \frac{1}{2}(\Gamma_{\perp}^{\omega_{31}} + \Gamma_{\parallel}^{\omega_{31}}) \\ \kappa_2 &= \frac{1}{2}\mu^2\omega_{21}\omega_{31} \text{Im}[G_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega_{21}) - G_{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega_{21})] \approx \frac{1}{2}(\Gamma_{\perp}^{\omega_{21}} - \Gamma_{\parallel}^{\omega_{21}}) \\ \kappa_3 &= \frac{1}{2}\mu^2\omega_{21}\omega_{31} \text{Im}[G_{\perp}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega_{31}) - G_{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{r}; \omega_{31})] \approx \frac{1}{2}(\Gamma_{\perp}^{\omega_{31}} - \Gamma_{\parallel}^{\omega_{31}}),\end{aligned}$$

(40)

όπου  $\mathbf{G}$  είναι ο τανυστής Green του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου και  $\mathbf{r}$ , η θέση του ΚΕ. [31],[43]

Αν θεωρήσουμε τις δύο άνω καταστάσεις εκφυλισμένες, τότε :

$$\omega_{21} = \omega_{31} \Rightarrow \gamma_2 = \gamma_3 = \frac{(\Gamma_{\perp} + \Gamma_{\parallel})}{2} = \bar{\gamma} \text{ και}$$

$$\kappa_2 = \kappa_3 = \frac{(\Gamma_{\perp} - \Gamma_{\parallel})}{2} = \bar{\kappa}$$

και συνεπώς, ορίζουμε το βαθμό κβαντικής συμβολής  $\rho$ , ως[32],[33]:

$$\rho = \frac{\bar{\kappa}}{\bar{\gamma}} = \frac{(\Gamma_{\perp} - \Gamma_{\parallel})}{(\Gamma_{\perp} + \Gamma_{\parallel})}$$

Είναι εμφανές ότι στις περιπτώσεις όπου  $\Gamma_{\perp} = 0$  ή  $\Gamma_{\parallel} = 0$ , προκύπτει  $\rho=1$  ή  $-1$ , με αποτέλεσμα να εμφανίζονται φαινόμενα μέγιστης κβαντικής συμβολής μεταξύ των “καναλιών” αποδιέγερσης του ατόμου. Αντιθέτως, όταν ο ΚΕ τοποθετείται στο κενό,  $\Gamma_{\perp} = \Gamma_{\parallel}$  και  $\bar{\kappa} = 0$ , και επομένως δεν υπάρχει κβαντική συμβολή ( $\rho=0$ )[34],[35].

Η διηλεκτρική συνάρτηση της σφαίρας δίνεται από τον τύπο :

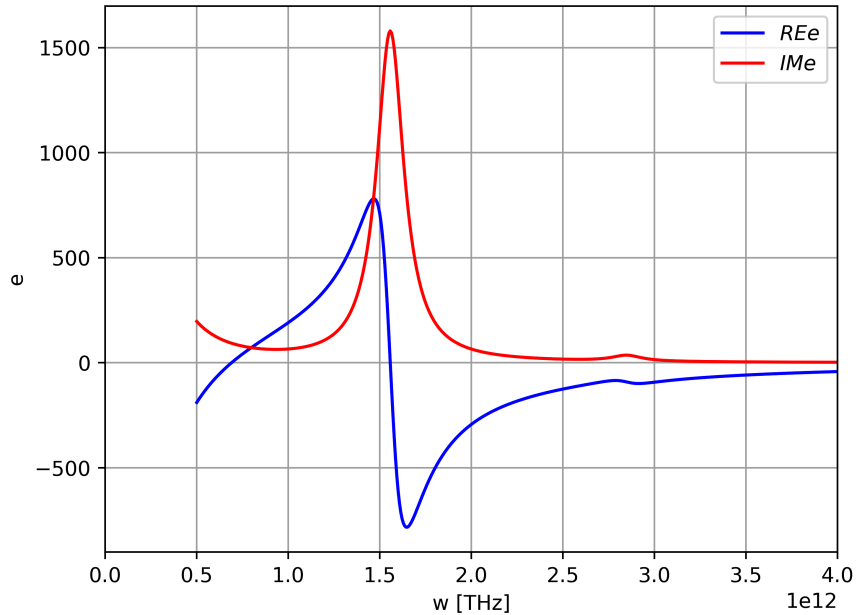
$$\varepsilon(\omega) = \sum_{i=\alpha,\beta,f} \frac{\omega_{pi}^2}{\omega_{oi}^2 - \omega^2 - i\gamma_i\omega} \quad (42)$$

Για την περίπτωση της εξεταζόμενης σφαίρας, οι παράμετροι δίνονται από τον παρακάτω πίνακα [16] :

[THz]	$\omega_p$	$\omega_o$	$\gamma$
α	21.0	1.56	0.18
β	4.0	2.85	0.2
γ	11.0	0	0.24



Επομένως, το πραγματικό και το φανταστικό μέρος της διηλεκτρικής συνάντησης υπολογίστηκαν :



Σχ.6: Πραγματικό (μπλε) και φανταστικό (κόκκινο) μέρος της διηλεκτρικής συνάντησης της  $Bi_2Te_3$  νανόςφαιρας .

Η  $n$ -οστή πολωσιμότητα της σφαίρας σύμφωνα με το μοντέλο Drude, είναι[19] :

$$\alpha_n = \frac{\varepsilon(\omega) - 1}{\varepsilon(\omega) + (n + 1)/n} R^{2n+1} \quad (43)$$

Ενώ, ο ρυθμός αυθόρμητης εκπομπής στο κενό υπολογίζεται ως εξής :

$$\Gamma_0 = \frac{d^2\omega^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3} \quad (44)$$

Οι κατευθυντικοί (κάθετα και παράλληλα στην επιφάνεια της σφαίρας ) παράγοντες Purcell [36], υπολογίζονται ως εξής :

$$\frac{\gamma_{\parallel}^R}{\gamma_0} = \left| 1 - \frac{\alpha_1}{(\alpha + d)^3} \right|^2 \quad (45)$$

$$\frac{\gamma_{\parallel}^{NR}}{\gamma_0} = -\frac{3}{4} \left( \frac{c}{\omega \alpha} \right)^3 \sum_n (n+1)(2n+1) \times \text{Im} \left( \frac{1}{\varepsilon + (n+1)/n} \right) \left( \frac{\alpha}{\alpha + d} \right)^{2n+4} \quad (46)$$

, όπου ο κανονικοποιημένος ρυθμός ακτινοβολίας (R) υπολογίζεται από το διάνυσμα Poynting του εκπεμπόμενου πεδίου, ενώ ο μη- ακτινοβολικός ρυθμός (NR) υπολογίζεται από την απώλεια Joule, λόγω απορρόφησης από το μεταλλικό σωματίδιο (μοντέλο Gersten-Nitzan). Επακόλουθα, ο συνολικός ρυθμός εκπομπής υπολογίζεται ως εξής:

$$\gamma^{TOTAL} = \gamma^R + \gamma^{NR} \Rightarrow \frac{\gamma_{\parallel}^{TOTAL}}{\gamma_0} = 1 + \frac{3}{4} \left( \frac{c}{\omega} \right)^3 \sum_n n(n+1) \frac{\text{Im} \alpha_n}{(\alpha + d)^{2n+4}} \quad (47)$$

Με όμοιο τροπο προκύπτουν οι εξισώσεις για τα κάθετα στην επιφάνεια, προσανατολισμένα δίπολα (ακτινικά):

$$\frac{\gamma_{\perp}^R}{\gamma_0} = \left| 1 + \frac{2\alpha_1}{(\alpha + d)^3} \right|^2 \quad (48)$$

$$\frac{\gamma_{\perp}^{NR}}{\gamma_0} = -\frac{3}{2} \left( \frac{c}{\omega\alpha} \right)^3 \sum_n (2n+1) \frac{(n+1)^2}{n} \times \text{Im} \left( \frac{1}{\varepsilon + (n+1)/n} \right) \left( \frac{\alpha}{\alpha+d} \right)^{2n+4}$$

[49]

$$\Rightarrow \frac{\gamma_{\perp}^{TOTAL}}{\gamma_0} = 1 + \frac{3}{2} \left( \frac{c}{\omega} \right)^3 \sum_n (n+1)^2 \frac{\text{Im}\alpha_n}{(\alpha+d)^{2n+4}} \quad (50)$$

Συνοπτικά :

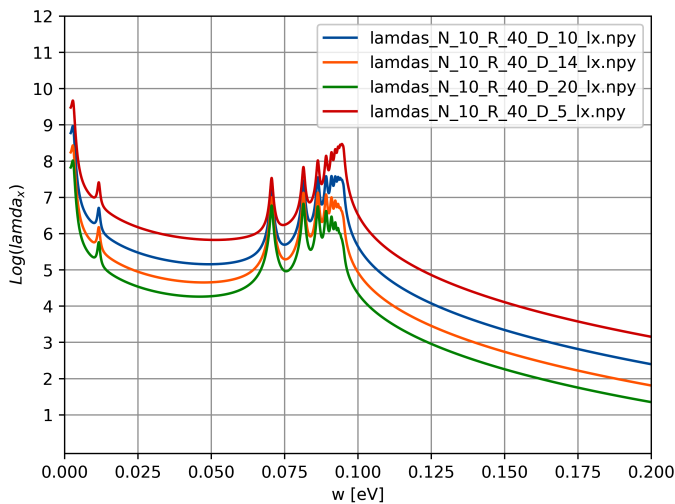
$$\lambda^x(\omega, D) = 1 + \frac{3}{4} \left( \frac{c}{\omega} \right)^3 \sum_{n=1}^N \frac{n(n+1)}{(R+D)^{2n+4}} \text{Im}\alpha_n \quad (51)$$

$$\lambda^z(\omega, D) = 1 + \frac{3}{2} \left( \frac{c}{\omega} \right)^3 \sum_{n=1}^N \frac{(n+1)^2}{(R+D)^{2n+4}} \text{Im}\alpha_n \quad (52)$$

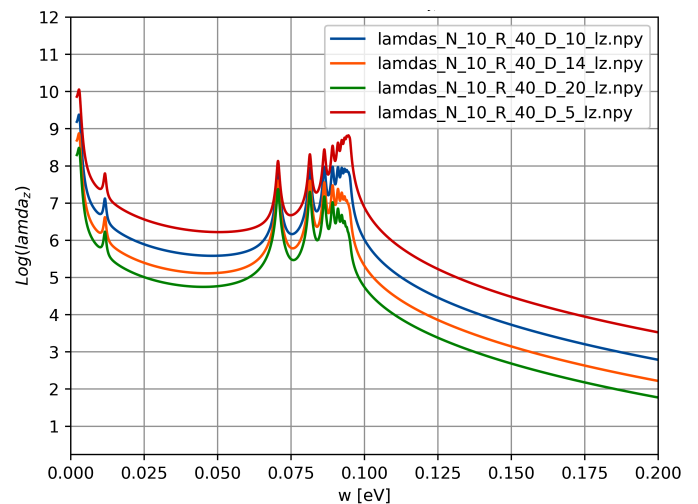
### 3.1 Αποτελέσματα

Διατηρώντας σταθερή απόσταση  $D=20\text{nm}$  από την επιφάνεια της σφαίρας, δοκιμάζουμε διαφορετικές ακτίνες  $R=40,60,80$  και  $100\text{ nm}$  και υπολογίζουμε τους παράγοντες  $\lambda^x, \lambda^z$  συναρτήσει της συχνότητας, υπολογισμένη σε eV .

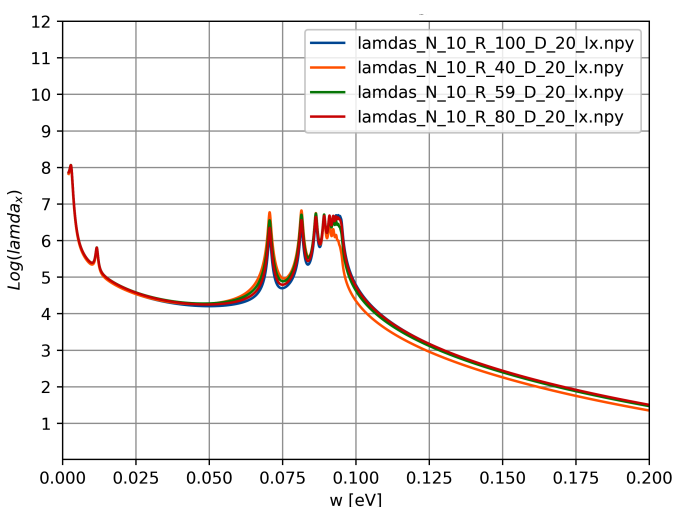
Ομοίως, διατηρώντας σταθερή ακτίνα της νανόσφαιρας,  $R=40\text{nm}$ , αλλά για διαφορετικές αποστάσεις  $d=5,10,15$  και  $20\text{nm}$  . Στα παρακάτω σχήματα παρουσιάζονται τα αποτελέσματα:



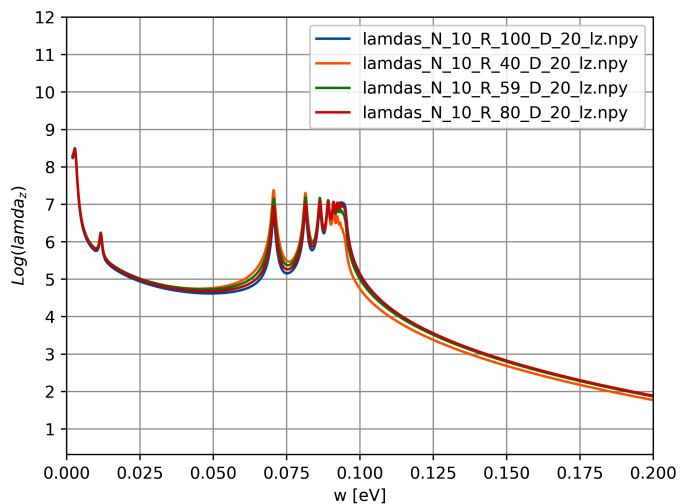
Σχ. 7α: Παράγοντας  $\lambda^x$  -συχνότητα  $\omega$  (eV) για  $R=40\text{nm}$  και  $D=5,10,15$  και  $20\text{nm}$  και  $N=10$ .



Σχ. 7β: Παράγοντας  $\lambda^z$  -συχνότητα  $\omega$  (eV) για  $R=40\text{nm}$  και  $D=5,10,15$  και  $20\text{nm}$  και  $N=10$ .



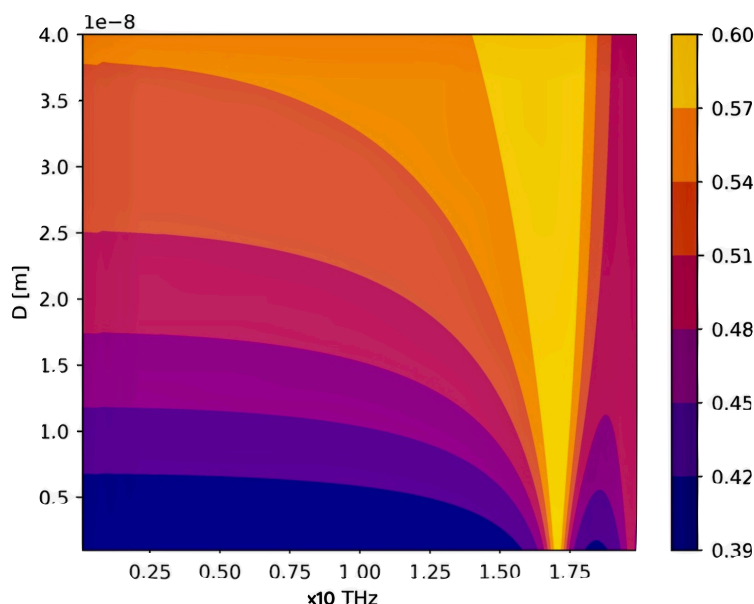
Σχ. 7γ: Παράγοντας  $\lambda^x$  -συχνότητα  $\omega$  (eV) για  $R=40,60,80$  και  $100\text{nm}$  όταν  $D=20\text{nm}$  και  $N=10$ .



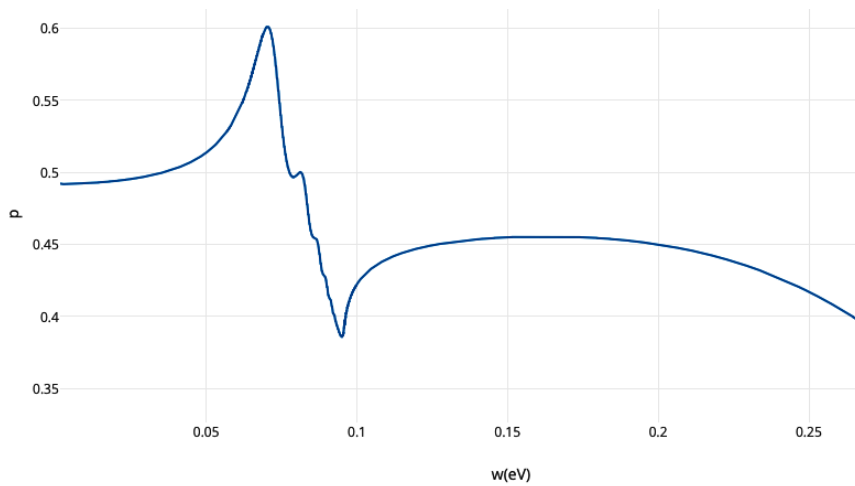
Σχ. 7δ: Παράγοντας  $\lambda^z$  -συχνότητα  $\omega$  (eV) για  $R=40,60,80$  και  $100\text{nm}$  όταν  $D=20\text{nm}$  και  $N=10$ .

Τα παραπάνω γραφήματα υποδεικνύουν μεγάλη ενίσχυση στους ρυθμούς εκπομπής, η οποία φτάνει πάνω από 8 τάξεις μεγέθους. Ακόμη, αυτή επηρεάζεται σε μικρό βαθμό από την απόσταση  $D$  μεταξύ του ΚΕ και της επιφάνειας της σφαίρας, αλλά όχι τόσο από μικρές διαφοροποιήσεις της ακτίνας  $R$ , για τιμές που κυμαίνονται από 40-100nm.

Έχοντας υπολογίσει τους παράγοντες Purcell, είναι εφικτός ο προσδιορισμός της κβαντικής συμβολής  $\rho$ . Προκειμένου να συγκλίνουν τα ολοκληρώματα στους τύπους, η ακτίνα της σφαίρας περιορίστηκε μέχρι τα 100nm και έπειτα έγινε θερμοδιάγραμμα για  $R=40\text{nm}$ , ώστε να βρεθούν οι υπόλοιπες παράμετροι που μεγιστοποιούν το  $\rho$ . Επαγωγικά, η κβαντική συμβολή υπολογίστηκε γραφικά συναρτήσει της συχνότητας  $\omega$ , για τιμές  $R=40\text{nm}$  και  $D=20\text{nm}$ .

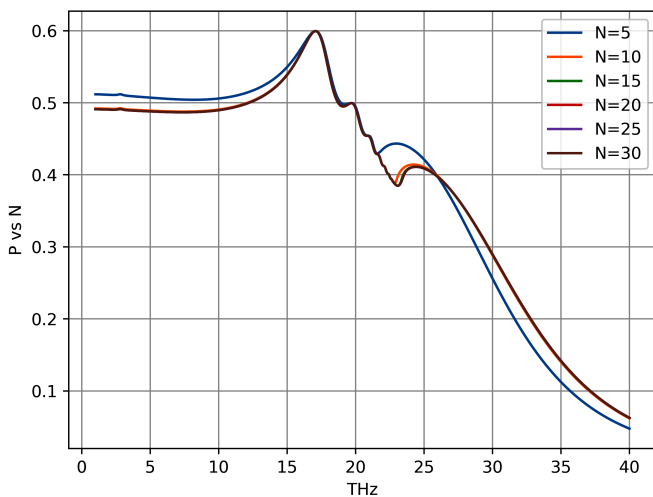


Σχ. 8: Θερμοδιάγραμμα κβαντικής συμβολής  $\rho$ -συχνότητας  $\omega(\text{THz})$ - $D(\text{m})$  και  $R=40\text{nm}$ .

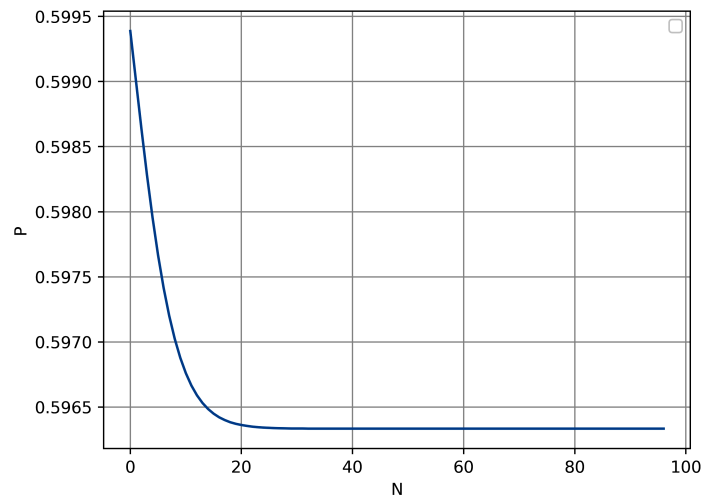


Σχ. 9:Κβαντικής συμβολή  $p$ -συχνότητα  $w$ (eV) για  $R=40\text{nm}$  και  $D=20\text{nm}$ . Η μέγιστη τιμή που υπολογίζεται είναι  $p=0,60$ .

Τα αποτελέσματα επιβεβαιώνουν ότι η απόσταση του ΚΕ από την νανόσφαιρα δεν έχει σημαντική επιρροή στο βαθμό κβαντικής συμβολής,  $p$ . Ακόμη, εξετάστηκε η σύγκλιση του για διαφορετικές τιμές  $N$  και συναρτήσε της συχνότητας  $\omega$ :

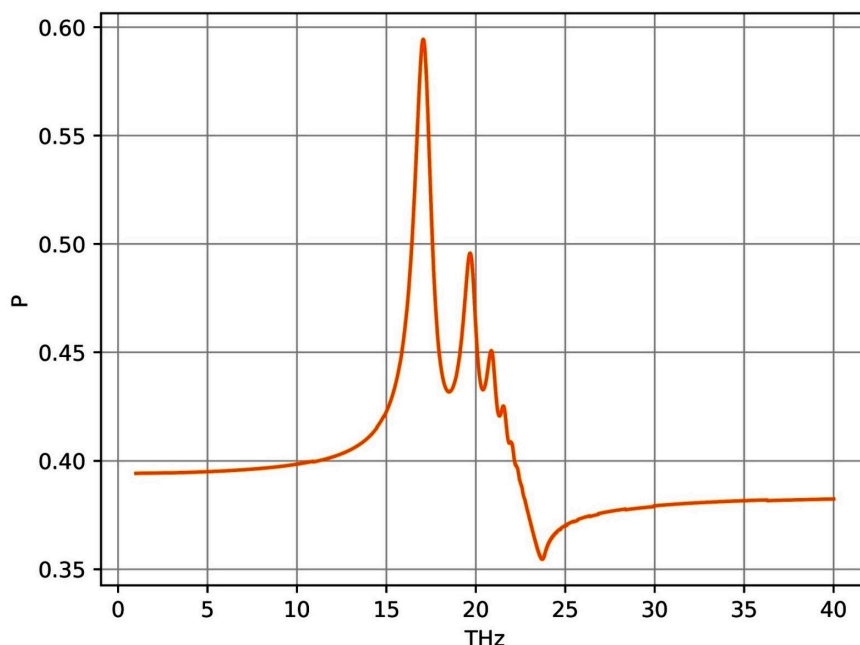


Σχ. 10α: Η συμπεριφορά του βαθμού κβαντικής συμβολής δεν αλλάζει σημαντικά όσο μεγαλώνει η σύγκλιση για τιμές μικρότερες του  $N=100$ .



Σχ. 10β: Ο βαθμός κβαντικής συμβολής  $p$  συγκλίνει στην τιμή 0.60 και φαίνεται ως συνάρτηση των τιμών του  $N$ .

Η συγκεκριμένη υπολογιστική μέθοδος λοιπόν, ανεξαρτήτως της διπολικής κατεύθυνσης κατά την αυθόρμητη εκπομπή και δεδομένης της σύγκλισης των αποτελεσμάτων, δεν οδηγεί σε σημαντική ενίσχυση Purcell και επαγωγικά προκύπτει μέγιστος βαθμός κβαντικής συμβολής  $p \approx 0.6$  στη συχνότητα  $\omega = 17,07 \text{ THz}$ , όταν ο ΚΕ τοποθετηθεί σε απόσταση  $D = 5 \text{ nm}$  από την επιφάνεια του νανοσωματιδίου, ακτίνας  $R = 35,69 \text{ nm}$ , όπως φαίνεται στο παρακάτω γράφημα. Αυτά τα αποτελέσματα δεν είναι ικανά να δείξουν τη μεταβολή του φάσματος εκπομπής παρουσία της νανόσφαιρας, όπως θα φανεί πιο μετά .



Σχ. 11: Βαθμός κβαντικής συμβολής  $p$  για εύρος συχνοτήτων  $\omega=1-40$  THz όταν  $R=35,69\text{nm}$  και  $d=5\text{nm}$ .

Στο πλαίσιο της προσέγγισης περιστρεφόμενου κύματος [37], τα χρονο-εξαρτημένα πλάτη πιθανότητας των καταστάσεων  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$  και  $|0\rangle$  [38],[31] είναι:

$$\dot{b}_2(t) = \frac{1}{2}(i\omega_{32} - 2\gamma_2 - 2\gamma'_2)b_2(t) - \kappa_3 b_3(t) \quad (53\alpha)$$

$$\dot{b}_3(t) = -\frac{1}{2}(i\omega_{32} + 2\gamma_3 + 2\gamma'_3)b_3(t) - \kappa_2 b_2(t) \quad (53\beta)$$

$$\dot{b}_k(t) = -i\delta_k b_k(t) - ig_{k_2} b_2(t) - ig_{k_3} b_3(t) , \quad (53\gamma)$$

όπου  $g_{km} = -i \frac{\sqrt{2\pi\omega_k}}{V} \vec{\mu}'_{m0} \cdot \hat{\epsilon}_k$ , η σταθερά ζεύξης των καταστάσεων  $|m\rangle$ ,  $|0\rangle$ ,  $\hat{\epsilon}_k$  το διάνυσμα πόλωσης που αντιστοιχεί σε συχνότητα εκπομπής  $\omega_k$ ,  $\delta_k = \omega_k - \frac{(\omega_{20} + \omega_{30})}{2}$  και  $\kappa_2, \kappa_3$  οι κβαντικοί όροι ζεύξης των καταστάσεων  $|2\rangle$ ,  $|3\rangle$  αντίστοιχα, λόγω του τροποποιημένου ανισοτροπικού χώρου[39] αποδιέγερσης (παρουσία της νανόσφαιρας).

Έτσι για  $t \rightarrow \infty$ , το φάσμα εκπομπής θα είναι ανάλογο του  $|b_k(t)|^2$  [40]. Εφαρμόζοντας μετασχηματισμούς Laplace στις εξισώσεις (53α,β,γ), προκύπτει ο εξής τύπος για το φάσμα [35]:

$$S(\delta_k) \propto \gamma'_2 \frac{|(-i\delta_k + i\omega_{32}/2 + \gamma_3 + \gamma'_3)b_2(0) - \kappa_3 b_3(0)|^2}{|D(\delta_k)|^2}$$



$$+\gamma'_3 \frac{|(-i\delta_k - i\omega_{32}/2 + \gamma_2 + \gamma'_2)b_3(0) - \kappa_2 b_2(0)|^2}{|D(\delta_k)|^2} \quad (54)$$

$$D(\delta_k) = (-i\delta_k + i\omega_{32}/2 + \gamma_3 + \gamma'_3) \cdot (-i\delta_k - i\omega_{32}/2 + \gamma_2 + \gamma'_2) - \kappa_2 \kappa_3 \quad (55)$$

Ακολούθως, έγινε η γραφική αναπαράσταση των φασμάτων εκπομπής του ΚΕ όταν σε πρώτη φάση, βρίσκεται στο κενό, απουσία της νανόσφαιρας.

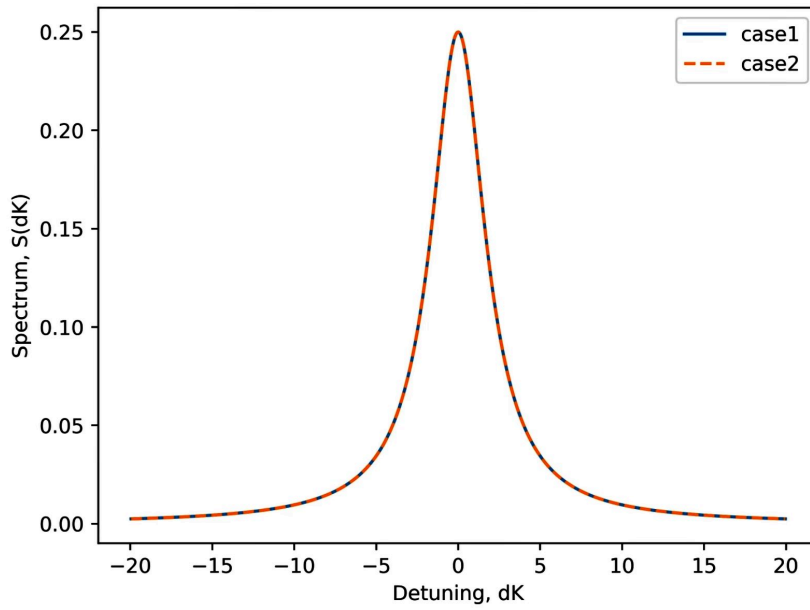
Σε κάθε φάσμα εξετάζεται το κατά πόσο οι αρχικές συνθήκες αλλάζουν τη μορφή του και για αυτό θεωρήθηκαν οι εξής αρχικές συνθήκες :

$$A. b_2(0) = b_3(0) = 1/\sqrt{2} \quad (case1)$$

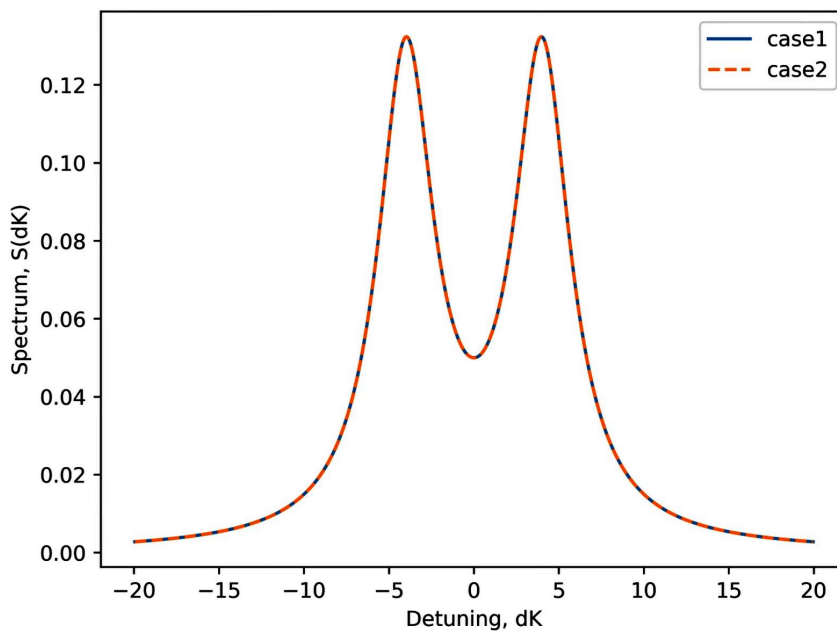
$$B. b_2(0) = 1/\sqrt{2} \quad , \quad b_3(0) = -1/\sqrt{2} \quad (case2)$$

$$\text{με τη συνθήκη } |b_2(0)|^2 + |b_3(0)|^2 = 1 \quad (58)$$

Χάριν απλότητας θεωρούμε  $\gamma'_2 = \gamma'_3 = \gamma_2 = \gamma_3 = \gamma$ . Για  $\omega_{32} = 0$  και  $\omega_{32} = \delta\gamma$  προκύπτουν τα αντίστοιχα φάσματα στο κενό, με λορεντζιανή μορφή, όπως αναμενόταν, της οποίας οι κορυφές καθορίζονται από τις εκάστοτε αρχικές συνθήκες :



Σχ. 12α : Φάσματα εκπομπής του ΚΕ στο κενό για  $\omega_{32} = 0$ , χωρίς την παρουσία νανόσφαιρας.

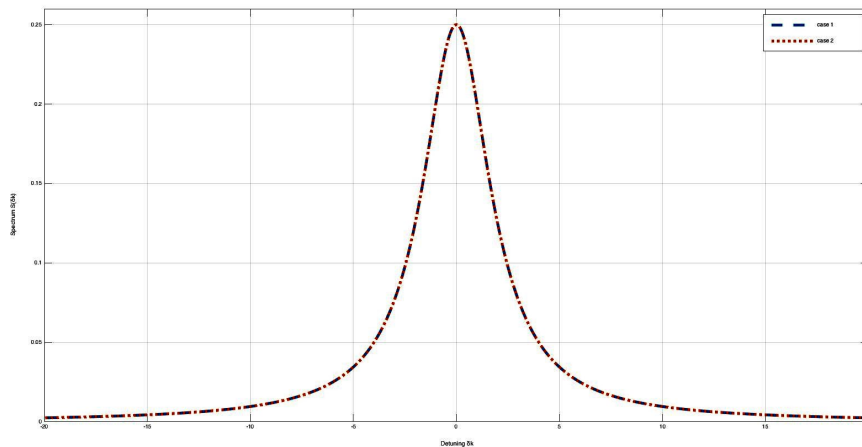


Σχ. 12β: Φάσματα εκπομπής του ΚΕ στο κενό , $\omega_{32} = 8\gamma$ .

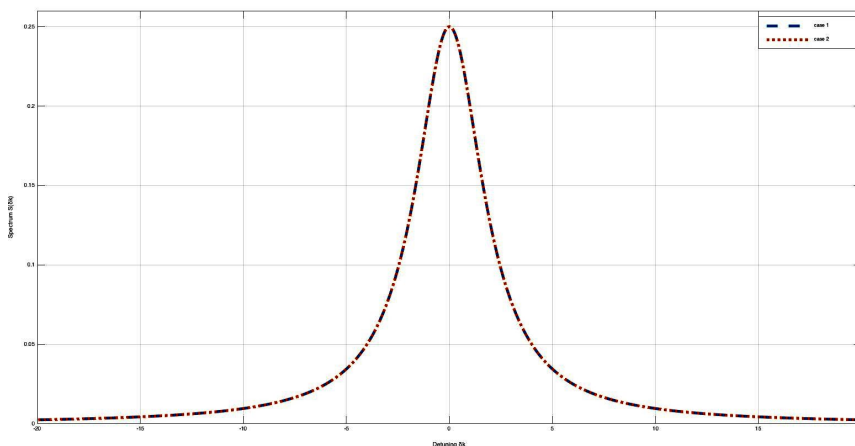
Είναι φανερό ότι οι αρχικές συνθήκες οδήγησαν στα ίδια φάσματα εκπομπής προς το κενό και για τις δύο περιπτώσεις που θεωρήθηκαν, καθώς επιλέχθηκαν τέτοιες, ώστε να ισχύει:

$|b_2(0)|^2 = |b_3(0)|^2$  και  $|b_2(0)|^2 + |b_3(0)|^2 = 1$  . Διαφορετικά, η εξάρτηση των φασμάτων από αυτές είναι ισχυρή .

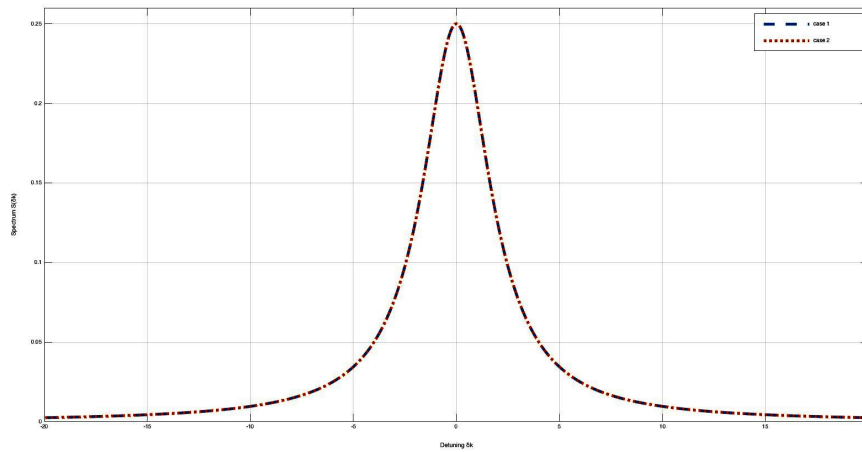
Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα φάσματα υπό την παρουσία της νανόςφαιρας. Σε αυτήν την περίπτωση, θεωρούμε  $\gamma'_2 = \gamma'_3 = \gamma$  και τις ίδιες αρχικές συνθήκες . Επίσης, έγιναν υπολογισμοί για  $D=5,15$  και  $50\text{nm}$ , για κάθε μία από τις περιπτώσεις  $\omega_{32} = 0$  και  $\omega_{32} = 8\gamma$ , αντίστοιχα.



Σχ. 13β: Φάσματα αυθόρμητης εκπομπής στο κενό όταν ο ΚΕ βρίσκεται κοντά στην νανόςφαιρα,  $D=15\text{nm}$ ,  $\omega_{32} = 0$ .

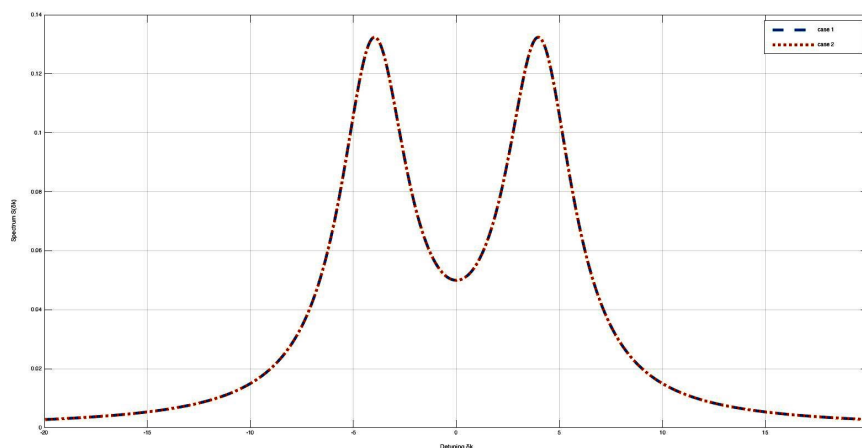


Σχ. 13γ: Φάσματα αυθόρμητης εκπομπής στο κενό όταν ο ΚΕ βρίσκεται κοντά στην νανόςφαιρα,  $D=50\text{nm}$ ,  $\omega_{32} = 0$ .

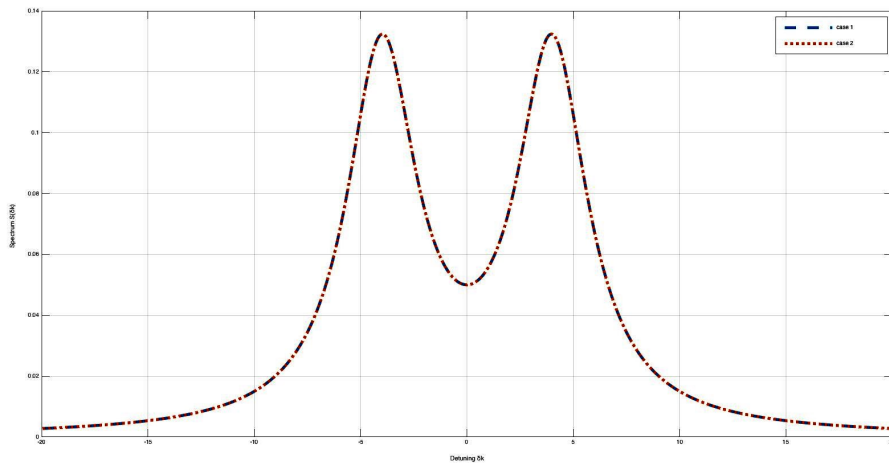


Σχ. 13α : Φάσματα αυθόρμητης εκπομπής στο κενό όταν ο ΚΕ βρίσκεται κοντά στην νανόσφαιρα,  $D=5\text{nm}$ ,  $\omega_{32} = 0$ .

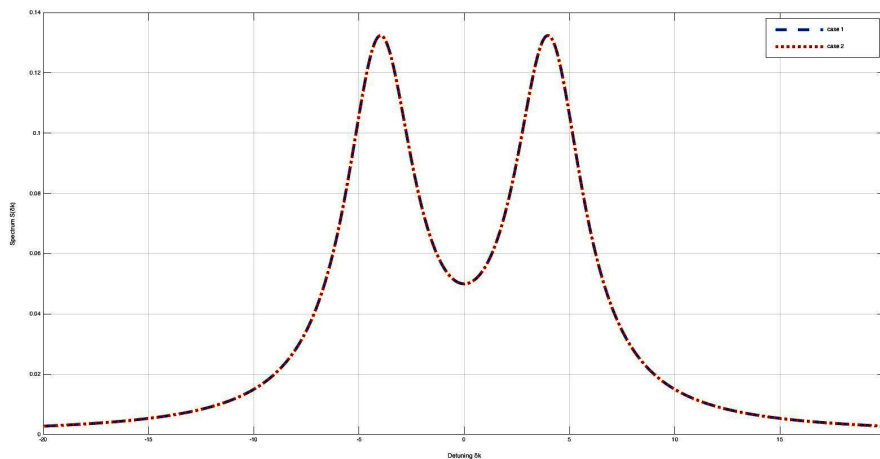
Και τα τρία φάσματα, αφενός δεν επηρεάζονται από την απόσταση μεταξύ της νανόσφαιρας και του ΚΕ, αφετέρου δε μεταβάλλονται από τις διαφορετικές αρχικές συνθήκες, καθώς κανένας εκ των δύο ρυθμών εκπομπής ( $\Gamma_{\perp}, \Gamma_{\parallel}$ ) δεν ενισχύεται σημαντικά, σε σχέση με τον άλλον. Κάτι τέτοιο είναι απαραίτητο, ώστε να προκύψει βαθμός κβαντικής συμβολής κοντά στη μονάδα και να οδηγήσει σε εμφανή κβαντικά φαινόμενα, όπως μεταβολές στο προκύπτον φάσμα εκπομπής. Όμοια αποτελέσματα προέκυψαν για  $\omega_{32} = \delta\gamma$  και  $D=5,15$  και  $50\text{ nm}$ :



Σχ. 14α: Φάσματα αυθόρμητης εκπομπής στο κενό όταν ο ΚΕ βρίσκεται κοντά στην νανόσφαιρα,  $D=5\text{nm}$ ,  $\omega_{32} = \delta\gamma$ .



Σχ. 14β: Φάσματα αυθόρμητης εκπομπής στο κενό όταν ο ΚΕ βρίσκεται κοντά στην νανόςφαιρα,  $D=15\text{nm}$ ,  $\omega_{32} = 8\gamma$ .



Σχ. 14γ: Φάσματα αυθόρμητης εκπομπής στο κενό όταν ο ΚΕ βρίσκεται κοντά στην νανόςφαιρα,  $D=50\text{nm}$ ,  $\omega_{32} = 8\gamma$ .

Καθώς η υπολογιστική μέθοδος που παρουσιάστηκε παραπάνω είναι αξιόπιστη για νανόςφαιρες ακτίνας έως περίπου 100nm, επόμενο βήμα είναι ο υπολογισμός των ίδιων φασμάτων χρησιμοποιώντας αποτελέσματα τα οποία έχουν προκύψει από την ερευνητική αναφορά [14], με τη μέθοδο του τανυστή Green του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Η τελευταία, καθιστά δυνατούς τους

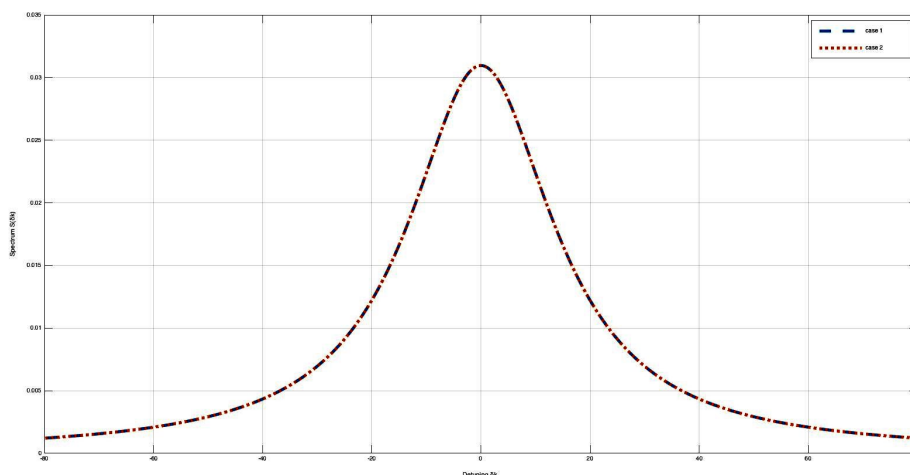
υπολογισμούς για σφαίρες μεγαλύτερων ακτίνων (μικρό-σφαίρες). Έτσι, προέκυψε βαθμός κβαντικής συμβολής  $p_{max} \approx 0.95$  στη συχνότητα  $\omega=12\text{THz}$ , για μια σφαίρα ακτίνας  $R=2\mu\text{m}$ , τοποθετημένη σε απόσταση  $D=1\mu\text{m}$  από ΚΕ, όπως του σχήματος 5. Οι αρχικές συνθήκες και πάλι, είναι οι εξής :

A.  $b_2(0) = b_3(0) = 1/\sqrt{2}$  (case1)

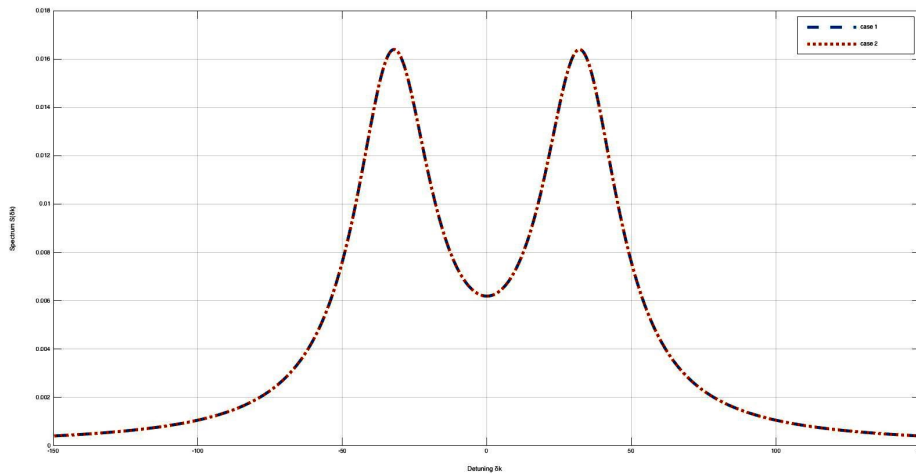
B.  $b_2(0) = 1/\sqrt{2}$  ,  $b_3(0) = -1/\sqrt{2}$  (case2)

με τη συνθήκη  $|b_2(0)|^2 + |b_3(0)|^2 = 1$

Αρχικά, υπολογίζονται τα φάσματα όταν ο ΚΕ αποδιεγείρεται στο κενό, για τις περιπτώσεις όπου  $\omega_{32} = 0$  (εκφυλισμένες καταστάσεις  $|3\rangle$  ,  $|2\rangle$  ) και  $\omega_{32} = 8\gamma$  (μη εκφυλισμένες):

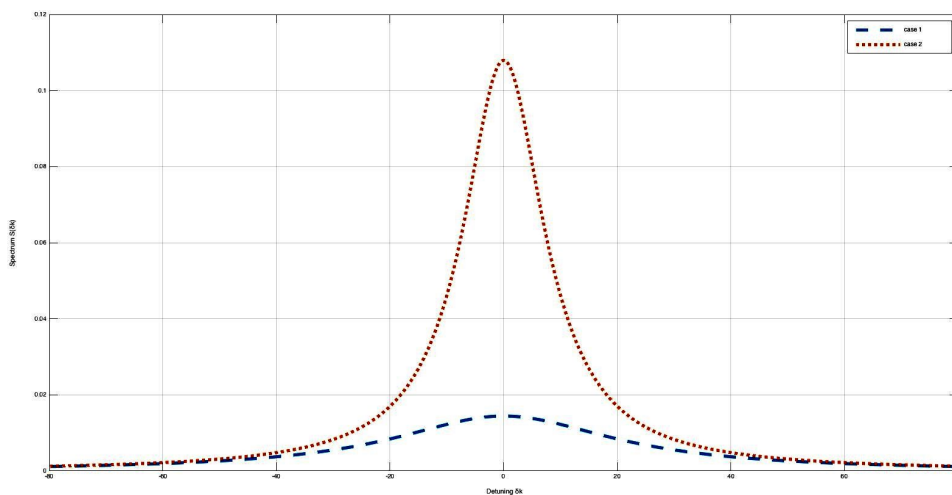


Σχ. 15α: Φάσματα εκπομπής του ΚΕ στο κενό,  $\omega_{32} = 0$ .

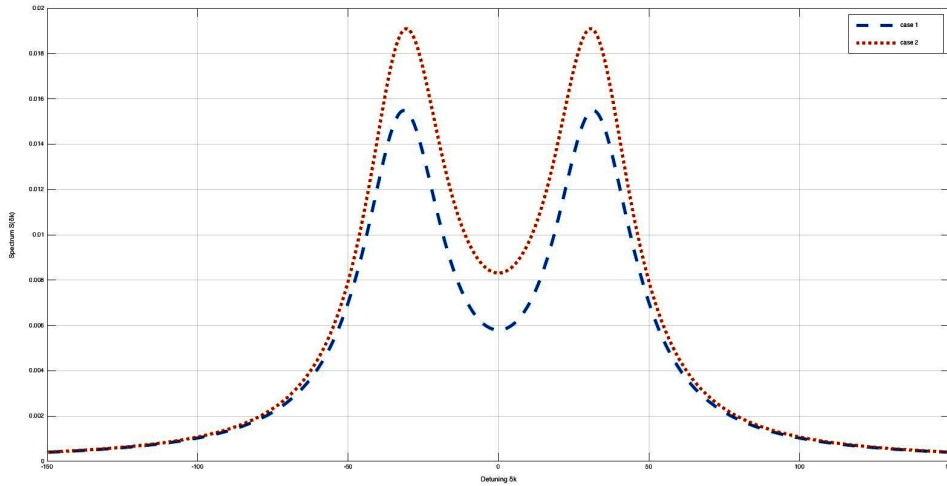


Σχ. 15β: Φάσματα εκπομπής του ΚΕ στο κενό,  $\omega_{32} = 8\gamma$ .

Παρατηρούμε ότι οι αρχικές συνθήκες δεν επηρεάζουν το φάσμα εκπομπής στο κενό χώρο, καθώς επιλέχθηκαν τέτοιες ώστε να ισχύει  $|b_2(0)|^2 = |b_3(0)|^2$ . Αυτό που επηρεάζουν είναι το ύψος της κορυφής των λορεντζιανών καμπύλων που προκύπτουν από τους υπολογιστικούς τύπους. Αυτό όμως δεν ισχύει όταν τοποθετήσουμε την νανόσφαιρα κοντά στον εκπομπό:

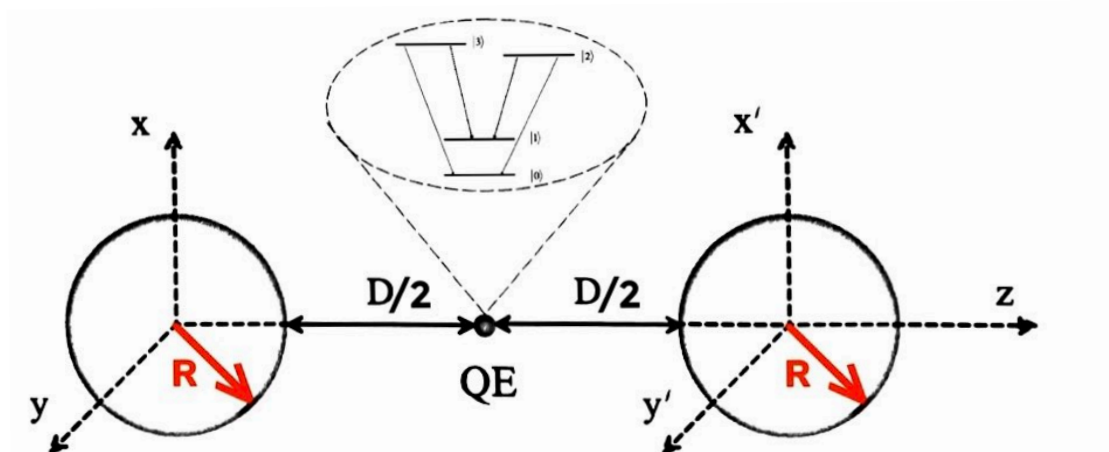


Σχ. 16α: Φάσματα αυθόρμητης εκπομπής στο κενό όταν ο ΚΕ βρίσκεται κοντά στην νανόσφαιρα,  $D=5\text{nm}$ ,  $\omega_{32} = 0$ .



Σχ. 16β: Φάσμα αυθόρμητης εκπομπής στο κενό όταν ο ΚΕ βρίσκεται κοντά στην νανόσφαιρα,  $D=5\text{nm}$ ,  $\omega_{32} = 8\gamma$ .

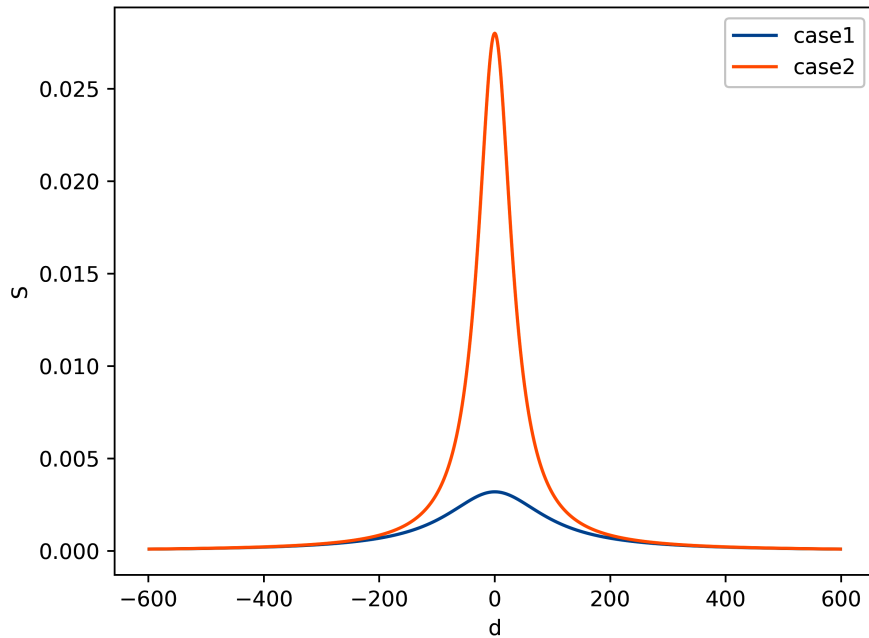
Μεγάλες τιμές του βαθμού κβαντικής συμβολής (κοντά στη μονάδα) προέκυψαν και στην ερευνητική αναφορά [44], για σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , σε απόσταση  $d=50,100$  ή  $1000\text{nm}$  από ΚΕ, όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα.



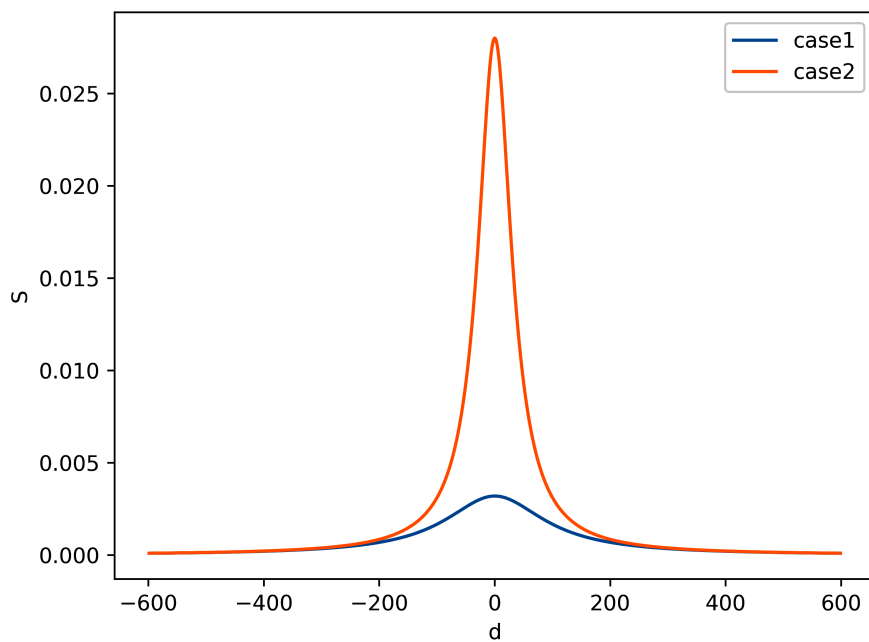
Σχ. 17 : Μοντέλο κβαντικού εκπομπού (ΚΕ) ανάμεσα σε δύο σφαίρες ακτίνας  $R$ , με διάκενο  $D$ , όπως θεωρήθηκε στην ερευνητική αναφορά [44] .



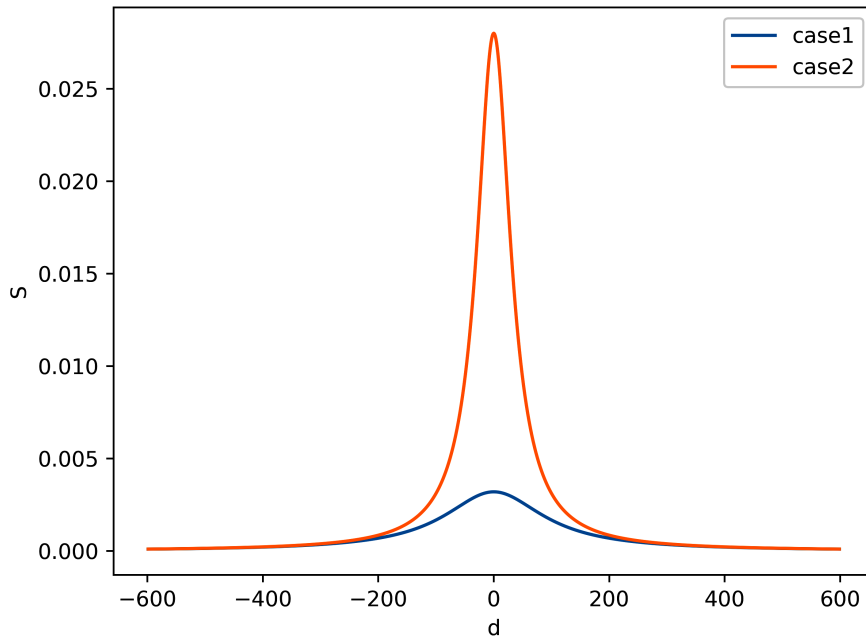
Πιο αναλυτικά, για  $\rho=0,98999$ , στη συχνότητα  $\omega=11,6\text{THz}$  και για τις ίδιες αρχικές συνθήκες με πριν, υπολογίστηκαν τα εξής φάσματα εκπομπής :



Σχ. 18α: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=50\text{nm}$  και  $\omega_{32}=0$ .

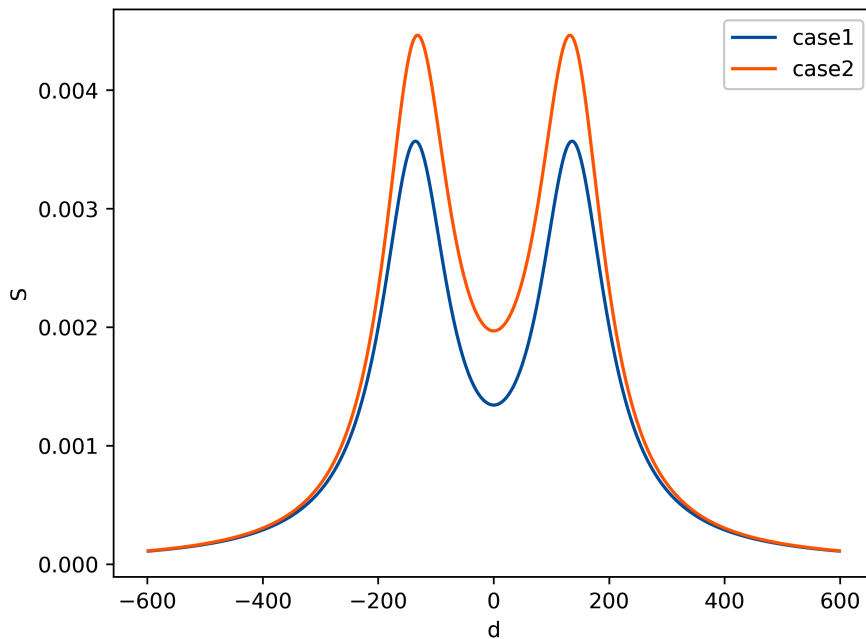


Σχ. 18β: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=100\text{nm}$  και  $\omega_{32}=0$ .

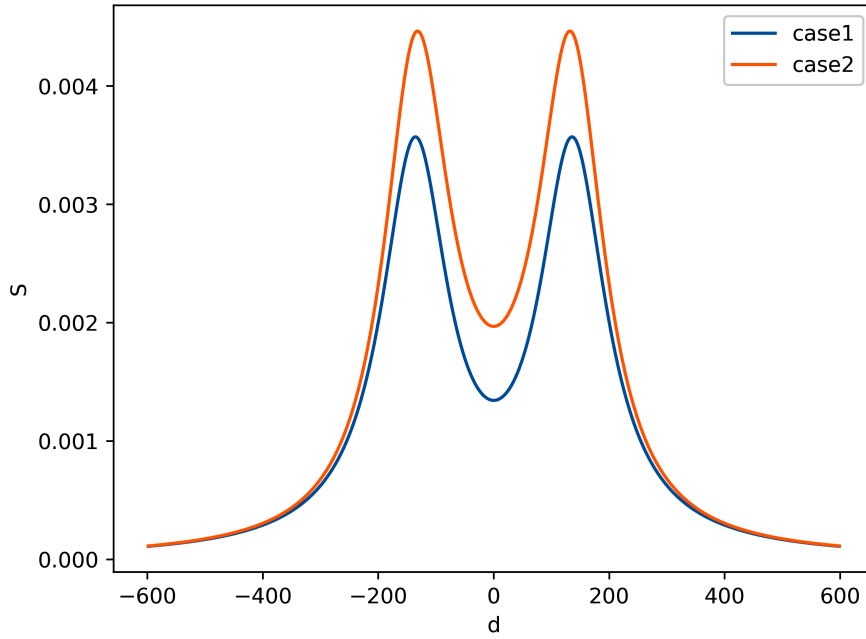


Σχ. 18γ: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=1000\text{nm}$  και  $\omega_{32}=0$ .

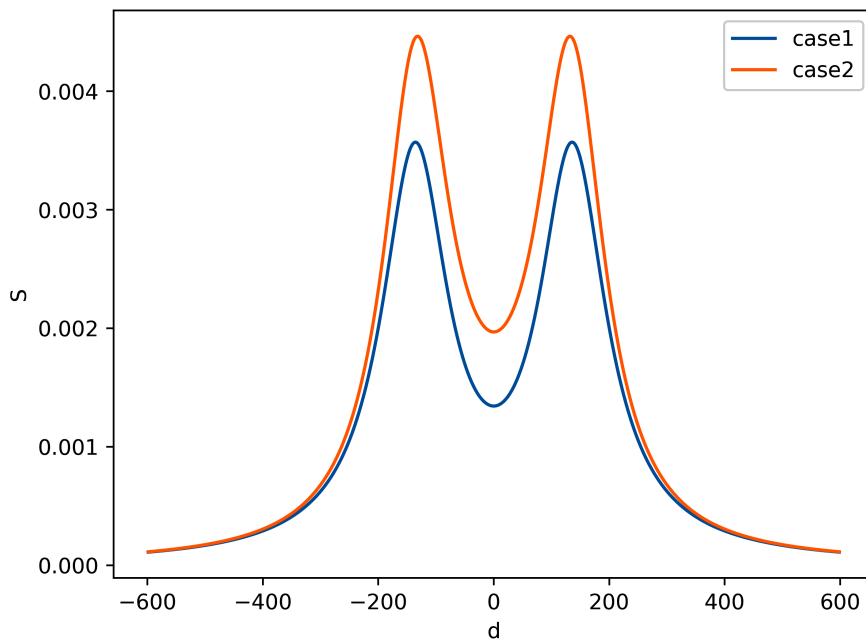
Σημειώνεται ότι οι τιμές των παραγόντων Purcell ενδεικτικά προέκυψαν ως :  $\lambda^x = 0,35061$  και  $\lambda^z = 69,67284$ . Για  $\omega_{32} = 8\gamma$  τα αντίστοιχα φάσματα είναι :



Σχ. 19α: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=50\text{nm}$  και  $\omega_{32}=8\gamma$ .



Σχ. 19β: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=100\text{nm}$  και  $\omega_{32}=8\gamma$ .



Σχ. 19γ: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=1000\text{nm}$  και  $\omega_{32}=8\gamma$ .

Τέλος, όταν οι σφαίρες έχουν και πάλι, ακτίνα  $R=2000\text{nm}$ , ο βαθμός κβαντικής συμβολής μπορεί να φτάσει  $\rho=0,98072$ , στη συχνότητα  $\omega=9,9\text{THz}$ . Οι παράγοντες Purcell υπολογίστηκαν ως :  $\lambda^x = 0,28326$  και  $\lambda^z = 29,10047$ .

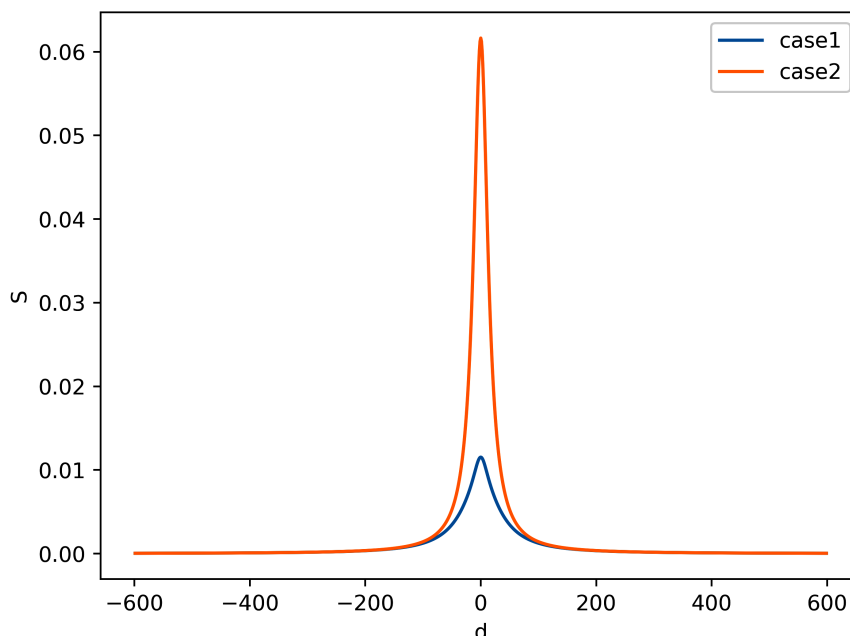
Δοκιμάστηκαν οι εξής αρχικές συνθήκες :

A.  $b_2(0) = 1/2, \quad b_3(0) = \sqrt{3}/2 \quad (\text{case1})$

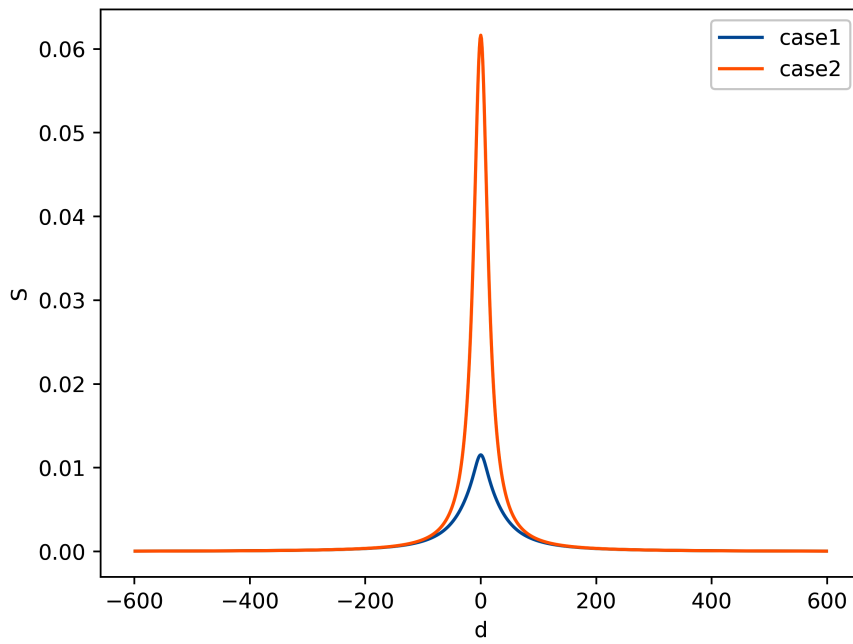
B.  $b_2(0) = 1/2, \quad b_3(0) = -\sqrt{3}/2 \quad (\text{case2})$

με τη συνθήκη φυσικά ,  $|b_2(0)|^2 + |b_3(0)|^2 = 1$ .

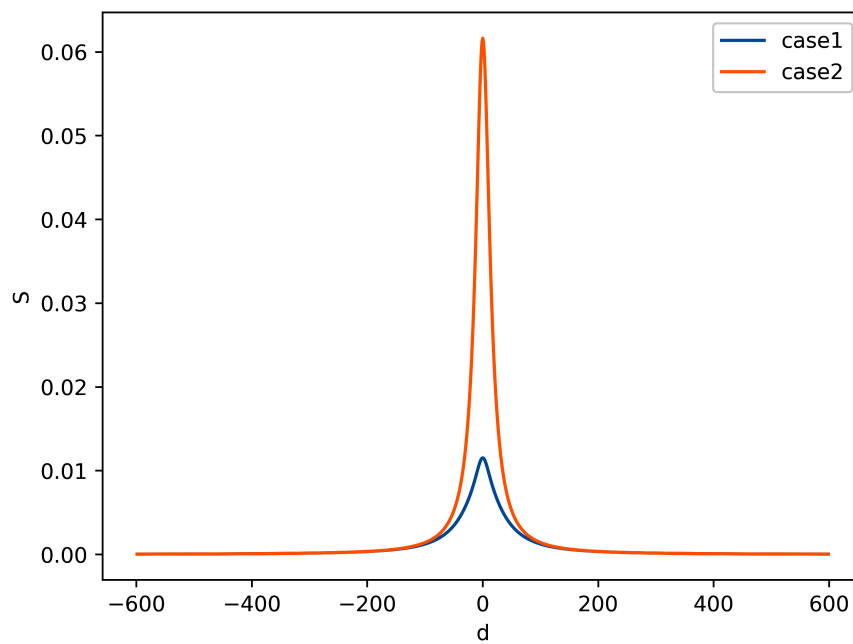
Για  $\omega_{32} = 0$  προέκυψαν τα εξής φάσματα εκπομπής :



Σχ. 20α: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=50\text{nm}$ . Υπολογίστηκε για  $\omega_{32}=0$  και  $b_2(0) \neq b_3(0)$ .

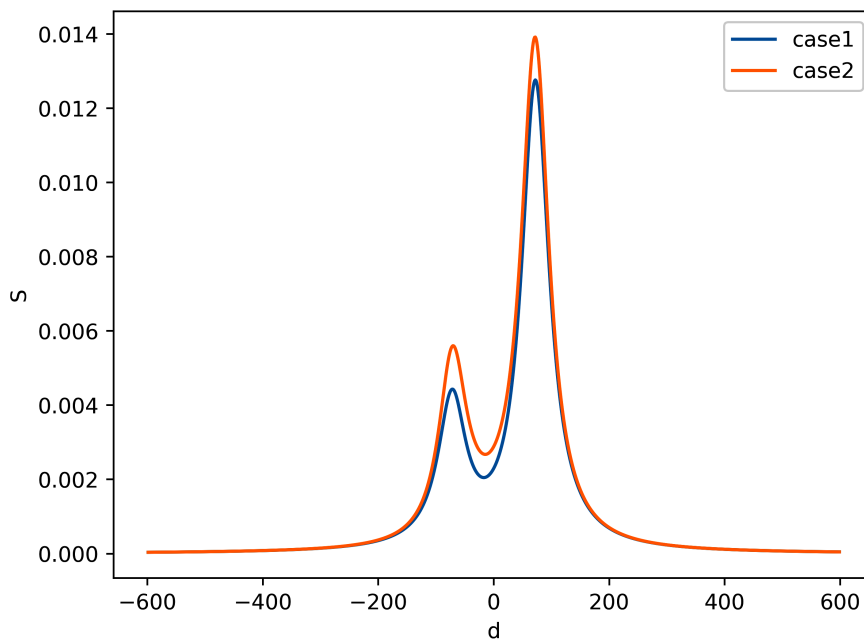


Σχ. 20β: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=100\text{nm}$ . Υπολογίστηκε για  $\omega_{32}=0$  και  $b_2(0) \neq b_3(0)$ .

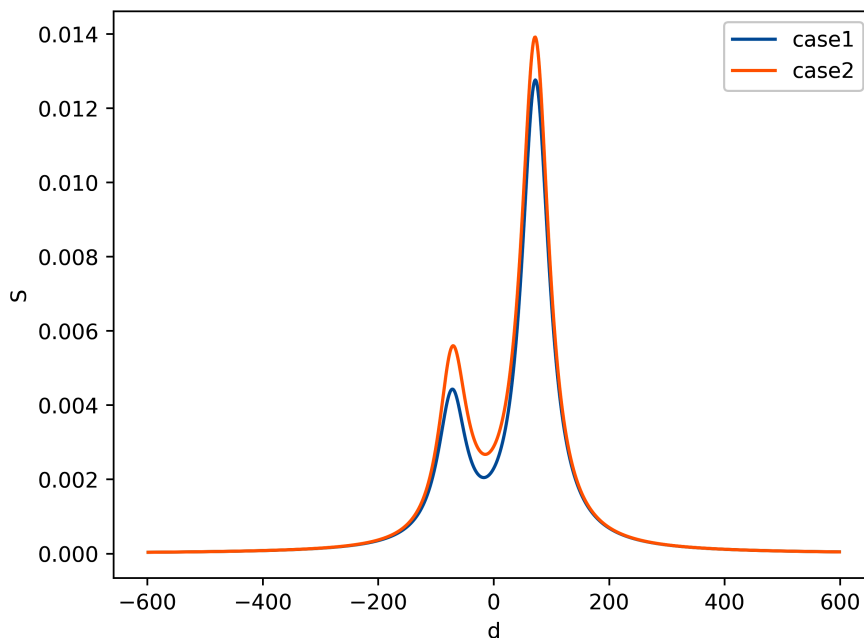


Σχ. 20γ: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=1000\text{nm}$ . Υπολογίστηκε για  $\omega_{32}=0$  και  $b_2(0) \neq b_3(0)$ .

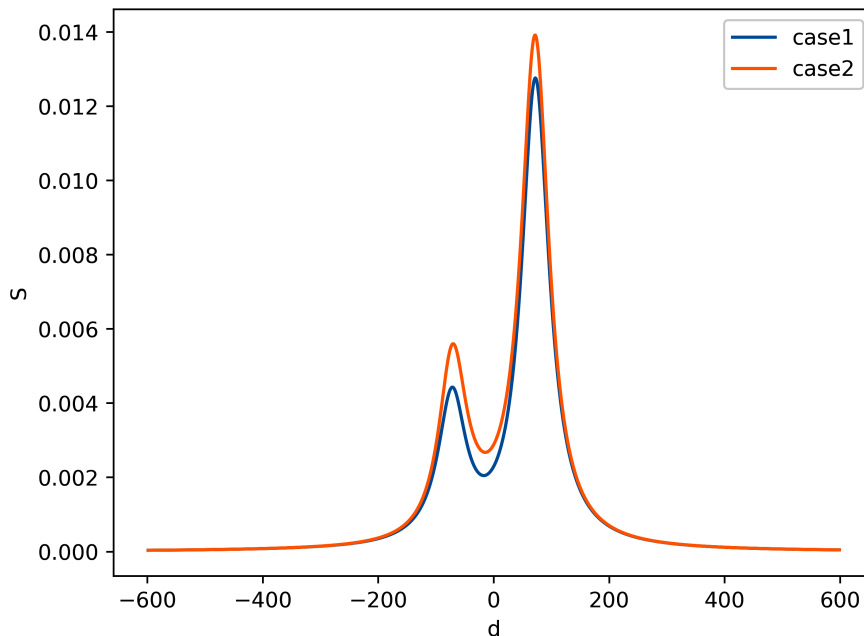
Για  $\omega_{32} = 10\gamma$  αντίστοιχα, έχουμε:



Σχ. 21α: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=50\text{nm}$ . Έγιναν υπολογισμοί για  $\omega_{32}=10\gamma$  και  $b_2(0) \neq b_3(0)$ .



Σχ. 21β: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=100\text{nm}$ . Έγιναν υπολογισμοί για  $\omega_{32}=10\gamma$  και  $b_2(0) \neq b_3(0)$ .



Σχ. 21γ: Φάσμα εκπομπής ΚΕ ανάμεσα σε σφαίρες ακτίνας  $R=2000\text{nm}$ , με διάκενο  $D=1000\text{nm}$ . Έγιναν υπολογισμοί για  $\omega_{32}=10\gamma$  και  $b_2(0) \neq b_3(0)$ .

Πράγματι λοιπόν, ο βαθμός κβαντικής συμβολής κοντά στη μονάδα, ο οποίος προκύπτει παρουσία της νανόσφαιρας, οδηγεί σε μεταβολή του φάσματος εκπομπής του ΚΕ και πλέον, οι αρχικές συνθήκες επηρεάζουν το ρυθμό αποδιέγερσης. Πιο συγκεκριμένα, για την περίπτωση 1 (case1) το φάσμα καταστέλλεται, ενώ στη 2<sup>η</sup> περίπτωση συνθηκών, ενισχύεται. Το συμπέρασμα είναι ότι σε κάθε περίπτωση ισχυρής κβαντικής συμβολής των “καναλιών” εκπομπής του 4-καταστασιακού ΚΕ, λόγω της ύπαρξης νανοδομής πλησίον του, η οποία επηρεάζει τους τρόπους του πεδίου αποδιέγερσης, ένας από τους δύο ρυθμούς εκπομπής “συμπιέζεται” σε σχέση με τον άλλον. Εν τελεί, στις εξεταζόμενες περιπτώσεις παρατηρείται σημαντική

ενίσχυση του ρυθμού αποδιέγερσης  $\Gamma_{\perp}$  και σχετικός εκμηδενισμός του ρυθμού  $\Gamma_{\parallel}$ , με αποτέλεσμα να έχουμε μέγιστο  $\rho$ .

### 3.2 Συμπεράσματα

Η μεγιστοποίηση του βαθμού κβαντικής συμβολής των δύο καναλιών αποδιέγερσης ενός κβαντικού εκπομπού τεσσάρων καταστάσεων, όταν δίπλα σε αυτόν τοποθετηθεί νανόςφαιρα υλικού  $Bi_2Te_3$ , επιτυγχάνεται μέσω του εκμηδενισμού ενός εκ των δύο διπολικών προσανατολισμών αποδιέγερσης, σε σχέση με τον άλλον. Μια ημι-στατική προσέγγιση, υπολογίζοντας αρχικά τους παράγοντες Purcell και στη συνέχεια το βαθμό κβαντικής συμβολής, δεν οδήγησε σε αλλαγή στο φάσμα εκπομπής προς τον κενό χώρο, λόγω του μικρού μεγέθους σφαιρών, στο οποίο περιορίζεται. Για το λόγο αυτό, επρεπε να καταφύγουμε στην εξέταση μεγαλύτερων σφαιρών (1-2 $\mu$ m), αλλά και σε μία διαφορετική μέθοδο, αφού η ημι-στατική προσέγγιση δεν είναι έγκυρη για τόσο μεγάλες σφαίρες. Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα λοιπόν, που εξήχθησαν από τον τανυστή Green του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου για τους ενισχυμένους ρυθμούς, η κβαντική συμβολή προσέγγισε τη μονάδα. Τα φάσματα εκπομπής του κβαντικού εκπομπού που προέκυψαν, έδειξαν ξεκάθαρα το πώς η παρουσία της σφαίρας σε μικρές αποστάσεις  $D$  από τον ΚΕ, μπορεί να μεταβάλλει τους τρόπους αποδιέγερσης του και να ενισχύσει την αυθόρμητη εκπομπή. Αυτό το αποτέλεσμα πηγάζει από την ισχυρή αλληλεπίδραση φωτός-ύλης,



αναδύομενη από τις υπερ-τιμές της διηλεκτρικής σταθεράς, που μια νανόςφαιρα υλικού  $Bi_2Te_3$  διαθέτει, καθώς τα διχαλκογενίδια βισμούθιου υποστηρίζουν ισχυρούς φωνονικούς συντονισμούς στην περιοχή του υπέρυθρου φάσματος. Ως αποτέλεσμα αυτού, δεν επιτρέπεται η διείσδυση της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας στο εσωτερικό των σωματιδίων και γι' αυτό το λόγο, αυτά τα υλικά έχουν μικρό ποσοστό ωμικών (θερμικών) απωλειών.

Εν κατακλείδι, πολλά ακόμη φαινόμενα μπορούν να προκύψουν εκ του σχεδόν, μοναδιαίου βαθμού κβαντικής συμβολής, όπως λέιζερ χωρίς αναστροφή[41], επίτευξη διαφάνειας και αλλά φαινόμενα κβαντικής οπτικής, τα οποία στηρίζονται στον περιορισμό της αυθόρμητης εκπομπής .

## Αναφορές

- 1.** Fang, W., Yang, Z., & Li, G. (2015). Quantum properties of an atom in a cavity constructed by topological insulators. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 48(24), 245504.
- 2.** Li, G., Evers, J., & Keitel, C. H. (2009). Spontaneous emission interference in negative-refractive-index waveguides. *Physical Review B*, 80(4)
- 3.** "Einstein coefficients, cross sections, f values, dipole moments, and all that", Robert C. Hilborn, Department of Physics, Amherst College, Amherst, MA 01002
- 4.** tu
- 5.** Κβαντική οπτική - Mark Fox, Ακτινοβολητικές μεταβάσεις στα άτομα, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης
- 6.** M. Pelton, "Modified spontaneous emission in nanophotonic structures", *Nature Photonics* 9,427–435 (2015)
- 7.** Κβαντική οπτική - Mark Fox, Σύντονες αλληλεπιδράσεις φωτός -ατόμου , Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης
- 8.** Spontaneous Decay: Alessandro Cere, National University of Singapore, Quantum optics group
- 9.** B. M. Garraway and P. L. Knight, "Cavity modified quantum beats," *Phys. Rev. A* 54, 3592 (1996)
- 10.** Weisskopf-Wigner decay of excited oscillator states, Stig Stenholm and Kalle-Antti Suominen
- 11.** Analysis of the Purcell effect in photonic and plasmonic crystals with losses, Hideo Iwase, Dirk Englund, and Jelena Vučković
- 12.** Agarwal, G. S. (2000). Anisotropic Vacuum-Induced Interference in Decay Channels. *Physical Review Letters*, 84(24), 5500–5503.
- 13.** L. Sun and C. Jiang, "Quantum interference in a single anisotropic quantum dot near hyperbolic metamaterials," *Opt. Express* 24,7719-7727 (2016)
- 14.** Quantum interference near bismuth-chalcogenide microstructures, Dimitrios Karaoulanis, Emmanuel Paspalakis, and Vassilios Yannopoulos

- 15.** Chatzidakis, G. D., & Yannopoulos, V. (2020). Strong electromagnetic coupling in dimers of topological-insulator nanoparticles and quantum emitters. *Physical Review B*, 101(16)
- 16.** Siroki, G., Lee, D. K. K., Haynes, P. D., & Giannini, V. (2016). Single-electron induced surface plasmons on a topological nanoparticle. *Nature Communications*, 7, 12375.
- 17.** P. Harrison and A. Valavanis, *Quantum Wells, Wires and Dots*, 4th ed. Wiley, 2016).
- 18.** Dutt, M. V. G., Cheng, J., Li, B., Xu, X., Li, X., Berman, P. R., ... Sham, L. J. (2005). Stimulated and Spontaneous Optical Generation of Electron Spin Coherence in Charged GaAs Quantum Dots. *Physical Review Letters*, 94(22).
- 19.** Strong light-matter interaction of a quantum emitter with a topological insulator nanoparticle - I.Thanopoulos, V.Yanopoulos, E.Paspalakis
- 20.** [https://www.researchgate.net/figure/TINP-interacting-with-light-a-The-system-studied-a-spherical-Bi2Se3-nanoparticle-of\\_fig1\\_305927837](https://www.researchgate.net/figure/TINP-interacting-with-light-a-The-system-studied-a-spherical-Bi2Se3-nanoparticle-of_fig1_305927837)
- 21.** V. Yannopoulos 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)
- 22.** Sainidou, R., Stefanou, N., & Modinos, A. (2004). Green's function formalism for phononic crystals. *Physical Review B*, 69(6).
- 23.** González-Tudela, A., Huidobro, P. A., Martín-Moreno, L., Tejedor, C., & García-Vidal, F. J. (2014). Reversible dynamics of single quantum emitters near metal-dielectric interfaces. *Physical Review B*, 89(4).
- 24.** Phase-dependent properties for absorption and dispersion by spontaneously generated coherence in a four-level atomic system  
Wei-Hua Xu, Hui-Fang Zhang, Jin-Yue Gao, and Bing Zhang
- 25.** 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)
- 26.** S. Evangelou, V. Yannopoulos, and E. Paspalakis, "Transparency and slow light in a four-level quantum system near a plasmonic nanostructure," *Phys. Rev. A* 86, 053811 (2012)
- 27.** Evangelou, S., Yannopoulos, V., & Paspalakis, E. (2011). Modifying free-space spontaneous emission near a plasmonic nanostructure. *Physical Review A*, 83(2)

- 28.** Salomon, A., Genet, C., & Ebbesen, T. W. (2009). Molecule-Light Complex: Dynamics of Hybrid Molecule-Surface Plasmon States. *Angewandte Chemie International Edition*, 48(46), 8748–8751
- 29.** G. X. Li, F.-L. Li, and S.-Y. Zhu, "Quantum interference between decay channels of a three-level atom in a multilayer dielectric medium," *Phys. Rev. A* 64, 013819 (2001)
- 30.** M. Kiffner, M. Macovei, J. Evers, and C. H. Keitel, "Vacuum-induced processes in multi-level atoms," *Prog. Opt.* 55, 85-197 (2010)
- 31.** S. Evangelou, V. Yannopoulos, and E. Paspalakis, "Simulating quantum interference in spontaneous decay near plasmonic nanostructures: population dynamics," *Phys. Rev. A* 83, 055805 (2011)
- 32.** V. Karanikolas and E. Paspalakis, "Plasmon-induced quantum interference near carbon nanostructures," *J. Phys. Chem. C* 122, 14788 (2018)
- 33.** Xu, J.-P., Wang, L.-G., Yang, Y.-P., Lin, Q., & Zhu, S.-Y. (2008). Quantum interference between two orthogonal transitions of an atom in one-dimensional photonic crystals. *Optics Letters*, 33(17), 2005.
- 34.** Z. Ficek and S. Swain, *Quantum Interference and Coherence: Theory and Experiments* (Springer-Verlag, 2005)
- 35.** Rider, M. S., Sokolikova, M., Hanham, S. M., Navarro-Cía, M., Haynes, P. D., Lee, D. K. K., ... Giannini, V. (2020). *Experimental signature of a topological quantum dot. Nanoscale*, 12(44), 22817–22825. doi:10.1039/d0nr06523d
- 36.** Vielma, J., & Leung, P. T. (2007). Nonlocal optical effects on the fluorescence and decay rates for admolecules at a metallic nanoparticle. *The Journal of Chemical Physics*, 126(19), 194704.
- 37.** "Exact Rotating Wave Approximation", Daniel Zeucha, Fabian Hasslerb, Jesse J. Slimc, David P. DiVincenzo, Peter Grunberg Institut: Theoretical Nanoelectronics, Research Center Julich, 52428 Julich, Germany bInstitute for Quantum Information, RWTH Aachen University, 52062 Aachen, Germany Center for Nanophotonics, AMOLF, Science Park 104, 1098 XG Amsterdam, The Netherlands
- 38.** Keitel, C. H. (1999). Narrowing Spontaneous Emission without Intensity Reduction. *Physical Review Letters*, 83(7), 1307–1310.
- 39.** Analysis of complex anisotropy decays from single-frequency polarized-phasor ellipse plots Noga Kozer<sup>1</sup> and Andrew H A Clayton<sup>1,2</sup>

- 40.**E.Paspalakis, E., Keitel, C. H., & Knight, P. L. (1998). Fluorescence control through multiple interference mechanisms. *Physical Review A*, 58(6), 4868–4877.
- 41.**M. Macovei and C. H. Keitel, "Laser control of collective spontaneous emission," *Phys. Rev. Lett.* 91, 123601 (2003)
- 42.**"The Green's Tensor" ,cern.ch/record/1517909/files/978-3-642-32466-6\_BookBackMatter
- 43.**Thanopoulos, I., Yannopoulos, V., & Paspalakis, E. (2017). Non-Markovian dynamics in plasmon-induced spontaneous emission interference. *Physical Review B*, 95(7).
- 44.**N.Kyvelos,G.Tsigaridas,E.Paspalakis, V.Yannopoulos ,"Quantum Interference in Spontaneous Decay of a Quantum Emitter Placed in a Dimer of Bismuth-Chalcogenide Microparticles"