Κανόνες ἐπιλογῆς ἠλεκτρικοῦ διπόλου

Γνωρίζουμε πλέον ὅτι οἱ κανόνες ἐπιλογῆς ἀναφέρονται στά μητροστοιχεῖα τοῦ τύπου $f_{ls_c} = \langle \Phi_l^{(0)} | \vec{d} \,| \Phi_s^{(0)} \rangle \equiv d_{ls}$ σύμφωνα μέ τήν σχέση (43'), ὅπου $\vec{d}$ ἡ διπολική ροπή τοῦ συστήματος. Μεταβάσεις ὀφειλόμενες στά μητροστοιχεῖα d_{ls} ὀνομάζονται "μεταβάσεις ἠλεκτρικοῦ διπόλου" καί στίς μεταβάσεις τοῦ εἴδους αὐτοῦ ἀναφέρονται οἱ κανόνες ἐπιλογῆς τούς ὁποίους διαπιστώνουμε ἐδῶ πού ἐξετάζουμε. (Ἐάν θεωρούσαμε καί τήν μαγνητική διπολική ροπή τοῦ συστήματος, $\vec{\mu}$ τότε θά εἴχαμε πρόσθετα μητροστοιχεῖα τοῦ τύπου μ_{ls} καί θ' ἀναφερόμεθα σέ μεταπτώσεις "μαγνητικοῦ διπόλου" (φαινόμενα NMR καί ESR).) Ἐάν $d_{ls}=0$ (συνήθως γιά λόγους συμμετρίας χώρου) ἀναφερόμεθα σέ "ἀπαγορευμένες" μεταπτώσεις τοῦ εἴδους αὐτοῦ· στήν ἀντίθετη περίπτωση μιλᾶμε γιά "ἐπιτρεπτές" μεταπτώσεις.

(α) Κανόνες ἐπιλογῆς σωματιδίου φορτίου q σέ μονοδιάστατο φρέαρ δυναμικοῦ ἀπείρων τοιχωμάτων.

$$d_{ls} = \langle \Phi_l^{(0)} | d_x | \Phi_s^{(0)} \rangle = q \int_0^L dx \sin\frac{l\pi x}{L}\, x \sin\frac{s\pi x}{L} \cdot \frac{2}{L}$$

ὅπου L τό μῆκος τοῦ φρέατος.

$$d_{ls} = q\,\frac{2}{L}\int_0^L dx\,\frac{1}{2}\,x\left\{\cos\frac{(l-s)\pi}{L}x - \cos\frac{(l+s)\pi}{L}x\right\}$$

$$= \frac{q}{L}\left[\frac{1}{\frac{(l-s)^2\pi^2}{L^2}}\cos\frac{(l-s)\pi}{L}x + \frac{x}{\frac{(l-s)\pi}{L}}\sin\frac{(l-s)\pi}{L}x\right]_0^L$$

$$-\frac{q}{L}\left[\frac{1}{\frac{(l+s)^2\pi^2}{L^2}}\cos\frac{(l+s)\pi}{L}x + \frac{x}{\frac{(l+s)\pi}{L}}\sin\frac{(l+s)\pi}{L}x\right]_0^L$$

$$= \frac{qL}{(l-s)^2\pi^2}\Big(\cos(l-s)\pi - 1\Big) - \frac{qL}{(l+s)^2\pi^2}\Big(\cos(l+s)\pi - 1\Big) \qquad (52)$$

*Ἡ

$$d_{ls} \begin{cases} = 0 & \text{ἐάν } l-s \text{ ἄρτιος} \\ \neq 0 & \text{ἐάν } l-s \text{ περιττός} \end{cases}$$

Δηλ. μεταπτώσεις διπόλου στό σύστημα αὐτό εἶναι ἐπιτρεπτές μόνον ἐάν $l-s \equiv \Delta n = 2k+1$ ὅπου k ἀκέραιος

(β) Μονοδιάστατος ἁρμονικός ταλαντωτής φορτίου q

Ἀκριβῶς ὅπως καί στήν περίπτωση τοῦ ρότορος γράφουμε

$$d_{ls} = \langle \Phi_l^{(0)} | \hat{d}_x | \Phi_s^{(0)} \rangle = q \langle \Phi_l^{(0)} | x | \Phi_s^{(0)} \rangle$$

Οἱ συναρτήσεις τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτοῦ εἶναι (βλ. σ. 28)

$$\Phi_n = \left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \frac{1}{2^n n!} \right)^{1/2} e^{-\beta x^2/2} H_n(\sqrt{\beta} x)$$

ὅπου $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$, $\beta = \frac{m\omega}{\hbar}$ καί $\omega = \sqrt{\frac{E}{m}}$. $H_n(\sqrt{\beta}x)$ εἶναι τά πολυώνυμα Hermite βαθμοῦ n. Τά τελευταῖα ὑπακούουν στήν ἀναδρομική σχέση

$$u H_n(u) = n H_{n-1}(u) + 1/2 \, H_{n+1}(u)$$

ὅπου $u = \sqrt{\beta} x$ π.χ. Χρησιμοποιώντας τήν τελευταία μποροῦμε νά γράψουμε

$$x \Phi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \frac{1}{2^n n!} \right)^{1/2} e^{-\beta x^2/2} \frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{\beta}} x H_n(\sqrt{\beta} x)$$

$$= \left(\sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \frac{1}{2^n n!} \right)^{1/2} e^{-\beta x^2/2} \frac{1}{\sqrt{\beta}} \left(n H_{n-1}(\sqrt{\beta}x) + \tfrac{1}{2} H_{n+1}(\sqrt{\beta}x) \right)$$

ἤ $\quad x \Phi_n(x) = A \Phi_{n-1}(x) + B \Phi_{n+1}(x)$

ὅπου οἱ τιμές τῶν σταθερῶν A καί B προσδιορίζονται ἀπό τήν προηγούμενη σχέση. Ἄρα

$$d_{ls} = A \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\Phi_{l-1}^{(0)}(x) \right)^* \Phi_s^{(0)}(x) + B \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\Phi_{l+1}^{(0)}(x) \right)^* \Phi_s^{(0)}(x)$$

$$= A \delta_{l-1,s} + B \delta_{l+1,s} \qquad (53)$$

Ἡ τελευταία σημαίνει ὅτι ἐπιτρεπτές μεταπτώσεις εἶναι ἐκεῖνες γιά τίς ὁποῖες ἰσχύει $l-1=s$ ἤ $l+1=s \Rightarrow \Delta n = \pm 1$.