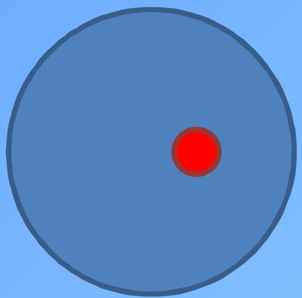
Взаимодействие излучения с атомами и молекулами

Классический подход



$$E_{осц} = \frac{m\omega^2 a^2}{2}$$

Дипольный момент

$$\vec{d} = -e\vec{r} = -e\vec{a}\cos(\omega t + \varphi)$$

Мощность излучения

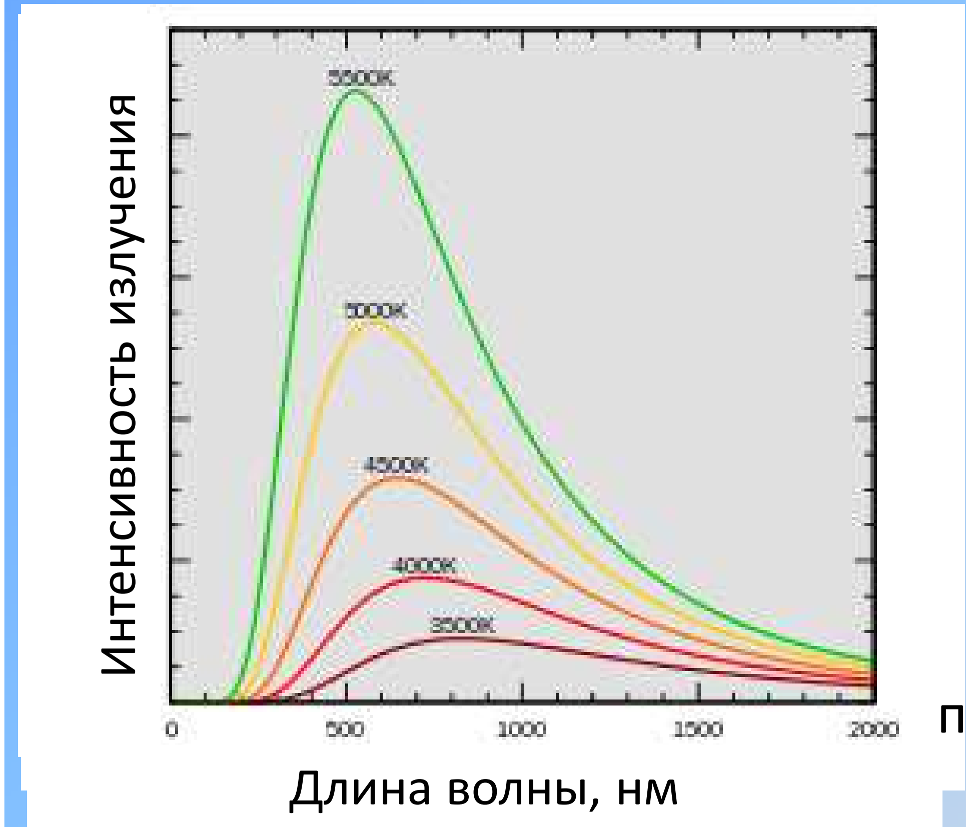
$$W = \frac{2}{3c^3}\left|\ddot{\vec{d}}\right|^2 = \frac{2e^2}{3c^3}\left|\ddot{\vec{r}}\right|^2 = \frac{e^2\omega^4}{3c^3}\left|\vec{a}\right|^2 = \dot{E}_{осц}$$

$$\frac{e^2\omega^4}{3c^3}a^2 = \frac{\omega^2}{2}2ma\dot{a} \Rightarrow E_{осц} = E_0 e^{-t\Big/\frac{3}{2}\frac{mc^3}{e^2\omega^2}}$$

Излучение абсолютно черного тела

$W \sim \omega^4$

Неограниченный рост интенсивности на коротких длинах волн («ультрафиолетовая катастрофа»)



Модель абсолютно черного тела

Закон смещения Вина (эмпирика)

$\lambda_{max} = b/T$

при 300 К получаем $\lambda_{max} \sim 10$ мкм (ИК)

Требуется квантовомеханическое описание!

Квантовомеханический подход

Характерный параметр
(считаем, что излучает внешний электрон)

$$ka \approx \frac{\omega}{c} a_0 \approx \frac{Ry}{\hbar c} a_0 \approx \frac{e^2}{a_0} \frac{a_0}{\hbar c} = \alpha << 1$$

$$\Downarrow$$

Можно пользоваться теорией возмущений

Квантование электромагнитного поля (вторичное квантование)

Квантование ЭМ-поля: переход от полей E, B (непрерывные функции координат) к фотонам

Число фотонов дискретно и меняется при поглощении/излучении

Радиационная калибровка: $\varphi=0$, $\mathrm{div}A=0$

Рассмотрим систему в кубическом объеме V (потом устремим $V\to\infty$)

Вектор-потенциал можно разложить по плоским волнам

Квантование электромагнитного поля (вторичное квантование)

Разложим вектор-потенциал по плоским волнам

$$A(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\rho} \vec{e}_{\vec{k}\rho} \left(a_{\vec{k}\rho} e^{i\vec{k}\vec{r}} + a^*_{\vec{k}\rho} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right)$$

$\vec{e}_{\vec{k}\rho}$ – вектор поляризации $\qquad \left| \vec{e}_{\vec{k}\rho} \right| = 1$

$\vec{k}$ – волновой вектор $\qquad k = \omega / c$

$$a_{\vec{k}\rho} \propto e^{-i\omega t}$$

$$\vec{e}_{\vec{k}\rho} \perp \vec{k}$$

Разложение для электрического поля

$$\vec{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} = \sum_{\vec{k},\rho} i\frac{\omega}{c}\vec{e}_{\vec{k}\rho}\left(a_{\vec{k}\rho}e^{i\vec{k}\vec{r}} - a^{*}_{\vec{k}\rho}e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right)$$

Энергия электромагнитного поля в объеме V

$$W = \frac{1}{8\pi}\int_V \left(\left|\vec{E}\right|^2 + \left|\vec{H}\right|^2\right)dv = \frac{1}{4\pi}\int_V \left|\vec{E}\right|^2 dv = \sum_{\vec{k}\rho} W_{\vec{k}\rho}$$

$$W_{\vec{k}\rho} = \frac{V\omega^2}{4\pi c^2}\left(a_{\vec{k}\rho}a^{*}_{\vec{k}\rho} + a^{*}_{\vec{k}\rho}a_{\vec{k}\rho}\right)$$

Переход к каноническим переменным

$$W_{\vec{k}\rho} = \frac{V\omega^2}{4\pi c^2}\left(a_{\vec{k}\rho} a^*_{\vec{k}\rho} + a^*_{\vec{k}\rho} a_{\vec{k}\rho}\right)$$

$$Q_{\vec{k}\rho} = \sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}}\left(a_{\vec{k}\rho} + a^*_{\vec{k}\rho}\right)$$

$$P_{\vec{k}\rho} = \dot{Q}_{\vec{k}\rho}$$

$$P_{\vec{k}\rho} = -i\omega\sqrt{\frac{V}{4\pi c^2}}\left(a_{\vec{k}\rho} - a^*_{\vec{k}\rho}\right)$$

Гамильтониан электромагнитного поля

$$\hat{H}_{\vec{k}\rho} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{k},\rho}\left(\hat{P}^{2}_{\vec{k}\rho} + \omega^{2}\hat{Q}^{2}_{\vec{k}\rho}\right)$$

– гармонический осциллятор

$$W = \sum_{\vec{k},\rho}\hbar\omega(N_{\vec{k}\rho} + \tfrac{1}{2})$$

Результат не зависит от объема и дается числом фотонов (вторичное квантование – квантуем по числам заполнения)

При N=0 энергия не равна нулю: состояния вакуума совершают колебания даже при отсутствии квантов поля

Наблюдаемые эффекты: Лэмбовский сдвиг, эффект Казимира

Операторы рождения и уничтожения

$$W_{\vec{k}\rho} = \left\langle N_{\vec{k}\rho} \left| \frac{V\omega^2}{4\pi c^2} \left(\hat{a}_{\vec{k}\rho} \hat{a}^{+}_{\vec{k}\rho} + \hat{a}^{+}_{\vec{k}\rho} \hat{a}_{\vec{k}\rho} \right) \right| N_{\vec{k}\rho} \right\rangle = \hbar\omega \left(N_{\vec{k}\rho} + \tfrac{1}{2} \right)$$

$$\boxed{a_{N,N+1} \neq 0 \qquad a^{*}_{N+1,N} \neq 0}$$

Гейзенберговское представление

$$a_{N_f N_i} = \left\langle N_f \left| \hat{a} \right| N_i \right\rangle \propto \int e^{\frac{iE_f}{\hbar}t} e^{-\frac{iE_i}{\hbar}t} \propto e^{\pm i\omega t}$$

$$a_{N_f N_i} \propto \int e^{i\omega(N_f + 1/2)} e^{-i\omega(N_i + 1/2)} \propto e^{\pm i\omega t}$$

Учитывая полноту базиса

$$\left\langle N\left|\hat{a}\,\hat{a}^{+}\right|N\right\rangle = \sum_i \left\langle N\left|\hat{a}\right|i\right\rangle\left\langle i\left|\hat{a}^{+}\right|N\right\rangle = a_{N,N+1}a^{*}_{N+1,N}$$

$$a_{N,N+1}a^{*}_{N+1,N} + a^{*}_{N,N-1}a_{N-1,N} = \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\left(2N_\omega + 1\right)$$

Учитывая эрмитовость матриц

$$a_{N,N+1}a^{*}_{N+1,N} = \left(a_{N,N+1}\right)^2$$

$N = 0$ – нормальное состояние

$$a^{*}_{0,-1} \equiv 0$$

$$N_\omega = 0 \qquad \left(a_{0,1}\right)^2 + \left(a^*_{0,-1}\right)^2 = \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}(2\cdot 0+1)$$

$$a_{0,1} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}}$$

$$N_\omega = 1 \qquad \left(a_{1,2}\right)^2 + \left(a^*_{1,0}\right)^2 = \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}(2\cdot 1+1)$$

$$a_{1,2} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\cdot 2}$$

$$a_{N,N+1} = a^*_{N+1,N} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V}\left(N_\omega+1\right)}$$

Вероятность излучения и поглощения фотона атомом

Гамильтониан взаимодействующих атома и ЭМ-поля

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_i \left(\hat{\vec{p}}_i - \frac{e}{c}\hat{\vec{A}} \right)^2 + \hat{H}_{ат} + \hat{H}_{эм}$$

$$\hat{H} = \hat{H}_{ат} + \hat{H}_{эм} - \boxed{\frac{e}{mc}\sum_i \hat{\vec{p}}_i \hat{\vec{A}}} + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{\vec{A}}^2$$

Излучение и поглощение

Двухфотонные процессы

Вероятность излучения фотона

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc}\sum_i \hat{\vec{p}}_i \hat{\vec{A}}$$

$$A(\vec{r},t) = \sum_{\vec{k},\rho} \vec{e}_{\vec{k}\rho}\left(a_{\vec{k}\rho} e^{i\vec{k}\vec{r}} + a^*_{\vec{k}\rho} e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right)$$

$$\hat{V} = \frac{e}{mc}\sum_i \hat{\vec{p}}_i \sum_{\vec{k},\rho} \vec{e}_{\vec{k}\rho}\left(\hat{a}_{\vec{k}\rho} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \hat{a}^+_{\vec{k}\rho} e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right)$$

Нестационарная теория возмущений
(для периодического возмущения)

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle f, N_\omega + 1\left|\hat{V}\right|i, N_\omega\right\rangle\right|^2 g_{кон}$$

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) =$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{e}{mc}\right)^2\left|\left\langle f, N_\omega + 1\left|\sum_i \hat{\vec{p}}_i \sum_{\vec{k},\rho} \vec{e}_{\vec{k}\rho}\left(\hat{a}_{\vec{k}\rho} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \hat{a}^+_{\vec{k}\rho} e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right)\right| i, N_\omega\right\rangle\right|^2 g_{кон} =$$

$$= \frac{1}{\omega V}\left(\frac{2\pi e}{m}\right)^2 (N_\omega + 1)\left|\left\langle f\left|\sum_\rho \vec{e}_{\vec{k}\rho} \hat{\vec{p}} e^{-i\vec{k}\vec{r}}\right| i\right\rangle\right|^2 g_{кон}$$

Плотность конечных состояний

$$g_{кон} = \delta(E_i - E_f - \hbar\omega)\cdot g_f \cdot dn$$

dn – число осцилляторов конечного состояния

Пусть объем V имеет форму куба

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

Число осцилляторов поля для которого волновой вектор лежит в интервале $\vec{k}, \vec{k} + d^3k$

$$dn = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 dk\, dO = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2 d\omega}{c^3} dO$$

$$g_{кон} = \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) g_f \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2 d\omega}{c^3} dO$$

$$g_{кон} = \frac{g_f}{\hbar} \frac{V\omega^2 dO}{(2\pi c)^3}$$

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) =$$

$$= \frac{g_f \omega}{2\pi\hbar c} \left(\frac{e}{mc} \right)^2 (N_\omega + 1) \left| \left\langle f \left| \sum_\rho \vec{e}_{\vec{k}\rho} \vec{p} \right| i \right\rangle \right|^2 dO$$

$$\vec{k}\vec{r} \approx \alpha << 1 \Rightarrow e^{-i\vec{k}\vec{r}} \approx 1$$

$$\vec{p} = m\vec{v} = m\dot{\vec{r}} = m\frac{i}{\hbar}\left[H, \vec{r}\right]$$

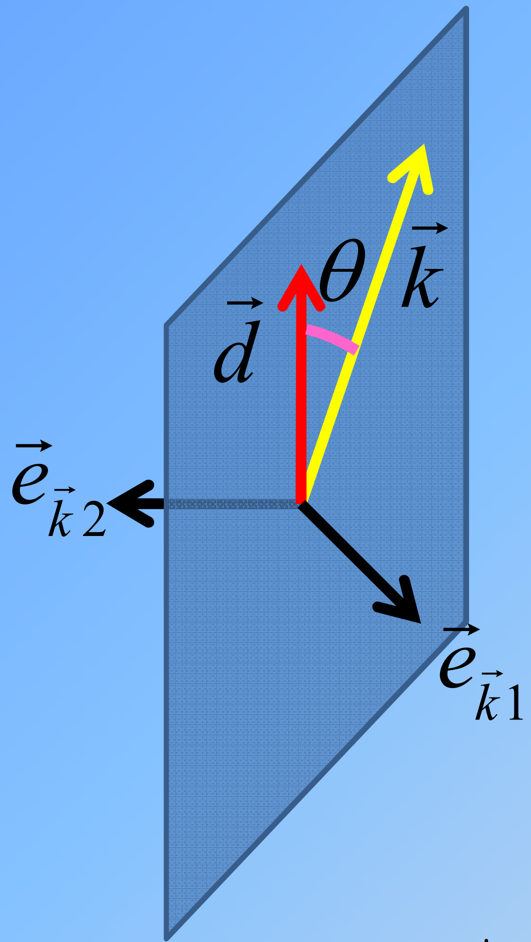
$$\langle f \left| \vec{p} \right| i \rangle = m\frac{i}{\hbar}\langle f \left| H\vec{r} - \vec{r}H \right| i \rangle =$$

$$= m\frac{i}{\hbar}\left(E_f - E_i\right)\langle f \left| \vec{r} \right| i \rangle = -im\omega\langle f \left| \vec{r} \right| i \rangle$$

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) =$$

$$= \frac{g_f \omega^3}{2\pi\hbar c^3}\left(N_\omega + 1\right)\left|\sum_\rho \vec{e}_{\vec{k}\rho}\langle f \left| e\vec{r} \right| i \rangle\right|^2 dO$$

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) = \frac{g_f \omega^3}{\hbar c^3}(N_\omega + 1)\left|\sum_\rho \vec{e}_{\vec{k}\rho}\vec{d}_{fi}\right|^2 \frac{dO}{2\pi}$$



$$\vec{e}_{\vec{k}1}\vec{d}_{fi} = \left|\vec{d}_{fi}\right| \sin\theta$$

$$\int \sin^2\theta \, dO = 2\pi \cdot \int_0^\pi (\cos^2\theta - 1) d\cos\theta = \frac{8\pi}{3}$$

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) =$$

$$= \frac{4}{3}\frac{\omega^3}{\hbar c^3}\left|\vec{d}_{fi}\right|^2 (N_\omega + 1) g_f$$

Классика

$$\left|d^2\vec{d}/dt^2\right|^2 \to 2\omega^4 \left|\vec{d}_{fi}\right|^2$$

Коэффициенты Эйнштейна

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) = \frac{4}{3}\frac{\omega^3}{\hbar c^3}\left|\vec{d}_{fi}\right|^2 (N_\omega + 1) g_f$$

I_ω - интенсивность излучения

$U_\omega = I_\omega / c$ – спектральная плотность излучения

A_{if} – вероятность спонтанного излучения

$B_{if} U_\omega$ – вероятность вынужденного излучения

$B_{fi} U_\omega$ – вероятность поглощения

$$\Re_{fi}^{\;0} = \frac{4}{3}\frac{\omega^3}{\hbar c^3}\left|\vec{d}_{fi}\right|^2 g_f$$

Расчет для обратного процесса проводится аналогично, но остаются только вынужденные переходы

Коэффициенты Эйнштейна

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) = \frac{4}{3}\frac{\omega^3}{\hbar c^3}\left|\vec{d}_{fi}\right|^2 (N_\omega + 1) g_f$$

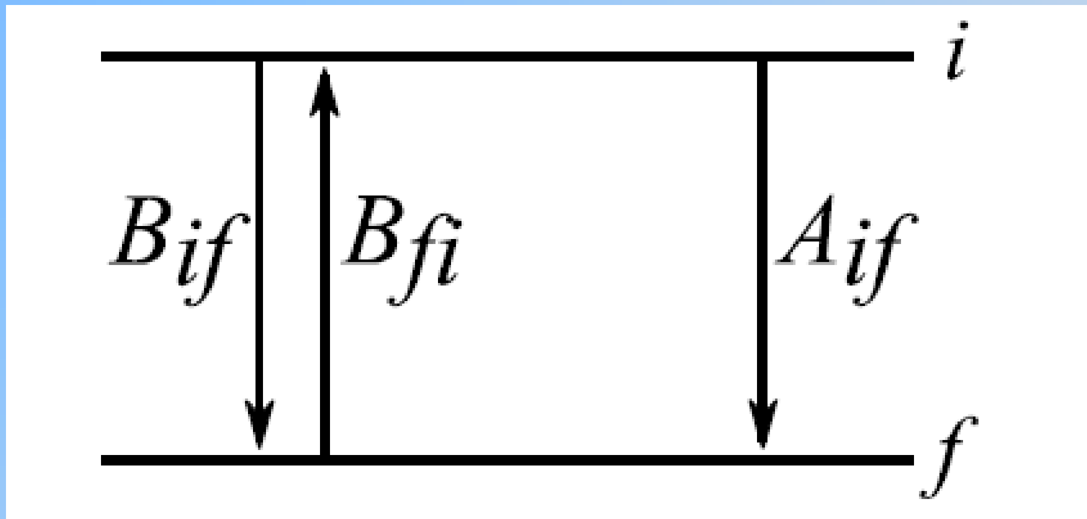
I_ω - интенсивность излучения

$U_\omega = I_\omega / c$ – спектральная плотность излучения

A_{if} – вероятность спонтанного излучения

$B_{if} U_\omega$ – вероятность вынужденного излучения

$B_{fi} U_\omega$ – вероятность поглощения



Коэффициенты Эйнштейна

$$\Re_{fi}(N_\omega \to N_\omega + 1) = \frac{4}{3}\frac{\omega^3}{\hbar c^3}\left|\vec{d}_{fi}\right|^2 (N_\omega + 1) g_f$$

I_ω - интенсивность излучения

$U_\omega = I_\omega / c$ – спектральная плотность излучения

A_{if} – вероятность спонтанного излучения

$B_{if} U_\omega$ – вероятность вынужденного излучения

$B_{fi} U_\omega$ – вероятность поглощения

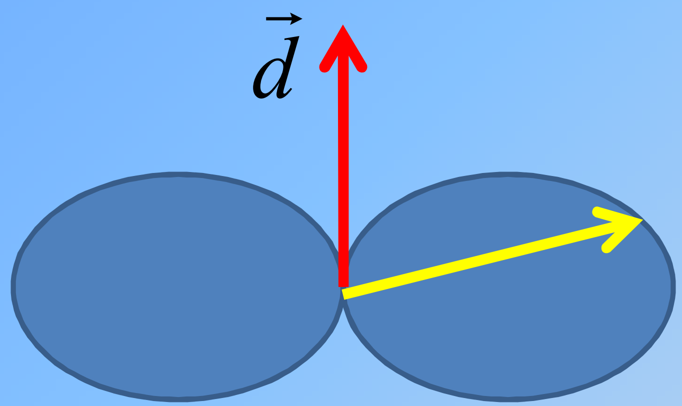
$$I_\omega d\omega = 2\int \hbar\omega \frac{cN_\omega}{V}\frac{Vk^2 dk}{(2\pi)^3} dO = N_\omega \frac{2\cdot\hbar\omega^3\cdot 4\pi}{(2\pi)^3 c^2} d\omega$$

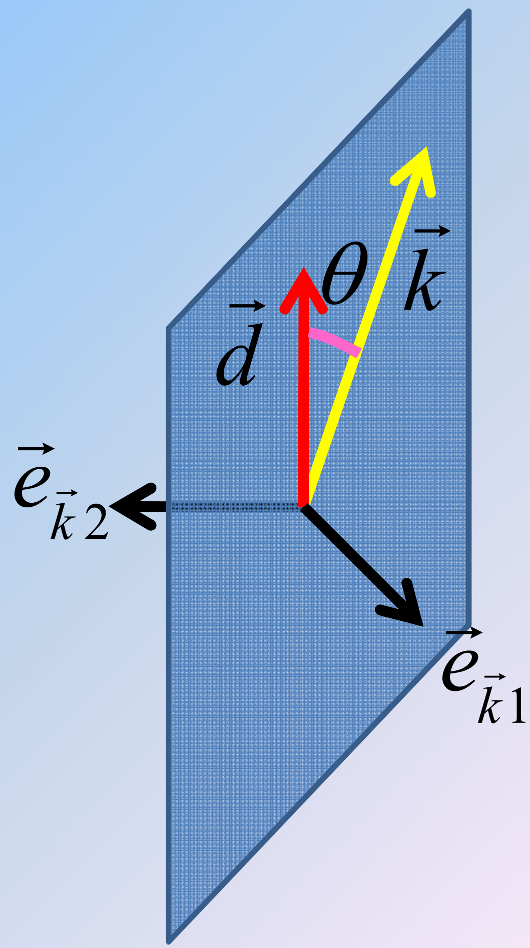
$$\boxed{g_f B_{fi} = g_i B_{if} = g_i A_{if} \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3}}$$

Угловое распределение

$$\Delta m = 0 \;\rightarrow\; d_x, d_y = 0$$

$$\Re_{fi} \propto \left| \sum_{\rho} \vec{e}_{\vec{k}\rho} \vec{d}_{fi} \right|^2 dO$$





$$\Re_{fi} \propto \sin^2\theta \, dO$$

Правила отбора

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$$

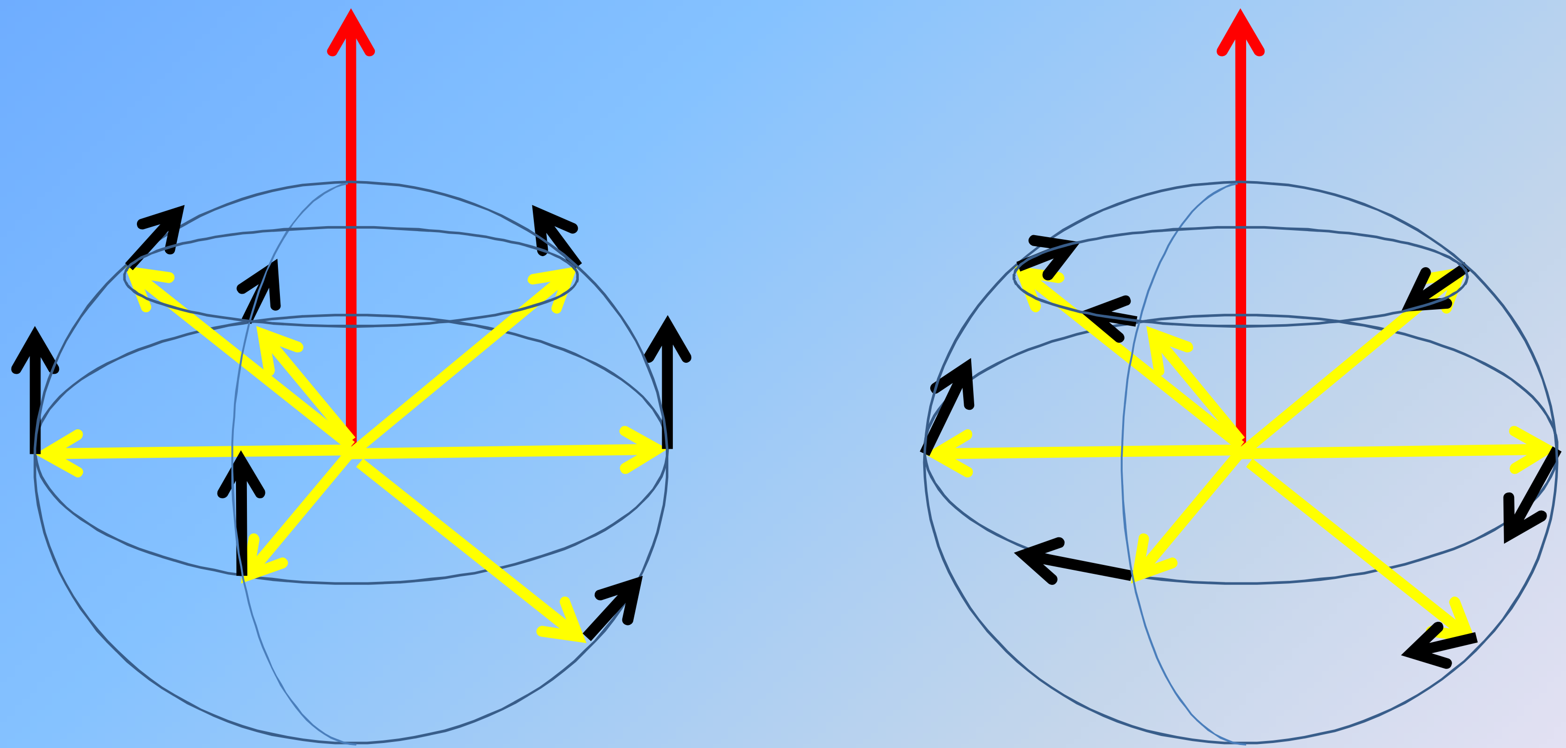
$$\vec{k} \Leftrightarrow \vec{l} \qquad \vec{A} \Leftrightarrow \vec{s}$$

$\vec{A} \perp \vec{k} \Rightarrow$ Определен только момент $\vec{j}$

$j \quad P = (-1)^{j}$ Электрический 2^{j}-польный фотон (Ej)

$j \quad P = (-1)^{j+1}$ Магнитный 2^{j}-польный фотон (Mj)

Поляризация излучения



Правила отбора (дипольное излучение)

$$\vec{j}_{ат.нач.} = \vec{j}_{ат.кон.} + \vec{j}_{фот.}$$

$$j_{фот.} = 1$$

$$\Downarrow$$

$$j_{ат.кон} - j_{ат.нач} = \pm 1, 0$$

$$j_{ат.нач} = 0, \quad j_{ат.кон} = 0 \text{ - запр.}$$

Один электрон

$$\varphi(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\Re_{fi} \propto \left|\vec{d}_{fi}\right|^2$$

$$\vec{d} \propto (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$$

Магнитное квантовое число

$$\vec{d} \propto 1, e^{\pm i\varphi}$$

$$\vec{d}_{fi} \propto \int e^{im_f\varphi}\cdot 1\cdot e^{im_i\varphi}d\varphi$$

$$\vec{d}_{fi} \propto \int e^{im_f\varphi}\cdot e^{\pm i\varphi}\cdot e^{im_i\varphi}d\varphi$$

$$\Delta L = \pm 1$$

$$\Delta m = 0, \pm 1$$

$$\Delta S = 0$$

Прочие типы излучения

Электрическое квадрупольное

$$\left|\left\langle f\left|\sum_{\rho}\vec{e}_{\vec{k}\rho}\vec{p}e^{i\vec{k}\vec{r}}\right|i\right\rangle\right|^2$$

$$\Re_{квадр}=(ka)^2\Re_{дип}\approx\alpha^2\Re_{дип}$$

$$e^{i\vec{k}\vec{r}}\approx 1+i\vec{k}\vec{r}$$

Магнитное дипольное

$$-\frac{e}{mc}\sum_i\hat{\vec{p}}_i\hat{\vec{A}}-\boxed{\vec{\mu}\vec{H}}$$

$$\Re_{магн}=\left|\frac{\mu}{d}\right|^2\Re_{дип}\approx\alpha^2\Re_{дип}$$

Другие правила отбора!

Уширение спектральных линий

Время жизни атома в возбужденном состоянии

Время жизни атома в состоянии i при переходе в нижнее состояние f

$$\tau_{fi} = 1/\Re_{fi} = \frac{3\hbar c^3}{4\omega^3 \left|d_{fi}\right|^2 g_f}$$

Время жизни атома в состоянии i

$$\tau_j = \frac{1}{\Re_j} \qquad \Re_i = \sum_{f<i} \Re_{fi}$$

$$\frac{\Delta W_j}{\hbar} = \gamma_j \sim \frac{1}{\tau_j}$$

– Соотношение неопределенности

Естественное уширение

$$\vec{I} = c\frac{\left[\vec{E}\vec{H}\right]}{4\pi} = c\frac{E^2}{4\pi}\frac{\vec{k}}{k}$$ – Интенсивность излучения

$$E(t) = E_0 e^{i\omega_{fi}t - \frac{\gamma_{fi}}{2}t}, \text{при } t \geq 0$$

$$E(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(t) e^{i\omega t} dt$$

$$E(\omega)=\frac{E_o}{\frac{\gamma_{fi}}{2}+i\left(\omega_{fi}^{o}-\omega\right)}$$

Спектральная мощность излучения (теорема Парсеваля)

$$\int_{-\infty}^{+\infty}E(t)^2\,dt=2\int_{0}^{+\infty}\left|E(\omega)\right|^2\frac{d\omega}{2\pi}\quad\Rightarrow\quad dI_{\omega}=\frac{c}{2\pi}\left|E(\omega)\right|^2\frac{d\omega}{2\pi}$$

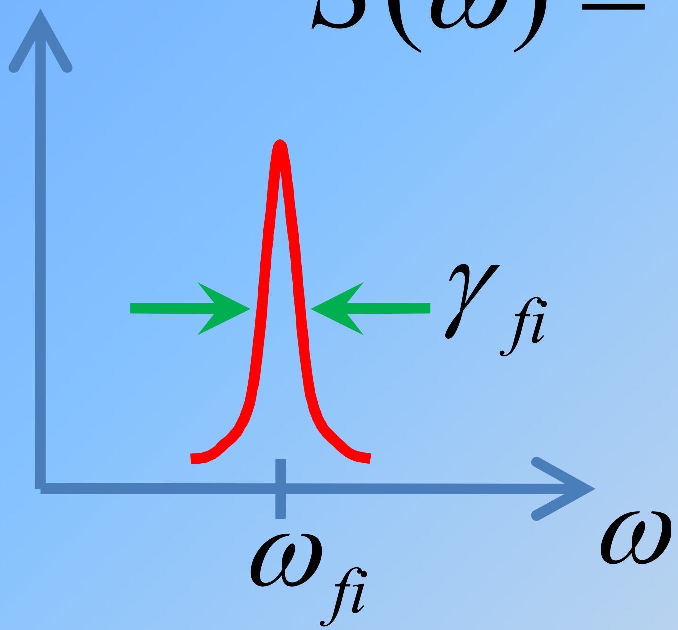
$$dI_{\omega}=\frac{cE_o^2}{2\pi}\frac{1}{\left(\omega_{fi}^{o}-\omega\right)^2+\left(\frac{\gamma_{fi}}{2}\right)^2}\frac{d\omega}{2\pi}$$

Лоренцевский контур

$$dI_\omega = I_\omega d\omega = N_\omega \hbar\omega \Re^0_{fi} S(\omega) d\omega$$

$\Re^0_{fi}$ – вероятность спонтанного перехода

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_{fi}}{\left(\omega^o_{fi} - \omega\right)^2 + \left(\frac{\gamma_{fi}}{2}\right)^2}$$



Допплеровское уширение

$$\omega_{fi}^{o} - \omega_{obs} = -\vec{k}\vec{V} = -kV_z$$

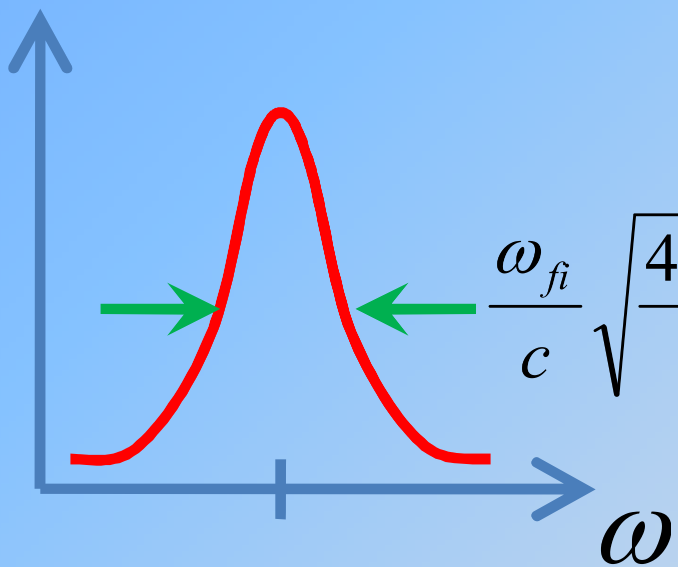
$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \frac{\gamma_{jf}}{\left(\omega_{fi}^{o} - \omega - \vec{k}\vec{V}\right)^2 + \left(\dfrac{\gamma_{fi}}{2}\right)^2}$$

$$I_{\omega} \sim \int S(\omega) F(\vec{V}) d\vec{V} = \frac{1}{2\pi} \int \frac{\gamma_{fi} F(\vec{V}) d\vec{V}}{\left(\omega_{fi}^{0} - \omega + \vec{k}\vec{V}\right)^2 + \left(\dfrac{\gamma_{fi}}{2}\right)^2}$$

Чисто допплеровское уширение

$$S(\omega)=\frac{1}{2\pi}\frac{\gamma_{jf}}{\left(\omega_{fi}^{o}-\omega-\vec{k}\vec{V}\right)^{2}+\left(\dfrac{\gamma_{fi}}{2}\right)^{2}}\xrightarrow{k\bar{V}>>\gamma}\delta\left(\omega_{fi}^{o}-\omega-\vec{k}\vec{V}\right)$$

$$\vec{V}=(v_x,0,0)\quad\Rightarrow\quad v_x=\frac{\omega_{fi}^{o}-\omega}{k}$$



$$\frac{\omega_{fi}}{c}\sqrt{\frac{4\cdot\ln 2}{\beta}}$$

$$F(\vec{V})=\sqrt{\frac{\beta}{\pi}}e^{-\beta v_x^2}$$

$$\Downarrow$$

$$I_\omega=I_{\omega 0}e^{-\beta c^2\left(\frac{\omega-\omega_{fi}^0}{\omega_{fi}^0}\right)^2}$$

Численные оценки

Естественная ширина линии

$$\tau = \frac{3mc^3}{2e^2\omega^2} \cong 4{,}53\lambda^2$$

$\lambda = 5 \cdot 10^{-5}$ см $\qquad \tau \sim 10^{-8}$ с $\qquad \Delta\omega_j \sim 10^8\,\text{с}^{-1}$

Допплеровская ширина линии

$v \cong 4.6 \cdot 10^4$ см/с $\qquad \Delta\omega_D \cong \omega_o v / c \sim 4 \cdot 10^9\,\text{с}^{-1}$

Ударная ширина линии

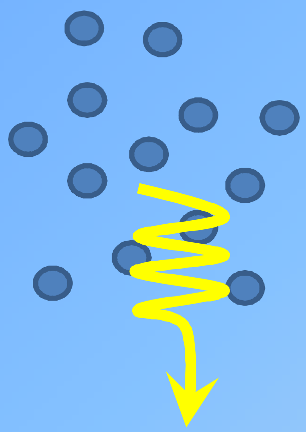
$\gamma_{jf} \sim \upsilon_a \cong \sigma n_a v \cong 2{,}5 \cdot 10^{-10} n_a \qquad \sigma \cong 5{,}5 \cdot 10^{-15}$ см^2

$\upsilon_a > \Delta\omega_D$ при $n_a \geq 1{,}6 \cdot 10^{19}$ см$^{-3}$, т.е. $p \geq 0{,}6$ атм

Эффект Дике

Столкновения изменяют направление и величину скорости частицы, но при этом не влияют на излучаемую волну (оставляют неизменной фазу).
Длина свободного пробега между столкновениями меньше длины волны.
Набег фазы, связанный с пространственным смещением частицы, задается

$$e^{i\vec{k}\vec{r}_i} = 1 + i\vec{k}\vec{r}_i + \frac{1}{2}(-1)k^2 r_i^2 + \ldots$$



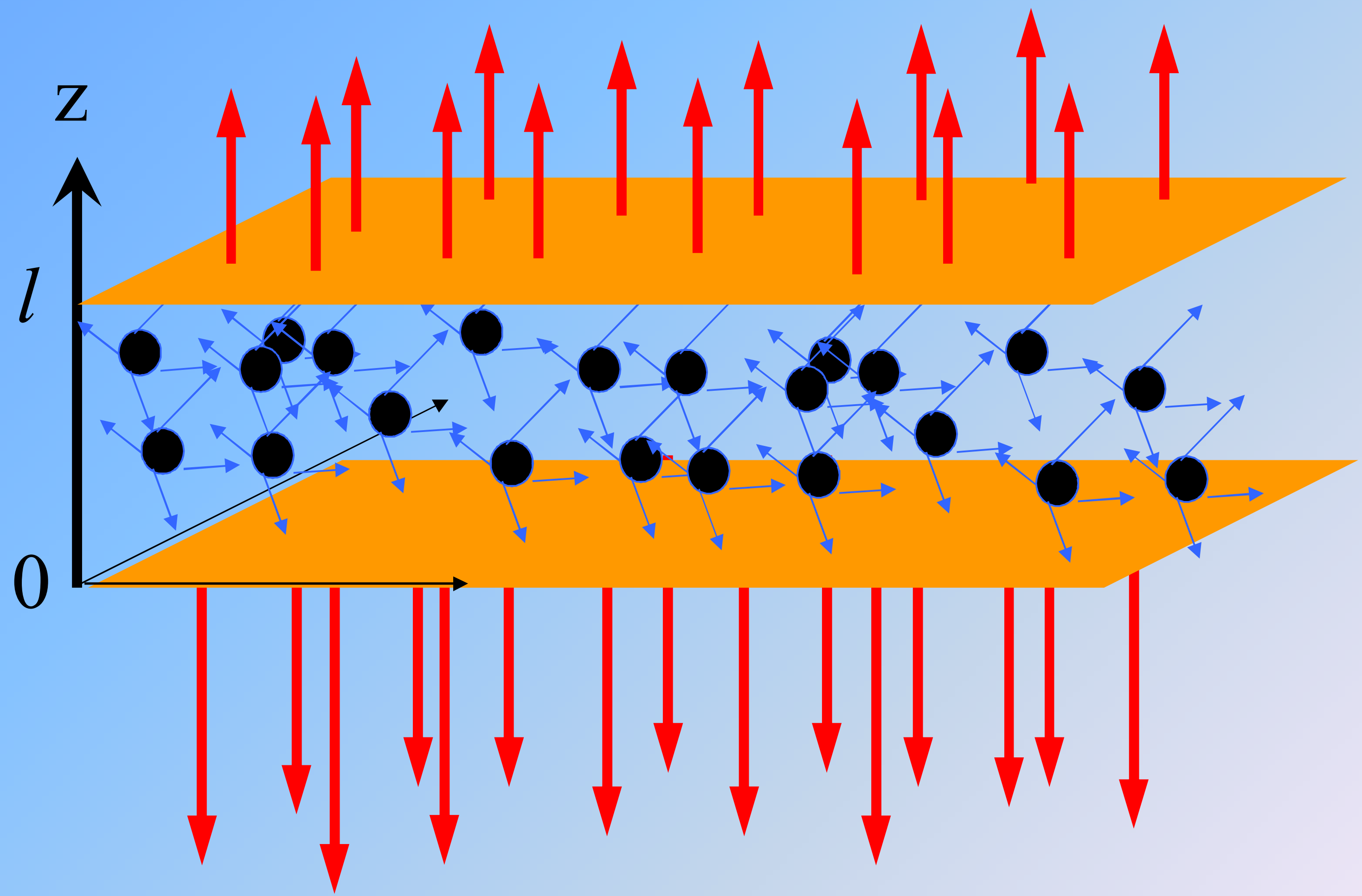
$$\left\langle e^{i\vec{k}\vec{r}_i} \right\rangle \cong e^{-\frac{k^2 Dt}{2}}$$

$$E' = E_o e^{(i\omega_{fi}^{o} t) - \left(\frac{\gamma_{fi} + k^2 D}{2}\right) t}$$

$$S(\omega) = \frac{\left(\gamma_{fi} + k^2 D\right)}{2\pi\left[\left(\omega - \omega_{fi}\right)^2 + \left(\frac{\gamma_{fi} + k^2 D}{2}\right)^2\right]}$$

$$\Delta\omega \sim k^2 D \approx \frac{k^2 v \widetilde{L}}{3} \sim \frac{\pi}{3} k v \frac{\widetilde{L}}{\lambda}$$

Пленение излучения



$\Re_{fi}^{0}$ – вероятность спонтанного перехода

$S(\omega)$ – контур спектральной линии

N_ω – число фотонов в ед. интервале частот

I_ω – интенсивность излучения

$$I_\omega d\omega = 2\int \hbar\omega \frac{cN_\omega}{V} \frac{Vk^2 dk}{(2\pi)^3} dO = N_\omega \frac{2\cdot\hbar\omega^3\cdot 4\pi}{(2\pi)^3 c^2} d\omega$$

$n_\omega \cdot c = \dfrac{I_\omega}{\hbar\omega} = N_\omega \dfrac{\omega^2}{\pi^2 c^2}$ – плотность потока фотонов

Сечение вынужденного излучения

$$\sigma_{fi} \equiv \frac{\text{вероятность вынужденного излучения}}{\text{плотность потока фотонов}}$$

$$\sigma_{fi} = \frac{\pi^2 c^2}{\omega^2} \Re^0_{fi}\, S(\omega)$$

Сечение поглощения

$$\sigma_{if} \equiv \frac{\text{вероятность поглощения}}{\text{плотность потока фотонов}}$$

$$\sigma_{if} = \frac{\pi^2 c^2}{\omega^2} \Re^0_{fi} \, S(\omega) \frac{g_i}{g_f}$$

$g = 2J + 1$ – статистический вес

N_i – плотность атомов на верхнем уровне

N_f – плотность атомов на нижнем уровне

$$\mu_\omega = \sigma_{if} N_f - \sigma_{fi} N_i$$

$\mu_\omega > 0$ – коэффициент поглощения потока фотонов на единице пути

$\mu_\omega < 0$ – коэффициент усиления потока фотонов на единице пути

$$\mu_\omega = \sigma_{if} N_f \left[1 - \frac{g_f N_i}{g_i N_f} \right]$$

Уравнение баланса

для плотности фотонов n_ω

$$\frac{dn_\omega}{dt} = \frac{\partial n_\omega}{\partial t} + c\frac{\partial n_\omega}{\partial z} = -\mu_\omega n_\omega c + \Re^0_{fi} N_i S(\omega)$$

$$\frac{\partial n_\omega}{\partial t} = 0$$ – стационарная задача

$$\boxed{\frac{dI_\omega}{dz} = -\mu_\omega I_\omega + \hbar\omega \cdot \Re^0_{fi} N_i S(\omega)}$$

1. Поглощение света средой

$$\frac{dI_\omega}{dz} = -\mu_\omega I_\omega$$

$$I_\omega(z) = I_\omega(0)e^{-\mu_\omega z}$$

2. Поглощение мало

(оптически тонкая среда)

$$\mu_\omega l << 1$$

$$\frac{dI_\omega}{dz} = \hbar\omega \cdot \Re^0_{fi} N_i S(\omega)$$

$$I_\omega = \frac{1}{2}\hbar\omega \cdot \Re^0_{fi} N_i S(\omega) \cdot l$$

Контур определяется $S(\omega)$

3. Поглощение велико

(оптически протяженная среда)

$$\mu_\omega l >> 1 \quad \Rightarrow \quad \Delta z \sim \mu_\omega^{-1}$$

$$I_\omega \sim \frac{\hbar\omega \cdot \Re_{fi}^0 N_i S(\omega)}{\mu_\omega}$$

$$I_\omega \sim \frac{\hbar\omega \cdot \Re^0_{fi} N_i S(\omega)}{\frac{\pi^2 c^2}{\omega^2} \Re^0_{fi} S(\omega) \frac{g_i}{g_f} N_f} \sim \frac{4\hbar\omega}{\lambda^2} \frac{N_i}{N_f}$$

Интенсивность не зависит от $S(\omega)$

Вблизи центра линии, где $\mu_\omega l << 1$

интенсивность уменьшается в $1/\mu_\omega l$ раз

- пленение излучения

Эффективная вероятность спонтанного излучения

Проинтегрируем по ω

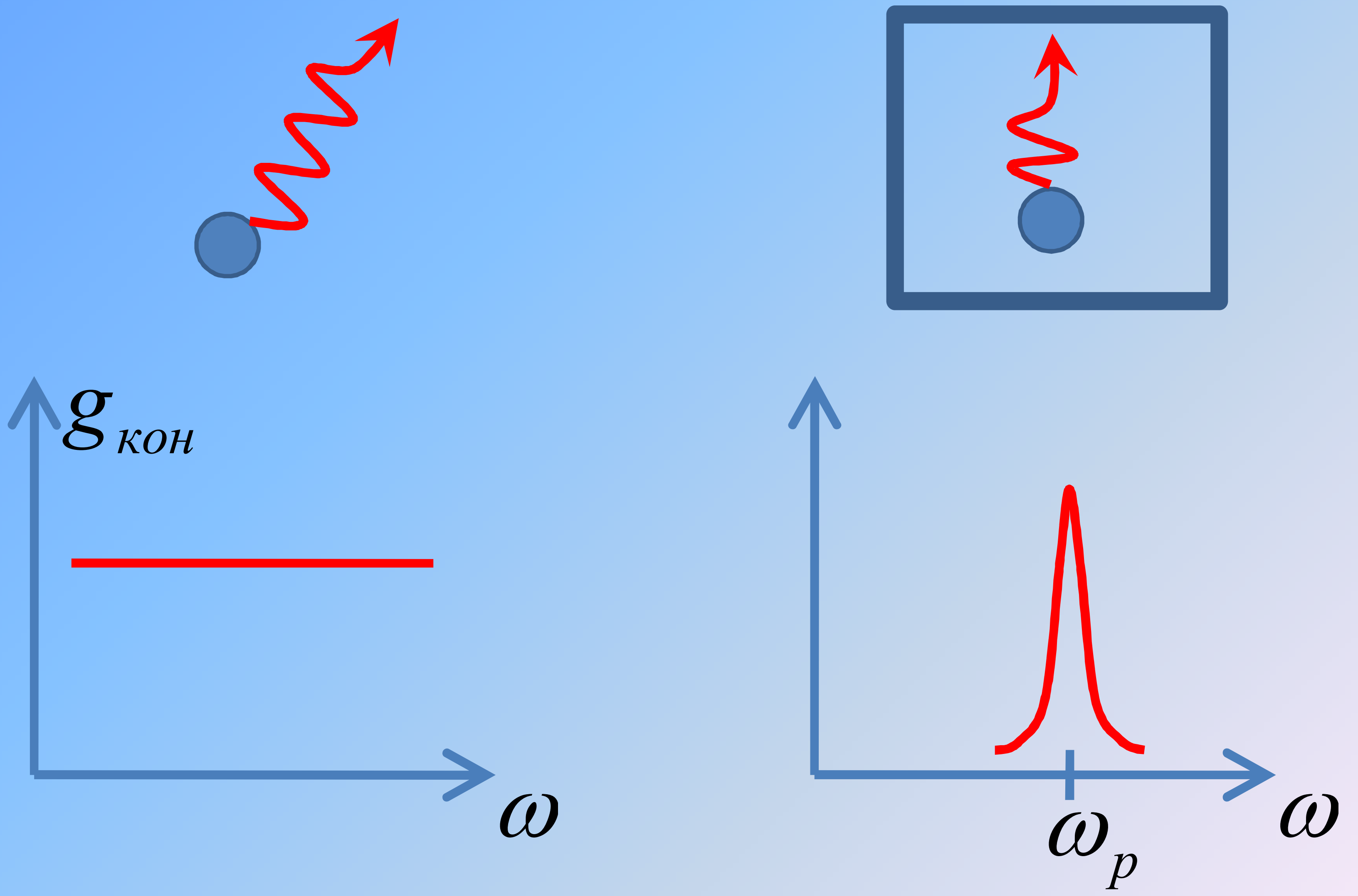
1. Оптически тонкая среда $\quad I \sim \hbar\omega_0 \cdot \Re^0_{fi} N_i l$

2. Оптически протяженная среда $\quad l \cdot \mu_\omega(\Delta\omega^*) \sim 1$

$$I \sim \frac{\hbar\omega_0 \cdot \Re^0_{fi} N_i S(\omega_0)}{\mu^0_\omega} \sim \hbar\omega_0 \cdot \Re^0_{fi} N_i l \frac{\Delta\omega^*}{l\mu^0_\omega} \frac{2}{\pi\gamma_{fi}}$$

$$\Re^0_{fi,\text{эфф}} \sim \Re^0_{fi} \frac{1}{l\mu^0_\omega} \frac{\Delta\omega^*}{\gamma_{fi}}$$

Изменение скорости спонтанного излучения атома в замкнутом пространстве



Плотность конечных состояний (континуум)

$$g_{кон} = \delta(E_i - E_f - \hbar\omega)\cdot g_f \cdot dn$$

dn – число осцилляторов конечного состояния

Пусть объем Ω имеет форму куба

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

Число осцилляторов поля для которого волновой вектор лежит в интервале $\vec{k}, \vec{k} + d^3k$

$$dn = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} d^3k = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} k^2 dk\, dO = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2 d\omega}{c^3} dO$$

$$g_{кон} = \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) g_f \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2 d\omega}{c^3} dO$$

$$g_{кон} = \frac{g_f}{\hbar} \frac{\Omega \omega^2 dO}{(2\pi c)^3}$$

$$g_{кон} = \frac{g_f}{\hbar} \frac{\Omega \omega^2}{(2\pi c)^3} \frac{8\pi}{3}$$

$$\boxed{g_c = \frac{g_f}{\hbar} \frac{\Omega \omega^2}{3\pi^2 c^3}}$$

Плотность конечных состояний (дискретные моды $\omega = \omega_p$)

$$g_{кон} = \delta(E_i - E_f - \hbar\omega) \cdot g_f \cdot dn$$

dn – число осцилляторов конечного состояния

$$dn = \frac{1}{\pi} \frac{\omega_p / Q}{(\omega - \omega_p)^2 + (\omega_p / Q)^2} d\omega$$

$$\boxed{g_f = \frac{g_f}{\hbar} \frac{Q}{\pi\omega}}$$

Связь скоростей спонтанного излучения атома в свободном и в замкнутом пространствах

$$\Re_{if}^{f} = \Re_{if}^{c}\,\frac{3\pi Q c^{3}}{\Omega\omega^{3}} = \Re_{if}^{c}\,\frac{3Q\lambda^{3}}{8\pi^{2}\Omega}$$

Если $\lambda^{3} \approx \Omega$

$$\Re_{if}^{f} \approx \Re_{if}^{c}\cdot Q$$

Теория спонтанного излучения в ограниченных объемах
(модель Вайскопфа-Вигнера)

Атом

Поглощающая система (стенки)

Взаимодействие атома с осциллятором

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_c + \hat{H}_w + \hat{U} + \hat{V}$$

Осциллятор

Взаимодействие осциллятора с поглотителем

Возможные состояния совокупной системы

Возбужден только атом $W_a = \hbar\omega_a$

$\hat{H}_a|1,0,0\rangle = W_a|1,0,0\rangle$ $\hat{H}_c|1,0,0\rangle = 0$ $\hat{H}_w|1,0,0\rangle = 0$

Возбужден только осциллятор $W_c = \hbar\omega_c$

$\hat{H}_a|0,1,0\rangle = 0$ $\hat{H}_c|0,1,0\rangle = W_c|0,1,0\rangle$ $\hat{H}_w|0,1,0\rangle = 0$

Стенки поглотили фотон с частотой ω $W_w = \hbar\omega$

$\hat{H}_a|0,0,1_\omega\rangle = 0$ $\hat{H}_c|0,0,1_\omega\rangle = 0$ $\hat{H}_w|0,0,1_\omega\rangle = W_w|0,0,1_\omega\rangle$

Ищем решение в виде

$$\Psi(t) = A(t)\cdot e^{-i\omega_a t}\left|1,0,0\right\rangle +$$

$$+ B(t)\cdot e^{-i\omega_c t}\left|0,1,0\right\rangle +$$

$$+ \sum_{\omega} C_{\omega}(t)\cdot e^{-i\omega t}\left|0,0,1_{\omega}\right\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi$$

$$i\hbar \frac{dA}{dt} = Ue^{i(\omega_a - \omega_c)t} \cdot B + i\hbar\delta(t)$$

$$i\hbar \frac{dB}{dt} = U^* e^{-i(\omega_a - \omega_c)t} \cdot A + \sum_{\omega} V_{\omega} e^{-i(\omega_c - \omega)t} C_{\omega}$$

$$i\hbar \frac{dC_{\omega}}{dt} = V_{\omega}^* e^{i(\omega_c - \omega)t} \cdot B$$

Ненулевые матричные элементы

$$U = \left\langle 0,1,0 \middle| \hat{U} \middle| 1,0,0 \right\rangle \quad V_{\omega} = \left\langle 0,0,1 \middle| \hat{V}_{\omega} \middle| 0,1,0 \right\rangle$$

1. Атом в свободном пространстве

$$i\hbar\frac{dA}{dt}=Ue^{i(\omega_a-\omega_c)t}\cdot B+i\hbar\delta(t)$$

$$i\hbar\frac{dB}{dt}=U^{*}e^{-i(\omega_a-\omega_c)t}\cdot A$$

$$U_{\alpha}\propto\left(\vec{d}\,\vec{e}\right)e^{i\vec{k}\vec{r}}\,\hat{a}_{\vec{k},\alpha}$$

Решение системы

$$A(t) = e^{-\gamma t}$$

$$\boxed{\gamma = \frac{2d^2\omega_a^3}{3\hbar c^3}}$$

$$B_\alpha(t) = \frac{U_\alpha^*}{i\hbar}\frac{1 - e^{-\left[i(\omega_a - \omega_{c,\alpha}) + \gamma\right]t}}{i(\omega_a - \omega_{c,\alpha}) + \gamma}$$

Вероятность спонтанных переходов в единицу времени

$$\Re_{\alpha} = -\frac{d|A|^2}{|A|^2 dt} = 2\gamma = \frac{4d^2\omega_a^3}{3\hbar c^3}$$

Распределение испущенных фотонов по частоте

$$\int |B_{\alpha}|^2 g_f(\omega_{\alpha}) dO = \frac{\gamma}{\pi\left[\gamma^2 + \left(\omega_a - \omega_{c,\alpha}\right)^2\right]}$$

2. Затухание энергии в резонаторе

$$B(t) = e^{-\left(\gamma_c + i\left(\omega_c - \delta_c\right)\right)t}$$

сдвиг частоты резонатора

плотность состояний в поглотителе

$$\gamma_c = \frac{\pi \left| V_{\omega_c} \right|^2 g\left(\omega_c\right)}{\hbar^2}$$

$$Q = \frac{\omega_c}{2\gamma_c}$$

добротность резонатора

3. Спонтанный распад атома в резонаторе

$$\gamma_c >> \left|\frac{U_\alpha}{\hbar}\right| \qquad \Re_\alpha^c = \frac{3\lambda^3 \Re_\alpha^o}{8\pi^2\Omega} \frac{\omega_c^2 / Q}{(\omega_c - \omega_a)^2 + \dfrac{\omega_c^2}{Q^2}}$$

$$\omega_c = \omega_a \quad \Rightarrow \quad \Re_{if}^f \approx \Re_{if}^c \cdot Q$$

Если

$$\omega_a - \omega_c \approx \omega_c \quad \Rightarrow \quad \Re_{if}^f \approx \Re_{if}^c / Q \qquad \lambda^3 \approx \Omega$$

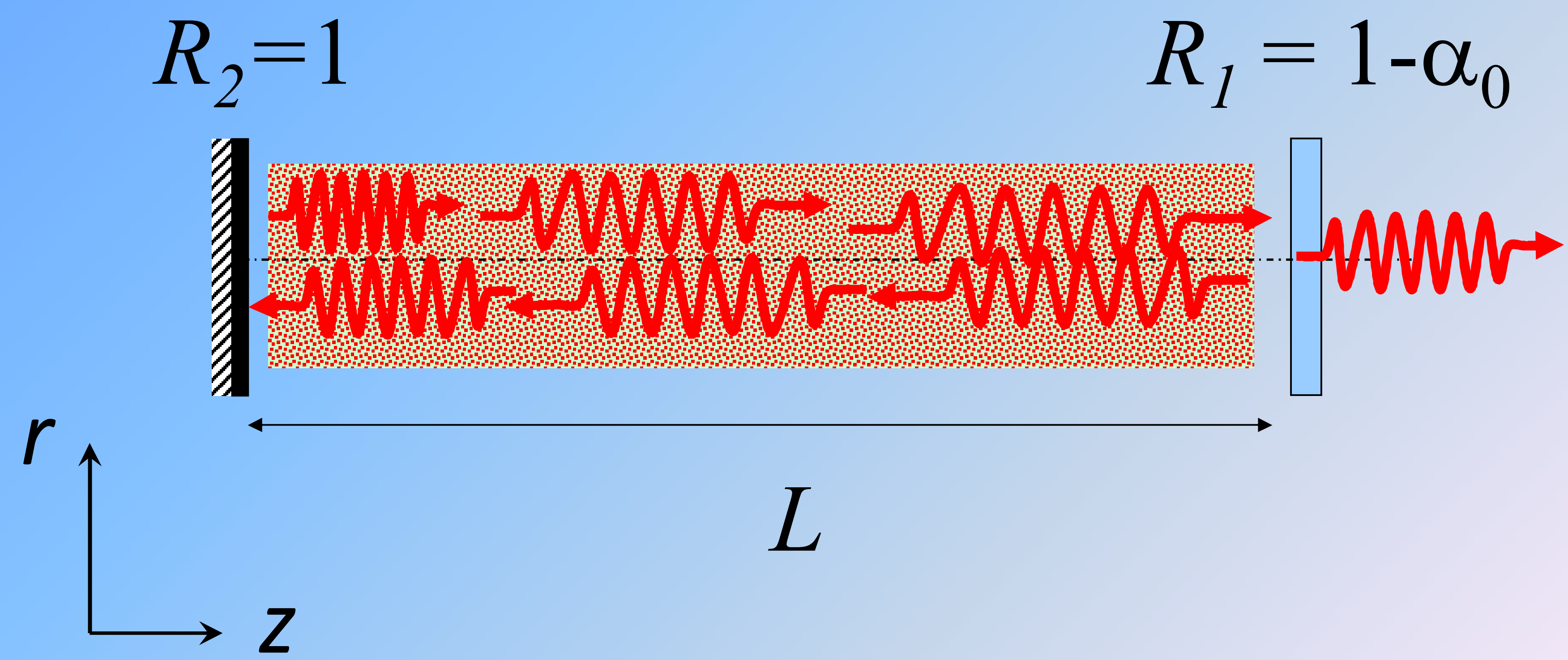
$$\gamma_c << \left|\frac{U_\alpha}{\hbar}\right| \quad \Rightarrow \quad \omega = \omega_a \pm \left|\frac{U_\alpha}{\hbar}\right|, \text{при } \omega_c = \omega_a$$

Лазеры

Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

Типичная геометрия лазера

$\mu_\omega < 0$ – коэффициент усиления потока фотонов на единице пути



Распределение установившегося поля в резонаторе

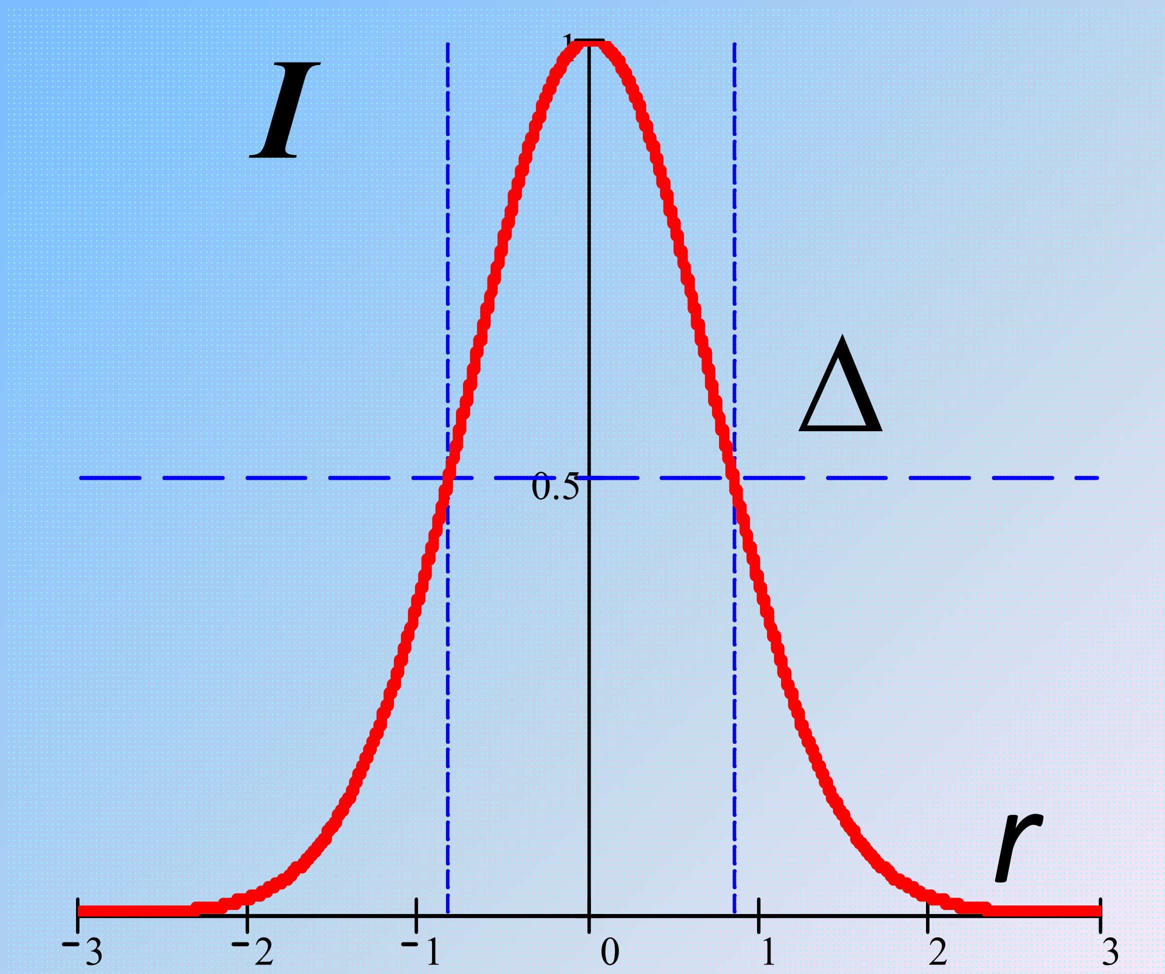
$$R \approx 1 \quad \Rightarrow \quad I \propto const(z)$$

$I(r)$ – определяется параметрами зеркал

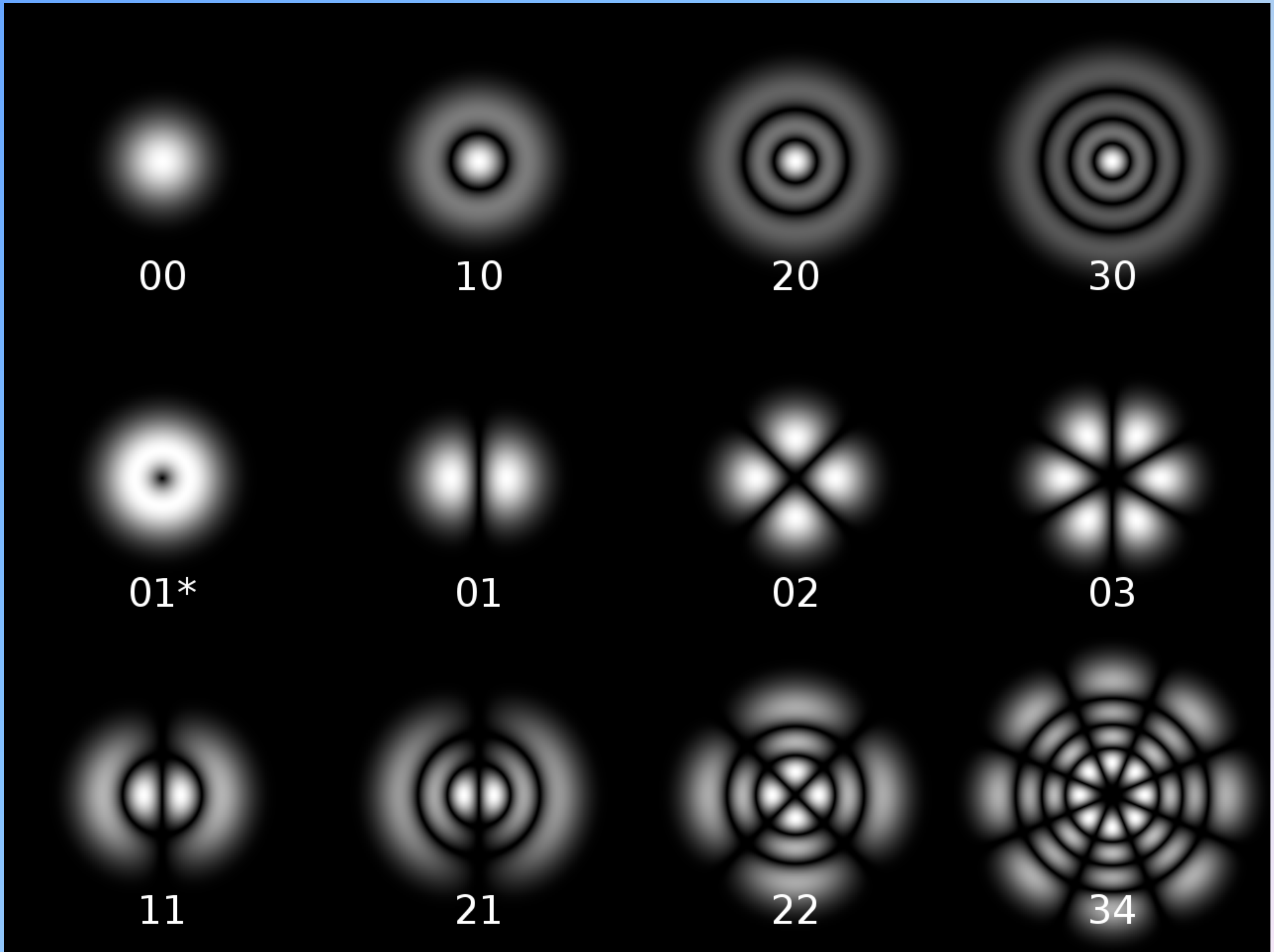
Гауссов пучок

$$I(r) \propto e^{-r^2/\Delta^2}$$

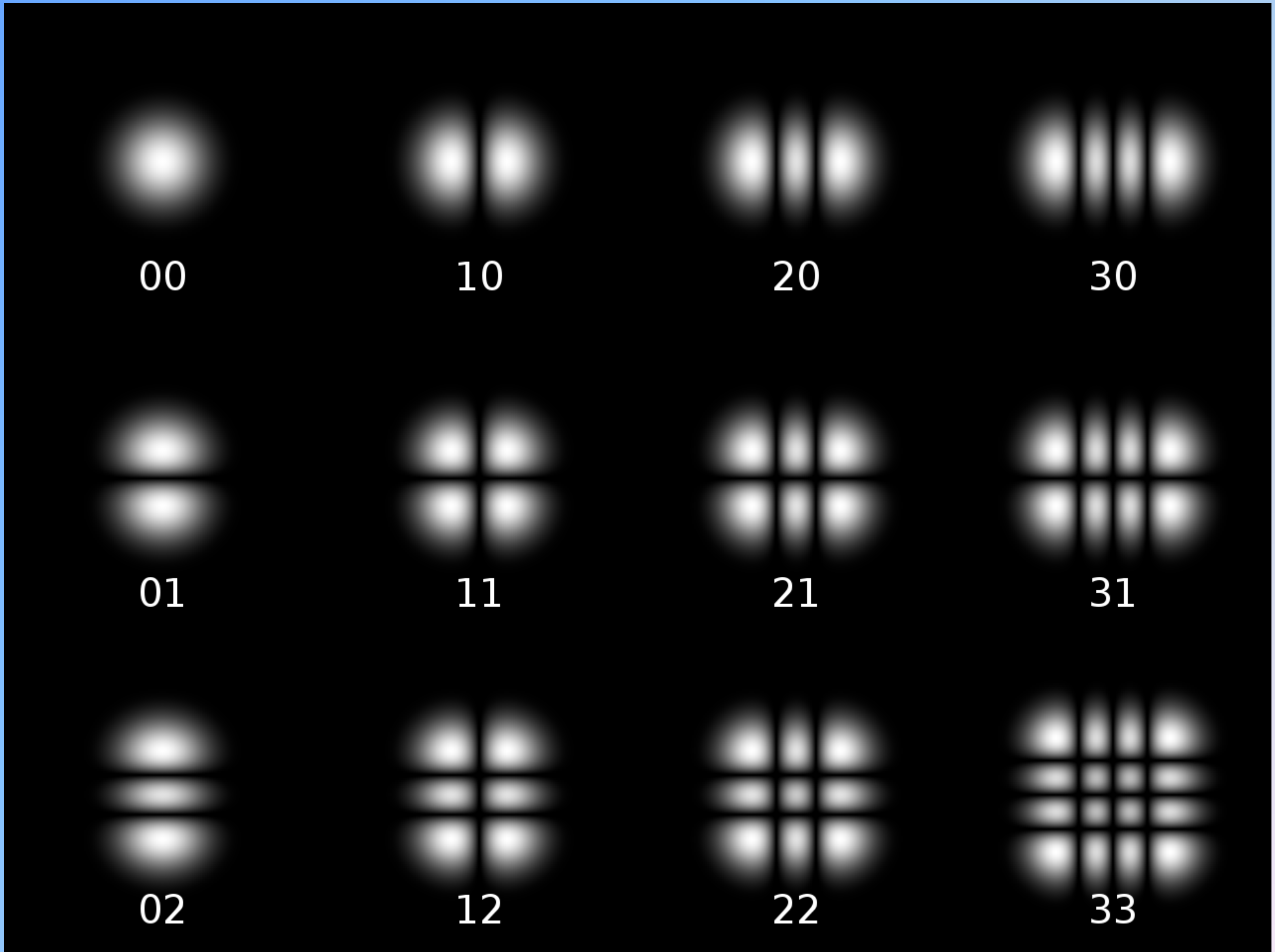
$$\Delta^2 = \frac{\lambda l}{\pi}$$



Цилиндрические моды



Прямоугольные моды



Добротность и потери фотонов из резонатора

$$\frac{\partial n_\omega}{\partial t} = \alpha_0 \frac{c}{2L} n_\omega$$

$$\tau_{резонатора} = 2L/\alpha_0 c = 3 \cdot 10^{-7} \quad \text{при} \quad \alpha_0 = 0.02$$

$$Q = \omega\tau \sim 10^9$$

Уравнение баланса для плотности фотонов

$$\frac{dn_\omega}{dt} = \frac{\partial n_\omega}{\partial t} + c\frac{\partial n_\omega}{\partial x} = -c\mu_\omega n_\omega - \frac{\alpha_o}{2L} n_\omega c + \Re^0_{fi} N_i S(\omega)$$

$\Re^0_{fi}$ – вероятность спонтанного перехода

N_i – плотность атомов на верхнем уровне

$S(\omega)$ – контур спектральной линии

Условие возникновения генерации

$$-\mu_{\omega} >> \frac{\alpha_o}{2L}$$

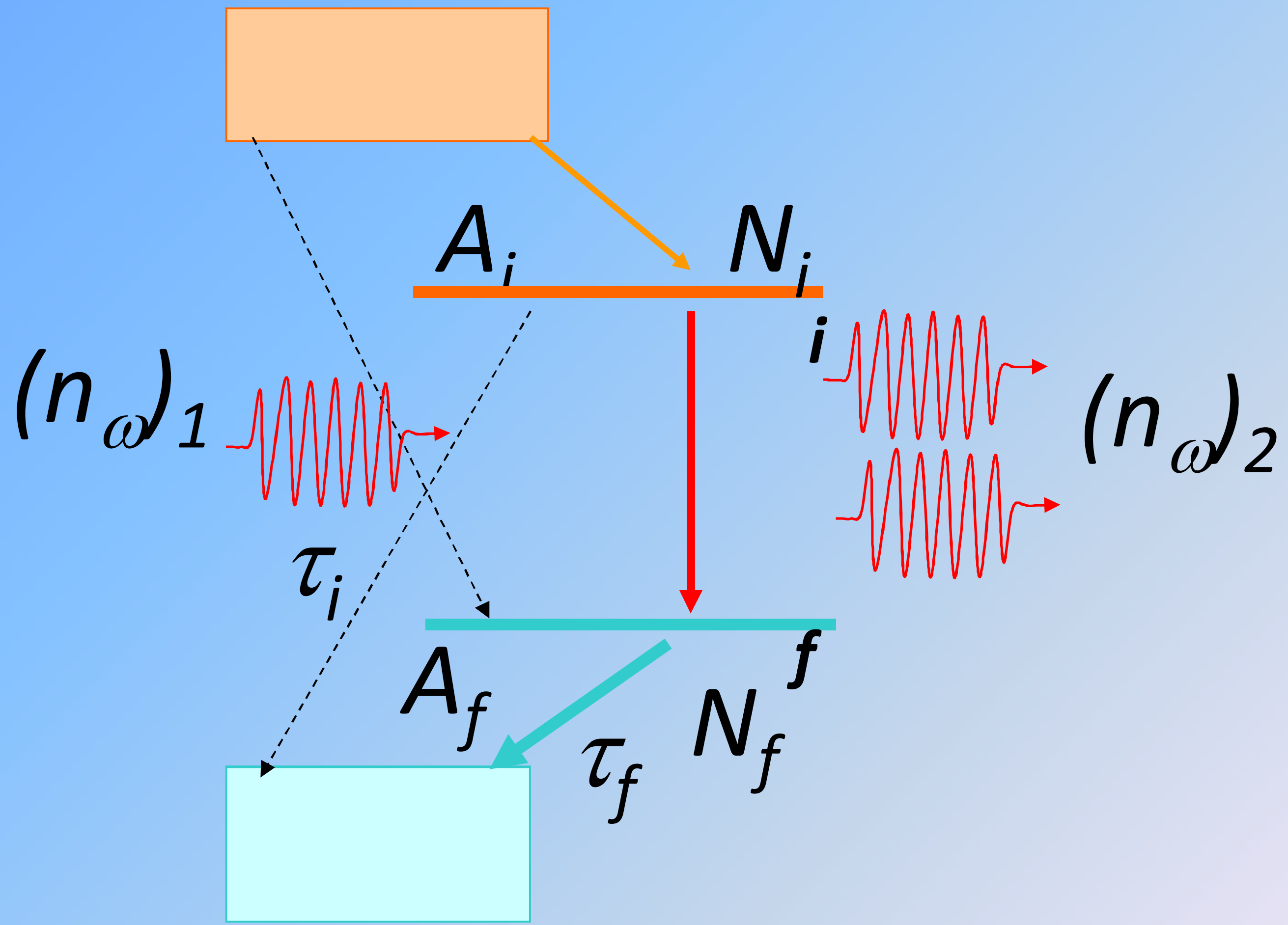
$$\sigma_{fi} N_i \left[1 - \frac{g_i N_f}{g_f N_i} \right] >> \frac{\alpha_0}{2L}$$

Тепловое равновесие

$$\frac{g_f N_i}{g_i N_f} = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$$

$$\mu_\omega = \sigma_{if} N_f \left[1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \right] > 0$$

Схема уровней усиливающей атомной системы



Система балансных уравнений

$$\frac{dN_i}{dt} = A_i - \frac{N_i}{\tau_i} - c\sigma_{fi} N_i \left(1 - \frac{g_i N_f}{g_f N_i}\right) n_\omega$$

$$\frac{dN_f}{dt} = A_f - \frac{N_f}{\tau_f} + \nu_{fi} N_i + c\sigma_{fi} N_i \left(1 - \frac{g_i N_f}{g_f N_i}\right) n_\omega$$

A_i, A_f – скорости возбуждения атомов

τ_i, τ_f – времена жизни уровней

ν_{fi} – полная частота переходов с $\boldsymbol{i}$ на $\boldsymbol{f}$

Приближение

- усиление света максимально в *центре линии*
- $Q \gg 1$
- ширина лазерной линии << ширины линии перехода
- излучение лазера можно считать ***монохроматическим*** с плотностью фотонов $n_ф$, усиливаемых в центре линии

$$\sigma^0_{fi} n_ф = \int \sigma_{fi} n_\omega d\omega$$

Стационарный режим генерации

$$\frac{dN_{i,f}}{dt} = 0 \qquad A_f = 0$$

$$N_i - N_f \frac{g_i}{g_f} = \frac{A_i \tau_i \left(1 - \frac{g_i}{g_f} \tau_f \nu_{fi} \right)}{1 + c\sigma_{fi}^0 n_\phi \underbrace{\left(\tau_i + \frac{g_i}{g_f} \tau_f \left(1 - \nu_{fi} \tau_i \right) \right)}_{\tau}}$$

Снижение инверсии заселенностей

$$N_i - N_f\frac{g_i}{g_f} = A_i\tau_i\left(1-\frac{g_i}{g_f}\tau_f\nu_{fi}\right)$$ – поля нет

$$N_i - N_f\frac{g_i}{g_f} = \frac{A_i\tau_i\left(1-\frac{g_i}{g_f}\tau_f\nu_{fi}\right)}{1+c\sigma_{fi}^0 n_\phi \tau}$$ – поле есть

$$\mu = \sigma_{if}^0 N_f\left[1-\frac{g_f N_i}{g_i N_f}\right] = \frac{\mu_0}{1+c\sigma_{fi}^0 n_\phi \tau}$$

Нестационарные процессы в лазере

$$g_i = g_f\,,\ \tau_{\mathrm{i}} = \tau_f\,,\ \nu_{fi} = 0$$

$$\Delta N = N_i - N_f$$

$$A = A_i - A_f$$

$$\frac{d\Delta N}{dt} = A - \frac{\Delta N}{\tau} - \sigma_{fi}^{0} n_{\phi} c \cdot \Delta N$$

$$\frac{dn_{\phi}}{dt} = \sigma_{fi}^{0} n_{\phi} c \cdot \Delta N - \frac{\alpha_o}{2L} n_{\phi} c + \beta \Re_{fi}^{0} N_i$$

$\beta = S(\omega_0)$ – параметр уширения линии

Начальное значение

(режим модулированной добротности)

$$\sigma_{fi}^{0} \cdot \Delta N << \frac{\alpha_o}{2L}$$

плотность фотонов в резонаторе определяется только спонтанным излучением

$$\cancel{\frac{d\Delta N}{dt}} = A - \frac{\Delta N}{\tau} - \cancel{\sigma^{0}_{fi} n_{\phi} c \cdot \Delta N}$$

$$\cancel{\frac{dn_{\phi}}{dt}} = \cancel{\sigma^{0}_{fi} n_{\phi} c \cdot \Delta N} - \frac{\alpha_{o}}{2L} n_{\phi} c + \beta \Re^{0}_{fi} N_{i}$$

$$\Delta N_{o} = A\tau \qquad n^{0}_{\phi} \approx 2L\beta \Re^{0}_{fi} N_{i} / \alpha_{o} c$$

– малó

Убрали поглощение

в начальный момент

$$\frac{dn_\phi}{dt} = \sigma_{fi}^{0} n_\phi c \cdot \Delta N \cancel{- \frac{\alpha_o}{2L} n_\phi c + \beta \Re_{fi}^{0} N_i}$$

$$n_\phi \approx n_\phi^{0} \cdot e^{k_0 c t}$$

$k_0 = \sigma_{fi}^{0} \cdot \Delta N_0$ – коэффициент усиления света на единицу длины резонатора

Плотность фотонов, при которой начинается изменение заселённостей

$$\frac{d\Delta N}{dt} = A - \frac{\Delta N}{\tau} - \sigma_{fi}^{0} n_{\phi} c \cdot \Delta N$$

$$n_{\phi}^{*} \approx \frac{A}{\sigma_{fi}^{0} \Delta N_{o} c} \cong \frac{A}{k_{o} c} = \frac{1}{\tau \sigma_{fi}^{0} c}$$

Большое k_0

n_{ϕ}^{*} достигается за время одного прохода $\Delta t \sim L / c$
–
суперлюминесцентный режим

$$I = c n_{\phi} \hbar \omega \approx \frac{A}{k_o} \hbar \omega$$

Малое k_0

$$n_{\phi}^{*} \approx n_{\phi}^{0} \cdot e^{k_0 c t}$$

$$\Downarrow$$

$$\Delta t >> L / c$$

$$t \approx \frac{1}{k_0 c} \ln \frac{n_{\phi}^{*}}{n_{\phi}^{0}}$$

Установившаяся плотность фотонов

$$0 = A - \frac{\Delta N}{\tau} - \sigma_{fi}^{0} n_{\phi} c \cdot \Delta N$$

$$0 = \sigma_{fi}^{0} n_{\phi} c \cdot \Delta N - \frac{\alpha_o}{2L} n_{\phi} c$$

$$\Delta N_{уст} = \frac{\alpha_0}{2L\sigma_{fi}^{0}}$$

$$n_{\phi} = \frac{2L}{\alpha_0 c}\left(A - \frac{\Delta N_{уст}}{\tau}\right)$$

Мощность излучения через единицу площади выходного зеркала

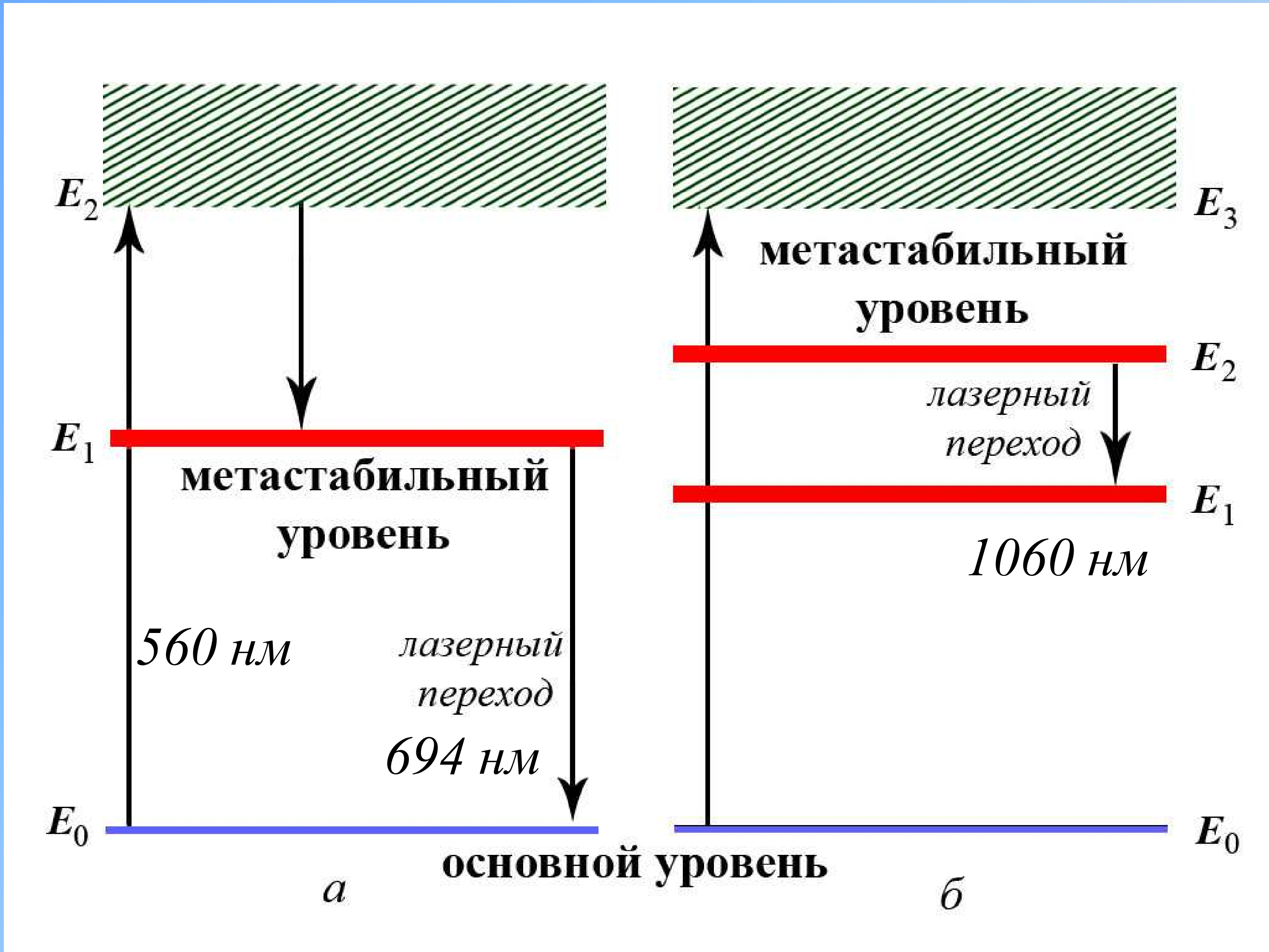
$$I = \frac{1}{2} n_{\phi} c \alpha \hbar \omega$$

$$I = \hbar \omega L \frac{\alpha}{\alpha_0} \left(A - \frac{\alpha_0}{2 L \tau \sigma_{fi}} \right)$$

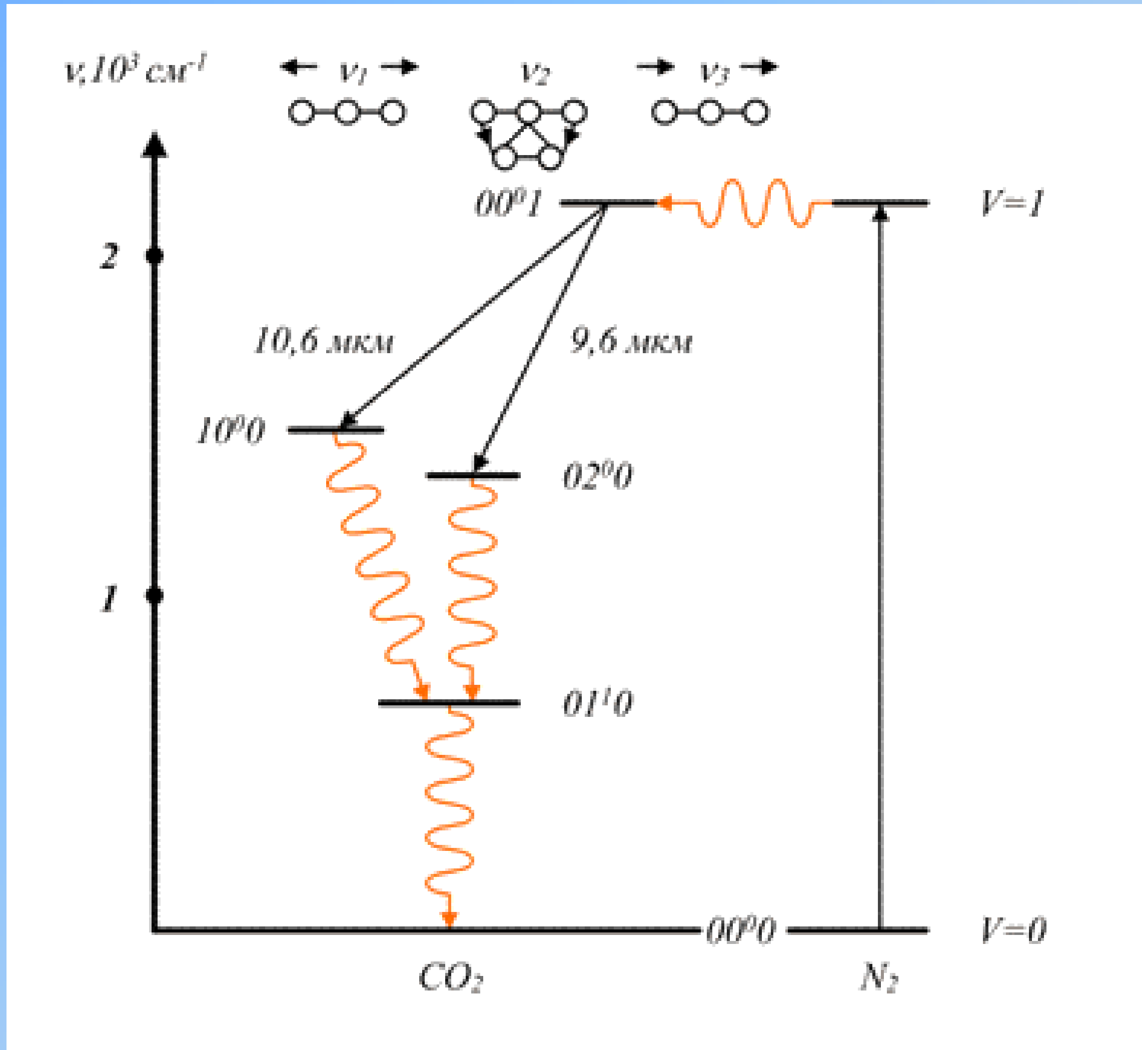
$$КПД_{квант} = \frac{\hbar\omega}{E_i}$$

$$КПД = \frac{I}{E_{возб} A_i L}$$

Рубиновый и YAG : Nd лазеры

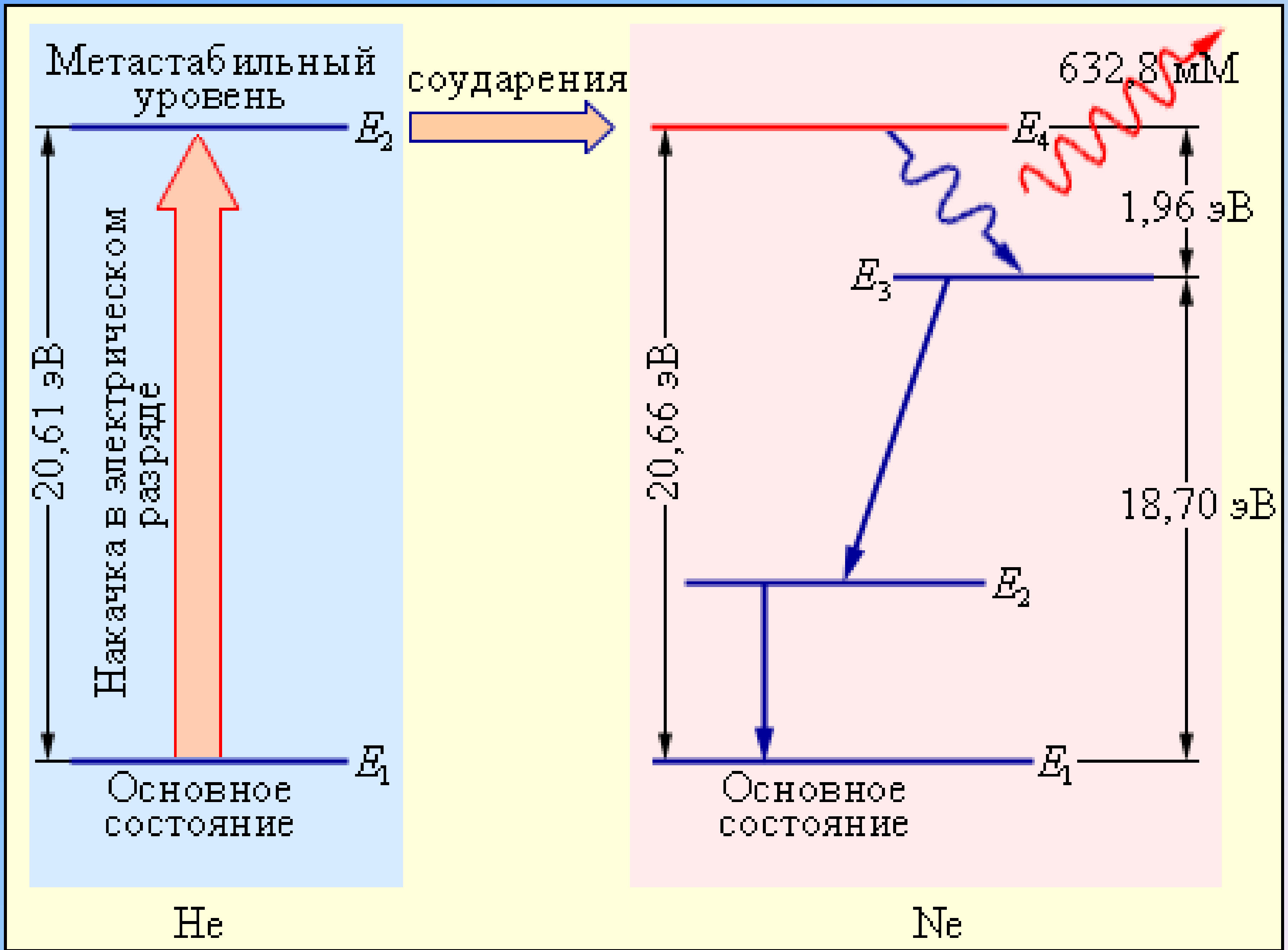


CO_2 лазер



ν,10³ см⁻¹
ν₁
ν₂
ν₃
00⁰1
V=1
2
10,6 мкм
9,6 мкм
10⁰0
02⁰0
1
01¹0
00⁰0
V=0
CO₂
N₂

He-Ne лазер



Метастабильный уровень
соударения
632,8 нм
E_2
E_4
1,96 эВ
E_3
20,61 эВ
Накачка в электрическом разряде
20,66 эВ
18,70 эВ
E_2
E_1
Основное состояние
E_1
Основное состояние
He
Ne

Эксимерный лазер