Scuola di Dottorato Leonardo da Vinci – a.a. 2007/08

LASER: CARATTERISTICHE, PRINCIPI FISICI, APPLICAZIONI

Versione 1 – Luglio 08 – http://www.df.unipi.it/~fuso/dida

Parte 3
Cenni di interazione radiazione materia in approssimazione semiclassica

SOMMARIO

-Approccio quantistico ai sistemi:
- cenni su concetti e strumenti
- livelli discreti e conservazioni
- probabilità di transizione

- Interazione radiazione materia in termini semiclassici:
  - cenni su regola di Fermi per perturbazione periodica
  - assorbimento ed emissione di fotoni

- Sistemi a due livelli secondo Einstein:
  - assorbimento, emissione stimolata, emissione spontanea
  - coefficienti di Einstein
  - Interazione ad alta intensità e saturazione

Obiettivo : mostrare che si può avere amplificazione di radiazione da parte di un mezzo materiale se si considerano sistemi quantistici e l'emissione stimolata

MECCANICA QUANTISTICA

Effetti quantistici diventano rilevanti (e predominanti) nei sistemi di interesse per la produzione di luce laser (atomi, molecole, solidi)

Alcuni postulati, effetti, conseguenze della MQ:

1. Dualismo onda corpuscolo (già visto con fotoni)
2. Quantizzazione dei livelli di energia (cfr fotoni in una scatola)
3. Principio di indeterminazione

Strumento fondamentale della MQ (diretta conseguenza di 1):
Funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r},t)$ per descrivere una particella quantistica (e.g., elettrone, fotone, etc.)
→ approccio probabilistico: $|\Psi(\mathbf{r},t)|^2$ è la probabilità di trovare particella in $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}+d\mathbf{r}$
→ decade il concetto di traiettoria

Infatti il principio di indeterminazione 3 stabilisce, e.g., per un moto unidimensionale:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$

« non è possibile conoscere simultaneamente posizione e quantità di moto di un dato oggetto con precisione arbitraria »

ESEMPIO 1: FUNZIONE D'ONDA DEL FOTONE

Esempio: particella libera (fotone) che si muove lungo *X* avendo quantità di moto <u>definita</u> *p*

Secondo de Broglie si ha:

$$\Psi(x,t) \propto e^{ikx} e^{-i\omega t} = \psi(x)\varphi(t)$$

$$\psi(x) = e^{ikx}$$

con $p = \hbar k$

Nota: La funzione d'onda Y si fattorizza come y(r) f(t) quando lo stato è "stazionario"

Nota: è la stessa funzione dell'onda (elettromagnetica) piana (dualismo onda corpuscolo)!

Attenzione: la funzione d'onda di de Broglie ha $|\psi|^2 = 1$

→ la probabilità è sempre e ovunque unitaria

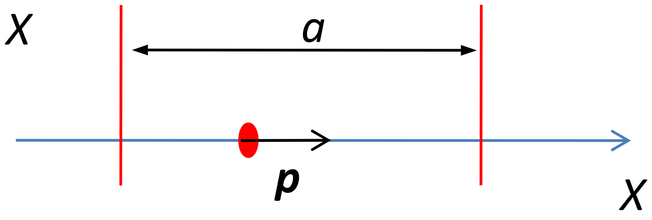
→ $\int |\psi|^2 dx$ (fattore di normalizzazione) diverge!

D'altra parte, per principio di indeterminazione: $\Delta p = 0$ → $\Delta x \to \infty$

ESEMPIO 2: BUCA DI POTENZIALE (INFINITA)

Esempio: particella libera (elettrone) che si muove lungo *X* essendo confinata in intervallo *–a/2, a/2* da potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & x < 0;\ x > a \end{cases}$$

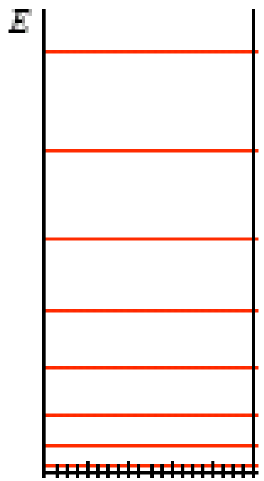


Le condizioni al contorno sono le stesse della radiazione nella cavità (scatola)

Si era ottenuto: $k_n = n\dfrac{\pi}{a}$

Essendo la particella <u>libera</u> l'energia è solo cinetica:

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$



Sistema con livelli discreti (quantizzati) di energia

ESEMPIO 3: ATOMO (DI IDROGENO)

Modello planetario dell’atomo (classico):

- Equilibrio (forza Coulomb dà acc. centr.)

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r^2}$$

- Energia (elettrostatica + cinetica)

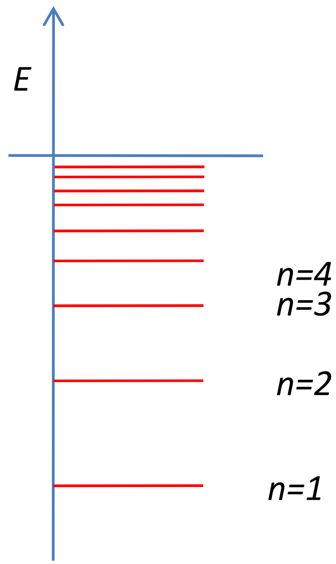
$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

$$E = \frac{1}{2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r} = -\frac{1}{2}\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

Ipotesi di Bohr (quantistica): $L = mvr = n\frac{h}{2\pi}$

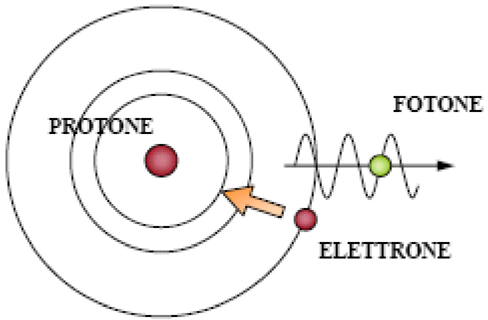
Quantizzazione raggio orbitale: $r_n = \frac{n^2h^2\varepsilon_o}{\pi m Z e^2}$

Quantizzazione energia: $E_n = -\frac{mZ^2e^4}{8\varepsilon_o^2 h^2}\frac{1}{n^2}$ $\quad E_n = -13.6\frac{Z^2}{n^2}\quad eV$



Sistema con livelli discreti (quantizzati) di energia

INTERAZIONE RADIAZIONE SISTEMA A LIVELLI DISCRETI

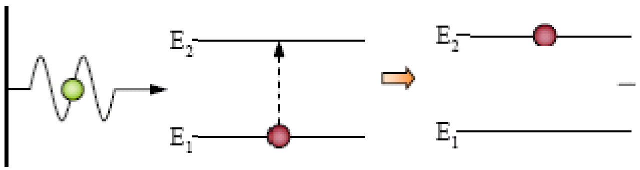


La transizione da un livello all'altro di un sistema quantistico (a livelli discreti) coinvolge assorbimento o emissione di uno (o più) fotoni

Conservazione energia: $h\nu = |E_{fin}-E_{in}|$
[Inoltre:
Conservazione quantità di moto
Conservazione momento angolare]

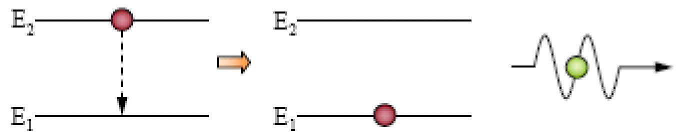
Processi possibili:

$$h\nu = E_2 - E_1$$



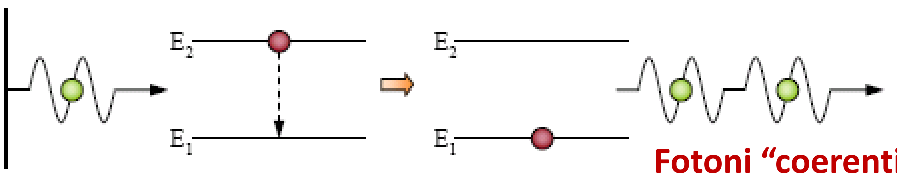
ASSORBIMENTO

Fotoni "incoerenti"



EMISSIONE SPONTANEA

Emissione spontanea postulata da Bohr



Fotoni "coerenti"

EMISSIONE STIMOLATA

CENNI DI STRUMENTI DI MQ

Le transizioni avvengono con una certa probabilità

In MQ sono stati stazionari quelli per cui $\Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})\phi(t)$, con $\phi(t) = e^{iE}$ (densità di prob costante)
E è autovalore dell'energia, $\psi(\mathbf{r})$ è autostato
Per un sistema con una data Hamiltoniana H e potenziale V, E è soluzione dell'eq. Schroedinger (agli stati stazionari):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

L'evoluzione temporale è invece data da

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r},t)$$

Quando un sistema interagisce con l'esterno si ha, generalmente: $H = H_0 + V$
- H_0 è Hamiltoniana del sistema imperturbato
- V è (energia potenziale) di interazione

La trattazione presuppone di considerare V come una perturbazione
Purtroppo in genere $V = V(t)$ → evoluzione attraverso stati non stazionari

Esempio: $V(t) \sim V_0 e^{i\omega t}$ tipica per interazione con radiazione e.m. in approssimazione di dipolo

REGOLA D'ORO DI FERMI

Per perturbazioni indipendenti dal tempo si trova la regola di Fermi

In general conceptual terms, a transition rate depends upon the strength of the coupling between the initial and final state of a system and upon the number of ways the transition can happen (i.e., the density of the final states). In many physical situations the transition probability is of the form

$$\underbrace{\lambda_{if}}_{\text{Transition probability}} = \frac{2\pi}{\hbar}\,\big|\underbrace{M_{if}}_{\text{Matrix element for the interaction}}\big|^2\,\underbrace{\rho_f}_{\text{Density of final states}}$$

Fermi's Golden Rule

A transition will proceed more rapidly if the coupling between the initial and final states is stronger. This coupling term is traditionally called the "matrix element" for the transition: this term comes from an alternative formulation of quantum mechanics in terms of matrices rather than the differential equations of the Schrodinger approach. The matrix element can be placed in the form of an integral where the interaction which causes the transition is expressed as a potential V which operates on the initial state wavefunction. The transition probability is proportional to the square of the integral of this interaction over all of the space appropriate to the problem.

$$M_{if} = \int \overbrace{\Psi_f^*}^{\text{Wavefunction for final state}}\;\underbrace{V}_{\substack{\text{Operator for the physical interaction}\\ \text{which couples the initial and final}\\ \text{states of the system.}}}\;\overbrace{\Psi_i}^{\text{Wavefunction for initial state}}\,dv$$

Nota: $\rho_f = \delta(E_f - E_i)$ per livelli idealmente "stretti"

Fortunatamente, per perturbazioni periodiche si trova, con ragionevoli assunzioni: $\lambda_{if} = \dfrac{2\pi}{\hbar}\,|M_{if}|^2\,\rho_f\,\tau$

con τ durata dell'interazione

⇨

Si definisce probabilità per unità di tempo:

$$P_{if} = \frac{2\pi}{\hbar}\,|M_{if}|^2\,\rho_f$$

(detta rate di transizione)

Perturbazione periodica → rate di transizione costante
(per transizioni "al primo ordine", e.g., un solo fotone)

ELEMENTI DI MATRICE DI DIPOLO

Per perturbazione data da radiazione e.m., esempio:

$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}, t) = E_0\, e^{i(kx-\omega t)}\, \boldsymbol{y} \rightarrow E_0\, e^{-i\omega t}\, \boldsymbol{y}$ (appr. dipolo)

si dimostra che $|M_{if}|^2 \propto E_0^2 \int \psi_f^* (\hat{y} \bullet \vec{d}) \psi_i d^3\vec{r}$

con: $\vec{d} = e\vec{r}$ operatore di dipolo elettrico

Nota: la forma dell'elemento di matrice determina regole di selezione → non tutti gli stati possono essere accoppiati (per dipolo elettrico)

Riassumendo: transizioni di dipolo e.m. con perturbazione periodica hanno rate di transizione (i.e., probabilità per unità di tempo) costante data da:

$$P_{if} \propto E_0^2 |M_{if}|^2 \rho_f$$

Essendo la densità di energia e.m. $u \sim E_0^2$ si ha:

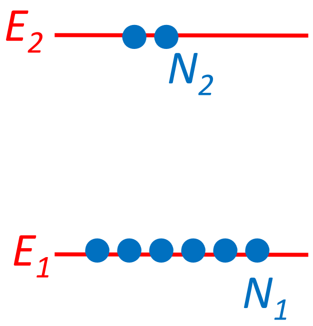
$$P_{if} \propto u |M_{if}|^2 \rho_f$$

Ovvero $$P_{if} = uB_{if}$$

Con B_{if} coefficiente di Einstein per assorbimento ed emissione stimolata

EQUAZIONI DI BILANCIO PER SISTEMA A 2 LIVELLI

Per semplicità considero sistema (ideale) a 2 soli livelli



N_1, N_2 popolazioni dei livelli (numero o densità di sistemi che si trovano al livello 1 e 2 in un campione macroscopico)

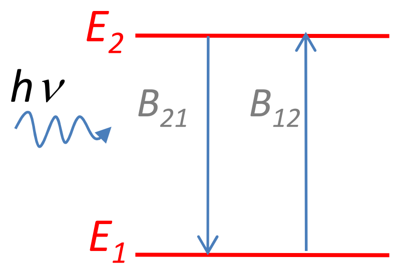
All'equilibrio termodinamico vale Boltzmann:

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left({E_1 - E_2}\big/{kT} \right)$$

Nota: $kT \sim 1/40$ eV @ room temp, mentre $\Delta E \sim$ eV

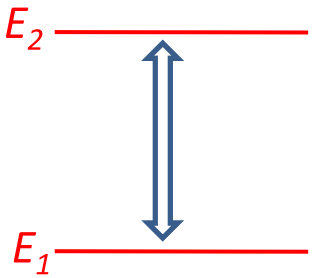
→ $N_2 << N_1$ in condizioni ordinarie

- Suppongo radiazione $h\nu = E_2 - E_1$ (con densità di energia u_ν)
- Considero solo:
  - Assorbimento 1→ 2 con probabilità P_{12}
  - Emissione stimolata 2 → 1 con probabilità P_{21}
- Assumo $B_{12}=B_{21}$
  - Nota: $B_{12}/B_{21} = g_1/g_2$ con g_j degenerazione del livello j



$$\frac{dN_2}{dt} = -B_{21}u_\upsilon N_2 + B_{12}u_\upsilon N_1 \qquad \frac{dN_1}{dt} = B_{21}u_\upsilon N_2 - B_{12}u_\upsilon N_1$$

BILANCIO DETTAGLIATO ED EINSTEIN



Deve essere P_{12}=P_{21} (bilancio dettagliato per una “reazione chimica”)

$\Downarrow$

Se B_{12}=B_{21} → all’equilibrio N_1 = N_2 : incompatibile con Boltzmann!!

Introducendo emissione spontanea (ragionamento di Einstein): rate A_{21} di emissione spontanea indipendente da u_ν

$$\frac{dN_2}{dt} = -B_{21}u_\upsilon N_2 + B_{12}u_\upsilon N_1 - A_{21}N_2$$

$$\frac{dN_1}{dt} = B_{21}u_\upsilon N_2 - B_{12}u_\upsilon N_1 + A_{21}N_2$$

Posto B_{12}=B_{21} , all’equilibrio (soluzione stazionaria) si ha: $$N_2^0 = N_1^0 \frac{B_{21}u_\nu}{B_{21}u_\nu + A_{21}}$$

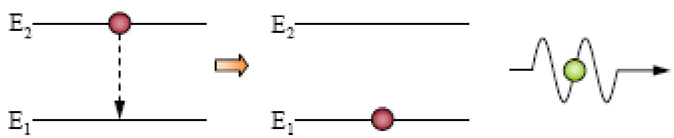
Per soddisfare Boltzmann deve essere: $$\frac{B_{21}u_\nu}{B_{21}u_\nu + A_{21}} = \exp\left(\frac{-h\nu}{kT}\right)$$

Per radiazione di corpo nero $$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^2}{c^3}\frac{1}{\exp(h\nu/kT)-1}$$

da cui: $$\boxed{A_{21} = B_{21}\frac{8\pi h\nu^3}{c^3}}$$

Il rate di decadimento spontaneo è proporzionale al valore di *B* (parametri “interni”) e al cubo della frequenza

“CONFRONTO” TRA PROCESSI I



EMISSIONE SPONTANEA

Rappresenta la tendenza di un sistema a tornare allo stato di energia più bassa
In “seconda quantizzazione” si spiega con “fluttuazioni del vuoto”

I fotoni sono emessi in modo casuale (incoerente)

Un campione eccitato (cioè preparato in modo da avere popolazione dei livelli eccitati) decade spontaneamente con vita media $\tau = 1/A$

Valori tipici di τ per transizioni elettroniche (atomiche/molecolari) permesse: 5-50 ns
La vita media aumenta con λ^3 (alle microonde $\tau \sim \mu s$, o maggiore)

Nota: esistono anche altri processi di decadimento non radiativo
(e.g., collisioni fra atomi/molecole, interazione con fononi in solidi, etc.l)
Si ha allora:

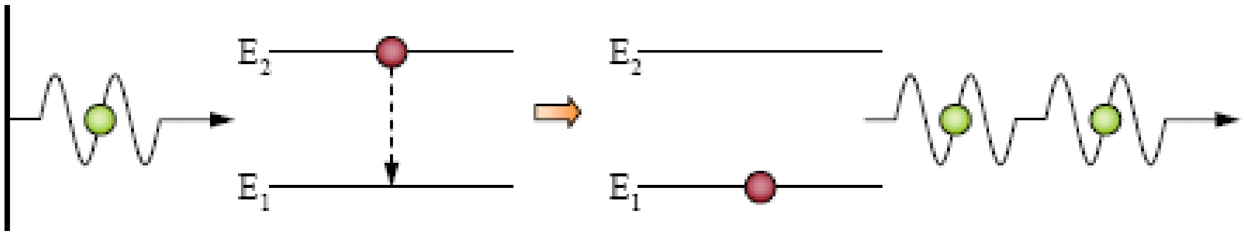
$$1/\tau_{eff} = 1/\tau_{spont} + 1/\tau_{nonrad}$$

La vita media effettiva è generalmente minore di quella spontanea

Nota: la vita media finita è in accordo con principio di indeterminazione e dà luogo a indeterminazione nella frequenza emessa:

$$\Delta\nu \sim 1/\tau$$

"CONFRONTO" TRA PROCESSI II



EMISSIONE STIMOLATA

Esiste solo in presenza di radiazione (risonante)
Da un fotone ne escono due (può amplificare!)

Il fotone emesso è indistinguibile da quello stimolante (emissione coerente)

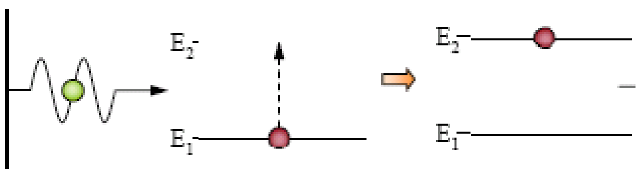
$$A_{21} = B_{21} \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}$$

$$\frac{B_{21} u_\nu}{A_{21}} = u_n \frac{c^3}{8\pi h\nu^3} = \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1} = \bar{n}_\nu$$

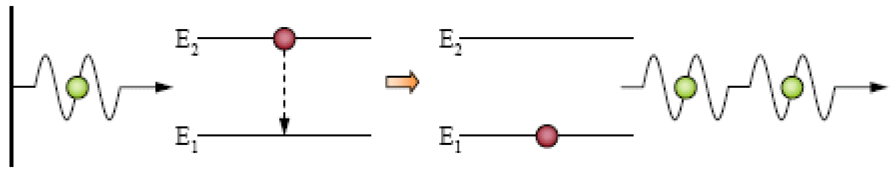
Con radiazione convenzionale (corpo nero) prevale sempre, in pratica, l'emissione spontanea

Occorrono sorgenti "non convenzionali" (laser!) per sfruttare emissione stimolata

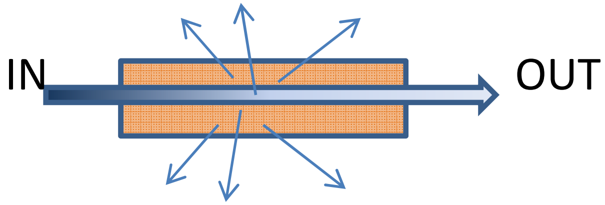
INTERAZIONE RADIAZIONE MATERIA



Assorbimento: “sottrae” un fotone



Emissione: “aggiunge” un fotone



In prima approx posso trascurare emissione spontanea, dato che i fotoni hanno direzione casuale ed escono dal cono di accettanza del rivelatore

Nel mezzo: $u_\nu = Fh\nu$
Con F densità di fotoni

$$\frac{dN_2}{dt} = -B_{21}Fh\nu N_2 + B_{12}Fh\nu N_1 - \cancel{A_{21}N_2}$$

$$\frac{dN_1}{dt} = B_{21}Fh\nu N_2 - B_{12}Fh\nu N_1 + \cancel{A_{21}N_2}$$

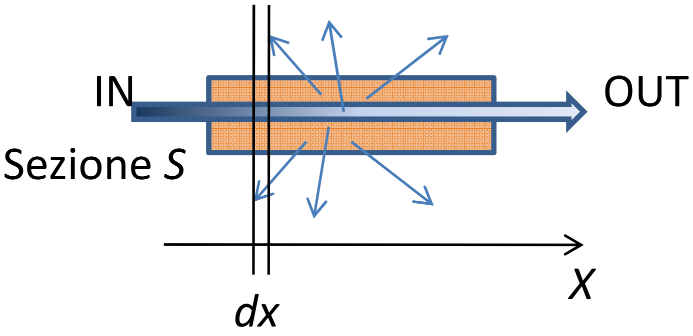
$$\frac{dF}{dt} = B_{21}Fh\nu N_2 - B_{12}Fh\nu N_1 + \cancel{A_{21}N_2}$$

Posto $\Delta N = (N_2 - N_1)$, se $B_{12} = B_{21}$ e trascurando em spontanea si ha

$$\frac{dF}{dt} = B_{21}Fh\nu(N_2 - N_1) \propto \Delta N$$

Comportamento del mezzo dipende da inversione di popolazione

COEFFICIENTE DI ASSORBIMENTO



La potenza all'interno del mezzo è: $P = Scu_\nu$
L'intensità all'interno del mezzo è: $I = P/S = cu_\nu$
La variazione di intensità sul volumetto Sdx è:

$$dI = \frac{dP}{S} = \frac{dU/dt}{dS} = \frac{h\nu \frac{dF}{dt} Sdx}{S} = (h\nu)^2 FB_{21}\Delta N dx = u_\nu h\nu B_{21}\Delta N dx =$$

$$= \frac{I}{c} h\nu B_{21}\Delta N dx = I\alpha dx \rightarrow I(x) = I_0 \exp(\alpha x)$$

Il segno di α (coefficiente di assorbimento) dipende da ΔN:
$\Delta N < 0$ → $\alpha < 0$ (assorbimento in condizioni ordinarie)
$\Delta N > 0$ → $\alpha > 0$ (amplificazione in condizioni di inversione di popolazione)

Mezzo materiale in interazione con la radiazione può produrre amplificazione della radiazione stessa se la sua popolazione è invertita

RILASSAMENTO

In condizioni stazionarie e assenza di radiazione (u_ν=0) il sistema deve tendere alla situazione di equilibrio:

$$N_1 \rightarrow N_1^0 \;;\; N_2 \rightarrow N_2^0 \quad \text{cioè } \Delta N \rightarrow \Delta N^0$$

Diversi meccanismi di rilassamento portano verso l'equilibrio:
- meccanismi radiativi (em spontanea per i livelli eccitati)
- meccanismi non radiativi (e.g., collisioni con perdita di energia)

Necessario introdurre nelle eq di bilancio termini per descrivere il rilassamento:

$dN_2/dt|_{relax} = -\gamma_2 (N_2 - N_2^0)$ $\qquad$ $dN_1/dt|_{relax} = -\gamma_1 (N_1 - N_1^0)$

con γ_j rate di rilassamento: per semplicità poniamo $\underline{\gamma_2 = \gamma_1}$

Equazioni di bilancio per sistema a due livelli con rilassamento

$$\frac{dN_2}{dt} = -B_{21} u_\nu N_2 + B_{12} u_\nu N_1 - \gamma (N_2 - N_2^0)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = B_{21} u_\nu N_2 - B_{12} u_\nu N_1 - \gamma (N_1 - N_1^0)$$

SOLUZIONE STAZIONARIA E SATURAZIONE

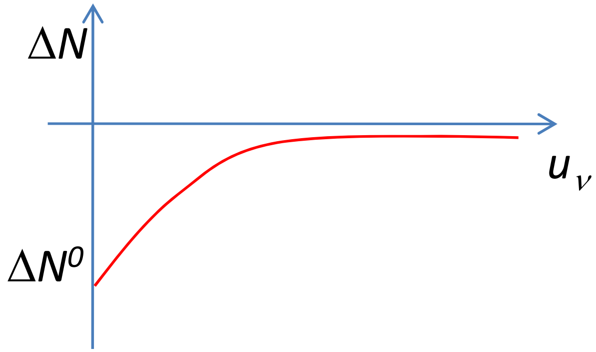
$$\frac{dN_2}{dt} = -B_{21}u_\nu N_2 + B_{12}u_\nu N_1 - \gamma(N_2 - N_2^0)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = B_{21}u_\nu N_2 - B_{12}u_\nu N_1 - \gamma(N_1 - N_1^0)$$

$$\frac{d(\Delta N)}{dt} = \frac{dN_2}{dt} - \frac{dN_1}{dt} = -2B_{21}u_\nu \Delta N - \gamma(\Delta N - \Delta N^0) = 0$$

Inversione di popolazione in condizioni stsazionarie

$$\Delta N = \frac{\gamma \Delta N^0}{2B_{21}u_\nu + \gamma}$$



Formulazione alternativa:

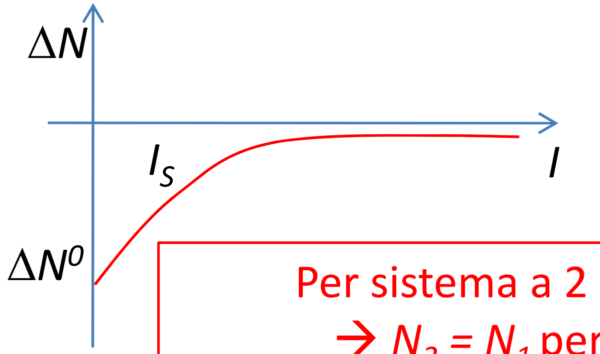
$$\Delta N = \frac{\Delta N^0}{\frac{2B_{21}u_\nu}{\gamma} + 1} = \frac{\Delta N^0}{\frac{I}{I_S} + 1}$$

con I_S intensità di saturazione (dipende solo dal sistema)

$$I_S = \frac{2B_{21}u_\nu}{\gamma}$$

ovvero, tenendo conto della "forma di riga" $g(\nu-\nu_0)$:

$$I_S = \frac{2B_{21}u_\nu g(\nu - \nu_0)}{\gamma}$$



Per sistema a 2 livelli si ottiene
→ $N_2 = N_1$ per $I >> I_S$, $\Delta N =$
⇩
Non può esserci inversione di popolazione

CONCLUSIONI

La MQ mostra che i sistemi di interesse per interazione materia hanno livelli discreti di energia

L’interazione radiazione materia è simile ad un urto (o frammentazione) fotone sistema, dando luogo a leggi di conservazione specifiche

Tre meccanismi in particolare: assorbimento (come nel caso classico), emissione stimolata, emissione spontanea

Emissione stimolata può originare amplificazione di radiazione se si verifica inversione di popolazione

Non si può ottenere inversione di popolazione per un sistema a 2 livelli in condizioni stazionarie

Ohi ohi: come si fa, allora?

FONTI

E. Arimondo, Struttura della Materia (ETS, 2005)
http://www.wikipedia.org
D.Batani, Seminario Sicurezza Laser (UniBicocca)
W. Demtroeder, Laser Spectroscopy, (Springer, 1991)