

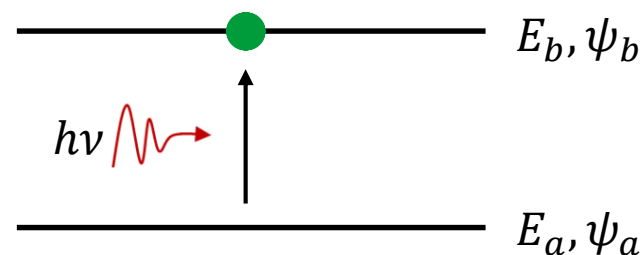
C4-2 光的吸收和发射

课程回顾

二能级系统和跃迁几率：

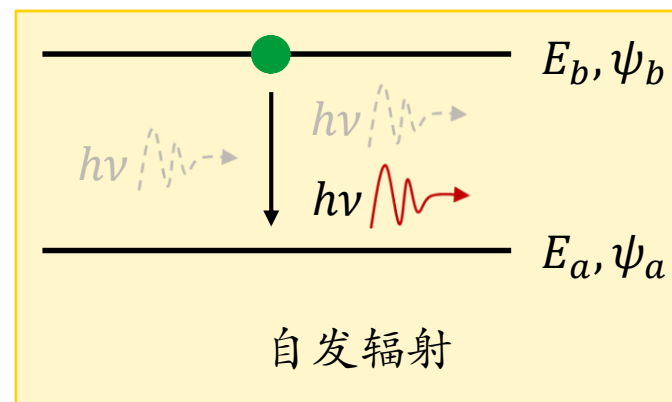
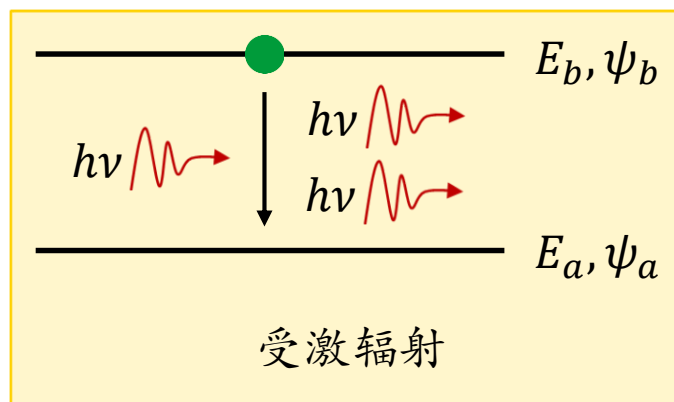
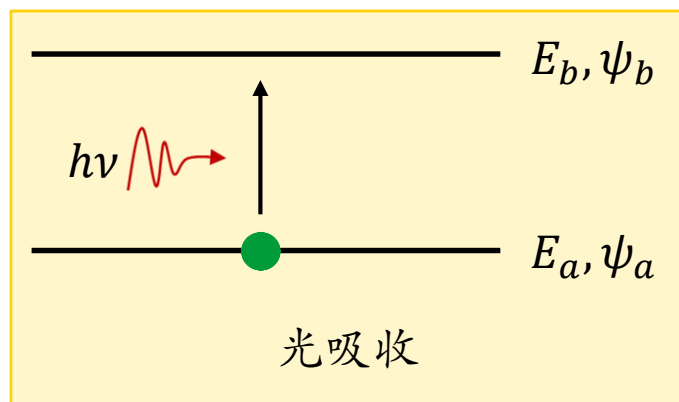
- 二能级系统的含时波函数是本征波函数乘以含时项的线性叠加 $\Psi(t) = c_a(t)\psi_a e^{iE_a t/\hbar} + c_b(t)\psi_b e^{iE_b t/\hbar}$ 。
- 将含时微扰项 $H'(t)$ 和含时波函数代入薛定谔方程可以得到含时系数的时间演化关系，从而得到各阶近似。
- 在周期性微扰（如电磁场）情况下，可以得到含时系数的确切表达式，即跃迁几率公式。

$$P_{a \rightarrow b}(t) \cong \frac{|V^{ba}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}$$



- 原子能级
- 自旋
- 势阱中的能级
- 导带/价带

物质和电磁场相互作用的三种过程



- 受激辐射与光吸收是相反的过程。光吸收是电子处于低能级，在外界入射光的作用下，电子从低能级向高能级跃迁，吸收光子。受激辐射是电子处于高能级，在外界入射光的作用下，电子从高能级向低能级跃迁，发射光子。
- 选定两个能级 $E_a < E_b$ 。则受激辐射从高能级到低能级的跃迁速率与光吸收从低能级到高能级的跃迁速率相等： $P_{b \rightarrow a} = P_{a \rightarrow b}$ 。
- 自发发射是由于真空零点能带来的“零点辐射”，导致电子从高能级跃迁至低能级，可以看作二能级系统在“虚光子”扰动下的受激辐射。

跃迁几率

考虑到，当体系从低能级吸收一个光子跃迁到高能级的几率为

$$P_{a \rightarrow b}(t) \cong \frac{|V^{ba}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

所以光子的吸收几率为

$$P_{a \rightarrow b}(t) \cong \left(\frac{|\langle p | \mathcal{E}_0 \rangle|}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

如果我们假设起始状态为 $c_a(0) = 0, c_b(0) = 1$ ，经过推导可以得到

$$P_{b \rightarrow a}(t) \cong \left(\frac{|\langle p | \mathcal{E}_0 \rangle|}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

所以无论电子在高能级还是低能级，在一个光子作用下变换能级的几率是一样的！

非相干扰动

电磁场能量密度 $U = \frac{1}{2}\varepsilon_0\mathcal{E}^2 + \frac{1}{2}\frac{B^2}{\mu_0}$ ，只考虑电场能量时 $u = \frac{1}{2}\varepsilon_0\mathcal{E}^2$ 。

$$P_{b \rightarrow a}(t) \cong \left(\frac{|p|\mathcal{E}_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} = \frac{2u}{\varepsilon_0\hbar^2} |p|^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

In many applications the system is exposed to electromagnetic waves at a whole range of frequencies; in that case $u \rightarrow \rho(\omega)d\omega$, where $\rho(\omega)$ is the energy density in the frequency range $d\omega$, and the net transition probability takes the form of an integral:

$$P_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{2}{\varepsilon_0\hbar^2} |p|^2 \int_0^\infty \rho(\omega) \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} d\omega$$

$\rho(\omega)$ 为能量密度，假设能量密度在频域均匀分布 $\rho(\omega) = \rho(\omega_0)$

$$P_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{2}{\varepsilon_0\hbar^2} |p|^2 \rho(\omega_0) \int_0^\infty \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} d\omega = \frac{\pi |p|^2}{\varepsilon_0\hbar^2} \rho(\omega_0) t$$

注意：跃迁几率和时间线性相关了

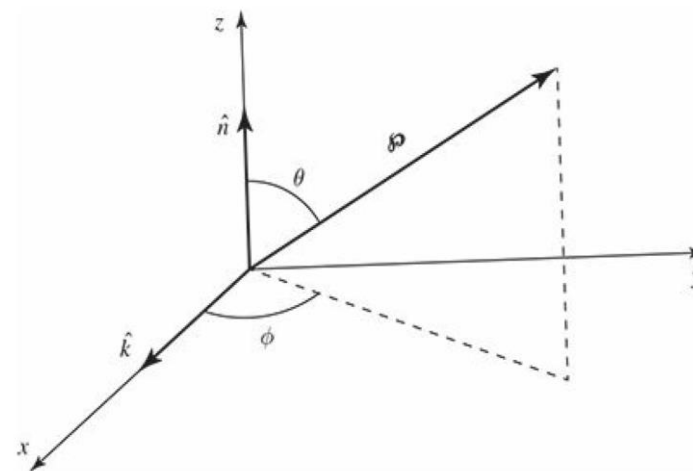
跃迁速率

既然跃迁几率和时间线性相关，我们可以定义跃迁速率

$$R_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{\pi}{\varepsilon_0 \hbar^2} |\boldsymbol{p}|^2 \rho(\omega_0)$$

考虑到电偶极矩在一般情况下为矢量形式，有

$$\boldsymbol{p} \equiv q \langle \psi_b | \boldsymbol{r} | \psi_a \rangle$$



跃迁速率中的电偶极矩项应该由偶极子在各个方向上的平均值决定，即 $\boldsymbol{p} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$ 的平均。

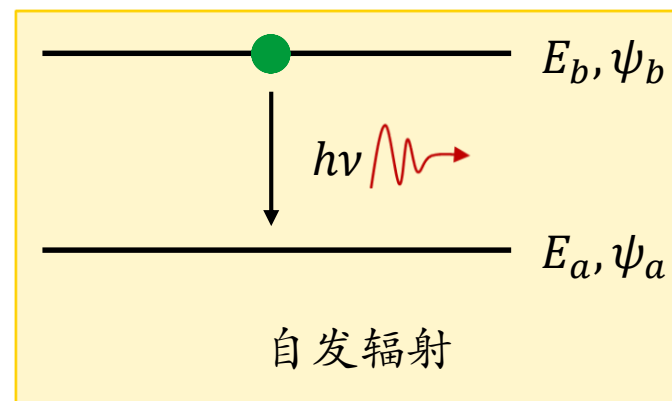
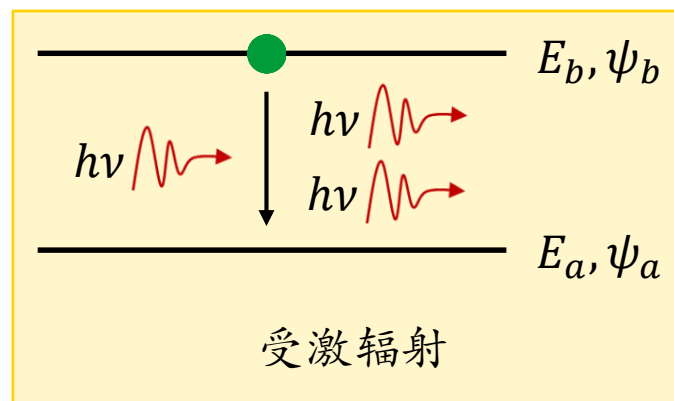
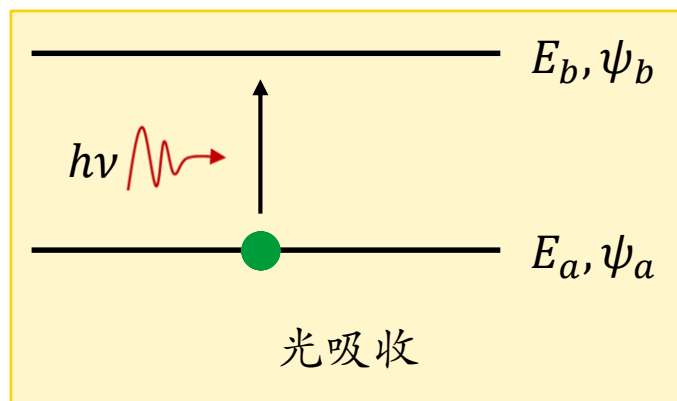
$$\boldsymbol{p} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} = p \cos \theta$$

$$|\boldsymbol{p} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}|^2 = \frac{1}{4\pi} \int |\boldsymbol{p}|^2 \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi = \frac{1}{3} |\boldsymbol{p}|^2$$

所以，平均的跃迁速率为

$$R_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{\pi}{3\varepsilon_0 \hbar^2} |\boldsymbol{p}|^2 \rho(\omega_0)$$

爱因斯坦系数



爱因斯坦从旧量子论出发，利用热力学平衡条件，导出了自发辐射系数 A ，受激辐射系数 B_{ba} 和吸收系数 B_{ab} 之间的关系。

A ：由高能态 E_b 自发向低能态 E_a 的跃迁速率，并辐射能量为 $\hbar\omega_0$ 的光子。

B_{ba} ：在入射光作用下，由高能态 E_b 向低能态 E_a 的跃迁速率，并辐射能量为 $\hbar\omega_0$ 的光子。

B_{ab} ：在入射光作用下，由低能态 E_a 向高能态 E_b 的跃迁速率，并吸收能量为 $\hbar\omega_0$ 的光子。

速率方程

假设有 N_a 个原子处于低能量状态 E_a , N_b 个原子处于高能量状态 E_b , 我们可以写下系统的速率方程:

$$\frac{dN_b}{dt} = -N_b A - N_b B_{ba} \rho(\omega_0) + N_a B_{ab} \rho(\omega_0)$$

假设系统处于热平衡状态, 所以等式的左边为0

$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{(N_a/N_b)B_{ab} - B_{ba}}$$

我们引入热平衡下的玻尔兹曼分布

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{e^{-E_a/k_B T}}{e^{-E_b/k_B T}} = e^{\hbar\omega_0/k_B T}$$

细致平衡 (detailed balance)

$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} B_{ab} - B_{ba}}$$

从黑体辐射公式出发

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} - 1}$$

爱因斯坦关系

所以爱因斯坦得到了下面这组爱因斯坦系数之间的关系

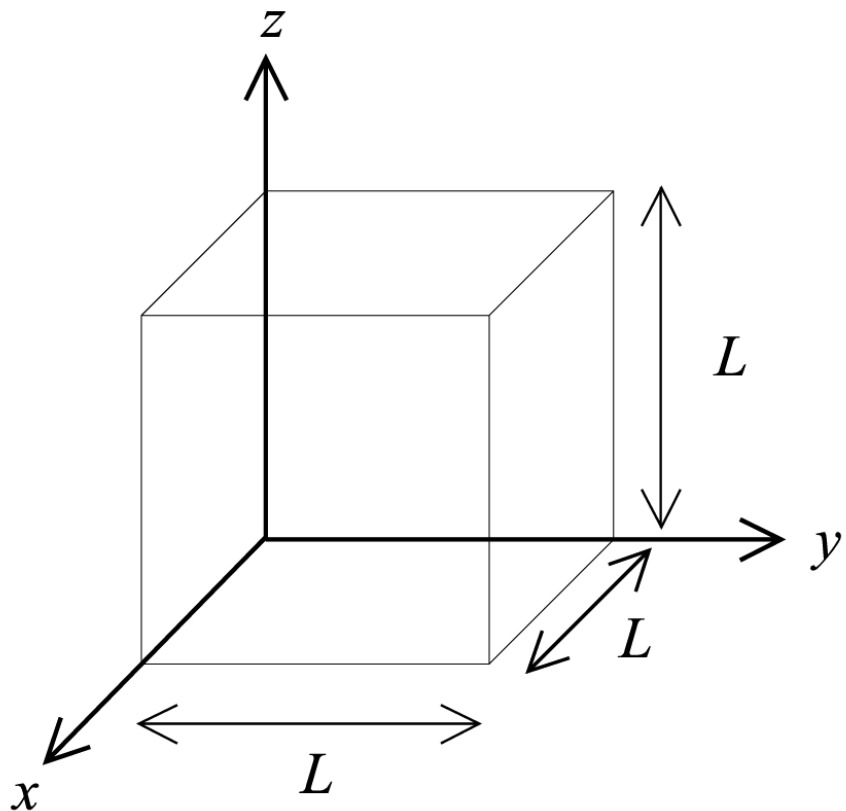
$$\begin{cases} B_{ab} = B_{ba} \\ A = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{ba} \end{cases}$$

由跃迁速率公式可知

$$R_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{\pi}{3\varepsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \rho(\omega_0)$$

$$\begin{cases} B_{ab} = \frac{\pi}{3\varepsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \\ A = \frac{\omega^3}{3\pi\varepsilon_0 \hbar c^3} |\mathcal{P}|^2 \end{cases}$$

光子态密度(1)



电磁波的电场强度满足波动方程

$$\nabla^2 \mathcal{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathcal{E} = 0$$

波动方程的通解

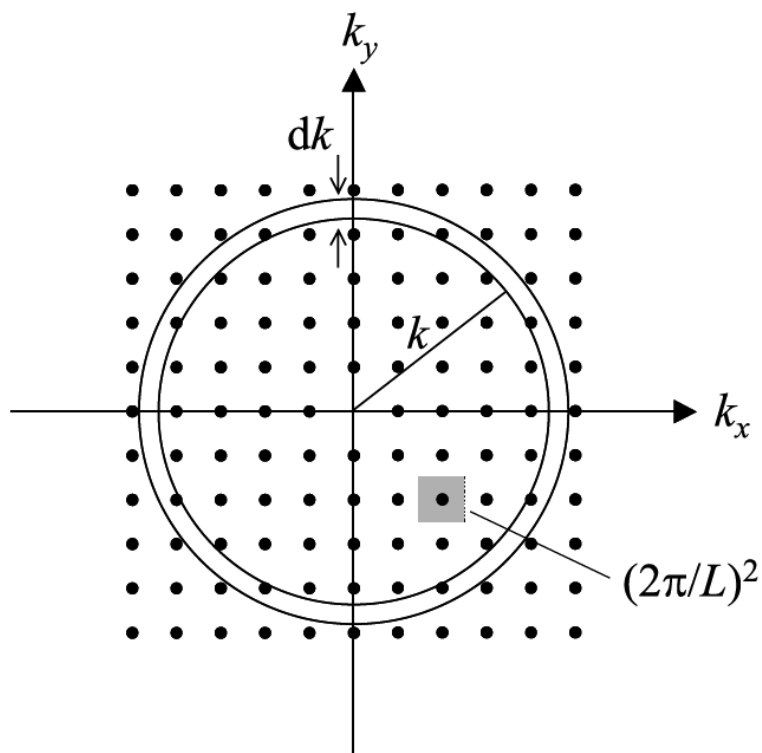
$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} = \sum_{k_x, k_y, k_z} \mathcal{E}_{\mathbf{k}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} e^{ik_z z} e^{-i\omega t}$$

假设光场被限制在一个边长为 L 的立方体中（请类比自由电子气模型）

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

k 空间中每个模式占据的体积为 $(2\pi/L)^3$ 。

光子态密度(2)



考虑到在 k 空间中 k 到 $k+dk$ 间的能态数目为

$$g(k)Vdk = \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi/L)^3} = V \frac{k^2}{2\pi^2} dk$$
$$\therefore g(k) = \frac{k^2}{2\pi^2}$$

考虑到每个 k 对应于两个偏振的光子

$$g(\omega)d\omega = 2g(k)dk$$

由于光子的色散关系 $\omega = ck$

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

自发辐射

对于能量密度

$$\rho(\omega) = g(\omega) \cdot \hbar\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$$

考虑到

$$R_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{\pi}{3\varepsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \rho(\omega_0)$$

对于自发辐射

$$R_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{\pi}{3\varepsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \frac{\hbar\omega_0^3}{\pi^2 c^3} = \frac{\omega_0^3}{3\pi\varepsilon_0 \hbar c^3} |\mathcal{P}|^2$$

对比爱因斯坦关系

$$\begin{cases} B_{ab} = B_{ba} \\ A = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{ba} \end{cases} \quad \begin{cases} B_{ab} = \frac{\pi}{3\varepsilon_0 \hbar^2} |\mathcal{P}|^2 \\ A = \frac{\omega^3}{3\pi\varepsilon_0 \hbar c^3} |\mathcal{P}|^2 \end{cases}$$

爱因斯坦系数A吸收了光子能量密度。

激发态的平均寿命

从自发辐射系数 A 可以计算处于激发态原子的寿命。原子处于激发态的平均时间称为该激发态的平均寿命 τ 。我们假设没有外加光场的扰动，这时速率方程简化为

$$\begin{aligned} dN_b &= -AN_b dt \\ \therefore N_b(t) &= N_b(0)e^{-At} \end{aligned}$$

所以激发态的平均寿命为

$$\tau = \frac{1}{A} \quad \longrightarrow \quad \tau = \frac{1}{A_1 + A_2 + A_3 + \dots}$$

其含义是 $t = \tau$ 时，激发态上的原子减少到 $t = 0$ 时的 $1/e$ 。

光吸收、受激辐射和自发辐射的跃迁几率（跃迁速率），其表达式都与 τ 有关，所以跃迁几率与未受微扰时的波函数有关，对不同种类的原子和不同态的电子，有不同的跃迁几率。

- 基于受激辐射的器件：半导体激光器、半导体光放大器、光纤激光器、光纤掺铒放大器
- 基于自发辐射的器件：发光二极管(LED)

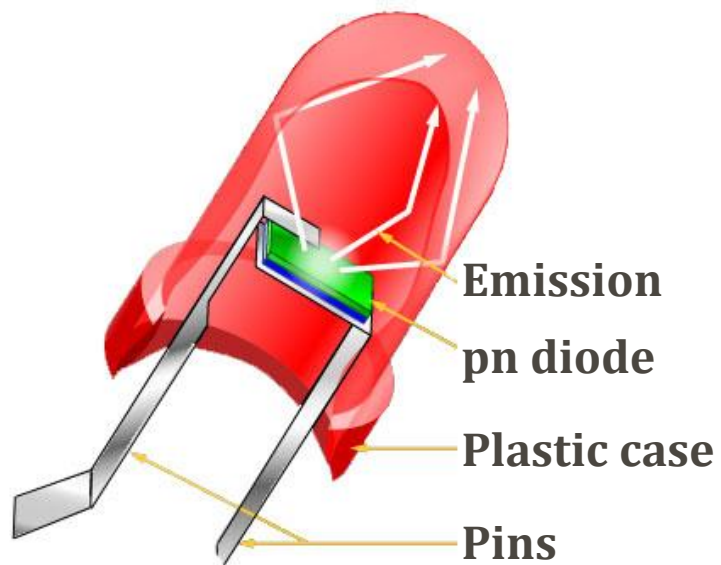
选择定则

- 对于确定的原子，并非任意两个量子态间都会发生跃迁，上一节的计算的光吸收、受激辐射与自发辐射的跃迁几率都与 $|\boldsymbol{p}|^2$ 有关。
- 而 $\boldsymbol{p} \equiv q\langle\psi_b|\boldsymbol{r}|\psi_a\rangle$ 又与 ψ_b, ψ_a 有关，如果 $|\boldsymbol{p}|^2 = 0$ ，则 ψ_b, ψ_a 间的跃迁几率为0，即不会发生跃迁。
- 跃迁的选择定则：两个量子态间跃迁几率不为0的条件。
- 以有心力场下的选择定则为例，对有心力场中的电子，两个状态间的跃迁选择定则是：当两个状态的角量子数 l, l' ，和磁量子数 m, m' 满足下列条件时，电子在这两个状态间的跃迁才有可能。

$$\Delta l = l' - l = \pm 1, \quad \Delta m = m' - m = 0, \pm 1$$

- 符合跃迁条件的跃迁称为允许跃迁，不符合跃迁条件的跃迁，不可能出现，称为禁止跃迁。

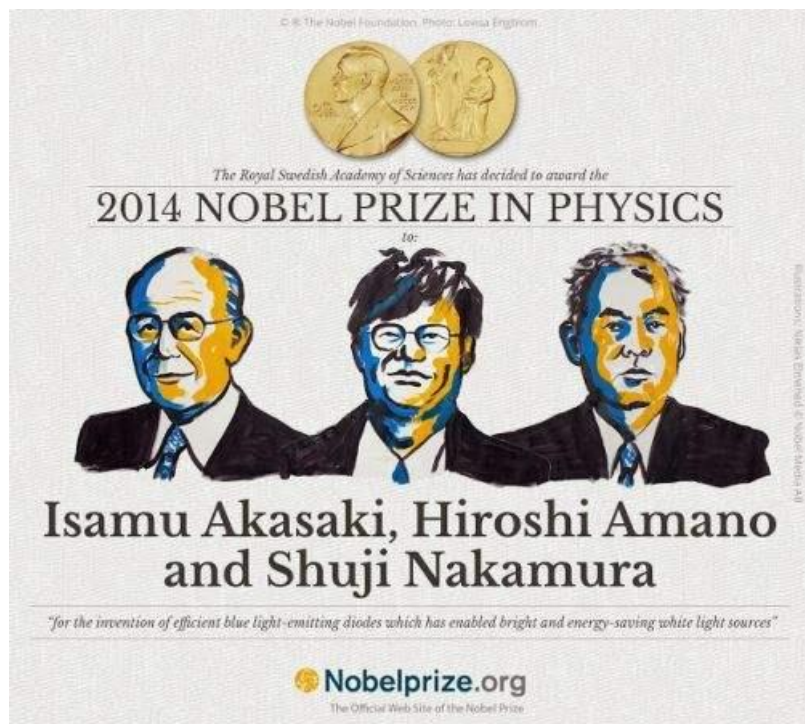
发光二极管(LED)



Light emitting diode (LED)

- 发光二极管，也称为LED，是半导体pn结在正向电流条件下发光的器件。发光二极管的原理基于半导体中的自发辐射现象。
- LED最早在1907年由Round在制作SiC衬底接触中报道。1962年基于直接带隙材料GaAs的LED被报道，为半导体激光器的发明奠定了基础。
- LED主要应用于显示和照明，以及中低数据率和中短距离的数据通信。

蓝光二极管



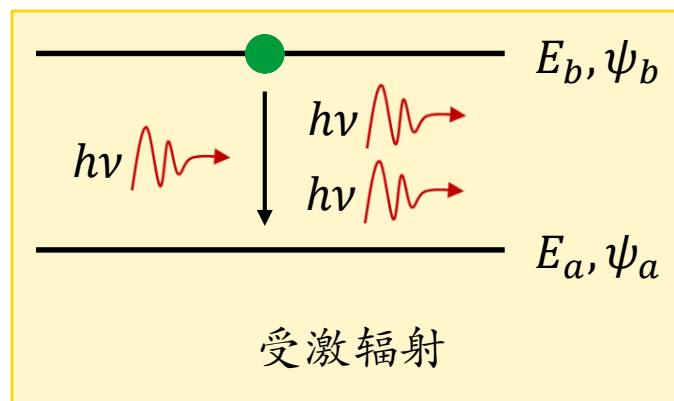
- 蓝光二极管，是能发出蓝光的发光二极管。基于蓝光LED的白光LED的发明，大幅提高了人类的照明效率。
- 1971年，雅克·彭哥芬（Jacques Pankove）和艾德·米勒（Ed Miller）提出掺锌（Zn）的氮化镓（GaN）有可能发出蓝光。尽管随后他们造出的第一个用氮化镓制成的LED是发绿光的。
- 1980年代初，日本名古屋大学赤崎勇带着学生天野浩重启了有关氮化镓的研究。1986年，他们成功制出了以前被认为不可能制造出的氮化镓晶体。
- 随后，日亚化学工业的员工中村修二注意到了赤崎勇师徒的研究成果。他顺着师徒的研究方向，最终在1993年制出了高亮度的蓝光LED。
- 2014年，蓝光LED的发明人中村修二与天野浩与赤崎勇获得了该年度的诺贝尔物理学奖。

受激辐射

- 在入射光的作用下发射光子，原子从高能级向低能级跃迁，称为受激辐射。受激辐射和光吸收是相反的过程。受激辐射也代表了光放大的过程。
- 非相干条件扰动下，受激发射的平均跃迁速率

$$R_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{\pi}{3\varepsilon_0 \hbar^2} |\boldsymbol{p}|^2 \rho(\omega_0)$$

其中 $\boldsymbol{p} \equiv q\langle\psi_b|\boldsymbol{r}|\psi_a\rangle$ 是偶极子算符， $\rho(\omega_0)$ 是光子能态密度。这里其实假设了 $H' = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}$ 。



受激辐射微波放大



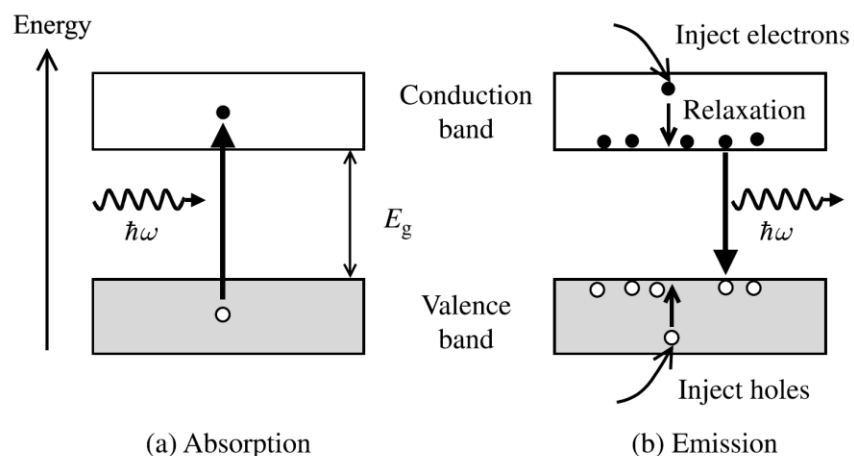
- 激光的概念起源于爱因斯坦对受激辐射过程的分析。
- 查尔斯·哈德·汤斯(Charles Hard Townes, 1915-2015)在第二次世界大战期间从事雷达投弹系统的设计工作。雷达技术涉及到微波的发射和接收，汤斯渴望有一种产生高强度微波的器件。
- 通常的器件只能产生波长较长的无线电波，若打算用这种器件来产生微波，器件结构的尺寸就必需极小。他设想通过热或电的方法，把能量泵入氨分子中，使它们处于“激发”状态。然后，再设想办法使这些受激的分子处于具有和氨分子的固有频率相同的微波束中。
- 1953年12月，汤斯终于制成了一个装置，产生了所需要的微波束。这个过程称为“受激辐射微波放大”，即MASER（Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation）。
- 汤斯被称为激光之父，获得了1964年诺贝尔物理学奖。

激光的发明



- 西奥多·哈罗德·梅曼(Theodore Harold Maiman, 1927-2007)制造了世界上第一台激光器。即LASER(Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation)。
- 受到微波激射器理论的启发，当时就职于休斯飞行器公司的梅曼决定设计能发射可见光的激光器。但他的主管反对这项研究，于是梅曼从政府那里获得了5万美元的研究预算。他的聚光器使用人造的红宝石作为工作媒质。1960年5月16日，梅曼利用这台设备产生出了脉冲相干光。
- “梅曼设计”引起了科学界的震惊和怀疑，因为科学家们一直在注视和期待着氦氖激光器，但梅曼是第一个将激光引入实用领域的科学家。
- 部分地由于争议，梅曼并没有获得诺贝尔奖，但他的发明无疑是极具开创性的。5月16日也被定为了“国际光日”。

半导体中的跃迁过程



- 在半导体中，简并的原子能级会分裂成能带，因此半导体中的载流子跃迁过程就是载流子在能带之间迁移的过程。
- 在光吸收过程中，价带中的电子吸收一个光子，跃迁至导带，在价带中留下一个空穴。在自发辐射过程中，导带中的电子放出一个光子，与价带中的一个空穴复合。
- 由于注入的电子可以非常迅速地弛豫到导带的底部，所以一般情况下，发射的光子频率接近与带隙所对应的频率，即 $\nu \approx E_g/h$ 。

半导体激光器



- 半导体激光器的发明更富争议性。1962年，几乎同时有四个研究小组观察到了半导体材料中的激射现象。一般认为通用电气公司的罗伯特·霍尔(Robert Hall)在半导体激光器的竞争中享有优先权。
- 初期的半导体激光器是同质结型激光器。依赖于同一种材料制作的 pn 结二极管组成了只能以脉冲形式在低温条件下工作的半导体激光器。
- 最早的室温条件下工作的半导体激光器是单异质结激光器，室温阈值极高，不具有实用性。
- 1970年，若列斯·伊万诺维奇·阿尔费罗夫 (Zhores Ivanovich Alferov)利用双异质结设计实现了第一个低阈值工作的室温半导体激光器。美国的Morton Panish和Izuo Hayashi几乎在同时获得了类似的结果。一般认为阿尔费罗夫是第一个实用化半导体激光器的发明者，他因此获得了2000年的诺贝尔物理学奖。

激光的产生

- 光的受激辐射有广泛应用，像激光器、光放大器、超辐射发光管等有源器件都是基于受激辐射原理工作的。
- 激光是1960年代发展起来的技术，与普通光线比，激光具有很好的空间相干性、单色性和良好的方向性，能量密度大，有着广泛应用。
- 受激辐射的特点：受激辐射产生的光子与原来光子的状态完全相同（包括相位、能量、传播方向等）。如果体系内有大量原子处于激发态，则某一原子自发辐射的光子，可以促使处于激发态的其他原子发生受激辐射并发出光子，这一过程将以连锁反应的方式在很短的时间内完成。
- 产生上述放大过程的条件是要有大量的原子处于激发态，但通常在平衡态的体系下，处于基态的原子比较多，因此要有粒子数反转的过程。
- 产生激光的三个条件：**泵浦源、谐振腔、增益介质**。

参考文献

- 受激辐射和自发辐射的内容主要参考：
 - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第11.2-11.4节。
- 激光器和发光二极管的内容主要参考：
 - Mark Fox, Quntum Optics – An Introduction, Oxford University Press (2006). 第4.2, 4.7小节
 - 施敏, 半导体器件物理 (第三版), 西安交通大学出版社。第十二章。
 - Coldren LA, Corzine SW, Masanovic MI, Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits (2nd Edition), John Wiley & Sons (2012). 第一章。
- 光子态密度的内容主要参考
 - Mark Fox, Quntum Optics – An Introduction, Oxford University Press (2006). 附录C。