CHUYỂN DỜI BỨC XẠ TRONG NGUYÊN TỬ

1 Density of states

$$\vec{\varepsilon}(\vec{r},t) = \sum_k \vec{\varepsilon}_{\vec{k}}.e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)}$$

$\left(\omega = |\vec{k}|.c \text{ do } \frac{\omega}{|\vec{k}|} = \frac{\frac{2\pi}{T}}{\frac{2\pi}{\lambda}} = \frac{\lambda}{T} = \frac{cT}{T} = c\right)$

Trong không gian gian tự do, có nguồn $\rightarrow div\vec{\varepsilon} = \vec{\nabla}.\vec{\varepsilon} = i\vec{k}\vec{\varepsilon}_k.e^{i(\vec{k}\vec{r}-\omega t)} = 0$
$\rightarrow \vec{\varepsilon}_k \perp \vec{k} \left(\vec{k}.\vec{\varepsilon}_k = 0\right)$
$\Rightarrow$ Sóng ngang $\rightarrow$ Điều kiện này cho phép có 2 phân cực sóng độc lập cho mỗi $\vec{k}$.

Với $k_xL = 2\pi n_x$; $k_yL = 2\pi n_y$; $k_zL = 2\pi n_z$; $n_x, n_y, n_z \in Z$
$\Rightarrow \vec{k} = (k_x,k_y,k_z) = \frac{2\pi}{L}(n_x,n_y,n_z) \Rightarrow$ mỗi bộ số nguyên này tương đương 2 mode của trường điện từ (2 phân cực)

Số trạng thái k được phép trong miền k tới k + dk:

$$g^{2D}(k)dk = \frac{d^2k}{(\frac{2\pi}{L})^2} = \frac{2\pi k}{(\frac{2\pi}{L})^2}dk = L^2\frac{k}{2\pi}dk \rightarrow g^{2D}(k) = \frac{L^2k}{2\pi}$$
$$g^{3D}(k)dk = \frac{d^3k}{(\frac{2\pi}{L})^3} = \frac{4\pi k^2}{(\frac{2\pi}{L})^3}dk = L^3\frac{k^2}{2\pi^2}dk \rightarrow g^{3D}(k) = \frac{L^3k^2}{2\pi^2}$$
$$\Rightarrow g(k) \equiv \frac{g^{3D}(k)}{V} = \frac{k^2}{2\pi^2}$$

Do có 2 phân cực, photon cho mỗi trạng thái $\vec{k}$

$$\Rightarrow g(\omega)d\omega = 2g(k)dk = g(E)dE$$
$$\Rightarrow g(\omega)d\omega = 2\frac{k^2}{2\pi^2}dk \quad (\omega = ck \rightarrow d\omega = cdk)$$
$$= \frac{\omega^2}{\pi^2c^2} = g(E)dE$$

2 Selection rules

Phần tử ma trận chuyển dời lưỡng cực điện:

$$e\langle n'l'm'|\hat{\vec{r}}|nlm\rangle = e\left[\langle n'l'm'|\hat{\vec{x}}|nlm\rangle + \langle n'l'm'|\hat{\vec{y}}|nlm\rangle + \langle n'l'm'|\hat{\vec{z}}|nlm\rangle\right]$$

1. Đối với m, m'

   Ta có: $[\hat{L}_z,\hat{x}] = i\hbar\hat{y} \quad [\hat{L}_z,\hat{y}] = -i\hbar\hat{x} \quad [\hat{L}_z,\hat{x}] = 0$

$$\langle n'l'm'|[\hat{L}_z,\hat{z}]|nlm\rangle = 0$$
$$\Rightarrow \langle n'l'm'|\hat{L}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{L}_z|nlm\rangle = 0$$
$$\Rightarrow (m'-m)\hbar\langle n'l'm'|\hat{z}|nlm\rangle = 0$$

$\rightarrow m' = m$ do $\langle n'l'm'|\hat{z}|nlm\rangle \neq 0$

$$\langle n'l'm'|[\hat{L}_z, \hat{x}]|nlm\rangle = (m'-m)\hbar \langle n'l'm'|\hat{x}|nlm\rangle = i\hbar \langle n'l'm'|\hat{y}|nlm\rangle$$
$$\langle n'l'm'|[\hat{L}_z, \hat{y}]|nlm\rangle = (m'-m)\hbar \langle n'l'm'|\hat{y}|nlm\rangle = -i\hbar \langle n'l'm'|\hat{z}|nlm\rangle$$
$$\rightarrow [(m'-m)^2 - 1] = 0$$

Vậy ta có $\Delta m = \pm 1$ hoặc 0

2. Đối với l, l'

Ta có: $\left[\hat{\vec{L}}^2, [\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{r}}]\right] = 2\hbar^2 \left(\hat{\vec{r}}\hat{\vec{L}}^2 + \hat{\vec{L}}^2\hat{\vec{r}}\right)$

$$\begin{aligned}
\langle n'l'm'| \left[\hat{\vec{L}}^2, [\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{r}}]\right] |nlm\rangle &= 2\hbar^2 \langle n'l'm'|\hat{\vec{L}}^2\hat{\vec{r}} + \hat{\vec{r}}\hat{\vec{L}}^2|nlm\rangle \\
&= 2\hbar^4 \left[l'(l'+1) + l(l+1)\right] \langle n'l'm'|\hat{\vec{r}}|nlm\rangle \\
\text{mà } \langle n'l'm'| \left[\hat{\vec{L}}^2, [\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{r}}]\right] |nlm\rangle &= \langle n'l'm'| \left[\hat{\vec{L}}^2[\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{r}}] - [\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{r}}]\hat{\vec{L}}^2\right] |nlm\rangle \\
&= \hbar^2 \left[l'(l'+1) - l(l+1)\right] \langle n'l'm'|[\hat{\vec{L}}^2, \hat{\vec{r}}]|nlm\rangle \\
&= \hbar^2 \left[l'(l'+1) - l(l+1)\right] \langle n'l'm'|\hat{\vec{L}}^2\hat{\vec{r}} - \hat{\vec{r}}\hat{\vec{L}}^2|nlm\rangle \\
&= \hbar^4 \left[l'(l'+1) - l(l+1)\right]^2 \langle n'l'm'|\hat{\vec{r}}|nlm\rangle
\end{aligned}$$

$$\rightarrow 2\left[l'(l'+1) + l(l+1)\right] - \left[l'(l'+1) - l(l+1)\right]^2 = 0$$
$$\Rightarrow l' = l = 0 \text{ hoặc } \Delta l = \pm 1$$

Quy tắc cho Δm có thể được hiểu từ thực tế các photon phân cực tròn σ^+ và σ^- mang động lượng góc $L_z = \hbar$ và $-\hbar$ $\rightarrow$ số lượng m phải thay đổi 1 đơn vị để bảo toàn động lượng góc khi tương tác với photon phân cực tròn. Còn với photon phân cực thẳng theo trục z thì photon không mang thành phần động lượng góc dọc trục z $\Rightarrow$ Không có sự thay đổi m: $\Delta m = 0$. Còn photon phân cực thẳng dọc theo trục x hoặc y có thể được coi là sự kết hợp của 2 photon phân cực tròn σ^+ và σ^- với tỉ lệ bằng nhau $\rightarrow$ $\Delta m = \pm 1$.
Quy tắc chọn lọc spin: photon không tương tác với spin của e $\rightarrow$ s không bao giờ thay đổi: $\Delta s = 0$

Tổng hợp quy tắc chọn lọc lưỡng cực điện cho 1e đơn trong hệ hydro:

Số lượng tử	Quy tắc chọn lựa	Ghi chú
l	$\Delta l = \pm 1$	
m	$\Delta m = 1$	Phân cực tròn G^+
m	$\Delta m = -1$	Phân cực tròn G^-
m	$\Delta m = 0$	Phân cực tuyến tính trục z
m	$\Delta m = \pm 1$	Phân cực tuyến tính trục x, y
s	$\Delta s = 0$	
m_s	$\Delta m_s = 0$	

Tổng quát cho nguyên tử đa electron

- $\Delta l = \pm 1$
- $\Delta L = 0, \pm 1 \quad (L = 0 \rightarrow 0$ không cho phép)
- $\Delta J = 0, \pm 1 \quad (J = 0 \rightarrow 0$ không cho phép)
- $\Delta S = 0$

Quy tắc chuyển dời bậc cao hơn

- Thông thường, trong chuyển đổi lượng cực điện, chỉ có những trạng thái chẵn lẻ khác nhau mới chuyển đổi.

- Chuyển dời bậc cao: lượng cực từ, tứ cực điện, v.v... tuân theo quy tắc trên cho phép chuyển đổi giữa các trạng thái cùng chẵn (lẻ).

Ý nghĩa: Nếu một nguyên tử ở trạng thái kích thích mà không thể phân rã qua các chuyển đổi lượng cực điện, nó vẫn chuyển về trạng thái cơ bản thông qua các chuyển dời bậc cao hơn (xác suất thấp hơn).

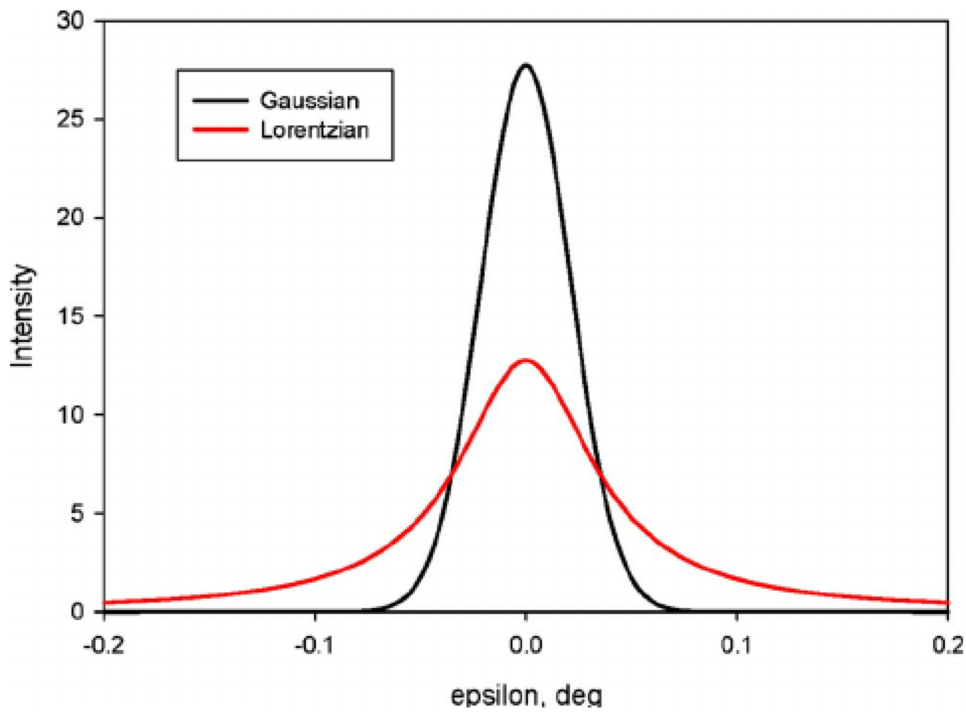
Trạng thái bán bền (Metastable state)

Trong các trường hợp đặc biệt như J = 0 → Không bị cấm (chuyển dời lưỡng cực điện) → Nếu một trạng thái kích thích có J = 0 không thể trở về trạng thái cơ bản J = 0 qua quá trình phát xạ photon đơn thông thường ⇒ Trạng thái bán bền

Nguyên tử ở trạng thái đó phải khử kích thích thông qua: truyền năng lượng cho nguyên tử khác qua va chạm, phát xạ đa photon,...

3 Bề rộng - dáng điệu phổ

Thực hiện đo 1 vạch nhưng bản chất không phải là vạch, mà là một phổ, khi ta hóng to vạch đó ra ta sẽ thấy nó là một phổ có vị trí đỉnh (sáng nhất, mạnh nhất) ứng với giá trị của vạch. Có 2 loại dáng điệu phổ (từ thực nghiệm)



Có 3 cơ chế ảnh hưởng đến bề rộng phổ:

1) Life-time broadening (1 mình)

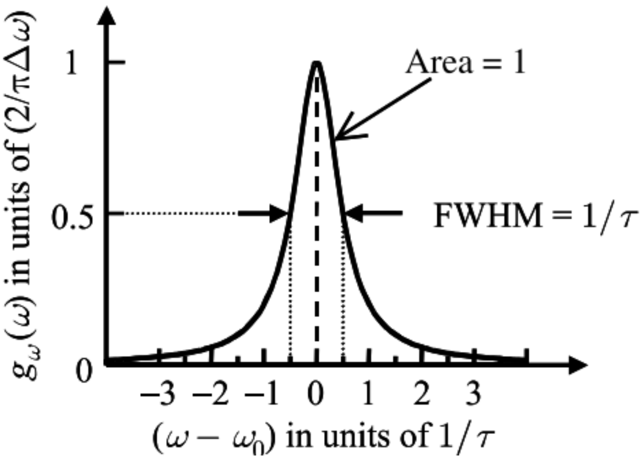
   - Gắn với tự nhiên (gắn với phát xạ tự phát rất nhiều)

   - Mỗi vật đều có thời gian sống của nó, tùy thuộc vào $\tau = \frac{1}{A_{21}}$

- Liên hệ với năng lương bức xạ (sự mở rộng phổ) qua nguyên lý bất định Heisenberg:

$$\Delta E.\Delta t \geq \hbar$$
$$\text{mà } \Delta E = \hbar \Delta\omega, \quad \Delta t = \tau$$
$$\rightarrow \Delta\omega \geq \frac{1}{\tau}$$

$$g_\omega(\omega) = \frac{\Delta\omega}{2\pi} \frac{1}{(\omega-\omega_0)^2 + (\frac{\Delta\omega}{2})^2}$$



2) Collissional broading (do va chạm)

- Các phân tử va đậm với nhau, với thành hộp: $\rightarrow$ Làm ảnh hưởng thời gian sống τ_{col}, năng lượn,...

- Xét atom hệ khí, theo quy tắc thống kê:

$$\tau_{col} \sim \frac{1}{\sigma_s p} \left(\frac{\pi m K_b T}{8}\right)^{\frac{1}{2}}$$

trong đó: σ_s: tiết diện va chạm; p: áp suất

$\rightarrow$ Áp suất cao $\rightarrow$ Va chạm nhiều $\rightarrow$ τ giảm $\Rightarrow$ Còn gọi là Pressure broading

- $\tau_{col} \ll \tau \rightarrow$ Độ rộng phổ lớn hơn rất nhiều so với trường hợp lifetime boarding $\rightarrow$ Giảm P bằng đèn áp suất thấp để khảo sát phổ.

3) Doppler broading

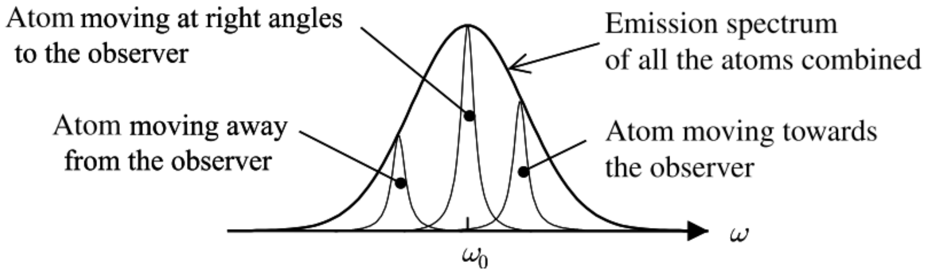
- Do sự dịch chuyển của atom với người (máy) quan sát.

- Nếu một nguyên tử có thành phần v_x hướng về người quan sát với tần số ω_0 thì tần số quan sát được:

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{v_x}{c}\right)$$

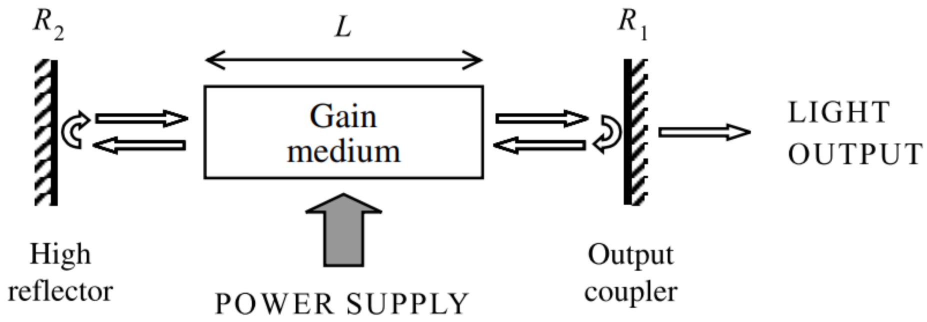
- Số hạt di chuyển với vận tốc trong khoảng $(v_x, v_x + dv_x)$ cho bởi cơ học thống kê:

$$N(v_x) = N_0 \left(\frac{2K_B T}{\pi m}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-m v_x^2}{2K_B T}\right)$$
$$(FWHM) \rightarrow \Delta\omega_D = 2\omega_0 \left(\frac{2\ln 2 K_B T}{mc^2}\right) = \frac{4\pi}{\lambda} \left(\frac{2\ln 2 K_B T}{m}\right)$$



4 Laser

4.1 Cấu tạo



Hình 1: Cấu tạo Laser

Laser gồm: môi trường khuếch đại (gain medium) và hai gương phản xạ (hệ số phản xạ R_1, R_2). Để laser có thể hoạt động liên tục (dao động), môi trường khuếch đại phải cung cấp đủ sự khuếch đại để bù đắp cho những tổn thất năng lượng (do hấp thụ, tán xạ, hoặc truyền ra ngoài) xảy ra khi ánh sáng di chuyển qua lại trong khoang cộng hưởng của laser (Ánh sáng trong laser di chuyển qua lại giữa hai gương , mỗi lần như vậy gọi là một "chu kỳ" hoặc "một vòng đi").

Tia laser thoát ra ngoài thông qua bộ ghép đầu ra, có lớp phủ truyền dẫn một phần, là một lớp phủ quang học được thiết kế để cho phép một phần ánh sáng đi qua, trong khi phần còn lại bị phản xạ lại. Lớp phủ này giúp kiểm soát công suất của chùm tia laser phát ra, ổn định sự dao động và duy trì hiệu suất của hệ thống laser. Thông thường, một trong các gương trong buồng cộng hưởng laser sẽ có lớp phủ truyền dẫn một phần, được gọi là "output coupler", cho phép một phần năng lượng của chùm tia laser thoát ra ngoài để sử dụng, trong khi phần còn lại được giữ lại trong khoang để tiếp tục khuếch đại.

4.2 Sự khuếch đại ánh sáng

Định nghĩa hệ số khuếch đại $\gamma(\omega)$:

$$\frac{dI}{dz} = \gamma(\omega)I(z)$$

trong đó I là cường độ sáng, ω là tần số góc của ánh sáng, và z là hướng lan truyền của chùm tia. Từ phương trình (1):

$$I = I_0 e^{\gamma z}$$

$\rightarrow$ Cường độ sáng tăng theo hàm e mũ trong môi trường khuếch đại trong điều kiện không có hiện tượng bão hòa khuếch đại

Xét trường hợp chùm ánh sáng gần với tần số cộng hưởng của một nguyên tử chuyển tiếp có tần số góc ω_0. Chùm sáng này sẽ kích hoạt cả quá trình hấp thụ và phát xạ cảm ứng. Để có thể xảy ra khuếch đại, thì tốc độ phát xạ kích thích phải lớn hơn tốc độ hấp thụ để số lượng photon trong chùm tăng lên khi nó truyền qua môi trường khuếch đại:

$$B_{21}^{\omega} N_2 u(\omega) > B_{12}^{\omega} N_1 u(\omega) \to N_2 > \frac{g_2}{g_1} N_1$$

Trong trạng thái cân bằng nhiệt, tỉ lệ giữa N_2 và N_1 được cho bởi công thức Boltzmann:

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{\frac{E_2 - E_1}{K_B T}} = e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}}$$

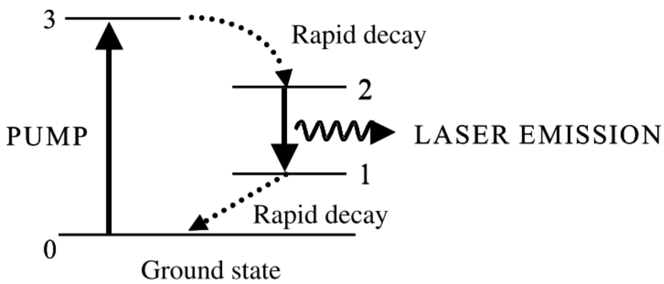
thì điều kiện trên sẽ không có thể được thỏa mãn, và cường độ ánh sáng sẽ suy giảm khi truyền qua môi trường vì tốc độ hấp thụ kích thích vượt quá tốc độ phát xạ cảm ứng. Từ đó phương trình để thỏa mãn điều kiền trên chỉ khi điều kiện không cân bằng, được gọi là population inversion. Điều này có thể quan sát được bằng cách "bơm" năng lượng vào buồng cộng hưởng để kích thích số lượng lớn nguyên tử đạt được trạng thái kích thích. Mật độ population inversion là:

$$\Delta N = N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1$$

Hệ số khuếch đại đạt được với mật độ population inversion ΔN:

$$\gamma(\omega) = \frac{\lambda^2}{4n^2\tau} \Delta N g_\omega(\omega)$$

trong đó λ là bước sóng trong chân không, n là chiết suất của môi trường khuếch đại, τ là thời gian sống phóng xạ của mức trên, và $g_\omega(\omega)$ là hàm phân bố phổ. $\Rightarrow$ Hệ số khuếch đại tỷ lệ trực tiếp với population inversion và cũng tỷ lệ với xác suất chuyển tiếp thông qua $\frac{1}{\tau} \equiv A_{21}$.



Hình 2: Population inversion mechanism in a four-level laser

Ví dụ để tạo ra population inversion: Các nguyên tử được bơm từ trạng thái cơ bản lên trạng thái kích thích 3 (có thể là quang học như là đèn flash hoặc một laser khác, hoặc điện), nguyên tử sau đó nhanh chóng chuyển xuống trạng trái kích thích 2 $\to$ tạo ra population inversion so với trạng thái kích thích 1.

Trong điều kiện hoạt động bình thường, population inversion sẽ tỉ lệ với tốc độ bơm R, và R tỉ lệ với công suất được cung cấp từ nguồn bơm. Sự thay đổi độ khuếch đại trong môi trường khuếch đại sẽ tăng tuyến tính theo tốc độ bơm năng lượng ở giai đoạn đầu, khi đạt đến một mức độ khuếch đại đủ lớn để khởi động hoạt động của laser, trạng thái này được gọi là ngưỡng laser. hi laser hoạt động ở ngưỡng, độ khuếch đại và population inversion sẽ bị "kẹp" tại giá trị ngưỡng đó. $\to$ Dù có tăng thêm năng lượng bơm vào, độ khuếch đại và population inversion sẽ không tăng cao hơn nữa. Mọi năng lượng bơm thêm vào sẽ chuyển hóa thành ánh sáng phát ra từ laser, thay vì làm tăng thêm độ khuếch đại bên trong khoang.

Giá trị của hệ số khuếch đại tại ngưỡng laser có thể được tính bằng cách xem xét lượng khuếch đại cần thiết để duy trì dao động laser. Tuy nhiên, việc tính toán này khá phức tạp, vì các yếu tố như sự thay đổi của population inversion trong môi trường khuếch đại và hiện tượng bão hòa khuếch đại xảy ra khi mật độ photon trong khoang tăng lên.

Trong điều kiện dao động ổn định, sự tăng cường độ do khuếch đại phải cân bằng chính xác với các tổn hao do phản xạ không hoàn hảo của các gương ở hai đầu và bất kỳ tổn hao nào khác trong khoang. Khi theo dõi chùm tia qua một chu kỳ hoàn chỉnh của khoang (như trong Hình 4.8), ta có thể viết điều kiện dao động như sau:

$$R_1 R_2 \xi e^{2\gamma L} = 1,$$

trong đó L là chiều dài của môi trường khuếch đại và ξ là hệ số tính đến các tổn hao khác như tán xạ và hấp thụ trong quang học. Số mũ 2 trong hàm mũ phản ánh rằng ánh sáng đi qua môi trường khuếch đại hai lần trong một chu kỳ hoàn chỉnh.

Điều kiện dao động trong phương trình 4.44 có thể được viết lại như sau:

$$\gamma = -\frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2) - \frac{1}{2L} \ln \xi.$$

Phương trình này xác định hệ số khuếch đại ngưỡng γ_{th} cần thiết để làm cho laser dao động. Hệ số này sẽ đạt được với một tốc độ bơm R_{th}. Với các tốc độ bơm lớn hơn R_{th}, hệ số khuếch đại không thể tăng thêm vì đã bị giới hạn bởi điều kiện dao động. Năng lượng bổ sung từ nguồn bơm do đó được chuyển thành công suất đầu ra của laser, tăng tuyến tính với $(R - R_{\text{th}})$ khi $R > R_{\text{th}}$ trong mô hình đơn giản này, như được minh họa trong Hình 4.10.

Trong một laser lý tưởng với tổn hao thấp và gương phản xạ cao gần như có độ phản xạ hoàn hảo, giá trị của R_{th} được xác định bởi hệ số truyền của bộ ghép đầu ra. Một giá trị thấp của $(1 - R_1)$ sẽ cho ngưỡng thấp, nhưng cũng tạo ra công suất đầu ra thấp, vì chỉ một phần rất nhỏ năng lượng dao động bên trong khoang có thể thoát ra. Ngược lại, giá trị $(1 - R_1)$ cao hơn sẽ tăng ngưỡng, nhưng cũng tăng hiệu suất ghép đầu ra, do đó có thể đạt được công suất cao hơn. Trên thực tế, giá trị của bộ ghép đầu ra thường được chọn dựa trên lượng công suất sẵn có từ nguồn bơm.

4.3 Tính chất của laser

Ánh sáng laser có nhiều đặc điểm hấp dẫn và có thể được điều chỉnh để đáp ứng nhu cầu của các thí nghiệm hoặc ứng dụng cụ thể. Các tính chất của ánh sáng laser chủ yếu được xác định bởi:

- Môi trường khuếch đại (gain medium) được sử dụng: Chủ yếu quyết định bước sóng mà laser tạo ra. Nó cũng ảnh hưởng đến việc laser có thể hoạt động liên tục hay chỉ ở dạng xung.
- Thiết kế khoang cộng hưởng (cavity design): Quyết định cấu trúc mode ngang (transverse mode) và mode dọc (longitudinal mode).
- Chế độ hoạt động (mode of operation): Ảnh hưởng đến độ rộng phổ (linewidth) và độ rộng xung (pulse width) phù hợp với mục đích sử dụng.

Hai đặc điểm chung của tất cả các loại laser là:

- Tính định hướng (directionality) của chùm tia
- Độ sáng quang phổ (spectral brightness)

So sánh với các nguồn sáng thông thường

Những đặc điểm này rõ ràng hơn khi so sánh với các nguồn sáng như đèn phát xạ nhiệt (black-body) hoặc đèn phóng điện nguyên tử (atomic-discharge lamps). Cụ thể:

- Các loại đèn này phát sáng theo mọi hướng, dẫn đến cường độ ánh sáng theo một hướng bất kỳ là rất nhỏ.
- Trong trường hợp nguồn phát xạ nhiệt, năng lượng được phân bố trên một phổ rất rộng.

Ví dụ minh họa: Vết sáng đỏ do laser He:Ne công suất 1 mW tạo ra có độ sáng cao hơn rất nhiều lần so với vết sáng đỏ cùng diện tích được lọc từ ánh sáng của một bóng đèn dây tóc tungsten công suất 100 W.

Các tính chất khác của laser

Các tính chất hữu ích khác như:

- Tính đơn sắc (monochromaticity),
- Chiều dài kết hợp lớn (long coherence length)
- Phát xung ngắn (short pulse emission)

5 Bài tập

Bài 4.2

Chứng minh rằng parity của trạng thái đầu và trạng thái cuối trong các chuyển dời E1 phải khác nhau.

Xét toán tử lưỡng cực:

$$\mathbf{p} = -e.\mathbf{r}$$

Dưới tác động của toán tử parity:

$$\hat{\pi}^\dagger \mathbf{p} \hat{\pi} = -\mathbf{p}$$

mà toán tử parity tác động lên trạng thái:

$$\hat{\pi} \left|n, l, m\right\rangle = (-1)^l \left|n, l, m\right\rangle$$

Khi đó, ta có xác suất chuyển dời:

$$\begin{aligned}
\langle n', m', l'| \mathbf{p} |n, m, l\rangle &= - \langle n', m', l'| \hat{\pi}^\dagger \mathbf{p} \hat{\pi} |n, m, l\rangle \\
&= -(-1)^{l'} \langle n', m', l'| \mathbf{p} (-1)^l |n, m, l\rangle \\
&= -(-1)^{l'+l} \langle n', m', l'| \mathbf{p} |n, m, l\rangle \\
\to \langle n', m', l'| \mathbf{p} |n, m, l\rangle \left(1 + (-1)^{l'+l}\right) &= 0
\end{aligned}$$

Trường hợp $l = l'$

$$\begin{aligned}
\left(1 + (-1)^{l'+l}\right) &= 1 + (-1)^{2l} = 2 \neq 0 \\
\to \langle n', m', l'| \mathbf{p} |n, m, l\rangle &= 0 \\
\Rightarrow \text{Không có chuyển dời}
\end{aligned}$$

Nên parity của trạng thái đầu và trạng thái cuối trong các chuyển dời E1 phải khác nhau.

Bài 4.3

a) $m' = m$ cho ánh sáng phân cực $\hat{z}$

Xét hàm sóng của nguyên tử Hydro có dạng

$$\psi(r,\theta,\phi) = F(r,\theta)\exp(im\phi)$$

Một cách ăn gian (lần nữa), ta có thể viết trạng thái của hàm sóng này dưới dạng $|n,m,l\rangle$.
Ta có các toán tử tác động lên:

- $H|n,m,l\rangle = E_n|n,m,l\rangle$
- $L^2|n,m,l\rangle = \hbar^2 l(l+1)|n,m,l\rangle$
- $L_z|n,m,l\rangle = m\hbar|n,m,l\rangle$

Giả sử V là một toán tử vector, $V_\pm = V_x + iV_y$ (ứng với σ^+ và σ^- trong Fox). Ta có bộ giao hoán tử:

- $[L_z, V_z] = 0$
- $[L_\pm, V_\pm] = 0$
- $[L_\pm, V_z] = \mp\hbar V_\pm$
- $[L_\pm, V_\mp] = \pm 2\hbar V_z$

Ta có:

$$\begin{aligned}\langle n',m',l'|[L_z,V_z]|n,m,l\rangle = 0 &\implies \langle n',m',l'|(L_z^\dagger V_z^\dagger - V_z L_z)|n,m,l\rangle = 0\\ &\implies (m'-m)\hbar\langle n',m',l'|V_z|n,m,l\rangle = 0\end{aligned} \tag{1}$$

Để $\langle n',m',l'|V_z|n,m,l\rangle \neq 0$, $(m'-m)$ phải bằng 0. Như vậy, các phần tử ma trận bằng 0 trừ khi $m' = m$.

b) $m' = m \pm 1$ cho ánh sáng phân cực $\sigma^\pm$

Chứng minh tương tự, ta có

$$\langle n',m',l'|[L_z,V_\pm]|n,m,l\rangle = \pm\hbar < V_\pm > \implies (m'-m\mp 1)\hbar < V_\pm >= 0 \tag{2}$$

Để $\langle n',m',l'|V_\pm|n,m,l\rangle \neq 0$, $(m'-m\mp 1)$ phải bằng 0. Như vậy, các phần tử ma trận bằng 0 trừ khi $m' = m \pm 1$.

d) $m' = m \pm 1$ cho ánh sáng phân cực $\hat{x}$ hoặc $\hat{y}$

Ta có

$$\begin{aligned}[L_z, x] &= [xp_y - yp_x, x]\\ &= -y[p_x, x]\\ &= -y(-i\hbar)\\ &= iy\hbar\end{aligned} \tag{3}$$

Chứng minh tương tự:

$$[L_z, y] = -i\hbar x$$

Như vậy, ta có hệ phương trình:

- $(m' - m)\hbar \langle n', m', l'| x |n, m, l\rangle - i\hbar \langle n', m', l'| y |n, m, l\rangle = 0$
- $i\hbar \langle n', m', l'| x |n, m, l\rangle + (m' - m)\hbar \langle n', m', l'| y |n, m, l\rangle = 0$

Thay phương trình trên xuống phương trình dưới, ta có:

$$i\hbar\frac{i\hbar \langle n', m', l'| y |n, m, l\rangle}{\hbar(m' - m)} + (m'-m)\hbar \langle n', m', l'| y |n, m, l\rangle = 0 \Leftrightarrow \left[\frac{-\hbar}{m' - m} + \hbar(m' - m)\right] \langle n', m', l'| y |n, m, l\rangle =$$

Để xác suất chuyển trạng thái khác 0, thì $\frac{-\hbar}{m'-m} + \hbar(m' - m) = 0$ khi đó

$$(m' - m)^2 = 1$$

Và như thế, mọi thành phần ma trận khác $(m' - m \pm 1)$ thì bằng không.

4.4

Để giải thích tại sao trường điện phụ thuộc thời gian $\mathcal{E}(t)$ được cho dưới dạng này, hãy xem xét mối quan hệ giữa cường độ ánh sáng và trường điện.

a) Mối quan hệ giữa cường độ và trường điện

Cường độ $I(t)$ của sóng tỉ lệ với bình phương biên độ của trường điện:

$$I(t) \propto |\mathcal{E}(t)|^2.$$

Vì cường độ giảm theo hàm mũ với thời gian:

$$I(t) = I(0)\exp(-t/\tau),$$

ta có thể suy ra rằng biên độ của trường điện cũng phải có một yếu tố suy giảm theo hàm mũ để đảm bảo rằng bình phương của nó khớp với sự suy giảm của cường độ:

$$|\mathcal{E}(t)|^2 = |\mathcal{E}_0|^2 \exp(-t/\tau).$$

Dạng của trường điện

Để phù hợp với mối quan hệ trên, trường điện $\mathcal{E}(t)$ nên bao gồm một yếu tố phụ thuộc thời gian giảm theo căn bậc hai của sự suy giảm cường độ:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \exp(-t/2\tau).$$

Ngoài ra, trường điện của một sóng có tần số góc ω_0 có thể được biểu diễn dưới dạng hàm cosin:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t)\exp(-t/2\tau).$$

Dạng này thỏa mãn điều kiện rằng cường độ $I(t)$ sẽ tỉ lệ với bình phương của trường điện, dẫn đến một sự suy giảm theo hàm mũ với cùng hằng số thời gian τ.

Giải thích các điều kiện

- Với $t < 0$, $\mathcal{E}(t) = 0$ vì xung ánh sáng chưa được phát ra.
- Với $t \geq 0$, trường điện $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t)\exp(-t/2\tau)$ mô tả bản chất dao động của sóng ánh sáng với biên độ giảm dần theo hàm mũ, phù hợp với hồ sơ cường độ đã cho.

Để tìm phổ phát xạ, chúng ta thực hiện phép biến đổi Fourier của trường điện $\mathcal{E}(t)$.

b) Phép biến đổi Fourier

Trường điện cho $t \geq 0$ được cho bởi:

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t) e^{-t/2\tau} = \frac{\mathcal{E}_0}{2}\left(e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}\right) e^{-t/2\tau}.$$

Phép biến đổi Fourier $\mathcal{E}(\omega)$ là:

$$\mathcal{E}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{E}(t) e^{i\omega t}\, dt.$$

Vì $\mathcal{E}(t) = 0$ cho $t < 0$, tích phân trở thành:

$$\mathcal{E}(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} \left(\frac{\mathcal{E}_0}{2} e^{i(\omega_0 t - \omega t) - t/2\tau} + \frac{\mathcal{E}_0}{2} e^{-i(\omega_0 t + \omega t) - t/2\tau} \right) dt.$$

Giải các tích phân

Xét thành phần đầu tiên:

$$\int_0^{\infty} e^{i(\omega_0 - \omega)t - t/2\tau}\, dt = \int_0^{\infty} e^{-(1/2\tau - i(\omega_0 - \omega))t}\, dt.$$

Giá trị của tích phân là:

$$\frac{1}{1/2\tau - i(\omega_0 - \omega)}.$$

Đối với thành phần thứ hai:

$$\int_0^{\infty} e^{-i(\omega_0 + \omega)t - t/2\tau}\, dt = \frac{1}{1/2\tau + i(\omega_0 + \omega)}.$$

Kết hợp các kết quả

$$\mathcal{E}(\omega) = \frac{\mathcal{E}_0}{2\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{1/2\tau - i(\omega_0 - \omega)} + \frac{1}{1/2\tau + i(\omega_0 + \omega)} \right).$$

Giả định: $\omega_0 \gg 1/\tau$

Với giả định này, thành phần thứ hai có thể được bỏ qua so với thành phần thứ nhất, do đó:

$$\mathcal{E}(\omega) \approx \frac{\mathcal{E}_0}{2\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{1/2\tau - i(\omega_0 - \omega)}.$$

Phổ phát xạ

Cường độ tỉ lệ với bình phương của giá trị tuyệt đối của phép biến đổi Fourier:

$$I(\omega) \propto |\mathcal{E}(\omega)|^2 = \left| \frac{\mathcal{E}_0}{2\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{1}{1/2\tau - i(\omega_0 - \omega)} \right|^2.$$

Điều này dẫn đến một dạng Lorentz:

$$I(\omega) \propto \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + (1/2\tau)^2}.$$

Dạng này khớp với biểu thức cho phổ phát xạ đã cho.

Bài 4.5

a)

$$L = \frac{\text{Quãng đường đã đi được}}{\text{Số va chạm}}$$

- Quãng đường phân tử khí đi được: $c \cdot t$
- Số va chạm của 1 phân tử khí: $\delta_s \cdot c \cdot t$
- Số va chạm của N phân tử khí: $\delta_s \cdot c \cdot t \cdot \left(\frac{N}{V}\right)$

$$\Rightarrow L = \frac{c \cdot t}{\delta_s \cdot c \cdot t \cdot \left(\frac{N}{V}\right)} = \frac{1}{\delta_s \cdot \left(\frac{N}{V}\right)}$$

b)

- Xác suất để hệ nằm trong vùng $[v_x \to v_x + dv_x] = f(v_x)dv_x$
- Tương tự cho các phương y và z:

$$[v_y \to v_y + dv_y] = f(v_y)dv_y$$
$$[v_z \to v_z + dv_z] = f(v_z)dv_z$$

Do hệ khí là hỗn loạn $\to$ hệ va chạm theo mọi phương với xác xuất như nhau:

$$f(v_x)dv_x = f(v_y)dv_y = f(v_z)dv_z$$

Với $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ thì xác suất hệ nằm trong vùng $[\vec{v} \to \vec{v} + d\vec{v}]$:

$$\rho(\vec{v})d\vec{v} = f(v_x)f(v_y)f(v_z)d\vec{v}$$

Ta tìm $f(\vec{v})$ để thỏa $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ thì $f(\vec{v})$ phải là hàm của v^2

$$f(v_x) = c \cdot \exp(Av_x^2)$$
$$f(v_y) = c \cdot \exp(Av_y^2)$$
$$f(v_z) = c \cdot \exp(Av_z^2)$$

$$\Rightarrow \rho(\vec{v}) = c^3 \cdot \exp\left(A \cdot \vec{v}^2\right)$$

Điều kiện chuẩn hóa:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\vec{v})d\vec{v} = 1$$

Xét 1 nguyên tử khí:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(v_x)dv_x = \int_{-\infty}^{\infty} c \cdot \exp(Av_x^2)dv_x = 1$$

Ta thấy A $<$ 0 thì tích phân mới hội tụ. Đặt $A = -\frac{1}{\alpha^2}$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} c \exp\left(-\frac{v_x^2}{\alpha^2}\right) dv_x = 1 \Rightarrow c \cdot \alpha\sqrt{\pi} = 1 \Rightarrow c = \frac{1}{\alpha\sqrt{\pi}}$$

Hệ số α thu được so sánh với thuyết động học phân tử khí tính $\vec{v}$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2k_BT}{m}} \quad \Rightarrow \quad c = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_BT}}$$

3D:

$$f(\vec{v}) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\vec{v}^2}{2k_B T}\right)$$

Xác suất hệ thuộc vùng: $[v \to v + dv]$

$$f(v)dv = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) v^2 \sin(\theta) dv d\theta d\phi$$

Tích phân theo góc:

$$f(v)dv = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right) v^2 \cdot 4\pi dv$$

$$f(c)dc = \rho(c)dc = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mc^2}{2k_B T}\right) c^2 dc$$