Tóm tắt QO chương 9

Ngày 20 tháng 12 năm 2024

1 Giới thiệu

Bohr đưa ra giả thuyết rằng một lượng tử ánh sáng có tần số góc ω sẽ được hấp thụ hoặc phát ra khi nguyên tử chuyển giữa hai mức năng lượng tử hóa E_1 và E_2 tuân theo biểu thức:

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega \tag{1}$$

Sau đó, Einstein phát triển thêm bằng cách giới thiệu các hệ số Einstein để định lượng tốc độ hấp thụ và phát xạ lượng tử và phát hiện quá trình phát xạ kích thích (stimulated emission), cơ sở của công nghệ laser sau này.

Quá trình tương tác giữa ánh sáng và nguyên tử, dựa trên mô hình của Bohr và Einstein, được minh họa trong Hình 9.1. Quá trình hấp thụ ánh sáng được hiểu là sự phá hủy một photon trong chùm ánh sáng kèm theo sự kích thích nguyên tử, trong khi quá trình phát xạ tương ứng với việc bổ sung một photon vào trường ánh sáng và sự giảm kích thích của nguyên tử.

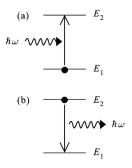


Fig. 9.1 Optical transitions between quantized energy levels: (a) absorption, and (b) spontaneous emission. Stimulated emission processes are not considered here.

Trong quá trình hấp thụ (Hình 9.1(a)), nguyên tử ban đầu ở mức năng lượng thấp hơn. Một chùm sáng (tần số góc ω) bật vào thời điểm t = 0, nguyên tử sẽ nhảy lên trạng thái kích thích và hấp thụ một photon từ chùm sáng. Tương tự, trong quá trình phát xạ (Hình 9.1(b)), nguyên tử ở trạng thái kích thích tại t = 0. Sau khoảng thời gian tương đương với tuổi thọ phóng xạ của trạng thái kích thích, một photon có tần số góc ω được phát ra và nguyên tử quay về trạng thái năng lương thấp hơn.

Câu hỏi được đặt ra là: Điều gì xảy ra với nguyên tử khi nó bị chiếu sáng trước khi quá trình hấp thụ hoàn tất? Cách tiếp cận của Einstein không giải quyết được vấn đề này. Để trả lời, cần giải phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian cho nguyên tử dưới tác động của ánh sáng.

Ngoài ra, việc xem xét cơ chế của phát xạ tự phát (spontaneous emission) theo cách tiếp cận của Einstein là một quá trình hoàn toàn ngẫu nhiên, được điều khiển bởi xác suất phân rã. Tuy nhiên, ở mức độ sâu hơn, quá trình này có thể được coi như một sự kiện phát xạ kích thích được kích hoạt bởi một photon chân không. Tính ngẫu nhiên được quy cho nhiễu lượng tử (quantum noise) của dao động điểm không (zero-point fluctuations) của trường điện từ.

2 Các khái niệm

2.1 Gần đúng hai mức

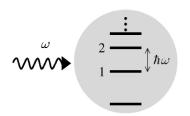


Fig. 9.2 The two-level atom approximation. When the light angular frequency ω coincides with one of the optical transitions of the atom, we have a resonant interaction between that transition and the light field. We can therefore neglect the other levels of the atom, which only weakly interact with the light because they are off-resonance.

Atom có nhiều mức năng lượng, nhưng giả sử chuyển dời từ mức này sang mức kia (chọn ra 2 mức nào đó), để có chuyển dời này ta giả định năng lượng ánh sáng đi vô vừa đủ bằng năng lượng giữa 2 mức

Sự tương tác lượng tử giữa ánh sáng và nguyên tử thường được mô tả thông qua xấp xỉ nguyên tử hai mức, áp dụng khi tần số của ánh sáng khớp với một trong các chuyển dời quang học của nguyên tử. Dù nguyên tử có nhiều mức năng lượng lượng tử và các chuyển dời quang học tương ứng, xấp xỉ này chỉ xét riêng một chuyển dời thỏa mãn phương trình (1), bỏ qua các mức khác.

Cơ sở vật lý của xấp xỉ hai mức dựa trên hiện tượng cộng hưởng. Theo cách nhìn cổ điển, chùm ánh sáng gây dao động lưỡng cực trong nguyên tử, làm nguyên tử phát xạ ở cùng tần số. Khi tần số ánh sáng khớp với tần số tự nhiên của nguyên tử, biên độ dao động lưỡng cực sẽ lớn, dẫn đến tương tác mạnh giữa ánh sáng và nguyên tử. Ngược lại, nếu tần số ánh sáng lệch xa tần số tự nhiên (không cộng hưởng), biên độ dao động nhỏ, tương tác yếu. Do đó, xấp xỉ này hợp lý khi chỉ xét các chuyển dời cộng hưởng, bỏ qua các chuyển dời không cộng hưởng.

Tuy nhiên, giả định chỉ các mức cộng hưởng đóng vai trò quan trọng vẫn là một xấp xỉ. Trong nhiều trường hợp, xấp xỉ này rất chính xác. Nhưng các mức không cộng hưởng có thể tác động gián tiếp, ví dụ khi nguyên tử ở mức 2 có thể chuyển xuống các mức thấp hơn ngoài mức 1, gây giảm hiệu quả tương tác ánh sáng-nguyên tử. Xử lý bằng cách thêm các yếu tố suy giảm (damping terms) vào phân tích.

Nguyên tử hai mức có thể được so sánh với hạt spin 1/2 trong từ trường.

2.2 Trạng thái chồng chập có tính chất liên kết (Coherent Superposition States)

Việc nghiên cứu tương tác cộng hưởng giữa nguyên tử và trường ánh sáng dựa trên khái niệm coherent superposition state. Đây là một trong những hiện tượng đặc trưng làm hệ lượng tử khác biệt so với hệ cổ điển.

Xét một hệ lượng tử hai mức. Trạng thái của hệ được biểu diễn dưới dạng:

$$|\psi\rangle = c_1 |1\rangle + c_2 |2\rangle \tag{2}$$

trong đó c_1 và c_2 là biên độ xác suất của các trạng thái $|1\rangle$ và $|2\rangle$. Xác suất để đo được trạng thái $|1\rangle$ là $|c_1|^2$, và tương tự với $|2\rangle$ là $|c_2|^2$.

Nếu xét một hỗn hợp thống kê gồm N_0 hạt hai mức, với N_1 hạt ở mức thấp và N_2 hạt ở mức cao, ta có thể gán:

$$|c_1|^2 = \frac{N_1}{N_0}, \quad |c_2|^2 = \frac{N_2}{N_0}.$$
 (3)

Sự khác biệt nằm ở trong trạng thái chồng chập, mỗi hạt có thể đồng thời ở cả hai trạng thái $|1\rangle$ và $|2\rangle$, dẫn đến khả năng xuất hiện giao thoa hàm sóng. Trong hỗn hợp thống kê, mỗi hạt chỉ ở một trong hai mức, nên không có giao thoa.

Hiện tượng giao thoa ánh sáng cung cấp một phép so sánh trực quan. Nếu hai chùm ánh sáng có cùng tần số nhưng khác pha ϕ_1 và ϕ_2 , trường tổng hợp sẽ là:

$$E = E_1 e^{-i(\omega t + \phi_1)} + E_2 e^{-i(\omega t + \phi_2)}.$$

$$= E_1 e^{-i(\omega t + \phi_1)} \left(1 + \frac{E_2}{E_1} e^{-i(\phi_2 - \phi_1)} \right)$$
(4)

Trong trường hợp hai chùm ánh sáng $k\hat{e}t$ hợp $(\Delta\phi = \phi_2 - \phi_1 = hằng số)$, giao thoa tạo ra các vân sáng $(\Delta\phi = 2n\pi)$ và vân tối $(\Delta\phi = (2n+1)\pi)$. Ngược lại, nếu các chùm không liên $k\hat{e}t$ (pha thay đổi ngẫu nhiên), giao thoa không xảy ra và cường độ tổng chỉ là tổng cường độ từng chùm:

$$|E|^2 = |E_1|^2 + |E_2|^2. (5)$$

Áp dụng tương tự này vào hệ hai mức, biên độ c_1 và c_2 đóng vai trò tương ứng với $E_1e^{-i\phi_1}$ và $E_2e^{-i\phi_2}$. Giao thoa hàm sóng chỉ xảy ra khi c_1 và c_2 có mối quan hệ pha xác định, tức là trong trạng thái chồng chập, chứ không phải trong hỗn hợp thống kê.

Khi một xung ánh sáng tác động lên nguyên tử hai mức, nó liên kết pha giữa các mức năng lượng trên và dưới, tạo ra trạng thái chồng chập. Hiện tượng này dẫn đến các dao động hàm sóng của nguyên tử giữa hai mức, điều mà lý thuyết Einstein không xem xét (vì chỉ mô tả hỗn hợp thống kê). Trong quá trình có mặt xung ánh sáng, nguyên tử dao động qua lại giữa hai mức năng lượng. Điều này dường như mâu thuẫn với mô hình đơn giản về các chuyển dời rời rạc giữa hai mức. Tuy nhiên, sự khác biệt này sẽ được làm rõ hơn khi xem xét hiệu ứng suy giảm (damping).

2.3 Ma trân mật đô và trang thái chồng chập lương tử

Các nghiên cứu nâng cao hơn về hiện tượng tương tác ánh sáng-nguyên tử thường sử dụng **ma trận mật độ** ρ . Các phần tử của ma trận mật độ được định nghĩa bởi:

$$\rho_{ij} = \langle c_i c_i^* \rangle \tag{6}$$

trong đó c_i là biên độ hàm sóng của trạng thái lượng tử thứ i, và chỉ số i, j chạy qua tất cả các trạng thái lượng tử của nguyên tử. Dấu $\langle \cdots \rangle$ biểu thị giá trị trung bình cho một hệ nhiều hạt.

Đối với nguyên tử hai mức, ma trân mật độ có dang tổng quát:

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle |c_1|^2 \rangle & \langle c_1 c_2^* \rangle \\ \langle c_2 c_1^* \rangle & \langle |c_2|^2 \rangle \end{pmatrix}.$$
(7)

Hỗn hợp thống kê: Trong trường hợp hỗn hợp thống kê, mỗi nguyên tử chỉ ở một trong hai trạng thái ($|c_1| = 1$ và $|c_2| = 0$ hoặc ngược lại). Do đó, các phần tử ngoài đường chéo (ρ_{12} và ρ_{21}) bằng 0, và ma trận mật độ trở thành:

$$\rho = \begin{pmatrix} \frac{N_1}{N_0} & 0\\ 0 & \frac{N_2}{N_0} \end{pmatrix},\tag{8}$$

trong đó N_1 và N_2 lần lượt là số hạt ở mức thấp và mức cao.

Trạng thái chồng chập liên kết: Trong trạng thái chồng chập, cả $|c_1|$ và $|c_2|$ đều khác 0. Khi đó, các phần tử ngoài đường chéo $(\rho_{12}$ và $\rho_{21})$ không bị triệt tiêu. Ma trận mật độ đầy đủ vẫn giữ dạng tổng quát như trên với cả bốn phần tử khác 0.

Điểm khác biệt cốt lõi giữa **hỗn hợp thống kê** và **trạng thái chồng chập liên kết** nằm ở các phần tử ngoài đường chéo của ma trận mật độ. Những phần tử này đóng vai trò trung tâm trong khái niệm trạng thái chồng chập, vì chúng thể hiện sự giao thoa lượng tử giữa các trạng thái.

Trong các hệ đơn giản như nguyên tử hai mức, người ta thường mô tả hành vi của hệ bằng cách sử dụng trực tiếp biên độ hàm sóng thay vì ma trận mật độ. Ma trận mật độ được giới thiệu ở đây nhằm mục đích đầy đủ và để nhấn mạnh vai trò của các phần tử ngoài đường chéo trong trạng thái chồng chập lượng tử.

3 Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian

Giải phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian cho một nguyên tử hai mức trong sự hiện diện của ánh sáng:

$$\hat{H}\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \tag{9}$$

đối với một nguyên tử có hai mức năng lượng E_1 và E_2 trong sự hiện diện của sóng ánh sáng với tần số góc ω . Giả sử ánh sáng có tần số rất gần với tần số cộng hưởng của sự chuyển mức, sao cho:

$$\omega = \omega_0 + \delta\omega \tag{10}$$

trong đó:

$$\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \tag{11}$$

và $\delta\omega \ll \omega_0$. Cộng hưởng chính xác tương ứng với $\delta\omega = 0$.

Chúng ta bắt đầu bằng cách tách Hamiltonian thành một phần không phụ thuộc thời gian \hat{H}_0 , mô tả nguyên tử trong bóng tối, và một phần nhiễu loạn $\hat{V}(t)$, mô tả sự tương tác giữa ánh sáng và nguyên tử:

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + \hat{V}(t) \tag{12}$$

Vì chúng ta đang xem xét nguyên tử hai mức, sẽ có hai nghiệm cho hệ không bị nhiễu loạn:

$$\hat{H}_0 \Psi_i = i\hbar \frac{\partial \Psi_i}{\partial t} \tag{13}$$

với:

$$\Psi_i(\mathbf{r},t) = \psi_i(\mathbf{r})e^{-iE_it/\hbar} \quad \{i = 1, 2\}$$
(14)

và:

$$\hat{H}_0(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = E_i \,\psi_i(\mathbf{r}) \quad \{i = 1, 2\}$$
(15)

Lời giải tổng quát cho phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian là:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sum_{i}^{2} c_i(t)\psi_i(\mathbf{r})e^{-iE_it/\hbar} = c_1(t)\psi_1(\mathbf{r})e^{-iE_1t/\hbar} + c_2(t)\psi_2(\mathbf{r})e^{-iE_2t/\hbar}$$
(16)

Khi thế hàm sóng và \hat{H} vào phương trình trên, ta có:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \left(c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \right) = i\hbar \left((\dot{c}_1 - iE_1 c_1/\hbar) \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + (\dot{c}_2 - iE_2 c_2/\hbar) \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \right)$$

$$\rightarrow c_1 \hat{V} \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \hat{V} \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} = i\hbar \dot{c}_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + i\hbar \dot{c}_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}$$

$$(17)$$

Khi nhân với ψ_i^* , tích phân trong không gian và sử dụng tính trực giao của các hàm riêng, ta có điều kiện:

$$\int \psi_i^* \psi_j \, \mathrm{d}^3 \mathbf{r} = \delta_{ij} \tag{18}$$

Từ đó, ta tìm được:

$$\dot{c}_1(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(c_1(t) V_{11} + c_2(t) V_{12} e^{-i\omega t} \right) \tag{19}$$

trong đó:

$$V_{ij}(t) \equiv \langle i|\hat{V}(t)|j\rangle = \int \psi_i^* \hat{V}(t)\psi_j \,\mathrm{d}^3\mathbf{r}$$
(20)

Tương tự, khi nhân với ψ_2^* và tích phân, ta thu được:

$$\dot{c}_2(t) = -\frac{i}{\hbar} \left(c_1(t) V_{21} e^{i\omega t} + c_2(t) V_{22} \right) \tag{21}$$

Xét dạng tường minh của nhiễu loạn $\hat{V}(t)$. Trong cách tiếp cận bán cổ điển, tương tác ánh sángnguyên tử được xác định bởi sự dịch chuyển năng lượng của lưỡng cực nguyên tử trong điện trường của ánh sáng:

$$\hat{V}(t) = e\mathbf{r} \cdot \mathcal{E}(t) \tag{22}$$

Tùy ý chọn trục x là hướng phân cực để có thể viết:

$$\mathcal{E}(t) = (\mathcal{E}_0, 0, 0) \cos \omega t \tag{23}$$

trong đó \mathcal{E}_0 là biên độ của sóng ánh sáng. Khi đó, nhiễu loạn được viết đơn giản lại thành:

$$\hat{V}(t) = ex\mathcal{E}_0 \cos \omega t = \frac{ex\mathcal{E}_0}{2} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right)$$
 (24)

và các phần tử ma trận nhiễu loạn được cho bởi:

$$V_{ij}(t) = \frac{e\mathcal{E}_0}{2} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right) \int \psi_i^* x \psi_j \, \mathrm{d}^3 \mathbf{r}$$
 (25)

Phần tử ma trận lưỡng cực **dipole matrix element** μ_{ij} được cho bởi:

$$\mu_{ij} = -e \int \psi_i^* x \psi_j \, \mathrm{d}^3 \mathbf{r} \equiv -e \langle i | x | j \rangle$$
 (26)

do đó ta có thể viết:

$$V_{ij}(t) = -\frac{\mathcal{E}_0}{2} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right) \mu_{ij}$$
(27)

Vì x là một toán tử lẻ và các trạng thái nguyên tử có tính chẵn hoặc lẻ, nên $\mu_{11} = \mu_{22} = 0$. Hơn nữa, phần tử ma trận lưỡng cực biểu diễn một đại lượng có thể đo được và phải là số thực, điều này dẫn đến $\mu_{21} = \mu_{12}$ (vì $\mu_{21} = \mu_{12}^*$).

$$\dot{c}_{1}(t) = i\frac{\mathcal{E}_{0}\mu_{12}}{2\hbar} \left(e^{i(\omega - \omega_{0})t} + e^{-i(\omega + \omega_{0})t} \right) c_{2}(t),$$

$$\dot{c}_{2}(t) = i\frac{\mathcal{E}_{0}\mu_{12}}{2\hbar} \left(e^{-i(\omega - \omega_{0})t} + e^{i(\omega + \omega_{0})t} \right) c_{1}(t)$$
(28)

Chúng ta giới thiệu **tần số Rabi** được định nghĩa bởi:

$$\Omega_R = |\mu_{12} \mathcal{E}_0 / \hbar| \tag{29}$$

Kết quả cuối cùng mà chúng ta thu được là:

$$\dot{c}_1(t) = \frac{\mathrm{i}}{2} \Omega_R \left(e^{\mathrm{i}(\omega - \omega_0)t} + e^{-\mathrm{i}(\omega + \omega_0)t} \right) c_2(t),$$

$$\dot{c}_2(t) = \frac{\mathrm{i}}{2} \Omega_R \left(e^{-\mathrm{i}(\omega - \omega_0)t} + e^{\mathrm{i}(\omega + \omega_0)t} \right) c_1(t)$$
(30)

Đây là các phương trình mà chúng ta cần giải để hiểu được hành vi của nguyên tử trong trường ánh sáng. Hóa ra có hai loại nghiệm riêng biệt có thể tìm thấy, tương ứng với **giới hạn trường yếu** và **giới hạn trường mạnh**. Trước hết, chúng ta sẽ xét giới hạn trường yếu.

4 Giới hạn trường yếu: Hệ số B của Einstein

Giới hạn trường yếu áp dụng cho các nguồn ánh sáng cường độ thấp như đèn bức xạ nhiệt. Chúng ta giả sử rằng nguyên tử ban đầu nằm ở mức thấp hơn và đèn được bật tại t = 0 nghĩa là $c_1(0) = 1$ và $c_2(0) = 0$.

Với nguồn cường độ thấp, biên độ điện trường sẽ nhỏ và nhiễu loạn yếu: $c_1(t) \gg c_2(t)$. Đặt $c_1(t) = 1$, phương trình chuyển động trở thành:

$$\dot{c}_1(t) = 0,$$

$$\dot{c}_2(t) = \frac{i}{2} \Omega_R \left(e^{-i(\omega - \omega_0)t} + e^{i(\omega + \omega_0)t} \right)$$
(31)

Nghiệm của $c_2(t)$ với $c_2(0) = 0$ là:

$$c_2(t) = \frac{\mathrm{i}}{2} \Omega_R \left[\frac{e^{-\mathrm{i}\delta\omega t} - 1}{-\mathrm{i}\delta\omega} + \frac{e^{\mathrm{i}(\omega + \omega_0)t} - 1}{\mathrm{i}(\omega + \omega_0)} \right]$$
(32)

Bỏ qua số hạng thứ hai theo **giao thoa sóng quay** (RWA) bởi vì $\delta\omega \ll (\omega + \omega_0)$, số hạng thứ hai nhỏ hơn nhiều so với số hạng thứ nhất. Ta thu được:

$$|c_2(t)|^2 = \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 \left(\frac{\sin(\delta\omega t/2)}{\delta\omega/2}\right)^2 \tag{33}$$

Khi $\delta\omega=0$:

$$|c_2(t)|^2 = \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 t^2 \tag{34}$$

Đây là kết quả không thỏa đáng vì xác suất tăng theo t^2 , mâu thuẫn với lý thuyết của Einstein, trong đó xác suất chuyển tiếp là độc lập với thời gian và $|c_2(t)|^2$ tăng tuyến tính theo thời gian.

Chúng ta đã giả sử xuyên suốt rằng đường chuyển tiếp của nguyên tử hoàn toàn sắc nét nhưng thực tế tất cả các vạch quang phổ đều có bề rộng hữu hạn. Giả sử đường chuyển tiếp có độ rộng $\Delta\omega$ và xét nguồn phổ rộng với mật độ năng lượng $u(\omega)$:

$$\frac{1}{2}\epsilon_0 \mathcal{E}_0^2 = \int u(\omega)d\omega \tag{35}$$

Tích phân phương trình $|c_2(t)|^2$ trên phổ:

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\mu_{12}^2}{2\epsilon_0 \hbar^2} \int_{\omega_0 - \Delta\omega/2}^{\omega_0 + \Delta\omega/2} u(\omega) \left(\frac{\sin((\omega - \omega_0)t/2)}{(\omega - \omega_0)/2} \right)^2 d\omega$$
 (36)

Chúng ta thực hiện xấp xỉ rằng vạch quang phổ sắc nét so với phổ rộng của đèn, vì vậy $u(\omega)$ không thay đổi đáng kể trong tích phân. Điều này cho phép ta thay thế $u(\omega)$ bằng một giá trị không đổi $u(\omega_0)$ và đánh giá tích phân. Giới hạn của $t\Delta\omega\to\infty$ là $u(\omega)2\pi t$. Kết quả cuối cùng là:

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\pi}{\epsilon_0 \hbar^2} \mu_{12}^2 u(\omega_0) t \tag{37}$$

Kết quả này là một kết luận thỏa đáng hơn vì nó chỉ ra rằng xác suất nguyên tử ở mức trên tăng tuyến tính theo thời gian.

Chúng ta có thể liên hệ phương trình trên với hệ số B của Einstein được định nghĩa như sau:

$$\frac{\mathrm{d}N_2}{\mathrm{d}t} = B_{12}^{\omega} u(\omega_0) N_1 \tag{38}$$

trong đó xác suất chuyển tiếp trên một đơn vị thời gian cho mỗi nguyên tử được xác định bởi $B_{12}^{\omega}u(\omega_0)$.

Trong phân tích trước đó, ta giả sử mômen lưỡng cực của nguyên tử song song với vectơ phân cực của ánh sáng. Tuy nhiên: trong khí chứa các nguyên tử, hướng của các lưỡng cực nguyên tử sẽ ngẫu nhiên.

- Trong khí chứa nhiều nguyên tử, hướng của các lưỡng cực nguyên tử sẽ là ngẫu nhiên.
- Góc giữa phân cực của ánh sáng và một lưỡng cực bất kỳ là θ .
- Lấy trung bình trên tất cả các nguyên tử:

$$\langle (\mu_{12}\cos\theta)^2 \rangle = \frac{\mu_{12}^2}{3}.$$

Thay μ_{12}^2 bằng $\mu_{12}^2/3$ vào phân tích, ta thu được tốc độ xác suất chuyển dời W_{12} :

$$W_{12} \equiv B_{12}^{\omega} u(\omega_0) = \frac{|c_2|^2}{t} = \frac{\pi}{3\epsilon_0 \hbar^2} \mu_{12}^2 u(\omega_0)$$
(39)

Cuối cùng, kết quả cho hệ số B của Einstein là:

$$B_{12}^{\omega} = \frac{\pi}{3\epsilon_0 \hbar^2} \mu_{12}^2,\tag{40}$$

$$B_{12}' = \frac{1}{6\epsilon_0 \hbar^2} \mu_{12}^2 \tag{41}$$

Điều này cho thấy rằng giới hạn trường yếu là tương đương với phân tích của Einstein và cho phép chúng ta tính toán các giá trị cụ thể của hệ số B từ hàm sóng nguyên tử.

5 Giới hạn trường mạnh - Dao động Rabi

5.1 Khái niệm cơ bản

Trong phần trước, ta giả sử rằng cường độ trường ánh sáng là yếu sao cho xác suất tìm thấy electron ở mức kích thích luôn nhỏ : $c_1(t) \approx 1$. Tuy nhiên, trong phần này, chúng ta xem xét trường hợp tổng quát khi xác suất tìm thấy electron ở mức trên trở nên đáng kể, tức là khi tương tác ánh sáng nguyên tử là mạnh(trường điện mạnh), ví dụ như trong laser cường độ cao.

Để tìm nghiệm cho phương trình (30) trong giới hạn trường mạnh, ta thực hiện hai đơn giản hóa:

- Thứ nhất, áp dụng **xấp xỉ sóng quay** (rotating wave approximation), bỏ qua các số hạng dao động với tần số $\pm(\omega + \omega_0)$.
- Thứ hai, xét trường hợp **cộng hưởng chính xác**, tức là $\delta\omega = 0$.

Với các đơn giản hóa này, phương trình (30) được rút gọn thành:

$$\dot{c}_1(t) = \frac{i}{2}\Omega_R c_2(t), \quad \dot{c}_2(t) = \frac{i}{2}\Omega_R c_1(t)$$
 (42)

Lấy đạo hàm bậc hai của phương trình thứ nhất và thay thế vào phương trình thứ hai, ta thu được:

$$\ddot{c}_1 = \frac{i}{2} \Omega_R \dot{c}_2 = \left(\frac{i}{2} \Omega_R\right)^2 c_1. \tag{43}$$

Do đó:

$$\ddot{c}_1 + \left(\frac{\Omega_R}{2}\right)^2 c_1 = 0 \tag{44}$$

Nghiệm của phương trình này mô tả chuyển động dao động với tần số góc $\Omega_R/2$. Nếu ban đầu hệ ở trạng thái dưới, tức là $c_1(0) = 1$ và $c_2(0) = 0$, thì nghiệm là:

$$c_1(t) = \cos\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right), \quad c_2(t) = i\sin\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right)$$
 (45)

Xác suất tìm thấy electron ở mức thấp và mức cao lần lượt là:

$$|c_1(t)|^2 = \cos^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right), \quad |c_2(t)|^2 = \sin^2\left(\frac{\Omega_R t}{2}\right) \tag{46}$$

Quá trình này thể hiện sự dao động của electron giữa mức thấp và mức cao với chu kỳ $2\pi/\Omega_R$. Dao động này được gọi là **dao động Rabi** hoặc **Rabi flopping**.

Khi ánh sáng không cộng hưởng chính xác với mức năng lượng chuyển tiếp, xác suất $|c_2(t)|^2$ được hiệu chỉnh thành:

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\Omega_R^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{\Omega t}{2}\right),\tag{9.49}$$

trong đó:

$$\Omega^2 = \Omega_R^2 + \delta\omega^2 \tag{47}$$

với $\delta\omega$ là độ lệch tần số (detuning).

Kết quả này cho thấy tần số dao động Rabi tăng khi độ lệch $\delta\omega$ tăng, nhưng biên độ dao động giảm khi ánh sáng lệch khỏi cộng hưởng.

Trong thực tế, để quan sát được dao động Rabi trong dải tần số ánh sáng khả kiến, cần sử dụng các chùm laser cường độ mạnh. Khi đó, biên độ điện trường E_0 của chùm laser sẽ xác định tần số Rabi $\Omega_R/2\pi$ cũng thay đổi theo thời gian, do đó việc định nghĩa diện tích xung Θ là rất hữu ích như sau:

$$\Theta = \left| \frac{\mu_{12}}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{E}_0(t) \, dt \right| \tag{48}$$

Diện tích xung là một đại lượng không thứ nguyên, được xác định bởi năng lượng của xung và đóng vai trò tương tự như $\Omega_R t$ trong phân tích ở trên. Một xung có diện tích bằng π được gọi là xung π . Một nguyên tử ở trạng thái cơ bản với $c_1 = 1$ tại thời điểm t = 0 sẽ được chuyển lên trạng thái kích thích với $c_2 = 1$ nhờ xung π , nhưng sẽ quay trở lại trạng thái cơ bản nếu nó tương tác với xung 2π . Diện tích xung có thể được diễn giải theo góc quay của vecto Bloch.

Hiện tượng dao động kỳ lạ được dự đoán bởi phương trình 46 đã được quan sát trong nhiều hệ thống.