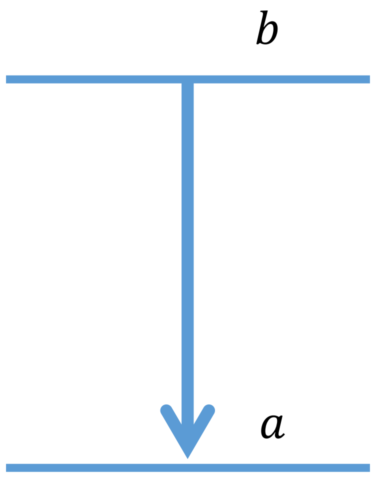
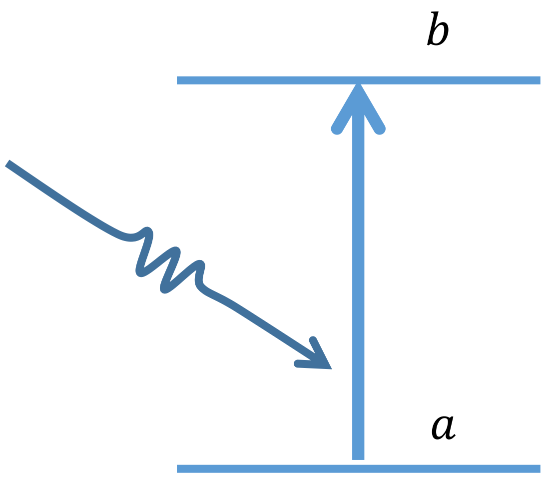
Interazione Radiazione materia (intro)
Sistema a due livelli e coefficienti di Einstein

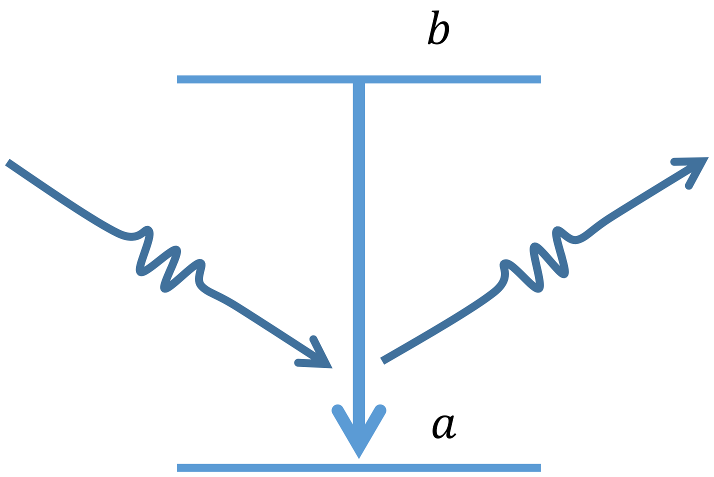
Emissione Spontanea



Assorbimento



<u>Emissione Stimolata</u>



-Energia del fotone (<u>Emesso/Assorbito</u>) uguale alla differenza di energia tra i due livelli

-'Equazioni di bilanciamento' (Rate equation) delle popolazioni

-Condizioni di stazionarietà

-In condizioni di stazionarietà Einstein propone l'esistenza di un processo di <u>**emissione stimolata**</u> dal campo e.m.

-In cond. di equilibrio ottiene la legge di Plank (Nota: solo introducendo il processo di emissione stimolata)

-LASER: <u>**L**</u>ight <u>**A**</u>mplification by <u>**S**</u>timulated <u>**E**</u>mission of <u>**R**</u>adiation

Interazione Radiazione materia

Approssimazione semiclassica: campi classici e atomi quantistici (no feedback dell'atomo sul campo)

L'Hamiltoniana di una particella in un campo e.m. è:

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi$$

E l'eq. di Schroedinger diventa

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\varepsilon_0)r}\right]\Psi(\mathbf{r}, t)$$

Nota: 'Eq. Di Schroedinger è <u>invariante per la scelta di Gauge (la funzione d'onda acquisisce una fase)</u>.

Interazione di atomi ad 1e- con campi e.m.

La probabilità di transizione è data da:

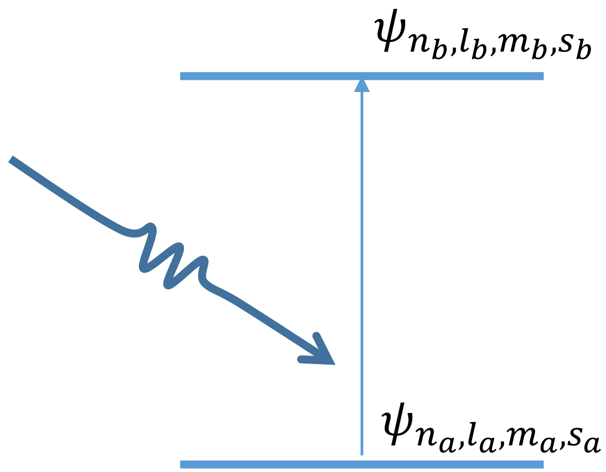
$$c_b^{(1)}(t) = -\frac{e}{m}\int_{\Delta\omega} d\omega A_0(\omega)\left[\underbrace{e^{i\delta_\omega}\langle\psi_b|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{\nabla}|\psi_a\rangle\int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba}-\omega)t'}} + \underbrace{e^{-i\delta_\omega}\langle\psi_b|e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\,\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{\nabla}|\psi_a\rangle\int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba}+\omega)t'}}\right]$$

Assorbimento
≠0 se
$w_{ba}=w$;
i.e. $E_b=E_a+\hbar\omega$

Emissione
≠0 se
$w_{ba}=w$;
i.e. $E_b=E_a-\hbar\omega$

In un processo di **assorbimento** la probabilità che un atomo si trovi in uno stato viene calcolata in teoria delle perturbazioni dipendente dal tempo e prende la forma:

$$|c_b^{(1)}(t)|^2 = 2\int_{\Delta\omega} d\omega\left[\frac{eA_0(\omega)}{m}\right]^2 |M_{ba}(\omega)|^2 F(t,\omega-\omega_{ba})$$



Dove il ruolo cruciale è quello dell'**Elemento di Matrice**:

$$M_{ba} = \langle\psi_b|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{\nabla}|\psi_a\rangle = \int \psi_b^\star(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}\cdot\boldsymbol{\nabla}\psi_a(\mathbf{r})\,d\mathbf{r}$$

Che ci permette di definire la **probabilità di transizione di asorbimento** $$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{m^2 c}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{I(\omega_{ba})}{\omega_{ba}^2}|M_{ba}(\omega_{ba})|^2$$

Legata alla sua **sezione d'urto** $$\sigma_{ba} = \frac{4\pi^2\alpha\hbar^2}{m^2\omega_{ba}}|M_{ba}(\omega_{ba})|^2$$

Oltre al processo di **Assorbimento** dal campo e.m.

Il processo in cui un fotone viene emesso da un atomo in un processo di diseccitazione è chiamato
Emissione

Emissione Stimolata è un processo per cui la presenza di un campo e.m. (risonante all'energia di transizione) stimola la diseccitazione di un atomo e di conseguenza l'emissione di un fotone

Al contrario il processo di **Emissione Spontanea** è un processo di decadimento spontaneo dello stato eccitato di un atomo che avviene in assenza di fotoni nel campo di stimolo;

Nota: emissione spontanea è un processo di emissione «stimolato» dal campo elettromagnetico di vuoto. In formalismo quantistico esistono fluttuazioni di campo e.m. anche in assenza di eccitazioni (fotoni) in tale campo.

L’approssimazione di dipolo

Il calcolo dell’elemento di matrice $M_{ba} = \langle \psi_b | e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \nabla | \psi_a \rangle$ può essere semplificato

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 + (i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) + \frac{1}{2!}(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2 + \cdots = 1$$

L’approx. corrisponde ad assumere che il campo sia uniforme sulle dimensioni atomiche; i.e. Campi ottici (10^{-6}m) e dimensioni atomiche 10^{-10}m

L’espressione per una probabilità di transizione si può quindi esprimere in funzione di $\mathbf{r}_{ba} = \langle \psi_b | \mathbf{r} | \psi_a \rangle$ (dove abbiamo espresso il nabla attraverso la sua equazione del moto al primo ordine):

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{c\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right) I(\omega_{ba}) |\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \cdot \mathbf{r}_{ba}|^2$$

Che possiamo esprimere introducendo l’operatore di momento di dipolo elettrico:

$$\mathbf{D}_{ba} = -e\mathbf{r}_{ba}$$

Il calcolo delle probabilità di transizione si riduce a calcolare la precedente o più in generale (q indice delle componenti sferiche).

$$I^{q}_{n'l'm';nlm} = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} \int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^3 R_{n'l'}(r) R_{nl}(r) \times \int \mathrm{d}\Omega\, Y^{\star}_{l'm'}(\theta, \phi) Y_{1,q}(\theta, \phi) Y_{lm}(\theta, \phi)$$

La componente radiale della funzione d'onda è non nulla, mentre la componente angolare ci da delle **<u>Regole di selezione di dipolo</u>**:

$$\Delta l = \pm 1$$

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

Regola generale: vale per transizione tra stati elettronici

-**Stati vibrazionali** (IR and Raman activities)

O—C—O
Simmetrico
No dipolo

O—C—O
Dipolo (IR)

-**Magnetici** (Magnon absorption)