Kapitola 4

Interakce optického záření s látkou

Elektromagnetické pole, složené z vln s optickými frekvencemi, má vliv zejm. na stav a strukturu elektronového obalu atomů. Dochází ke změnám doprovázeným přenosem energie mezi podsystémy tj. atomy, molekulami nebo ionty a elektromagnetickým polem.

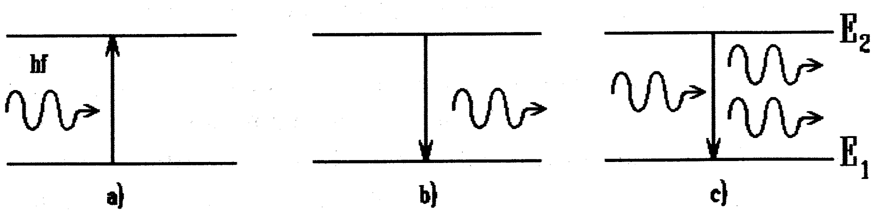
4.1 Elementární procesy absorpce a emise

Dochází-li ke zářivému kvantovému přechodu mezi dvěma energetickými hladinami E_1 a E_2 ($E_1 < E_2$), kvantová soustava získává nebo ztrácí rozdíl energií $E_2 - E_1$, tato energie může být vyměňována s elektromagnetickou vlnou o frekvenci $f = \frac{E_2 - E_1}{h}$, kde $h = 6.626.10^{-34}$ Js je tzv. Planckova konstanta. Tato frekvence bývá označována jako *frekvence kvantového přechodu.* Množství předávané energie $\Delta E = E_2 - E_1 = hf$ je elementární kvantum energie, které vlna o frekvenci f může s kvantovými soustavami vyměňovat. Toto kvantum energie, nazývané *fotonem*, bývá v korpuskulárních představách o světle ztotožňováno s *kvazičásticí.* Na záření o známé frekvenci se pohlíží jako na proud fotonů. Intenzita záření je přímo úměrná počtu fotonů.

Elementární proces *absorpce* záření kvantovou soustavou se interpretuje jako zánik (anihilace) fotonu a současný přechod kvantové soustavy z nižší energetické hladiny E_1 na vyšší E_2 neboli zánik kvantové soustavy s vnitřní energií E_1 a vznik kvantové soustavy s vnitřní energií E_2. Obvykle používané schematické znázornění tohoto procesu je na obr. 4.1a.

Opačným procesem k absorpci je proces emise. Nachází-li se kvantová soustava v excitovaném stavu E_2, dochází s jistou pravděpodobností k samovolnému (spontánnímu) uvolnění fotonu s frekvencí rovnou frekvenci kvantového přechodu, atom při tom přechází na nižší hladinu E_1 uvažovaného kvantového přechodu. Tento proces se nazývá *spontánní emisí* (viz obr. 4.1b).

V r.1916 A.Einstein teoreticky zdůvodnil existenci ještě dalšího elementárního procesu, při kterém přítomné záření rezonanční frekvence f vyvolává kvantový přechod, při němž je uvolněno kvantum (foton) se stejnou frekvencí f. Směr šíření a polarizace vlny jsou stejné jako směr šíření a polarizace vlny, která kvantový přechod vyvolala. Tento proces bývá označován jako *stimulovaná emise* (viz obr. 4.1c).



Obr. 4.1: Zářivé kvantové přechody

absorpce a), spontánní emise b), stimulovaná emise c)

Tři uvedené elementární procesy absorpce, spontánní emise a stimulovaná emise se někdy presentují relacemi používanými při popisu chemických reakcí:

absorpce:	$hf + A$	$\longrightarrow$	A^*
spontánní emise:	A^*	$\longrightarrow$	$A + hf$
stimulovaná emise:	$hf + A^*$	$\longrightarrow$	$A + 2hf$

kde A označuje atom ve stavu s energií E_1, A^* atom v excitovaném stavu, tj stavu s energií E_2 a hf označuje foton rezonančního záření.

4.2 Absorpční a emisní spektrum látky

Prochází-li elektromagnetická vlna s frekvencí f prostorem, ve kterém se nacházejí kvantové soustavy, dochází k výměně energie mezi vlnou a soustavami, jestliže je splněna podmínka rezonance, tj jestliže existuje kvantový přechod mezi hladinami E_k a E_i, jehož frekvence kvantového přechodu $f_{ki} = (E_k - E_i)/h = f$.

V ideálním případě izolovaných soustav jsou energetické hladiny přesně určeny a prostředí absorbuje nebo zesiluje jen vlny s přesně definovanými frekvencemi. Říkáme, že absorpční (emisní) spektrum látky je čárové.

Vzhledem k tomu, že na kvantové soustavy působí vždy mnoho vlivů okolního prostředí, nejsou energetické hladiny přesné, vykazují jistou neurčitost (šířku ΔE_k). Frekvence optického záření, které je absorbováno nebo vysíláno, není také určena přesně, hovoříme o rozšíření spektrální čáry. Interval frekvencí Δf, v němž jsou vlny prostředím absorbovány nebo vysílány nazýváme šířkou spektrální čáry.

Je-li rozšířena jen jedna z hladin E_k uvažovaného kvantového přechodu, je šířka spektrální čáry Δf rovna převrácené hodnotě doby života τ_k na této hladině.

Jsou-li všechny kvantové soustavy v souboru stejné (navzájem nerozlišitelné) je výsledná spektrální čára pro soubor stejná jako spektrální čára každé kvantové soustavy v uvažovaném souboru. O spektrální čáře pak říkáme, že je *homogenně* rozšířená.

Jiným případem je tzv. *nehomogenní* rozšíření spektrální čáry, ke kterému dochází, když jednotlivé prvky souboru kvantových soustav jsou rozlišitelné podle frekvencí kvantových přechodů (tj. existují podsoubory, které se navzájem liší jmenovitými frekvencemi kvantových přechodů).

4.3 Rovnovážné záření

Vzhledem k tomu, že ke vzájemné výměně energie mezi molekulami a elektromagnetickým polem dochází po kvantech hf (fotonech), je možné uvažovat o každé elektromagnetické vlně jako o kvantovém systému s vnitřními stavy energie $E_n = E_0 + nhf$, tj. o systému se spočetně mnoha, stejně od sebe vzdálenými energetickými hladinami, přičemž E_0 je energie základního stavu, ze kterého již nemůže být žádná energie poli odebrána. Takže pole elektromagnetické, které je v základním stavu, existuje, nemá však k disposici žádné fotony pro výměnu.

Vycházejíce z kvantové představy o elektromagnetickém záření, vyjádříme nejprve vlastnosti pole, které interaguje s hmotným prostředím, vyměňuje s ním energii prostřednictvím elementárních procesů absorpce a emise, přičemž je v celé soustavě ustavena *termodynamická rovnováha.*

4.3.1 Pravděpodobnostní rozdělení počtu fotonů

Počet fotonů v elektromagnetickém poli (neboli energie pole) nemusí být přesně stanoven. V takovém případě se na počet fotonů (počet elementárních kvant energie, které mohou být vlně odebrány) díváme jako na náhodnou veličinu. Popisuje se pak statisticky, přesněji metodami statistické fyziky . Např. pomocí pravděpodobnostního rozdělení počtu fotonů $p_f(i)$, vyjadřujícího pravděpodobnost, že elektromagnetická vlna má energii $E_i = E_0 + ihf$. V podmínkách termodynamické rovnováhy může být pravděpodobnost výskytu kvantové soustavy na i-té hladině vyjádřena obdobně jako v části: 3.2.1, tj.

$$p(i) = \frac{1}{Z} \mathrm{e}^{-\frac{ihf}{kT}}. \tag{4.1}$$

Statistická suma Z je součtem geometrické posloupnosti s kvocientem $e^{-\frac{hf}{kT}}$:

$$Z = \frac{1}{1 - e^{-\frac{hf}{kT}}} \tag{4.2}$$

Pravděpodobnostní rozdělení $p(i)$ může být zapsáno ve tvaru:

$$p(i) = e^{-\frac{ihf}{kT}}(1 - e^{-\frac{hf}{kT}}). \tag{4.3}$$

Pravděpodobnostní rozdělení $p(i)$ je tedy monotonně klesající funkcí. Největší pravděpodobnost přísluší základnímu stavu ($i = 0$), tj. nulovému počtu fotonů.

4.3.2 Střední hodnota energie

Střední hodnota počtu fotonů $\bar{i}$ nebo energie $\bar{E_f}$ v daném módu je nenulová, lze ji snadno určit z právě odvozeného pravděpodobnostního rozdělení:

$$\begin{aligned}
\bar{E_f} &= \sum_i p(i) E_i, && (4.4)\\
&= \sum_i ihf e^{-\frac{ihf}{kT}}(1 - e^{-\frac{hf}{kT}}), && (4.5)\\
&= \frac{hf}{\left(e^{\frac{hf}{kT}} - 1\right)}, && (4.6)\\
&= hf.\bar{n_f}, && (4.7)
\end{aligned}$$

kde $\bar{n_f}$ je střední hodnota počtu fotonů v každé elektromagnetické vlně ve stavu termodynamické rovnováhy.

Obecně je však rovnovážné záření složeno z vln různých frekvencí, směrů šíření i polarizací. Ve volném prostoru je každá vlna stejně pravděpodobná. Rozlišujeme-li elektromagnetické záření jenom podle frekvence (bez ohledu na směr šíření a polarizaci), není již každá frekvence stejně pravděpodobná. Pravděpodobnost výskytu vlny s jistou frekvencí f je vyjádřena spektrální hustotou počtu elektromagnetických vln, definovanou jako počet vln spadajících do jednotkového intervalu frekvencí v okolí dané frekvence. Toto rozdělení lze opět odvodit na základě shora uvedených elementárních představ.

4.3.3 Spektrální hustota počtu elektromagnetických vln

Každá vlna ve volném prostoru je plně určena vlnovým vektorem $\vec{k}$ a polarizačním (jednotkovým) vektorem $\vec{i_p}$. Oba vektory jsou navzájem kolmé. Absolutní hodnota vlnového vektoru $k = |\vec{k}| = 2\pi f/c$. Počet vln s frekvencemi v intervalu $(f, f + df)$ je úměrný dvojnásobku *objemu kulové vrstvy o poloměru* k a tloušťce dk, tj. $8\pi k^2 dk = 8\pi(2\pi/c)^3 f^2 df$. Z uvedeného je zřejmé, že spektrální hustota počtu vln je úměrná druhé mocnině frekvence.

4.3.4 Spektrální hustota energie

Spektrální objemová hustota energie $u(f,T)$ záření (v termodynamické rovnováze s okolním prostředím na teplotě T) je tedy úměrná součinu spektrální hustoty počtu elektromagn. vln a střední hodnoty energie vlny v jednotce objemu:

$$u(f,T) = \frac{8\pi f^2}{c^3}\frac{hf}{(e^{\frac{hf}{kT}} - 1)}. \tag{4.8}$$

Fyzikální rozměr $u(f,T)$ je $\mathrm{Jm^{-3}s}$.

Vzorec, který byl právě uveden, je *Planckův zákon*. Při přepisu do závislosti na vlnových délkách s využitím relací $\lambda = c/f$, $d\lambda = (c/f)df$ má Planckův zákon tvar:

$$u(\lambda,T) = \frac{8\pi ch}{\lambda^5(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1)}. \tag{4.9}$$

Tato rozdělovací funkce dosahuje svého maxima při $\lambda = \lambda_{max}$. Poměrně snadno (prostřednictvím derivace vztahu) je možné ukázat, že platí: $\lambda_{max}T =$ konst.. (tzv. *Wienův zákon posunovací*), kde konst.. $= 2.896.10^{-3}$ mK. Což znamená například, že těleso nahřáté na 3 až 6 tisíc kelvinů vyzařuje rovnovážné záření s maximem v oblasti viditelných vlnových délek (bílý žár).

Celková energie $U(T)$ rovnovážného záření v jednotce objemu, kterou můžeme vypočíst integrací (4.8) přes celý definiční obor frekvencí:

$$U(T) = S.T^4, \tag{4.10}$$

kde $S = 7.56.10^{-16}\ \mathrm{JK^{-4}m^{-3}}$ vyjadřuje tzv. *Stefanův-Boltzmannův zákon.* . To znamená např., že při tepelné rovnováze na pokojové teplotě (300 K) je v 1 m^3 obsaženo cca 2.10^{-7} J energie v elektromagnetickém záření.

4.4 Einsteinovy součinitelé (koeficienty)

Ve stavu termodynamické rovnováhy dochází k neustálé vzájemné výměně energie mezi optickým zářením a kvantovými soustavami. Charakter výměny je však takový, že populace energetických hladin se nemění a její velikost je dána Boltzmannovým rozdělením a současně objemová spektrální hustota záření $u(f,T)$ je také neměnná a dána Planckovým zákonem viz rovnice (4.8). V zájmu jednoduchosti teoretického popisu interakce předpokládáme látku složenou ze stejných dvouhladinových kvantových soustav, s energetickými hladinami E_1, E_2 (přičemž $E_1 < E_2$). Úbytek dN_1 populace N_1 hladiny E_1 v důsledku *absorpce* je úměrný součinu délky intervalu času dt, populace N_1 a spektrální objemové hustoty $u(f,T)$ záření (pro f odpovídající rezonanční podmínce $f = (E_1 - E_2)/h$), takže rychlost změny populace dolní hladiny vyvolaná absorpcí je:

$$\frac{dN_1}{dt} = -B_{12}N_1u(f,T) \tag{4.11}$$

Součinitel B_{12} se nazývá *Einsteinovým součinitelem absorpce.* Protože předpokládáme jen dvouhladinové prostředí, musí být rychlost úbytku populace hladiny E_1 rovna současnému zvýšení populace hladiny E_2, tj.

$$\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{abs} = -\frac{dN_1}{dt} \tag{4.12}$$

Současně se však populace hladiny E_2 snižuje v důsledku *spontánní emise* a to rychlostí:

$$\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{spont} = -A_{21}N_2 \tag{4.13}$$

Tento člen nezávisí na vlastnostech přítomného záření a je úměrný populaci N_2 horní hladiny E_2. A_{21} je tzv. *Einsteinův součinitel* (koeficient) *spontánní emise*. Rychlost změny populace je ovlivněna též stimulovanou emisí a to:

$$\left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{stim} = -B_{21}N_2u(f,T), \qquad (4.14)$$

kde B_{21} je *Einsteinův součinitel* (koeficient) *stimulované emise*. Celková změna populace N_2 hladiny E_2 bude rovna:

$$\frac{dN_2}{dt} = \left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{abs} + \left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{spont} + \left(\frac{dN_2}{dt}\right)_{stin}, \qquad (4.15)$$

$$= B_{12}N_1u(f,T) - A_{21}N_2 - B_{21}N_2u(f,T). \qquad (4.16)$$

Vzhledem ke stavu termodynamické rovnováhy však musí být výsledná změna populace každé hladiny, tedy i N_2 nulová, takže:

$$B_{12}N_1u(f,T) = A_{21}N_2 + B_{21}N_2u(f,T). \qquad (4.17)$$

S ohledem na Boltzmannův zákon musí platit:

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{(E_2-E_1)}{kT}}. \qquad (4.18)$$

Takže na základě předešlého vztahu dostáváme:

$$B_{12}u(f,T) = (A_{21} + B_{21}u(f,T))e^{-\frac{(E_2-E_1)}{kT}}. \qquad (4.19)$$

Tato poslední rovnost musí mít obecnou platnost. Platí tedy i pro velmi velké hodnoty T, pro které je hodnota $u(f,T)$ mimořádně vysoká a exponenciála v posledním výrazu se blíží jedné. Z toho vyplývá rovnost $B_{12} = B_{21}$. Tj. Einsteinovy součinitelé absorpce a stimulované emise jsou si rovny. Za tohoto předpokladu pak z rovnice (4.19) plyne:

$$u(f,T) = \frac{\frac{A_{21}}{B_{21}}}{e^{\frac{hf}{kT}} - 1}. \qquad (4.20)$$

Uvážíme-li, že objemová spektrální hustota záření při termodynamické rovnováze je dána Planckovým zákonem, nejsou Einsteinovy součinitelé spontánní a stimulované emise nezávislými veličinami, ale platí:

$$A_{21} = \frac{8\pi hf^3}{c^3}B_{21}. \qquad (4.21)$$

Z toho je patrné, že poměr Einsteinova součinitele A_{21} spontánní emise k součiniteli stimulované emise B_{21} vzrůstá se třetí mocninou frekvence kvantového přechodu. Tato skutečnost se projevuje v kvantových zesilovačích tak, že zesilování záření s kratší vlnovou délkou je více zatěžováno šumy (spontánní emisí) zesilovače.

Příklady ke kapitole 4

4.1 Pro vybraný přechod v rentgenových vlnových délkách ($\lambda = 10$ nm) je pravděpodobnost přechodu (Einsteinův součinitel) za jednotku času $A_{21} = 10^6$ s^{-1}. Určete B_{21} pro tento přechod. Jaká musí být objemová hustota energie záření v rezonátoru, aby byla pravděpodobnost stimulovaného vyzáření třikrát větší než pravděpodobnost spontánního přechodu?

4.2 Platí-li, že $B_{21} = 10^9$ m^{3}J^{-1}s^{-1}, určete A_{21} a odpovídající dobu života $\tau_{21} = 1/A_{21}$ pro záření s vlnovou délkou $\lambda = 600$ nm (viditelná oblast); $\lambda = 6\,\mu$m (infračervená oblast); $\lambda = 60$ nm (ultrafialová oblast); $\lambda = 0,6$ nm (rentgenová oblast). Určete počet stimulovaných přechodů za jednotku času pro rovinnou vlnu s intenzitou $I = 10$ Wmm^{-2}.

4.4 Typický kontinuální CO_2 laser používá směs He, N_2 a CO_2 v poměru 8:1:1 a celkový tlak plynu při pokojové teplotě je 2 kPa. Výstupní výkon kontinuálního laseru při $\lambda = 10,6\,\mu$m z optimalizované CO_2 laserové trubice 1 cm v průměru a 1 m dlouhé je 50 W. Kolikrát za sekundu je při této hodnotě výstupního výkonu CO_2 molekula vzbuzena na horní laserovou úroveň a pak stimulovaně přechází na dolní laserovou úroveň? Relace mezi tlakem p a hustotou N v plynu je N(cm^{-3})$= 7,33 * 10^{16}p$(Pa)$/T$(K).

4.9 Kolikrát vzroste poměr spontánní ke stimulované emisi v záření černého tělesa, jestliže měřená vlnová délka klesne dvakrát? Vyjádřete fyzikální rozměry Einsteinových součinitelů spontánní a stimulované emise.

4.10 Jaká je pravděpodobnost spontánního přechodu, jestliže doba života na hladině je 100 ns, excitační energie je 2 eV a stavy tohoto dvouhladinového systému jsou nedegenerované?

4.11 Excitovaná molekula, která se nachází na rotační podhladině s energií 1 meV, je v systému v termodynamické rovnováze při teplotě 300 K. Vypočtěte poměr pravděpodobnosti stimulované a spontánní emise. Jaký je tento poměr pro excitovaný atom na úrovni s energií 4 eV?

4.12 Vyšetřete detailní průběh spektrální hustoty energie pro teploty 1000 a 10000 K a graficky znázorněte.

4.13 Vypočtěte plošnou hustotu zářivého toku tělesa ohřátého do červeného žáru.

Kapitola 5

Detekce optického záření

Detekce záření je zjišťování přítomnosti optického záření v daném místě a v daném čase. V elektromagnetickém poli radiových kmitočtů se na přítomnost elektromagnetického pole usuzuje z účinků elektrického pole elektromagnetické vlny na volné náboje (nosiče proudu ve vodivé anténě). Je-li frekvence vlny stejná jako rezonanční frekvence obvodu připojeného k anténě, přelévá se energie elektromagnetické vlny do kmitavého elektrického obvodu, obsahujícího indukčnosti a kondenzátory. Velikosti intenzity elektrického pole elektromagnetické vlny odpovídá např. napětí na kondenzátoru kmitavého obvodu. Anténa zajišťující účinné odsátí energie elektromagnetického pole a její přeměnu na energii elektrickou musí mít vhodný rozměr, bývá rovný polovině vlnové délky detekovaného záření.

V případě, že bychom chtěli tuto metodu tzv. *přímé detekce* extrapolovat pro optické vlny, pak by příslušná anténa měla mít rozměry zlomků mikrometrů a rezonanční obvod by měl být naladěn na frekvenci řádově 10^{15} Hz. V našem makrosvětě pomocí běžných elektronických prvků to však není realizovatelné.

Detektory optického záření jsou *detektory nepřímé* . Jsou založeny zpravidla na absorpci záření, tj. předání energie kvantovým soustavám, po které následuje přeměna vnitřní energie kvantové soustavy v jinou formu energie makroskopického systému (v němž se kvantová soustava nachází), nejčastěji