1. Atomok, molekulák, szilárd testek lehetséges energiaállapotai

Fény és anyag kölcsönhatásának klasszikus tárgyalása szerint a fény elektromágneses tere az anyag töltött részecskéivel vagy dipóljaival lép kölcsönhatásba, azokat gyorsítja vagy rezgésbe hozza. A gyorsuló illetve rezgõ töltések pedig fényt bocsátanak ki.

Az atomok, molekulák és szilárd testek a kvantummechanika segítségével meghatározható energiaállapotokkal rendelkeznek. Fénnyel való kölcsönhatásuk bizonyos esetekben a megengedett állapotok közötti átmenetet eredményezi. Ha a fénykvantum energiája az anyagban egy lehetséges energia-átmenet gerjesztésére elegendõ, akkor a fény elnyelõdhet. Fordított folyamat - fénykibocsátás - szintén lejátszódhat. Ha $T \neq 0$ és az anyag környezetével hõmérsékleti egyensúlyban van, termikus fénykibocsátás történik. A kibocsátott fény energiasûrûségének frekvencia-eloszlását ilyenkor a Planck-törvény írja le.

Fénykibocsátás akkor is lehetséges, ha valamilyen külsõ energiaforrás segítségével gerjesztjük az anyagot. A külsõ energiaforrás lehet fényforrás, elektromos kisülés, áram, kémiai reakció, stb. Az íly módon szelektíven gerjesztett anyag által kibocsátott fény frekvencia-eloszlását már nem a Planck-törvény írja le.

Bármely anyag atomokból épül fel. Az atomok elõfordulhatnak önállóan például egy ritka gázban, vagy más atomokkal kölcsönhatásban molekulát, folyadékot vagy szilárd testet hozhatnak létre. Az anyagot alkotó mikrorészecskék a kvantummechanika törvényszerûségeinek megfelelõen viselkednek. A mikrorészecskék "mozgásának" leírására, állapotainak meghatározására a kvantummechanika fogalomrendszerét kell használni.

1.1 Atomok lehetséges állapotai

A legegyszerûbb atom a H - atom, mely egy protonból és egy elektronból áll. H - szerû atomoknak nevezik azokat az atomokat, melyek Z protont és csak egy elektront tartalmaznak. Ezek lehetséges energiái:

$$E_n = -\frac{13{,}6Z^2}{n^2} \quad [\text{eV}], \tag{1}$$

ahol Z a protonszám, n = 1, 2, ... pozitív egész szám, az energia értéke pedig eV -ban értendõ. Az energia negatív, mert kötött állapotról van szó.

1 eV energiára tesz szert egy elektron 1 V feszültséggel gyorsítva. Mivel az elektron töltése $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ C, az energia értéke SI egységben $1{,}6 \cdot 10^{-19}$ J.

Több elektronnal rendelkezõ atom esetén csak jóval bonyolultabban adhatók meg a lehetséges energiaértékek, de minden atomra jellemzõ, hogy diszkrét energiaszintekkel rendelkezik, melyek távolsága tipikusan eV-os nagyságrendû.

1 eV - os energiájú foton vákuumbeli hullámhosszát megkapjuk, ha a fénysebesség és a Planck-állandó (h = 6,63 10^{-34} Js) értékének szorzatát elosztjuk a J - ban kifejezett energia értékével, vagyis jelen esetben ez megfelel 1,24 µm - nek.

1.2 Molekulaállapotok

Az atomokhoz hasonlóan tárgyalhatók a molekulák is, de mivel ezek több atom együtteséből állnak, figyelembe kell venni a molekula rezgéséből és forgásából eredõ hatásokat is.

Rezgési energia

A legegyszerûbb molekula két atomból áll. Ekkor a rezgés potenciális energiája, ha m_1 és m_2 jelöli az atomok tömegét és a kitérés az erõvel lineáris és x irányú,

$$V(x) = \frac{1}{2}\kappa x^2 \qquad (2)$$

alakban írható, ahol κ a rugóállandó. A lehetséges rezgési energiák megegyeznek a kvantummechanika egyik alapproblémájának, a harmonikus oszcillátornak az energiaértékeivel

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad \omega = \left(\frac{\kappa}{m_r}\right) \qquad (3)$$

$$v = 0, 1, 2 \ldots \quad \text{és} \quad m_r = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$$

ahol m_r a redukált tömeg, v a rezgési kvantumszám és ω a sajátfrekvencia. Érdemes megjegyezni, hogy a rotációs energiaszintek egymástól való távolsága mindig $\hbar\omega$. Így a κ rugóállandó a redukált tömeg ismeretében a rotációs vonalak távolságából meghatározható. Az oszcillátor legalacsonyabb energiája

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad (4)$$

a szintek távolságának fele és nem 0. Ez az energiaérték az ún. zérusponti energia. $\hbar\omega$ tipikus értéke molekuláknál 0,05 -0,5 eV, ami megfelel 2,5 - 25 µm hullámhossznak.

Többatomos molekula esetén többfajta rezgés is lehetséges különbözõ rugóállandóval.

Forgási energia

Megint a legegyszerûbbet, a kétatomos molekulákat példaként tekintve a forgási energia kvantummechanikai megfelelõje felírható a klasszikus forgási energia alapján

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1), \qquad J = 0, 1, 2 \ldots \qquad (5)$$

alakban, ahol I a molekula tehetetlenségi nyomatéka, az $J(J+1)$ pedig az impulzusmomentum lehetséges értékeibõl származtatható, vagyis J az impulzusmomentum kvantumszáma. A tipikus energiaértékek 0,001-0,01 eV tartományba esnek, ami hullámhosszban megfelel a távoli infravörös (100 µm - 1 mm) tartománynak.

A molekula teljes energiája

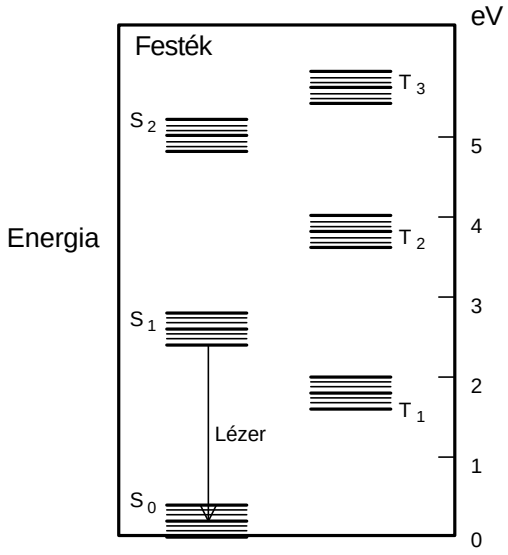
A molekula teljes energiája az elektron-, a rezgési és a forgásból eredõ energiák összege

$$E = E_e + E_v + E_r,$$

mivel az egyes tagok energiában igen különbözõ nagyságrendûek, ezért a molekula-átmenetek hullámhosszából következtetni lehet arra, hogy milyen típusú energia-átmenetrõl van szó.

Festékmolekula

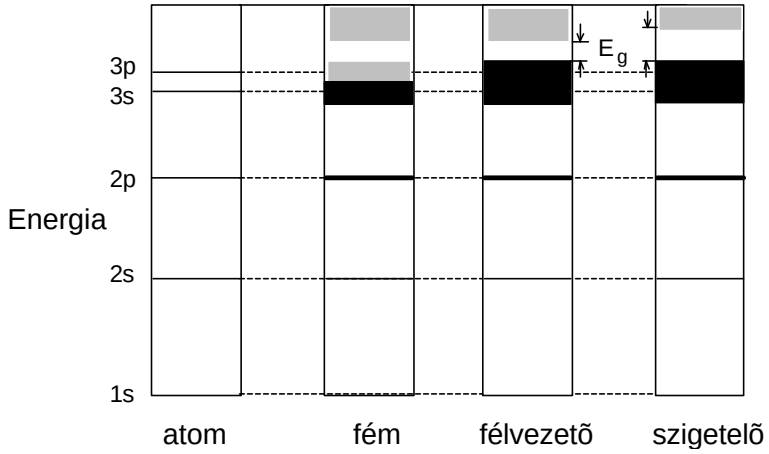
A szerves festékek nagy bonyolult molekulákból állnak, melyek elektronenergiái, rezgési és rotációs szintjei egymásra épülve a nagyon sok, egymáshoz közeli energiaszintbõl sávokat hoznak létre (1.1 ábra).



1.1 ábra Festékmolekulák jellemzõ energiái

1.3 Elektronállapototok szilárd testekben

Az atomok és molekulák diszkrét energiáitól eltérõen a szilárdtestben az eredeti atomi elektronszintek nagymértékben kiszélesednek. A kiszélesedés az iontörzstõl távolodva növekszik. A kiszélesedett, s ezért át is fedõ sávok betöltöttségének függvényében nagymértékben változó tulajdonságok miatt három típusú szilárdtestet szokás megkülönböztetni (1.2 ábra): fémet, félvezetõt és szigetelõt.

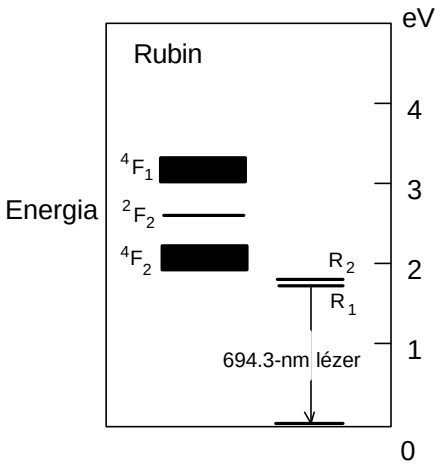


1.2 ábra Atomi diszkrét elektronszintek kiszélesedése sávokká.

Azok az anyagok, melyekben a legfelsõ energiasáv csak kis mértékben betöltött, s ezért elektronjaik szinte tetszõlegesen kis energiával gerjeszthetõk, a fémek. Azok az anyagok, amelyekben a legfelsõ energiasáv teljesen betöltött és a következõ sáv, mely 3 eV - nál közelebb van, $T = 0$ hõmérsékleten teljesen üres, a félvezetõk. Hasonlóan jellemezhetõk a szigetelõk, csakhogy ezeknél az üres sáv távolsága 3 eV - nál messzebb van. A legfelsõ betöltetlen, vagy részlegesen betöltött sáv a vezetési sáv. A teljesen betöltött legfelsõ sáv a vegyértéksáv. A kettõ távolsága a tiltott sáv, melynek energiaszélességét E_g - vel jelölik. *g* a gap (jelentése rés) angol szó kezdõbetûje.

A különbözõ típusú szilárdtest anyagok eltérõ tulajdonságát jól mutatja vezetõképességük nagymértékû eltérése. A vezetõképesség Ωcm - ben kifejezett tipikus értéke fémekben 10^6, félvezetõkben 10^{-6} - 10^3 és szigetelõkben 10^{-12}.

Szigetelõ típusú szilárdtest-lézer volt az elsõ mûködõ lézer is, a rubinlézer. A rubin krómmal szennyezett alumíniumoxid kristály. A lézermûködés szempontjából érdekes nívói az 1.3 ábrán láthatók.



1.3 ábra Rubin kristály sávjai és energiaszintjei.

A lézerátmenet a krómion közbülsõ diszkrét energiaszintjei között történik, míg a szilárd testeket jellemzõ sávok (az 1.3 ábrán $^4F_1$ és $^4F_2$) alkalmasak a lézerátmenet szélessávú gerjesztésére.

A két legismertebb félvezetõ anyag a Si és a GaAs. Tiltott sávjuk szélessége 1,11 eV (Si) és 1,42 eV (GaAs). A sávszélesség értékének alapján a Si látszik könnyebben gerjeszthetõnek. A tiltott sáv környéki lehetséges energiaállapotok részletesebb tanulmányozása alapján belátható, hogy a Si -ban a vezetési sáv és a vegyértéksáv között nem lehetséges foton kibocsátásával vagy elnyelésével kapcsolatos közvetlen átmenet, mivel az impulzus-megmaradás ezekre a folyamatokra nem tud teljesülni. (A Si indirekt sávú, a GaAs pedig direkt sávú félvezetõ.) Ezért a félvezetõ lézerek legfontosabb alapanyaga a GaAs és különbözõ módosulatai, mint pl. GaAlAs, InGaAs, GaAsP, InGaAsP stb.

2. Fény és anyag kölcsönhatása (fénykibocsátás, fényelnyelés)

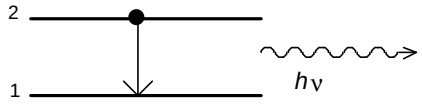
Az elektromágneses térrel való kölcsönhatás következtében egy anyagi részecske, legegyszerûbb esetben egy atom lehetséges energiaszintjei között fénykibocsátásos illetve fényelnyeléses átmenetek fordulhatnak elõ. Válasszuk ki egy atomnak két energiaállapotát, E_1 és E_2-t. Legyen az energiakülönbségnek megfelelõen a rezonanciafrekvencia ν_0, vagyis

$$h\nu_0 = E_2 - E_1. \qquad (6)$$

Három kölcsönhatási folyamat lehetséges: spontán emisszió, abszorpció és indukált emisszió.

2.1 Spontán emisszió

Amikor az atom a magasabb energiájú E_2 állapotból egy $n \approx n_0$ frekvenciájú foton kibocsátásával kerül az alacsonyabb energiájú E_1 állapotba, akkor spontán emisszióról beszélünk. A kibocsátott foton frekvenciájának legvalószínûbb értéke a n_0 frekvencia, de attól eltérõ is lehet, mivel az E_1 és E_2 energiaszintek csak a legvalószínûbb energiaértéket adják meg, a nívók nem végtelen keskenyek.



2.1 ábra Spontán emissziós fénykibocsátás folyamata.

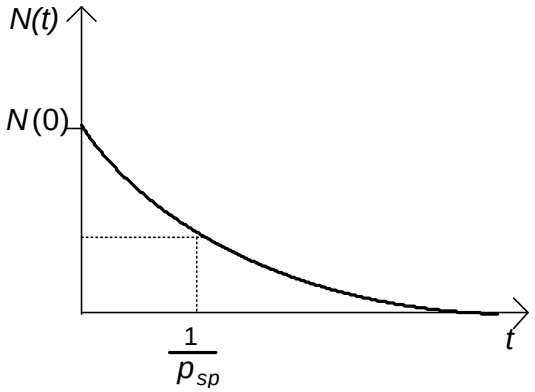
Ha a spontán emisszió valószínûsége egységnyi idõ alatt p_{sp}, akkor $p_{sp}\Delta t$ annak a valószínûsége, hogy a $[t, t + \Delta t]$ idõintervallumban ν frekvenciájú foton kibocsátása történik. Ha N az atomsûrûség (egységnyi térfogatban, dV-ben az atomok száma) a felsõ E_2 szinten, akkor spontán emisszióval

$$\Delta N = \left(p_{sp}\Delta t\right)N \qquad (7)$$

atom fog bomlani egységnyi térfogatban, a gerjesztett atomok számának változása pedig dV -ben

$$\frac{dN}{dt} = -p_{sp}N, \quad N(t) = N(0)e^{-p_{sp}t}. \tag{8}$$

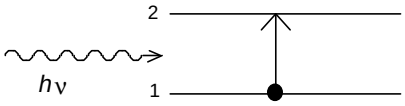
A gerjesztett atomok száma exponenciálisan csökken az $1/p_{sp}$ idõállandóval.



2.2 ábra A spontán emisszió a gerjesztett atomok számának exponenciális csökkenését okozza.

2.2 Abszorpció

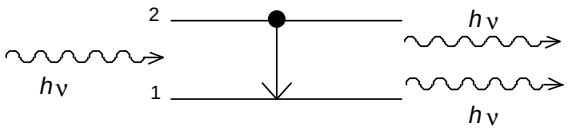
Abszorpció során az atom egy ν frekvenciájú foton hatására az E_1 állapotból az E_2 állapotba megy át, minek következtében a térben jelen lévõ ν frekvenciájú fotonok száma eggyel csökken.



2.3 ábra Az abszorpció folyamata.

2.3 Indukált emisszió

Az abszorpciós folyamat fordítottja. Egy ν frekvenciájú foton hatására egy ugyanolyan tulajdonságú "hasonmás" foton keletkezik, miközben az atom a magasabb energiájú E_2 állapotból az alacsonyabb energiájú E_1 állapotba kerül. A ”hasonmás” foton ugyanolyan energiájú, irányú, mint a beérkezett foton és az általa leírt elektromágneses hullám polarizációja és fázisa is megegyezik a beérkezõ foton által képviselt hullám megnevezett tulajdonságaival.



2.4 ábra Indukált emissziós fénykibocsátás folyamata.

Az indukált emissziós folyamat hozza létre a lézerek "nem közönséges tulajdonságú" fényét!!

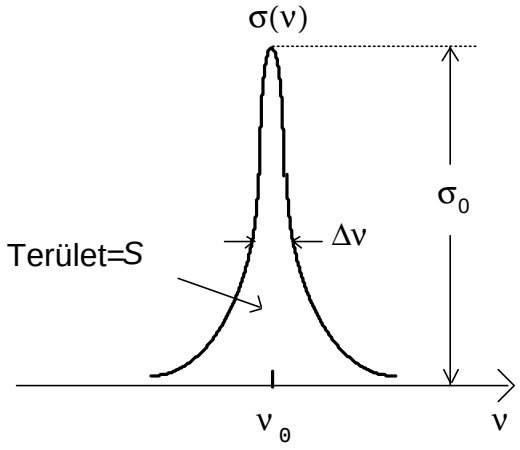
Az abszorpció és az indukált emisszió matematikai leírásához szükségünk van egy új fogalom, a fluxussûrûség bevezetéséhez. Tekintsük az atom kölcsönhatását egy csupa ν frekvenciájú fotonokból álló (monokromatikus) nyalábbal! Jellemezzük a fotonnyalábot a ν frekvencián kívül az I intenzitásával. (Az intenzitás az egységnyi felületre beesõ fényteljesítmény.) Vezessük be az egységnyi felületre, egységnyi idõ alatt beesõ fotonszámot, a fluxussûrûséget, mely az intenzitással definíció szerint a következõ kapcsolatban van:

$$\Phi = \frac{I}{h\nu}. \qquad (9)$$

Az indukált emisszió vagy az abszorpció egységnyi idõ alatti valószínûségét, W_i-t a következõképpen írhatjuk le:

$$W_i = \Phi\, s(\nu). \qquad (10)$$

ahol $s(\nu)$ az anyagi részecske kiválasztott átmenetéhez rendelhetõ, frekvencia-függõ, felület dimenziójú mennyiség, a hatáskeresztmetszet. Egységnyi idõ alatt annyi indukált emisszió vagy abszorpció játszódik le, ahány fotont „fog be” az anyagi részecske a fotonnyalábból. A hatáskeresztmetszet rezonancia jellegû frekvencia-függvény. Jellemzése lehetséges maximális értékével $s(\nu_0) = s_0$-lal, félérték-szélességével $\Delta\nu$ - vel és a görbe alatti S területtel (2.5 ábra).



2.5 ábra Frekvenciafüggõ hatáskeresztmetszet jellemzése.

W_i annál nagyobb, minél nagyobb a fluxussûrûség és a hatáskeresztmetszet. $\sigma(\nu)$ tehát az atomhoz rendelhetõ hatásos felület, melyen ha a foton áthalad, biztosan bekövetkezik az indukált emisszió vagy az abszorpció folyamata.

2.4 Homogén és inhomogén rendszerek hatáskeresztmetszete

A frekvenciafüggõ hatáskeresztmetszet szabja meg, hogy az anyag kiválasztott átmenete milyen $\Delta\nu$ tartományban képes abszorpcióra ill. emisszióra. A különbözõ anyagformák esetében a frekvenciafüggvény alakja és $\Delta\nu$ szélessége változik.

Az anyagi rendszerek a fénnyel való emissziós és abszorpciós kölcsönhatások szempontjából két csoportra oszthatók. Vannak olyan rendszerek, melyeknek a kölcsönhatásban résztvevõ atomjai, vagy molekulái mind azonosan viselkednek, ezeket homogén típusú rendszereknek nevezik, és vannak olyanok, melyeknél atom- ill. molekulacsoportok különbözõképpen viselkednek, s így a teljes kölcsönható rendszer csak egy átlagos frekvencia-kiszélesedéssel jellemezhetõ. Ezek az inhomogén típusú rendszerek.

A homogén rendszerek hatáskeresztmetszetének frekvenciafüggése a Lorentz-függvénnyel adható meg:

$$s(\nu) = konst. * \frac{\Delta\nu / 2\pi}{(\nu - \nu_o)^2 + (\Delta\nu / 2)^2} \qquad (11)$$

ahol $\Delta\nu$ a maximum felénél a Lorentz - görbe szélességének értéke. Homogén viselkedést eredményez az anyagi rendszerekben:

- a gerjesztett energiaszintek véges élettartama (a gerjesztés egy idõ után „lecseng”, a rendszer visszatér a gerjesztés elõtti egyensúlyi állapotába) miatt fellépõ kiszélesedés, amit természetes vonalszélességnek neveznek, tipikus nagysága 10-20 MHz;
- gázokban a nyomás növekedésével gyakoribbá váló ütközés miatti kiszélesedés, tipikus értéke 5-10 MHz / torr (760 torr = 1 atm);
- kristályokban a hõmérséklet növekedésével egyre effektívebbé váló rezgés.

Az inhomogén rendszerek hatáskeresztmetszetének frekvenciafüggése Gauss-függvénnyel adható meg:

$$s(\nu) = \underbrace{konst. * \frac{c}{\nu_o}\left(\frac{M}{2\pi hT}\right)}_{\max imum = \nu_o} \exp\left\{-\frac{Mc^2}{2k_B T}\frac{(\nu - \nu_o)^2}{\nu_o^2}\right\} \qquad (12)$$

ahol *M* a részecske tömege, *h* a Planck-állandó, *c* a fénysebesség vákuumban, *T* az abszolút hõmérséklet, k_B a Boltzmann-állandó.

Inhomogén viselkedést eredményez gázokban a mozgó részecskék fényirányú eltérõ sebessége (Doppler-hatás), vagy szilárd testekben az adalék eltérõ környezete (az adalékatom, vagy –ion átmenete a lézerátmenet). Az inhomogén kiszélesedést is szokás a maximális érték felénél felvett frekvenciakülönbség értékével (félértékszélesség) jellemezni. Számítsuk ki a (12) alapján:

$$\frac{1}{2} = \exp\left\{ -\frac{Mc^2}{2k_b T} \frac{(\nu_{1/2} - \nu_o)^2}{\nu_o^2} \right\} 1 - en \tag{13}$$

$$\nu_{1/2} - \nu_o = \nu_o \left(\frac{2k_b T \ln 2}{M_c^2} \right) 1/2$$

$$\Delta\nu_{inhomogén} = \underbrace{2(\nu_{1/2} - \nu_o)}_{a\ szimmetria miatt} = \frac{2\nu_o}{c} \left(\frac{2k_b T \ln 2}{Mc^2} \right)^{1/2} = \frac{2}{l} \left(\frac{2k_b T \ln 2}{Mc^2} \right)^{1/2}$$

(13) alapján látható, hogy a kiszélesedés fordítottan arányos az átmenet hullámhosszával és a részecskék tömegének négyzetgyökével. Ezért infravörös tartományban és molekulák esetén (pl. CO_2 lézer 10,6 μm-es hullámhosszán) nagyságrendekkel kisebb az inhomogén kiszélesedés mértéke.

2.5 Különbözõ lézerközegek jellemzõ kiszélesedései

Elsõnek számítsuk ki a He-Ne lézer leggyakoribb, λ =0,6328 μm - es átmenetének (Ne atomok átmenete) inhomogén kiszélesedését. Tételezzük fel, hogy a He-Ne gázkisülésben a kialakuló egyensúlyi hõmérséklet 400 K. További adatok:

$$M_{Ne} = \frac{20\text{g}}{6 \cdot 10^{23}} \quad k = 1{,}38 \cdot 10^{23}\,\text{JK}^{-1} \tag{14}$$

$$h = 6{,}63 \cdot 10^{-34}\,\text{Js}$$

$$\Delta\nu_{inhomogén} = \frac{2}{0{,}6328.10^{-6}} \left(\frac{2.1{,}38 10^{-23}.3 10^2.\ln 2.6 10^{23}}{2.10^{-2}} \right)^{1/2}$$

$$\Delta\nu_{ih}^{Ne} = 1{,}5.10^9\,Hz = \underline{1{,}5\,GHz}$$

A következõ táblázatban különbözõ lézerközegek jellemzõ kiszélesedéseit gyûjtöttük össze.

	Tipus	Gáz	Folyadék	Szilárdtest
Homo-gén	természetes	1 kHz - 10 MHz	elhanyagolható	elhanyagolható
	ütközési	5 - 10 MHz/torr	9 THz	-
	kristályráccsal kölcsönh.	-	-	300 GHz (300K)
Inho-mogén	Doppler	50 MHz - 1 GHz	elhanyagolható	-
	lokális tér	-	15 THz	30 GHz - 15 THz