

1. JOHDANTO

LASER

(Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation)

on laite, joka/jonka

- tuottaa ja vahvistaa voimakkaan yhdensuuntaisen ja monokromaattisen valosädekimpun
- koko: tuskin paljain silmin havaittava – "talon kokoinen"
- teho: 10^{-9} – 10^{20} W
- aallonpituus: mikroaallot – röntgensäteet, 10^{11} – 10^{17} Hz
- jatkuvatoiminen tai pulsseittain säteilevä (jopa 10^4 J / pulssi ja jopa 6×10^{-15} s)
- käyttö: valonlähde, työstö, elektroniikka, lämpökäsittelyt, kirurgia, etäisyyden mittaaminen (tutka), tiedon luku, tallennus ja siirto jne.

Laservalon ominaisuudet:

- koherenssi
- monokromaattisuus
- yhdensuuntaisuus
- suuri tehoteho
- aallonpituudet (nykyisin): kaukainen IR – pehmeä röntgen

HISTORIAA

- Charles Townes: MASER mikroaalloilla (1.25 cm), NH_3
- Townes ja Schawlow 1958: LASERin idea
⇒ Nobel palkinto v.
- Theodore Maiman 1960: ensimmäinen LASER rubiinikiteen ja salamavalon avulla
- Javan, Bennett ja Harriot 1961: He–Ne-laser
- Johnson ja Nassau: Nd-laser
- Hall 1962: puolijohdelaser
- Patel 1963: CO_2 -laser
- Bell 1963: Hg-ionilaser
- Bridges 1964: Ar-ionilaser
- Silfvast W., Fowles ja Hopkins: sininen He–Cd-metallihörylaser
- Sorokin ja Lankard: 1. nestelaser (väriainelaser)
- Walter et al.: Cu-hörylaser
- Hodgson
• Waynant 1970: VUV-laser (excimer)
- Ewing ja Brau 1975: XeF
- Van der Ziel et al. 1975: GaAs-kvanttikaivolaser
- Madey et al. 1976: vapaaelektronilaser
- Walling et al. 1979: viritettävä aleksandriitti
- Matthews et al. 1985: pehmeä röntgensädelaser

OSA I VALO AALLOT

2. VALON AALTOLUONNE

Pääkohdat:

- Maxwellin yhtälöt ja aaltoyhtälö
- vaihenopeus ja ryhmänopeus
- valon polarisaatio
- aineen optiset "vakiot"
- valon koherenssi

2.1. MAXWELLIN YHTÄLÖT

V. 1865 James Clerk Maxwell kokosi yhteen ja täydensi sähkö- ja magneettikenttiin liittyviä tunnettuja lainalaisuuksia (Gauss, Biot–Savart, Ampere ja Faraday), joiden avulla hän ennusti sähkömagneettisten aaltojen etenemisen. Nämä lait ovat ns. [Maxwellin yhtälöt](#). V. 1887 Heinrich Hertz onnistui tuottamaan ja havaitsemaan Maxwellin ennustamat aallot laboratorio-olosuhteissa.

Maxwellin yhtälöistä voidaan johtaa sm aaltojen etenemisnopeus $(\mu\epsilon)^{-1/2}$. Tyhjiössä se riippuu vain luonnonvakioista $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$ F/m ja $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}$ H/m. Suureen $1 / (\epsilon_0 \mu_0)^{1/2}$ oli jo aikaisemmin havaittu olevan suuruudeltaan mitatun valonnopeuden luokkaa, minkä Maxwell tiesikin etukäteen.

Kun tarkastellaan sm ilmiöitä väliaineessa, kuvataan niitä (makroskooppisilla) suureilla

(1) (vapaa) [varaustiheys](#) ρ

(2) [sähköinen polarisoituvuus](#) \mathbf{P}

(3) [magnetoituvuus](#) \mathbf{M}

(4) [virrantiheys](#) \mathbf{J}

Eräitä tarpeellisia sm statiikan ja dynamiikan lakeja ovat sähkö- ja magneettikentissä \mathbf{E} ja \mathbf{B} nopeudella \mathbf{v} liikkuvaan varaukseen q kohdistuva [Lorentz-voima](#)

$$(5) \quad \mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (2.1)$$

ja sähkökentän \mathbf{E} aiheuttama virrantiheys väliaineessa, jossa johtavuus on σ

$$(6) \quad \mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}, \quad (2.2)$$

joka on [Ohmin laki](#).

[Sähkövuon tiheys](#) (engl. electric displacement)

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}, \quad (2.3)$$

on tyhjiössä

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (2.4)$$

ja isotrooppisessa väliaineessa

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \quad (2.5)$$

Edellinen voidaan kirjoittaa myös

$$\mathbf{P} = (\epsilon - \epsilon_0) \mathbf{E} = \chi \epsilon_0 \mathbf{E}, \quad (2.6)$$

joten [sähköinen susceptibiliteetti](#) (engl. electric susceptibility)

$$\chi = \epsilon / \epsilon_0 - 1. \quad (2.7)$$

Isotrooppisten aineiden χ ja ϵ ovat skalaareja, mutta yleisemässä tapauksessa ne ovat tensoreita. Jos aineen susceptibiliteetti χ yhtälössä (2.6) riippuu sähkökentän voimakkuudesta \mathbf{E} , on sillä ns. epälineaarisia optisia ominaisuuksia. Tällöin voidaan polarisoituvuus esittää sähkökentän sarjakehitelmänä.

Samoin kuin edellä sähkökentälle voidaan myös magneettikentälle (**magneettivuon tiheydelle**) kirjoittaa

$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}), \quad (2.8)$$

missä \mathbf{H} on **magneettikentän voimakkuus**. Tyhjiössä

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \quad (2.9)$$

ja magneettisesti isotrooppisessa väliaineessa

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}. \quad (2.10)$$

Maxwellin yhtälöt ovat

Gauss

$$\oint \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S} = \int \rho \, dr = Q \quad (2.11)$$

Gauss

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0 \quad (2.15a)$$

Faraday

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\boldsymbol{\ell} = -\frac{d}{dt} \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \quad (2.18)$$

Ampere-
Maxwell

$$\oint \mathbf{H} \cdot d\boldsymbol{\ell} = \int \left(\mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \right) \cdot d\mathbf{S} \quad (2.16)$$

Biot–Savartin laki voidaan kirjoittaa yleisessä muodossa

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \mathbf{J}(\mathbf{V}) \times \frac{\mathbf{r}}{r^3} \, dV \quad (2.13)$$

tai

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \nabla \times \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{V})}{r} \, dV, \quad (2.14)$$

josta $\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0$ (2.15a) seuraa.

Maxwellin yhtälöt differentiaalimuodossa ovat

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (2.12)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.15)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.19)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.17)$$

ja Biot–Savartin laki voidaan kirjoittaa vastaavasti

$$d\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{I \, d\boldsymbol{\ell} \times \hat{\mathbf{r}}}{r^2}, \quad (2.13a)$$

missä I on ℓ :n suuntainen virta.

2.2. AALTOYHTÄLÖT

AALTOYHTÄLÖT TYHJIÖSSÄ

Tyhjiössä tulevat Maxwellin yhtälöt muotoon

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0, \quad (2.20)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (2.21)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.22)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \quad (2.23)$$

ja

Nyt

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (2.26)$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} \quad (2.27)$$

ja

YLEISEN AALTOYHTÄLÖN RATKAISU

Ratkaistaan aaltoyhtälö yksiulotteisessa tapauksessa

$$\frac{d^2 \mathbf{E}}{dz^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (2.29)$$

yritteellä

$$\mathbf{E}(z,t) = \mathbf{E}_z(z) \mathbf{E}_t(t). \quad (2.30)$$

Tällöin saadaan

$$\mathbf{E}_t \frac{d^2 \mathbf{E}_z}{dz^2} = \frac{\mathbf{E}_z}{v^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_t}{\partial t^2} \quad (2.31)$$

ja

$$\mathbf{E}(z,t) = C e^{\pm i(k_z z - \omega t + \delta)}, \quad (2.38)$$

missä tasoaallon (2.38) aaltovektori (z-komp.) on

$$k_z = \omega / v. \quad (2.39)$$

Aallonpituus

$$\lambda = v / \nu = v / (\omega/2\pi) = 2\pi v / \omega \quad (2.40)$$

ja

$$k_z = 2\pi / \lambda. \quad (2.41)$$

Edellä oleva tarkastelu voidaan yleistää vektorikentille $\mathbf{E}(x,y,z,t)$ ja $\mathbf{H}(x,y,z,t)$.

VAIHE- JA RYHMÄNOPEUDET

Lauseketta

$$\phi = k_z z - \omega t + \delta \quad (2.42)$$

yhtälössä (2.38) sanotaan aallon **vaiheeksi**. Jos ajan t muuttuessa vaihe on vakio, seurataan silloin aallon vaiheen (aalto-muodon) etenemistä, jolle

$$k_t \frac{dz}{dt} - \omega = 0. \quad (2.43)$$

Vaihenopeus (engl. phase velocity) on tällöin

$$V_{\text{phase}} = \frac{dz}{dt} = \frac{\omega}{k_z}. \quad (2.44)$$

Yhtälöitä (2.26) ja (2.29) vertaamalla nähdään, että $\mu_0 \epsilon_0 = 1/v^2$ ja sm aallon vaihenopeus on

$$v = (\mu_0 \epsilon_0)^{-1/2} = 2.99792 \times 10^8 \text{ m/s} = c.$$

Etenevän aallon **ryhmänopeudeksi** sanotaan lauseketta

$$V_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk}. \quad (2.45)$$

Yksinkertaisessa tapauksessa, yht. (2.40) ja (2.41), $V_{\text{group}} = V_{\text{phase}}$, jolloin väliaineessa ei tapahdu valon **dispersiota**. Sm **aallon energia (ja informaatio) kulkevat ryhmänopeudella**.

AALTOYHTÄLÖN YLEINEN RATKAISU

Aaltoyhtälön (2.26) ratkaisu (2.38) voidaan kirjoittaa 3-dimensioisessa muodossa

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}(x,y,z,t) = C e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t + \delta)}, \quad (2.47)$$

missä $\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{i}} + k_y \hat{\mathbf{j}} + k_z \hat{\mathbf{k}}$ on **aaltovektori** ja $\mathbf{r} = x \hat{\mathbf{i}} + y \hat{\mathbf{j}} + z \hat{\mathbf{k}}$ on radius- eli paikkavektori. Aallon vaihenopeus on

$$v = c = 1 / (\mu_0 \epsilon_0) = 2.99792 \times 10^8 \text{ m/s}. \quad (2.49)$$

POLARISAATIO

Yhtälön (2.20) mukaan $0 = \nabla \cdot \mathbf{E} = i \mathbf{k} \cdot \mathbf{E}$, joten

$$i \mathbf{k} \cdot \mathbf{E} = 0.$$

Siten $\mathbf{E} \perp \mathbf{k}$ ja samoin $\mathbf{H} \perp \mathbf{k}$, joten **sm aallot ovat poikittaisia aaltoja**. Siksi z-akselin suuntaan etenevä aalto voidaan jakaa kahteen komponenttiinsa

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i(k_z z - \omega t)} \quad (2.50)$$

$$= E_{0x} \hat{\mathbf{i}} e^{-i(k_z z - \omega t)} + E_{0y} \hat{\mathbf{j}} e^{-i(k_z z - \omega t + \phi)}. \quad (2.51)$$

Jos $\phi = 0$, on kyseessä **lineaarisesti polarisoitunut** aalto.

ENERGIAN SIIRTYMINEN SM AALLON MUKANA

Poyntingin vektori

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} \quad (2.52)$$

antaa sm aallon mukana siirtyvän tehon, $[\mathbf{S}] = \text{W/m}^2$. Sen aikakeskiarvo on

$$\langle \mathbf{S} \rangle = 1/2 \mathbf{E}_0 \times \mathbf{H}_0. \quad (2.53)$$

PISTEMÄISEN DIPOLIN SÄTEILY

Värähtelevän pistemäisen dipolin sähkökenttä on

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (2.54)$$

missä \mathbf{A} on vektoripotentiali ja skalaaripotentiali on

$$\phi = e^{i\omega t} \int \rho \frac{e^{-ikr}}{r} dV \quad (2.55)$$

ja ρ on värähtelevä varaustiheys.

2.3. VALON JA AINEEN VUOROVAIKUTUS

VALONNOPEUS VÄLIAINEESSA

Tarkastellaan läpinäkyvää väliainetta, jossa valo etenee Maxwellin yhtälöiden mukaisesti nopeudella $v = (\mu\varepsilon)^{-1/2}$. Väliainetta kuvaavat suureet μ ja ε vastaavat tyhjiön vakioita μ_0 ja ε_0 , ja suhteellinen permittiivisyys määritellään

$$K = \varepsilon / \varepsilon_0 \quad (2.56)$$

ja suhteellinen permeabiliteetti taas

$$K_m = \mu / \mu_0. \quad (2.57)$$

Siten

$$v = (\mu\varepsilon)^{-1/2} = c (K_m K)^{-1/2}. \quad (2.58)$$

Taitekerroin (engl. index of refraction) määritellään

$$\eta = c / v = (K_m K)^{1/2}. \quad (2.59)$$

Jos väliaine ei ole magneettista (mikä on tavallista), niin $K_m = 1$ ja

$$\eta = K^{1/2}. \quad (2.60)$$

AALTOYHTÄLÖ VÄLIAINEESSA

Tarkastellaan Maxwellin yhtälöitä väliaineessa, jossa $\mathbf{M} = 0$.

Tällöin ne voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \rho - \nabla \cdot \mathbf{P}, \quad (2.61)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0, \quad (2.62)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} \quad (2.63)$$

ja

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \quad (2.64)$$

Aaltoyhtälö saadaan nyt samoin kuin edellä

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} - \mu_0 \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t}. \quad (2.65)$$

Yhtälön oikealla puolella olevat ns. lähdetermit aiheutuvat väliaineen polarisoituvuudesta ja sähkövirrasta. Edellinen "selittää" eristeaineiden optiset ominaisuudet: dispersio, absorptio, jne. ja jälkimmäinen metallien ominaisuuksia, mm. heijastavuuden. **Puolijohteiden tapauksessa molemmat termit ovat merkittäviä.**

ERISTE – TYYPILLINEN LASERVÄLIAINE

Väliaine, jossa laservahvistus tapahtuu, on tyypillisesti eriste. Tarkastellaan valon ja tällaisen väliaineen vuorovaikutusta klassillisen mallin ja materiaalia kuvaavien makroskooppisten suureiden ns. **optisten vakioiden** avulla.

Oletetaan, että väliaine on isotrooppinen ja polarisoituva ja että

$$\mathbf{P} = -N e \mathbf{x}, \quad (2.66)$$

missä $-e$ on vektorin \mathbf{x} verran poikkeutettu varaus ja N on varauksien tiheys. Jos poikkeaman aiheuttaa sähkökenttä \mathbf{E} ja palauttava voima on harmoninen voimavakiolla k , niin

$$-e \mathbf{E} = k \mathbf{x}. \quad (2.67)$$

Tällöin staattisessa sähkökentässä

$$\mathbf{P} = (N e^2 / k) \mathbf{E}. \quad (2.68)$$

Mikäli sähkökenttä ei ole staattinen vaan riippuu ajasta, on otettava huomioon varaukseen liittyvän massan m dynamiikka. Sen liikeyhtälöksi tulee

$$m \frac{d^2 \mathbf{x}}{dt^2} + m \gamma \frac{d \mathbf{x}}{dt} + k \mathbf{x} = -e \mathbf{E}, \quad (2.69)$$

missä γ on liikkeen **vaimenemis-**
kerroin.

Polarisaation **vaimenemisaika**
(engl. polarization decay time) on

$$\tau = 1 / \gamma.$$

Oletetaan, että sähkökenttä on $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$, jolloin varauksen liikettä kuvaa $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 e^{-i\omega t}$. Sijoittamalla nämä yhtälöön (2.69) saadaan

$$(-m\omega^2 - i \omega m \gamma + k) \mathbf{x} = -e \mathbf{E} \quad (2.70)$$

ja polarisaation lausekkeesta (2.66) seuraa

$$\mathbf{P} = \frac{N e^2}{-m\omega^2 - i \omega m \gamma + k} \mathbf{E}. \quad (2.71)$$

Kun $\omega \rightarrow 0$, saadaan tästä staattinen polarisaatio (2.68).

Lähellä resonanssitaajuutta

$$\omega_0 = (k/m)^{1/2} = 2\pi\nu_0 \quad (2.72)$$

polarisaatiolla ja kentällä on vaihe-ero, vrt. pakotettu harmoninen oskillaattori. Resonanssitaajuuden avulla polarisaatio voidaan kirjoittaa muotoon

$$\mathbf{P} = \frac{N e^2 / m}{\omega_0^2 - \omega^2 - i \omega \gamma} \mathbf{E}. \quad (2.73)$$

Valon ja aineen vuorovaikutuksen klassisessa kuvauksessa on oleellista se kuinka varaukset voivat "liikkua" aineessa, parametrit k ja m edellä. Siitä määräytyvät sekä optiset vakiot että absorptio-ominaisuudet.

Sijoittamalla saatu polarisaation lauseke aaltoyhtälöön (2.65) sekä ottamalla huomioon se, että eristeelle $\mathbf{J} = \nabla \cdot \mathbf{D} = 0$, joten $\nabla \cdot \mathbf{P} = \nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ ja $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -\nabla^2 \mathbf{E}$, saadaan

$$\nabla^2 \mathbf{E} = \frac{1}{c^2} \left(1 + \frac{N e^2}{m} \left[\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i \omega \gamma} \right] \right) \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2}. \quad (2.75)$$

KOMPLEKSIINEN TAITEKERROIN JA OPTISET VAKIOT

Ratkaistaan aaltoyhtälö (2.75) yritteellä

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(Kz - \omega t)}, \quad (2.76)$$

missä K on kompleksinen aaltovektori. Tämä yrite on ratkaisu, jos

$$K^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + \frac{N e^2}{m \epsilon_0} \left[\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i \omega \gamma} \right] \right). \quad (2.77)$$

Kun kompleksinen aaltovektori kirjoitetaan muotoon

$$K = k + i \alpha_E, \quad (2.78)$$

niin imaginääriosaa α_E , ns. ekstinktiokerroin (engl. extinction index) kuvaa absorptiota etenevässä aallossa

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-\alpha_E z} e^{i(kz - \omega t)}. \quad (2.79)$$

Koska aallon intensiteetti E^2 vaimenee kuten $e^{-2\alpha_E z}$ on absorptiokerroin

$$\alpha = 2 \alpha_E \quad (2.80)$$

ja vastaavasti absorptiopituus

$$l_d = 1 / \alpha.$$

Koska $\eta = c / v = ck / \omega$, tulee myös taitekertoimesta kompleksinen

$$N = \eta + i \kappa = c/\omega K. \quad (2.81)$$

Niinpä

$$\alpha_E = \omega/c \kappa \quad (2.83)$$

ja

$$\alpha = 2 \alpha_E = 4\pi \kappa/\lambda. \quad (2.84)$$

Koska $K^2 = \omega^2/c^2 N^2$, saadaan kompleksisen aaltovektorin lausekkeesta (2.77) yhtälö

$$(\eta - i\kappa)^2 = 1 + \frac{N e^2}{m\epsilon_0} \left[\frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i \omega \gamma} \right]. \quad (2.86)$$

josta merkitsemällä reaaliosat samoiksi

$$\eta^2 - \kappa^2 = 1 + \frac{N e^2}{m\epsilon_0} \left[\frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - \gamma^2 \omega^2} \right] \quad (2.87)$$

ja vastaavasti imaginääriosat

$$2\eta\kappa = \frac{N e^2}{m\epsilon_0} \left[\frac{\gamma \omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - \gamma^2 \omega^2} \right]. \quad (2.88)$$

Edellä olevista yhtälöistä voidaan optiset vakiot η ja κ ratkaista.

Yleensä aineen polarisaatiosta vastaavilla elektroneilla on useita resonanssitaajuuksia, joilla on "suhteelliset vahvuudet" f_j (engl. oscillator strength) siten, että $\sum_j f_j = 1$. Tällöin

$$N^2 = 1 + \frac{N e^2}{m\epsilon_0} \sum_j \left[\frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i \omega \gamma_j} \right] \quad (2.89)$$

ja jos absorptio on vähäistä, $\gamma_j \approx 0$, ja

$$N^2 \approx \eta^2 = 1 + \frac{N e^2}{m\epsilon_0} \sum_j \left[\frac{f_j}{\omega_j^2 - \omega^2} \right]. \quad (2.90)$$

Tämä on ns. Sellmeierin yhtälön eräs muoto.

2.4. KOHERENSSI

Tarkastellaan kahden lähes samanlaisen aallon

$$E_1 = E_1^0 e^{-i(k_1 z - \omega_1 t)} \quad (2.91)$$

ja

$$E_2 = E_2^0 e^{-i(k_2 z - \omega_2 t + \delta)} \quad (2.92)$$

interferenssiä. Niiden superpositio on

$$E = E_1^0 e^{-i(k_1 z - \omega_1 t)} + E_2^0 e^{-i(k_2 z - \omega_2 t + \delta)} \quad (2.93)$$

ja intensiteetti

$$I = E^2 = (E_1^0)^2 + (E_2^0)^2 + 2 E_1^0 E_2^0 \cos\theta, \quad (2.94)$$

missä

$$\theta = (k_1 - k_2) z + (\omega_1 - \omega_2) t + \delta. \quad (2.95)$$

Jos $k_1 \approx k_2$ ja $\omega_1 \approx \omega_2$, θ vaihtelee "riittävän" hitaasti ja superpositioaallon ääriarvot ovat

$$I = I_1 + I_2 \pm 2 E_1^0 E_2^0 \quad (2.96)$$

ja aaltojen sanotaan olevan **koherentteja**. Mikäli aallot eivät ole koherentteja, vaan **epäkoherentteja**, niin

$$I = I_1 + I_2 \quad (2.97)$$

Koherenssi voi olla myös osittaista ja aikakeskiarvoa

$$\gamma = |\langle \cos\theta \rangle|$$

sanotaan **koherenssiasteeksi**.

Täydellinen koherenssi $\gamma = 1$,
osittainen koherenssi $0 < \gamma < 1$ ja
täydellinen epäkoherenssi $\gamma = 0$.

Laservalon fotonit ovat samassa vaiheessa stimuloitun emission liipaisun vuoksi. Käytännössä ei laserlähdekään emittoi äärettömän pitkää ja stabiilia sm aaltoa, ja lisäksi lähteen äärellinen koko aiheuttaa epäkoherenssiä.

PITKITTÄINEN KOHERENSSI (longitudinal, temporal)

Koherenssipituus ℓ_c

on se matka jolla kaksi samassa vaiheessa olevaa aaltoa ($\Delta\lambda = \lambda_2 - \lambda_1$) tulevat vastakkaisiin vaiheisiin. Siten

$$\ell_c = \lambda \lambda / \Delta\lambda = \lambda^2 / \Delta\lambda. \quad (2.98)$$

Koherenssipituus on tavallaan laserin emittoimien aaltopakettien, fotonien, pituus. **Koherenssiaika** on

$$t_c = \ell_c / c.$$

Pitkittäistä koherenssiä sanotaan myös ajalliseksi koherenssiksi.

POIKITTAINEN KOHERENSSI (transverse, spatial, lateral)

Poikittaista koherenssiä kuvaa se havaintopisteiden etäisyys ℓ_t , jolla kahden etäisyydeltä s (lähteen koko) lähteneen koherentin aallon konstruktii- vinen interferenssi häviää. Siten

$$\ell_t = r\lambda / s = \lambda / \theta, \quad (2.99)$$

missä r on tarkastelu- etäisyys ja $\theta = s/r$.

LASER SPECKLE

Tarkastellaan lasersäteen muodostamaa täplää esim. seinällä tai sädettä, joka on kulkenut sirottavan kohteen läpi. Täplän huomataan koostuvan kirkkaista ja tummista alueista, pienemmistä täplistä, jotka näyttävät vielä liikkuvankin. Pienemmillä täplillä on tyypillinen raekoko.

Tämä ilmiö on nimeltään **speckle** ja aiheutuu laservalon koherenssista ja heijastavan tai sirottavan pinnan epätasaisuudesta. Epätasainen pinta muodostaa sirontakeskuksia, joista lähtevän valon konstruktivinen ja destruktivinen interferenssi muodostaa pienet kirkkaat ja tummat täplät.

Arvioidaan vielä speckle-kuvion raekokoa, kun lasersäteen halkaisija on D ja aallonpituus λ sekä täplän etäisyys lähteestä on L .

OSA II

VALON KVANTITTUMINEN

3. VALON HIUKKASLUONNE

Pääkohdat:

- Diskreetit energiatasot (esim. atomissa)

HISTORIAA

Valosähköinen ilmiö, atomien spektrit, ...

Esim. Vetyatomin energiatilat

$$E_n = -E_0 / n^2, \quad (3.8)$$

missä

$$E_0 = 13.595 \text{ eV} \quad (3.9)$$

Samoin kuin valolla on aalto- ja hiukkasluonne (fotoni), myös materiahiukkasilla on aaltoluonne. De Broglie'n [aineaaltorelaation](#) mukaan nopeudella v liikkuvan hiukkasen aallonpituus on

$$\lambda = h / p, \quad (3.15)$$

missä $p = mv$ on hiukkasen liikemäärä.

KVANTTITILAT

Kvanttitilojen [aaltofunktiot](#) ratkaistaan [Schrödingerin aaltoyhtälöstä](#). Stationäärisen tilan aaltofunktio on

$$\Psi_n(x,y,z,t) = \psi_n(x,y,z) e^{-i\omega t}, \quad (3.21)$$

missä $\omega = E_n/\hbar$, ja sitä vastaava [todennäköisyystiheys](#)

$$|\Psi_n|^2 = |\psi_n|^2 \quad (3.22)$$

on ajasta riippumaton.

Transitiota ($1 \rightarrow 2$) kuvaava aaltofunktio on lineaarikombinaatio alku- ja lopputilojen aaltofunktioista

$$\Psi(x,y,z,t) = C_1(t) \psi_1(x,y,z) e^{-i\omega_1 t} + C_2(t) \psi_2(x,y,z) e^{-i\omega_2 t}, \quad (3.23)$$

missä kertoimet $C_1(t)$ ja $C_2(t)$ muuttuvat (hitaasti) transition aikana. Tällaisen ns. [koherentin tilan](#) energia ei ole määritelty transition aikana.

Koherentin tilan todennäköisyystiheys on

$$\begin{aligned} \Psi^* \Psi &= |C_1 \psi_1|^2 + |C_2 \psi_2|^2 + \\ &+ C_1^* C_2 \psi_1^* \psi_2 e^{-i\omega_{21} t} + C_2^* C_1 \psi_2^* \psi_1 e^{i\omega_{21} t}, \end{aligned} \quad (3.24)$$

missä

$$\omega_{21} = (E_2 - E_1) / \hbar \quad (3.25a)$$

riippuu [transitioenergiasta](#) $E_2 - E_1$.

Jos transitiossa on kyseessä esim. atomin transiio tilasta toiseen, on seurauksena elektronien uudelleen järjestyminen, yleensä yhden elektronin siirtyminen orbitaalilta toiselle. Tällöin voidaan ajatella elektronin oskilloivan alku- ja lopputilojensa välillä taajuudella

$$\nu_{21} = (E_2 - E_1) / h \quad (3.25b)$$

transition aikana. Tällainen värähtelevä dipoli kytkeytyy vastaan taajuiseen sm kenttään joko absorboiden tai emittoiden kvantin

$$h\nu_{21} = E_2 - E_1.$$

Tämä on ns. [Bohrin frekvenssiehto](#).

4. SÄTEILEVÄT TRANSITIOIT JA VIIVANLEVEYS

Pääkohdat:

- viritystilojen purkautuminen (atomeissa)
- atomien välisten vuorovaikutusten vaikutus
- säteilyn klassista teoriaa: intensiteettijakautuma, ...
- viivanmuoto ja leveneminen, levenemismekanismeja
- säteilyn kvanttiteoriaa

4.1. VIRITETTYJEN TILOJEN PURKAUTUMINEN

SPONTAANI EMISSIO

Tarkastellaan atomeja, joista osa N_u on viritetty tiloihin u (upper) ja loput ovat perustilassa N_l (lower). Oletetaan, että atomien viritykset voivat purkautua perustilaansa vain emittoimalla tilojen energiaeroa vastaavan kvantin $h\nu = E_u - E_l$. Tällöin aikayksikössä tapahtuvien transiitioiden lukumäärä on verrannollinen viritettyjen atomien lukumäärään

$$\frac{dN_u}{dt} = -A_{ul}N_u. \quad (4.1)$$

Verrannollisuuskerrointa A_{ul} sanotaan spontaanin emissioon transiitiodennäköisyydeksi.

Mikäli uusia viritymisiä ei tapahdu, saadaan viritettyjen atomien lukumäärä ratkaisuna edellisestä

$$N_u(t) = N_u^0 e^{-A_{ul}t} = N_u^0 e^{-t/\tau_u}, \quad (4.2-3)$$

missä [aikavakiota](#)

$$\tau_u = 1 / A_{ul}$$

sanotaan viritystilan [elinajaksi](#) (engl. lifetime).

Huom! Termisessä tasapainossa kvantttilojen miehitys noudattaa ns. [Boltzmannin jakautumaa](#)

$$N_i(T) = N^0 e^{-E_i/kT},$$

jossa E_i on tilan i energia. Boltzmannin jakautuma on termisten viritysten ja transiitioiden dynaaminen tasapaino.

Jos edellä viritystilan u purkautumiskanavia on useita: i, j, k, \dots , niin

$$\frac{dN_u}{dt} = -(A_{ui} + A_{uj} + A_{uk} + \dots)N_u = -\sum_i A_{ui} N_u \quad (4.4)$$

ja

$$N_u(t) = N_u^0 e^{-t/\tau_u}, \quad (4.5)$$

missä nyt

$$\tau_u = 1 / \sum_i A_{ui}. \quad (4.6)$$

Esim. He–Cd-laser

Spontaanin emission transitiotodennäköisyyksiä kahden tilan u ja l välillä voi arvioida likimäärin käyttämällä lauseketta

$$A_{ul} = \frac{f_{lu}}{(g_u/g_l) \lambda_{ul}} \frac{10^{-4} \text{m}^2}{1.5 \text{s}}, \quad (4.7)$$

missä g_u ja g_l ovat tilojen degeneraatiot.

KLASSISEN VÄRÄHTELEVÄN DIPOLIN ELINAIKA

Tarkastellaan atomissa olevan virittyneen elektronin emittoimaa säteilyä klassisen värähtelevän dipolin mallin avulla. Harmonisesti värähtelevän elektronin liikeyhtälö on

$$m_e \frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0, \quad (4.8)$$

jonka ratkaisu on

$$x(t) = x_0 e^{-i\omega_0 t},$$

missä

$$\omega_0 = (k/m_e)^{1/2} = 2\pi\nu_0. \quad (4.9)$$

Harmonisen liikkeen kokonaisenergia on

$$E_T = 1/2 kx_0^2. \quad (4.10)$$

Em. klassinen värähtelijä $x(t) = x_0 e^{-i\omega_0 t}$, jonka varaus on e , säteilee tehon

$$P_R = -\frac{dE_T}{dt} = \frac{\omega_0^4 e^2 x_0^2}{3\pi\epsilon_0 c^3}, \quad (4.11)$$

joka on verrannollinen kokonaisenergiaan E_T . Siten

$$\frac{dE_T}{dt} = -\gamma_0 E_T \quad (4.12)$$

ja

$$E_T(t) = E_T^0 e^{-\gamma_0 t} = E_T^0 e^{-t/\tau_0}, \quad (4.13)$$

missä

$$\tau_0 = 1/\gamma_0. \quad (4.14)$$

Tekijä γ_0 on itse asiassa juuri virityksen säteilevän purkautumisen transitionopeus A_{ul} , edellä yhtälössä (4.7).

Jos värähdysenergian väheneminen säteilemällä otetaan huomioon tulee liikeyhtälöksi

$$m_e \frac{d^2x}{dt^2} + \gamma_0 \frac{dx}{dt} + \omega_0 m_e x = 0, \quad (4.15)$$

josta saadaan ratkaisuksi, vrt. yht. (2.79)

$$x(t) = x_0 e^{-\gamma_0 t/2} e^{-i\omega_0 t} \quad (4.16)$$

Siten säteilyn kenttä on

$$E(t) = E_0 e^{-\gamma_0 t/2} e^{-i\omega_0 t}; t \geq 0 \quad (4.17)$$

ja intensiteetti

$$I(t) = |E(t)|^2 = E_0^2 e^{-\gamma_0 t} = I_0 e^{-\gamma_0 t}; t \geq 0 \quad (4.18)$$

Intensiteetti vaimenee siis samalla tavalla kuin värähtelijän energia vähenee.

Kyseessä on siis spontaani emissio (ja sen klassinen malli), koska säteily emittoituu ilman ulkoista liipaisua.

VIRITYSTILOJEN SÄTEILEMÄTTÖMÄT PURKAUTUMISET

Atomin viritystila voi purkautua myös törmäyksissä toisiin atomeihin. Klassisesti voidaan ajatella törmäyksien myös keskeyttävän joskus viritystilan purkautumistapahtuman aiheuttaen tällöin viivan levenemistä.

Kun otetaan huomioon sekä spontaani että törmäyksien aiheuttamat purkautumiset,

$$N_u = N_u^0 e^{-\gamma_u t}, \quad (4.19)$$

missä purkautumisnopeus (eli transitiotodennäköisyys) on

$$\gamma_u = \gamma_u^{\text{rad}} + \gamma_u^{\text{coll}} \quad (4.20)$$

ja

$$\tau_u = \frac{1}{\gamma_u} = \frac{1}{\gamma_u^{\text{rad}} + \gamma_u^{\text{coll}}}. \quad (4.21)$$

Edellä jo saatiin tulos $\gamma_u^{\text{rad}} = \sum_i A_{ui}$ ja myöhemmin tullaan toteamaan, että $\gamma_u^{\text{coll}} = 1 / T_1^u$, missä T_1^u on viritystilan u törmäyksiin liittyvä purkautumisaika.

Kiinteässä aineessa **fononit** eli hilavärähtelyt ovat samassa asemassa kuin törmäykset kaasu- ja nestefaasissa. Siten alhainen lämpötila onkin usein tärkeä tekijä törmäyksellisten purkautumisten hallinnassa. Kaasufaasissa myös paine vaikuttaa tietysti sekä törmäyksiin että kaasun tiheyteen.

Atomien ja/tai molekyylien väliset törmäykset ovat eräs varsin merkittävä tekijä, joka on otettava huomioon kaasulasereiden toiminnassa. Törmäykset voivat haitallisesti vähentää tarvittavaa miehitysinversiota, mutta joskus myös lisätä sitä (esim. CO₂-laser).

4.2. SÄTEILEVÄN TRANSITION VIIVANLEVEYS

Tarkastellaan seuraavssa kuinka säteilevän transition viivanleveys $\Delta\omega$ (tai $\Delta\nu$) riippuu viritetyn tilan elinajasta. Viivan paikakan määräytyy transition energiasta $\omega_0 = (E_u - E_l) / \hbar$.

KLASSINEN TARKASTELU

Säteilevän transition aiheuttama kenttä yhtälössä (4.17)

$$E(t) = E_0 e^{-\gamma_0 t/2} e^{-i\omega_0 t}; t \geq 0$$

ei ole vaimennustermin $e^{-\gamma_0 t/2}$ vuoksi puhtaasti vain taajuudella ω_0 värähtelevä sm aalto, vaan sisältää myös muita taajuuksia. Aallon (4.17) taajuusspektri saadaan Fourier-muunnoksella

$$E(\omega) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i\omega t} dt \quad (4.22)$$

$$= E_0 (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i[(\omega-\omega_0) + i\gamma_0/2] t} dt$$

$$= -E_0 (2\pi)^{-1/2} 1/[i[(\omega-\omega_0) + i\gamma_0/2]]. \quad (4.23)$$

Tästä saadaan intensiteetti

Kun intensiteetti on normitettu (olettaen että $\gamma_0/\omega \ll 1$) siten, että kaikkien taajuuksien yli integroitu intensiteetti on I_0 , niin

$$I(\omega) = |E(\omega)|^2 = I_0 \frac{\gamma_0/2\pi}{(\omega-\omega_0)^2 + \gamma_0^2/4}. \quad (4.24)$$

Saatu lauseke on [klassinen teorettinen emissioviivanmuoto](#).

Se on ns. [Lorentzin viivanmuoto](#), kulma-
taajuudella ω_0 . Sen
puoliarvoleveys
FWHM (Full Width at
Half Maximum) saa-
daan helposti ehdosta

$$I_0/2 = I(\omega_0 \pm \Delta\omega/2).$$

$$\Delta\omega^{\text{FWHM}} = \gamma_0 = 1/\tau_0 = 2\pi\Delta\nu_C, \quad (4.26)$$

missä γ_0 on virityksen purkautumisnopeus, τ_0 on purkautumisaika ja $\Delta\nu_C$ on "klassinen viivanleveys".

Tämä ns. luonnollinen viivanmuoto luetaan homogeenista viivanlevenemistä aiheuttaviin ilmiöihin. Viivanmuoto säilyy tietysti samanlaisena myös useamman atomin emission tapauksessa, jos atomit eivät ole vuorovaikutuksessa keskenään. Tällöin intensiteetti kertautuu atomien lukumäärällä.

TÄSMENNYSTÄ KVANTTIMEKANIIKAN AVULLA

Kun tarkastellaan kahden tason u ja l systeemiä, jossa ylemmän tason eli virityksen elinaika on τ_u , korvataan sillä edellisen tarkastelun τ_0 . Mikäli vain spontaani emissio otetaan huomioon, yhtälön (4.6) mukaan $\tau_u = 1 / \sum_i A_{ui}$.

Samaan tulokseen päädytään [Heisenbergin epätarkkuusperiaatteesta](#) lähtien. Sen mukaan energiatason epätarkkuus ΔE ja elinaika Δt kytkeytyvät relaation

$$\Delta E \Delta t \approx \hbar = h / 2\pi \quad (4.27)$$

mukaisesti. Kun nyt rinnastetaan tarkasteltavat suureet siten, että $\Delta E = \Delta E_u$ ja $\Delta t = \tau_u$, saadaan

$$\Delta E_u = \hbar / \tau_u = \hbar \sum_i A_{ui}. \quad (4.28)$$

Jos myös alemmalla tasolla on äärellinen elinaika τ_l , on sillä myös nollasta poikkeava viivanleveys

$$\Delta E_l = \hbar / \tau_l = \hbar \sum_j A_{lj} \quad (4.28)$$

ja koko transition viivanleveys on näiden summa

$$\begin{aligned} \Delta E_T &= \Delta E_u + \Delta E_l = \hbar (\gamma_u + \gamma_l) = \hbar \gamma_{ul}^T = \hbar (\sum_i A_{ui} + \sum_j A_{lj}) \quad (4.29) \\ &= \hbar \Delta\omega_{ul} = h \Delta\nu_{ul}. \quad (4.31) \end{aligned}$$

Siten

$$I(\omega) = I_0 \frac{\gamma_{ul}^T/2\pi}{(\omega-\omega_0)^2 + (\gamma_{ul}^T)^2/4}. \quad (4.36)$$

4.3. VIIVANLEVEYTEEN VAIKUTTAVIA TEKIJÖITÄ

Viivanleveyteen vaikuttavat prosessit voidaan jakaa kahteen ryhmään: virstytilan **elinaikaa lyhentävät, jotka tuottavat Lorentzin viivanmuodon**, ja **muut, jotka johtavat Gaussin viivanmuotoiseen levenemiseen**. Ensiksi mainittuja, joihin kuuluvat edellä tarkastellut spontaani emissio ja törmäyksistä aiheutuva virstyksen elinajan lyheneminen, sanotaan **homogeenisiksi prosesseiksi**. Gaussin viivanmuotoisen levenemisen aiheuttavia ovat Doppler-levenemä, isotooppilevenemä ja amorfisen rakenteen aiheuttama levenemä, joita sanotaan taas **epä-homogeenisiksi prosesseiksi**.

T₁-LEVENEMÄ

Tämä, jo alustavasti kappaleessa 4.1. käsitelty mekanismi, voidaan kirjoittaa virstyksen purkautumisnopeuteen vaikuttavana yhtälön (4.20) mukaisesti

$$\gamma_u = 1 / \tau_u = \sum_i A_{ui} + 1 / T_1^u, \quad (4.38)$$

missä törmäyksien aiheuttama transitionopeus on $\gamma_1 = 1 / T_1$. Samoin voidaan kirjoittaa transition,lopputilalle ℓ ,

$$\gamma_\ell = 1 / \tau_\ell = \sum_j A_{\ell j} + 1 / T_1^\ell, \quad (4.39)$$

ja kokonaislevenemäksi

$$\Delta\omega_{u\ell} = \gamma_u + \gamma_\ell$$

ja

$$\begin{aligned} \Delta\nu_{u\ell} &= (\gamma_u + \gamma_\ell) / 2\pi, \\ &= \Delta\nu_{u\ell}^N + (1/T_1^u + 1/T_1^\ell) / 2\pi, \end{aligned} \quad (4.41)$$

missä $\Delta\nu_{u\ell}^N$ on luonnollinen viivanleveys. Tyypillisiä elinaikaa lyhentäviä törmäyksiä ovat elektronien aiheuttamat kaasufaasissa ja fononien aiheuttamat kiinteässä olomuodossa.

T₂-LEVENEMÄ

Törmäyksien aiheuttama "dephasing" eli vaiheen sekoittuminen voidaan kirjoittaa muodollisesti samoin kuin edellä,

$$\gamma_2^u = 1 / T_2^u \quad (4.42)$$

ja

$$\gamma_2^\ell = 1 / T_2^\ell, \quad (4.43)$$

vaikka kyse ei olekaan varsinaisesti virstyksen purkautumisnopeuteen vaikuttavasta tapahtumasta.

Kun merkitään $T_2 = T_2^u = T_2^\ell$, voidaan homogeenisten levenemien yhteisvaikutukseksi kirjoittaa

$$\Delta\nu_{u\ell}^H = \Delta\nu_{u\ell}^N + (1/T_1^u + 1/T_1^\ell + 2/T_2) / 2\pi, \quad (4.44)$$

Koska T₂-prosessi ei lyhennä virstysten elinaikaa ja siten vähennä virstytilojen populaatiota, se on tavallisesti "pienempi haitta" kuin T₁-prosessi.

AMORFISEN RAKENTEEN AIHEUTTAMA LEVENEMÄ

Amorfisessa "olomuodossa" atomien ympäristö vaihtelee ja se vaikuttaa niiden virstytilojen energioihin. Tästä aiheutuu vaihtelua myös transitioenergioihin ja se taas lisää viivanleveyttä.

Esim. Nd⁺³-ionien lasereissa käytetyn 1.064 μm transition viivanleveys on $\Delta\nu = 1.2 \times 10^{11}$ Hz Nd:YAG-laserissa, kun taas Nd:lasi-laserissa se on $\Delta\nu = 7.5 \times 10^{12}$ Hz. Viivanleveyksien suhde on luokkaa 50. (YAG: Y₃Al₅O₁₂).

DOPPLER-LEVENEMÄ

Doppler-siirtymä etenevän aaltoliikkeen havaitussa taajuudessa aiheutuu siitä, että joko aallon lähettäjä tai vastaanottaja liikkuu. Koska sm aalto ei liiku väliainetta käyttäen, on vain suhteellinen liike merkitsevää eli se, väheneekö vai kasvaako lähettäjän ja havaitsijan etäisyys.

Ajassa $\Delta\tau$ nopeudella v suoraan kohti (–) tai poispäin (+) liikkuva lähde lähettää $(c \pm v)$ $\Delta\tau$ pitkän aaltojonon, joka liikkuu nopeudella c . Tarkastellaan yhden aallon mittaista "aaltोजना" $\lambda_{\pm} = (c \pm v) / \nu_0$, jolloin havaittu taajuus on

$$\nu_{\pm} = c / \lambda_{\pm}$$

Kineettisen kaasuteorian mukaan M -massaisten molekyylien keskinopeus lämpötilassa T on

$$\bar{v} = \sqrt{(8kT / M\pi)}, \quad (4.49)$$

mikä vaihtelee välillä 100 – 1000 m/s. Siten $v/c \approx 10^{-6}$ ja näkyvän valon alueella siitä aiheutuu $\Delta\nu \approx 10^{15} \text{ Hz} \times 10^{-6} \approx 10^9 \text{ Hz} !$

Lämpötilassa T kaasumolekyyleillä (tai atomeilla) on **Maxwellin nopeusjakautuma**, jonka x -komponentti on

$$P(v_x) = \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{M}{2kT} v_x^2\right). \quad (4.51)$$

Vastaavasti y - ja z -komponentit ovat samaa muotoa. Jakuma on normitettu siten, että

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} P(v_x) P(v_y) P(v_z) dv_z dv_y dv_x = 1. \quad (4.53)$$

Valitaan x -akseli, joka kulkee lähteen ja havaitsijan kautta, jolloin

Intensiteettijakautuma taajuuden funktiona voidaan kirjoittaa

$$I(\nu) = I_0 \frac{c}{\nu_0} \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{M}{2kT} \frac{c^2}{\nu_0^2} (\nu - \nu_0)^2\right) \quad (4.57)$$

ja

$$\int_0^\infty I(\nu) d\nu = I_0. \quad (4.58)$$

Doppler-ilmiö aiheuttaa siis Gaussin käyrän muotoisen intensiteettijakautuman lämpöliikkeessä olevien atomien tai molekyylien lähettämästä monokromaattisesta säteilystä. Tätä sanotaan Doppler-levenemäksi.

Helposti nähdään, että jakautuman puoliarvoveveys (FWHM) on

$$\Delta\nu^D = 2\nu_0 \sqrt{(2kT \ln 2 / Mc^2)}. \quad (4.59)$$

Niinpä (4.57) voidaan kirjoittaa vielä muotoon

$$I(\nu) = \frac{2I_0}{\Delta\nu^D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left(-\frac{4 \ln 2}{(\Delta\nu^D)^2} (\nu - \nu_0)^2\right). \quad (4.60)$$

Taulukko 4-1.

Laser	λ / nm	$\Delta\nu^N$ / Hz	$\Delta\nu^D$ / Hz
He-Ne	632.8	5.4×10^5	1.5×10^9
Ar-ioni	488.0	1.2×10^7	2.7×10^9
He-Cd	441.6	2.2×10^5	1.1×10^9
Cu	510.5	2.2×10^7	2.3×10^9

VOIGTIN VIIVANMUOTO

Jos $\Delta\nu^N \ll \Delta\nu^D$, niin luonnollisella viivanmuodolla ja viivanleveydellä ei ole merkitystä, vaan Doppler-viivanmuoto dominoi. Jos kuitenkin $\Delta\nu^N \approx \Delta\nu^D$, niin tällöin yhteisvaikutuksena luonnollisesta Lorentzin viivasta $I^N(\nu) = L(\nu)$ ja Doppler-levenemästä $I^D(\nu) = G(\nu)$ muodostuu niiden konvoluutiona ns. **Voigtin viivanmuoto**

$$I^V(\nu) = \int_{-\infty}^{\infty} G(\nu) L(\nu - f) df. \quad (4.61)$$

Voigtin viivanmuodolle ei voida ratkaista analyttistä esitystä, mutta se on helppo laskea numeerisesti.

$$\stackrel{(4.33)}{\Delta\nu^N} \propto A \stackrel{(4.7)}{\propto} 1/\lambda^2 \propto \nu^2$$

$$\stackrel{(4.59)}{\Delta\nu^D} \propto \sqrt{T} / \lambda \propto \nu \sqrt{T}$$

$$\Rightarrow \Delta\nu^N / \Delta\nu^D \propto \nu / \sqrt{T} \propto 1 / \lambda \sqrt{T}$$

ISOTOOPILEVENEMÄ

Atomin eri isotoopit emittoivat saman transition kvantin hieman eri taajuuksilla. Luonnossa tavattavat alkuaineet ovat tavallisesti useamman isotoopin seoksia, esim. He: 99.0008% ^4He , 0.00013% ^3He ja loput muita isotooppeja; Ne: 90.8% ^{20}Ne , 0.26% ^{21}Ne ja 8.9% ^{22}Ne . **Isotoopista riippuvat siirtymät emission taajuudessa** aiheuttavat kokonaisuutena ns. isotooppilevenemän, jossa voidaan erottaa vielä **kaksi eri mekanismia**.

Toinen näistä on ns. **massasiirtymä**, joka esiintyy vaimakkaana keveillä atomeilla, siirtäen raskaamman isotoopin säteilyn taajuuksia korkeamman energia suuntaan. Tämä **aiheutuu säilymislaeista** emission aikana.

Toista mekanismia taas voidaan kutsua **tilavuussiirtymäksi**. Se aiheutuu siitä, että **eri isotooppien ytimien tilavuudet ovat erilaiset**. Tämä vaikuttaa erityisesti s-elektronien tiloihin, koska niiden aaltofunktioilla on merkittävä amplitudi ytimen sisällä. Raskailla alkuaineilla tämä efekti on voimakkain ja merkittäviä siirtymiä säteilyn taajuuteen saadaan silloin, kun transitiossa on mukana s-elektroneja. Parillisten ja parittomien isotooppien siirtymillä on pieniä eroja. Tilavuussiirtymä on samaan suuntaan kuin massasiirtymäkin.

$N_u A_{u\ell}$

Tarkastellaan vielä laservalon tuottamisen kannalta tärkeän termin $N_u A_{u\ell}$ taajuusjakautumaa edellä olleiden viivanleveys-tekijöiden avulla.

Homogeenisten prosessien voidaan ajatella tuovan spontaanin emission transiitodennäköisyyteen Lorentzin viivan muotoisen taajuusjakautuman, vrt. (4.36),

$$A_{u\ell}(\nu) = \frac{\gamma_{u\ell}^T/4\pi^2}{(\nu-\nu_0)^2 + (\gamma_{u\ell}^T/4\pi)^2} A_{u\ell}, \quad (4.64)$$

joka on normitettu siten, että

$$\int_0^\infty A_{u\ell}(\nu) d\nu = A_{u\ell}. \quad (4.63)$$

Jos ajatellaan, että kaikki viritykset ovat muuten "samanlaisia" tai samassa asemassa, saadaan tästä lauseke

$$N_u A_{u\ell}(\nu). \quad (4.65)$$

Epähomogeenisen levenemisen taas voidaan ajatella johtuvan täsmälleen samalla taajuudella ν_0 (ja $A_{u\ell}(\nu_0)$) säteilevien, mutta eri asemassa olevien lähteiden seurauksena.

Esim. Doppler-levenemä on seurausta viritystilojen (atomien) populaation jakautumisesta eri liiketiloihin. Edellä saadun yhtälön (4.60) mukaan

$$N_u(\nu) = \frac{2 N_u}{\Delta\nu^D} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \exp\left(-\frac{4 \ln 2}{(\Delta\nu^D)^2} (\nu - \nu_0)^2\right), \quad (4.69)$$

joka on normitettu siten, että

$$\int_0^\infty N_u(\nu) d\nu = N_u. \quad (4.67)$$

Yhtälöistä (4.64) ja (4.69) voidaan verrata maksimi-intensiteettejä laskemalla suhde

$$\frac{N_u A_{u\ell}(\nu)}{N_u(\nu) A_{u\ell}} = \frac{1}{\sqrt{\pi} \ln 2} \frac{\Delta \nu^D}{\Delta \nu^H} \approx 0.85 \frac{\Delta \nu^D}{\Delta \nu^H}. \quad (4.73)$$

4.4. SÄTEILEVÄN TRANSITION KVANTTITEORIAA

Spontaanissa transitiossa säteilevän atomin **klassinen malli** antaa oikean luonnollisen viivanmuodon, mutta se **ei selitä intensiteettejä eli transiitodennäköisyyksiä**. Klassinen malli ei myöskään kykene erottamaan transition alku- ja lopputilaefektejä, koska se **ei sisällä tasorakennetta**.

SÄHKÖINEN DIPOLITRANSITIO

Transitiota kahden kvanttitalan välillä voidaan tarkastella ajasta riippuvan häiriöteorian avulla, ks. esim. <http://cc.oulu.fi/~trantala/opetus/files/MF-.../MF98.s95-.pdf>

Kahden tason ajasta riippuvassa häiriöteoriassa tarkastellaan **koherentin tilan aaltofunktion** (3.23) kertoimien **aikariippuvuutta**, joista saadaan transitionopeus. Transiitodennäköisyyden antaa ns. **Fermin kultainen sääntö**, jonka mukaan kahden tason välinen transitionopeus tai -todennäköisyys on **verrannollinen transition aiheuttavan häiriöoperaattorin alku- ja lopputilojen välisen matriisielementin neliöön**. Suurimmillaan transiitodennäköisyys on resonanssissa.

Kun häiriönä on sähkömagneettinen kenttä, on **merkittävin häiriöoperaattori sähköinen dipoli** $e\mathbf{r}$, joka kytkee tai "sekoittaa" alku- ja lopputilat. Jos kenttä on oskilloiva sm aalto, tulee transiitodennäköisyyden taajuusriippuvuudeksi Lorentzin viivanmuoto (4.64).

Dipolitransition matriisielementti on

$$M_{u\ell} = \langle u | e\mathbf{r} | \ell \rangle = \int \psi_u e\mathbf{r} \psi_\ell dV, \quad (4.74)$$

missä $\mathbf{r} = x \hat{\mathbf{i}} + y \hat{\mathbf{j}} + z \hat{\mathbf{k}}$.

Matriisielementin $M_{u\ell} = \langle u | e\mathbf{r} | \ell \rangle$ voidaan ajatella esittävän transition aikana oskilloivan dipolimomentin amplitudia. Vastavasti matriisielementit $\langle u | e\mathbf{r} | u \rangle$ ja $\langle \ell | e\mathbf{r} | \ell \rangle$ ovat tilojen ψ_u ja ψ_ℓ , eli alku- ja lopputilojen, varausjakautumien dipolimomentit.

Voidaan myös ajatella, että häiriöoperaattori aiheuttaa transition alku- ja lopputilojen "peittoa" (engl. overlap), sillä vektorit $|u\rangle$ ja $e\mathbf{r}|\ell\rangle$ eivät välttämättä ole ortogonaalisia,

$$\langle u | e\mathbf{r} | \ell \rangle = M_{u\ell} \neq 0,$$

vaikka $|u\rangle$ ja $|\ell\rangle$ ovat,

$$\langle u | \ell \rangle = 0.$$

Peiton suuruus antaa **transiitiamplitudin** ja **sen neliö intensiteetin eli transiitodennäköisyyden**.

Tämä voidaan päätellä myös klassillisen säteilytehon lausekkeesta (4.11) seuraavasti. Kvantittunut säteilyteho atomia kohti on

$$P_R = dE/dt = A_{u\ell} h\nu_{u\ell}. \quad (4.75)$$

Kirjoittamalla tämä samaksi kuin (4.11), kun $e x_0 = M_{u\ell}$,

saadaan

$$A_{u\ell} = \frac{16\pi^3 \nu_{u\ell}^3}{3h\epsilon_0 c^3} M_{u\ell}^2. \quad (4.77)$$

Edellä on käytetty myös käsitettä oskillatorinen voimakkuus $f_{\ell u}$ kuvaamaan transiitodennäköisyyttä. Kun tietyn tilan u kaikkien mahdollisten transiitoiden (ml. absorptiot ja emissiot) oskillatoriset voimakkuudet normitetaan siten, että

$$\sum_k f_{uk} = 1, \quad (4.80-81)$$

(Thomas–Kuhn–Reiche-summasääntö) niin

$$A_{u\ell} = \frac{2\pi e^2 \nu_{u\ell}^2}{\epsilon_0 m_e c^3} \left(\frac{g_\ell}{g_u} \right) f_{\ell u}, \quad (4.78)$$

missä g_ℓ ja g_u ovat tilojen ℓ ja u degeneraatiot, ja $f_{\ell u}$ on **absorption oskillatorinen voimakkuus**. Vastaavasti määritellään **emission oskillatorinen voimakkuus**

$$f_{u\ell} = - (g_\ell/g_u) f_{\ell u}. \quad (4.79)$$

DIPOLITRANSITION VALINTASÄÄNNÖT: YKSI ELEKTRONI

Dipolitransition matriisielementin neliö voidaan jakaa kolmeen komponenttiinsa

$$M_{u\ell}^2 = e^2 (X^2 + Y^2 + Z^2), \quad (4.82)$$

missä

$$X = \langle u|x|\ell \rangle = \int \psi_u x \psi_\ell dV, \quad (4.83)$$

$$Y = \langle u|y|\ell \rangle = \int \psi_u y \psi_\ell dV \quad (4.84)$$

ja

$$Z = \langle u|z|\ell \rangle = \int \psi_u z \psi_\ell dV. \quad (4.85)$$

Nämä matriisielementit riippuvat **yksielektroniaaltofunktioiden**

$$\psi_{n\ell m s}(r, \theta, \phi) = C \rho^\ell e^{-\rho/2} L_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) P_\ell^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \sigma(s), \quad (3.65)$$

missä $\rho = 2r / na_H$, symmetriaominaisuuksista.

Esim.

Kun transition koko matriisielementti häviää on kyseinen transiitio kielletty ja tätä sanotaa valintasäännöksi. Sähköisen dipolitransition valintasäännöt yhden elektronin transitiassa

$\psi_{n\ell m_s}(r, \theta, \phi) \rightarrow \psi_{n'\ell' m'_s}(r, \theta, \phi)$ ovat

$$\begin{aligned} \Delta \ell &= \pm 1 \\ \Delta s &= 0 \end{aligned} \quad (4.91)$$

$$\Delta j = \pm 1, 0 \quad \text{paitsi } j = 0 \rightarrow j = 0$$

$$\Delta m_j = \pm 1, 0 \quad \text{paitsi } m_j = 0 \rightarrow m_j = 0, \text{ jos } \Delta j = 0,$$

missä $j = \ell \pm 1/2$.

Usean elektronin transition valintasäännöt voidaan kirjoittaa vastaavasti koko tilan impulsimomenttikvanttilukujen avulla

$$\begin{aligned} \Delta \ell &= \pm 1, & \Delta L &= \pm 1, 0 \\ \Delta S &= 0 \end{aligned} \quad (4.104)$$

$$\Delta J = \pm 1, 0 \quad \text{paitsi } J = 0 \rightarrow J = 0$$

$$\Delta M_J = \pm 1, 0 \quad \text{paitsi } M_J = 0 \rightarrow M_J = 0, \text{ jos } \Delta J = 0,$$

missä $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

Valintasääntöjä tarkasteltaessa ensimmäisenä kannattaa tarkastaa **pariteetti** laskemalla parittomien ℓ -kvattilukujen omaavien elektronien lukumäärät alku- ja lopputiloissa. **Dipolitransitiassa pariteetti vaihtuu**, koska \mathbf{r} on pariton funktio.

Viritystila voi purkautua myös esim. **sähköisen kvadrupolitransition** kautta ($\Delta L = \pm 2$) tai **magneettisten dipoli-, kvadrupoli- ja transitioiden** avulla. Nämä purkautumiskanavat ovat kuitenkin **tavallisesti useita kertalukuja hitaampia** kuin sähköinen dipolitransitio. Niitä kutsutaankin myös kielletyiksi transitioksi.

5. LASERVÄLIAINEIDEN ENERGIATASOT

Pääkohdat:

- molekyylien energiatasot: rotaatio-, vibraatio- ja elektroniset
- nesteistä: orgaaniset väriaineet (engl. dye)
- kiinteiden aineiden energiatasot ja viritykset: eristeet ja puolijohteet

5.1. MOLEKYYYLIEN ENERGIATASOT JA SPEKTRIT

MOLEKYYYLIEN ENERGIATASOT

Edellä on tarkasteltu lähinnä atomien elektronisia virityksiä esimerkkeinä kvantittuneista energiataasoista. Molekyyleillä on elektronisten viritysten lisäksi kvantittunutta rotaatio- ja vibraatioenergiaa,

$$E_{\text{total}} = E_{\text{electr}} + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}}. \quad (5.1)$$

MOLEKYyliEN LUOKITTELU

N-atomisella molekyylillä on $3N$ vapausastetta, joista 3 liittyy translaatioon, 3 rotaatioon (lineaarilla 2) ja $3N-6$ vibraatioon (lineaarilla $3N-5$).

Yksinkertaisia molekyylejä on neljää päätyyppiä: lineaarisia, pallohyrriä, symmetrisiä hyrriä ja asymmetrisiä hyrriä. Nämä eroavat toisistaan päähitausmomenttiensa suuruuksien perusteella.

MOLEKYyliEN ROTAATIOENERGIAT

Lineaarisen molekyylin rotaatioenergian klassinen lauseke on

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I}, \quad (5.2)$$

missä I on molekyylin hitausmomentti pyörimisakselinsa suhteen, ω on kulmanopeus ja L on liikemäärämomentsi eli impulssimomentsi. Impulssimomentsi on kvantittunut

$$L^2 = J(J+1) \hbar^2 \quad (5.3)$$

kvanttiluvulla

$$J = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.4)$$

joten

$$E_{\text{rot}}^J = J(J+1) \hbar^2 / 2I = J(J+1) Bhc, \quad (5.5)$$

missä

$$B = h / (8\pi^2 cI). \quad (5.6)$$

Symmetrisen hyrriän rotaatioenergia

$$E_{\text{rot}} = J(J+1) Bhc + K^2(C-B) hc, \quad (5.7)$$

riippuu kahdesta kvanttiluvusta J ja K , missä

$$B = h / (8\pi^2 cI_b), \quad C = h / (8\pi^2 cI_c), \quad (5.8)$$

sekä I_b ja I_c ovat molekyylin kaksi eri päähitausmomenttia.

Huom! Rotaatioliikkeessä ei ole nollapiste-energiaa.

Rotaatioviritykset voivat purkautua ja syntyä dipolitransition kautta vain, jos molekyylin rotaatioon liittyy oskilloiva dipolimomentsi. Tällöin valintasäännöt ovat

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad \text{ja} \quad \Delta K = \pm 1 \quad (5.9)$$

MOLEKYyliEN VIBRAATIOENERGIA

Molekyylin pienet vibraatiot ovat hyvin tarkasti harmonista värähtelyä. kun molekyylin värähdysvapausasteiden ominaistajuudet (resonanssit) ovat ν_1, ν_2, \dots , niin vibraatioenergia on

$$E_{\text{vib}} = (\nu_1 + 1/2) h\nu_1 + (\nu_2 + 1/2) h\nu_2 + \dots, \quad (5.10)$$

missä kvanttiluvut $\nu_i = 0, 1, 2, \dots$

Huom! Klassinen ja kvanttimekaaninen harmoninen oskillaattori värähtelevät samalla taajuudella.

Huom! Vibraatioon liittyy nollapiste-energia.

Dipolitransitiossa aktiivisiin vibraatiovirityksiin täytyy liittyä "värähtelevä dipolimomentsi" ja siten yleensä molekyyliin pysyvä dipolimomentsi. Harmonisten vibraatiotransitioiden dipolivalintasääntö on

$$\Delta \nu = \pm 1, \quad (5.11)$$

mutta epäharmonisuuksien vuoksi myös $\Delta \nu = \pm 2, \pm 3, \dots$ ovat heikkoina mahdollisia.

Vapaiden molekyylien transitoissa muuttuvat tavallisesti sekä rotaatio- että vibraatiotilat samanaikaisesti edellä olleiden valintasääntöjen mukaisesti. Rotaatio–vibraatiotransitioissa on tapana nimetä ns. P-, Q- ja R-haarat J-quanttiluvun mukaan seuraavasti

$$\Delta J = \begin{cases} +1 & \text{P} \\ 0 & \text{Q} \\ -1 & \text{R} \end{cases} \quad (5.13)$$

Esim. CO₂-molekyyli.

MOLEKYLLIEN ELEKTRONISET ENEGIATASOT

Lineaaristen molekyylien impulssimomenttikvanttilukuja merkitään seuraavasti

$$\Lambda = \begin{matrix} 0 & 1 & 2 & 3 & \dots \\ \Sigma & \Pi & \Delta & \Phi & \dots \end{matrix}$$

$$[L = S \quad P \quad D \quad F \text{ (atomit)}]$$

Dipolitransition valintasäännöt ovat

$$\Delta\Lambda = 0, \pm 1 \quad (5.15)$$

$$\Delta S = 0 \quad (5.16)$$

FRANCK–CONDON PERIAATE

Elektroniset transiitot valitsevat alku- ja lopputilojen vibraatiotasot siten, että **transitio voi tapahtua "vertikaalisesti"**. Tämä johtuu siitä, että ytimien liike on rajoittunutta ja hidasta elektronisiin transiitioihin verrattuna.

EXCIMER-MOLEKYYLIT

Kaksi- tai kolmeatomiset ns. **excimer-molekyylit**, joita käytetään laserväliaineena, ovat **perustilassaan epästabilleja** tai heikosti sidottuja, mutta **pysyviä elektronisesti viritettyinä**. Tällaisia molekyyliä ovat mm. XeF, XeCl, KrF, ArF, HgBr, Xe₂, Ar₂ ja F₂.

5.2. VÄRIAINELIUOSTEN ENERGIATASOT

Orgaaniset "väriainemolekyylit", joita käytetään laserväliaineena ovat suuria ja monimutkaisia. Niissä on tiettyssä paikassa valoa absorboiva ja emittoiva osa ns. **kromofori** (engl. chromophor).

Absorptio tapahtuu yleensä hieman lyhyemmällä aallonpituudella kuin emissio ja riippuu jonkin verran siitä millaisessa liuoksessa väriainemolekyylit ovat. Tyypilliset liuokset ovat vesi, alkoholit ja glykoli, ja konsentraatiot luokkaa 1/10000.

Väriainemolekyylit purkavat virityksensä säteilemällä yleensä varsin hyvällä "hyötysuhteella" (quantum yield), joka on lähellä 100 %.

Tyypillinen väriainemolekyylin energiatasokaavio käsittää singletti- ja tripletiosat, joiden väliset transiitot ovat hitaita.

5.3. KIINTEÄN AINEEN ENERGIATASOT – ERISTEET

Sopivin läpinäkyviin eristeaineisiin voidaan lasertoimintaa varten "liuottaa" tai upottaa ioneja, esim. $\text{Cr}^{3+} \rightarrow \text{Al}_2\text{O}_3$ ja $\text{Nd}^{3+} \rightarrow \text{YAG}$. Liuosolosuhteilla, esim. konsentraatio ja isäntäaineen (liuottimen) kiteisyys/amorfisuus, voidaan säätää mm. lasertransition ylätasoa elinaikaa ja muita viivanleveyyteen vaikuttavia tekijöitä.

Amorfiset (lasit) isäntämateriaalit ovat halpoja ja helppoja valmistaa. Kiteiset aineet ovat taas kovia ja kestäviä, mutta niiden hallittu valmistaminen on vaikeaa. Kiteisillä materiaaleilla on myös suurempi lämmönjohtavuus ja tavallisesti paremmat optiset ominaisuudet. Tyypillisiä kiteisiä isäntämateriaaleja ovat oksidit kuten Al_2O_3 ja $\text{Y}_2\text{Al}_5\text{O}_{12}$.

Laseraktiiviset ionit ovat yleensä harvinaisia maametalleja, transitiometalleja tai aktinideja. Lasertransiitot tapahtuvat syvällä ionien sisäkuorilla.

KAPEAVIIVAISIA LASERVÄLIAINEITA

Rubiini

- $\text{Cr}^{3+} : \text{Al}_2\text{O}_3$ Cr^{3+} -ioneja n. $1.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ (Al_2O_3 , johon lisätty 0.05 % Cr_2O_3 , synteett. rubiini)
- kide tyypillisesti 5 – 10 mm × 5 – 20 cm
- voimakas absorptio $\lambda = 560 \text{ nm}$, 100 nm levyisellä kaistalla
- lasertransitio $\lambda = 694.3 \text{ nm}$ (@ 300 K, 693.4 nm @ 77 K)
 $\Delta\nu = 3.3 \times 10^{11} \text{ Hz}$, $\tau_u = 3000 \mu\text{s}$

Neodyymi : YAG tai lasi

- Nd^{3+} : YAG, max konsentraatio 1.0 – 1.5 %
- YAG hyvä lämmönjohde
max. kiteen koko n. 3 cm × 15 cm
- lasertransitio $\lambda = 1.0641 \mu\text{m}$, $\Delta\nu = 1.2 \times 10^{11} \text{ Hz}$, $\tau_u = 230 \mu\text{s}$
- Nd^{3+} : lasi, leveämpi viiva, $\Delta\nu = 1.2 \times 10^{12} \text{ Hz}$
- lasertransitio $\lambda = 1.054 - 1.062 \mu\text{m}$, $\tau_u = 300 \mu\text{s}$
- pumppaus: Kr-kaarilamppu, GaAs-LED, ...
- myös Nd^{3+} : Cr^{3+} : GSGG ja Nd^{3+} : YLF

Erbium

- Er^{3+} : YAG
- Er^{3+} : lasi
- $\lambda = 1.54 \mu\text{m}$ ja $\lambda = 2.9 \mu\text{m}$

LEVEÄKAISTAISIA LASERVÄLIAINEITA

Leveällä aallonpituusalueella säteileviä laserväliaineita voidaan käyttää viritettävissä lasereissa, vrt. väriainelaserit. Leveäkaistaisuus johtuu elektronisten tilojen ja fononien vuorovaikutuksesta. Siitä tulee nimitys vibroniset transitiot.

Aleksandriitti

- Cr^{3+} : BeAl_2O_4
- rubiinin kaltainen
- 3-tasoisena $\lambda = 680.4 \text{ nm}$
- 4-tasoisena viritettävä
 $\lambda = 701 - 818 \text{ nm}$,
 $\tau_u = 260 \mu\text{s}$
- pumppaus $\lambda = 380 - 630 \text{ nm}$

Titaanisafiiri

- eniten käytetty viritettävä kiinteän aineen laser
- Ti^{3+} : Al_2O_3 , Ti-pitoisuus 0.1 %
- kiteen pituus tyypillisesti 2 – 10 mm
- voimakas absorptio
 $\lambda = 560 \text{ nm}$, 100 nm levyisellä kaistalla
- lasertransitio $\lambda = 660 \text{ nm}$ – 1.18 μm , $\Delta\lambda = 400 \text{ nm}$,
 $\Delta\nu = 1.5 \times 10^{14} \text{ Hz}$,
 $\tau_u = 3.8 \mu\text{s}$
- τ_u niin lyhyt, että salalamput eivät hyviä pumppaukseen, käytetään esim. Ar^+ -laseria tai Nd-lasera taajuuskahdennettuna

Kromi–LiSAF, kromi–LiCaF

- Cr^{3+} : LiSrAlF
- lasertransitio $\lambda = 800 \text{ nm}$ – 1.05 μm , $\Delta\lambda = 250 \text{ nm}$
 $\Delta\nu = 9 \times 10^{13} \text{ Hz}$, $\tau_u = 67 \mu\text{s}$
- pumppaus salamalampuilla ja esim. puolijohdelasereilla
- Cr^{3+} : LiCaF
- lasertransitio $\lambda = 700 \text{ nm}$ – 900 nm, $\Delta\lambda = 200 \text{ nm}$
 $\tau_u = 190 \mu\text{s}$

5.4. PUOLIJOHTEEN ENERGIATASOT

Puolijohdeet ovat tärkeimpiä lasermateriaaleja nykypäivän elektroniikan kannalta. Niitä käytetään massiivisesti tiedon tallennuksessa/lukemisessa ja siirtämisessä sekä viihde-elektronikassa.

Puolijohdeiden lasertoiminnan kannalta tärkeät energiatasot ovat elektronisia virityksiä. Elektronien aaltofunktiot jaksollisessa kiteessä ovat muotoa

$$\psi_{\mathbf{k}} = C \varphi e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (5.17)$$

ja alimmat ominaisenergiat [johtavuuskaistassa](#) (engl. conduction band) likipitään muotoa

$$E_{\mathbf{k}}^c = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_c, \quad (5.23)$$

missä

$$\hbar \mathbf{k} = \mathbf{p} \quad (5.20)$$

on elektronin liikemäärää vastaava suure, kideimpulssi, ja m_c on [elektronin efektiivinen massa](#).

[Valenssikaistassa](#) (engl. valence band) energiat ovat muotoa

$$E_{\mathbf{k}}^v = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_v,$$

missä m_v on [aukon efektiivinen massa](#), $m_v < 0$.

Puolijohdeiden elektroniset viritykset ovat [elektroni–aukkopareja](#), jotka syntyvät elektronin siirtyessä valenssikaistan yläreunasta johdekaistan alareunaan.

Puolijohteen alimmat elektroniset viritykset tapahtuvat siis valenssikaistan ja johtavuuskaistan välisen **raon** (engl. band gap) yli. Raon leveys riippuu materiaalista, esim.

Si: $E_G = 1.1 \text{ eV}$ ja GaAs: $E_G = 1.55 \text{ eV}$,
ja se määrää virityksen vähimmäisenergian.

Viritys voi purkautua elektronin ja aukon **rekombinaationa**, jolloin energia vapautuu säteilynä tai fononina (lämpönä) tai molemmissa.

TILATIHEYS (engl. density-of-states, DOS)

SUORA- JA EPÄSUORARAKOISET PUOLIJOHTEET

Jos puolijohteen johtavuuskaistan alareuna ja valenssikaistan yläreuna sattuvat saman aaltovektorin kohdalle, sanotaan, että **kaistarako** on **suora** (engl. direct). Muussa tapauksessa se on **epäsuora** (engl. indirect).

Suorarakoisessa puolijohteesatapahtuvaan rekombinaatioon ei liity elektronin aaltovektorin ja siten liikemäärän muutosta. Jos taas transitio on epäsuora, on liikemäärän säilymiseksi transitiossa synnyttävä (tai hävittävä) myös fononi. Tähän liittyy energian vaihtoa, yleensä häviötä, ja siten epäsuora transitio ei ole edullinen säteilyn synnyttämiseksi.

Piin kaistarako esim. on epäsuora, mutta GaAs:n taas suora. Rekombinaatio GaAs:ssa ($E_G = 1.55 \text{ eV}$) tuottaa säteilyä aallonpituudella $\lambda = 0.8 \text{ }\mu\text{m}$.

ITSEISPUOLIJOHTEET JA SEOSTUS

Itseispuolijohteessa (engl. intrinsic semiconductor) ei ole epäpuhtauksia (engl. impurity) tai seostusta (engl. doping) eikä kidevirheitä (engl. defect). Sen varauksenkuljettajakonsentraatio riippuu vain lämpötilasta (ellei muita viritysmekanismeja (esim. fotonit) ole läsnä) ja hyvin alhaisissa lämpötiloissa se on eriste.

Seostamalla saadaan puolijohteeseen runsas ja lämpötilasta miltei riippumaton varauksenkuljettajakonsentraatio.

PN-LIITOKSEN REKOMBINAATIOSÄTEILY

Puolijohteessa syntyvää elektronien ja aukkojen rekombinaatiosäteilyä voidaan käyttää lasertoiminnassa, kunhan viritysmekanismi (pumppaus) saadaan tehokkaasti toteutetuksi. Elektroneja ja aukkoja on tuotettava paljon samalle alueelle. Tämä saadaan toteutetuksi pn-liitoksella, jossa voidaan käyttää hyväksi p-tyypin ja n-tyypin puolijohteiden suuria h^+ - ja e^- -konsentraatiota liitospinnan läheisyydessä.

Myötäsuuntaisella jännitteellä liitospinnan yli saadaan varauksenkuljettajia jatkuvasti liitosalueelle ja siten syntymään jatkuva rekombinaatioprosessi.

Pienintä virrantiheyttä, jolla lasertoimintaan riittävä rekombinaationopeus voidaan synnyttää, sanotaan kynnysvirrantiheydeksi (engl. threshold current density).

Tällaisessa ns. homoliitoksessa tapahtuvassa rekombinaatiossa haittana on syvä (tai paksu) alue, jossa rekombinaatio tapahtuu. Siitä aiheutuu paljon säteilemätöntä rekombinaatiota ja lämmönmuodostusta.

HETEROLIITOSREKOMBINAATIO

Ns. heteroliitoksella voidaan rajoittaa rekombinaatioalueen paksuutta ja siten vähentää lämmön tuottoa. Heteroliitoksessa käytetään puolijohteita, joiden kaistarako on erilainen, ja lisäksi useita kerroksia.

6. SÄTEILY JA LÄMPÖTASAPAINO

Pääkohdat:

- vitystilojen populaatiot lämpötasapainossa
- mustan kappaleen säteily
- Einsteinin kertoimet

6.1. LÄMPÖTASAPAINO

Lämpötasapainossa lämpöenergiaa ei siirry suljetun systeemin osista toisiin. Tällöin **lämpötila on vakio** koko systeemissä. Mikäli systeemi ei ole lämpötasapainossa, lämpöä siirtyy erilaisilla mekanismeilla: **johtuminen** (engl. conduction), **kulkeutuminen** (engl. convection) ja **säteily** (engl. radiation).

6.2. LÄMPÖSÄTEILY

Lämpötasapainossa olevan hiukkasjoukon (esim. atomit) energiat noudattavat **Boltzmannin jakautumaa**

$$f_i(E_i) = C_1 g_i \exp(-E_i / kT), \quad (6.1)$$

missä g_i on energiatason E_i statistinen paino (degeneraatio) ja Boltzmannin vakio $k = 8.6164 \times 10^{-5}$ eV/K. Normitusvakio C_1 valitaan siten, että

$$\sum_i f_i = 1. \quad (6.2)$$

Jos hiukkasia on N kappaletta, on diskreettien energiatasojen E_i populaatiot

$$N_i = f_i N. \quad (6.4)$$

Liitospintoja, joissa taitekerroin muuttuu voidaan käyttää myös ohjaamaan syntyvää säteilyä, ns. "index guiding".

Jos kerrosrakenteiden paksuudet ovat vain nanometrien luokkaa, voidaan niitä käyttää loukkuunnuttamaan varauksenkuljettajat kvantittuneisiin tiloihin. Tällaisia yhdessä dimensiossa kvantittuneita tiloja synnyttäviä kerroksellisia rakenteita sanotaan **kvanttikaivoiksi** (engl. quantum well).

AALLONPITUUDEN SÄÄTÄMINEN SEOKSIEN AVULLA

Ns. kolmen aineen **ternäärisillä seoksilla** voidaan säätää kais-taraon leveyttä ja siten syntyvän säteilyn allonpituutta.

Esim. GaAs \rightarrow Al_xGa_{1-x}As \rightarrow AlAs
1.55 eV \rightarrow \rightarrow \rightarrow \rightarrow 2.15 eV

Jos energiajakautuma on (kvasi)jatkuva, on jakautumafunktio

$$g(E) dE = C_2 \exp(-E / kT) dE, \quad (6.5)$$

missä C_2 valitaan siten, että

$$\int_0^\infty g(E) dE = 1, \quad (6.6)$$

josta seuraa, että

$$g(E) = 1/kT \exp(-E / kT). \quad (6.7)$$

Mikäli systeemin tilatiheys on vakio,

$$N(E) dE = N/kT \exp(-E / kT) dE. \quad (6.9)$$

Tästä seuraa, että energiatilojen E_1 ja E_2 populaatioiden suhde on

$$N_2/N_1 = g_2/g_1 \exp[-(E_2-E_1) / kT], \quad (6.10)$$

ja mikäli jatkuvan jakautuman tilatiheys on vakio,

$$N(E_2)/N(E_1) = \exp[-(E_2-E_1) / kT]. \quad (6.11)$$

Esim. Punahehku ja valkoinen valo.

STEFAN–BOLTZMANNIN LAKI

Kappaleen lämpötilassa T säteilemä teho pinta-alayksikköä kohti (W/m^2) on

$$I = e_M \sigma T^4, \quad (6.15)$$

missä e_M on materiaalin **emissiviteetti** ($0 < e_M < 1$) ja $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} Wm^{-2}K^{-4}$ on Stefan–Boltmannin vakio.

Kappaleen lämpötilassa T säteilemän tehon aallonpituusjakautumassa on maksimi aallonpituudella λ_m , jolle on voimassa

$$\lambda_m T = 2.898 \times 10^{-3} mK. \quad (6.16)$$

Tämä on Wienin (siirtymä)laki.

Lämpötasapainossa kappaleen säteilemä ja absorboima teho ovat yhtäsuuria. Siitä seuraa, että kappale, joka absorboi hyvin, myös emittoi hyvin, samassa suhteessa.

6.3. MUSTAN KAPPALEEN SÄTEILY

Mustan kappaleen säteilyn energian taajuusjakautuma saadaan tarkastelemalla seisovia sähkömagneettisia aaltoja onkalossa. Tarkastellaan yksinkertaisuuden vuoksi suoran särmiön muotoista onkaloa, jonka mitat ovat L_x , L_y ja L_z . Tällöin seisovien aaltojen aaltovektoreiden \mathbf{k} komponentit määrää ehto

$$n_i (\lambda_i/2) = L_i \Rightarrow k_i L_i = n_i \pi, \quad (6.19)$$

missä $i = x, y, z$ ja n_i on kokonaisluku.

Lasketaan kuinka monta \mathbf{k} -pistettä (moodia) sisältyy k -säteisen pallon yhteen oktanttiin \mathbf{k} -avaruudessa. Tiettyyn lyhimpään aallonpituuteen λ saakka

$$M = 1/8 \cdot 4\pi/3 \cdot n_x \cdot n_y \cdot n_z$$

(6.22)

Vastaavaan suurimpaan taajuuteen $\nu = c/\lambda$ saakka moodien tiheys (tilavuutta V kohti) on

$$\rho(\nu) = 2M / V = 8\pi\nu^3 / 3c^3. \quad (6.23)$$

Moodeja taajuusalueella $d\nu$ on

$$d\rho(\nu) / d\nu = 8\pi\nu^2 / c^3. \quad (6.24)$$

Olettamalla, että lämpötilassa T moodin energia on jatkuvasta jakautumasta laskettuna keskimäärin $\langle E \rangle = kT$, saadaan energiatiheys

$$u(\nu) = 8\pi\nu^2 / c^3 \cdot kT. \quad (6.25)$$

Tämä on [Rayleigh–Jeans-yhtälö](#), joka johtaa ns. [ultraviolettikatastrofiin](#): säteilyn energia kasvaa rajatta taajuuden kasvaessa.

Ultraviolettikatastrofin välttämiseksi Planck kvantitti moodien energian

$$1/kT e^{-E/kT} \rightarrow C e^{-E_m/kT} = C e^{-mh\nu/kT} = f_m. \quad (6.26)$$

Normitus

$$\sum_{m=0}^{\infty} f_m = 1 \quad (6.27)$$

antaa kertoimeksi

$$C = 1 - h\nu/kT, \quad (6.28)$$

jolloin

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \sum_{m=0}^{\infty} E_m f_m = \sum_{m=0}^{\infty} mh\nu e^{-mh\nu/kT} \\ &= h\nu / (e^{h\nu/kT} - 1). \end{aligned} \quad (6.31)$$

Tästä saadaan energiatihedyn jakautumafunktioksi nyt

$$u(\nu) = 8\pi h\nu^3 / c^3 (e^{h\nu/kT} - 1), \quad (6.32)$$

mikä noudattaa täsmälleen kokeellisesti havaittua jakautumaa.

Onkaloon tehty "reikä" absorboi kaiken siihen osuvan säteilyn, minkä vuoksi se on hyvä malli ns. "mustalle kappaleelle". Siten lämpötasapainossa ympäristönsää kanssa mustan kappaleen säteilyn energiatiheys on yht. (6.32) mukainen. Planckin jakautumaa noudattavaa säteilyä sanotaankin mustan kappaleen säteilyksi.

Säteilyn intensiteetti (teho / pa.yks.) on

$$I(\nu) = c u(\nu) \quad (6.35)$$

ja mustan pinnan puoliavaruuteen säteilemä teho pinta-alayksikköön kohti on

$$I_{BB}(\nu) = 1/4 c u(\nu). \quad (6.37)$$

6.4. ABSORPTIO JA STIMULOITU EMISSIO

Tarkastellaan seuraavassa fotonin indusoimaa eli stimuloimaa viritystilan purkautumista ja toisen fotonin emissiota. Fotonin absorptiohan on aina tavallaan fotonin itsensä indusoima.

Tarkastelu perustuu tasapainotiloja koskevaan ns. [mikroskoopin tasapainon periaatteeseen](#) (engl. principle of detailed balance tai principle of microscopic reversibility).

MIKROSKOOPPISEN TASAPAINON PERIAATE

Mikroskoopin tasapainon periaate koskee dynaamisia tasapainotiloja. Sen mukaan tasapainossa olevassa systeemissä transiitioita tiettyyn (mikroskoopin tasapainon periaateeseen) tilaan tapahtuu tietyssä ajassa yhtä paljon kuin transiitioita pois tästä tilasta. Laajennettuna voidaan vielä sanoa, että tietyllä mekanismilla tapahtuvien transiitioiden lukumäärä on sama kuin käänteisellä tai vastakkaisella mekanismilla tapahtuvien transiitioiden lukumäärä.

EINSTEININ KERTOIMET

Sovelletaan mikroskoopin tasapainon periaatetta fotonien ja esim. atomien viritystilojen tasapainotilaan, ja tarkastellaan kahden tason E_u ja E_ℓ tapausta.

Spontaani emissio, stimuloitu emissio ja (stimuloitu) absorptio ovat tasapainossa, jonka seurauksena tilojen miehitykset ovat Boltzmannin jakautuman mukaiset

$$\begin{aligned} N_u / N_\ell &= g_u / g_\ell \exp[-(E_u - E_\ell) / kT] \\ &= g_u / g_\ell \exp[-(\Delta E_{u\ell}) / kT] \end{aligned} \quad (6.45)$$

Stimuloidun ja spontaanin emission suhde on

$$B_{u\ell}(\nu) u(\nu) / A_{u\ell}(\nu) = 1 / (e^{h\nu/kT} - 1), \quad (6.56)$$

mikä on tavallisesti hyvin pieni, koska $h\nu \gg kT$. Lasertoimintaa varten tämä suhde on kasvatettava väliaineessa ykköistä paljon suuremmaksi.

Esim. He–Ne-laserin ($\lambda = 632.8$ nm) ulostuloteho on 1.0 mW ja säteen halkaisija 1.0 mm. Säde tulee ulos osittain läpäisevää peilistä, jonka heijastavuus on 99% ja läpäisy 1%. Mikä on suhde $B_{u\ell}(\nu) u(\nu) / A_{u\ell}(\nu)$ laserväliaineessa ja mikä on sitä vastaava lämpötila?

Siten saadaan

$$A_{u\ell}(\nu) = 8\pi h\nu^3/c^3 B_{u\ell}(\nu) \quad (6.54)$$

ja

$$g_\ell B_{\ell u}(\nu) = g_u B_{u\ell}(\nu). \quad (6.55)$$