Rozšíření a tvar spektrálních čar

přednáška – podzim 2021

A. Brablec

Ústav fyzikální elektroniky
PřF MU v Brně
Kotlářská 2, 61137 Brno
Česká republika

1 Úvod

- atomová spektroskopie - diagnostika plazmatu, astrofyzika, laserová fyzika, ...

2 Metoda klasického oscilátoru

- souvislost s interakcí atomů s okolními částicemi $\longrightarrow$ obecná teorie atomových srážek
- v oblasti nepříloš vysokých tlaků, kdy platí srážkové přiblížení to znamená výpočet amplitudy rozptylu nebo fázového posuvu
- obvykle se začíná tlakovým rozšířením
- Předpoklady:

  relativní pohyb částic či rušících částic $\longrightarrow$ trajektorie rušících čístic

  trajektorie je po částech lineární

  převládají binární interakce

  porucha je adiabatická $\longrightarrow$ nejsou povoleny přechody mezi různými stavy atomu

- rušící částice vytváří vnější pole $V(r) = V(\sqrt{\rho^2 + v^2(t-t_0)^2})$, ρ srážkový parametr, t_0 doba nejbližšího přístupu, v vzájemná rychlost
- kmity oscilátoru $f(t) = \exp\left[i\omega_0 t + i\int\limits_{-\infty}^{t} k(t')\mathrm{d}t'\right]$, kde ω_0 je neporušená frekvence, $k(t)$ je posuv frekvence vyvolaný srážkami
- porucha monochromatičnosti má za následek rošíření čáry $\longrightarrow$ Fourierova transformace

$$I(\omega) = \lim_{T\to\infty}\left|\frac{1}{2\pi T}\int\limits_{-T/2}^{+T/2} f(t)\exp(-i\omega t)\mathrm{d}t\right|^2$$

$$= \lim_{T\to\infty}\left|\frac{1}{2\pi T}\int\limits_{-T/2}^{+T/2} f(t)\exp\left[-i(\omega-\omega_0)t + i\eta(t)\right]\mathrm{d}t\right|^2, \eta(t) = \int\limits_{-\infty}^{t} k(t')\mathrm{d}t'$$

obvykle $\omega - \omega_0 \longrightarrow \omega$ pak $I(\omega) = \lim_{T\to\infty}\left|\frac{1}{2\pi T}\int\limits_{-T/2}^{+T/2} f(t)\exp\left[-i\omega t + i\eta(t)\right]\mathrm{d}t\right|^2$

- obvykle se tlak a teplota nemění během poruchy s časem $\longrightarrow$ rozšíření je náhodný proces: $I(\omega) = \frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\left[\int\limits_0^\infty \Phi(\tau)\exp(-i\omega\tau)\mathrm{d}\tau\right]$,
- korelační funkce $\Phi(\tau) = \lim\limits_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int\limits_{-T/2}^{+T/2} f(t)^* f(t+\tau)\mathrm{d}t = \overline{f(t)^* f(t+\tau)}$
- zprůměrování přestatický asemblér $\Phi(\tau) =< f(0)^* f(\tau) >$ pro $f(t) = \exp\left[i\eta(t)\right]$ je $\Phi(\tau) =< \exp\left[\eta(\tau)\right] >$
- srážkové rozšíření - během srážky se naruší monochromatičnosti, což vede ke změně fáze, doba srážky $\ll$ doba mezi srážkami $\longrightarrow$ srážky se projeví jen změnou η
- počet srážek $P(\rho, v)\mathrm{d}\rho\mathrm{d}v\Delta\tau$, $< 1 - \exp(i\Delta\eta) >= \theta\Delta\tau$, $\theta = \int[1-\exp(i\eta)]P(\rho,v)\mathrm{d}\rho\mathrm{d}v$, $\theta = N\int\limits_0^\infty vF(v)\mathrm{d}v.2\pi\int\limits_0^\infty \rho\mathrm{d}\rho[1-\exp(i\eta)]$ $\sigma' = 2\pi\int\limits_0^\infty(1-\cos\eta)\rho\mathrm{d}\rho$, $\sigma'' = 2\pi\int\limits_0^\infty \sin\eta\rho\mathrm{d}\rho$

- Pak $\theta = N < v(\sigma' - \sigma'') >$, $\Phi = \exp(-v\tau)$ a tedy
  $I(\omega) = \frac{\gamma}{2\pi}\frac{1}{(\omega-\Delta)^2+(\gamma/2)^2}$, $\gamma = 2N < v\sigma' >$, $\Delta = N < v\sigma'' >$
- obecně $k = C_n R^{-n} = C_n[\rho^2 + v^2(t-t_0)^2]^{n/2}$,
  $\eta(\rho, v) = C_n \int\limits_{-\infty}^{+\infty} [\rho^2 + v^2(t-t_0)^2]^{n/2} \mathrm{d}t = \alpha_n \frac{C_n}{v\rho^{n-1}}$, $\alpha_n = \sqrt{n}\frac{\Gamma(\frac{n-1}{2})}{\Gamma(\frac{n}{2})}$
- $n = 3$, $\gamma = 2\pi^2 C_3 N$
- $n = 4$, $\gamma \approx 11.4 C_4^{2/3} < v^{1/3} > N$, $\Delta = \sqrt{3}/2 * \gamma$
- $n = 6$, $\gamma \approx 8.16 C_6^{2/3} < v^{1/3} > N$, $\Delta = 0.36 * \gamma$
- silné srážky: $\eta \geq 1$ a $\rho < \rho_0 \longrightarrow \eta(\rho_0) = 1$, $\rho_0 = \left(\frac{\alpha_n C_n}{v}\right)^{1/(n-1)}$, $\sigma' \approx \pi\rho_0^2$
- $n = 2$ divergence, rozšíření jeurčeno vzdálenými (slabými) srážkami $\rho > \rho_0$

- kvazistatické přiblížení pokud se vn2j39 pole m2n9 pomalu je $I(\omega)$d$\omega \approx$ stat. váhám (konfigurace rušícících částic) $\longrightarrow$ je třeba určit pravděpodobnost $W(R)$dR, že se rušící částice nachází ve vzdálenosti $< R, R +$ d$R >$
- pro R mnohem větší jak vzdálenost atomů nezávisí interakční potenciál na čase $W(R)$d$R = \exp\left[-(R/R_0)^3\right]$ d$(R/R_0)^3$, $R_0 = (2/4\pi N)^{1/3}$, $R = [C_n/(\omega - \omega_0)]^{1/n}$, $I(\omega)$d$\omega = 4\pi/nNC_n^{3/n}(\omega - \omega_0)^{-(3+n)/n} \exp\left[-(\frac{\Delta\omega}{\omega-\omega_0})^{3/n}\right]$ dω $\Delta\omega = C_n R_0^{-n}$
- pro dostatečně velké $\omega - \omega_0$ je $R = C_n^{1/n}(\omega - \omega_0)^{-1/n} \ll R_0$ a $I(\omega)$d$\omega = 4\pi/nNC_n^{3/n}(\omega - \omega_0)^{-(3+n)/n}d\omega$
- podmínky použitelnosti: $h = \rho_0^3 N \ll 1$ srážkové přiblížení, $h = \rho_0^3 N \approx 1$ velké tlaky a rychlosti (kvazistatické přiblížení)
- Dopplerovo rozšíření $W(v)$d$v = 1/\sqrt{\pi} \exp\left[-(v/v_0)^2\right]$ dv/v_0 $v_0 = sqrt2kT/m$ $I(\omega)$d$\omega = 1/\sqrt{\pi} \exp\left[-(\frac{\omega-\omega_0}{\Delta\omega_D})^2\right]$ d$\omega/\Delta\omega_D$, $\Delta\omega_D = \omega_0 \frac{v_0}{c}$, $I(\omega_0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\Delta\omega_D$

- Konvoluce D a L rozšíření pro $L \gg \lambda/2\pi$

  $I(\omega) = \frac{\gamma}{2\pi} \int \frac{W(v)\mathrm{d}v}{(\omega-\Delta-\omega_0 v/v_0)^2+(\gamma/2)^2}$

  $I(\omega) = \frac{\gamma}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{\pi} v_0} \int \frac{\exp\left[-(v/v_0)^2\right]\mathrm{d}v}{(\omega-\Delta-\omega_0 v/v_0)^2+(\gamma/2)^2}$ - pro Maxwellovo rozdělení

3 Obecná teorie srážkového rozšíření

- $I(\omega) \approx \left|\int P_{\alpha\beta}(t) \exp(-i\omega t)\mathrm{d}\right|^2$, $P_{\alpha\beta}$ maticový element dipólové matice spočtené pomocí porušené vlnové funkce Ψ_α, Ψ_β
- $H = H_0 + V(t)$, $I(\omega) = \sum_{\alpha,\beta} \Psi_{\alpha\beta}(\omega)$
- $\Psi_\alpha(t) = \sum_{\alpha'} a_{\alpha'\alpha}(t)\Psi_{\alpha'} \exp(-\frac{i}{\hbar}E_{\alpha'}t)$
- $< P_{\alpha\beta}(t)P_{\beta\alpha}(0) = \sum_{\alpha'\beta'} < a^*_{\alpha'\alpha}(\tau)a_{\beta'\beta}(\tau) > P_{\alpha'\beta'}P_{\beta\alpha} \exp(i\omega_{\alpha'\beta'})$
- matice hustoty $\rho =< a^*_{\alpha'\alpha}(\tau)a_{\beta'\beta}(\tau) >$
- časový vývoj matice hustoty $\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}(H\rho - \rho H)$
- srážková aproximace $\frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}(H\rho - \rho H) + \frac{\mathrm{d}\rho}{\mathrm{d}t}_{\text{coll}}$
- $\Psi' = S\Psi$ - srážková matice S je obecně komplexní, degenerace hladin, ...