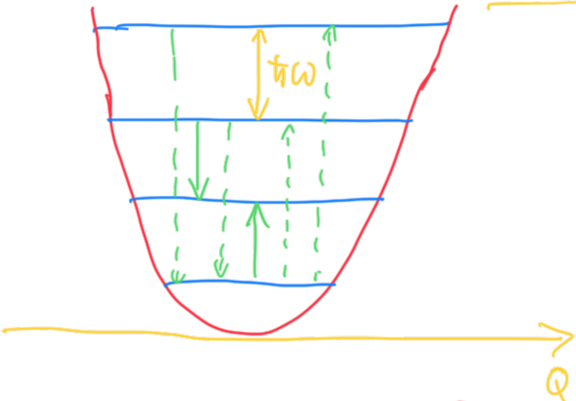
Dipólový operátor a výběrová pravidla v harmonickém oscilátoru



Dvou-hladinový systém $\Rightarrow$ 

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 \end{pmatrix}$$

$$\mu = \begin{pmatrix} 0 & d \\ d & 0 \end{pmatrix}$$

$$H_I = -\vec{\mu}\cdot\vec{E}(t) = -\begin{pmatrix} \ddots & & d_{nm} \\ & \ddots & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \vec{E}(t)$$

$$\boxed{\hat{\mu} = e\hat{Q}}$$

$$d_{nm} = \langle n|\hat{\mu}|m\rangle$$

Př.:

Přechodový dipólový moment $\langle 0|\hat{\mu}|n\rangle$

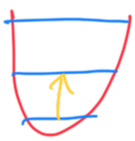
$$\langle 0|\hat{\mu}|n\rangle = e\langle 0|\hat{Q}|n\rangle \propto e\sqrt{\frac{\hbar}{2}}\,\langle 0|(a^\dagger + a)|n\rangle \propto$$

$$\propto \langle 0|\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \langle 0|\sqrt{n}|n-1\rangle$$

$$= \sqrt{n+1}\,\delta_{0,n+1} + \sqrt{n}\,\delta_{0,n-1}$$

$$= \sqrt{n}\,\delta_{0,n-1}$$

Jediný nenulový element je d_{01}

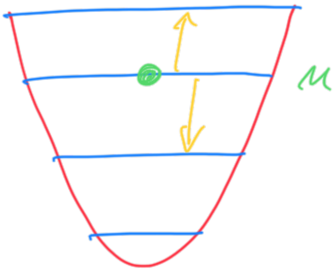


ze základního stavu absorbuje HO pouze na frekvenci ω

Výběrová pravidla

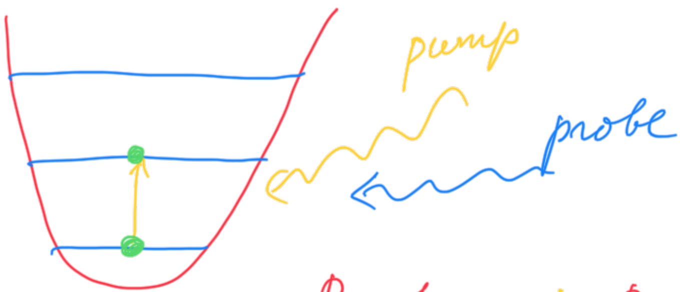
$$\langle n|\hat{\mu}|m\rangle \neq 0 \quad \text{kdy?}$$

$$\langle n|\hat{Q}|m\rangle \propto \langle n|a^{\dagger}+a|m\rangle = \langle n|\sqrt{m+1}\,|m+1\rangle + \langle n|\sqrt{m}\,|m-1\rangle$$
$$= \sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1} + \sqrt{m}\,\langle n|m-1\rangle$$



Všechny dovolené přechody mají frekvenci $\underline{\underline{\omega}}$

Měření transientní absorpce na molekulárních vibracích



signál ⇒ ΔP stimulovaná emise +

ΔP absorpce do ex. stavu −

ΔP chybějící absorpce ze zákl. stavu +

$$P_0 = 1 \rightsquigarrow P_0 = 1 - \Delta P$$
$$P_1 = \Delta P$$

$$\langle 0|\mu|1\rangle^2 + \langle 0|\mu|1\rangle^2 - \langle 1|\mu|2\rangle^2$$

GS SE ESA

Celkový signál $\approx \langle 0|\mu|1\rangle^2 + \langle 0|\mu|1\rangle^2 - \langle 1|\mu|2\rangle^2$

$S =$

$\langle 0|Q|1\rangle \;\; 1$

$\langle 1|Q|2\rangle = \sqrt{2} \quad \Rightarrow \quad S \approx 1+1-2 = \underline{\underline{0}}$