Тема 2. Спонтанні та вимушені переходи.
Лекція 2.

Рівноважний стан квантових систем, населеність енергетичних рівнів. Закон розподілу населеності квантових систем. Властивості вимушеного випромінювання. Співвідношення між імовірностями вимушеного і спонтанного випромінювання.

Згідно з класичними уявленнями, випромінювання і поглинання електромагнітних хвиль кількісно пов'язано із сповільненням та прискоренням електричних зарядів. Наприклад, процес спонтанного випромінювання супроводжується витратою початкової енергії осцилятора на випромінювання протягом деякого проміжку часу, кількісною характеристикою якого служить середній час життя $\tau *$(під часом життя розуміють часовий інтервал, протягом якого початкова енергія елементарного осцилятора змінюється в e разів). В результаті – випромінювана потужність зменшується з часом по експоненті і розсіюється в просторі.

В квантовій теорії мають справу з стаціонарними станами, і припускається, що елементарні акти поглинання і випромінювання відбуваються миттєво. А.Ейнштейн запропонував процес випромінювання або поглинання характеризувати ймовірністю або числовим коефіцієнтом, який визначається кількістю переходів, що відбуваються в середньому за одиницю часу з кожним атомом даного ансамблю. Ймовірності, отримані з досліду, є статистичними емпіричними сталими атомних процесів, знання яких дозволяє чисельно описати поведінку даної сукупності атомів. Квантова механіка дає можливість, виходячи з будови електронної оболонки атома, обчислити як абсолютні, так і відносні значення цих коефіцієнтів.

Плоску монохроматичну хвилю характеризують хвильовим вектором $\overline{\mathbf{k}}$, поляризацією α. Частота хвилі $\omega = ck$, довжина хвилі $\lambda = 2\pi / k$. Індекс поляризації набуває тільки двох значень $(\alpha = 1{,}2)$ - правої і лівої у випадку кругової поляризації. Реальні хвилі можна описувати суперпозицією плоских монохроматичних хвиль. При квантово-механічному розгляді кожній з вхідних у таку суперпозицію хвиль відповідає деяка кількість фотонів у відповідному $\overline{\mathbf{k}}_{\alpha}$ просторі. При формуванні суперпозиції виникає „розладнання", яке тягне за собою часткову некогерентність, часткову поляризацію, часткову монохроматичність.

Випромінювання може бути спонтанним (самодовільним), тобто відбуватися при відсутності зовнішньої дії і вимушеним – в результаті дії зовнішнього випромінювання. Поглинання, природно, завжди вимушений процес. При розгляді рівноважного стану між речовиною та полем, як показав А.Ейнштейн, необхідно враховувати не тільки спонтанне випромінювання і процеси поглинання, але і вимушене випромінювання. Ймовірність спонтанного випромінювання визначається лише внутрішніми властивостями атомів і не залежить від інтенсивності падаючого випромінювання. Ймовірність же переходів при поглинанні залежить як від властивостей квантового ансамблю, так і від інтенсивності падаючого випромінювання. Тому для встановлення рівноважного стану системи при довільній інтенсивності падаючого випромінювання необхідне існування вимушених переходів квантових частинок з випромінюванням квантів.

Квантові системи з набором дискретних рівнів мають три типи переходів: спонтанні, індуковані електричним полем та безвипромінювальні релаксаційні переходи. Особливістю індукованих переходів є когерентність випромінювання. Спонтанне випромінювання зумовлює наявність шумів. При спонтанному оптичному переході квантова система може тільки випромінювати фотон і переходити з верхнього енергетичного стану на нижній. Ймовірність спонтанного випромінювання не залежить від зовнішнього електромагнітного поля і тому спонтанне випромінювання некогерентне і зумовлює власний шум кантової системи. В результаті спонтанного випромінювання відбувається спустошення верхніх рівнів, що шкідливо відбивається на коефіцієнтах підсилення лазерних середовищ. Спонтанне випромінювання для лазерів є шкідливим процесом. Спонтанне випромінювання є ефектом принципово квантовим, що не допускає класичного трактування. В класичній механіці знаходження системи в стані нестійкої рівноваги, що має більшу енергію по відношенню до деякого стійкого стану, за умови відсутності зовнішніх збурень може бути нескінченне велике. В квантовій же механіці перебування системи в метастабільному стані в результаті довільного переходу завжди відбувається за скінчений проміжок часу. При індукованих переходах квантова система може переходити як з верхнього стану на нижній з випромінюванням фотона (вимушене випромінювання), так і з нижнього стану на верхній, з поглинанням фотона (явище поглинання).

Властивості вимушеного випромінювання:

1. Ймовірність індукованих переходів за одиницю часу пропорційна густині енергії зовнішнього поля в одиничному спектральному інтервалі (спектральна об’ємна густина енергії) - $\rho_\nu \left\lfloor Дж \cdot c / см^3 \right\rfloor$.
2. Кванти електромагнітного поля, що випромінюються при індукованих переходах, повністю тотожні квантам, що викликали ці переходи $h\nu_{вим} = h\nu_{інд}$. Ймовірність індукованих переходів відмінна від нуля тільки для зовнішнього поля резонансної частоти, тобто для $\nu_{ik} = 1/h(E_i - E_k)$, при цьому $E_i > E_k$.

Спонтанне випромінювання – ефект чисто квантовий, індуковане ж випромінювання має класичний аналог. Дійсно класичний гармонійний осцилятор, який вільно коливається і знаходиться в полі резонансного йому монохроматичного випромінювання, розкачується цією зовнішньою силою. Частота і фаза його коливань, як відомо, визначається частотою і фазою зовнішньої сили. При певному фазовому співвідношенні між вихідними (початковими) вільними коливаннями осцилятора і зовнішньої сили потужність, яка поглинається в осциляторі, може бути від’ємною. Це означає, що для таких фазових співвідношень осцилятор віддає енергію зовнішньому полю під впливом цієї зовнішньої дії, тобто має місце індуковане випромінювання. Класичний ефект передачі енергії осцилятора полю має місце, коли коливання осцилятора і поля знаходяться в квадратурі (зсув фаз $\pi/2$).

Введемо поняття ймовірностей відповідних переходів. Нехай є сукупність однакових квантових частинок, які можуть випромінювати або поглинати фотони з частотою

$$\nu_{ik} = 1/h \cdot (E_i - E_k)$$

Згідно з постулатами А Ейнштейна число спонтанних переходів за одиницю часу в одиниці об’єму з верхнього рівня E_i на нижній E_k пропорційне числу частинок n на вихідному рівні:

$$Z_{ik}^{c} = A_{ik} n_i \cdot \left\lfloor c^{-1} \cdot см^{-3} \right\rfloor$$

Це співвідношення виконується строго, якщо елементарні процеси є незалежними, що характерно для більшості випадків. Коефіцієнт пропорційності A_{ik}:

$$A_{ik} = \frac{Z_{ik}^{c}}{n_i} \cdot \left[c^{-1}\right].$$

Отже A_{ik} визначає число спонтанно випромінюваних за одиницю часу фотонів частоти ν_{ik} в розрахунку на одну збуджену частинку з енергією E_i. Тому коефіцієнт A_{ik} називається ймовірністю спонтанного випромінювання або коефіцієнтом Ейнштейна для спонтанного випромінювання. Розмірність величини A_{ik} обернена часові (c^{-1}).

Число фотонів, що поглинуті ансамблем за одиницю часу в одиниці об’єму - Z_{ki}^{n}, також є пропорційним заселеності початкового (нижнього) рівня E_k. Але на відміну від попереднього випадку, поглинання є вимушеним процесом. Тому воно залежить також від густини падаючого випромінювання ρ_{ν} на даній частоті або енергії фотонів в одиниці об’єму.

$$Z_{ki}^{n} = B_{ki}\rho_{\nu_{ik}} n_k \cdot \left[c^{-1} \cdot см^{-3}\right]$$

Звідси коефіцієнт пропорційності:

$$B_{ik} = \frac{Z_{ki}^{n}}{\rho_{\nu_{ik}} n_i} \left[см^{3} \cdot Дж^{-1} \cdot c^{-2}\right]$$

B_{ik} - число випромінених однією часткою за одиницю часу фотонів з енергією $h\nu_{ik} = E_i - E_k$, віднесених до густини випромінювання. Це коефіцієнт Ейнштейна для вимушеного випромінювання.

Ймовірність переходу - $B_{ik} \cdot \rho_{\nu_{ik}} \left[c^{-1}\right]$. Необхідно підкреслити, що повна тотожність стимулюючого та вимушеного випромінювання зумовлює когерентність підсилення і випромінювання в квантовій електроніці.

Розглянемо взаємодію атома з полем випромінювання абсолютно чорного тіла, яке знаходиться при температурі T. Для такого поля спектральна густина енергії визначається виразом

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu / k_B T} - 1} \tag{1}$$

Повна імовірність переходу з рівня 2, що відповідає більшій енергії, на рівень 1 в присутності поля

$$W'_{21} = B_{21}\rho(\nu) + A \tag{2}$$

Імовірність переходу з рівня 1 на рівень 2

$$W'_{12} = B_{12}\rho(\nu) \tag{3}$$

де $A = 1/t_{spont}$, а B_{21} та B_{12} - постійні, що необхідно визначити. Якщо маємо стан теплової рівноваги при температурі T, імовірність переходів $2 \Rightarrow 1$ дорівнює імовірності переходів $1 \Rightarrow 2$, звідки

$$N_2 W'_{21} = N_1 W'_{12} \tag{4}$$

відношення населеності рівнів N_2 / N_1 визначається розподілом Больцмана:

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-h\nu / k_B T} \tag{5}$$

де g_2 та g_1 - кратності виродження рівнів 2 та 1, відповідно. За допомогою (2), (3), та (4) отримаємо

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}\rho(\nu)}{B_{21}\rho(\nu) + A} \tag{6}$$

Підставив (5) в (6) отримаємо

$$\rho(\nu) = \frac{A(g_2 / g_1) e^{-h\nu / k_B T}}{B_{12} - B_{21}(g_2 / g_1) e^{-h\nu / k_B T}} \tag{7}$$

Оскільки вся система (атоми та поле) знаходиться в тепловій рівновазі, то значення $\rho(\nu)$, що визначається виразом (7) повинно дорівнювати спектральній густині енергії поля випромінювання абсолютно чорного тіла (1), так, що

$$\frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu / k_B T} - 1} = \frac{A(g_2 / g_1) e^{-h\nu / k_B T}}{B_{12} - B_{21}(g_2 / g_1) e^{-h\nu / k_B T}} \tag{8}$$

Оскільки ця рівність повинна виконуватися при будь-якій температурі, отримаємо

$$B_{12} = B_{21}\frac{g_2}{g_1}, \quad \frac{A}{B_{21}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3}, \quad \frac{A}{B_{12}} = \frac{g_1}{g_2}\frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \qquad (9)$$

При відсутності виродження $B_{12} = B_{21}$ (або $B_{ki} = B_{ik}$) . Отже якщо немає виродження енергетичних рівнів, ймовірність вимушених переходів з випромінюванням і поглинанням кванта рівні. Це значить, що фотон з однаковою ймовірністю може індукувати випромінювання ансамблю частинок або бути ним поглинутий.
Цей висновок вперше був здійснений А.Ейнштейном.
При використанні (9) отримуємо

$$\rho_\nu = \frac{A_{ik}}{B_{ik}\left(\exp\frac{h\nu_{ki}}{kT} - 1\right)}$$

У відповідності з (2) та (9) імовірність вимушеного переходу, який обумовлений взаємодією з полем, дорівнює

$$(W_{21}^{'})_{вим} = \frac{Ac^3}{8\pi h\nu^3}\rho(\nu) = \frac{c^3}{8\pi h\nu^3 t_{spont}} \qquad (10)$$

Оскільки при виведенні брали наявність поля випромінювання абсолютно чорного тіла, то вираз (10) є справедливим для будь-якого електромагнітного поля, що має спектр „білого шуму”, інакше кажучи, спектральна густина енергії поля повинна залишатися постійною в області частот, що відповідають вимушеним переходам.

Але для нас головний інтерес представляє взаємодія з монохроматичними полями. Для визначення імовірності переходу W_{21}, який індукований монохроматичним полем, приймемо, що імовірності переходів, що викликані компонентами різних частот багато частотного електричного поля, є адитивними, так, що вираз (10) є частинним випадком більш загального виразу

$$(W_{21}^{'})_{вим} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{Ac^3 \rho(\nu')}{8\pi h \nu'^3} g(\nu' - \nu_0) d\nu' \qquad (11)$$

де $g(\nu' - \nu_0)$- нормована функція форми лінії (з максимумом при ν_0).

Якщо $\rho(\nu')/\nu'^3$ є постійним в межах смуги частот, що поглинаються, то вираз (11) спрощується і приймає вигляд (10).

У випадку монохроматичного електромагнітного поля з частотою ν, густиною енергії ρ_ν спектральна густина енергії дорівнює

$$\rho(\nu') = \rho_\nu \delta(\nu' - \nu)$$

Якщо підставити цей вираз у (11), то отримаємо імовірність переходу, що індукований монохроматичним полем:

$$W_{21} = \frac{c^3 A \rho_\nu}{8\pi h \nu^3} g(\nu - \nu_0) \qquad (12)$$

Можна виразити W_{21} через густину потоку потужності (потужність на одиницю площі) $I_\nu = c\rho_\nu$:

$$W_{21} = \frac{Ac^2 I_\nu}{8\pi h \nu^3} g(\nu - \nu_0) = \frac{\lambda^2 I_\nu}{8\pi h \nu t_{spont}} g(\nu - \nu_0) \qquad (13)$$

За допомогою (9) знаходимо

$$W_{12} = \frac{g_2}{g_1} \frac{Ac^2 I_\nu}{8\pi h \nu^3} g(\nu - \nu_0) \qquad (14)$$

Для отримання абсолютних значень коефіцієнтів Ейнштейна необхідно третє незалежне рівняння, яке може бути отримано за допомогою квантовомеханічної теорії Дірака.

Необхідно пам’ятати, що відомі на сьогоднішній день частинки поділяються за статистикою на дві групи – бозони (частинки з нульовим чи цілочисельним спіном) і ферміони (частинки з напівбілим спіном) Ферміони займають квантові стани тільки поодинці (заборона Паулі). Бозони займають один і той же стан в необмеженій кількості, причому, ймовірність зростає з ростом заселення. Це явище зумовлює конденсацію бозонів. Бозонність фотонів дає можливість опису їх класичними хвилями, так як перехід до класики $N_{k\alpha} >> 1$, а у випадку ферміонів (наприклад електронів) $N \sim 1$, що не дозволяє користуватися класичним описом.

Існування індукованого випромінювання є прямий наслідок бозонного характеру статистики фотонів (спін фотона рівний 1 в одиницях h. тобто він – бозон). З дослідних даних випливає, що маса фотона $m_\gamma < 4 \cdot 10^{21} m_e$, маса спокою фотона рівна нулю, тобто він розповсюджується із швидкістю світла. Індуковане випромінювання треба розглядати як процес, який сприяє більш густому заселенню фотонних станів поля випромінювання, яке взаємодіє з квантовими системами. Фотони поля випромінювання фактом своєї присутності стимулюють народження нових фотонів.

Те, що фотони описуються статистикою Бозе-Ейнштейна, можна показати з наступних міркувань. В силу детальної рівноваги при оптичних переходах:

$$B_{ki}\rho_{\nu_{ki}} n_k = \left(A_{ik} + B_{ik}\rho_{\nu_{ki}}\right) n_i$$

тобто:

$$A_{ik} + B_{ik}\rho_{\nu_{ki}} = \frac{n_k}{n_i}\rho_\nu \cdot B_{ki}$$

де $\rho_{\nu_{ki}} = \dfrac{8\pi h \nu_{ki}^3}{c^3} \cdot \dfrac{1}{\exp\dfrac{h\nu_{ki}}{kT} - 1}$.

Отже:

$$f_{ik} = A_{ik} + B_{ik}\rho_{\nu} = \frac{g_k}{g_i} \cdot \frac{8\pi h \nu_{ki}^3}{c^3} \cdot \frac{\exp\frac{h\nu_{ki}}{kT}}{\exp\frac{h\nu_{ki}}{kT} - 1} \cdot B_{ki}$$

таким чином, ймовірність випромінювання $f_{ik} = \sigma F(T)$, де σ-коефіцієнт, який не залежить ні від температури, ні від густини випромінювання, а

$$F(T) = \frac{\exp\frac{h\nu_{ki}}{kT}}{\exp\frac{h\nu_{ki}}{kT} - 1}$$

Якби фотони були ферміонами, то:

$$F(T) = \frac{\exp\frac{h\nu_{ki}}{kT}}{\exp\frac{h\nu_{ki}}{kT} + 1}$$

і при $T \to \infty$, $F'(T) \to 1/2$, тобто $f_{ik} \to \sigma/2$. Це значить, що має місце лише спонтанне випромінювання.

У випадку бозонної статистики при $T \to \infty$:

$$F(T) \to \frac{kT}{h\nu_{ki}}$$

тобто:

$$f_{ik} \to \sigma \frac{kT}{h\nu_{ki}} \to \infty.$$

Присутність у ймовірності члена, який зростає з температурою, свідчить про наявність індукованого випромінювання, причому, число квантів у будь-якому стані не обмежене.

Умову класичності можна записати так: $E^2 >> \hbar\omega\left(\frac{\omega}{c}\right)^3$

де E- напруженість поля, тобто класичність зменшується із зменшенням напруженості і із збільшенням частоти. В радіодіапазоні умова класичності виконується завжди, а в видимому діапазоні, де $\sqrt{\hbar\omega(\omega/c)^3} \approx 50 В/м \cdot (\omega = 5\cdot 10^{14} Гц)$ - напруженість поля повинна бути набагато більшою – 50 В/м. Для не лазерних джерел у видимому діапазоні $E \approx 10^3 \div 10^4$ В/м, але в дійсності виявляється, що ця вимога не завжди добре виконується, що і призводить до прояву корпускулярних властивостей світла.

Таким чином, повна ймовірність випромінювання (спонтанного плюс індукованого) дорівнює:

$$f_{ik} = A_{ik} + B_{ik}\rho_{\nu_{ki}} = \left(\frac{8\pi h\nu_{ki}^3}{c^3} + \rho_{\nu_{ki}}\right)\cdot B_{ik} \times$$

$$\times\left(\frac{8\pi h\nu_{ki}^3}{c^3} + \rho_{\nu_{ki}}\right)\cdot\frac{g_k}{g_i}\cdot B_{ki}$$

Оскільки f_{ik} пропорційне B_{ik}, то там де заборонені індуковані переходи, заборонені і спонтанні переходи, і навпаки.

Внаслідок бозонної природи фотонів їх число в моді поля необмежене. Тому із зростанням числа актів індукованого випромінювання за одиницю часу інтенсивність вимушеної хвилі зростає, а її фаза і частота залишаються незмінними. Це дозволяє (при великому числі квантів, що не відрізняються один від одного) перейти до класичного розгляду електромагнітного випромінювання, для якого характерний принцип суперпозиції коливань. Зокрема, це призводить до когерентності випромінювання лазера, що принципово відрізняє квантовий генератор від теплових і люмінесцентних джерел випромінювання. Для квантового генератора характерна висока ступінь концентрації світлової енергії в дуже вузькому тілесному куті і малому спектральному інтервалі; іншими словами – висока направленість і монохроматичність випромінювання. До цього слід додати здатність лазеру концентрувати велику енергію в надзвичайно малих відрізках часу.

Співвідношення (9) є основними для елементарних процесів випромінювання. Оскільки в стані теплової рівноваги високі енергетичні рівні мають меншу заселеність чим нижчі, тому акти поглинання відбуваються значно частіше, ніж акти індукованого випромінювання. Загальний енергетичний баланс підтримується за рахунок спонтанного випромінювання та безвипромінювальних переходів. Рівноважне випромінювання всього ансамблю частинок по відношенню до кожної з частинок виступає як зовнішнє поле, яке стимулює поглинання чи випромінювання частинки в залежності від її стану. Тому співвідношення (9), отримані з умови рівноваги (4), справедливі і для випадку квантової системи, що знаходиться в полі зовнішнього випромінювання.

У випадку спонтанних процесів – випромінювання фотонів відбувається в будь-якому напрямку, а вимушене випромінювання фотонів – в напрямку розповсюдження падаючого на частинку випромінювання. Цілком природно, що вимушене випромінювання можна розглядати як процес протилежний поглинанню. Тому його ще називають від'ємним поглинанням. При цьому під дією випромінювання при елементарному процесі поглинання число фотонів частоти ν_{ik} зменшується на одиницю, а при елементарному процесі вимушеного випромінювання – збільшується на одиницю. Це одно фотонні процеси.

Необхідно підкреслити ще раз, що коефіцієнти Ейнштейна залежать тільки від властивостей квантових частинок ансамблю і не залежать від поля випромінювання.

Коефіцієнт поглинання.

Якщо монохроматична хвиля розповсюджується в середовищі з населеностями рівнів N_2 та N_1, то зміна густини потоку потужності I_ν, що обумовлена вимушеними переходами дається

$$\frac{dI_\nu}{dz} = [N_2 W_{21} - N_1 W_{12}]h\nu = -\left[N_1\frac{g_2}{g_1} - N_2\right]\frac{c^2 g(\nu-\nu_0)}{8\pi\nu^2 t_{spont}} I_\nu$$

де були використані вирази (13) та (14). Отже, густина потоку потужності буде змінюватися по закону $I_\nu(z) = I_\nu(0)e^{-\alpha(\nu)z}$, де

$$\alpha(\nu) = -\frac{dI_\nu}{dz}\frac{1}{I_\nu} = \left(N_1\frac{g_2}{g_1} - N_2\right)\frac{c^2}{8\pi\nu^2 t_{spont}}\, g(\nu - \nu_0) \qquad (15)$$

Якщо прослідкувати за виведенням формули (15), то легко впевнитися, що вона є застосовною як при однорідному розширенні, так і при неоднорідному. Ця її властивість обумовлена тим, що $g(\nu' - \nu_0)$, як видно з формули (11), є мірою відносної ефективності, з якою випромінювання частоти ν' індукує переходи. Дане визначення є справедливим для обох типів розширення.

До цього висновку можна прийти і іншим шляхом. Припустимо, що $g(\nu - \nu_0)$ в (15) відноситься до однорідно розширеної лінії, і, отже, центральна частота ν_0 однакова для всіх атомів. Припустимо далі, що по якийсь причині (неоднорідне магнітне поле, неоднорідності кристалу і таке ін.) центральні частоти ν_0 розійшлися і імовірність того, що центральна частота якогось із атомів дорівнює ν' визначається неоднорідною функцією форми лінії $b(\nu' - \nu_0)$ з центром в ν_0. В цьому випадку, нехтуючи зміною ν^2 в межах суттєвого при інтегруванні інтервалу частот, отримаємо коефіцієнт поглинання

$$\alpha(\nu) = \left(N_1\frac{g_2}{g_1} - N_2\right)\frac{c^2}{8\pi\nu^2 t_{spont}}\int_{-\infty}^{\infty} g(\nu - \nu_0{}')\, b(\nu_0{}' - \nu_0)\, d\nu_0{}'.$$

Для простоти будемо вважати лінію $g(\nu - \nu_0)$ дуже вузькою у порівнянні з $b(\nu_0{}' - \nu_0)$. Це дозволяє винести $b(\nu - \nu_0)$ з під знаку інтегралу і приходимо до формули

$$\alpha(\nu) = \left(N_1\frac{g_2}{g_1} - N_2\right)\frac{c^2}{8\pi\nu^2 t_{spont}}\, b(\nu - \nu_0)$$

що відрізняється від (15) лише заміною $g(\nu - \nu_0)$ на функцію неоднорідної форми лінії $b(\nu - \nu_0)$.

Умовою експоненціального наростання електромагнітного поля є

$$N_2 > \frac{g_2}{g_1} N_1 \tag{16}$$

Таким чином, залежність експоненціального підсилення або затухання від частоти співпадає з функцією форми спектральної лінії. Форми спектральних ліній, що зустрічаються на практиці, звичайно можна апроксимувати кривими Гаусса або Лоренца. Гауссова форма спектральної лінії найбільш часто зустрічається в газах. Внаслідок руху частинок газу має місце допплерівський зсів частоти випромінювання, є справедливим максвелівський розподіл по швидкостям, і відповідна функція розподілу по частотам, тобто $g(\nu-\nu_0)$ є гауссовою.

Нормована крива Гауса має вигляд

$$g(\nu-\nu_0) = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi}\Delta\nu} \exp\left[-\frac{4\ln 2(\nu-\nu_0)^2}{(\Delta\nu)^2}\right] \tag{17}$$

де $\Delta\nu$ - повна ширина лінії на рівні половинної інтенсивності. Якщо газ знаходиться при температурі T, а маса частинки (атому або молекули) дорівнює M, то

$$\Delta\nu = \Delta\nu_D = 2\nu_0 \sqrt{\frac{2k_B T}{Mc^2}\ln 2} \tag{18}$$

Ця величина звичайно називається допплерівською шириною спектральної лінії.

Крива Лоренца відноситься до тих випадків, коли форма спектральної лінії обумовлена скінченими часами життя на рівнях, що приймають участь в переходах.

Нормована крива Лоренцо має вигляд

$$g(\nu-\nu_0) = \frac{\Delta\nu}{2\pi\left[(\nu-\nu_0)^2 + (\Delta\nu/2)^2\right]} \tag{19}$$

де - $\Delta\nu$ - повна ширина лінії на рівні половинної інтенсивності.

Сила осцилятору

В оптичному діапазоні інтегральне поглинання атому часто характеризується силою осцилятору $2 \to 1$:

$$f_{21} = \frac{\varepsilon_0 mc}{\pi e^2 \left[N_1 (g_2 / g_1) - N_2\right]} \int_0^\infty \alpha(\nu) d\nu \qquad (20)$$

Підставив вираз (15) для $\alpha(\nu)$ та виконав інтегрування. можна виразити f_{21} через t_{spont}:

$$f_{21} = \frac{\varepsilon_0 mc^3}{8\pi^2 e^2 \nu^2 t_{spont}} \qquad (21)$$

можна також виразити t_{spont} через дипольний матричний елемент x_{21}:

$$f_{21} = \frac{m\omega x_{21}^2}{h} \qquad (22)$$

Цей вираз пояснює, чому f_{21} служить мірою сили переходу $2 \leftrightarrow 1$. Якщо перехід заборонено, як, наприклад, дипольні переходи між станами з одноковою парністю, то $x_{21} = 0$ і $f_{21} = 0$. Якщо навпаки, перехід дозволено, то $f \approx 1$. Розглянемо наприклад перехід атому водоводу із стану $n = 2$ у стан $n = 1$. Енергія переходу дорівнює

$$\hbar\omega = E_2 - E_1 = \frac{e^4 m}{8\varepsilon_0^2 h^2}\left(\frac{1}{1} - \frac{1}{4}\right)$$

Для грубої оцінки величини матричного елементу x_{21} можна взяти радіус першої орбіти Бора: $x_{21} \approx a_1 = \varepsilon_0 h^2 / \pi e^2 m$. Якщо підставити це в (22) отримаємо $f \approx 1/16$. Формули (21) та (22) дозволяють з використанням експериментальних даних о поглинанні, обчислювати спонтанний час життя.