Estructura 3

TEMA 18. El cuerpo negro y los coeficientes de Einstein.

J. E. Miraglia.

Departamento de Física. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. Argentina.

(Dated: June 15, 2016)

Abstract

IMPORTANCIA

FORMULACION. Ley de Boltzman. ley de Plank. El cuerpo negro.

COEFICIENTES DE EINSTEIN

falta dibujos , espanol y bibliografia.

PACS numbers:

Miraglia. Estructura 3 (19.11). 1er. cuat 2016

I. IMPORTANCIA

Cuando uno comienza cuántica en su forma mas elemental (gralmente en en el contexto de física moderna) la primer clase está dedicada al cuerpo negro. Se cálcula el llamado espectro de Rayleigh-Jeans se encuentra que esta en desacuerdo con los experimentos. Algunos libros hablan de la "catastrofe del ultravioleta" (ya no se usa). Se propone el postulado de Plank, se introduce su constante h y de allí en más se ingresa a la mecánica cuántica.

A esa altura de la carrera no quedaba claro, que es realmente el cuerpo negro. Típicas frases que se invocaban eran : "todo cuerpo a una determinada temperatura emite esta radiación"¨, "radiación térmica",.. "superficie que absorve toda la radiación que incide", "cavidad electromagnética", etc. **Pero que es un cuerpo negro?** A esta altura de lo que conocemos sobre teoría de la radiación-materia estamos en condiciones de encontrar la interpretación física de un cuerpo negro (el modelo de partida). Resulta interesante (épico digamos) entender en la última clase lo que se planteó en la primera.

Una consecuencia de este tema fue estudiado por Einstein bajo el nombre de *detail balancing*. La derivación de Einstein es diferente a la que presentamos aca. Aca nos interesara ver la conexión con la teoria de Plank y el equilibrio termodinámico (debo reconocer que lo haremos en una forma algo forzada). Lo que resulta extraordinario es que Einstein lo considero un postulado porque todavía no se conocian las ecuaciones especificas que involucraban la emisión (espontánea) y absorcion.

A. FORMULACION

Consideremos una caja de volumen $\mathcal{V}$ con un gran número de átomos variados que emiten y absorben radiación (que ahora sabemos son fotones). Este sistema de átomos lo podemos considerar en equilibrio a una cierta temperatura T.

Que sabemos de la Física clasica?

1- Si hacemos un pequeno agujero en la caja de volumen $\mathcal{V}$, la radiación electromagnética que emerge corresponde a la del **cuerpo negro**.

2- El número total de átomos en cada estado de energía debe estar distribuido de acuerdo a la estadística de **Maxwell Boltzman** correspondiente a la temperatura T.

3- Como el sistema está en **equilibrio**, el número total de átomos en cada nivel de energía

Miraglia. Estructura 3 (19.11). 1er. cuat 2016

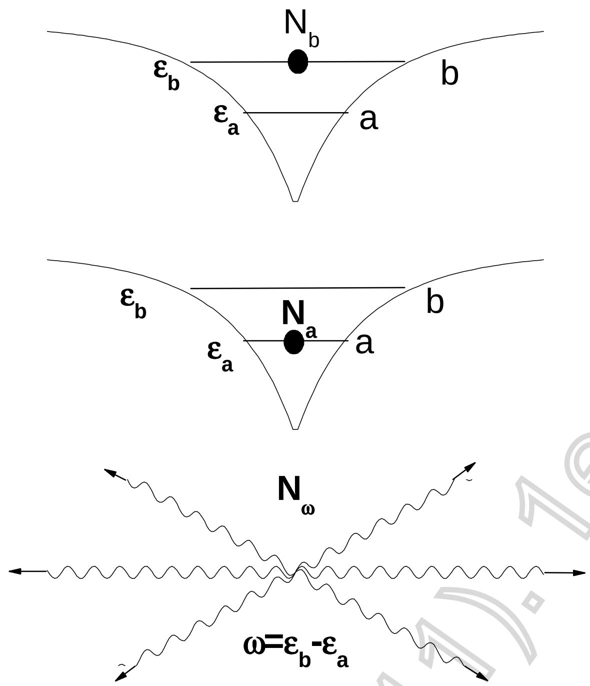

FIG. 1:

debe permanecer constante. Esquematicamente los componentes que componen un cuerpo negro lo vemos en la figura.Vamos a suponer que los átomos o iones interactúan solamente via emisión y absorción de fotones, según lo hemos visto en las notas anteriores. El sistema esta en un baño de fotones que incluyen todas las frecuencias. Supongamos dos estados cualquiera de un cierto átomo (*two state system*, luego lo generalizaremos). Llamemos (trabajaremos en unidades atomicas)

$$\begin{aligned}
N_a &= \text{ número de átomos en el estado } a, \\
n_a &= \frac{N_a}{\mathcal{V}} = \text{ densidad del estado } a, \\
E_a &= \text{ Energía del estado } a, \text{ caracterizado por la función } \psi_a, \\
N_b &= \text{ número de átomos en el estado } b, \\
n_b &= \frac{N_b}{\mathcal{V}} = \text{ densidad del estado } b, \\
E_b &= \text{ Energía del estado } b, \text{ caracterizado por la función } \psi_b,
\end{aligned}$$

Miraglia. Estructura 3 (19. 11). 1er. cuat 2016

y además que

$$E_b \; > \; E_a \quad \text{tal que } \omega_{ba} = \omega = E_b - E_a > 0, \quad \text{y} \tag{1}$$

$$N_{\lambda \overrightarrow{k}} \; = \; N_\omega = \text{ número de fotones con energía } \hbar\omega \text{ en } \mathcal{V},$$

$$n_\omega \; = \; \frac{N_\omega}{\mathcal{V}} = \text{ densidad de esos fotones.} \tag{2}$$

Por simplicidad llamaremos directamente $\omega_{ba} = \omega$.

1. Fotoexcitación

Planteemos la equivalencia básica. Conocemos la probabilidad de transición por unidad de tiempo de que el sistema estando en el estado a, absorba un fotón de energia $\omega = \omega_{ba}$ con polarización $\widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}}$ y sea fotoexcitado al estado b (ligado). De las ecuaciones de foto excitación resulta (en a.u.)

$$\frac{d\, W^{-}_{b \leftarrow\, a}}{dt\; d\overrightarrow{f}} \; = \; 2\pi\delta\left[(E_a+\omega) - E_b\right] \overbrace{\left(\frac{2\pi N_\omega}{\omega \mathcal{V}}\right)}^{A^2_{N_\omega}} \left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \cdot \langle \overrightarrow{p} \rangle_{ba}\right|^2, \tag{3}$$

$$\frac{d\, W^{-}_{b \leftarrow\, a}}{dt} \; = \; N_\omega \frac{4\pi^2}{\omega \mathcal{V}} |\widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \cdot \langle \overrightarrow{p} \rangle_{ba}|^2 = N_\omega \; X, \tag{4}$$

$$X \; = \; \frac{4\pi^2}{\omega \mathcal{V}} |\widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \cdot \langle \overrightarrow{p} \rangle_{ba}|^2 = \frac{4\pi^2}{\omega \mathcal{V}} \left|\widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \cdot i\omega \left\langle \overrightarrow{r} \right\rangle_{ba}\right|^2 \tag{5}$$

Podemos reducir la expresión de X (ver apendice). Como es fotoexcitación hemos hecho la equivalencia $\int d\overrightarrow{f}\, \delta\left[(E_a+\omega) - E_b\right] \equiv 1$. ya que $d\overrightarrow{f} \; = \Sigma n + \int dk$ y nos que damos con la delta de Kronecker. Hay otra forma de escribir (4) mas popular, llamando (ver segunda cuantificación)

$$I(\omega) = \rho(\omega)c = \frac{\omega N_\omega}{\mathcal{V}} c, \implies \quad N_\omega = \frac{I(\omega)\mathcal{V}}{\omega c} \tag{6}$$

entonces queda

$$\frac{d\; W^{-}_{b \leftarrow a}}{dt} = I(\omega) \frac{4\pi^2}{\omega^2 c} |\widehat{\varepsilon}_{\lambda \overrightarrow{k}} \cdot \langle \overrightarrow{p} \rangle_{ba}|^2 \tag{7}$$

y asi nos liberamose una cantidad teórica N_ω por otra mas física $I(\omega)$.

2. Decaimiento radiativo

Por otro lado, la probabilidad de transición por unidad de tiempo de que el sistema estando en el estado b, emita un fotón de energia $\omega_{ba} = \omega$ y caiga al estado $a-$fotoemisión.

Miraglia. Estructura 3 (1911) 1er. cuat 2016

esta dado por.

$$
\begin{aligned}
\frac{d\, W^{+}_{a\leftarrow b}}{dt\; d\overrightarrow{f}} &= 2\pi\delta\left[\varepsilon_b - (\varepsilon_a + \omega_{ba})\right] \overbrace{\left(\frac{2\pi(N_\omega+1)}{\omega V}\right)}^{A^2_{N_\omega+1}} \left|\widehat{\varepsilon}^{*}_{\lambda\overrightarrow{k}} \cdot \langle\overrightarrow{p}\rangle_{ab}\right|^2, &(8)\\
\frac{d\, W^{+}_{a\leftarrow b}}{dt} &= (N_\omega+1)\frac{4\pi^2}{\omega\mathcal{V}}|\widehat{\varepsilon}^{*}_{\lambda\overrightarrow{k}} \cdot \langle\overrightarrow{p}\rangle_{ab}|^2. =(N_\omega+1)X, &(9)
\end{aligned}
$$

donde usamos nuevamente la delta de Kronecker.

3. Equilibrio

Teniendo las expresiones de foto-excitación ($W^{+}_{a\leftarrow b}$) y foto-decaimiento ($W^{-}_{b\leftarrow a}$) planteemos la *Master equatión*

$$
\begin{aligned}
\frac{dN_a}{dt} &= \frac{d\, W^{+}_{a\leftarrow b}}{dt} N_b - \frac{d\, W^{-}_{b\leftarrow a}}{dt} N_a, &(10)\\
&= \left[(N_\omega+1)N_b - N_\omega N_a\right]\ X, &(11)
\end{aligned}
$$

y similarmente

$$
\begin{aligned}
\frac{dN_b}{dt} &= \frac{d\, W^{-}_{b\leftarrow a}}{dt} N_a - \frac{d\, W^{+}_{a\leftarrow b}}{dt} N_b, &(12)\\
&= \left[N_\omega N_a - (N_\omega+1)N_b\right] X, . &(13)
\end{aligned}
$$

La primera relación importante es que de (11) y (13)

$$
\begin{aligned}
\frac{dN_b}{dt} + \frac{dN_a}{dt} &= 0, \quad \text{o sea} &(14)\\
\frac{d}{dt}(N_b + N_a) &= 0 &(15)
\end{aligned}
$$

que era de esperar de un sistema **cerrado**. **Nada se pierde en el sistema $a + b$ via ω.**

Ahora sí, supongamos que estamos en **equilibrio,** en este caso

$$
\frac{dN_b}{dt} = 0, \quad \text{y} \quad \frac{dN_a}{dt} = 0, \tag{16}
$$

de lo que resulta la misma ecuación y nos da

$$
\frac{N_a}{N_b} = \frac{1+N_\omega}{N_\omega}. \tag{17}
$$

Miraglia. Estructura 3 (19.11). 1er. cuat 2016

4. Maxwell-Boltzman

Ahora usemos el hecho que la densidad de estados esta regido por la estadística de **Mawxell-Boltzman ,** $N(\varepsilon) \propto \exp[-\varepsilon/k_B T]$

$$\begin{aligned} \frac{N_a}{N_b} &= \frac{n_a}{n_b} = \frac{\exp[-\varepsilon_a/k_B T]}{\exp[-\varepsilon_b/k_B T]}, \\ &= \exp[(\varepsilon_b - \varepsilon_a)/k_B T] = \exp(\omega_{ba}/k_B T) = \exp(\omega/k_B T). \end{aligned} \tag{18}$$

Reemplazando en (17)

$$\frac{n_a}{n_b} = \frac{N_a}{N_b} = \frac{1+N_\omega}{N_\omega} = \exp[\omega/k_B T], \tag{19}$$

$$N_\omega = \frac{1}{\exp(\omega/k_B T) - 1}. \tag{20}$$

(notar el -1 en el denominador!). Si $\omega \to 0, N_\omega \to \infty$, y si $\omega \to \infty, N_\omega \to \exp(-\omega/k_B T) \to 0$. Recordemos que estamos trabajando en unidades atomicas por lo que $\omega \equiv \hbar\omega$.

5. Ley de Plank

Ahora consideremos un ensamble de fotones con atomos con energía ω de modo tal que el espectro sea continuo, por lo que ahora tenemos en cuenta la densidad de fotones en particular elemento de volumen en el espacio $\overrightarrow{k}$ de fotones. Esto significa fisicamente pasar al continuo de ω con todo lo que eso implica. Esto es considerar que hay infinitos estados excitados de modo tal que las transiciones formen un continuo (que es la base del **cuerpo negro).** El número total de fotones en $\mathcal{V}$ será

$$N = \int N_\omega \, d\overrightarrow{f} = \int N_\omega \underbrace{\frac{\overbrace{2}^{polariz.\lambda} \; \mathcal{V}}{(2\pi)^3} d\overrightarrow{k}}_{d\overrightarrow{f}} = \int N_\omega \frac{2\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \frac{d\overrightarrow{\omega}}{c^3}, \tag{21}$$

$$= \frac{2\,\mathcal{V}}{(2\pi)^3 c^3} \int d\omega\; \omega^2 N_\omega \underbrace{\int d\Omega_\omega}_{4\pi} = \frac{8\pi\,\mathcal{V}}{(2\pi)^3 c^3} \int d\omega\; \omega^2 N_\omega, \tag{22}$$

$$\frac{N}{\mathcal{V}} = n = \frac{8\pi}{(2\pi)^3 c^3} \int d\omega\; \omega^2 N_\omega = \int d\omega\; \underbrace{\frac{1}{\pi^2 c^3} \omega^2 N_\omega}_{\frac{dn_\omega}{d\omega}} \tag{23}$$

$$= \int d\omega \frac{dn}{d\omega} \tag{24}$$

Miraglia. Estructura 3 (19.11). 1er. cuat 2016

donde n es la densidad total de fotones (sumando todos los colores). La cantidad de fotones entre ω y $\omega + d\omega$ en la caja $\mathcal{V}$ es dn_ω

$$\frac{dn_\omega}{d\omega} = \frac{\omega^2 N_\omega}{\pi^2 c^3} \tag{25}$$

Reemplazando (20) resulta

$$\frac{dn_\omega}{d\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\omega/k_B T) - 1} \tag{26}$$

La energía de cada estado es $\hbar\omega = \omega$ en unidades atómicas, con lo que la densidad de energía total (integrada angularmente por unidad de volumen) es

$$\rho_{ph}(\omega) = \frac{d\varepsilon}{d\omega} = \omega \frac{dn_\omega}{d\omega} = \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\omega/k_B T) - 1}. \tag{27}$$

Que no es otra cosa que la **ley de Plank !!.** Ahora queda entendido el cuerpo negro en el que la emisión espontánea es determinante en este análisis.

Y de allí sale todo lo que se vio en F´isica Moderna. Por ejemplo si queremos ver toda la energía del cuerpo negro o sea integrando todas las frecuencias tenemos

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \int_0^\infty d\omega \ \frac{d\varepsilon}{d\omega}(\omega) = \int_0^\infty d\omega \ \rho_{ph}(\omega) = \int_0^\infty d\omega \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\omega/k_B T) - 1}, \\ &= \frac{\pi^2}{15 c^3} k^4 \ T^4 = \quad Cte \ T^4, \end{aligned} \tag{28}$$

que no es otra cosa que la ley de Stephen Boltzman. Y sigue Física Moderna.

B. COEFICIENTES DE EINSTEIN

Verificamos entonces la propiedad de los cuerpos negros (o como sabemos ahora: una colección de atómos embebidos en un gas de fotones) basandonos en la formalismo de la interacción materia-radiación. Einstein lo hizo al revés. Propuso la siguiente *master equati*ón (BJ168)

$$\begin{cases} \frac{dN_{b\leftarrow\ a}}{dt} = B_{b\leftarrow\ a}\rho(\omega)N_a & \text{(asistido)} \\ \frac{dN_{a\leftarrow b}}{dt} = B_{a\leftarrow b}\rho(\omega)N_b + A_{a\leftarrow b}N_b & \text{(asistido + espontáneo)} \end{cases} \tag{29}$$

$$\frac{dN_{b\leftarrow\ a}}{dt} = B_{b\leftarrow\ a}\rho(\omega)N_a \tag{30}$$

$$\frac{dN_{a\leftarrow b}}{dt} = B_{a\leftarrow b}\rho(\omega)N_b + A_{a\leftarrow b}N_b \tag{31}$$

Miraglia- Estructura 3 (19.11) 1er. cuat 2016

donde como siempre

$$\begin{aligned} N_a &= \text{ número de átomos en el estado } a, \\ N_b &= \text{ número de átomos en el estado } b, \end{aligned}$$

y $\rho(\omega)$ esta dado por (6)

$$\rho(\omega) = \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\omega/k_B T) - 1} \tag{32}$$

Los coeficientes $B_{a\leftarrow b}, B_{b\leftarrow a}$ y $A_{b\leftarrow a}$ son los coeficientes de Einstein y el encontró que

$$\begin{aligned} B_{a\leftarrow\ b} &= B_{b\leftarrow\ a} \quad (\textit{detail balancing}) &(33)\\ A_{a\leftarrow b} &= \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} B_{a\leftarrow b} &(34) \end{aligned}$$

Notese que $A_{b\rightarrow a}$ esta relacionado a la emisión espontánea.

Para empezar vamos a determinar el valor de $B_{b\leftarrow\ a}$.Sabemos que la fotoexcitación nos da

$$\frac{dN_{b\leftarrow a}}{dt} = \frac{dP_{b\leftarrow a}}{dt} N_a = N_\omega X\ N_a \tag{35}$$

igualandolo a (30) resulta

$$B_{b\leftarrow\ a} = \frac{N_\omega X}{\rho(\omega)} = \frac{N_\omega}{\underbrace{\frac{\omega N_\omega}{\mathcal{V}}}_{\rho(\omega)}} \overbrace{\frac{4\pi^2\omega}{3\mathcal{V}} \langle r\rangle_{ba}^2}^{X} = \frac{4\pi^2}{3\mathcal{V}} \langle r\rangle_{ba}^2 \tag{36}$$

Ahora si, como vimos, en equilibrio resulta que

$$\frac{dN_{b\leftarrow a}}{dt} = \frac{dN_{a\leftarrow b}}{dt} \tag{37}$$

En terminos de los coeficientes de Einstein la identidad (37) queda

$$\begin{aligned} B_{b\leftarrow\ a}\rho(\omega)N_a &= B_{a\leftarrow b}\rho(\omega)N_b + A_{a\leftarrow b}N_b &(38)\\ A_{a\leftarrow b}N_b &= \rho(\omega)(B_{b\leftarrow\ a}N_a - B_{a\leftarrow b}N_b) &(39)\\ \rho(\omega) &= \frac{A_{a\leftarrow b}}{(\ \frac{N_a}{N_b}B_{b\leftarrow\ a} - B_{a\leftarrow b})}, &(40) \end{aligned}$$

Usando (19) $N_a/N_b = \exp[\omega/k_B T]$, resulta

$$\rho(\omega) = \frac{A_{a\leftarrow b}}{(B_{b\leftarrow\ a}\exp[\omega/k_B T] - B_{a\leftarrow b})} \tag{41}$$

Si lo comparamos con el resultado exacto (27)

$$\rho_{ph}(\omega) = \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\omega/k_B T) - 1} \tag{42}$$

llegamos a las soluciones dadas por (33) y (34)

Miraglia. Estructura 3 (19.11). 1er. cuat 2016

II. APÉNDICE

Calculemos X de la siguiente manera: elijiendo

$$\begin{cases} \widehat{k} = (0,\ 0,\ 1) \qquad \text{dirección de incidencia del fotón}, \\ \widehat{\varepsilon}_1 = \widehat{\varepsilon}_x = (1,\ 0,\ 0), \quad \text{y} \quad \widehat{\varepsilon}_2 = \widehat{\varepsilon}_y = (0,\ 1,\ 0), \qquad , \\ \langle \overrightarrow{r} \rangle_{ba} = \langle r \rangle_{ba} (\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta), \end{cases} \tag{43}$$

podemos entonces considerar radiación *unpolarized* promediando sobre sobre todas las posibles valores $\widehat{\varepsilon}_{1,2}$, o lo que es lo mismo todas las posibles valores de $\{\theta,\ \varphi\}$

$$\frac{1}{2}\int \frac{d\Omega}{4\pi} \left|\widehat{\varepsilon}_1 \cdot \langle \overrightarrow{r} \rangle_{ba}\right|^2 = \langle r \rangle_{ba}^2 \int \frac{d\Omega}{8\pi} \sin^2\theta\cos^2\varphi = \frac{1}{6}\langle r \rangle_{ba}^2 , \tag{44}$$

$$\frac{1}{2}\int \frac{d\Omega}{4\pi} \left|\widehat{\varepsilon}_2 \cdot \langle \overrightarrow{r} \rangle_{ba}\right|^2 = \langle r \rangle_{ba}^2 \int \frac{d\Omega}{8\pi} \sin^2\theta\sin^2\varphi = \frac{1}{6}\langle r \rangle_{ba}^2 , \tag{45}$$

Luego

$$X = \frac{4\pi^2}{\omega\mathcal{V}}\omega^2\frac{1}{3}\langle r \rangle_{ba}^2 = \frac{4\pi^2\omega}{3\mathcal{V}}\langle r \rangle_{ba}^2 . \tag{46}$$

Miraglia. Estructura 3 (19.1). 1er cuat 2016