

#### 4. Lichtstrahlen in Materie

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \partial_t \vec{E} + \mu_0 \langle \vec{j} \rangle$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\partial_t \vec{B}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\langle \rho \rangle}{\epsilon_0}$$

$$\langle \rho \rangle, \langle \vec{j} \rangle$$

makroskopisch gemittelte

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

Ladung / Stromdichte

zu unendlichen Details über atomare Auflösung ist

weg gemittelt:

Dipoldichte



gemittelte Ladungsdichte:

$$\langle \rho \rangle = \rho_m - \vec{\nabla} \cdot \vec{P}$$



oder makroskopisch Ladungsdichte  
(für Ladungen)

gemittelte Stromdichte:  $\langle j \rangle = j_u + \partial_t \vec{P} + \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \vec{M}$

---

↑  
Maxwell'sche  
Stromdichte  
(freie Ladungen)

↑  
lokalisierte Ladg.  
in Molekülen

$\vec{M}$ : Magnetisierungsdichte

Ableitg. der Wellengleichg.:

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{E}) = -\partial_t \nabla \times \vec{B} = -\frac{1}{c^2} \partial_t^2 \vec{E} - \mu_0 \partial_t \langle j \rangle$$



$$\nabla (\nabla \cdot \vec{E}) - \Delta \vec{E} + \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \vec{E} =$$

$$-\mu_0 \partial_t \vec{j}_u - \mu_0 \partial_t^2 \vec{P} - \partial_t \nabla \times \vec{M}$$



Magneto-optik (eigenes Teilgebiet)

i.a. << Dipoleffekte

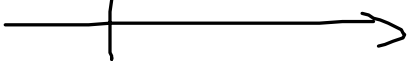
(Korrekturen zu Dipoldichte  $\vec{P}$ )

→ 0

$$\square \vec{E} = \mu_0 \frac{\partial \vec{j}_m}{\partial t} + \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{p}}{\partial t^2} + \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{E})$$

für Standardstrahl optik mit  
nicht zu starkes Totalreflex. ist  
 dieser Term von untergeordneter  
 Bedeutung

Abschätzung von  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}$

$\uparrow$  x Polarisation d. Strahl  


z (Ausbreit.)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \partial_x E_x + \partial_y E_y + \underbrace{\partial_z E_z}_{\text{klein}}$$

äuß. Strahl:

$\left[ \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) \right]_x$  ist der interessanteste Beitrag

zur  $E_x$ -Komponente d. Strahls  $e^{ik_z z}$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} \approx \partial_x E_x \approx - \frac{2x}{\left(1 + i \frac{\gamma}{z_0}\right) \omega_0^2} E_x$$

↑  
{ausbreitung

$$\left[ \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \right]_x \approx \frac{x}{\omega_0^2} k_z E_x \approx \frac{k_z}{\omega_0} E_x$$

↑  
∂<sub>z</sub> ist dom. (2)

ist jetzt zu vergleichen: paraxiale Wgl. an  $\vec{E} = 0$

$$\left( \Delta_{||} + 2i k_z \partial_z \right) \tilde{E}_x =$$

(1)

$$\partial_z \tilde{E}_x \sim \frac{1}{\omega_0} \tilde{E}_x$$

$$\frac{\tilde{E}_x}{l} \sim \frac{\tilde{E}_x}{\omega_0}$$

Absorptions-  
länge:

$$l < \omega_0$$

(i) Wenn man nicht zu stark fokussiert  
 ist  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}$  vernachlässigbar,  
 also  $l$  klein  $\rightarrow$  dh. für starke WW  
 vernachlässigbar

(ii) Wenn sehr schwache WW vorliegt,  
 so ist  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} \sim \langle \rho \rangle \rightarrow 0$ .

dh. in Zukunft  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E}$  in Ggl.  $\rightarrow 0$

$$\text{Skalen} \quad \frac{\lambda}{2\bar{n}} < l < \omega_0$$

$$\left( \epsilon_2^{-1} \right)$$

$$\frac{200 \mu\text{m}}{2\bar{n}} < \mu\text{m} < 10 \mu\text{m} \dots$$

## II Einfachste Materialmodell der makroskop. Optik

### 1. Makroskopische Quelle

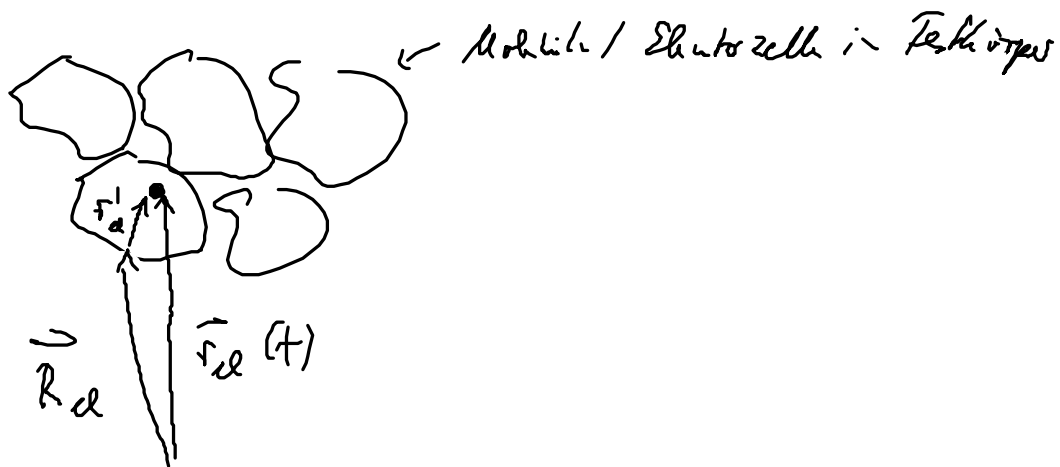
$$\langle \rho \rangle, \langle \vec{j} \rangle \rightarrow \text{Modell} : \langle \rangle = f \left( \underline{\underline{\vec{r}}}, t, \underline{\underline{\vec{E}}}(\underline{\underline{\vec{r}}}, t) \right)$$

Bestimmen & Selbstkonsistenz die Lsg. der Maxwellgl.

mikroskopische

$$\begin{array}{ccccc} \text{atomar} & < & \text{mikroskopisch} & < & \text{Wellenlänge} \\ (\text{\AA}) & & \text{Orbitalfg. } \vec{r} & & (\text{nm}) \\ & & (10\text{\AA}) & & \end{array}$$

Einschleichen einer atomaren magn. Effekte



$$\vec{j}(\vec{r}, t) = q \dot{\vec{r}}_{el}(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_{el}(t)) \text{ aus ED}$$

Ladg

Shor J. P. Vladz.

$$= q \dot{\vec{R}}_{el}(t) \delta(\vec{r} - \vec{R}_{el} - \vec{r}'_{el}) + q \dot{\vec{r}}'_{el} \delta(\vec{r} - \vec{R}_{el} - \vec{r}'_{el})$$

↗  
Wechsel zwisch. Moleküla  
bzw. Elektro Zelle

①

↑  
Klein  
Korrekturen

②

$$\textcircled{1} \quad \vec{j}_m = q \dot{\vec{R}}_{el}(t) \delta(\vec{r} - \vec{R}_{el}(t))$$

makroskop. Strom, beschreibt Wechsel  
der Elektronen zwisch. Zelle,  
bzw. Molekül beweg.

$$\textcircled{2} \quad \vec{j}' = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \underbrace{q \vec{r}'_{el}(t)}_{\text{Dipol}} \underbrace{\delta(\vec{r} - \vec{R}_{el}(t))}_{\text{Dichte an Stelle der Zelle}} \right\}$$

Dynam. zeitlich  
 Schwach bzw.  
 für Festkörper  
 = 0

$\vec{r}'$  ist auch nicht makroskop. gemeint  
 sondern ein Dipol des Molekülelektrons

übersetz. in Quantenmechanik:

$$\textcircled{1} \quad \vec{J}_B = \frac{q}{2} \varphi_B^* (\vec{R}, t) \frac{\vec{p}}{m} \varphi_B (\vec{R}, t) + \text{h.c.}$$

↑  
beweglich Ladung  
(B)

↑  
 $\vec{p}$ : Impulsoperater  $\hat{p} = -i\hbar \vec{\nabla}_R$

gilt bissh nur f. klein Wellenlänge  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

klein  $q_{\text{eff}} \approx \frac{1}{Z_{\text{eff}}}$

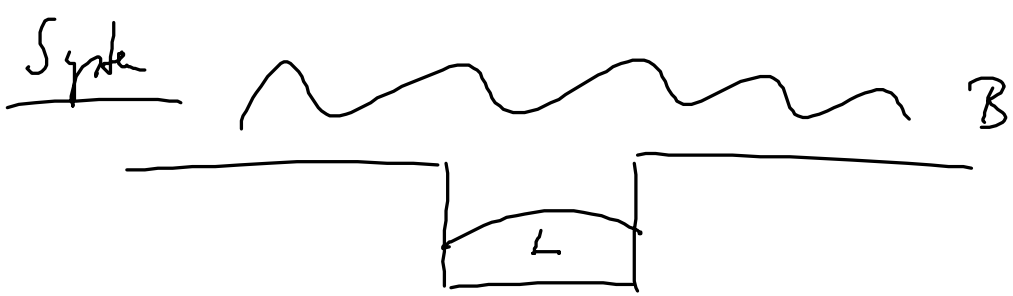
z.B. am  $\Gamma$ -Punkt in AL  
( $k \approx 0$ )

$$\textcircled{2} \quad \vec{J}_D = \frac{d}{dt} \varphi_L^* (\vec{r}', t) q \vec{r}' \varphi_L (\vec{r}', t) \delta (\vec{r} - \vec{R}_e)$$

↑  
Dipol

↑  
lokalisiert

Dipolstrom (gem. Dipoldicke)





## 2. Quantisierte Quelle

$\psi_{B/C}$  genügen ein Schrödinger-gleich.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{B/C} = H \psi_{B/C}$$

$$H = H_0 + H_{WW}$$

$$H_0 = T + V$$

$\nearrow$  kinet. Energie  
 $\nwarrow$  Kernpotential  
 $d_0 e^-$

$$H_{WW} = -q \vec{r}_d \cdot \vec{E}(\vec{r}_d, t)$$

reproduziert  $H_{WW} = \underline{q \phi}$  Ladg. mal Potential

$$\phi = -\vec{r}_d \cdot \vec{E}(\vec{r}_d, t),$$

Sinnvoll, wenn  $-\vec{\nabla} \phi = \vec{E}$

Zeige:  $-\vec{\nabla} \phi = \vec{E}(\vec{r}_{el}, t) + \text{höherer Term } (\vec{\nabla} \vec{E}(\vec{r}_{el}))$

Ableitung nach 3D-Koordinate,  $\vec{E}$ -Feld aber schwach berücksichtigt auf Far-Steil.

Modell well. fkt. des stationären Schrödinger gl.

$$\textcircled{1} \quad H_0^B = \frac{p_R^2}{2m_{\text{eff}}}$$

- ionisiert Atom / Molekül

- Testteilchen (effektive Masse)

$$H_0^B \varphi_k(\vec{r}) = \varepsilon_k \varphi(\vec{r})$$

$$\varphi_k = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}, \quad \varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\textcircled{2} \quad H_0^L = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{Kern}}$$

# Atom orbitale / Molekül orbitale

$$\varphi_i(\vec{r}), \quad \varepsilon_i$$

einfach Bsp: gebundene Zustand

H-Atom

Ziel:  $\vec{P}(\vec{r}, t), \vec{j}_{\text{ex}}(\vec{r}, t)$  g.u. zu bestimmen

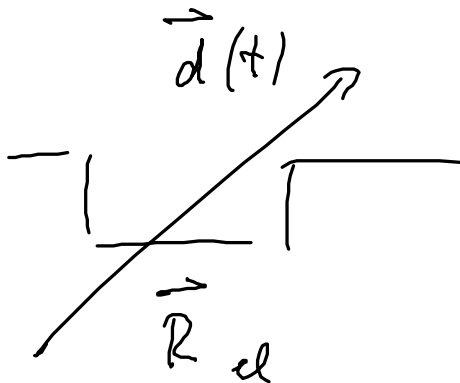
$$|\gamma\rangle = \sum_u c_u(t) |\varphi_u\rangle$$

$$u = \{i, k\}$$

a) Dipoldicht

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \underbrace{\langle \gamma_L | q \vec{r} | \gamma_L \rangle}_{d(t)} \delta(\vec{r} - \vec{R}_{el})$$

makrop. Mittg.  $\hat{=}$  g.u. Erwartungswert



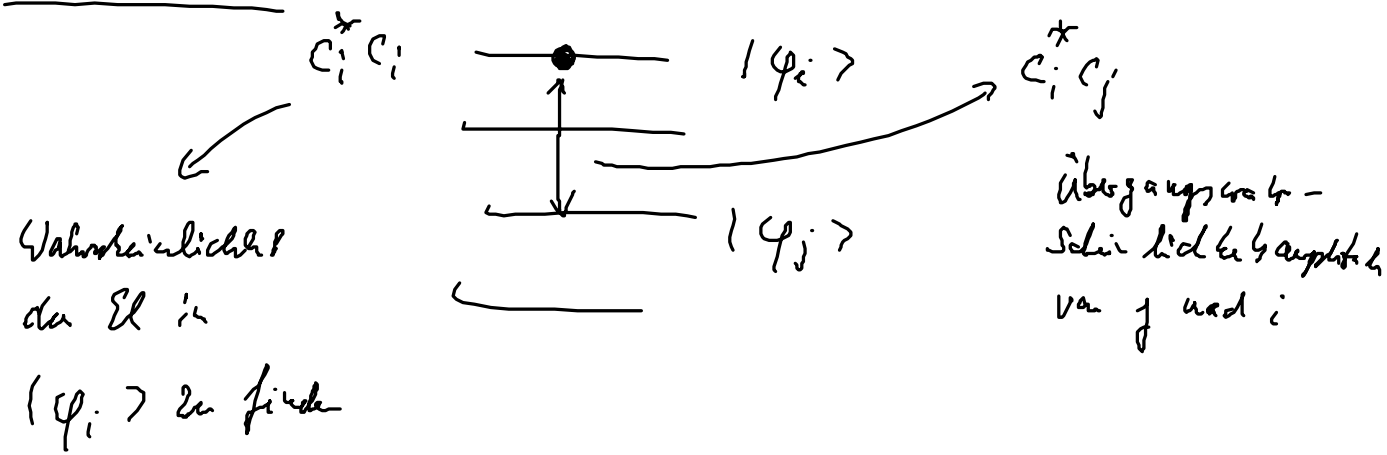
punktförmiger Dipol moment  
an der Stelle  $\vec{R}_{el}$  (Molekül)

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \sum_{ij} \underbrace{\langle \varphi_i | \vec{r} | \varphi_j \rangle}_{\vec{d}_{ij}} \underbrace{c_i^*(t) c_j(t)}_{\rho_{ij}(t)} \delta(\vec{r} - \vec{r}_d)$$

$$= \sum_{ij} \vec{d}_{ij} \rho_{ij}(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_d)$$

quadr. elektr. Dipolmoment      (Dipolmatrix - elemente)  
 Wahrscheinlichkeitsmatrix

Interpretation



Jeder Dipolübergang  $d_{ij} \neq 0$  wird durch  $\rho_{ij}(t)$  ausgelöst:  $\rho_{ij}(t) = f(\vec{E})$

b) Stromdichte

Mehrkomp.  $\vec{J}(\vec{r})$

$$\vec{J}_B = \frac{q}{2} \gamma_B^* (\vec{r}, t) \frac{\vec{p}}{m} \gamma_B (\vec{r}, t) + c.c.$$

$$= \frac{q}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \frac{p}{m_{\text{eff}}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \parallel C_{\vec{k}'}^* C_{\vec{k}} \rho_{\vec{k}'\vec{k}}(t) + \text{c.c.}$$

$\frac{1}{V}$  Normierung.

$$= \frac{q}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \frac{\hbar \vec{k}}{m} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \rho_{\vec{k}'\vec{k}} + \text{c.c.}$$

neue Koordinate  $\left. \begin{aligned} k' - k &= Q \\ \frac{k' + k}{2} &= q \end{aligned} \right\} \begin{aligned} k &= q - \frac{Q}{2} \\ k' &= q + \frac{Q}{2} \end{aligned}$

$$= \frac{q}{2V} \sum_{q, Q} \left( e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \frac{\hbar \left( \vec{q} - \frac{\vec{Q}}{2} \right)}{m} \rho_{\vec{q} + \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{q} - \frac{\vec{Q}}{2}} + e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \frac{\hbar \left( \vec{q} - \frac{\vec{Q}}{2} \right)}{m} \rho_{\vec{q} - \frac{\vec{Q}}{2}, \vec{q} + \frac{\vec{Q}}{2}} \right)$$

$$Q \rightarrow -Q$$

$$= \frac{q}{V} \sum_{\vec{q} \neq 0} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \frac{t_{\vec{q}}}{u_{\text{eff}}} \rho_{\vec{q} + \frac{q}{2}, \vec{q} - \frac{q}{2}}$$

$$= \frac{q}{V} \sum_{\vec{q}} \frac{t_{\vec{q}}}{u} \rho_{\vec{q}}(\vec{r}), \quad \rho_{\vec{q}}(\vec{r}) = \sum_{\alpha} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \rho_{\vec{q} + \frac{\alpha}{2}, \vec{q} - \frac{\alpha}{2}}$$

$\frac{\text{Impuls}}{\text{Masse}}$       Besetzungszahl der  
 $\vec{q}$ -Zustände  
 am Ort  $\vec{r}$

= Fermiondichte

fermion schon dicht am Ort  $\vec{r}$

$\sum_{\alpha}$

Achtg.  $\rho_{\vec{q}}(\vec{r})$ : Wignerverteilung  
 kann auch negativ werden,  
 kein echte Besetzungszahl  
 wg. qm. Unschärfe

### 3. Dichtematrixgleichungen f. Dipoldichte und Strom

$u : \{i, k\}$ , am interessiert  $\underbrace{c_u^*(t) c_u(t)} = \rho_{uu}(t)$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle_{B/L} = H |\psi\rangle_{B/L}$$

Ausatz  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$  in Schrödgl. einsetzen

$$H_0 |\varphi_n\rangle = \epsilon_n |\varphi_n\rangle$$

ableit d. Koeffizientengleichg:

1) einsetzen 2) mit  $\langle \varphi_m |$  multiplizieren

$$3) \langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \text{ unter } \text{Lsg. Ortsst.}$$

$$4) \frac{\langle \varphi_m | H_{ew} | \varphi_n \rangle}{\hbar} = - \frac{d c_m}{dt} \frac{\langle \varphi_m | \vec{E}(\vec{r}_1, t) \rangle}{\hbar}, \epsilon_n = \hbar \omega_n$$

$-\Omega_{mn}$  Rabi frequency



$$\dot{p}_{em} = i(\omega_e - \omega_m) p_{em}$$

$$-i \sum_n (\Omega_{en}^* p_{nm} - \Omega_{mn} p_{en})$$

• Dichte matrix gleich die die optisch

Antwort  $p_{em} = f(\vec{E}(\vec{r}_1, t))$  bestimmen

und damit  $\vec{P}$  und  $\vec{f}$  für  $k = \{i\}$   
 $u = \{\vec{k}\}$ .

- beschränkt je nach Wahl des Zustizes

