

### 3. Lichtstrahlung in Materie

makroskopische Maxwellgleichungen mit

räumliche Divergenz größer atomarer Skala

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

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

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

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

$\langle \rho \rangle, \langle \vec{j} \rangle$  : räumlich gemittelte Dichte

Ladungs-  
dichte      Strom-  
dichte

aus Elektrodynamik:

$$\langle \vec{j} \rangle = \underbrace{\vec{j}_m}_{\substack{\text{makroskopischer} \\ \text{Strom}}} + \underbrace{\partial_t \vec{P}}_{\substack{\text{Polarisationsdichte} \\ \text{(Dipoldichte)}}} + \underbrace{\mu_0^{-1} \vec{\nabla} \times \vec{M}}_{\substack{\text{Magnetisierungs-} \\ \text{dichte}}}$$

$$\langle \rho \rangle = \underbrace{j_m}_{\substack{\text{makroskopische} \\ \text{Ladungsdichte}}} - \vec{\nabla} \cdot \vec{P}$$

Wellen gleichg. f.  $\vec{E}$  durch  $\vec{\nabla} \times$  als 2. Maxwellgl.

$$\square \vec{E} = \underbrace{\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \vec{j}_m + \mu_0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \vec{P}}_{\text{Quellterme}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial t} \vec{\nabla} \times \vec{M}}_{\text{typischer v. untergeordnete Beding.}} + \cancel{\vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{E})}$$

↑  
 $\exists$  im Vakuum  
 wird f. Lichtstrahl  
 exakt analog behandelt  
 wie Licht VL

Beding.:  
 f. äußere Welt:  
 $\omega_0 > \lambda$ ,  
 in Materie:  
 $\omega_0 > \ell$ ,  
 (Absorptions-  
 Länge)

$\vec{j}_m, \vec{P}$  sind  
 Funktionen d. opt. Felds  $\vec{E}$   
 → Selbstkonsistenz  
 Löse.

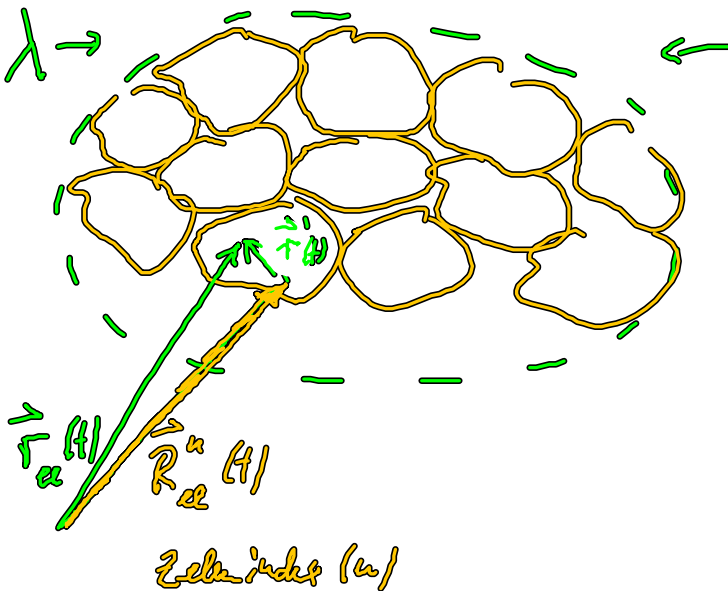
→ gutes Set v. „paraxialen“ Punkten

$\lambda = 500 \text{ nm}, \ell = 1 \mu\text{m}, \omega_0 = 10^{14} \text{ rad/s}$

Lichtstrahl:  $\vec{\nabla} \vec{E}$  analog. zu Vakuumfall behandeln  
 Ansatz:  $\vec{E}(z, \vec{r}_\perp, t) e^{i(k_z z - \omega t)}$   
Späte: darstellen Ansatz f. Quelle

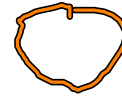
# III Einfache Materialmodelle f. mikroskopisch Opt.

## 1. Klassifizierung d. Quark



$\vec{r}_e(t)$ : Elektronenposition  
in Substruktur:

- Elementarzelle eines FK
- Moleküle, Sammlung v. Moleküle



klass. Strom: 
$$\vec{j} = q \dot{\vec{r}}_e(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_e(t)) \equiv \vec{j}(\vec{r}, t)$$

↑  
noch nicht gewichtet

↑  
Zellen bedingt, einzelne

$$= q \dot{\vec{r}}_e(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_e(t) - \vec{r}'(t)) \Rightarrow \text{Ändg. v. } \vec{r}_e(t) / \text{Mikroskop. Strom } \vec{j}$$

$$+ q \dot{\vec{r}}'(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_e(t) - \vec{r}'(t)) \Rightarrow \text{Ändg. der Koordin. in Zelle } \hat{=}$$

↑  
Mikroskop. Optik f. Beugg.  
da  $\lambda \gg R_{\text{cell}} \Rightarrow r'$

↑  
Mikroskop. Dipolstrahlung  
 $\vec{p}$

Quantisierung d. Quelle:  $\vec{R}_a, \dot{\vec{r}}' \rightarrow$  Impulse

Shou in QM

$$\dot{\vec{r}} \rightarrow \vec{j} = \frac{q}{2m} \psi^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \psi(\vec{r}, t) + \text{h.a.}$$

$$\vec{j}_m = \frac{q}{2m_{\text{eff}}} \psi_m^*(\vec{r}, t) \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_r \psi_m(\vec{r}, t) + \text{h.a.}$$

beispiel Ladg. ( $\vec{j}_m$ )

$m_{\text{eff}}$ : effektive Teilchenmasse d. Objekt dieses Zells bzw. Gitter

Erwartungswert d. Dipols

$$\vec{j}_p = \frac{d}{dt} \sum_p \int d\vec{r}' q_p \psi_p^*(\vec{r}', t) \vec{r}' \psi_p(\vec{r}', t) \cdot \delta(\vec{r} - \vec{R}_a)$$

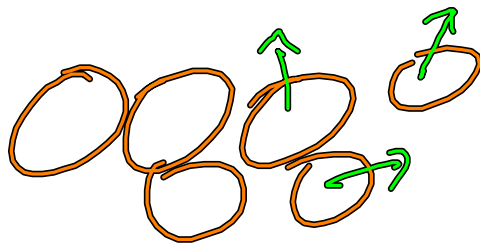
↑ gebundene Ladg. in Zelle

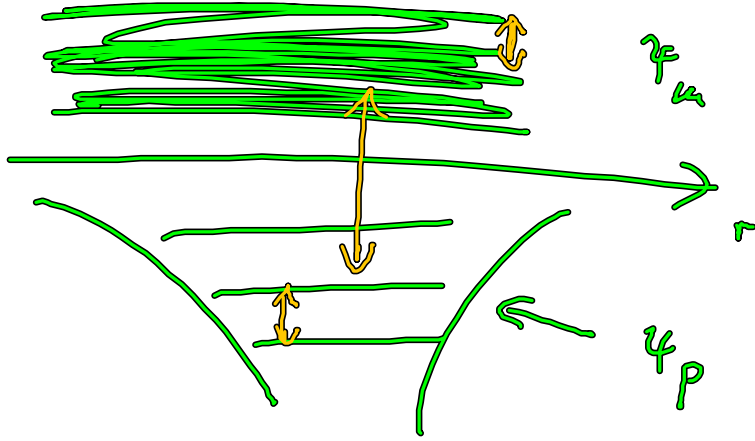
↑ all Zellen summiert

↑  $q_p$ : unüberlap. Kitzig.

↑ Ort d. Dipols

↑  $\psi_p$ :  $k$ -k Zelle





## 2. Beschlg. d. gestört. Quelle

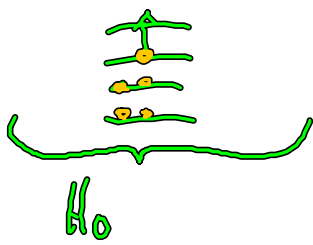
$\psi_u, \psi_p(\vec{r}, t)$  und gewisse Schrödgl.

$$\text{ist } \partial_t \psi_{u/p}(\vec{r}, t) = \neq \psi_{u/p}(\vec{r}, t)$$

$$H = \underbrace{T + V_{\text{ker}}}_{\text{1 El in Kernpot.}} - \underbrace{q \vec{r}_{el}(t) \cdot \vec{E}(\vec{r}_{el}, t)}_{\text{Dipol-H}}$$

1 El in Kernpot.  
z.B. Hartree-Fock Orbits

Dipol-H



keine Hartree

$$H_{\text{atom}} = q \phi, \text{ mit } \phi = -\vec{r}_a \cdot \vec{E}(\vec{r}_a, t)$$

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}_a \phi = \vec{E}(\vec{r}_a, t) - \vec{r}_a \cdot \vec{\nabla}_a \vec{E}(\vec{r}_a, t) \sim \vec{B}$$

Eigenfkt v.  $H_0$ :  $\hat{=}$   $\begin{cases} u: \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \text{ freie Teilchen} \\ p: \text{ Atomorbitale} \end{cases}$

entwickelt  $\vec{P}(\vec{r}, t)$  und  $\vec{j}_m(\vec{r}, t)$  nach Eigenfkt v.  $H_0$ :

$$\psi_p(\vec{r}, t) = \sum_i c_i(t) \psi_i(\vec{r})$$

$\uparrow$  Eigenfkt v.  $H_0$

$$\psi_m(\vec{r}, t) = \sum_k c_k(t) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

a) Dipoldicht  $\vec{P}(\vec{r}, t)$

$$\vec{P}(\vec{r}, t) = \sum_n \langle \psi_p^n | q \vec{r}' | \psi_p^n \rangle \delta(\vec{r} - \vec{R}_a^n)$$

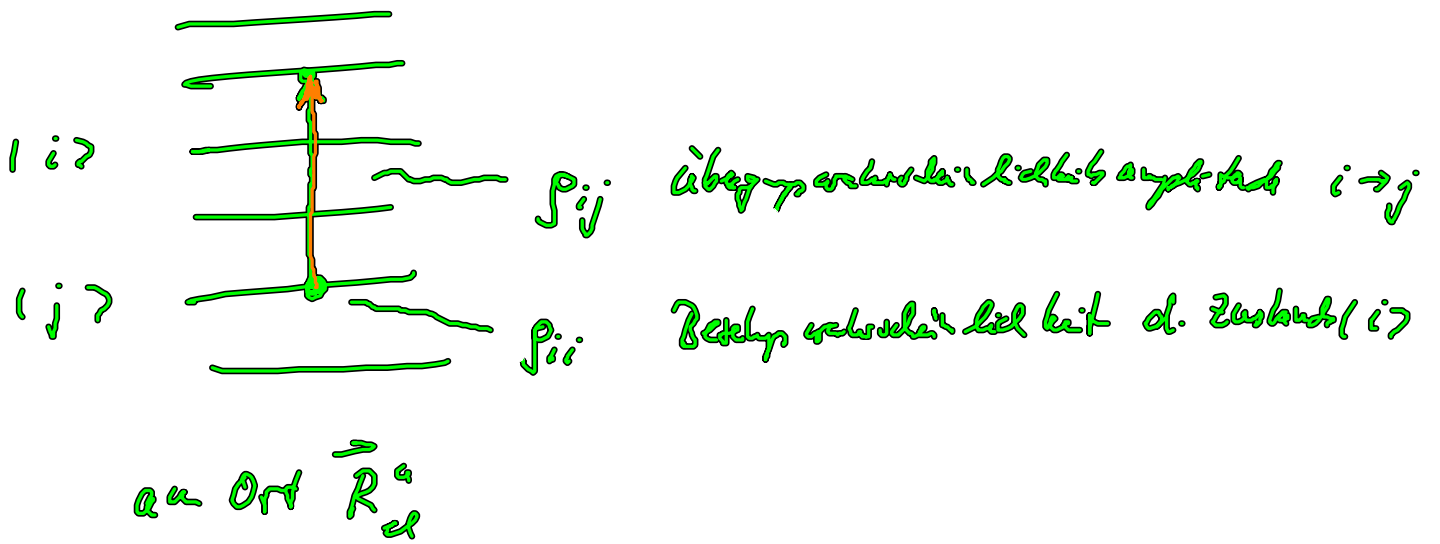
$\uparrow$   
Zell

Entwickelt und  $\psi_i$   $\leftarrow$   $\psi_j$   $\leftarrow$   $\psi_k$

$$= \sum_n \sum_{ij} \underbrace{\langle \psi_i^n | q \vec{r}' | \psi_j^n \rangle}_{\substack{> n \\ d_{ij} \\ \text{Dipolmatrix}}} \underbrace{c_i^*(t) c_j(t)}_{\text{Dynamik d. Dipols}} \delta(\vec{r} - \vec{R}_a^n)$$

$= \rho_{ij}(t)$

$\alpha$ -to Zelle



$c_i^* c_j = \rho_{ij}$  kann als Dichtematrix interpretiert werden  
 $d_{ij}^n =$  Dipolmoment, erhält Anschlag an Ort  $\alpha$ .

b) Stromdichte  $\vec{j}_n$

$$\vec{j}_n = \frac{q}{2} \sum_{\vec{k}} \frac{\vec{p}}{m_{eff}} \psi_n(\vec{r}, t) + cc.$$

$$= \frac{q}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{1}{v} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \frac{\vec{k}}{m_{eff}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cdot c_{\vec{k}'}^* c_{\vec{k}}(t) + cc.$$

$$\vec{k}' - \vec{k} = \vec{Q}$$

$$\frac{\vec{k}' + \vec{k}}{2} = \vec{q}$$

Übergang zu  
Siegwartitz



$$P_{ij} = c_i^* c_j = P_{ji}$$

üA

$$= \frac{q}{v} \sum_{q, \Omega} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} \frac{\vec{k}_q}{\omega_q} P_{q+\frac{\Omega}{2}} q-\frac{\Omega}{2}$$

$$\vec{J}_{\text{an}} = \frac{q}{v} \sum_{q, \Omega} \frac{\vec{k}_q}{\omega_q} P_q(\vec{r}) \Rightarrow \text{mittelt über } P_q(\vec{r}) \text{ über alle } \frac{\vec{k}_q}{\omega_q} \text{ Feldmoden an Ort } \vec{r}$$

Eigenverteilung: 
$$P_{\vec{r}}(\vec{r}) \equiv \sum_{\Omega} e^{-i\vec{Q}\cdot\vec{r}} P_{q+\frac{\Omega}{2}} q-\frac{\Omega}{2}$$

Verteil. d. Gitterzellen an Ort  $\vec{r}$   
(Feldmoden)

Achtung: kann nicht als Gitterzellenverteilung interpretiert werden! (Ausdrücke!)

### 3. Dicke nicht gleich f. Dipolmoment und Strom

beide  $J_{\text{an}} = J_{\text{an}}(\vec{E}(\vec{r}, t))$

Zur selbstkonsistenten Beschreibung nötig

$$i\dot{\varphi}(\vec{r}) = H(\vec{r}) \quad , \quad H = H_0 + H_{\text{an}}$$

$\varphi$ : Erweitert über  $\{\varphi_n\}$  erwehrt: üA



$$p_{en} = c_n^*(t) c_n(t)$$

$$\dot{p}_{en} = i(\omega_2 - \omega_n) p_{en} - i \sum_n (\Omega_{en}^* p_{en} - \Omega_{en} p_{en})$$

$$\omega_2 = \frac{\epsilon_2}{\hbar} \quad \epsilon_2 : \rightarrow \hbar \omega_2 = \epsilon_2$$

$$\Omega_{en} = \text{Rabi-Freq.} = \frac{\langle \psi_2 | H_{int} | \psi_n \rangle}{\hbar}$$

### 3.1. Ergänzungen zu den Dichtematrixgleichungen

wichtig: Prozess positiv v. Fluss zu beschreiben

- Dissipation (Teile, Energie)  $\Rightarrow$  an Umgebung
- Pumpe v. System (Zufuhr v. Energie)  $\Rightarrow$  an Umgebung

phenomenologische Zusatzform:

$$\text{Besatz: } \dot{p}_{en} / \text{Relaxation} = -\Gamma_n (p_{en} - p_{en}^0)$$

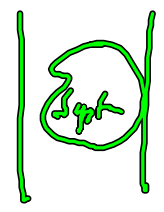
$\uparrow$   
Relaxation des System auf  $p_{en}^0$  bringt

aus dieser Form resultiert folgendes:

$$p_{en}(t) = (1 - e^{-\Gamma_n t}) p_{en}^0 + e^{-\Gamma_n t} p_{en}^0(0)$$

Beweis bei 0

$$j_{\text{Au}}(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} j_{\text{Au}}^0$$

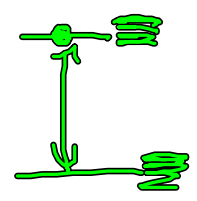


$j_{\text{Au}}^0 = \text{konst. / unkonst.}$   
angeg. Verteilung ( $T_{\text{Au}}$ )

Übung 2

$$j_{\text{Au}} / \text{Dichtheit} = -j_{\text{Au}} j_{\text{Au}}$$

→  
Roh die gem. Jutfez unternicht



↳  $j_{\text{Au}}(t) = j_{\text{Au}}(0) e^{-j_{\text{Au}} t}$   
zentriert kolieren

### 3.2. Dipoldichte: Beispielpf.

suchen:  $j_{\text{Au}}^{\text{opt}}$

→  
Dipol oszillieren  
üby an Ort  $\vec{R}_n$   
Zurück Zählend  $L, u$

