

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 / Strom dichte

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
(freie Ladungen)

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

\uparrow Makroskopische Stromdichte (freie Ladungen)
 \uparrow Lokalistische Ladg. in Molekülen

\vec{M} : Magnetisierungs-dichte

Ableitg. der Wellengleichg.:

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

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

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

\uparrow
 Magneto-optik (eigenes Teilgebiet)
 i.a. << Dipoleffekte
 (Korrekturen zu Dipolnähe?)

$\rightarrow 0$

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



für Standardstrahl optisch nicht
weit zu starkes Totalreflex. ist
dieser Term von untergeordneter
Bedeutung

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

↑ x Parallelkom d. Strahl

2 (Anhang.)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\partial}{\partial x} E_x + \frac{\partial}{\partial y} E_y + \underbrace{\frac{\partial}{\partial z} E_z}_{\text{klein}}$$

∫ auf Strahl:

$[\vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{E})]_x$ ist die interessante Beizig

zur E_x -Komponente d. Strahls

$$e^{ik_2 z}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} \approx \partial_x E_x \approx - \frac{2x}{(4\epsilon_0 \epsilon_0) \omega_0^2} E_x$$

↑
funktionswert

(z = z)

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

↑
∂_z ist dommt

②

ist jetzt 2. ordnung: partielle Dgl. an $\vec{E} = 0$

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

①

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

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

Absorptions-
länge:

$$l < \omega_0$$

(i) Wenn man nicht 2. Stut folglich
 ist $\vec{D} \cdot \vec{E}$ vernachlässigbar,
 also l klein \rightarrow dh. für starke WW
 vernachlässigbar

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

dh. in Zukunft $\vec{D} \cdot \vec{E}$ in Vgl. $\rightarrow 0$

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

$$(\bar{\epsilon}_2^{-1})$$

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

II Einfachste Maxwellmodell der makroskop. Optik

1. Makroskopische Quelle

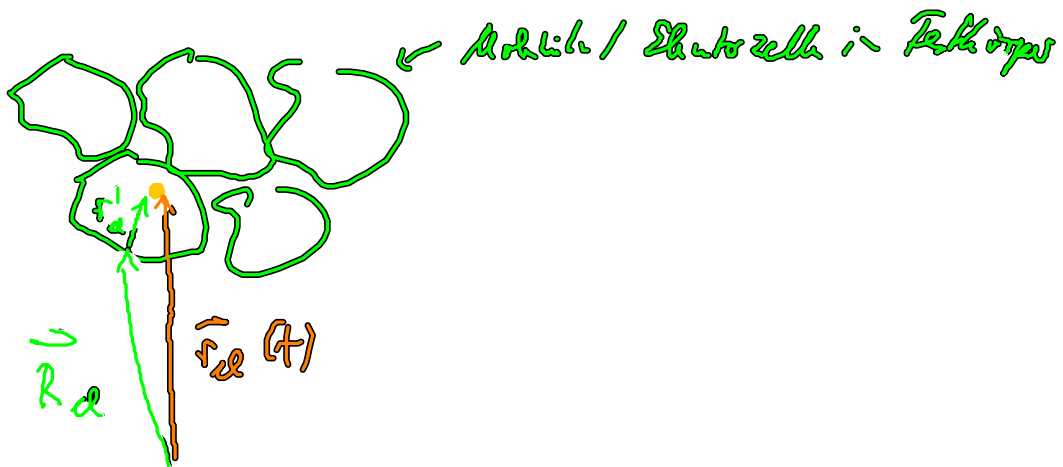
$$\langle \rho \rangle, \langle \vec{j} \rangle \rightarrow \text{Modell} : \langle \rangle = f(\underline{\vec{r}}, t, \underline{\vec{E}}(\underline{\vec{r}}, t))$$

Bestimmen & Selbstkonsistenz die Lsg. der Maxwell-Gl.

mikroskopisch

atomar $<$ mikroskopisch $<$ Wellenlänge
(\AA) Oszillat. \vec{r} (μm)
(10\AA)

Einschleichen einer ohne magn. Effekte



$$\vec{j}(\vec{r}, t) = q \dot{\vec{r}}_d(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_d(t)) \text{ am ED}$$

↑
Ladg

Strom f. Punktladg.

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

↗
↑
↑

①
②

Wechsel zwischen Kohlenzelle bzw. Elektrolyte
klein Kohlenzelle

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

makroskop. Strom, beschreibt Wechsel der Elektrolyten zwischen Zelle, bzw. Molekülbeweg.

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

Dipol
 Dichte an Stellen der Zelle
 Punkt zentral
 Polwand bzw
 f: Fallhöhe
 = 0

\vec{r}' ist auch nicht makroskop. gewichtet
 Eignet sich als Dipol des Molekülelektrolyten

überschj. in Quantenmechanik:

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

↑
 bewegliche Ladung
 (B)

\vec{p} : Impulsoperator $\hat{p} = -i\hbar \nabla$

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

klein gegen $\frac{1}{\text{Wellenlänge}}$

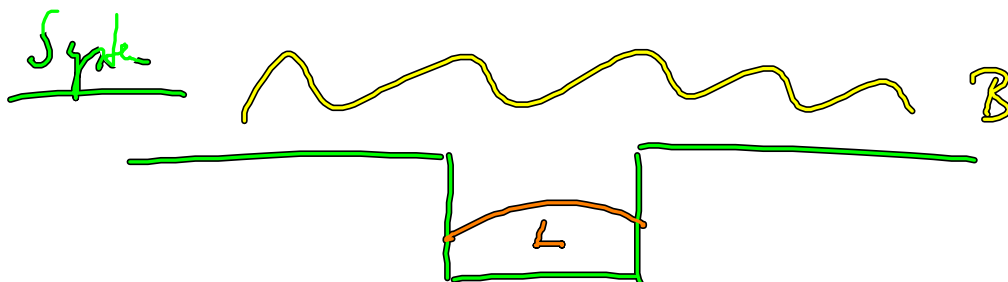
z.B. am Γ -Punkt in AL
 (k=0)

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

↑
 Dipol

↑
 lokalisiert

Dipolstrom (gem. Dipoldicke)



2. Quantisierte Quelle

$\psi_{B/L}$ genügt ein Schrödinger-gleich.

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

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

$$H_0 = T + V$$

\nearrow kinet. Energie
 \nwarrow Kernpotential
 ψe^-

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

reproduziert $H_{ww} = \underline{q \phi}$ Ladg. und Potential

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

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

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

Abhängigkeit von 2D-Koordinate, \vec{E} -Feld aber schwach veränderlich auf \vec{r}_e -Skal.

Modellwellenfkt. der stationären Schrödingergl.

$$\textcircled{1} \quad H_0^{\vec{B}} = \frac{\vec{p}_R^2}{2m_{eff}}$$

- ionisiert Atom / Molekül

- Teilchenparadigma (effektive Masse)

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

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

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

Atom orbitale / Molekül orbitale

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

einfachste Bsp: gebundener Zustand

H-Atom

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

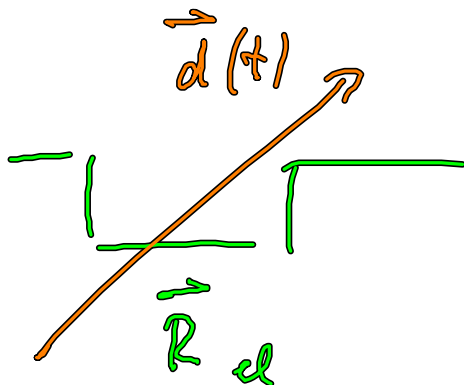
$$|\psi\rangle = \sum_u c_u(t) |\varphi_u\rangle$$

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

a) Dipollicht

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

matrixp. Mittlg. $\hat{=}$ g.u. Erwartungswert



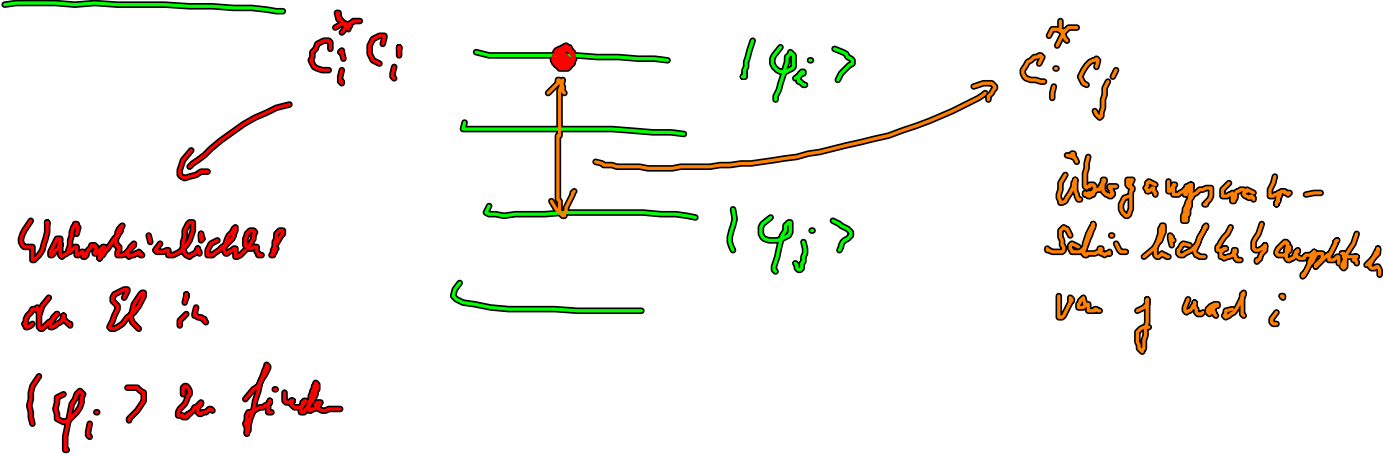
punktartiges Dipolmoment
an der Stelle \vec{R}_e (Molekül)

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

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

quadrupolmoment (Dipolmatrix-
 Dipolmoment elemente)
 Wertes der Dipolmatrix Wertes der Dipolmatrix

Interpretation



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

b) Stromdichte

Mehrp. $\vec{r}(\vec{r})$

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

$$= \frac{q}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \frac{1}{\omega_{\vec{k}'}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \cancel{C_{\vec{k}}^+} \rho_{\vec{k}'\vec{k}}(t) + c.c.$$

$\frac{q}{2V}$ Normierung.

$$= \frac{q}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{r}} \frac{1}{\omega_{\vec{k}'}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \rho_{\vec{k}'\vec{k}} + c.c.$$

neue Koordinat

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

$$= \frac{q}{2V} \sum_{q, Q} \left(e^{-i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \frac{1}{\omega_{q - \frac{Q}{2}}} \rho_{q + \frac{Q}{2}, q - \frac{Q}{2}} + e^{i\vec{Q} \cdot \vec{r}} \frac{1}{\omega_{q + \frac{Q}{2}}} \rho_{q - \frac{Q}{2}, q + \frac{Q}{2}} \right)$$

$$Q \rightarrow -Q$$

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

$$= \frac{q}{V} \sum_{\vec{q}} \underbrace{\frac{\vec{q} \cdot \vec{q}}{m}}_{\text{Inertie Masse}} \underbrace{\rho_{\vec{q}}(\vec{r})}_{\text{Besetzungszahl der } \vec{q}\text{-Zustände am Ort } \vec{r}}, \quad \rho_{\vec{q}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \rho_{\vec{q} + \frac{q}{2}, \vec{q} - \frac{q}{2}}$$

Inertie Masse Besetzungszahl der \vec{q} -Zustände am Ort \vec{r}
 = Leitfähigkeit



feront schon dicht am Ort \vec{r}

$\sum_{\vec{q}}$

Aufg. $\rho_{\vec{q}}(\vec{r})$: Wignervertelung
 kann auch negativ werden,
 kein echte Besetzungszahl
 wg. qu. Ausdrücke

3. Dichtematrixgleichungen f. Dipoldichte und Strom

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

Auswahl $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$ in Selbstadj. Ansatz

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

ableit die Koeffizientengleichg:

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

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

$$4) \frac{\langle \varphi_m | H_0 |\psi\rangle}{\hbar} = - \frac{d c_m}{dt} \frac{\langle \varphi_m | \vec{E}(\vec{r}_1, t) \rangle}{\hbar}, \epsilon_n = \hbar \omega_n$$

$-\Omega_{mn}$ Rabi frequenz

$$\dot{p}_{en} = i(\omega_e - \omega_n) p_{en}$$

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

• Dichte matrix gleich die die optisch

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

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

- beschreiben je nach Uml der Ladung

