2. Absorptionskoeffizient

Elektromagnetisches Feld stört das System aus seinem Gleichgewicht. Gesucht ist die lineare Antwort des Systems auf die Störung.

Startpunkt: Maxwell-Gleichungen

$$\operatorname{div} \vec{E}(\vec{r},t) = \frac{\rho_0(\vec{r},t)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \qquad \operatorname{div} \vec{B}(\vec{r},t) = 0$$

$$\operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r},t) = -\dot{\vec{B}}(\vec{r},t) \qquad \operatorname{rot} \vec{B}(\vec{r},t) = \mu_r \mu_0 \vec{j}(\vec{r},t) + \frac{1}{c_m^2} \dot{\vec{E}}(\vec{r},t)$$

mit der Ladungsträgerdichte ρ_0,
Stromdichte $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ (Ohmsches Gesetz)
und der Lichtgeschwindigkeit im Medium

$$c_m = \frac{c}{n} = \frac{c}{\sqrt{\mu_0 \mu_r \varepsilon_0 \varepsilon_r}}$$

$n \hat{=}$ Brechungsindex, ε dielektrische Konstante

$\mu \hat{=}$ magnetische Leitfähigkeit (Permeabilität)

In Anwesenheit eines elektrischen Felds bilden sich mikroskopische Dipole aus
$\Rightarrow$ makroskopische Polarisation $\vec{P}(\vec{r},t)$

Magnetischen Feld kann zur Magnetisierung $\vec{M}(\vec{r},t)$ von bestimmten Materialien.

Die Beziehung zwischen Feld, Polarisation und Magnetisierung nennt man Materialgleichung

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \varepsilon_0 \vec{E}(\vec{r},t) + \vec{P}(\vec{r},t)$$

elektrische Flußdichte

(dielektrische Verschiebung)

$$\vec{H}(\vec{r},t) = \frac{1}{\mu_0}\left(\vec{B}(\vec{r},t) - \vec{M}(\vec{r},t)\right)$$

magnetische Feldstärke

Für lineare, isotrope und homogene Materialien gilt im Frequenzraum

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon(\omega)\,\varepsilon_0\,\vec{E}(\vec{r},t)$$

$\varepsilon(\omega) \hat{=}$ dielektrische Funktion

Daraus folgt für die Polarisation

$$\vec{P}(\omega) = \vec{D}(\vec{r},t) - \varepsilon_0\,\vec{E}(\vec{r},t)$$

$$= \varepsilon_0\left[\varepsilon(\omega) - 1\right]\vec{E}(\omega)$$

$$\underline{\vec{P}(\omega)} = \varepsilon_0\,\chi(\omega)\,\underline{\vec{E}(\omega)}$$

$\Uparrow$

optische Suszeptibilität

$\Downarrow$

lineare Antwort des Systems auf eine Störung

Propagation elektromagnetischer Wellen durch ein ungeladenes Medium ($\rho_0 = 0$) und mit $\vec{j} = 0$ wird beschrieben durch die homogene Wellengleichung

$$\Box\,\vec{E}(\vec{r},t) = 0$$

d'Alembert Operator $\Box = \nabla^2 - \frac{1}{c_M^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}$

Verallgemeinerung der Wellengleichung für ungeladene elektrische Leiter, d.h. $\rho_0 = 0$, $\vec{j}(\vec{r},t) \neq 0$

⇒ Telegraphen-Gleichung

$$\Box \vec{E}(\vec{r},t) = \mu_r \mu_0 \sigma \frac{\partial}{\partial t} \vec{E}(\vec{r},t)$$

Kurze Herleitung aus Maxwell-Gleichungen

$$\rightarrow \quad \rho_0 = 0 \Rightarrow \operatorname{div} \vec{E} = 0 \Rightarrow \operatorname{rot}\operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r},t)$$

$$= \operatorname{grad}(\operatorname{div} \underbrace{\vec{E}(\vec{r},t)}_{=0}) - \Delta \vec{E}(\vec{r},t)$$

$$= -\Delta \vec{E}(\vec{r},t)$$

$$\rightarrow \quad \operatorname{rot}\operatorname{rot} \vec{E}(\vec{r},t) = -\operatorname{rot} \dot{\vec{B}}(\vec{r},t) = -\mu_r \mu_0 \underbrace{\sigma \dot{\vec{E}}(\vec{r},t)}_{\vec{j}(\vec{r},t)} - \frac{1}{c_n^2} \ddot{\vec{E}}(\vec{r},t)$$

Ohmsches Gesetz

Für Propagation in z-Richtung lautet der Lösungsansatz für die Telegraphengleichung

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_0 \, e^{i(kz - \omega t)}$$

Einsetzen in die Telegraphen-Gleichung

$$\left(-k^2 + \frac{1}{c_n^2}\omega^2\right) E(z,t) = -i \mu_r \mu_0 \sigma \omega E(z,t)$$

$$\Rightarrow \quad k^2 = \frac{1}{c_n^2}\omega^2 + i \mu_r \mu_0 \sigma \omega$$

d.h. im Medium propagierende Wellen mit komplexer Wellenzahl $k(\omega)$

$$(k' + i k'')^2 = \frac{\omega^2}{c^2}(\varepsilon' + i \varepsilon'')$$

Realteil Imaginärteil

$k = \frac{\omega}{c}$ im Vakuum

$k = \frac{\omega}{c} n = \frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon}$ im Medium

Der Real- und Imaginärteil von $k(\omega)$ können separiert werden

1) $\varepsilon'(\omega) = \frac{c^2}{\omega^2}\left[k'(\omega)^2 - k''(\omega)^2\right]$ $\Leftarrow$ $\varepsilon(\omega) = \frac{c^2}{\omega^2}(k'+ik'')^2$

2) $\varepsilon''(\omega) = 2\frac{c^2}{\omega^2} k'(\omega)\, k''(\omega)$

Daraus folgt:

aus 2) $k''(\omega) = \frac{\omega}{2cn(\omega)}\varepsilon''(\omega)$ mit $n(\omega) = \frac{c}{\omega}k'(\omega)$

aus 1) $k'(\omega) = \frac{\omega}{c}\sqrt{\frac{1}{2}\left(\varepsilon'(\omega) + \underbrace{|\varepsilon(\omega)|}\right)}$

$\frac{c^2}{\omega^2}(k'^2-k''^2)$ $\sqrt{\varepsilon'^2+\varepsilon''^2} = \frac{c^2}{\omega^2}(k'^2+k''^2) \Rightarrow \frac{c^2}{\omega^2}2k'^2$

Damit lässt sich die Lösung der Telegraphengleichung in Form einer gedämpften ebenen Welle aufschreiben

$$\vec{E}(z,t) = \vec{E}_0\, e^{ik(\omega)z}\, e^{-i\omega t}$$
$$= \vec{E}_0\, e^{-k''(\omega)z}\, e^{i(k'(\omega)z-\omega t)}$$

$k(\omega) = k'(\omega) + ik''(\omega)$

Das Beer-Lambert Gesetz für die Intensität einer Welle folgt direkt

$$I(\omega,z) = |E(\omega,z)|^2 = I_0 e^{-2k''(\omega)z} = I_0 e^{-\alpha(\omega)z}$$ mit $I_0 = |E_0|^2$

mit dem Absorptionskoeffizienten $\alpha(\omega) = 2k''(\omega)$

Es bestimmt die Eindringtiefe des Lichts ins Medium.

Der Realteil der Wellenzahl $k(\omega)$ bestimmt den Brechungsindex $n(\omega)$, der wiederum die Änderung der Lichtgeschwindigkeit im

Medium ausdrückt.

$$c_m(\omega) = \frac{c}{n(\omega)} \quad \text{mit} \quad n(\omega) = \frac{c}{\omega} k'(\omega)$$

Für die meisten Materialien gilt $\varepsilon'(\omega) \gg \varepsilon''(\omega)$

$$\Rightarrow \quad n(\omega) = \frac{c}{\omega} \underbrace{\frac{\omega}{c}\sqrt{\varepsilon'(\omega)}}_{k'} = \sqrt{\varepsilon'(\omega)}$$

Der Brechungsindex hat in der Regel nur eine schwache Frequenz-Abhängigkeit

$$\alpha(\omega) = 2\, k''(\omega) = \cancel{2} \frac{\omega}{\cancel{2} c\, n(\omega)} \varepsilon''(\omega)$$

$$\approx \frac{\omega}{c n} \varepsilon''(\omega)$$

$$\varepsilon''(\omega) = \operatorname{Im} \varepsilon(\omega) = \operatorname{Im}(\chi(\omega)+1) = \operatorname{Im} \chi(\omega)$$

$$\boxed{\alpha(\omega) = \frac{\omega}{c n} \operatorname{Im} \chi}$$

$\chi(\omega)$ ist nun die gesuchte Größe.

Für lineare, isotrope und homogene Medien gilt

$$\chi(\omega) = \frac{P(\omega)}{\varepsilon_0 E(\omega)}$$ mit der makroskopischen Polarisation

$$P(t) = \sum_k d_{vc}\, p_k(t) + c.c$$

Dipolmatrixelement (d_{vc}), mikroskop. Polarisation ($p_k(t)$)

Bestimmung von p_k über Bloch-Gleichungen

→ makroskopische Polarisation $P(t)$

→ Suszeptibilität $\chi(\omega)$

→ Absorptionskoeffizient $\alpha(\omega)$

Im Rahmen des p·A-Hamiltonians folgt für χ:

$$\chi(\omega) = \frac{j(\omega)}{\varepsilon_0 \omega^2 A(\omega)}$$

$$j = \dot{P}, \quad E = -\dot{A}$$

$$\Downarrow$$

$$j(\omega) = i\omega P(\omega), \quad E(\omega) = -i\omega A(\omega)$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{P(\omega)}{\varepsilon_0 E(\omega)} = \frac{j(\omega)}{i\omega}\frac{1}{\varepsilon_0(-i\omega A)} = \frac{j(\omega)}{\omega^2 A(\omega)}$$

mit der makroskopischen Stromdichte

$$\vec{j}(t) = \frac{e}{2m}\sum_{\lambda\lambda'}\sum_{k'k}\langle\lambda k|\vec{p}-e\vec{A}(t)|\lambda' k'\rangle\langle a^\dagger_{\lambda k} a_{\lambda' k'}\rangle + c.c.$$

Für ein 2-Band-System mit $\lambda, \lambda' \in \{c, v\}$ und mit Dipol-Approximation, d.h. $k \approx k'$

$$\vec{j}(t) = \frac{e}{2m}\sum_k\Big[\langle ck|p|vk\rangle\langle a^\dagger_{ck} a_{vk}\rangle + \langle vk|p|ck\rangle\langle a^\dagger_{vk} a_{ck}\rangle - eA(t)\left(\langle a^\dagger_{ck} a_{ck}\rangle + \langle a^\dagger_{vk} a_{vk}\rangle\right) + c.c\Big]$$

$$j(t) = \frac{2e}{m}\frac{\hbar}{i}\,\mathrm{Re}\left[M^{vc}_k\, p_k(t)\right] - \frac{e^2}{m}A(t)\, n_{tot}$$

$$p = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

mit den optischen Matrixelement

$$M^{vc}_k = \langle ck|\nabla|vk\rangle$$

und der gesamten elektronischen Dichte $n_{tot} = \sum_{k\lambda}\langle a^\dagger_{\lambda k} a_{\lambda k}\rangle$

$\Rightarrow$ Optische Suszeptibilität

$$\chi(\omega) \sim -i\sum_k\frac{1}{\varepsilon_0\omega^2 A(\omega)}\,\mathrm{Re}\left[M^{vc}_k\, p_k(\omega)\right]$$