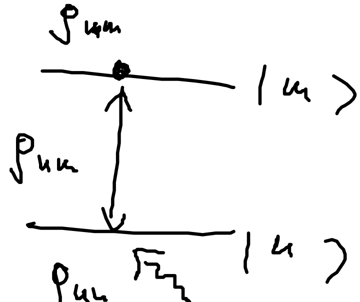
3.1. Phänomenologische (zunächst) Ergänzungen zu den Dichtematrixgleichungen

betrifft Verluste („Dissipation") und externe Pump-vorgänge an den atomaren Systemen durch Ankopplung an die Umgebung:

- Zufuhr / Abfuhr von Teilchen in/aus ρ_{nn}
  (Ankopplg. an Teilchenreservoir der statistischen Physik)
- Zerstörg. d. quantenmech. Überlagerung ρ_{mn}
  (Stöße aus Umgebg. die Phase beeinflussen)



Pumpe / chemisches Potential (höher in HL-Laser)

(i) <u>Besetzg.</u> $\dot{\rho}_{nn}\Big|_{pump} = -\Gamma_n \left(\rho_{nn} - \rho_{nn}^0\right)$

Rate

fest, von außen vorgegeben Besetzg. gegen die das System läuft!

(ii) Übergänge $\quad \dot{\rho}_{nm}\Big|_{\text{Dekohärenz}} = -\gamma_{nm}\,\rho_{nm}$

Rate, die die Übergänge dämpft

(zu i): $\quad \dot{\rho}_{nn} = -\Gamma_n \rho_{nn} + \Gamma_n \rho_{nn}^0 \quad$ (ohne Feld)

lösen $\quad \rho_{nn}(t) = e^{-\Gamma t}\rho_{nn}(t=0) \quad$ (homogen)

$$+ \int_0^t dt'\, e^{-\Gamma_n (t-t')}\,\Gamma_n \rho_{nn}^0 \quad \text{(inhomogen)}$$

$$= \rho_{nn}(t=0)\, e^{-\Gamma_n t} + \left(1 - e^{-\Gamma_n t}\right)\rho_{nn}^0$$

Start: $\quad t = 0 \quad \rightarrow \rho_{nn}(t=0)$ AB

$t > 0 \quad \rightarrow$ ausschalten der Batterie Γ_n

$t \rightarrow \infty$

$$= 0 + \underline{\underline{\rho_{nn}^0}}$$

läuft also gegen die extern vorgegeb. Verteilg.

(zu ii) $\rho_{nm} = \rho_{nm}(t=0)\, e^{-\gamma_{nm} t}$

$t \to \infty$

$= \underline{\underline{0}}$ wirkt Kohärenz zerstörend

$\rho_{nm} \to 0$

3.2. Dipoldichte: Bewegungsgleichg.

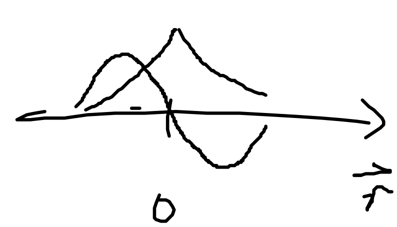
gebundene Zustände $n, m \to i, j$ sind die QZ d. gebund. Zustände

$$\partial_t \rho_{ij} = i\omega_{ij}\rho_{ij} - i \sum_k \left(\Omega^*_{ik} \rho_{kj} - \Omega_{jk} \rho_{ik} \right)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{\vec{E}(\vec{r}) \cdot \vec{d}_{ij}}{\hbar}\,,$$ $\vec{d}_{ij}$ = Dipolmoment, entscheidet ob Ankopplg stattfindet

<u>Zustand</u> $\varphi_i(\vec{r})$ <u>Parität</u>: $\varphi_i(-\vec{r}) = \pm \varphi_i(\vec{r})$

„Inversionssymmetrie"

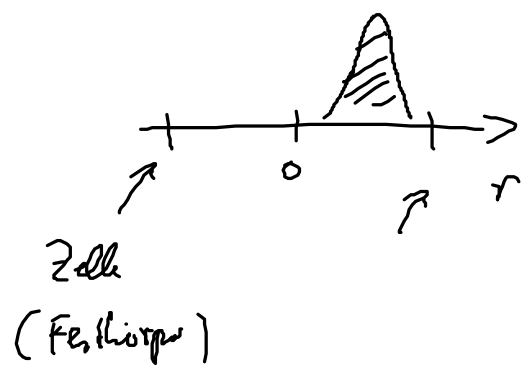


$d_{ii} = 0$

gemischte Parität

$$\varphi_i(-\vec r) \neq \pm \varphi_i(\vec r)$$

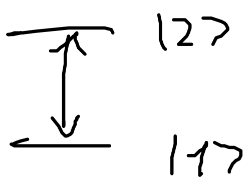
Kein Inversionssymmetrie



$d_{ii} \neq 0$

$\vec d_{ii} \neq 0$ statisches Dipolmoment

3.2.1. Beispiel Zweiniveausystem



$$\underline{\dot\rho_{12}} = i\omega_{12}\rho_{12} - i(\Omega_{12}^{*}\rho_{22} - \Omega_{21}\rho_{11})$$

$$- i(\Omega_{11}^{*}\rho_{12} - \Omega_{22}\rho_{12})$$

(permanente Dipole)

$$- \gamma_{12}\rho_{12}$$

$$\dot{\rho}_{11} = -i \left(\Omega_{12}^{*} \rho_{21} - \Omega_{12} \rho_{12} \right)$$

permanente Dipole tragen nicht bei

$$- \Gamma_{11} \left(\rho_{11} - \rho_{11}^{\circ} \right)$$

ρ_{22} analog

gekoppeltes System f. die Übergänge
und Besetzungen, zu lösen f (E)
→ einsetzen in Maxwellgleichung.

Bemerkung.

- $\Omega_{ii} \neq 0$ für gemischte Parität, sonst Null
- $\Omega_{ij} \neq 0$ Standard dipolmatrix $\langle \varphi_i | q r | \varphi_j \rangle$
- beschreibt Absorption / Dispersion / optische Gewinn (Verstärkung)
- nichtlinearen Eigenschaften :

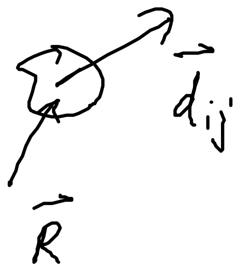
z.B. Zweite Harmonische: $\dot{\rho}_{12}\Big|_{\text{punkt Dipol}} \approx \Omega_{11}\,\rho_{12}$

$$\underbrace{E e^{-i\omega_L t}\; E e^{-i\omega_L t}}_{e^{-2i\omega_L t}}$$

3.2.2. Übergang zu räumlich Verteilungen

Ziel: Beschreibg. ausgedehnter Probe

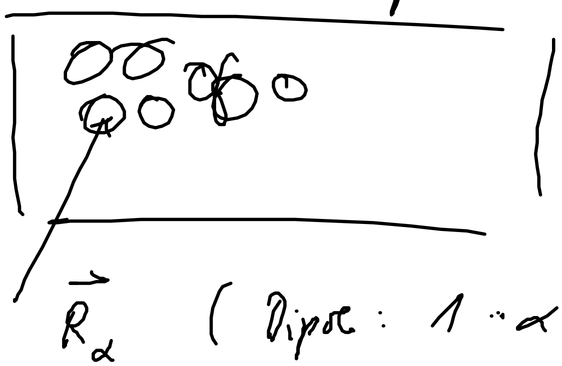
bisher



$$P = \sum_{ij} \vec{d}_{ij}\, \rho_{ij}\, \delta(\vec{r} - \vec{R})$$

jetzt

viele Dipole



(Dipole: $1 \cdots \alpha \cdots \infty$)

$$\vec{P} = \sum_\alpha \sum_{ij} \vec{d}_{ij}^{\,\alpha}\, \rho_{ij}^{\alpha}(t)\, \delta(\vec{r} - \vec{R}_\alpha) = f(\vec{r}, t)$$

$$\left(\sum_{\alpha} \to \sum_{\{R_\alpha\}} \to \sum_{R} \Delta N \right.$$

gleich Dipole in $\Delta^3 R$ Volumen

$\Delta^3 R$

Zahl der Dipole ΔN

$\vec{R}$)

$$= \sum_{\{R\}} \sum_{ij} \vec{d}_{ij}^{\,R} \, \Delta N \, \rho_{ij}^{R} \, \delta(\vec{r} - \vec{R})$$

$$= \sum_{\{R\}} \Delta^3 R \underbrace{\frac{\Delta N}{\Delta^3 R}} \sum_{ij} \vec{d}_{ij}^{\,R} \, \rho_{ij}^{R} \, \delta(\vec{r} - \vec{R})$$

$$= \int d^3 R \; \underbrace{n_0(R)}_{\text{Dichte der Dipole}} \sum_{ij} \vec{d}_{ij}(R) \, \rho_{ij}(R) \, \delta(\vec{r} - \vec{R})$$

wird von $\underline{E}(\vec{r},t)$ getrieben

$$\vec{P}(\vec{r},t) = \sum_{ij} \vec{d}_{ij}(\vec{r}) \, \rho_{ij}(\vec{r}) \, n_0(\vec{r})$$

Ort $\vec{r}$ der in Maxwellgl. auftaucht. $\vec{E}(\vec{r},t)$

3.3. Ladgsstrom: Bewegungsgleichg.

Quantenzahl f. freibewegl. Ladgn sind Wellenzahl $\vec{q}, \vec{\ell}$.

$$\partial_t \rho_{\ell m} = \underbrace{i\omega_{\ell m}\rho_{\ell m}}_{1} - \underbrace{i\sum_n \left(\Omega^*_{\ell n}\rho_{nm} - \Omega_{mn}\rho_{\ell n}\right)}_{2}$$

brauch f. Ladgsstrom $j \sim \rho_{\vec{q}+\frac{\vec{Q}}{2}\,\vec{q}-\frac{\vec{Q}}{2}}(t)$

$$\ell = q + \frac{Q}{2}, \quad m = q - \frac{Q}{2}$$

$$\omega_\ell \to \omega_{\vec{q}} = \frac{\hbar^2 \vec{q}^2}{2m}$$

$$\partial_t \rho_{q+\frac{Q}{2}\,q-\frac{Q}{2}}\Big|_1 = i\left(\frac{(q+Q/2)^2\hbar^2}{2m} - \frac{(q-Q/2)^2\hbar^2}{2m}\right)\rho_{q+\frac{Q}{2}\,q-\frac{Q}{2}}$$

$$\partial_t \rho_{q+\frac{Q}{2}\,q-\frac{Q}{2}}\Big|_1 = i\,\frac{\vec{q}\cdot\vec{Q}}{2m}\,\rho_{q+\frac{Q}{2}\,q-\frac{Q}{2}}$$

$$\partial_t \rho_{q+\frac{Q}{2}\, q-\frac{Q}{2}}\Big|_{2} = -i \sum_k \left(\underline{\underline{\Omega^*_{q+\frac{Q}{2}\,k}}} \rho_{k\, q-\frac{Q}{2}} - \Omega_{q-\frac{Q}{2}\,k} \rho_{q+\frac{Q}{2}\,k} \right)$$

Ladung q

$$\hbar\, \Omega_{\vec{k}_1 \vec{k}_2} = \int d^3R\, \varphi^*_{k_1}(R) \underbrace{q\vec{R}}_{\text{Dipol}} \varphi_{k_2}(R) \cdot \underbrace{\vec{E}(R)}_{}\,; \quad \varphi_k = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$$

$\vec{E}(\vec{r})$ Stelle d. Maxwellfelds

$$\approx \frac{q}{V} \int d^3R\, e^{-i\vec{k}_1\cdot\vec{R}} \underbrace{\vec{R}\, e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{R}}}_{-i\vec{\nabla}_{k_2} e^{i\vec{k}_2\cdot\vec{R}}} \cdot \vec{E}(\vec{r})$$

, partielle Integration bezgl. $\sum_{k_2\,(k)}$ (siehe oben)

$$= i\frac{q}{V} \underbrace{\int d^3R\, e^{-i(\vec{k}_1-\vec{k}_2)\cdot\vec{R}}}_{} \vec{E}(\vec{r})\cdot\vec{\nabla}_{k_2}$$

wirkt in DM-Gleichungen

$$\underbrace{\hbar\, \Omega_{k_1 k_2} = i\, q\, \delta_{k_1 k_2}\, \vec{E}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}_{k_2}}_{}$$

einsetzen in Gleichungen oben 2

$$\partial_t\, \rho_{q+\frac{Q}{2},\, q-\frac{Q}{2}}\Big|_{(2)} = \frac{q}{\hbar} \sum_{k} \Big(-\delta_{q+\frac{Q}{2},k}\, \vec{E}\cdot\vec{\nabla}_k\, \rho_{k,\, q-\frac{Q}{2}} - \delta_{q-\frac{Q}{2},k}\, \vec{E}\cdot\vec{\nabla}_k\, \rho_{q+\frac{Q}{2},\, k} \Big)$$

$$\Big(\rho_{q+\frac{Q}{2},\, q-\frac{Q}{2}} \equiv \rho_{q,Q} \Big)$$

$$= -\frac{q}{\hbar}\, \vec{E}(\vec{r})\cdot\vec{\nabla}_q\, \rho_{qQ}$$

Bewegungsgleichungen f. Ladungsträgerstrom:

$$\partial_t\, \rho_q(\vec{r}) = -\frac{\hbar \vec{q}}{2m}\cdot\vec{\nabla}_r\, \rho_q(\vec{r}) - \frac{q}{\hbar}\, \vec{E}(r,t)\cdot\vec{\nabla}_q\, \rho_q(\vec{r})$$

(a) (b)

Wignerverteilung: „Besetzung des Wellenzahlzustands q am Ort $\vec{r}$"

ρ_q an jedem Ort $\vec{r}$

Änderg. d. Zustands wird getrieben durch:

a) jeder Zustand hat Geschwindigkeit $\frac{\hbar \vec{q}}{m} = \vec{v}_q$

Lösg. ohne Term b:

$$\rho_q = \rho_q(\vec{r} - \vec{v}_q \cdot t)$$

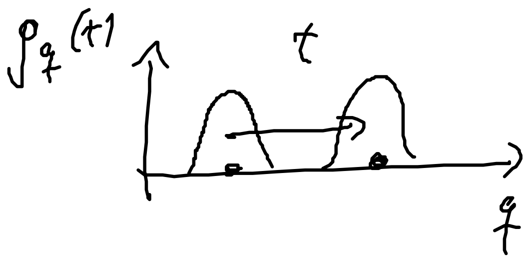
Ausbreitg. v. Elektronpaketen

b) Beschleunigg. d. Elektrons d. $\vec{E}$-Feld:

$$\rho_q = \rho_q\left(\vec{q} - \int_0^t dt' \, \vec{E}(t') \frac{e}{\hbar}\right)$$

bewegt ein Elektronpaket im q-Raum

durch die Beschleunigg. d. $\vec{E}$-Feld



3.3.2. Übergang zu räumlich ausgedehnten System

$$\frac{1}{V}\sum_{q} \to \frac{1}{V}\frac{V}{(2\pi)^3}\int d^3q = \underbrace{\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q}_{1/m^3}$$

$\Delta q \to 0$ Kontinuumslimit

3.3.3. Beispiel: Elektronenflüssigkeit

aus $$\partial_t \rho_q(\vec r) = -\frac{\hbar \vec q}{m}\cdot\vec\nabla \rho_q(\vec r) - \frac{q}{\hbar}\vec E(\vec r)\cdot\vec\nabla_q \rho_q(\vec r)$$

$$n(\vec r, t) = \frac{q}{V}\sum_{q} \rho_q(\vec r, t)$$

Elektronendichte

$$\vec j(\vec r, t) = \frac{q}{V}\sum_{q} \frac{\hbar \vec q}{m}\rho_q(\vec r, t)$$

Stromdefinition

Kontinuitätsgleichung:

wegen partieller Integration

$$\dot{n} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{j} + 0$$

siehe oben $\dot{\rho}_q$ am ersten Term

$$\sum_q \vec{\nabla}_q \rightarrow \underbrace{\rho_q \rightarrow \pm\infty}_{0}$$

$$\left(\int d^3_q\right)$$

Ansatz: $\vec{j} = n(\vec{r},t)\,\vec{v}(\vec{r},t)$

mit Geschwindigkeitsfeld $\vec{v}(\vec{r},t)$

$\vec{v}(\vec{r},t)$ ist zu bestimmen

$$\partial_t n + \vec{\nabla}\cdot(\vec{v}\cdot n) = 0$$

man startet von $\vec{j}$

$$\vec{j} = \frac{q}{V}\sum_q \frac{\hbar\vec{q}}{m}\rho_q(\vec{r},t)$$

, man möchte Gleichung für $\dot{\vec{v}}(\vec{r},t)$

$$\partial_t \vec{j} = \frac{q}{V}\sum_q\left\{\frac{\hbar\vec{q}}{m}\cdot\underbrace{\left(-\frac{\hbar\vec{q}\cdot\vec{\nabla}_r}{m}\rho_q(r,t)\right) - \frac{q}{\hbar}\vec{E}\cdot\vec{\nabla}_q\rho_q(\vec{r},t)}_{\dot{\rho}_q(\vec{r},t)}\frac{\hbar\vec{q}}{m}\right\}$$

partielle Integration

$$= -\frac{q}{V}\sum_q \left(\frac{\hbar \vec q}{m}\cdot\vec\nabla_r \frac{\hbar\vec q}{m}\, \rho_q(\vec r,t)\right) + \frac{q}{m}\, n(\vec r,t)\cdot \vec E(\vec r,t)$$

(Lorentzkraftdichte)

höheres Moment zerschlagen

$$\partial_t \left(\underline{\underline{v_i n}}\right) = -\partial_j \left(v_j\, \underline{\underline{v_i\, n}}\right) + \quad - " -$$

$$n\dot v_i + v_i \dot n = -(\partial_j v_i) v_j n - v_i \partial_j (v_j n) + - " -$$

↓ Kontinuitätsgleichg.

$$n\dot v_i - \cancel{v_i \partial_j (v_j n)} = -v_j (\partial_j v_i) n - \cancel{v_i \partial_j (v_j n)} + - " -$$

$$\partial_t v_i = v_j\, \partial_j v_i + \frac{q}{m} E(r,t)$$

$$\partial_t \vec v(\vec r,t) = -\vec v(\vec r,t)\cdot\vec\nabla_r\, \vec v(\vec r,t) + \frac{q}{m}\vec E(\vec r,t) \quad -\gamma \vec v(\vec r,t)$$

Dämpfung

Geschwindigkeitsfeldgleichg. f. Elektronenflüssigkeit

Änderg. der Geschwindigkeit: Lorentzkraft $\sim \vec E$

• kinetisch Term, <u>nichtlinear</u>

v^2

<u>enthält</u> : - Drude formel

- ponderomotive Kraft