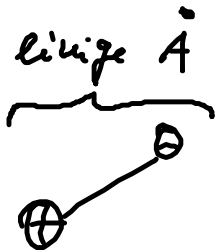
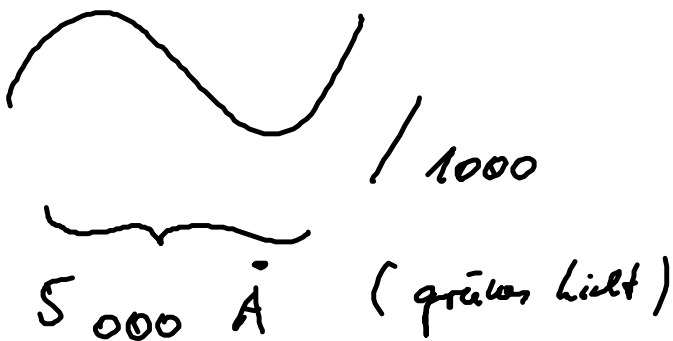


V Atomlehre in elektromagnetischen Feldern

1. Atommodell, räumliche Skalen und Feldkopplung

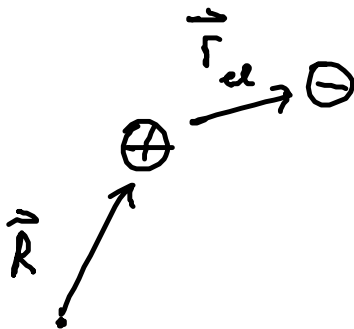


Atom ϕ im Vergleich
mit räumlich konstanten Feldern
bzw. optischen Feldern (λ)



$$|\vec{r}_{el}| \ll \lambda$$

↓ nur klein Variation der
Elektronen Koord. Werte



Um den Ort \vec{R} d. Kerns können
Felder in Taylorreihe nach \vec{r}_{el}
entwickelt werden.

(Röntgen gibt nicht)

\vec{R} : Kern-Koordinate

\vec{r}_{el} : Elektronen-Koordinate

z.B. Skalarpotential, erste Ordnung:

$$\phi(\vec{r}) = \phi(\vec{R}) + \vec{r}_{el} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{R})$$

Setzen $\vec{r}_{el} \rightarrow \vec{r}$

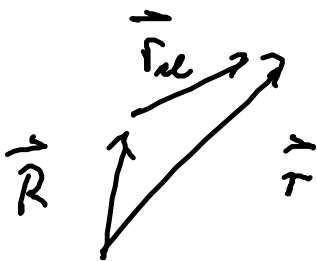
beginne mit Lagrange funktion:

$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}_{el}^2 - V(\vec{r}_{el}) - q \phi(\vec{r}, t) + q \dot{\vec{r}}(t) \cdot \vec{A}(\vec{r}, t)$$

kinet.
Energie
Elektron

Kern-
potential

Teilchen in elektromagnetisch Feld
 ϕ : Skalar, \vec{A} Vektorpotential
 \rightarrow Lorentzkraft in Lagrange Π
 (siehe Mechanik)



$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}_{el}^2 - V(\vec{r}_{el}) - q \phi(\vec{R}) - q \dot{\vec{r}}_{el} \cdot \vec{\nabla}_R \phi(\vec{R})$$

z.B. H-Atom

$$-q \frac{1}{2} \left(\vec{r}_{el} \cdot \vec{\nabla}_R \right) \left(\vec{r}_{el} \cdot \vec{\nabla}_R \right) \phi(\vec{R})$$

$$+ q \dot{\vec{r}}_{el} \cdot \vec{A}(\vec{R}) + q \dot{\vec{r}}_{el} \cdot \left(\vec{r}_{el} \cdot \vec{\nabla} \vec{A}(\vec{R}) \right)$$

Entwickl. in 2. Ordng. \vec{r}_{el} / $\vec{r}_{el} \rightarrow \vec{r}$

$$L \rightarrow L + \frac{d}{dt} \left(-q \vec{r}(t) \cdot \vec{A}(\vec{R}, t) - \frac{q}{2} \vec{r} \cdot \left[\vec{r} \cdot \vec{\nabla} A(\vec{R}, t) \right] \right)$$

Umwidg. der Lagrangefunktion

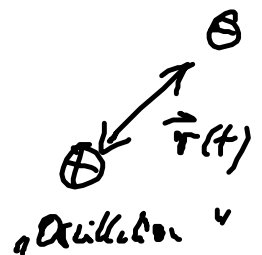
Idee: $\vec{A}, \phi \rightarrow \vec{E}, \vec{B}$ (beobachtbare Größen)

Umwidg. + ausrechnen: (Mechanik)

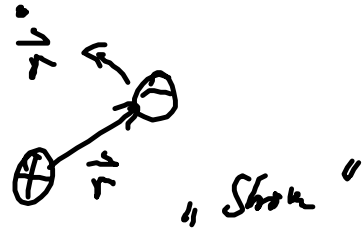
$$L = \frac{m}{2} \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}) - q \phi(R) + \vec{d} \cdot \vec{E} + \vec{u} \cdot \vec{B}$$

- $\phi(R)$ ist konstantes Potential bzgl. \vec{r}
(weglassen)

- $\vec{d} = q \vec{r}$ ist der ^{elektrische} Dipolvektor



- $\vec{u} = \frac{\vec{r}}{r} \times \dot{\vec{r}}$ ist das magnetische Dipolmoment



- $\vec{E} = -\vec{\nabla} \phi - \dot{\vec{A}}$
 - $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ hätte von \vec{R} ab

- elektrische Dipolnäherung - WW ist ungleich

$$\vec{\nabla}_R \cdot \vec{Q} \cdot \vec{E}(\vec{R})$$

$$\uparrow$$

$$\vec{r} \cdot \vec{r}$$

$L \rightarrow \underline{H}$

$$\underline{H} = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2m}}_{\text{Atom elektron}} + V(\vec{r}) - \vec{d} \cdot \vec{E} - \vec{m} \cdot \vec{B}$$

Hamiltonian ein "breit elektron" in Atom (H-ähnlich)
 unter WW mit \vec{E} , \vec{B} -Feld,

$$\vec{d} = q \vec{r}, \quad \vec{m} = \frac{q}{2m} \vec{r} \times \vec{p}_r$$

Untersuchung von

a) optisch Felder : ebene Wellen als Approx.

$$|\vec{B}| = \frac{|\vec{E}|}{c}$$

$\vec{d} \cdot \vec{E}$ vergleicht mit $\vec{a} \cdot \vec{B}$:

↓

$$r \vec{E}$$

$$r \frac{1}{c} E$$

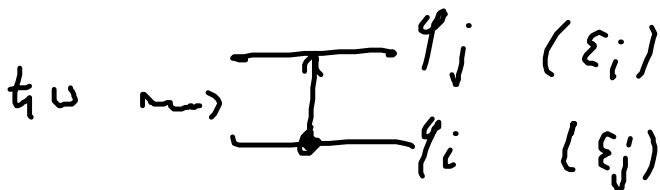
$\ll 1$ f. nichtrelativist. Elektronen

$$\boxed{\vec{d} \cdot \vec{E} \gg \vec{a} \cdot \vec{B}}$$

f. Optik!

man untersucht die Absorption v.

Stärke der Energie $\hbar\omega$ durch das Elektron



Ausgabe über 1) $\epsilon_i - \epsilon_j$ (Energie)

2) Stärke d. Übergangs:

$$\int d\tau \varphi_i^* \overleftrightarrow{\tau} \varphi_j \quad (\text{Dipolmoment})$$

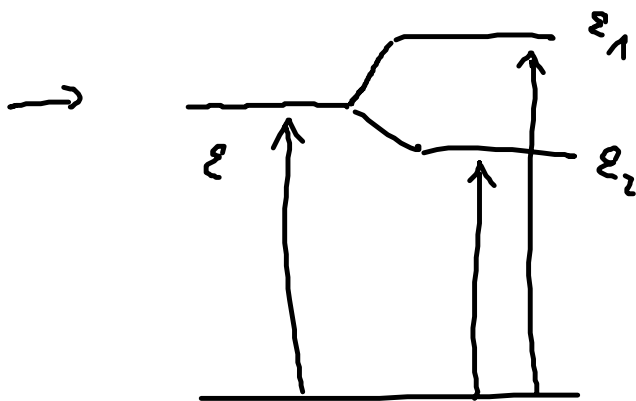
b) statische elektrisch und magnetisch Felder

ferromagnetisch und $d \cdot \vec{E}$ bzw. $\vec{m} \cdot \vec{B}$

wird statisch Felds betrachtet

Zee man effect : Aufspaltung v. optischen Absorptionslinie
in unter Linie wenn \vec{B} angelegt

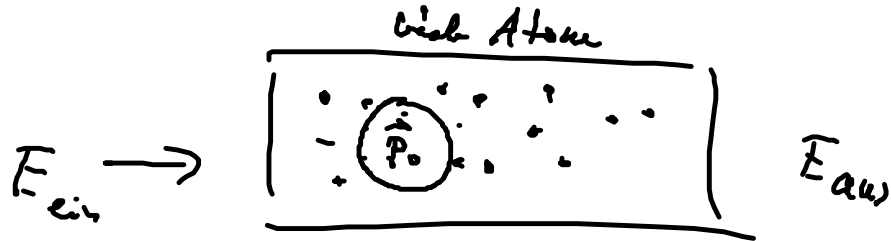
Stark effect : - 4 - wenn \vec{E} angelegt



optisch Spektroskopie
zu Kristallen

2. Optische Absorption

2.1. Lichtausbreitung



elektrisches Licht Wellen

\vec{P} : Dipoldichte im Volumen

Dipol dichte d.

↓ abstrakte faces

Wellengleichung:
$$\left(\partial_z^2 - \frac{1}{c^2} \partial_t^2 \right) \vec{E} = \mu_0 \partial_t^2 \vec{P}$$

unß quant. med.

berechnet werden

Auswahl:
$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{ikz - i\omega t} \sim \text{analog f. } \vec{P}$$

$$\left(-k^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \right) \vec{E}_0(\omega) = -\mu_0 \omega^2 \vec{P}_0(\omega)$$

$$\vec{P}_0(\omega) = \underbrace{\epsilon_0 \chi(\omega)} E_0(\omega)$$

Suszeptibilität (Antwort fkt)

↓ gm. berechnen

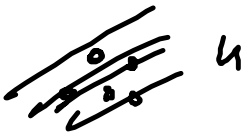
$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} + \omega^2 \underbrace{\mu_0 \epsilon_0}_{\mu_0 \epsilon_0} \chi(\omega)$$

Dispersionsrelation
von Licht in
Medium $\chi(\omega)$

erhält
Brechzahl n
des umgebenden
Mediums

$$\frac{1}{\mu_0 \epsilon_0} = c_0^2$$

Lichtgeschw. im Vakuum



$$k^2 = \frac{\omega^2}{c_0^2} (n^2 + \chi) = \frac{\omega^2}{c^2} \left(1 + \frac{\chi}{n^2} \right)$$

$$k = \pm \frac{\omega}{c} \left(1 + \frac{\chi}{n^2} \right)^{1/2} \approx \pm \frac{\omega}{c} \left(1 + \frac{\chi}{2n^2} \right)$$

n^2 ist groß

in Ansatz einsetzen:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i \frac{\omega}{c} z - i \omega t} e^{i \frac{\omega}{c} \frac{\chi}{2n^2} z} \approx e^{-\frac{\omega \text{Im} \chi}{c 2n^2} z}$$

eben Wellen in
Hilfsmedium

abklingende
Funktion in z

wenn $\text{Im } \chi \neq 0$, so findet Absorption statt:

↓
Absorption

$$\chi = \text{Re } \chi + i \text{Im } \chi$$

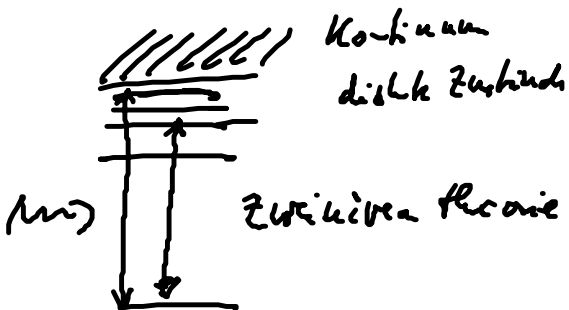
Maß der Absorption: $\text{Im } (\chi(\omega))$

bei ω findet Absorption statt

$$e^{-\alpha z} \rightarrow \alpha = \frac{\omega}{2c n^2} \text{Im } (\chi)$$

↑ Absorptionskoeffizient
in Lambert-Beer Gesetz

2.2. Dipoldichte und Zweiniveausystem



Abstraktion

— φ_2, ϵ_2

— φ_1, ϵ_1

$$1 \hat{=} u_1, r_1, m_1$$

$$2 \hat{=} u_2, r_2, m_2$$

Suche Ref. d. Dipoldichte:

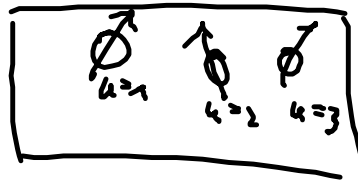
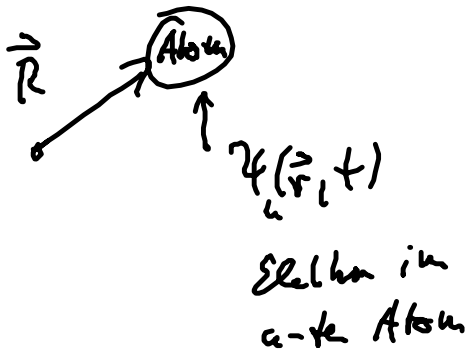
Erwartungswert d. u -te Dipols



$$\vec{P}(\vec{R}, t) = \sum_{\text{alle Atome } u} \delta(\vec{R} - \vec{R}_u) \langle q \vec{r} \rangle_u$$

Dipol

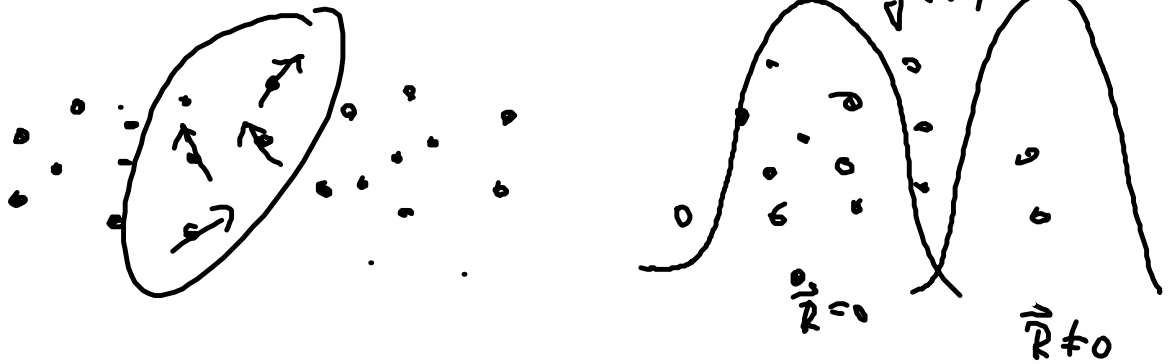
\vec{R}_u : Ort d. Dipole



$$[\vec{P}] = \frac{[\text{Dipol}]}{[\text{Volumen}]} = [q \vec{r}] [\delta(\vec{R} - \vec{R}_u)]$$

"Dipoldichte"

Mittel über viele Dipole: (Experiment)



$$\langle \vec{P} \rangle(\vec{R}) \stackrel{\text{Multiplikation}}{=} \int d^3 \vec{R}' g(\vec{R} - \vec{R}') \vec{P}(\vec{R}')$$

$$= \sum_u g(\vec{R} - \vec{R}_u) \langle q \vec{r} \rangle_u \quad \int \cdot g \quad \square$$

$$\Rightarrow n_0(\vec{R}) \langle q\vec{r} \rangle_R$$

die endgültige Formel f. Dipoldichte:

$$\boxed{\vec{P}(\vec{R}) = n_0(\vec{R}) \langle q\vec{r} \rangle_R \approx \epsilon_0 \langle q\vec{r} \rangle}$$

\uparrow Dipoldichte (Dichte d. Atome) \uparrow qm. Erwartungswert d. Dipoloperators
 über dieselbe Gasdichte

$$\boxed{\langle q\vec{r} \rangle = \int d^3r \psi^*(\vec{r}, t) q\vec{r} \psi(\vec{r}, t)}$$

Theorie f. $\langle q\vec{r} \rangle$ nötig bzw \vec{P}

$$\vec{P} = \epsilon_0 \langle q\vec{r} \rangle = \epsilon_0 \int d^3r \psi^* q\vec{r} \psi$$

$$\underline{H} = \underline{H}_{\text{atom}} - \underline{d} \cdot \vec{E}(t) \quad \text{mit} \quad i\hbar \dot{\psi} = \underline{H} \psi$$

wissen: $\underline{H}_{\text{atom}} \psi_i = \epsilon_i \psi_i$

Ansatz f. ψ : $\psi(\vec{r}, t) = \sum_i c_i(t) \psi_i(\vec{r})$

\uparrow
vollständige System

$$\vec{p} = u_0 \int d^3r (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)^* q \vec{r} (c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2)$$

$$= u_0 \left(\vec{d}_{11} c_1^* c_1 + \vec{d}_{12} c_1^* c_2 + \vec{d}_{21} c_2^* c_1 + \vec{d}_{22} c_2^* c_2 \right)$$

$$\vec{d}_{ij} = \int d^3r \psi_i^*(\vec{r}) q \vec{r} \psi_j(\vec{r})$$

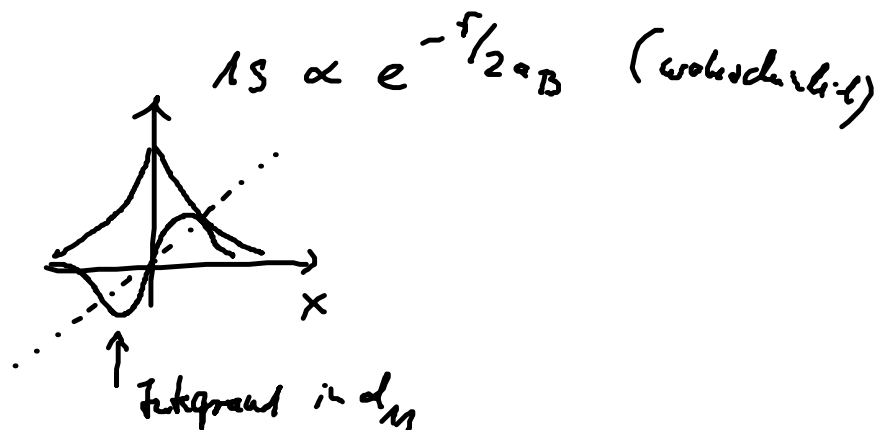
Matrix el. d. Dipol operators

„Dipol matrix el.“

$c_i^*(t) c_i(t) \hat{=} \text{Wahrscheinlichkeit, Elektron in Zustand } i \text{ zu finden}$

$$\vec{d}_{ii} = 0$$

in allgemein
am Bsp. Gl. 11.1



$c_i^* \cdot |c_j| \cdot (t) \quad i \neq j \quad \hat{=} \quad \text{Amplitude f. Wahrscheinlichkeit d. Überlagerungszustands aus } \varphi_i + \varphi_j.$

$\rightarrow d_{ij} \neq 0$

\nearrow
in all gemein

(i. A. : Auswählrecht)

\rightarrow bestimmt das Optik