

## 2.3. Optische Suszeptibilität eines Zweiniveausystems

starke Absorption:  $\kappa(\omega) \sim \text{Im}(\chi(\omega))$

$$\text{aus } \chi(\omega) = \frac{\overline{\vec{P}(\omega)}}{\epsilon_0 \overline{\vec{E}(\omega)}}$$

Übergangsamplitude  
beide durch Feld  
↓ induziert

$$\text{wobei } \vec{P}(t) = n_0 \left( \vec{d}_{12} c_1^*(t) c_2(t) + \vec{d}_{21} c_2^*(t) c_1(t) \right)$$

Anzahldichte  
der Atome  
( $\text{1/m}^3$ )

Dipolmomente, bestimmen Stärke der Absorption  
( für einige Übergänge stark, für andere Null )

bestimmen  $c_1(t), c_2(t)$  aus der Schrödingergleichung

$$i\hbar \partial_t \psi(\vec{r}, t) = \underline{H} \psi(\vec{r}, t)$$

$$\text{Ansatz: } \psi(\vec{r}, t) = c_1(t) \varphi_1(\vec{r}) + c_2(t) \varphi_2(\vec{r})$$

↑  
Eigenfunktionen d. Atomproblems

$$\underline{H} = \underline{H}_{\text{atom}} + \underline{W} \quad \underline{W} = -q \vec{r} \cdot \vec{E}(\vec{r}, t)$$

Ansatz in Schrödingergl. einsetzen:

↑  
alle Atome  
identisch

$$i\hbar (\dot{c}_1 \varphi_1 + \dot{c}_2 \varphi_2) = \underbrace{H}_{-A_{kl}} (c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2) + \underbrace{W}_{-} (c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2)$$

$$c_1 \varepsilon_1 \varphi_1 + c_2 \varepsilon_2 \varphi_2 \quad c_1 \underline{W} \varphi_1 + c_2 \underline{W} \varphi_2$$

Dgl. f.  $c_1$  und  $c_2$  konstruieren

Orthogonalität ausnutzen

$$\int d^3r \varphi_1^*(\vec{r}) \quad \text{links ableiten} : \int \varphi_1^* \varphi_1 = 1, \int \varphi_1^* \varphi_2 = 0$$

$$i\hbar \dot{c}_1 = \varepsilon_1 c_1 + W_{11} c_1 + W_{12} c_2$$

$$W_{11} = \int d^3r \varphi_1^*(\vec{r}) \underline{W} \varphi_1(\vec{r})$$

$$W_{12} = \int d^3r \varphi_1^*(\vec{r}) \underline{W} \varphi_2(\vec{r})$$

Matrixelement von  $\underline{W}$   
& diagonales

„nicht diagonales“

$$\underline{W} = \underline{W}(\vec{r}, \vec{p})$$

Bemerk. :  $W_{11} = \int d^3r \varphi_1^*(\vec{r}) \vec{r} \varphi_1(\vec{r}) = 0$

(siehe letzte VL + Realty.)

folgd. f.  $c_2$  mittels  $\int d^3r \varphi_2^*(\vec{r})$

$$i\hbar \dot{c}_2 = \varepsilon_2 c_2 + W_{22} c_2 + W_{21} c_1$$

$$W_{22} = 0$$


fermt ist  $c_1^* c_2$ , löse  $c_1(t)$ ,  $c_2(t)$  gekoppelt

$$c_1(t) = c_1^0 e^{-i\omega_1 t} - i \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_1(t-t')} \frac{\omega(t')}{\hbar} c_2(t')$$


homogen lsg. speziell lsg. inhomog. lsg.

die gefordert:  $\omega_1 = \frac{E_1}{\hbar}$

$$c_2(t) = c_2^0 e^{-i\omega_2 t} - i \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_2(t-t')} \frac{\omega_{21}(t')}{\hbar} c_1(t')$$

$c_2^0 = 0$   


Näherung: lineare Optik (Lambert-Beziehung)

$c_1^0 = 1$   


Aufg. bedingung: Wahrscheinlichkeit  $|c_1^0|^2 = 1$

System in  $\varphi_1$  zu finden

vor Anhalten d.  $\vec{E}$ -Felds ( $t \rightarrow \infty$ )

$|c_2^0| = 0$  (denn keine Wahrscheinlichkeit)

Störtheorie in  $\vec{E}$

$$c_2(t) = +i \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_2(t-t')} \frac{\vec{d}_{21} \cdot \vec{E}(t')}{\hbar} c_1(t')$$

$$C_2^0 = 0$$

$$\vec{w} = -\vec{q} \vec{r} \downarrow \vec{d}$$

woll uns Antwort in 1. Ordng. in  $\vec{E}$  betrachte

$$\text{dass } C_1(t) = C_1^0 e^{-i\omega_1 t} = e^{-i\omega_1 t}$$

$$C_2(t) = ti \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\omega_2(t-t')} \frac{\vec{d}_{21} \cdot \vec{E}(t')}{t} e^{-i\omega_1 t'}$$

eig. Fkt. in Frequenzraum benutzt ( $x(\omega)$ )

$$\vec{E}(t') = \int d\omega e^{-i\omega t'} \vec{E}(\omega)$$

$$C_2(t) = \int d\omega \frac{\vec{E}(\omega) \cdot \vec{d}_{21}}{t} \int_{-\infty}^t dt' e^{-i(\omega_2 - \omega_1 - \omega)(t-t')} e^{-i\omega_1 t - i\omega t}$$

$$\begin{aligned} s &= t - t' \\ ds &= -dt' \\ -\infty &\rightarrow +\infty \\ t &\rightarrow 0 \end{aligned}$$

$$C_2(t) = \int d\omega \frac{\vec{E}(\omega) \cdot \vec{d}_{21}}{t} \int_0^{\infty} ds e^{-i(\omega_2 - \omega_1 - \omega)s} e^{-i\omega_1 t} e^{-i\omega t}$$

Für ir. d. d. v.  $c_2(t)$ , also  $c_2(\omega)$

$$c_1^*(t) c_2(t) = \int_0^\infty ds e^{-i(\omega_2 - \omega_1 - \omega)s} = i\pi \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega)$$

+ i Hauptwert

$$c_1^* c_2(\omega) = i\pi \frac{\vec{E}(\omega)}{t} \cdot \vec{d}_{21} \delta(\omega_2 - \omega_1 - \omega)$$

Amplitude für den Übergang d. Elektronen von  $\varphi_1 \rightarrow \varphi_2$ .  
 Einsetzen in  $J_{in}(\omega)$  mit  $\vec{d}_{12} \vec{E} \cdot \vec{d}_{21} = E d_{12} d_{21} = E |d_{12}|^2$   
Skalar

$$J_{in}(\omega) = \frac{\pi |d_{12}|^2}{t \epsilon_0} \epsilon_0 \left[ \delta(\omega - (\omega_2 - \omega_1)) + \delta(\omega + (\omega_2 - \omega_1)) \right]$$

Formel f. Suszeptibilität ein Zweiveira System:

$$\alpha(\omega) \sim J_{in}(\omega) \sim \epsilon_0 \cdot |d_{12}|^2 \left[ \delta(\omega - \omega_{21}) + \delta(\omega + \omega_{21}) \right]$$

Auswahl dichte  $\uparrow$   
 je stärker optisch  
 Dipolmoment ist  
 desto stärker Absorption  
 kann wegge-  
 lassen  
 werden = 0  
 ~~$\delta(0)$~~

$$\epsilon_2 = t \omega_2 \quad \text{---} \quad 2$$

$$\epsilon_1 = t \omega_1 \quad \text{---} \quad 1$$

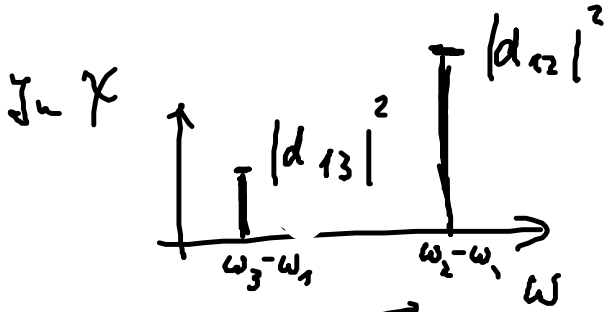
$$\omega_2 > \omega_1$$

wenn Frequenz  
 d. Licht =  
 Übergangsfrequenz ist

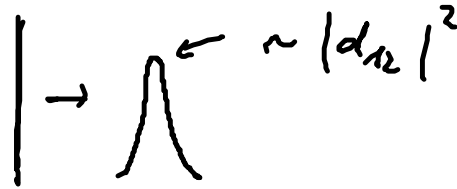
$$\omega_{21} = \omega_2 - \omega_1 > 0$$

$\omega = \omega_{21}$   
dann findet  
Starke Absorption  
statt

wie sieht die Absorption aus?



kein reines  $\delta$ -Funktionsverhalten sondern Lorentzlinien (Stellungsdrift)

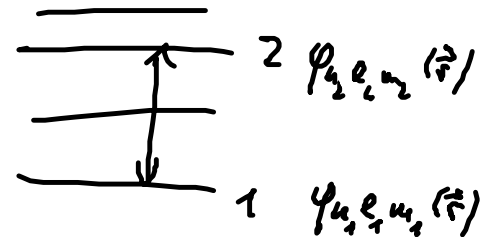


Kann man Aussagen über die Dipolmomente machen?

### 2.4. Dipolmatrixelemente und Auswahlregeln

wasserstoffähnlich Atom (1 äußere Elektron)

$$\vec{d}_{12} = q \int d\tau \psi_{n_1, l_1, m_1}^*(\vec{r}) \vec{r} \psi_{n_2, l_2, m_2}(\vec{r})$$



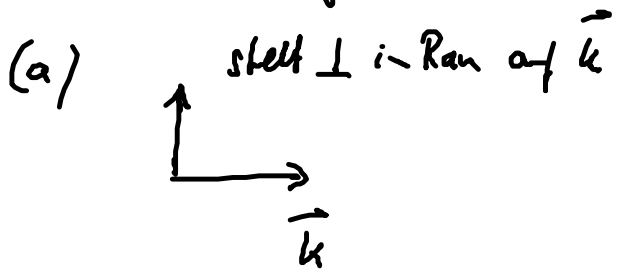
Wechselwirkung  $\vec{d}_{12} \cdot \vec{E} = \vec{d}_{12} \cdot \vec{e}_E E(\omega)$

↑

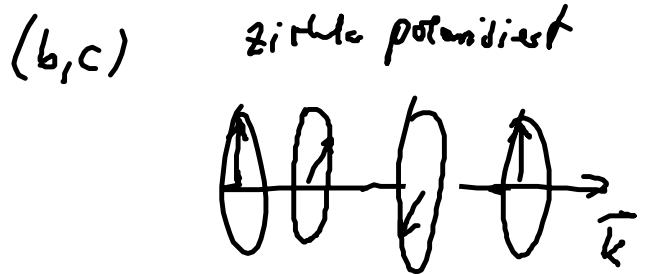
$$|d_{12}|^2 \equiv |\vec{d}_{12} \cdot \vec{e}_E|^2 \quad \vec{E}\text{-Feldvektor}$$

das Vektor d.  $\vec{E}$ -Felds hat typisch wie bepl. d. Atom 3 Mgl.

der Orientierung:

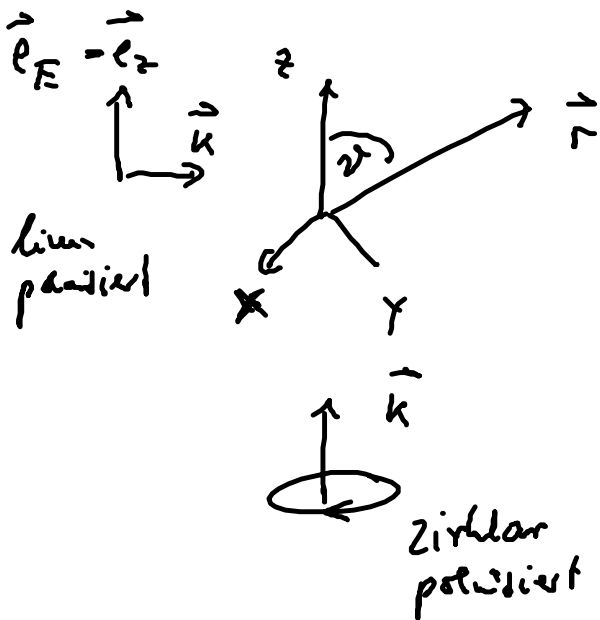


Ausbreitungsrichtg.  
d. Well



} links und rechts zirkular  
polarisiertes Licht

Skalarprodukt:  $\vec{r} \cdot \vec{e}_E$



$\vec{r}$  soll in  $\vec{e}_z$  und  $\vec{e}_{\pm}$  zerlegt wer

$$\vec{e}_{\pm} = (\vec{e}_x \mp i\vec{e}_y) \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\vec{r} = a_+ \vec{e}_+ + a_- \vec{e}_- + z \vec{e}_z$$

$$\vec{r} = x \vec{e}_x + y \vec{e}_y + z \vec{e}_z$$

$$\vec{r} = \underbrace{(x+iy)}_{\vec{e}_+^* \cdot \vec{r}} \vec{e}_+ + \underbrace{(x-iy)}_{\vec{e}_-^* \cdot \vec{r}} \vec{e}_- + \underbrace{z}_{\vec{e}_z \cdot \vec{r}} \vec{e}_z$$

$\vec{r}$  und  $\vec{r}^*$  können jeweils nach  $\vec{e}_z, \vec{e}_\pm$  zerlegt werden

$$\begin{aligned} \vec{d}_{12} \cdot \vec{r} &= \frac{q \int d^3r \varphi_1^*(\vec{r}) (x+iy) \varphi_2(\vec{r}) \cdot \vec{E}_+}{\text{reduziert}} \\ &\quad + \frac{q \int d^3r \varphi_1^*(\vec{r}) (x-iy) \varphi_2(\vec{r}) \cdot \vec{E}_-}{\text{links zirkulär}} \\ &\quad + \frac{q \int d^3r \varphi_1^*(\vec{r}) z \varphi_2(\vec{r}) \cdot \vec{E}_z}{\text{linear}} \end{aligned}$$

wenn  $\vec{E}_+, \vec{E}_-$  oder  $\vec{E}_z$  getrennt vorliegen,

↳ macht es Sinn, jede Zeile einzeln anzusehen:

allgemeine Ansatzformeln:

$$\left. \begin{array}{l} \underline{d_z}: \text{linear} \\ \underline{d_{\pm}}: \text{zirkulär} \end{array} \right\} = \left| \begin{array}{l} z = r \cos \vartheta \\ x \pm iy = r \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} \end{array} \right|$$



$$= N_1 N_2 \cdot q \cdot \int_0^\infty dr r^2 R_{u_1 l_1}^*(\vec{r}) \frac{1}{r} R_{u_2 l_2}(\vec{r}) \quad (1)$$

Normierung d. Wellenfunktionen

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{-i(m_1 - m_2)\varphi} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i\varphi \\ e^{\pm i\varphi} \\ m \end{pmatrix} \quad (2)$$

$$\int d\vartheta \sin\vartheta \begin{pmatrix} \cos\vartheta \\ \sin\vartheta \end{pmatrix} P_{l_1}^{m_1}(\cos\vartheta) P_{l_2}^{m_2}(\cos\vartheta) \quad (3)$$

Die 3 Integrale geben die Distributionen:

(1) gibt kein Regel die diese Integral einschränkt

$$(2) \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-im_1\varphi} e^{im_2\varphi} = \frac{e^{i(m_2 - m_1)\varphi}}{i(m_2 - m_1)} \Big|_0^{2\pi} = \delta_{m_1, m_2}$$

$$d_{\pm} \sim \int d\varphi e^{-im_1\varphi} e^{im_2\varphi} e^{\pm i\varphi} = \delta_{m_1 \pm 1, m_2}$$

1. Auswahlregel  $\Delta m = 0, \pm 1$   $\begin{matrix} \overline{\uparrow} & m_2 \\ & m_1 \end{matrix}$

• Für elektrische Dipolanregg. und linear polarisiertes Feld  
 unß  $m_1 = m_2$  sei als die Haupt Qz darf sich nicht  
 ändern

• Für zirkular polarisiertes Licht unß  $m_1 = m_2 \pm 1$  sei

sind also die Magnet  $QZ$  um  $\pm 1$  ändern.

③ Jetzt um  $\beta$  und  $\mathcal{D}$ -Integral diskutiert werden:

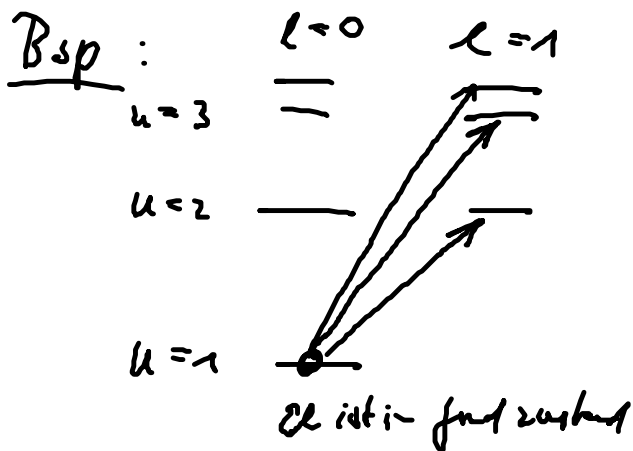
für lineare Polarisierung  $\cos \mathcal{D} = x$  (f. zirkular ähnlich)

$$d_z \sim \int_{-1}^1 dx \times P_{l_1}^m(x) P_{l_2}^m(x) \neq 0 \text{ für } l_1 - l_2 = \pm 1$$

3. Auswahlregel  $\Delta l = \pm 1$

Bei elektr. Dipol Übergängen um  $\beta$  sind die Bahndrehimpuls  $QZ$  um  $\pm 1$  ändern

(Photon trägt Drehimpuls aus Ebene ab).



Lyman - Serie

$$\Delta \tilde{E} = \frac{\omega_1 - \omega_u}{h} = R_H \left( 1 - \frac{1}{4^2} \right)$$

Auswertung

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1, \quad \left( \underline{\underline{\Delta m_s = 0}} \right)$$