

# 1. Einleitung

<b>1. EINLEITUNG</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Allgemeines und Organisation</b>	<b>2</b>
1.1.1 Inhalt	2
1.1.2 Publikum	2
1.1.3 Organisatorisches	2
<b>1.2 Wechselwirkung von Licht und Materie</b>	<b>3</b>
1.2.1 Übersicht	3
1.2.1.1 Streuung	3
1.2.1.2 Absorption	3
1.2.1.3 Brechung	3
1.2.1.4 Ausbreitungsgeschwindigkeit:	4
1.2.2 Materialeigenschaften und mikroskopische Theorien	5
<b>1.3 Formen der Spektroskopie</b>	<b>6</b>
1.3.1 Spektralbereiche	6
1.3.2 Wechselwirkungen	7
1.3.3 $\gamma$ -Strahlen	7
1.3.4 Röntgenstrahlen	8
1.3.5 Sichtbares Licht	8
1.3.6 Infrarot	9
1.3.7 Mikrowellen	9
1.3.8 ESR	10
1.3.9 NMR	11
1.3.10 Teilchen	13
<b>1.4 Der Laser als Lichtquelle</b>	<b>14</b>
1.4.1 Das Prinzip	14
1.4.2 Lasertypen	14
1.4.2.1 Schmalbandige Laser	14
1.4.2.2 Pulslaser	15
1.4.3 Lasermedien	16
1.4.4 Molekulare und atomare Medien	16
1.4.5 Festkörperlaser	17
1.4.6 Halbleiterlaser	18
1.4.7 Optische Frequenzmischung	18
<b>1.5 Die Lorentz-Lorenz Theorie der Dispersion</b>	<b>20</b>
1.5.1 Makroskopische und Mikroskopische Modelle	20
1.5.2 Bewegungsgleichung	21
1.5.3 Resonanzlinien	22
1.5.4 Lichtausbreitung	23
1.5.5 Absorption und Dispersion	25

## **1.1 Allgemeines und Organisation**

### **1.1.1 Inhalt**

Steht noch nicht fest!

Allgemein: Wechselwirkung Licht - Materie

Wünsche möglich: Methodik / Anwendungen, Grundlagen / aktuelle Themen, ...

Verwandte Vorlesung: Quantenelektronik (Fröhlich); Unterschied: Dort sind Laser ein wichtiges Thema, hier werden sie in erster Linie als Lichtquellen benutzt.

Literatur: Demtröder, Allen-Eberly, Suter

### **1.1.2 Publikum**

Doktoranden, Diplomanden, Studenten; wer gehört wozu?

Zeiten; Überziehen möglich?

### **1.1.3 Organisatorisches**

Schein

Kombinationsmöglichkeiten für Nebenfach: NMR? Quantenelektronik, E3-Seminar: Spektroskopie und Streumethoden an Festkörpern

Blockpraktikum

## 1.2 Wechselwirkung von Licht und Materie

### 1.2.1 Übersicht

Die Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung, insbesondere Licht, und Materie hat Philosophen und Naturwissenschaftler seit vielen Jahrhunderten beschäftigt und zu engagierten Debatten geführt, so z.B. zwischen Goethe und Newton. Ursprünglich wurde die Diskussion nur über die Wechselwirkung von Licht mit Materie geführt, da dies damals die einzige bekannte elektromagnetische Strahlung war. Wir betrachten zunächst einmal die Phänomene, die hierbei auftreten.

#### 1.2.1.1 Streuung

**Z: Streuung**

Während sich Licht durch das Vakuum ausbreiten kann ohne daß man das von der Seite bemerkt, ist das in Material nicht der Fall, sondern man sieht seitlich Streulicht. Dies ist u.a. ein Grund dafür, daß der Himmel tagsüber blau ist. Diese Streuung stammt größtenteils von Partikeln. Wir werden deshalb im weiteren nicht im Detail darauf eingehen. Was uns mehr interessiert ist die Streuung an Atomen und Molekülen sowie, etwas weniger detailliert an Elektronen in Bandstrukturen von Festkörpern.

#### 1.2.1.2 Absorption

**Z: Absorption**

Absorption: Man stellt fest, daß die Intensität des Lichtes vermindert wird, wenn es durch ein Medium durchtritt. Dieses Phänomen ist eng verwandt mit dem Phänomen der Streuung: Energieerhaltung fordert, daß die Abschwächung der Leistung des transmittierten Lichtes mindestens gleich groß ist wie die Leistung des gestreuten Lichtes. Wir werden uns zunächst mit linearen Systemen beschäftigen, d.h. Systemen, bei denen die Verringerung der Intensität des Lichtes bei der Durchquerung einer dünnen Schicht direkt proportional zur Intensität des einfallenden Lichtes ist,

$$dI/dx = - \alpha I ,$$

wobei die Proportionalitätskonstante  $\alpha$  offenbar die Dimension einer inversen Länge aufweist. Die Lösung ist offenbar

$$I(x) = I_0 e^{-\alpha x}$$

besitzt, d.h. die Intensität fällt exponentiell ab. Die Proportionalitätskonstante  $\alpha$  ist somit das Inverse der Distanz, über die die Intensität auf  $1/e$  abfällt. Diese Distanz wird als Absorptionslänge bezeichnet.

#### 1.2.1.3 Brechung

**Z: Brechung**

Licht breitet sich nicht geradlinig aus wenn es durch ein Medium durchtritt.

#### 1.2.1.4 Ausbreitungsgeschwindigkeit:

**Z: Ausbreitungsgeschwindigkeit**

Es zeigt sich, daß die Brechung direkt darauf zurückgeführt werden kann, daß die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichtes anders ist als im Vakuum. Die Feldamplituden hängen in diesem Fall vom Brechungsindex  $n$  des Systems ab:

$$A(x) = A_0 e^{i(\omega t - k_0 n x)} e^{-\alpha z/2} ,$$

In den meisten Fällen ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit niedriger als die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum, sie kann aber auch höher sein.

Man unterscheidet verschiedene Arten von Geschwindigkeiten: bereits aus der Physik 3 bekannt ist die Unterscheidung von Phasen- und Gruppengeschwindigkeit. Wenn wir das Licht als elektromagnetische Welle mit Kreisfrequenz  $\omega$  und Wellenvektor  $k$  beschreiben, ist die Phasengeschwindigkeit gegeben als

**Z: Arten von Geschwindigkeiten**

$$v_P = \omega/k \quad \text{und die Gruppengeschwindigkeit als} \quad v_G = d\omega/dk .$$

Die beiden unterscheiden sich dann, wenn sie von der Wellenlänge abhängen.

Dies führt z. B. dazu, daß am Rand der Brillouin-Zone die Gruppengeschwindigkeit gegen Null geht.

**Sim(Math): Phasen -vs. Gruppengeschw.**

Beide können kleiner oder grösser als die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum,  $c$ , sein. Die Relativitätstheorie verlangt jedoch, daß die Signal-Ausbreitungsgeschwindigkeit nicht größer als  $c$  sein darf.

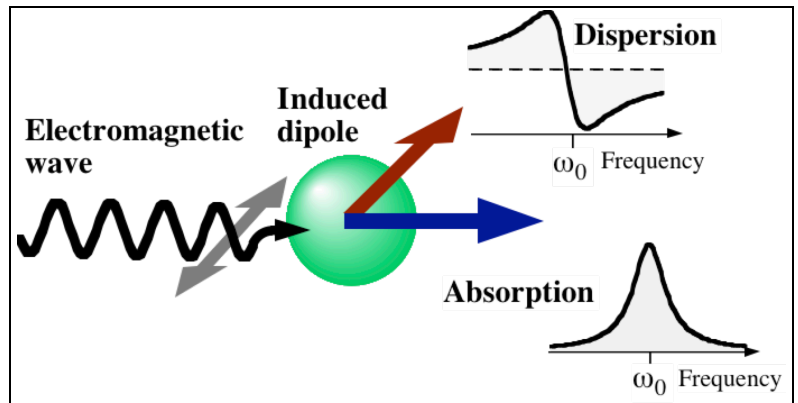
Diese kann z.B. definiert werden als die Geschwindigkeit, mit der sich die Front eines Lichtpulses ausbreitet.

**Z: Front-Ausbreitungsgeschwindigkeit**

## 1.2.2 Materialeigenschaften und mikroskopische Theorien

**Figur 1:** Absorption und Dispersion.

Das Interesse an diesen Effekten bezog sich ursprünglich in erster Linie auf die unterschiedliche Absorption und Brechung (d.h. Dispersion) verschiedener Materialien als Funktion der Wellenlänge.



$$n = n(\lambda) , \alpha = \alpha(\lambda)$$

### **F: Beispiel für Verhalten des Brechungsindex / Absorptionslinie.**

Ganz allgemein findet man ein resonantes Verhalten, d.h. eine hohe Verstärkung wenn die Wellenlänge in die Nähe einer charakteristischen Wellenlänge des Materials kommt. Diese Wellenlängen sind direkt an Energiedifferenzen des Materials gekoppelt und können deshalb Informationen über die mikroskopischen Bestandteile, d.h. die Atome oder Moleküle liefern. Hierin liegt auch praktisch das gesamte Interesse an der Spektroskopie jeglicher Art. Sie ermöglicht es nämlich, viel über die untersuchten Materialien zu lernen.

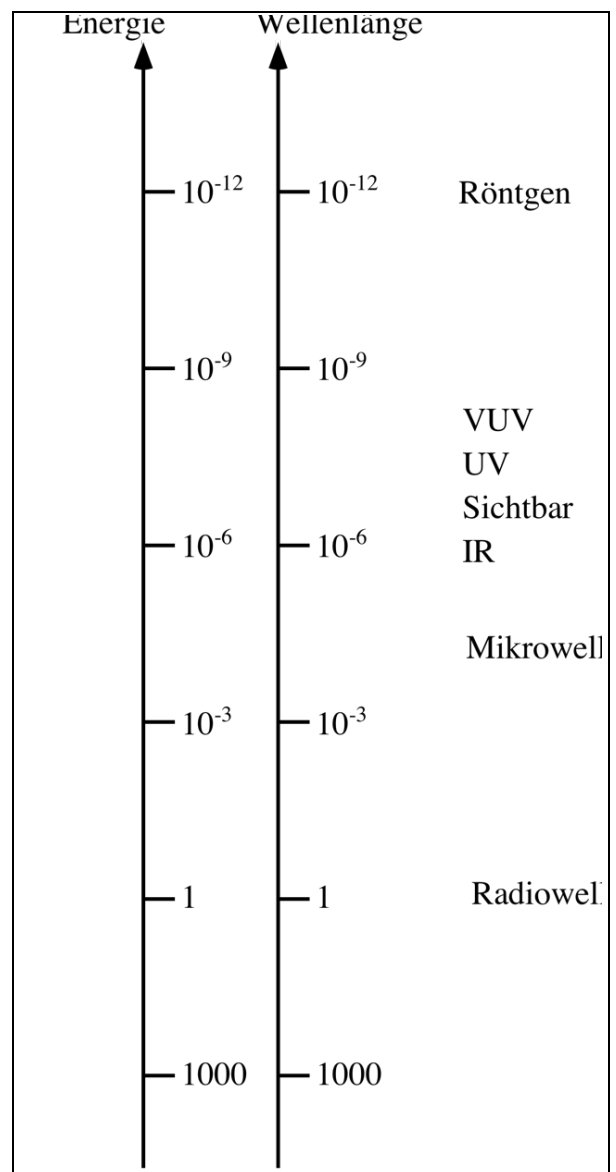
Um die Resultate von spektroskopischen Messungen nutzen zu können müssen wir eine theoretische Beschreibung haben, welche die makroskopischen Eigenschaften auf eine mikroskopische Grundlage zurückführt.

### 1.3 Formen der Spektroskopie

Spektroskopische Experimente untersuchen die Abhängigkeit von Absorption und Brechungsindex von der Wellenlänge, resp. Frequenz des Lichtes. Die Motivation für solche Experimente liegt zum einen darin, diese Eigenschaften zu verstehen und anzuwenden, zum andern darin, aus den gemessenen Daten Informationen über den mikroskopischen Aufbau der Materie zu erhalten. Es gibt verschiedene Gebiete der Spektroskopie, die man zum einen aufgrund der verwendeten Strahlung unterscheiden kann, zum andern anhand der Wechselwirkung und drittens anhand der untersuchten Eigenschaften klassifizieren kann.

#### 1.3.1 Spektralbereiche

Die elektromagnetische Skala kann nach Wellenlängen, Frequenzen oder Energien gegliedert werden. Im langwelligen, resp. niederenergetischen Bereich beginnt die Skala mit Radiowellen, deren Wellenlängen praktisch beliebig lang werden können. Im Bereich von ca. 1 GHz, resp. 30 cm Wellenlänge beginnt man üblicherweise von Mikrowellen zu sprechen. Im Bereich von einigen THz, resp. unterhalb eines Millimeters beginnt man von Millimeterwellen, THz-Wellen zu sprechen und etwas später von Fern-Infrarot. Ab einer Wellenlänge von ca.  $10^{-6}$  -  $0.75 \mu\text{m}$  spricht man von Infrarot und von 750 nm bis 400 nm findet man das sichtbare Licht. Daran schließt das UV, resp. daran das Vakuum-UV an, und schließlich Röntgen und Gamma-Strahlen. Ab diesem Bereich spricht man aber meistens nicht mehr von Wellen, sondern benutzt eher den Teilchencharakter der Strahlung.



### 1.3.2 Wechselwirkungen

Die elektromagnetischen Felder können über den elektrischen oder magnetischen Teil an entsprechende elektrische, resp. magnetische molekulare Dipole koppeln. Dazu gehören zum einen elektronische Dipolmomente, welche durch Elektronen und Kerne in Atomen oder Molekülen gebildet werden. Dies ist zum Beispiel der Fall im Bereich der Röntgenstrahlen, welche die Elektronen treiben. Im Bereich des UV- und des sichtbaren Lichtes erzeugen die elektromagnetischen Felder Übergänge zwischen einzelnen atomaren oder molekularen Zuständen, wobei die Kopplung wiederum über das molekulare Dipolmoment läuft. Im Infraroten kann die Kopplung an molekulare elektrische Dipolmomente Schwingungen erzeugen und im Mikrowellenbereich Rotation von Molekülen in gasförmigen Molekülen. In Festkörpern kann mit dielektrischer Spektroskopie im Frequenzbereich von THz bis sub-Hertz die Bewegung ganzer Atome, Moleküle und Ionen in Festkörpern untersucht werden.

Der magnetische Anteil der Felder kann an atomare und molekulare magnetische Dipolmomente koppeln. Diese sind immer an einen Drehimpuls gekoppelt. Davon gibt es als mögliche Quellen den Bahndrehimpuls des Elektrons, den Elektronenspin, sowie den Kernspin. Interessant ist zunächst der Elektronenspin, welcher im Gebiet der Elektronenspin-Resonanz (ESR) untersucht werden, deren Frequenzbereich im Mikrowellenbereich liegt, und der Kernspin, der in der NMR oder Kernspinresonanz untersucht wird, wobei die Frequenzen im Bereich von einigen MHz bis zu 800 MHz liegen.

### 1.3.3 $\gamma$ -Strahlen

$\gamma$ -Strahlen, also der Teil des elektromagnetischen Spektrums mit der höchsten Energie, wird zum einen zur Analyse von radioaktiven Materialien verwendet. Wenn ein Kern  $\gamma$ -Strahlen emittiert geht er von einem angeregten, meist metastabilen Zustand, in einen energetisch niedriger liegenden Zustand über. Die dabei freiwerdende Energie weist ein Spektrum auf, dessen Zentralfrequenz durch die Energiedifferenz der beiden Zustände gegeben ist und dessen Breite u.a. durch die Lebensdauer der Zustände.

**Z: Kernzustände / Emission**

Durch die Messung des Spektrums der emittierten Strahlung kann man deshalb feststellen, welcher Kern zerfällt. Ein berühmter Fall, wozu dies verwendet werden kann ist das Beispiel der kalten Fusion. Hier wurde das  $\gamma$ -Spektrum als „Beweis“ aufgeführt, daß bei dem Experiment wirklich verschiedene Wasserstoffisotopen verschmolzen worden waren. Allerdings zeigt dieses Beispiel auch gleich, daß man bei solchen Messungen genau wissen muß, was man wirklich mißt, und die erhaltenen Daten im Detail diskutieren.

**F: Zerfallsdaten**

Eine weitere spektroskopische Anwendung der  $\gamma$ -Strahlen ist die Mössbauerspektroskopie. Hierbei werden  $\gamma$ -Strahlen von metastabilen Atomkernen emittiert und von den entsprechenden Kernen im Grundzustand wieder absorbiert. Man kann die Kerne

und das Material darum so auswählen, daß die Absorption / Emission extrem scharf ist und auf diese Weise Resonanzlinien erhalten, die eine relative Breite

$$\Delta\nu/\nu < 10^{-13}$$

aufweisen. Dies ist die höchste bekannte Auflösung im gesamten Spektralbereich und wurde u.a. für Präzisionsmessungen verwendet, welche der Bestätigung der Relativitätstheorie ermöglichten.

### 1.3.4 Röntgenstrahlen

Röntgenstrahlen werden in erster Linie für Beugungsexperimente eingesetzt, wobei die Wellenlänge im wesentlichen die Art und Stärke der Wechselwirkung bestimmt, während die Frequenz nur eine sekundäre Rolle spielt.

Die oszillierenden elektrischen Felder der Röntgenstrahlen regen in der

**Z: Streuung an bewegtem Elektron**

Elektronenhülle eine Oszillationsbewegung an. Die Elektronen strahlen dabei als beschleunigte Ladungen wiederum ein Feld ab. Da die Elektronen in diesem Zusammenhang als quasi-frei betrachtet werden können ist die Wechselwirkung nur wenig abhängig von der Wellenlänge.

Röntgenstrahlen können aber auch für Röntgenfluoreszenz eingesetzt werden. Hierbei werden Elektronen

**Z: Röntgenfluoreszenz**

aus niedrig liegenden Schalen der Atome angeregt, worauf in einem kaskadenartigen Prozeß Elektronen aus höheren Schalen hinunterfallen und die frei gewordene Position einnehmen. Dabei werden mehrere Photonen niedrigerer Energie frei, welche gemessen werden können. Damit können Atome einer bestimmten Sorte in fast jeder chemischen Umgebung beobachtet werden.

### 1.3.5 Sichtbares Licht

Mit ultraviolettem und sichtbarem Licht werden höher liegende Elektronen, insbesondere Va-

**Z: elektronische Anregung**

lenzelektronen, in elektronisch angeregte Zustände gebracht. Dies kann sowohl in Atomen und Molekülen im gasförmigen Zustand geschehen, wie auch in Flüssigkeiten und Festkörpern. Die Position der Resonanzlinien gibt dabei Aufschluß über die Energien der beteiligten Zustände, während die Form von der Lebensdauer der Zustände abhängt. In kondensierter Materie erhält man auch Informationen über die Umgebung der Atome.

Während Resonanzlinien freier Atome sehr schmal sind (typischerweise  $\Delta\nu/\nu < 10^{-8}$ ) können die Linien in Festkörpern und Flüssigkeiten sehr breit werden ( $\Delta\nu/\nu \sim 10$ ), da die Wechselwirkung mit der Umgebung die Energien der Zustände verschiebt.

**Z: Linienbreite**



### 1.3.6 Infrarot

Bei noch größeren Wellenlängen Energien reichen die Energien nicht mehr aus für die Anregung von elektronischen Übergängen. Man gelangt dann in den Bereich der Vibrationsübergänge. Bekanntlich ist die Frequenz eines klassischen Pendels gegeben durch

**Z: Vibrationsübergänge / Potential**

$$\omega = \sqrt{f/m} ,$$

wobei  $f$  die Kraftkonstante und  $m$  die bewegte Masse darstellt. Je größer die Masse desto kleiner wird also die Frequenz des entsprechenden Oszillators. Da atomare Massen um rund 4 Größenordnungen schwerer sind als eine Elektronenmasse erwarten wir Frequenzen, die um 2 Größenordnungen unterhalb der elektronischen Frequenzen liegen. Diese „naive“ Erwartung entspricht auch in etwa den Erwartungen. Als Richtwert liegt die elektronische Anregung des Elektrons im Wasserstoff bei ca. 100 nm, während die energiereichste vibratorische Anregung ( $^1\text{H}$ -Streckschwingung) bei ca. 3  $\mu\text{m}$  erscheint. Aus den gemessenen Spektren können Kraftkonstanten und Massen bestimmt werden.

*Übung: Schwingungsfrequenz C-H; Annahme: Bindungsenergie 100 kJ/Mol; entspricht Streckung um 1 Å.*

Entsprechend niedrigere Energien erhält man für flachere Potentiale, d.h. geringere Rückstellkräfte.

Wenn das Potential gegen Null geht erhält man den Fall der freien Translationsbewegung. Hier ist die Anregungsenergie Null, d.h. die Energieverteilung ist kontinuierlich.

**F: IR-Übersicht**

### 1.3.7 Mikrowellen

Auf einer noch niedrigeren Skala, im Mikrowellenbereich, sind die Photonenenergien zu klein um Bewegungen anzuregen, die in einem Potential stattfinden. Rotationsbewegungen freier Moleküle unterliegen keinem Potential. In Analogie zur kinetischen Energie der Translation schreibt man

$$\mathcal{H} = \hbar^2/2I L^2 ,$$

wobei  $I$  das Trägheitsmoment des Moleküls darstellt und  $\hbar L$  den Drehimpuls.

Der Drehimpuls eines Moleküls ist aber quantisiert, d.h. ein Molekül kann Drehimpuls nur in Form einzelner Quanten aufnehmen. Die Energie der Rotationszustände ist

$$E_n = J(J+1) \hbar^2/2I \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

und die entsprechenden Übergangsenergien sind somit

$$\Delta E_n = 2(J+1) \hbar^2/2I$$

Literatur: M. Weissbluth, 'Atoms and molecules', Academic Press, San Diego (1978).

### Übung: Trägheitsmoment eines I<sub>2</sub>-Moleküls; Rotationspektrum

Wir berechnen zunächst des Trägheitsmoment. Die einzige relevante Komponente des Trägheitstensors ist diejenige bezüglich der Achse senkrecht zur Symmetrieachse des Moleküls. Das Trägheitsmoment beträgt

$$I = 2 m r^2 = 2 \cdot 127 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27} (1.35 \cdot 10^{-10})^2 = 8 \cdot 10^{-45} \text{ m}^2 \text{ kg} .$$

Die Einheit der Rotationsenergie beträgt damit

$$\hbar^2/2I = 10^{-68}/16 \cdot 10^{-45} = 6 \cdot 10^{-25} \text{ J}$$

In Frequenzeinheiten entspricht dies

$$\Delta \nu = \Delta E/h = 6 \cdot 10^{-25}/6 \cdot 10^{-34} \text{ sec} = 10^9 = 1 \text{ GHz}$$

Die Übergangsfrequenzen liegen somit im Mikrowellenbereich.

Aus den gemessenen Rotationspektren freier Moleküle kann man somit das Trägheitsmoment bestimmen. Da die Massen bekannt sind kann darüber somit auch die molekulare Struktur bestimmt werden. Allerdings ergibt das Mikrowellenspektrum eines Moleküls zunächst nur drei Hauptelemente des Trägheitstensors, unabhängig von der Komplexität des Moleküls, während die Struktur durch  $3N-6$  Parameter definiert ist. Die fehlenden Parameter können prinzipiell über isotope Substitution bestimmt werden. Allerdings ist dieses Verfahren zur Strukturbestimmung nur für sehr einfache Moleküle wirklich praktikabel.

### **1.3.8 ESR**

Energien im Mikrowellenbereich können aber nicht nur Rotationsübergänge anregen, sondern auch Übergänge zwischen unterschiedlichen Zuständen eines molekularen oder atomaren magnetischen Momentes. Die Wechselwirkung zwischen magnetischen Momenten und einem äußeren Magnetfeld ist so schwach, daß Felder im Bereich von einem oder mehreren Tesla benötigt werden um energetische Aufspaltungen im Mikrowellenbereich zu erhalten. Für ein freies Elektron ( $g=1$ ) liegt die Zeemanenergie in einem Feld von 1 T bei

$$\Delta \nu/B = \mu_B = 14 \text{ GHz/T}.$$

Der Proportionalitätsfaktor ist das Bohr'sche Magneton

$$\mu_B = e\hbar/2m = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C } 10^{-34} \text{ J sec}/(2 \cdot 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}) = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^2$$

Wir können diese Einheit umrechnen mit  $\text{A sec V} = \text{J}$  und  $\text{T} = \text{V s/m}^2$ , d.h.

$$9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^2 = 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ J/T} = 14 \text{ GHz/T}$$

Die Elektronen-spinresonanz erlaubt die

### **Z: Elektronenspin in einem Molekül / Kristall**

Bestimmung der elektronischen Struktur, insbesondere die Verteilung eines ungepaarten Valenzelektrons. Natürlich kann man Elektronenspinresonanz nur dann untersuchen, wenn ein Spin vorhanden ist. Dies schließt insbesondere sämtliche Moleküle mit geschlossenen Schalen aus. Interessante Untersuchungsobjekte findet man insbesondere bei Biomolekülen, wo Radikale z.B. in der Photosynthese vorkommen. Auch in Festkörpern findet man häufig Defekte, welche lokalisierte paramagnetische Zentren erzeugen. Da die Resonanzfrequenz proportional zur Feldstärke ist wird der Frequenzbereich durch die vorhandenen Magnetfelder bestimmt. Weitere technische Randbedingungen sind durch die Geräte zur Erzeugung und zum Nachweis der Mikrowellen gegeben. Kommerzielle Geräte benutzen heute Frequenzen im Bereich von etwa 9 bis rund 90 GHz. In Forschungslaboratorien stehen heute Geräte, welche bei Frequenzen bis zu 300 GHz arbeiten.

### **1.3.9 NMR**

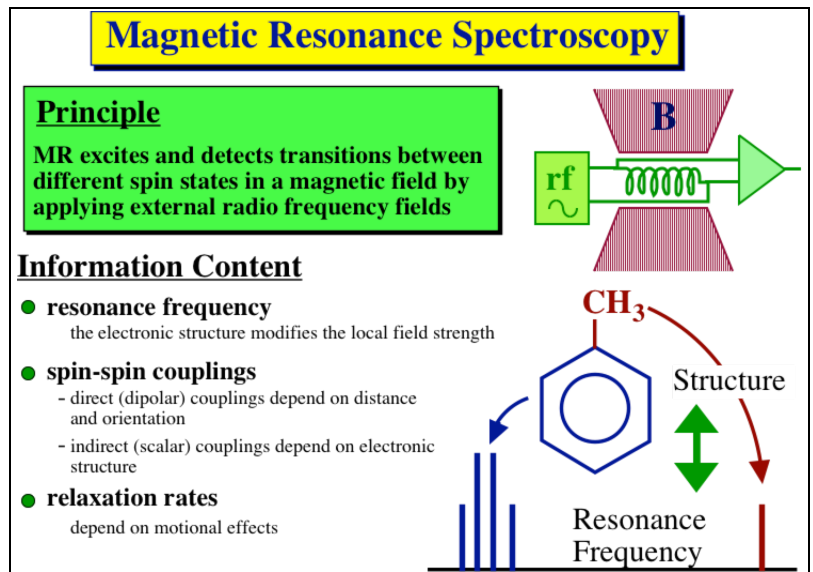
Eine weitere Stufe zu niedrigeren Frequenzen führt zu Radiofrequenzen, also zu Frequenzen unterhalb von 1 GHz. Hier findet man Kernspinübergänge. Aufgrund der höheren Masse des Kerns sind deren magnetische Momente schwächer als diejenigen des Elektrons und die entsprechenden Übergangsfrequenzen niedriger. Das entsprechende Arbeitsgebiet wird als Kernspinresonanz oder NMR bezeichnet. Man benutzt für diese Experimente möglichst hohe Magnetfelder, wobei man heute Felder bis etwa 20 T erreicht. Die entsprechenden Resonanzfrequenzen hängen vom Kern ab, wobei unterschiedliche Isotopen unterschiedliche Kopplungskonstanten und damit Resonanzfrequenzen aufweisen. Ein Kernresonanzspektrometer muß deshalb immer einen sehr breiten Bereich von Frequenzen abdecken.

Die Kernspinresonanz erlaubt primär die Messung der Frequenz von Kernspinübergängen. Die Übergangsfrequenzen liegen hierbei im Bereich von einigen MHz bis einigen 100 MHz, während die Linienbreiten sehr vom System abhängen. In Flüssigkeiten sind Breiten von weniger als einem Hertz möglich, d.h. man erreicht eine Auflösung von einigen ppb ( $10^{-9}$ ). Aufgrund dieser hohen Auflösung kann dabei sehr genau die Stärke des lokalen Magnetfel-

### **F: NMR-Frequenzen**

des bestimmt werden. Diese hängt wiederum von der lokalen Struktur ab, sowie von Kopplungen an benachbarte Spins.

In der Kernspinresonanz, wie auch in der ESR bringt man die zu untersuchende Probe in ein starkes Magnetfeld, welches die Entartung der Spinzustände aufhebt. Ein magnetisches Wechselfeld im Radiofrequenzbereich induziert Übergänge zwischen diesen Spinzuständen. Die physikalischen Grundlagen dieser Art von Experimenten sind seit den Pionierarbeiten von Bloch, Hahn, usw. vor bald 50 Jahren im wesentlichen bekannt. Trotzdem wird auf diesem Gebiet noch intensiv gearbeitet. Die meisten Experimente, zielen aber nicht mehr auf ein besseres Verständnis der Grundlagen ab, sondern versuchen die magnetische Resonanz auf die unterschiedlichsten Systeme anzuwenden.



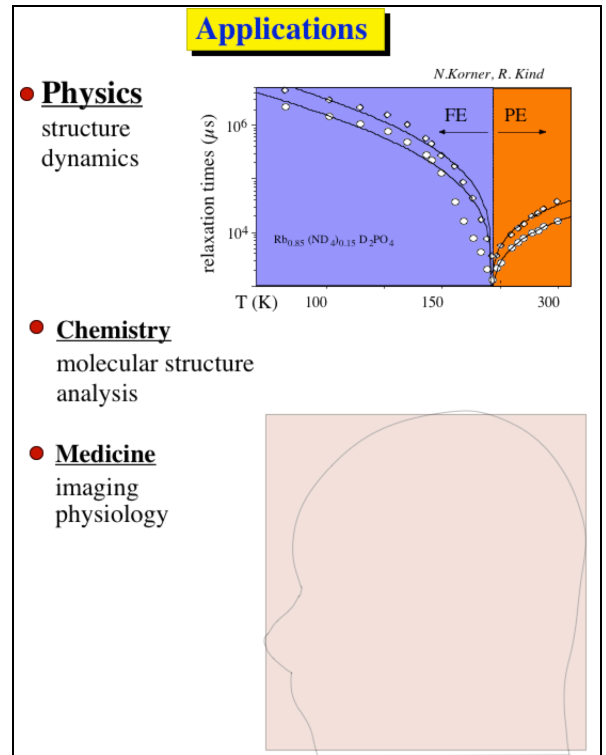
Die meisten Experimente, zielen aber nicht mehr auf ein besseres Verständnis der Grundlagen ab, sondern versuchen die magnetische Resonanz auf die unterschiedlichsten Systeme anzuwenden.

Der Grund dafür, daß die magnetische Resonanz für die Untersuchung so vieler unterschiedlicher Systeme so nützlich geworden ist, liegt im wesentlichen darin, daß die Spinsysteme zwar ziemlich gut, aber nicht perfekt von den übrigen Freiheitsgraden des Systems entkoppelt sind. Die Entkoppelung erlaubt eine theoretische Beschreibung der Dynamik des Spinsystems, welche wesentlich vollständiger und exakter ist, als wir uns aus anderen Bereichen der Physik gewöhnt sind. Dabei brauchen wir nur die Spin-Freiheitsgrade explizit zu berücksichtigen; die räumlichen Freiheitsgrade erscheinen nur in der Form von Parametern im Hamiltonoperator des Systems. Daß sie aber erscheinen, zeigt, das die Entkoppelung nicht vollständig ist. Und genau diese Restkopplung erlaubt uns, über die spektroskopischen Messungen Rückschlüsse auf die Struktur und Dynamik der untersuchten Substanzen zu ziehen.

So kann die genaue Resonanzfrequenz Aufschlüsse über die elektronische Struktur oder lokale Feldstärken geben. Kopplungen zwischen verschiedenen Spins enthalten Informationen über räumliche Strukturen oder die Natur von chemischen Bindungen. Relaxationsraten, resp. Linienbreiten geben Auskunft über Bewegungsprozesse.

Einige wenige Beispiele für die Anwendung der magnetischen Resonanz sind hier zusammengefaßt: In der Festkörperphysik benutzt man sie in erster Linie um Strukturen und Bewegungsprozesse zu untersuchen. Hier ein Beispiel aus der Arbeitsgruppe von Prof. Kind an unserem Institut: sie haben die Relaxationszeiten in diesem Mischkristall gemessen. Die deutliche Beschleunigung der Relaxation in diesem Bereich zeigt, daß das System an dieser Stelle einen Phasenübergang von einer paraelektrischen Hochtemperaturphase zu einer ferroelektrischen Tieftemperaturphase durchmacht.

Die meisten Anwendungen findet man immer noch in der Chemie, wo die magnetische Resonanz wohl das wichtigste Hilfsmittel für die Aufklärung von molekularen Strukturen darstellt. In einer breiten Öffentlichkeit wurde die Kernresonanz in den letzten Jahre sehr viel bekannter weil auch die Medizin die Möglichkeit entdeckte, die Kernresonanz zu verwenden. Sie wird dort inzwischen als nichtinvasive Untersuchungsmethode für verschiedene Anwendungen eingesetzt, vor allem für weiche Gewebe. In der Physiologie verwendet man sie in erster Linie als Spektroskopie zur Aufklärung von Stoffwechselfvorgängen. Am bekanntesten ist sie aber zweifellos als bildgebende Methode in der Form der Kernspin Tomographie geworden.



### 1.3.10 Teilchen

Neben elektromagnetischen Wellen können auch **Teilchenstrahlen** für spektroskopische Untersuchungen eingesetzt werden. Zu den wichtigsten gehören Neutronen, welche z.B. für die Bestimmung der Phononen-Dispersionsrelationen in Festkörpern benutzt werden, Elektronen für die Untersuchung der elektronischen Zustandsdichte an Oberflächen, und Atome, ebenfalls für Untersuchungen an Oberflächen.

## 1.4 Der Laser als Lichtquelle

*Literatur:* Demtröder, Kap. 5  
Siegman  
Kneubühl / Siegrist

### 1.4.1 Das Prinzip

Wenn wir im folgenden die Wechselwirkung von Licht und Materie diskutieren werden wir wenig darüber sagen, wie das Licht erzeugt wurde. Viele der Aussagen werden unabhängig von der Art des Lichtes sein, aber andere Experimente lassen sich nur mit Hilfe von Lasern durchführen.

Es existieren verschiedene Typen von Lasern.

**LASER = Light Ampl. ...**

Allen gemeinsam ist das Prinzip, daß in einem sogenannten aktiven Medium eine Besetzungsinversion

**Z: Absorption / stimulierte Emission**

besteht, so daß Licht beim Durchgang durch das Medium verstärkt statt abgeschwächt wird. Dabei erzeugt ein durchlaufendes Photon eine identische Kopie seiner selbst, so daß nach einer genügend großen Zahl von Durchläufen ein intensives Lichtfeld entsteht.

Während auch eine Lampe ein intensives Lichtfeld erzeugen kann, sind im Falle eines Wärmestrahlers die einzelnen

**Z: Lampe / Laser**

Photonen unabhängig voneinander, während im Laser im Idealfall alle identisch sind. Die stellt den wichtigsten Unterschied zwischen einer klassischen Lichtquelle und einem Laser dar. Man kann dies auf verschiedene Weise ausnutzen.

Neben dem aktiven Medium umfasst ein Laser weitere Elemente, so insbesondere Spiegel, welche einen Resonator definieren. Sie dienen

**Bauprinzip**

dazu, den entstehenden Laserstrahl mehrfach durch das atomare Medium zu lenken, so daß die Verstärkung groß genug ist. Weiterhin wird eine Pumpquelle benötigt, welche die Populationsinversion erzeugt. Dazu kann man in besonders geeigneten Fällen elektrischen Strom verwenden. In vielen Fällen wird aber auch Licht verwendet, entweder von einer klassischen Blitzlampe oder von einem anderen Laser.

### 1.4.2 Lasertypen

#### 1.4.2.1 Schmalbandige Laser

Jedes aktive Medium eines Lasers besitzt eine gewisse Bandbreite, über

**Z: Bandbreite von Medium / Laser**

welches es verstärken kann. Man bezeichnet dies als die Verstärkungsbandbreite. In vielen Fällen will man aber möglichst schmalbandiges Licht erzeugen. Dann ist es nötig, die

Bandbreite einzuschränken. Ein erster Schritt dazu ist automatisch gegeben durch die Struktur des Laserresonators

Aufgrund der Randbedingungen (z.B. Knoten an den Spiegeln) besitzt jeder Resonator bestimmte Moden. Der wichtigste Resonatortyp besitzt die gleichen Moden wie der Fabry-Perot Resonator (bekannt aus PIII). Normalerweise gibt es viele Moden innerhalb der Verstärkungsbandbreite. Wenn man den Laser so optimieren will, daß er nur auf einer dieser Moden arbeitet und damit möglichst schmalbandiges Licht erzeugt, muß man weitere frequenzselektive Elemente in der Resonator bringen. Damit kann man erreichen, daß alle Photonen, welche vom aktiven Medium emittiert werden, in die gleiche Mode des Resonators emittiert werden. Im Idealfall haben sie somit alle die gleiche Frequenz. **Z: Moden**

Der Resonator sieht in einem solchen System deshalb häufig sehr viel komplexer aus als auf dem einfachen Schema. **F: Resonator**

Heute erreichbar sind in kommerziellen Systemen Werte im Bereich von ca. 1 MHz. In unserem Labor läuft ein System, dessen Linienbreite im Bereich von einigen kHz liegt, und Spezialsysteme erreichen Werte unterhalb von 1 Hz. Diese Werte müssen verglichen werden mit der Frequenz des Lichtfeldes von etwas weniger als  $10^{15}$  Hz.

#### 1.4.2.2 Pulslaser

Eine andere Variante sind Laser, welche sehr kurze Pulse erzeugen. Hier bemüht man sich also, dafür zu sorgen, daß alle Photonen zur gleichen Zeit erzeugt werden.

Die Unschärferelation verlangt in einem solchen Fall, daß die Frequenzverteilung relativ breit ist. Ein Puls von 10 fsec Dauer bedingt eine Frequenz-Unschärfe von  $10^{-14}$  sec und damit bei einer Wellenlänge von 800 nm etwa ein 200 nm breites Verstärkungsprofil. **Z: Zeit-/Frequenzraum**

Erreichbar sind heute Werte im Bereich von 5 fsec. In diesem Fall enthält der Puls nur noch etwa 3 Oszillationen. **F: Autokorrelation**

Man kann auch die Länge eines solchen Pulses betrachten: sie beträgt noch etwa  $1 \mu\text{m}$ . Ein solcher Laserpuls muß offenbar anders diskutiert werden als ein kontinuierlicher Laserstrahl. Insbesondere spielt die Modenstruktur des Lasers hier keine Rolle mehr. Man drückt dies häufig auch dadurch aus, daß die Moden gekoppelt seien. **Z: Puls im Kristall**

Die spektrale Breite sollte hier im idealen Fall nur durch das aktive Medium begrenzt werden, d.h. der Resonator sollte möglichst breitbandig sein.

### 1.4.3 Lasermedien

Eine weitere Unterscheidung von Lasertypen besteht in der Art des aktiven Mediums. Da jedes dieser Medien nur einen gewissen Parameterbereich abdeckt, bezüglich Leistung, Kohärenz, Wellenlängenbereich etc. existiert kein "ideales" Medium, sondern man muß je nach Anwendung das geeignete Medium auswählen. Wesentliche Kriterien sind dabei die Wellenlänge, bei der man arbeiten will, aber auch die Pulsdauer, Leistung, verfügbare Pumpquelle, etc. Das wesentliche bei allen Lasermedien ist die Notwendigkeit, eine Bevölkerungsinversion zu erzeugen, d.h. der energetisch höherliegende Zustand des Laserübergangs muß stärker bevölkert sein als der energetisch tiefer liegende. Dies ist die Voraussetzung dafür, daß die stimulierte Emission, welche für die Verstärkung verantwortlich ist, über die Absorption dominiert, welche das Licht abschwächt.

Ein wesentliches Kriterium für die Wahl eines Lasermediums ist der Wellenlängenbereich, der damit abgedeckt werden kann. Die wichtigsten Medien sollen im folgenden kurz diskutiert werden.

**F: Wellenlängenbereiche**

### 1.4.4 Molekulare und atomare Medien

Das Erzeugen einer Besetzungsinversion kann z.B. molekulare Zustände verwenden. Man verwendet hier meist ein sog. 4-Niveausystem: Man pumpt den Übergang von einem Grundzustand in einen angeregten Zustand, welcher z.B. ein elektronisch und vibratorisch angeregter Zustand sein kann. Relaxation des Vibrations-Freiheitsgrades bringt das Molekül in einen Zustand, der nur noch elektronisch angeregt ist. Der eigentliche Laserübergang findet von diesem Zustand in einen vibratorisch angeregten Zustand des elektronischen Grundzustandes statt. Dieser muß anschließend schnell entvölkert werden, damit die Populationsinversion erhalten bleibt. Wichtige Beispiele für molekulare Systeme sind **Farbstofflaser**, bei denen das Molekül ein Farbstoffmolekül ist, welches in einer Flüssigkeit gelöst ist.

**Z: molekulare Zustände / 4-Niveaulaser**

Dabei handelt es sich typischerweise um aromatische Moleküle. Ein Molekül kann typischerweise über einen Wellenlängenbereich von etwa 50 nm verwendet werden.

**F: Farbstoff**

Zu den molekularen Lasermedien gehört auch der **CO<sub>2</sub>-Laser**, bei dem Molekülschwingungen des CO<sub>2</sub>-Moleküls verwendet werden. Damit können sehr hohe Leistungen erreicht werden, welche im industriellen Bereich z.B. für Schweißanlagen verwendet werden. Die Wellenlängen liegen im Infraroten.

**Z: CO<sub>2</sub>**

Ein anderes Beispiel ist der **Excimerlaser**. Der Name ist eine Abkürzung für "excited dimer", also ein angeregte Dimer. Dabei handelt es sich um Moleküle, die nur im angeregten Zustand existieren, während der elektroni-

**Z: Excimer**



sche Grundzustand schnell dissoziiert und so die Entvölerkung des niedrig liegenden Laserniveaus sicherstellt.

Analog können auch Atome durch Elektronenstrahl angeregt werden, wie z.B. in einem **HeNe**-Laser.

Dieser Lasertyp dürfte vielen schon aus der Mittelschule bekannt sein; man regt hierbei He Atome durch Elektronenstoß an. Diese übertragen die Energie anschliessend auf Ne Atome, und diese stellen das eigentliche aktive Medium dar. Ähnlich funktioniert der **Ar-Ionenlaser**. Diese emittieren im sichtbaren und ultravioletten Teil des Spektrums. **F: HeNe**

#### 1.4.5 Festkörperlaser

Man kann eine Besetzungsinversion z.B. in einem Festkörper wie Rubin erzeugen - in diesem Fall spricht man von einem Festkörperlaser.

Der Rubinlaser war der erste Laser überhaupt. Er wurde von einer Blitzlampe gepumpt, d.h. hier stellte Licht die Pumpenergie zur Verfügung. Einer der wichtigsten Lasertypen heute ist der Nd:YAG Laser: Der Laserübergang geschieht hier zwischen zwei elektronischen Zuständen des atomaren Ions Pr, welches in einer Matrix aus Yttrium-Aluminium-Garnet eingebettet ist. Da die atomaren Übergänge in diesem Fall relativ schmal sind ist dieser Lasertyp praktisch ein Festfrequenzlaser. Nd:YAG wird praktisch nur bei  $1.064 \mu\text{m}$  verwendet, oder bei der zweiten Harmonischen (532 nm, grün). **F: Rubinlaser**

Ein anderer wichtiger Laser ist der Ti:Saphir Laser, bei dem Ti-Ionen in einer Saphir (=Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) eingebettet sind. Da das Medium selber in diesem Fall einen breiten Wellenlängenbereich abdeckt, kann diese Art von Lasern von etwa 700 bis 950 nm betrieben werden. Wie im Falle des Farbstofflasers wird die Frequenz durch den Resonator festgelegt. Das gleiche Material ist aber auch eine ideale Basis für einen Kurzpulslaser, da seine große Bandbreite kurze Pulse ermöglicht. **F: Festkörperlasermedien**

Eine weitere Klasse von Festkörperlasern sind die Farbzentrenlaser. Die aktiven Zentren sind hier Defekte in Alkali-Halogenid Kristallen, wie z.B. Kochsalz. Diese emittieren im Infraroten. Sie sind für diesen Wellenlängenbereich relativ attraktiv, da sie auch durchstimmbare sind. Allerdings müssen sie bei tiefen Temperaturen betrieben werden.

Festkörperlaser bieten gegenüber Farbstofflasern den Vorteil, daß sie weniger Wartungsintensiv sind und höhere Ausgangsleistungen erlauben.

### 1.4.6 Halbleiterlaser

Alle bisher diskutierten Lasermedien sind lokalisierte Zentren wie Atome, Ionen oder Moleküle. Der heute wichtigste Laser ist aber der Halbleiterlaser. Sie werden nicht nur in Laserpointern und CD-Spielern eingesetzt, sondern auch in der Forschung immer stärker genutzt. Hier sind die Elektronen delokalisiert, also in ihren Bändern frei beweglich. Licht wird in diesem Fall durch Rekombination, also durch gegenseitige Annihilation von Elektronen im Leitungsband und Löchern im Valenzband erzeugt.

Hier wird die Besetzungsinversion zwischen dem Valenz- und Leitungsband eines Halbleiters erzeugt, indem man in einen p/n Übergang Ladungsträger injiziert.

**Z: aktive Zone**

Man braucht dazu lediglich durch die Diode in Vorwärtsrichtung einen Strom zu leiten. Im Bereich des p/n Übergangs besteht dann eine Inversion. Die Wellenlänge der Emission kann über die Bandlücke des Materials eingestellt werden. Halbleiterlaser können mit den meisten direkten Halbleitern hergestellt werden. Indirekte Halbleiter, wie z.B. Silizium, sind hingegen zu wenig effizient. Die wichtigsten Basismaterialien im sichtbaren sind GaAs, AlGaAs, InGaAs und weitere III/V Verbindungen. Für kürzere Wellenlängen bis ca. 400 nm werden gegenwärtig II/VI Materialien entwickelt. Für längere Wellenlängen sind vor allem Bleiverbindungen im Einsatz, die allerdings teilweise auch gekühlt werden müssen. Es gibt aber auch neuere Systeme, die auf GaAs basieren, das so strukturiert ist, daß die Bandlücke "unterteilt" wird und damit Photonen mit niedrigerer Energie erzeugt werden.

**F: aktive Zone**

Halbleiterlaser haben verschiedene attraktive Vorteile:

- sie können in großen Mengen hergestellt werden (Chipproduktion)
- sie sind sehr kompakt (typische Dimensionen  $5\mu\text{m} \times 20\mu\text{m} \times 100\mu\text{m}$ )
- sie sind sehr effizient: Bis zu 50% der elektrischen Energie kann in Licht umgeandelt werden. Halbleiterlaser sind somit die effizientesten Lichtquellen überhaupt.

Man kann heute Halbleiter-Lasersysteme mit mehreren kW Leistung herstellen.

### 1.4.7 Optische Frequenzmischung

Obwohl inzwischen eine große Auswahl von Lasermedien existieren ist es manchmal schwierig, eines zu finden, das genau die gewünschten Anforderungen erfüllt. Weitere Möglichkeiten bietet dann die nichtlineare Optik: bei hohen Leistungen zeigen viele Materialien nichtlineares Verhalten: wenn sie mit Licht einer gegebenen Wellenlänge gepumpt werden, strahlen sie nicht nur Licht dieser Wellenlänge, sondern auch anderer Wellenlängen ab.

Die wichtigsten Möglichkeiten der nichtlinearen Optik sind:

- Frequenzverdopplung / Erzeugung der zweiten Harmonischen: hier werden z.B. 2 Photonen addiert um eines der doppelten Frequenz zu erzeugen.

- Höhere Harmonische, insbesondere 3. H.

- Summenfrequenzerzeugung: Hier werden zwei Photonen unterschiedlicher Frequenz addiert, resp. subtrahiert (Differenzfrequenzerzeugung).

- parameterische Oszillatoren: Die entspricht dem inversen Prozess der Summenfrequenzerzeugung: ein Photon wird in zwei aufgespalten.

Allgemein werden diese Prozesse auch als 2-, resp. 3-Wellen-Mischprozesse bezeichnet. Dabei werden die einfallenden wie auch die auslaufenden Wellen gezählt. Frequenzverdopplung z.B. ist ein 3-Wellen-Mischprozess, da zwei einlaufende Photonen zu einem auslaufenden summiert werden.

Wichtig ist in all diesen Fällen, daß alle Prozesse Energie und Impuls der Photonen erhalten müssen. Dies führt zum Problem der Phasenanpassung.

## 1.5 Die Lorentz-Lorenz Theorie der Dispersion

### 1.5.1 Makroskopische und Mikroskopische Modelle

Wie bereits angedeutet findet man in der Absorption und Dispersion unterschiedlichster Materialien häufig resonante Effekte, d.h. grosse Änderungen des Absorptionskoeffizienten, resp. des Brechungsindex mit der Wellenlänge. Eine Interpretation benötigt eine detaillierte Theorie darüber, wie die gemessenen Resonanzlinien zustande kommen. Eine vollständige Theorie liefert die Quantenmechanik. Diese Theorie wird im Kapitel 2 im Detail behandelt werden. Wir beginnen zunächst aber mit einer klassischen Beschreibung - einerseits aus historischen Gründen, andererseits in der Hoffnung, dadurch an Anschaulichkeit zu gewinnen. Der physikalische Gehalt der beiden Modelle ist im wesentlichen der gleiche. Natürlich ergeben sich im Detail durch die Berücksichtigung der Quantenmechanik unterschiedliche Resultate, die wir auch diskutieren werden.

**Z: Resonanzlinien**

Die erste mikroskopische Theorie, welche die Frequenzabhängigkeit der Wechselwirkung zwischen Licht und Materie beschreiben konnte, ist die Lorentz-Lorenz Theorie der Dispersion. Sie wurde kurz nach der Entwicklung der Maxwell'schen Gleichung hergeleitet und im Jahr nach Maxwell's Tod publiziert, und zwar von zwei fast gleichnamigen Physikern unabhängig voneinander entwickelt. (H.A. Lorentz, "Über die Beziehung zwischen der Fortpflanzungsgeschwindigkeit des Lichtes und der Körperdichte", Ann. Phys. Chem. 9, 641-665 (1880); L. Lorenz, "Über die Refraktionsconstante", Wiedem. Ann. 11, 70-103 (1881)). Die Theorie behandelt das Material als eine Ansammlung von schwingungsfähigen elektrischen Dipolen. Dieses Bild wird auch heute noch benutzt, obwohl sich die mathematische Beschreibung geändert hat.

H.A. Lorentz hat weitere wichtige Beiträge zur Physik geliefert: er hat das Elektron postuliert und dafür den Nobelpreis erhalten. Außerdem hat er die nach ihm benannte Lorentz-Kontraktion beschrieben. Seine Lorentz-Transformation bildete die Grundlage für die spezielle Relativitätstheorie.

**Lorentz, Hendrik Antoon**, 1853–1928, Dutch physicist. For his explanation of the Zeeman effect (a change in spectral lines in a magnetic field), which was based on his postulating the existence of electrons, he shared with Pieter Zeeman the 1902 Nobel Prize in physics. He extended the hypothesis of George Fitzgerald, an Irish physicist, that a body's length contracts as its speed increases (the Fitzgerald-Lorentz contraction) and formulated the Lorentz transformation, by which space and time coordinates of one moving system can be correlated with the known space and time coordinates of any other system. This work influenced, and was confirmed by, Albert Einstein's special theory of relativity.

**Makroskopisch** stellen wir fest, daß ein elektrisches Feld, das auf ein polarisierbares Medium wirkt, darin eine Polarisation erzeugt

**Z: Polarisation**

$$\vec{P} = (\epsilon - 1) \epsilon_0 \vec{E} = \chi \epsilon_0 \vec{E} .$$

Die Proportionalitätskonstante  $\chi$  wird als Suszeptibilität bezeichnet. Sie enthält die materialspezifischen Eigenschaften.

Die Polarisation wird **mikroskopisch** zurückgeführt auf atomare, resp. molekulare Dipolmomente

**Z: Dipole**

$$\vec{\mu}_E = \alpha \vec{E}.$$

Die Proportionalitätskonstante  $\alpha$  wird als die Polarisierbarkeit des Mediums bezeichnet. Die makroskopische Polarisation ist somit mit den einzelnen Dipolen über die Dichte  $N$  verknüpft:

$$\vec{P} = N \vec{\mu}_e.$$

Die Polarisierbarkeit  $\alpha$ , resp. die Suszeptibilität  $\chi$  enthalten die Wellenlängenabhängigkeit. Sie sind komplexe Größen, welche sowohl die Absorption wie auch die Dispersion des Mediums beschreiben. Die Absorptionslinien erscheinen als Resonanzen der Polarisierbarkeit.

Die Theorie, die wir im folgenden diskutieren, ist ein Versuch, diese Beobachtung zu erklären. Sie leistet grob zusammengefasst folgendes:

- sie berechnet die Polarisierbarkeit  $\alpha$  aus der mikroskopischen Beschreibung des Materials.
- aus der Polarisierbarkeit  $\alpha$  erhält man Absorption und Brechung des Mediums.

### 1.5.2 Bewegungsgleichung

Um sich diesen schwingenden Dipol vorzustellen kann man z.B. von einem atomaren System ausgehen. Aufgrund der höheren Masse ( $m_p/m_e = 1836$ ) bleibt der Kern im wesentlichen am Ort, während das Elektron sich im elektrischen Feld bewegt. Wir benutzen ein eindimensionales Koordinatensystem, dessen Ursprung im Kern liegt und schreiben die Bewegungsgleichung als

**Z: atomarer Dipol**

$$F = m \ddot{x} = -f x - e E_0 e^{i\omega t} - 2 \gamma m \dot{x},$$

wobei  $f$  eine Kraftkonstante darstellt,  $m$  die Masse,  $-e$  die Ladung des Elektrons,  $\gamma$  eine phänomenologische Dämpfungskonstante und  $E_0$  die Amplitude des monochromatischen Feldes mit Frequenz  $\omega$ . Der erste Term stellt die rücktreibende Wirkung der Coulomb-Wechselwirkung zwischen Elektron und Kern dar. Wir nehmen an, daß das Potential quadratisch verläuft, was in der Umgebung des Gleichgewichts immer möglich ist. Der

Kopplungsterm mit dem äußeren Feld entspricht der Energie des Elektrons in einem angelegten Feld der Frequenz  $\omega$ . Der geschwindigkeitsproportionale Dämpfungsterm kann an dieser Stelle nicht weiter begründet werden.

Wie aus der Theorie des gedämpften harmonischen Oszillators bekannt hat die stationäre Lösung die Form

$$x(t) = x_0 e^{i\omega t} .$$

$x_0$  stellt somit die Amplitude der stationären Lösung dar.

Wir setzen diesen Ansatz in die Bewegungsgleichung ein und erhalten

$$- m \omega^2 x_0 = - f x_0 - 2 i \gamma m \omega x_0 - e E_0 .$$

Mit der Resonanzfrequenz

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{f}{m}}$$

wird die Amplitude somit

$$x_0 = \frac{eE_0}{m} \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2 - 2i\gamma\omega} .$$

Von praktischem Interesse ist vor allem der Fall  $\gamma \ll \omega_0$ .

Dann wird der Nenner sehr klein für  $\omega \rightarrow \pm\omega_0$ . Es treten somit 2 Resonanzlinien auf bei  $\omega = \pm\omega_0$ .

**Z: 2 Resonanzlinien**

### 1.5.3 Resonanzlinien

Wir beschränken die Diskussion auf den fast-resonanten Fall, wo die Frequenz  $\omega$  des Feldes nahe bei der Resonanzfrequenz  $\omega_0$  des Systems liegt. Außerdem schreiben wir die Frequenz des Feldes als eine Summe aus Resonanzfrequenz und Verstimmung  $\Delta$ ,

$$\omega = \omega_0 + \Delta ,$$

so daß

$$x_0 = \frac{eE_0}{m} \frac{1}{(\omega_0 + \Delta)^2 - \omega_0^2 - 2i\gamma(\omega_0 + \Delta)} .$$

In der Näherung  $\omega_0 \gg \Delta, \gamma$ , d.h. in der Nähe der Resonanz erhalten wir einen vereinfachten Ausdruck, welcher nur den Beitrag der näher liegenden Resonanzlinie enthält:

$$x_0 = e E_0 / ((2 m \omega_0)(\Delta - i \gamma)) = e E_0 / (2 m \omega_0) (\Delta + i \gamma) / (\Delta^2 + \gamma^2) .$$

Die Amplitude ist somit komplex; der Realteil oszilliert in Phase mit dem Feld, während der Imaginärteil 90 Grad außer Phase ist.

Diese oszillierenden Dipole besitzen somit ein Dipolmoment

**Z: Verschobene Schwingung des Dipols**

$$\mu_e = \alpha E = q x_0 = - e x_0 .$$

In einem homogenen Medium erzeugen diese induzierten Dipole eine makroskopische Polarisation. In der Maxwell Theorie wird diese geschrieben als

**Z: Polarisation**

$$P_\omega = (\epsilon - 1) \epsilon_0 E = \chi \epsilon_0 E .$$

Der Index  $\omega$  gibt an, daß diese Polarisation mit der Frequenz  $\omega$  der einfallenden Welle oszilliert. Gleichzeitig muß sie mit den mikroskopischen Dipolen verbunden sein über

$$P_\omega = N \mu_e = - N e x_0 .$$

$N$  stellt die Dichte der atomaren Dipole dar.

Da die Polarisation proportional zur Feldstärke der einfallenden Welle ist, ist die sinnvollere Größe die optische Suszeptibilität

$$\chi = - N e^2 / (2 m \epsilon_0 \omega_0) (\Delta + i \gamma) / (\Delta^2 + \gamma^2) .$$

Der Realteil dieser Funktion ist offenbar antisymmetrisch bezüglich  $\Delta$ , d.h. er ändert das Vorzeichen bei  $\Delta=0$ . Der Imaginärteil weist bei  $\Delta=0$  das Maximum auf und ist symmetrisch bezüglich  $\Delta$ .

**Z:  $\chi(\Delta)$**

#### 1.5.4 Lichtausbreitung

Diese optische Polarisation, welche mit der Frequenz der einfallenden Welle oszilliert, stellt eine beschleunigte Ladung dar. Sie strahlt somit eine Welle ab, d.h. sie wirkt als Quelle einer optischen Welle. Diese interferiert mit der einfallenden Welle und führt dadurch zu Dispersion (d.h. einer Änderung der Ausbreitungsgeschwindigkeit) und Absorption (d.h. Abschwächung).

**Z: Polarisation, Wellen**

Um diese Effekte zu beschreiben verwenden wir als Ausgangspunkt die Maxwell-Gleichungen für ein homogenes isotropes Medium.

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \frac{\partial}{\partial t} \vec{D} & \vec{\nabla} \times \vec{E} &= - \frac{\partial}{\partial t} \vec{B} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{D} &= \rho_e & \vec{\nabla} \cdot \vec{B} &= 0 \end{aligned}$$

Wir suchen als Lösung ebene Wellen, deren Wellenvektor parallel zur z-Richtung ist. Die Komponenten des elektromagnetischen Feldes sind somit

**Z: Welle, Koordinaten**

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \text{Re}[\{E_x, E_y, 0\} e^{i(\omega t - k_z z)}] & \vec{D} &= \epsilon_0(1 + \chi) \vec{E} \\ \vec{H} &= \text{Re}[\{H_x, H_y, 0\} e^{i(\omega t - k_z z)}] & \vec{B} &= \mu_0 \vec{H} \end{aligned}$$

wobei wir angenommen haben, daß das Material nicht magnetisch ist, d.h.  $\mu=1$ .

Wir lösen zunächst die Gleichung

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = - \frac{\partial}{\partial t} \vec{B}$$

Wenn wir den Nabla Operator schreiben als

$$\vec{\nabla} = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z),$$

so finden wir für den Fall der ebenen Welle den vereinfachten Ausdruck

$$\vec{\nabla}_{eW} = (0, 0, \partial/\partial z).$$

Angewendet auf einen transversalen Vektor wie das E-Feld wird somit

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \partial/\partial z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} E_x e^{-ik_z z} \\ E_y e^{-ik_z z} \\ E_z e^{-ik_z z} \end{pmatrix} = -ik_z \begin{pmatrix} -E_y \\ E_x \\ 0 \end{pmatrix} e^{-ik_z z}.$$

Die Maxwell-Gleichung wird somit

$$\begin{pmatrix} H_x \\ H_y \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{k_z}{\mu_0 \omega} \begin{pmatrix} -E_y \\ E_x \\ 0 \end{pmatrix}.$$



Dies ist die übliche Beziehung zwischen der elektrischen und der magnetischen Komponente einer elektromagnetischen Welle.

Diese Beziehung setzen wir ein in

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \frac{\partial}{\partial t} \vec{D}$$

und erhalten eine algebraische Gleichung für die elektrischen Feldamplituden allein:

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} \frac{k_z^2}{\mu_0 \omega} = \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} \omega \epsilon_0 (1 + \chi) .$$

Diese ist offensichtlich leicht lösbar, da wir den vektoriellen Teil abtrennen können und lediglich noch eine gewöhnliche algebraische Gleichung zu lösen haben.

### 1.5.5 Absorption und Dispersion

Nach Abtrennung des vektoriellen Teils enthält die Wellengleichung als Unbekannte nur noch den Wellenvektor  $k_z$ . Damit die Gleichung erfüllt ist, muß dieser somit

$$k_z = \omega/c (1 + \chi)^{1/2} = k_0 (1 + \chi)^{1/2} \approx k_0 (1 + \chi/2)$$

sein, wobei wir die Beziehungen

$$c = (1/(\epsilon_0 \mu_0))^{1/2}$$

für die Lichtgeschwindigkeit und

$$k_0 = \omega/c$$

für den Vakuum-Wellenvektor verwendet haben. Die Näherungsform gilt für verdünnte Medien, wo  $\chi \ll 1$ .

Wir setzen nun diese Lösung für den Wellenvektor in unseren Ansatz ein und finden

$$\vec{E} = \text{Re} \left[ \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\omega t} \exp(-i k_0 z(1 + \chi/2)) \right] .$$

Da die Suszeptibilität  $\chi$  eine komplexe Größe ist, ist es in vielen Fällen sinnvoll, sie in Realteil und Imaginärteil aufzuteilen. Wir schreiben für den Realteil

$$n = 1 + (1/2) \operatorname{Re}[\chi]$$

und für den Imaginärteil

$$\alpha = -\omega/2c \operatorname{Im}[\chi]$$

Die Welle wird damit

$$\vec{E} = \operatorname{Re} \left[ \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\omega t} e^{-ink_0 z} e^{-\alpha z} \right].$$

Der Brechungsindex  $n$  zeigt somit eine Vergrößerung des Wellenvektors, d.h. eine Verkürzung der Wellenlänge an, während der Absorptionskoeffizient  $\alpha$  eine Verringerung der Intensität beschreibt.

Diese Beziehung zwischen der optischen Suszeptibilität  $\chi$ , die aus den mikroskopischen Eigenschaften des Materials hergeleitet werden kann, und den Koeffizienten  $\alpha$  und  $n$ , welche die Lichtausbreitung beschreiben, ist das Hauptresultat der Lorentz-Lorenz Theorie der Dispersion. Wichtig ist hierbei, daß Absorption und Dispersion zwei Aspekte des gleichen mikroskopischen Phänomens sind, nämlich der Anregung von schwingungsfähigen Dipolen im Medium.

Weiterhin können wir damit eine direkte Beziehung zwischen den experimentell beobachtbaren makroskopischen Größen und den mikroskopischen Größen herstellen: Die Resonanzfrequenz  $\omega_0$  ist gegeben durch das Verhältnis von Kraftkonstante  $f$  zur bewegten Masse  $m$ . Und die Linienbreite ist gegeben durch die Dämpfungskonstante  $\gamma$ . Auch in der quantenmechanischen Variante der Theorie, welche im nächsten Kapitel diskutiert wird, werden diese beiden Parameter ähnliche Bedeutung haben.

**Z:**  $\omega_0, \gamma$