

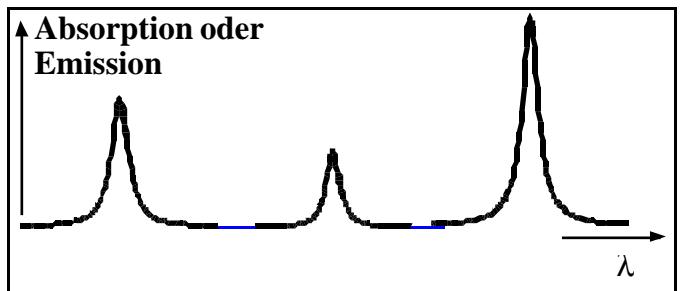
3. Zweiniveaumatome

3.ZWEINIVEAUATOME	1
3.1 Die Lorentz-Lorenz Theorie der Dispersion	2
3.1.1 Makroskopische und mikroskopische Modelle	2
3.1.2 Bewegungsgleichung	3
3.1.3 Resonanzlinien	4
3.1.4 Lichtausbreitung	6
3.1.5 Absorption und Dispersion	7
3.2 Das Jaynes-Cummings Modell	10
3.2.1 System	10
3.2.2 Wechselwirkung	11
3.2.3 Jaynes-Cummings Operator	12
3.2.4 Zustände und Energien	14
3.2.5 Dynamik	15
3.2.6 Kollaps	17
3.2.7 Experimente	19
3.3 Halbklassische Beschreibung: Das Modell	21
3.3.1 Übersicht	21
3.3.2 Basisoperatoren	22
3.3.3 Hamiltonoperator	23
3.4 Der Dichteoperator	24
3.4.1 Beschreibung eines Ensembles	24
3.4.2 Definition des Dichteoperators	25
3.4.3 Rechenregeln für den Dichteoperator	27
3.4.4 Beispiele	27
3.4.5 Darstellung in einer Basis	28
3.4.6 Pseudospin	29
3.4.7 Der Hamiltonoperator des Pseudospins	30
3.5 Bewegungsgleichung	32
3.5.1 Blochgleichung im Laborsystem	32
3.5.2 Freie Präzession	33
3.5.3 Rotierendes Koordinatensystem	34
3.5.4 Transformation von Zuständen	35
3.5.5 Transformation von Operatoren	35
3.5.6 Transformation des Hamiltonoperators	36
3.5.7 Anwendung auf Blochgleichung	37
3.5.8 Näherungsform	38
3.6 Laserpulse	39
3.6.1 Eigenwerte und Eigenvektoren	39
3.6.2 Verstimmungsabhängigkeit der Energien	40
3.6.3 Präzession und Pulse	41
3.7 Stationäre Lösung	43
3.7.1 Relaxationsprozesse	43
3.7.2 Die optische Blochgleichung	44
3.7.3 Stationäre Lösung	44
3.7.4 Intensitätsabhängigkeit	45
3.7.5 Verstimmungsabhängigkeit	46
3.7.6 Transversale Komponenten: Absorption / Dispersion	47
3.7.7 Vergleich klassisches / quantenmechanisches Modell	49

3.1 Die Lorentz-Lorenz Theorie der Dispersion

3.1.1 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 3.2 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 dieses Modells ist im wesentlichen der gleiche wie bei den später diskutierten quantenmechanischen Modellen. Natürlich ergeben sich im Detail durch die Berücksichtigung der Quantenmechanik unterschiedliche Resultate, die wir auch diskutieren werden.

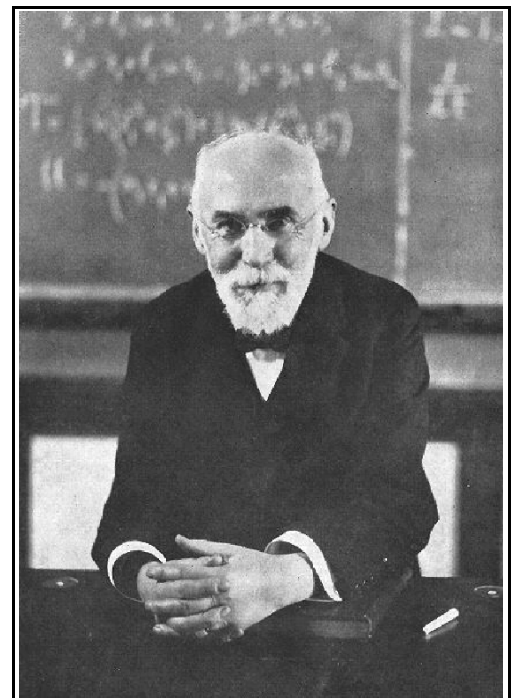


Die erste mikroskopische Theorie, welche die Frequenzabhängigkeit der Wechselwirkung zwischen Licht und Materie beschreiben konnte, ist die Lorentz-Lorenz Theorie der Dispersion. Sie wurde kurz nach der Entwicklung der Maxwell'schen Gleichung hergeleitet und im Jahr nach Maxwell's Tod (Nov. 1879) publiziert, 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 formale 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.

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.

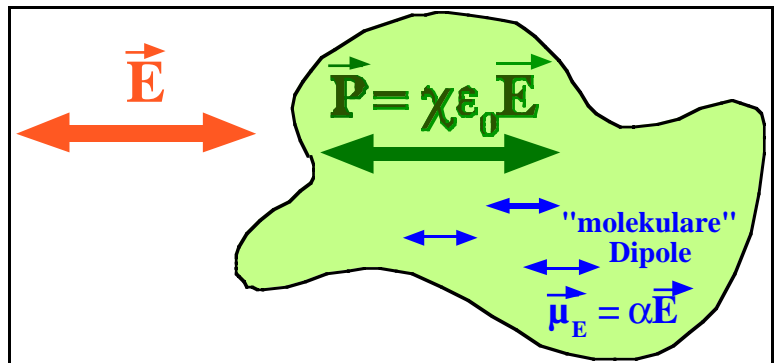
Lorentz, Hendrik Antoon, 1853–1928, Dutch physicist. For his explanation of the Zeeman effect (a change in spectral lines in a magnetic field), which was based on his postulating the existence of electrons, he shared with Pieter Zeeman the 1902 Nobel Prize in physics. He extended the hypothesis of George 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

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

Die Proportionalitätskonstante χ wird als Suszeptibilität bezeichnet. Sie enthält die materialspezifischen Eigenschaften.



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

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

Die Proportionalitätskonstante α wird als die Polarisierbarkeit des Mediums bezeichnet. Die makroskopische Polarisation erhält man durch Mittelung über die mikroskopischen Dipole; sie ist somit mit proportional zum mittleren Dipol μ_e und zur Dichte N :

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

Die Polarisierbarkeit α , resp. die Suszeptibilität χ 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.

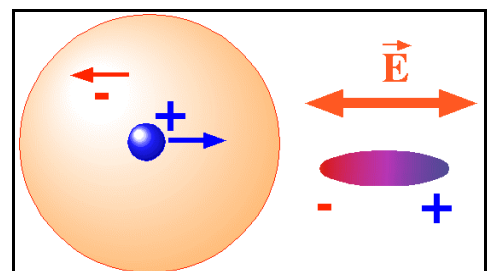
Die Theorie, die wir im folgenden diskutieren, ist ein Versuch, diese Beobachtung zu erklären. Sie leistet grob zusammengefasst folgendes:

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

3.1.2 Bewegungsgleichung

Da wir resonante Effekte eines zeitabhängigen elektrischen Feldes betrachten schreiben wir für die Amplitude des Feldes $E_0 e^{i\omega t}$, wobei E_0 die komplexe Amplitude des monochromatischen Feldes mit der Frequenz ω darstellt.

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 ein-dimensionales Koordinatensystem, dessen Ursprung im Kern liegt und schreiben die Bewegungsgleichung für



den Ort des Elektrons als

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

wobei f eine Kraftkonstante darstellt, m die Masse, $-e$ die Ladung des Elektrons und γ eine phänomenologische Dämpfungskonstante. 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 Kraft auf ein Elektron in einem äußeren Feld. Der geschwindigkeitsproportionale Dämpfungsterm kann an dieser Stelle nicht weiter begründet werden.

Wie aus der Theorie des gedämpften harmonischen Oszillators bekannt ist 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

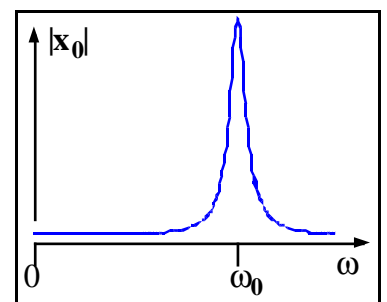
$$\omega_0 = \sqrt{\frac{f}{m}}$$

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 $\omega \rightarrow \omega_0$, d.h. die Amplitude wird bei dieser Frequenz resonant verstärkt.



3.1.3 Resonanzlinien

Wir beschränken die Diskussion auf den fast-resonanten Fall, wo die Frequenz ω des Feldes nahe bei der Resonanzfrequenz ω_0 des Systems liegt. Außerdem schreiben wir die Frequenz des Feldes als eine Summe aus Resonanzfrequenz und Verstimmung Δ ,

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

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 indem wir Terme mit Δ^2 oder $\Delta\gamma$ vernachlässigen:

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

Die Amplitude ist somit komplex. Auf der Resonanz ($\Delta=0$) verschwindet der Realteil (d.h. der Teil, welcher in Phase mit dem Feld ist). Der Dipol ist somit 90 Grad außer Phase.

Diese oszillierenden Elektronen erzeugen somit ein Dipolmoment

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

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

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

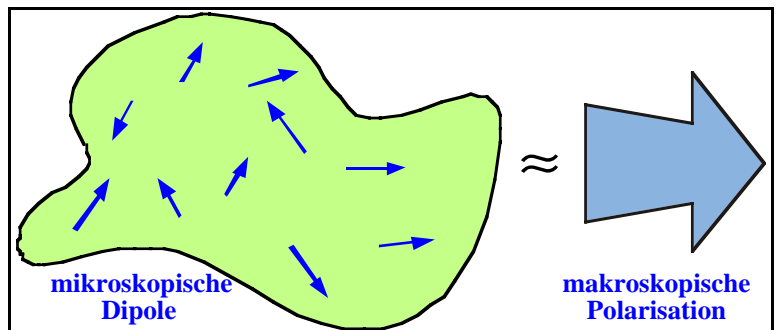
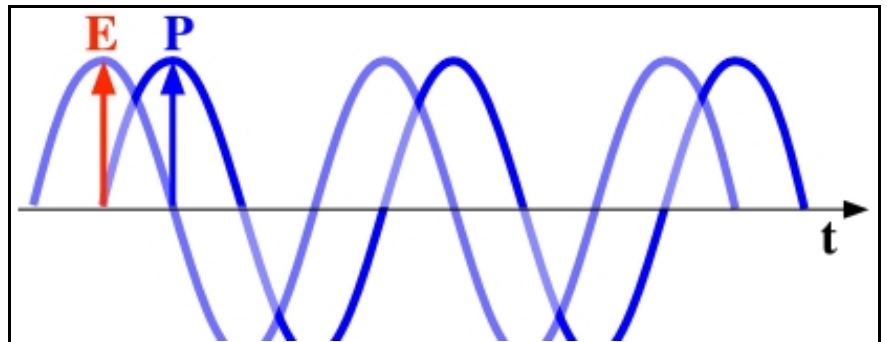
Der Index ω gibt an, daß diese Polarisation mit der Frequenz ω der einfallenden Welle oszilliert. Gleichzeitig muß sie mit den mikroskopischen Dipolen verbunden sein über

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

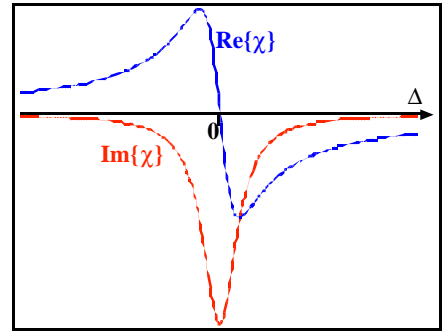
N stellt die Dichte der atomaren Dipole dar.

Da die Polarisation proportional zur Feldstärke der einfallenden Welle ist, ist die sinnvollere Größe die Proportionalitätskonstante, welche als optische Suszeptibilität bezeichnet wird:

$$\chi = - \frac{Ne^2}{2m\epsilon_0\omega_0} \frac{\Delta + i\gamma}{\Delta^2 + \gamma^2} .$$



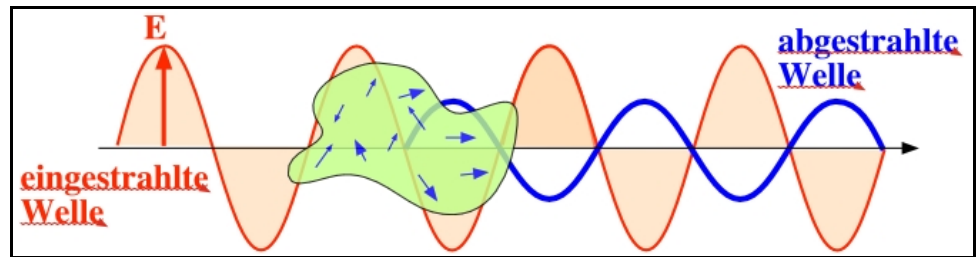
Der Realteil dieser Funktion ist offenbar antisymmetrisch bezüglich Δ , d.h. er ändert das Vorzeichen bei $\Delta=0$. Der Imaginärteil weist bei $\Delta=0$ das Maximum auf und ist symmetrisch bezüglich Δ .



3.1.4 Lichtausbreitung

Diese optische Polarisation, welche mit der Frequenz der

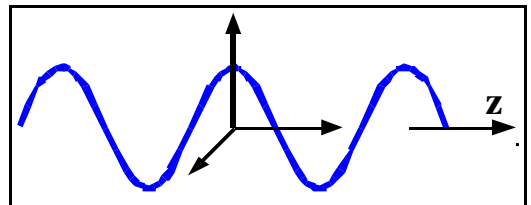
einfallenden Welle oszilliert, stellt eine beschleunigte Ladung dar. Sie strahlt somit ein Feld ab, d.h. sie wirkt als Quelle einer optischen Welle. Diese interferiert mit der einfallenden Welle und führt dadurch zu Dispersion (d.h. einer Änderung der Ausbreitungsgeschwindigkeit) und Absorption (d.h.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



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 transversale ebene Wellen, deren Wellenvektor parallel zur z-Richtung ist. Die Komponenten des elektromagnetischen Feldes sind somit



$$\vec{E} = \text{Re}[\{E_x, E_y, 0\} e^{i(\omega t - k_z z)}]$$

$$\vec{D} = \epsilon_0(1 + \chi) \vec{E}$$

$$\vec{H} = \text{Re}[\{H_x, H_y, 0\} e^{i(\omega t - k_z z)}]$$

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \quad ,$$

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

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

so können wir für den Fall der ebenen Welle die Ableitungen nach x und y = 0 setzen und erhalten so 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.

3.1.5 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

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$$

für die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum 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 χ eine komplexe Größe ist, ist es in vielen Fällen sinnvoll, sie in Realteil und Imaginärteil aufzuteilen. Wir schreiben für den Realteil

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

und für den Imaginärteil

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

Die komplexe Suszeptibilität ist dann eine Funktion dieser reellen Größen:

$$\chi = 2(n-1) - 2 i c \alpha/\omega.$$

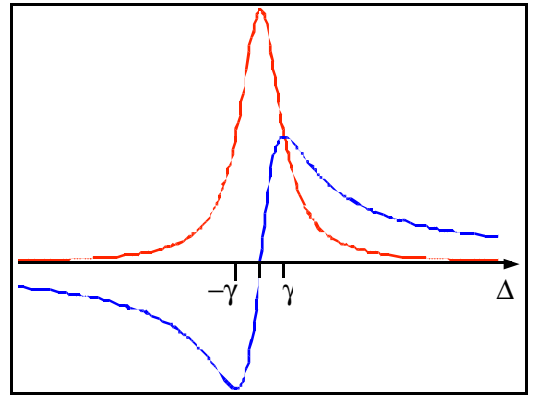
Die Welle wird damit

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

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

Diese Beziehung zwischen der optischen Suszeptibilität χ , die aus den mikroskopischen Eigenschaften des Materials hergeleitet werden kann, und den Koeffizienten α 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 $\omega_0 = \sqrt{f/m}$ ist gegeben durch das Verhältnis von Kraftkonstante f zur bewegten Masse m . Und die Linienbreite ist gegeben durch die Dämpfungskonstante γ . Auch in der quantenmechanischen Variante der Theorie, welche im nächsten Kapitel diskutiert wird, werden diese beiden Parameter ähnliche Bedeutung haben.



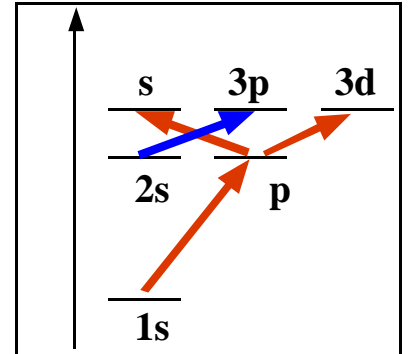
3.2 Das Jaynes-Cummings Modell

Das Jaynes-Cummings Modell ist ein voll quantenmechanisches Modell für die Wechselwirkung von Materie mit dem Strahlungsfeld, welches analytisch mit geringem Aufwand durchgerechnet werden kann.

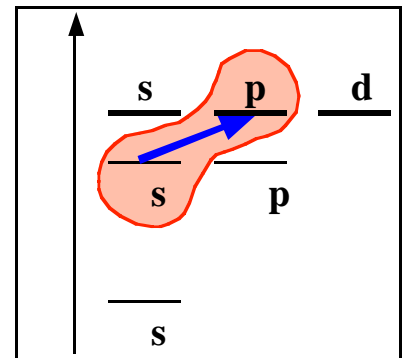
3.2.1 System

Sowohl das materielle System wie auch das Strahlungsfeld werden in diesem Modell quantenmechanisch behandelt.

Um ein konkretes Beispiel im Auge zu behalten können wir uns für das materielle System z.B. ein Wasserstoffatom vorstellen.



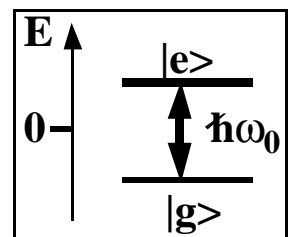
Obwohl jedes Atom eine unendliche Zahl von Zuständen besitzt, zwischen denen eine unendliche Zahl von erlaubten Übergängen existieren, ist es in vielen Fällen möglich, alle außer Zweien zu vernachlässigen. Die beiden relevanten Zustände sind diejenigen, deren Energiedifferenz in der Nähe der Photonenergie liegt. Wir schreiben für den energetisch tiefer liegenden Zustand $|g\rangle$ und für den höher liegenden Zustand $|e\rangle$.



Für dieses Zweiniveausystem können wir somit einen Hamiltonoperator

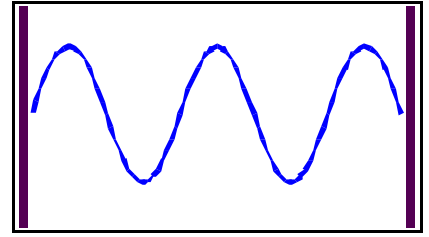
$$\mathcal{H}_{\text{atom}} = - 1/2 \hbar\omega_0\sigma_z$$

schreiben. Hier bezeichnet ω_0 die Energiedifferenz zwischen den beiden Zuständen und σ_z die z-Komponente der Pauli-Operatoren. Der positive Eigenwert gehört somit zu $|g\rangle$. Der Ursprung für die Energieachse wurde für das 2-Niveauatom so gewählt, daß er in der Mitte zwischen den beiden Zuständen liegt. Dies hat keine tiefere Bedeutung, ist aber für die weiteren Rechnungen nützlich.



Die Herleitung der Operator Darstellung für das elektrische Feld ist aufwendiger; es kann nicht durch einen einzelnen Operator ausgedrückt werden. Statt dessen benutzt man üblicherweise eine Summe über die einzelnen Moden des Feldes.

Davon gibt es aber unendlich viele. Jede einzelne Mode entspricht einem harmonischen Oszillator. Die vollständige Form des Hamiltonoperators ist deshalb bei weitem nicht trivial.

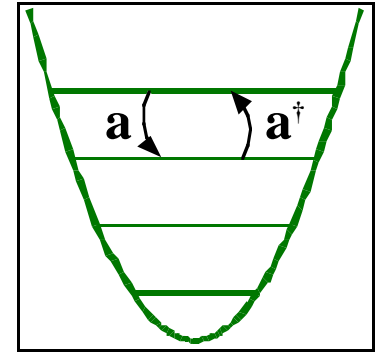


Es gibt jedoch eine vereinfachte Form, die es erlaubt, analytische Resultate zu erhalten und trotzdem einige wesentliche Aspekte der Wechselwirkung exakt beschreibt. Dazu vernachlässigt man sämtliche Moden außer einer. Eine einzelne Mode ist ein relativ leicht zu beschreibendes Objekt.

Die formale Behandlung ist identisch mit der eines harmonischen Oszillators. Die relevanten Operatoren können als Funktion des Auf- und Absteigeoperators a^\dagger und a geschrieben werden. Für die Energie erhalten wir

$$\mathcal{H}_{\text{Feld}} = \hbar\omega_L(a^\dagger a + 1/2).$$

Das Produkt $a^\dagger a$ aus Auf- und Absteigeoperator zählt die Anzahl der Photonen und ω_L stellt die Laserfrequenz dar.

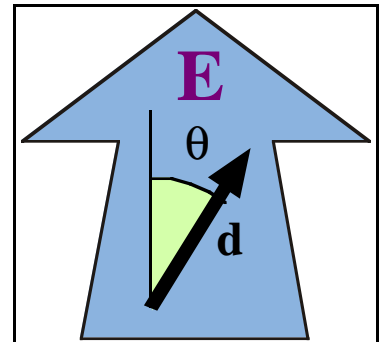


3.2.2 Wechselwirkung

Klassisch wird die Wechselwirkung zwischen einem Atom und dem Strahlungsfeld durch das Skalarprodukt

$$U = -\vec{E} \cdot \vec{d}$$

beschrieben, wobei \vec{E} das elektrische Feld und \vec{d} das atomare Dipolmoment beschreiben. Gemäß dem Korrespondenzprinzip können wir diese klassische Wechselwirkung in einen Hamiltonoperator umwandeln indem wir die klassischen Variablen durch die entsprechenden quantenmechanischen Operatoren ersetzen.



Den atomaren Dipol schreibt man bekanntlich als

$$\vec{d} = -e \vec{r},$$

wobei $-e$ die Ladung und \vec{r} den Ort des Elektrons bezeichnet. Der entsprechende Operator ist somit proportional zum Ortsoperator des Elektrons. Dieser besitzt nur zwischen Zuständen mit unterschiedlicher Parität nicht verschwindende Elemente; damit müssen insbesondere (für Zustände mit definierter Parität) alle Diagonalelemente verschwinden. Dann sind die Matrixelemente des Dipoloperators zwischen den Zuständen $|g\rangle$ und $|e\rangle$

$$\langle e|\vec{r}|e\rangle = \langle g|\vec{r}|g\rangle = 0 \quad -e \langle e|\vec{r}|g\rangle = -e \langle g|\vec{r}|e\rangle^* = \mu_e.$$

Wir können die Phase der beiden Zustände so wählen dass die Matrixelemente reell werden. Der Dipoloperator ist dann proportional zur x-Komponente der Pauli Matrizen $\sigma_x = (\sigma_+ + \sigma_-)$ und kann geschrieben werden als

$$d = \mu_e (\sigma_+ + \sigma_-).$$

Der Feldoperator ist für eine einzelne Mode proportional zur Summe eines Aufsteige- und eines Absteigeoperators

$$\hat{E} \sim a + a^\dagger.$$

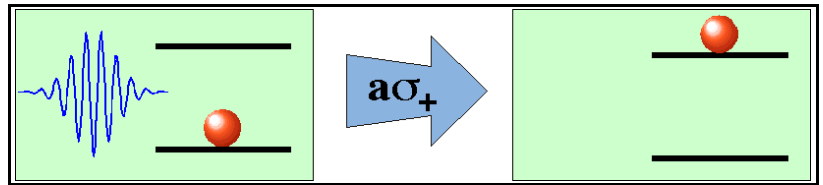
Damit können wir den Wechselwirkungsoperator schreiben als

$$\mathcal{H}_{\text{WW}} = \omega_1 (a + a^\dagger) (\sigma_+ + \sigma_-) = \omega_1 (a\sigma_+ + a\sigma_- + a^\dagger\sigma_+ + a^\dagger\sigma_-)$$

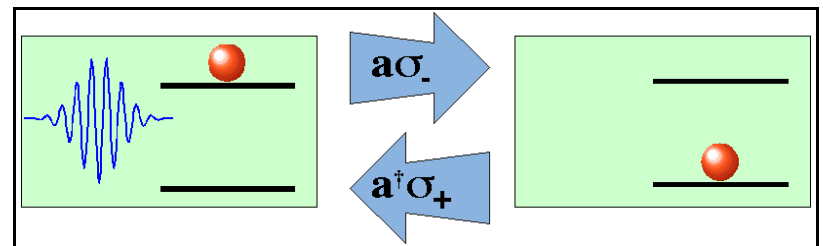
wobei ω_1 die Kopplungsstärke parametrisiert. Diese hängt vom atomaren Dipolmoment, dem Modenvolumen, sowie von der Position des Atoms in der Mode ab.

Der gesamte Wechselwirkungsoperator beschreibt somit vier unterscheidbare Prozesse:

Der Term $a\sigma_+$ beschreibt die Vernichtung eines Photons und die Erhöhung der Energie des Atoms, d.h. die Absorption eines Photons.



Der Term $a\sigma_-$ beschreibt die Erniedrigung der Energie des Atoms unter gleichzeitiger Vernichtung eines Photons. Dies entspricht offenbar einem Prozess, der nicht energieerhaltend ist. Der Term $a^\dagger\sigma_+$ entspricht dem inversen Prozess und ist damit ebenfalls nicht energieerhaltend. Der letzte Term entspricht dem Inversen der Absorption, d.h. der Emission eines Photons.



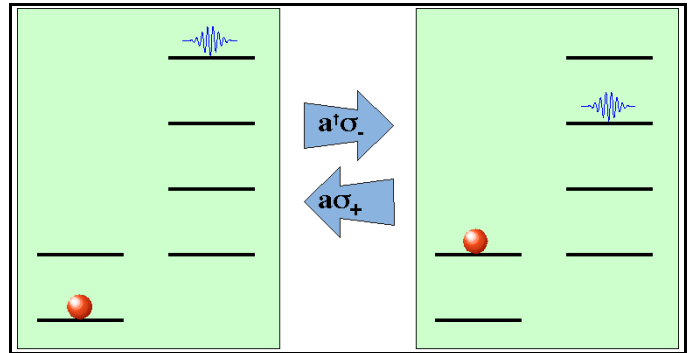
3.2.3 Jaynes-Cummings Operator

Eine einfachere Form erhält man indem man die Terme $a^\dagger\sigma_+$ und $a\sigma_-$ vernachlässigt, welche die Energie nicht erhalten und deshalb erst in sehr hoher Ordnung einer Störungsrechnung eine Rolle spielen. Damit wird

$$\mathcal{H}_{\text{WW}} \approx \omega_1 (a\sigma_+ + a^\dagger\sigma_-)$$

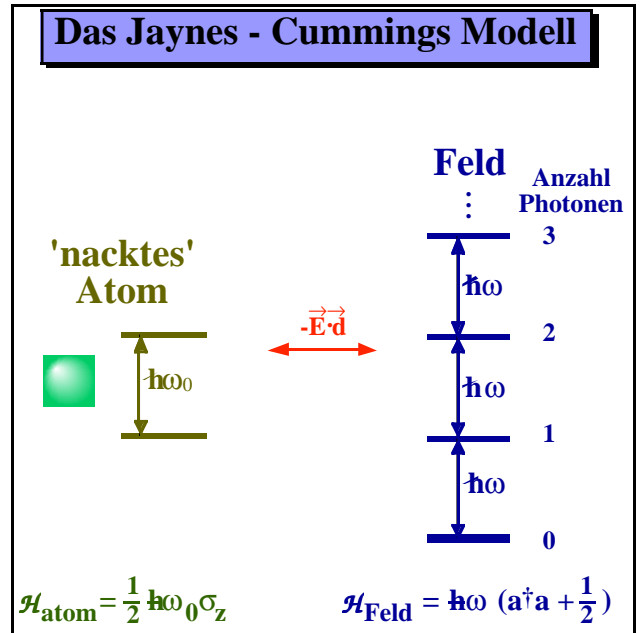
Dies entspricht der Approximation eines rotierenden Feldes (anstelle eines oszillierenden), das in der halbklassischen Näherung noch diskutiert wird.

Der Operator kann direkt mit einem physikalischen Prozeß verknüpft werden. Der eine beschreibt die Absorption eines Photons, d.h. die Vernichtung eines Photons und die Erhöhung der Energie des atomaren Systems um ein Quant. Der konjugierte Operator beschreibt den umgekehrten Prozeß.

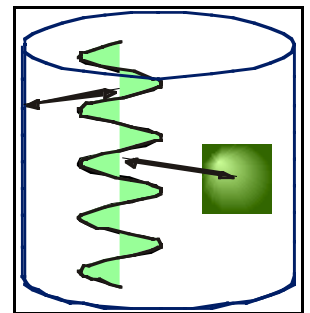


Damit erhalten wir das eigentliche Jaynes-Cummings Modell. Es beinhaltet auf der materiellen Seite ein sogenanntes 'nacktes' Atom, mit zwei möglichen Zuständen. Auf der anderen Seite ist das Strahlungsfeld mit einer unendlichen Folge von Zuständen, welche wie bei einem harmonischen Oszillator äquidistant sind.

Die Figur zeigt die beiden Komponenten des Modells. Das „Zweiniveaumatom“ kann hier einerseits wirklich ein Atom beschreiben, oder es kann einen Spin-1/2 darstellen. Die Wechselwirkung zwischen den beiden ist die elektrische oder magnetische Dipol Wechselwirkung. Dieses Modell ist von Jaynes und Cummings entwickelt worden (E.T. Jaynes and F.W. Cummings, Proc. IEEE 51, 89 (1963)). Es war ursprünglich als ein rein theoretisches Modell entwickelt worden, um zu untersuchen, inwiefern sich die Voraussagen der Quantenmechanik von denen der klassischen Theorie, d.h. der Maxwell-Gleichungen unterscheiden würde. Zu dieser Zeit schien es nicht denkbar, daß man mit einzelnen Moden des Strahlungsfeldes oder einzelnen Atomen Experimente durchführen könnte.



Inzwischen ist es aber in verschiedenen Gruppen gelungen, Versuchsaufbauten zu realisieren, in denen diese theoretische Idealsituation in einer sehr guten Näherung erreicht wird. Man muß dafür einerseits die Wechselwirkung mit einer Mode verstärken, andererseits die Wechselwirkung mit allen anderen Moden unterdrücken, so daß die Wechselwirkung des Systems mit einer einzelnen Mode sehr viel stärker wird als die mit allen anderen Moden zusammen.



Literatur: P. Goy, J.M. Raimond, M. Gross, and S. Haroche, 'Observation of cavity-enhanced single-atom spontaneous emission', Phys. Rev. Lett. 50, 1903-1906 (1983).

H. Walther, 'The single atom maser and the quantum electrodynamics in a cavity', Physica Scripta T23, 165-169 (1988).

S. Haroche and D. Kleppner, 'Cavity quantum electrodynamics', Physics Today January 1989, 24-30 (1989).

E.A. Hinds, 'Cavity Quantum Electrodynamics', in Adv. atomic, mol. opt. phys. 28, Editor: D. Bates, Academic Press, Boston (1991).

S. Haroche, 'Cavity Quantum Electrodynamics', in *Fundamental Systems in Quantum Optics; Proceedings of the Les Houches summer school*, Editor: J. Dalibard, J.M. Raimond, and J. Zinn-Justin, North-Holland, Amsterdam (1992).

H. Walther, 'Experiments on cavity quantum electrodynamics', Phys. Rep. 219, 263-281 (1992).

3.2.4 Zustände und Energien

Wir verwenden die folgende Bezeichnung für die Basiszustände:

$|n, g\rangle = n$ Photonen im Feld, Atom im Grundzustand

$|n-1, e\rangle = n-1$ Photonen im Feld, Atom im angeregten Zustand.

In dieser Basis besitzt der gesamte Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{\text{tot}} = \mathcal{H}_{\text{atom}} + \mathcal{H}_{\text{feld}} + \mathcal{H}_{\text{ww}}$$

eine Block-diagonale Struktur. Jeder einzelne Block umfaßt zwei Zustände und hat die Form

	$ \Psi\rangle$	E_0
$\begin{array}{ c c c } \hline \mathcal{H}_n & 0 & 0 \\ \hline 0 & \mathcal{H}_{n+1} & 0 \\ \hline 0 & 0 & \mathcal{H}_{n+2} \\ \hline \end{array}$	$ n, g\rangle$	$(n + \frac{3}{2}) \omega_L - \frac{\omega_0}{2}$
	$ n-1, e\rangle$	
	$ n+1, g\rangle$	$(n + \frac{1}{2}) \omega_L + \frac{\omega_0}{2}$
	$ n, e\rangle$	
	$ n+2, g\rangle$	
	$ n+1, e\rangle$	

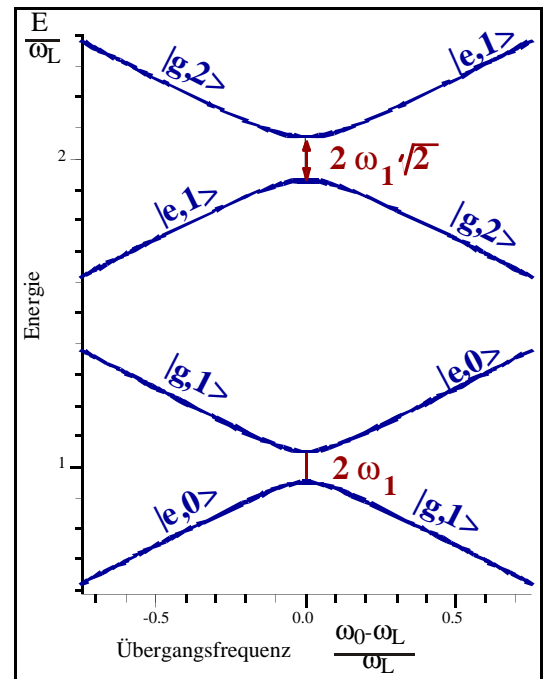
$$\mathcal{H}_n = \hbar \begin{pmatrix} (n + \frac{1}{2}) \omega_L - \frac{\omega_0}{2} & \omega_1 \sqrt{n} \\ \omega_1 \sqrt{n} & (n - \frac{1}{2}) \omega_L + \frac{\omega_0}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |n, g\rangle \\ |n-1, e\rangle \end{pmatrix}$$

Vernachlässigen wir zunächst die Kopplung, so beträgt die Differenz der Energien dieser Zustände

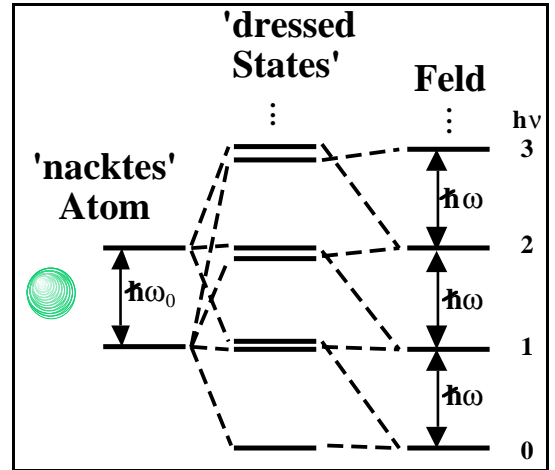
$$(E_1 - E_2)/\hbar = (n + 1/2)\omega_L - \omega_0/2 - [(n - 1/2)\omega_L + \omega_0/2] = \omega_L - \omega_0,$$

d.h. die Energien sind identisch wenn die Laserfrequenz der Resonanzfrequenz entspricht. Sonst ist die Energiedifferenz gleich der Resonanzverstimung.

Betrachten wir die Eigenzustände so werden die Energien durch die Kopplung verschoben. Der Einfluss ist gering wenn die Verstimung $\omega_L - \omega_0$ groß ist, wird aber wichtig wenn die Laserfrequenz gleich der atomaren Übergangsfrequenz ist. Dann erzeugt die Kopplung eine Aufspaltung von $2 \sqrt{n} \omega_1$.



Das System besteht aus einer unendlichen Reihe solcher Zustände, welche als "dressed states" bezeichnet werden: Das Atom ist mit einem Photon "bekleidet". Wenn der Laser mit dem atomaren Übergang resonant ist, so sind jeweils die beiden gekoppelten Zustände beinahe entartet. Die Entartung wird aufgehoben durch die Kopplung zwischen den Zuständen.



3.2.5 Dynamik

Wir gehen hier nicht im Detail auf die Berechnung der Dynamik ein, da sie weitgehend dem später zu behandelnden halbklassischen Fall entspricht. Wir diskutieren lediglich einen einfachen Fall, welcher einige Besonderheiten des quantenmechanischen Modells aufzeigt. Dafür nehmen wir an, dass

- die Energie der Photonen exakt der Aufspaltungsenergie des Atoms entspricht, $\omega_0 = \omega_L$.
- das Atom anfangs im angeregten Zustand ist, $\Psi_a(0) = |e\rangle$.
- das Feld zu Beginn n Photonen enthält, $\Psi_f(0) = |n\rangle$.

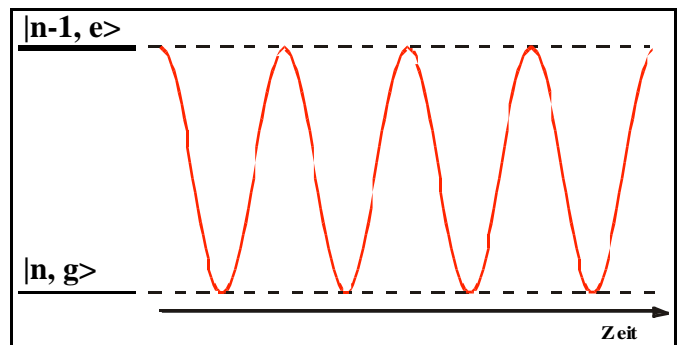
Somit ist

$$\Psi(0) = |n, e\rangle .$$

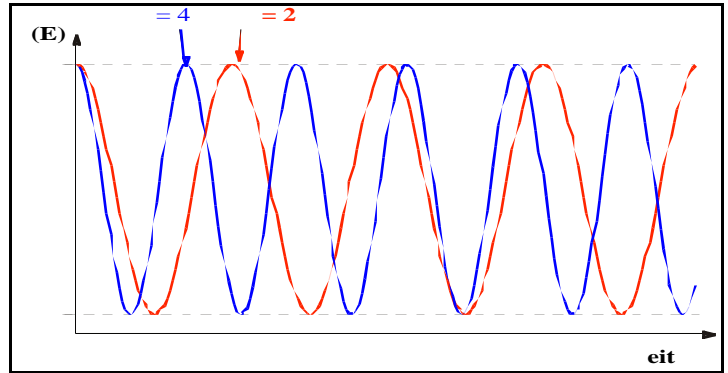
Man sieht leicht, daß der Kopplungsoperator Übergänge zwischen diesem Zustand und dem Zustand $|n-1, g\rangle$ induziert.

Man kann die Schrödingergleichung für dieses Zweiniveausystem leicht explizit lösen. Für die Wahrscheinlichkeit, das Atom im angeregten Zustand zu finden findet man

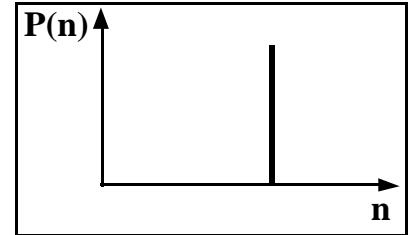
$$|\langle\Psi(t)|e;n-1\rangle|^2 = \frac{1}{2} (1 + \cos(2 \omega_1 \sqrt{n} t)).$$



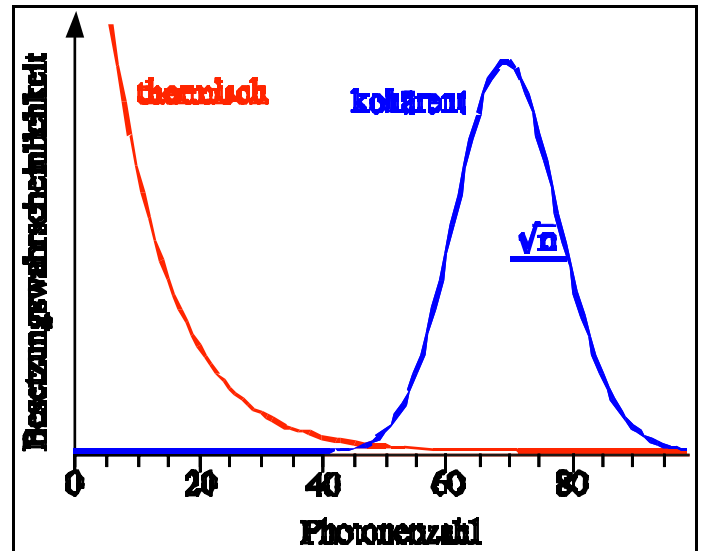
Dieses Resultat beschreibt den oszillatorischen Austausch eines Energiequantums zwischen dem Atom und dem Feld. Die Oszillationsfrequenz ist proportional zur Stärke des Feldes und somit zur Wurzel aus der Photonenzahl. Dieses Verhalten entspricht der quantenmechanischen Version der Rabi-Oszillationen, die wir bei der halbklassischen Beschreibung noch genauer diskutieren werden.



Dies stimmt aber nur solange das Feld durch eine scharfe Anzahl Photonen charakterisiert werden kann. Ein solches Feld, ein sogenannter Zahlzustand, hat jedoch einen stark nichtklassischen Charakter und kann experimentell nur sehr schwer realisiert werden. Ist dies nicht der Fall, so hängt die Evolution des Systems davon ab, in welchem Zustand sich das Feld befindet.



Die beiden für die Praxis wichtigsten Zustände eines optischen Feldes sind der thermische Zustand, welcher von einer klassischen Lichtquelle erzeugt wird. Hier ist die Wahrscheinlichkeit am höchsten, dass sich kein Photon in der Mode befindet. Ein idealer Laser erzeugt im Gegensatz dazu einen kohärenten Zustand, bei dem die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer bestimmten Zahl von Photonen ein Maximum aufweist und die Breite der Verteilung gleich der Wurzel aus der mittleren Photonenzahl ist.



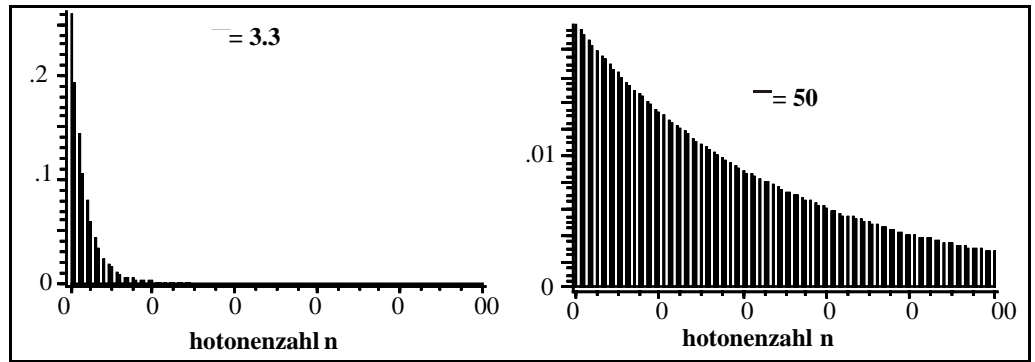
Tritt ein solcher Zustand in Wechselwirkung mit dem Atom, so erhält man für jede mögliche Photonenzahl eine Oszillation, deren Frequenz proportional zur Wurzel aus der Photonenzahl ist, und deren Amplitude durch die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten dieser Photonenzahl gegeben ist.

$$\omega \propto \omega_1 \sqrt{n} ; \quad A \propto P(n) .$$

Bei einer Überlagerung von zwei Zahlzuständen erhalten wir also ein Schwebungssignal, dessen Frequenz der Differenz der beiden Kopplungsstärken entspricht.

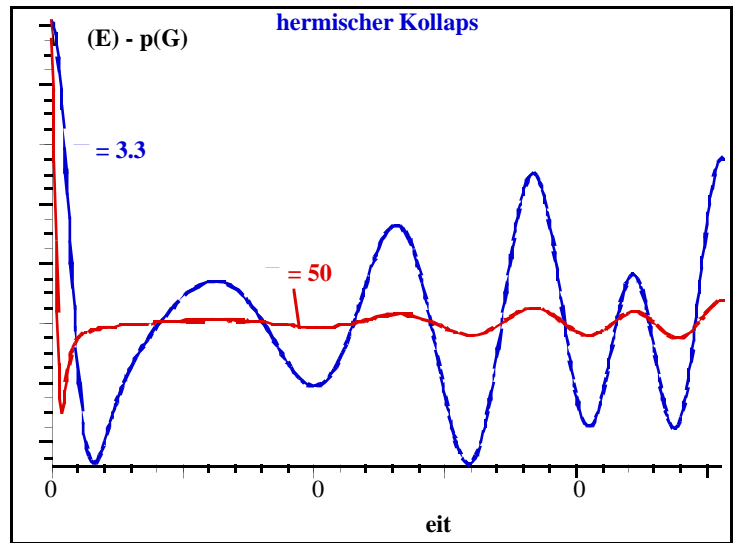
3.2.6 Kollaps

Das Feld, welches von einer klassischen Lichtquelle erzeugt wird, kann in guter Näherung durch einen thermischen Zustand beschrieben werden. Mit zunehmender Intensität nimmt auch die Breite der Verteilung zu.



Bei einem thermischen Zustand mit der mittleren Photonenzahl 3.3 tragen nur relativ wenige Zustände zur Wahrscheinlichkeitsamplitude bei. Deshalb erhält man hier (dargestellt durch die blaue Kurve) ein oszillatorisches Verhalten, wobei deutlich wird, dass mehrere Frequenzen beitragen.

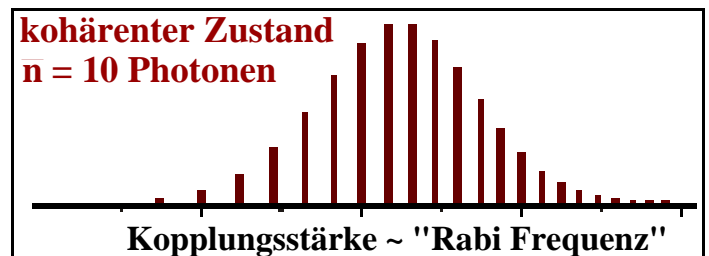
Steigt die mittlere Photonenzahl auf 50 (dargestellt durch die rote Kurve, so ist Zahl der Zustände, welche zum Signal beitragen, so groß, dass es sich um eine beinahe kontinuierliche Verteilung handelt. In diesem Fall klingt die Oszillation rasch ab und die Wahrscheinlichkeit, das Atom im angeregten Zustand zu finden wird



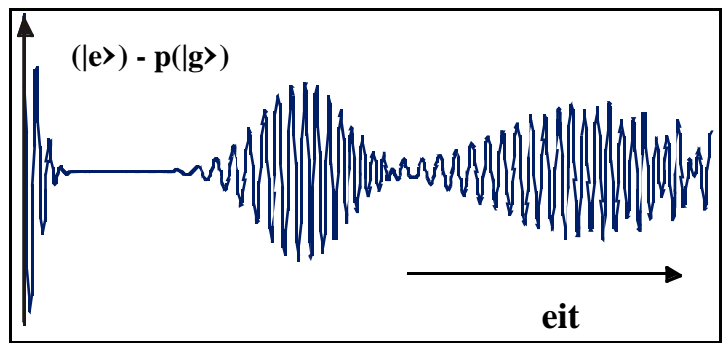
1/2, d.h. das Photon ist zwischen dem Atom und der Mode mit gleicher Wahrscheinlichkeit verteilt. Im freien Raum findet diese „Teilung“ zwischen dem Atom und einer unendlichen Zahl von Moden statt, so daß die Wahrscheinlichkeit, daß es sich auf dem Atom befindet, verschwindet. Wir erhalten auf diese Weise spontane Emission.

Kehren wir zum Fall einer einzelnen Mode zurück und betrachten einen kohärenten Zustand. Dies kann als Modell für die Wechselwirkung mit einem Laserstrahl betrachtet werden.

Für einen kohärenten Zustand besitzt die Feldstärke keinen scharfen Wert, sondern eine Verteilung, dessen Breite proportional zur Quadratwurzel aus der mittleren Photonenzahl ist. In diesem Fall erhält man eine Superposition aller möglichen Frequenzen, welche jeweils proportional zur Quadratwurzel aus der Photonenzahl sind. Diese Frequenzen sind dargestellt, jeweils mit der entsprechenden Amplitude, d.h. der Wahrscheinlichkeit ihres Auftretens in der Verteilung des kohärenten Zustandes.



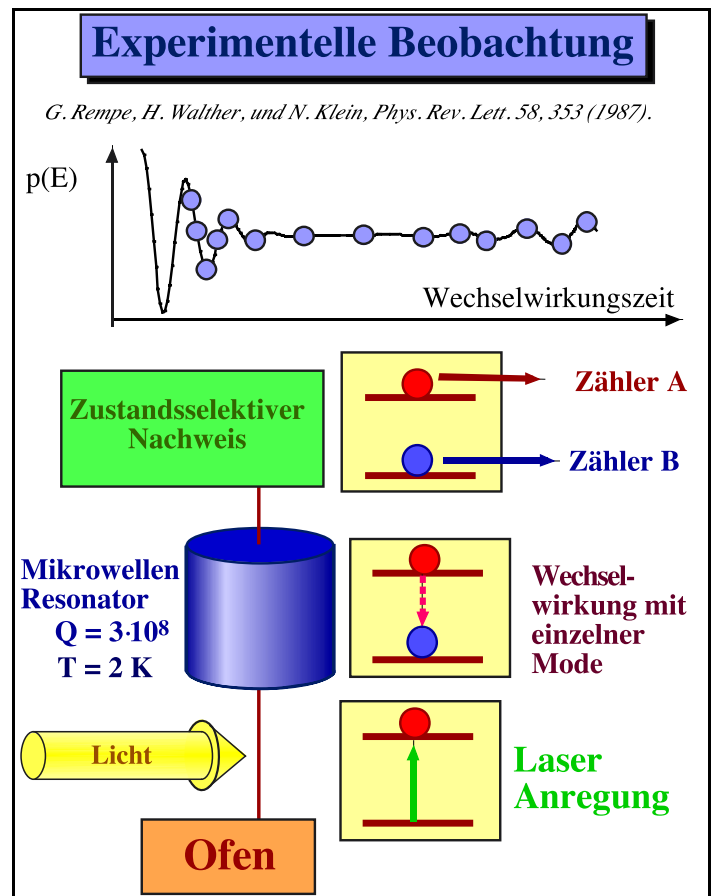
In der Figur ist die Wahrscheinlichkeit, das Atom im angeregten, resp. Grundzustand, anzutreffen, als Funktion der Zeit dargestellt. Für kurze Zeiten findet ein oszillatorischer Austausch statt. Aufgrund der Verteilung der Frequenzen ergibt sich eine Dämpfung der Oszillation, wobei die Zerfallszeit indirekt proportional zur Breite der Verteilung der Rabi-Frequenzen ist. Danach erreicht das System einen zeitunabhängigen Zustand, in dem die Hälfte der Atome sich im Grundzustand und die andere Hälfte im angeregten Zustand befindet. Nach diesem sogenannten Cummings Kollaps bleibt die Besetzungszahl konstant bei je 50%.



Dieses außer Phase geraten kann natürlich noch klassisch, als eine Folge der Intensitätsfluktuation verstanden werden. In einem solchen klassischen Bild würde man dann aber erwarten, dass die Wahrscheinlichkeitsverteilung anschließend bei diesem Wert bleibt. Die Verteilung der Rabi-Frequenzen ist aber nicht kontinuierlich, sondern diskret. Da nur eine endliche Zahl von Frequenzen zum Signal beiträgt kann es sich nicht um einen wirklich zeitunabhängigen Zustand handeln. Die Diskretisierung der Zustände führt deshalb zu einem Wiederaufleben der Oszillation. Die Zeit bis zum Erscheinen dieses „Echos“ ist indirekt proportional zum Abstand zwischen den Rabi-Frequenzen. Der Zerfall und das Wiederaufleben dieser Oszillation sind in der Literatur als „Cummings collapse“ und „revival“ bekannt. Sie stellen einen wesentlichen Unterschied zwischen den klassischen und den quantenmechanischen Voraussagen für die zeitliche Entwicklung dar.

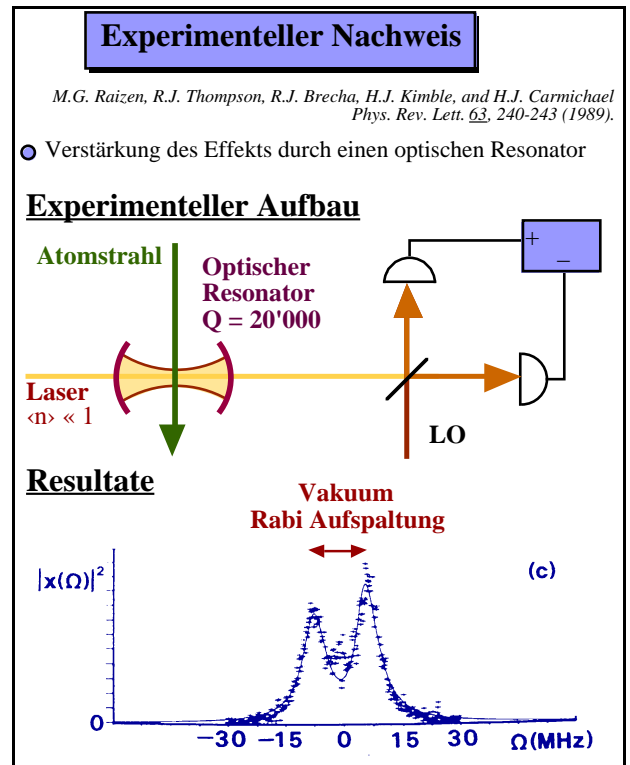
3.2.7 Experimente

Dass diese Rechnungen nicht nur Theorie sind konnte vor einigen Jahren eine Gruppe des Max-Planck Institutes für Quantenoptik beweisen, indem sie diesen Prozess experimentell nachwies. Sie verwendeten dafür einen Mikrowellenresonator extrem hoher Güte ($Q \sim 10^{10}$) (G. Rempe, H. Walther, and N. Klein, 'Observation of Quantum Collapse and Revival in a One-Atom Maser', Phys. Rev. Lett. 58, 353-356 (1987)). Dieser Resonator kann Photonen fast eine Sekunde speichern kann. Aufgrund der hohen Güte besitzen die einzelnen Moden diskrete Energien. Das Experiment beruht darauf dass nur eine dieser Moden in Resonanz ist mit einem Übergang zwischen zwei Rydbergzuständen. Die Atome fliegen frei durch den Resonator durch und werden vor dem Eintritt mit Hilfe eines Lasers in den oberen Zustand präpariert. Im Resonator spielt nur die Wechselwirkung zwischen diesen beiden Zuständen und der resonanten Mode des Strahlungsfeldes eine Rolle. Die im Resonator vorhandene Energie besteht aus den thermisch aktivierten Photonen sowie denjenigen Photonen, die durch den Übergang von Atomen in den unteren Zustand emittiert werden. Hinter dem Resonator werden die Atome detektiert, wobei gemessen wird, in welchem der beiden Zustände sie sich befinden. Hier ist der Unterschied in den Zählraten für die beiden Zustände dargestellt, also für die Wahrscheinlichkeit dass man das Atom im Grund-, resp. angeregten Zustand findet, als Funktion der Wechselwirkungszeit, also der Zeit, welche das Atom benötigt, um durch den Resonator hindurch zu fliegen. Für kurze Wechselwirkungszeiten beobachtet man einen oszillatorischen Energieaustausch zwischen Atom und Resonator; diese Oszillationen geraten dann offenbar außer Phase und über eine gewisse Zeit bleibt die Nachweishäufigkeit für die beiden Zustände etwa gleich. Nach einer längeren Zeitspanne sieht man aber wiederum Oszillationen entstehen. Diese Messungen zeigen also nicht nur die quantenmechanischen Fluktuationen der Feldamplitude, sondern auch, aufgrund des 'revivals', dass die Kopplungsstärken diskret verteilt sind.



Bei der Diagonalisierung des Hamiltonoperators stellt man fest dass die Zustände jeweils paarweise auftreten und sie um die Wechselwirkungsenergie (die "Rabi-Frequenz") aufgespalten sind. Dies gilt auch für den Fall dass sich gar kein Photon im Feld befindet, für den sog. "Vakuumzustand". Man spricht in diesem Fall von der sog. Vakuum - Rabi Aufspaltung. Sie ist der eigentliche Grund für das Auftreten von spontaner Emission, welche rein klassisch nicht erklärt werden kann.

Die Aufspaltung dieser 'dressed states' aufgrund der Kopplung an den Vakuumzustand kann auch experimentell nachgewiesen werden. Erste Experimente dieser Art wurden im Mikrowellenbereich durchgeführt. Ich möchte hier aber ein neueres Experiment zeigen, welches am Caltech mit sichtbarem Licht durchgeführt wurde. Um dem Jaynes-Cummings Modell möglichst nahe zu kommen, wurde das Atom in einen optischen Resonator gebracht. Dadurch wird die Wechselwirkung mit der Resonatormode selektiv verstärkt und dominiert gegenüber der Wechselwirkung mit dem Kontinuum der übrigen Moden. Atome wurden in der Form eines Atomstrahls durch diesen Resonator geschickt und die Aufspaltung wurde spektroskopisch mit Hilfe eines Laserstrahls nachgewiesen. Damit wirklich die Wechselwirkung mit der Resonatormode und nicht mit dem Laserstrahl gemessen wurde, musste die Intensität dieses Strahls sehr gering gehalten werden. Für einen empfindlichen Nachweis wurde eine Heterodyn Technik angewendet, d.h. der schwache Probenstrahl wurde einem wesentlich intensiveren Lokaloszillator überlagert.



Wie das experimentelle Spektrum zeigt konnte die Aufspaltung tatsächlich gemessen werden. Der Abstand zwischen den beiden Maxima entspricht dabei direkt der Stärke der Kopplung zwischen dem Atom und dem Vakuumzustand der Resonatormode. Diese Aufspaltung ergibt die spontane Emission, wenn die Wechselwirkung nicht mehr mit einer einzelnen Mode stattfindet, sondern mit dem Kontinuum.

3.3 Halbklassische Beschreibung: Das Modell

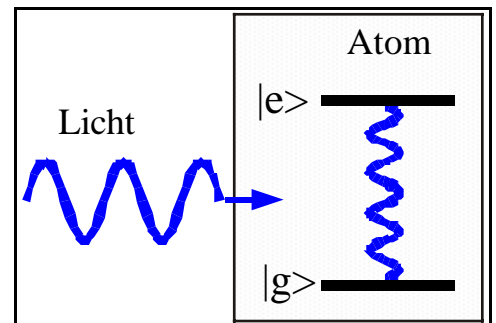
Literatur:

- R.P. Feynman, F.L. Vernon, and R.W. Hellwarth, 'Geometrical representation of the Schrödinger equation for solving maser problems', J. Appl. Phys. 28, 49-52 (1957).
 R.G. Brewer, *Coherent optical spectroscopy*, in *Frontiers of Laser Spectroscopy*, Editor: R. Balian, S. Haroche, and S. Liberman, North Holland (1977).
 L. Allen and J.H. Eberly, 'Optical resonance and two-level atoms', Dover Publications, Mineola, NY (1987).
 Dieter Suter, 'The Physics of Laser-Atom Interaction', Cambridge University Press, Cambridge (1997). Chapter 2.

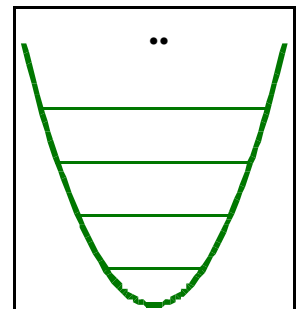
3.3.1 Übersicht

Der Ausgangspunkt für die halbklassische Beschreibung ist ein Zweiniveaumodell für das atomare System, wobei die beiden Zustände durch einen Dipol-erlaubten Übergang verbunden sind. Dieses quantenmechanische Zweiniveausystem wird von einer klassischen elektromagnetischen Welle getrieben.

Das halbklassische Modell gleicht dem klassischen weitgehend: In beiden Fällen treibt die elektromagnetische Welle einen schwingungsfähigen Dipol. Dieser ist selbst die Quelle einer elektromagnetischen Welle, welche mit der eingestrahlten Welle weiter läuft und sich ihr überlagert. Die in-, resp. außer Phase Komponente dieser Welle führt zu Absorption, resp. Dispersion. Wie im quantenmechanischen Fall schreiben wir für die Zustände des Atoms $|g\rangle$ (Grundzustand) und $|e\rangle$ (angeregter Zustand). Die beiden Zustände sind über einen elektrischen Dipol-Übergang verbunden.



Dies ist offenbar nicht das, was man durch eine direkte Quantisierung des klassischen Modells erhalten würde: dort hatten wir das Atom als harmonischen Oszillator beschrieben. Dieser müsste quantenmechanisch durch ein nach oben offenes System von äquidistanten Zuständen beschrieben werden. Wir erwarten somit bereits an dieser Stelle, daß das quantenmechanische System sich anders verhalten wird als das klassische.



Wir nehmen an, daß der Übergang elektrisch-Dipol erlaubt ist. Die beiden Zustände haben dann unterschiedliche Parität. Wie im Jaynes-Cummings Modell diskutiert hat der Dipoloperator \hat{d} die Matrixelemente

$$\langle e|\hat{d}|g\rangle = \langle g|\hat{d}|e\rangle = \mu_E \quad \langle e|\hat{d}|e\rangle = \langle g|\hat{d}|g\rangle = 0 ,$$

wobei μ_E das reelle Matrixelement des Dipoloperators darstellt.

Ein quantenmechanisches System, das durch zwei Zustände aufgespannt wird,

$$\Psi = c_1 |g\rangle + c_2 |e\rangle$$

kann mit zwei komplexen oder vier reellen Parametern vollständig beschrieben werden. Diese stellen Real- und Imaginärteil der beiden Koeffizienten dar. Das System besitzt in diesem Sinn vier Freiheitsgrade. Da die Phase eines quantenmechanischen Zustandes aber keine physikalische Bedeutung besitzt, können wir aber einen Freiheitsgrad eliminieren; es bleiben dann drei physikalisch relevante Freiheitsgrade.

3.3.2 Basisoperatoren

Das gleiche können wir sofort für den Raum der Operatoren, die auf dieses System wirken, sagen: Die Operatoren können als 2x2 Matrizen dargestellt werden. Wenn wir uns auf hermitesche (selbstadjungierte) Operatoren beschränken, müssen die beiden Diagonalelemente reell sein. Die Realteile der Außerdiagonalelemente müssen gleich sein, die Imaginärteile entgegengesetzt. Somit werden auch die Operatoren durch vier reelle Parameter eindeutig beschrieben.

$$\begin{pmatrix} a & c + id \\ c - id & b \end{pmatrix}$$

Es ist nützlich, für die Beschreibung der Operatoren eine Basis aus Operatoren zu wählen. Alle ändern können dann als Linearkombination dieser Basisoperatoren dargestellt werden. Dafür kommen beliebige vier linear unabhängige Operatoren in Betracht. Eine besonders nützliche Basis besteht aus der Einheitsmatrix, sowie aus den drei Operatoren

$$S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_y = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Matrixelemente sind somit

$$\begin{array}{lll} \langle g|S_x|g\rangle = 0 & \langle g|S_x|e\rangle = 1/2 & \langle e|S_x|e\rangle = 0 \\ \langle g|S_y|g\rangle = 0 & \langle g|S_y|e\rangle = -i/2 & \langle e|S_y|e\rangle = 0 \\ \langle g|S_z|g\rangle = 1/2 & \langle g|S_z|e\rangle = 0 & \langle e|S_z|e\rangle = -1/2 \end{array}$$

Es handelt sich somit jeweils um die Pauli-Matrizen, multipliziert mit 1/2.

Wie man leicht feststellen kann erfüllen diese Operatoren die Vertauschungsrelationen

$$[S_x, S_y] = i S_z \quad \text{und zyklische Permutationen,}$$

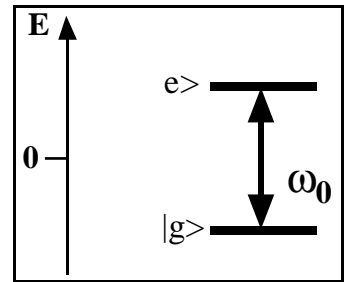
welche aus der quantenmechanischen Theorie des Drehimpulses bekannt sind. Diese drei Operatoren können u.a. die drei kartesischen Komponenten eines Spins 1/2 darstellen.

Wenn wir den elektrischen Dipoloperator für dieses System in dieser Basis schreiben erhalten wir

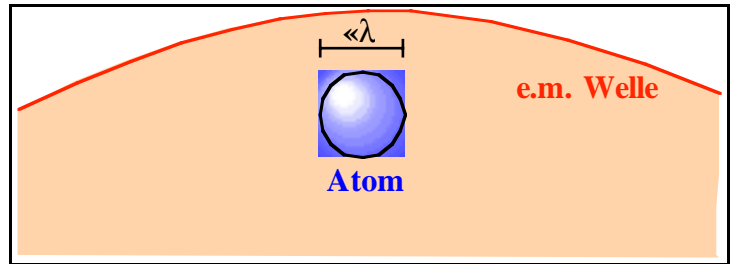
$$\hat{\mathbf{d}} = 2 \mu_E S_x = \begin{pmatrix} 0 & \mu_e \\ \mu_e & 0 \end{pmatrix}.$$

3.3.3 Hamiltonoperator

Wir schreiben für die Anregungsenergie vom Grund- zum angeregten Zustand ω_0 (mit $\hbar=1$). In dieser Form des Hamiltonoperators, wie auch in allen folgenden Rechnungen schreiben wir Energieeinheiten in der Form von Frequenzen. Damit erhalten wir eine direkte Beziehung zu den entsprechenden Experimenten, wo Energiedifferenzen immer als Frequenzen erscheinen. In der hier benutzten Form des Hamiltonoperators ist der Ursprung der Energieachse in der Mitte zwischen den beiden Zuständen. Diese Wahl des Ursprungs ist geeignet, die Symmetrie des Systems deutlich zu machen.



Da wir ein einzelnes Atom betrachten, von dem wir annehmen, daß es im Raum in Ruhe sei, und weil die Wellenlänge λ des Laserfeldes groß ist gegenüber der Ausdehnung des Atoms, können wir die räumlichen Koordinaten vernachlässigen und annehmen, das Feld sei (über den Bereich des Atoms) homogen. Unser Modell reduziert sich damit auf ein oszillierendes elektrisches Feld



$$E = 1/2 \{E_0 e^{i\omega_L t} + c.c.\}$$

mit der Frequenz ω_L und Amplitude E_0 .

Die elektrische Dipolwechselwirkung kann dann geschrieben werden als

$$\mathcal{H}_{ww} = - 2 \omega_x \cos(\omega_L t) S_x ,$$

mit der Kopplungskonstante

$$\omega_x = E_0 \mu_E .$$

Wir vernachlässigen die Eigenenergie des elektrischen Feldes. Der gesamte Hamiltonoperator wird somit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{atom} + \mathcal{H}_{ww} = - \omega_0 S_z - 2 \omega_x \cos(\omega_L t) S_x .$$

Im Hamiltonoperator erscheint das elektrische Feld nicht als Vektor, sondern als ein Skalar. Dies ist ein inhärentes Problem des Zweiniveausystems, das nur gelöst werden kann indem man das Zweiniveaumodell aufgibt und eine vollständigere atomare Struktur mit einer größeren Zahl von Zuständen berücksichtigt.

3.4 Der Dichteoperator

3.4.1 Beschreibung eines Ensembles

In vielen Experimenten, die in diesem Zusammenhang interessieren, besteht das physikalische System aus einem Ensemble von Atomen, welches nicht mit Hilfe einer Wellenfunktion oder Zustandsfunktion beschrieben werden kann.

Als einfaches Beispiel betrachten wir drei Atome, von denen sich zwei im Grundzustand und eines im angeregten Zustand befinden.

Frage: welche Wellenfunktion beschreibt diesen Zustand?

Man könnte versucht sein, diesen Zustand mit der Funktion

$$\Psi = 1/\sqrt{5}(2|g\rangle + |e\rangle)$$

zu schreiben.

Um zu überprüfen, ob dies sinnvoll ist, berechnen wir das elektrische Dipolmoment dieses Zustandes:

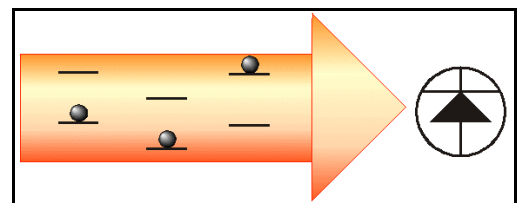
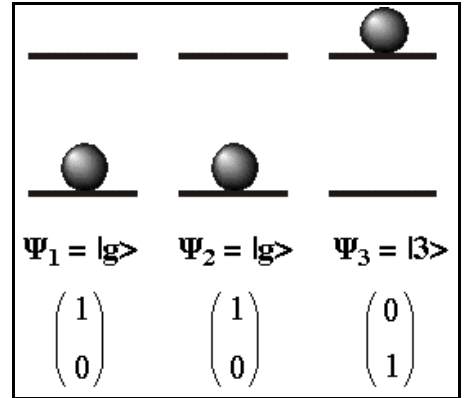
$$\langle d \rangle = \langle \Psi | \hat{d} | \Psi \rangle = \mu_e / 5 \begin{pmatrix} 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \mu_e / 5 \begin{pmatrix} 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = 4\mu_e / 5 .$$

Man würde also voraussagen, daß ein Dipolmoment in Richtung der x-Achse vorliegen würde. Die entspricht nicht der Beobachtung und zeigt, daß unsere Beschreibung des Zustandes mit obiger Funktion falsch ist. Korrekterweise müsste man für jedes einzelne Atom das Dipolmoment ausrechnen und die Resultate addieren.

$$\begin{aligned} \langle d \rangle &= \sum_i \langle d_i \rangle = \mu_e \left[2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \mu_e \left[2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] = 0 . \end{aligned}$$

Der Schrödinger-Formalismus der Quantenmechanik erlaubt es nicht, direkt Ensembles von gleichartigen Quantensystemen zu behandeln.

Die meisten Experimente werden aber an Ensembles von näherungsweise identischen Systemen durchgeführt. Wenn wir z.B. die Absorption eines Laserstrahls in einem atomaren Gas messen, so stellt die absorbierte Leistung eine Summe über die Beiträge einer ganzen Reihe von Zweiniveausystemen dar. Wenn



man dieses System durch eine Zustandsfunktion beschreibt, so ist dies nur dann korrekt, wenn

- alle Atome im gleichen Zustand sind
- alle Atome die gleichen äußeren Felder spüren
- keine Wechselwirkungen zwischen den Atomen existieren.

3.4.2 Definition des Dichteoperators

Für die Beschreibung eines solchen Ensembles benötigt man statt dessen den sogenannten Dichteoperator. Er kann am besten definiert werden mit Hilfe der bra-ket Schreibweise

$$\rho = 1/N \sum_{i=1,N} |\psi\rangle\langle\psi| .$$

(U. Fano, 'Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques', Rev. Mod. Phys. 29, 74-93 (1957).).

Für ein einzelnes Atom im Zustand

$$\Psi = a|g\rangle + b|e\rangle$$

wird der Dichteoperator

$$\rho = (a|g\rangle + b|e\rangle)(a^*\langle g| + b^*\langle e|) .$$

Die Matrixelemente sind

$$\langle g|\rho|g\rangle = \langle g|(a|g\rangle + b|e\rangle)(a^*\langle g| + b^*\langle e|)|g\rangle = (a\langle g|g\rangle + b\langle g|e\rangle)(a^*\langle g|g\rangle + b^*\langle e|g\rangle) = |a|^2,$$

wobei wir die Orthonormalität der Zustände benutzt haben. Analog erhalten wir

$$\langle e|\rho|e\rangle = \dots = |b|^2$$

$$\langle g|\rho|e\rangle = \langle g|(a|g\rangle + b|e\rangle)(a^*\langle g| + b^*\langle e|)|e\rangle = ab^*$$

$$\langle e|\rho|g\rangle = a^*b .$$

oder in Matrixschreibweise

$$\rho = \begin{pmatrix} |a|^2 & ab^* \\ ba^* & |b|^2 \end{pmatrix}$$

Ein einzelnes Atom im Grundzustand wird demnach durch den Dichteoperator

$$\rho_g = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

beschrieben, und eines im angeregten Zustand durch

$$\rho_e = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Für ein Einzelsystem besteht somit eine 1-1 Beziehung zwischen der Zustandsfunktion und dem Dichteoperator.

Der wichtigste Unterschied zwischen dem Dichteoperator und einer Zustandsfunktion besteht darin, daß der Dichteoperator eines Ensembles einfach durch die Summe der Dichteoperatoren der einzelnen Teilsysteme gegeben ist. Wie wir für das einfache Beispiel von 3 Atomen gesehen hatten, ist das bei der Zustandsfunktion nicht der Fall.

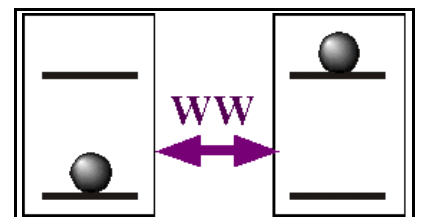
Für das aus drei Atomen bestehende Ensemble in unserem Beispiel wird der Dichteoperator

$$\rho = 1/3 \sum_{i=1,3} \rho_i = 1/3 \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) = 1/3 \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

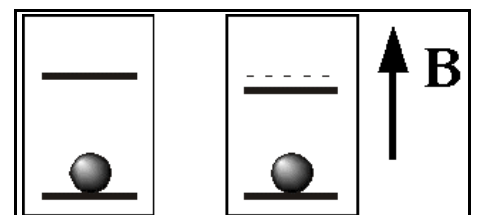
Die Diagonalelemente stellen direkt die Populationen der entsprechenden Zustände dar. Für das vorliegende Ensemble finden wir somit 2/3 der Atome im Grundzustand, 1/3 im angeregten Zustand.

Der Dichteoperator des Systems beschreibt ein gemitteltes Atom. Man kann ihn verwenden um die Zeitabhängigkeit der Mittelwerte zu berechnen. Das bringt den großen Vorteil, daß wir für die Berechnung der Zeitentwicklung des Systems nicht zuerst die Zeitentwicklung jedes einzelnen Atoms berechnen müssen, sondern direkt die Zeitentwicklung des Mittelwertes berechnen können. Voraussetzung dafür ist allerdings daß die verschiedenen Atome gut voneinander isoliert sind und die gleiche Umgebung sehen. Die wichtigsten Abweichungen sind Relaxationseffekte und Inhomogenitäten.

Relaxation kommt durch die Wechselwirkung zwischen den einzelnen Teilsystemen zustande, sowie durch die Wechselwirkung mit der Umgebung. Diese geschieht vor allem über elektromagnetische Felder und/oder über die translatorischen Freiheitsgrade.



Mit Inhomogenitäten bezeichnet man unterschiedliche Wechselwirkungen der Atome mit ihrer Umgebung. Dies können z.B. durch unterschiedliche Geschwindigkeiten (Dopplerverbreiterung) oder durch unterschiedlichen Ort in inhomogenen externen Feldern (z.B. einem Laserstrahl mit endlichem Durchmesser) zustande kommen.



3.4.3 Rechenregeln für den Dichteoperator

Ausgehend von der Schrödingergleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi = -i \mathcal{H} \Psi,$$

welche bekanntlich die Lösung

$$\Psi(t) = \Psi(0) e^{-i\mathcal{H}t}$$

hat, finden wir die Bewegungsgleichung für den Dichteoperator als

$$\dot{\rho} = \frac{\partial}{\partial t} (|\Psi\rangle\langle\Psi|) = |-i\mathcal{H}\Psi\rangle\langle\Psi| + |\Psi\rangle\langle -i\mathcal{H}\Psi| = -i\mathcal{H} |\Psi\rangle\langle\Psi| + |\Psi\rangle\langle\Psi| i\mathcal{H} = -i [\mathcal{H}, \rho].$$

Diese Gleichung ist auch als Liouville-Schrödinger Gleichung bekannt.

Die Lösung finden wir durch einsetzen der Lösung der Schrödingergleichung:

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)| = e^{-i\mathcal{H}t} |\Psi(0)\rangle\langle\Psi(0)| e^{i\mathcal{H}t} = e^{-i\mathcal{H}t} \rho(0) e^{i\mathcal{H}t}.$$

Der Erwartungswert einer Observablen A für den Zustand, welcher durch den Dichteoperator ρ beschrieben wird, kann ebenfalls aus der Definition des Dichteoperators hergeleitet werden:

$$\langle\Psi|A|\Psi\rangle = \sum_{i,j} (c_i^* A_{ij} c_j) = \sum_{i,j} (A_{ij} \rho_{ji}) = \sum_i (A \rho)_{ii} = \text{Sp}\{A \rho\} = \text{Sp}\{\rho A\}.$$

Für die Berechnung von Erwartungswerten ist es wichtig, dass die Spur eines Operators unter zyklischen Vertauschungen invariant bleibt,

$$\text{Sp}\{ABC\} = \text{Sp}\{BCA\} = \text{Sp}\{CAB\}.$$

Daraus folgt zum Beispiel

$$\text{Sp}\{\rho(t) A\} = \text{Sp}\{e^{-i\mathcal{H}t} \rho(0) e^{i\mathcal{H}t} A\} = \text{Sp}\{\rho(0) e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t}\} = \text{Sp}\{\rho(0) A(t)\}.$$

Diese Umformung entspricht dem Übergang vom Schrödingerbild zum Heisenbergbild: Im Schrödingerbild ist der Zustand zeitabhängig, während die Observable invariant ist, im Heisenbergbild entwickelt sich die Observable. Für diese läuft die Zeitentwicklung umgekehrt als für den Dichteoperator.

3.4.4 Beispiele

1) Erwartungswert des Dipolmomentes für das 3-Atom Ensemble.

$$\text{Lösung: } \langle d \rangle = \text{Sp}\{\hat{d} \rho\} = \mu_e \text{Sp}\left\{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2/3 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{pmatrix}\right\} = \mu_e \text{Sp}\left\{\begin{pmatrix} 0 & 1/3 \\ 2/3 & 0 \end{pmatrix}\right\} = 0$$

2) Gegeben sei ein Zustand $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + i|2\rangle)$. Wie lautet der entsprechende Dichteoperator?

Lösung: $\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix}$

3) Welche Wellenfunktion entspricht dem Dichteoperator $\rho = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$?

Lösung: keine !!

4) Berechnen Sie die Zeitentwicklung des Dichteoperators in der Eigenbasis des Hamiltonoperators.

Lösung: $\rho(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(0) & \rho_{12}(0)e^{i\omega t} \\ \rho_{21}(0)e^{-i\omega t} & \rho_{22}(0) \end{pmatrix}$.

5) Überprüfen Sie damit die Schrödingergleichung.

Lösung: $\frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = \begin{pmatrix} 0 & i\omega \rho_{12}(t) \\ -i\omega \rho_{21}(t) & 0 \end{pmatrix}$

$$-i[\mathcal{H}, \rho(t)] = -i \begin{pmatrix} -\frac{\omega}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\omega}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \rho_{12}(t) \\ \rho_{21}(t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{\omega}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\omega}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & i\omega \\ -i\omega & 0 \end{pmatrix}$$

3.4.5 Darstellung in einer Basis

Wie jeder quantenmechanische Operator kann auch der Dichteoperator in einem geeigneten Satz von Basisoperatoren aufgespannt werden. Für das Zweiniveausystem besteht ein besonders geeigneter Satz von Basisoperatoren aus den Drehimpulsoperatoren S_x , S_y und S_z , die oben definiert wurden. Wir schreiben die Entwicklungskoeffizienten als s_x , s_y , und s_z , so daß der Dichteoperator folgende Form erhält

$$\rho' = a \mathbb{1} + s_x S_x + s_y S_y + s_z S_z .$$

Die Diagonalelemente des Dichteoperators stellen Populationen dar, z.B. ρ_{11} die Wahrscheinlichkeit, daß sich das Atom im Grundzustand befindet. Die Summe der Diagonalelemente muß deshalb immer gleich 1 sein,

$$\sum_i \rho_{ii} = \text{Sp}\{\rho\} = \sum_i p_i = 1 ,$$

da sich jedes System in irgendeinem Zustand befinden muß. Damit wird der Koeffizient a bestimmt als $1/2$ und der Dichteoperator wird

$$\rho' = 1/2 \mathbb{1} + s_x S_x + s_y S_y + s_z S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} s_z & s_x - is_y \\ s_x + is_y & -s_z \end{pmatrix}.$$

Der Einheitsoperator $\mathbb{1}$ ist zeitunabhängig und trägt zu keiner beobachtbaren Größe bei. Im Sinne einer Abkürzung ist es deshalb häufig einfacher, diesen Teil des Dichteoperators herauszulösen und den reduzierten Dichteoperator

$$\rho = s_x S_x + s_y S_y + s_z S_z,$$

zu betrachten, dessen Spur verschwindet.

Als Beispiel betrachten wir unser Standard-Ensemble:

$$\rho = \begin{pmatrix} 2/3 & 0 \\ 0 & 1/3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/6 & 0 \\ 0 & -1/6 \end{pmatrix} = \frac{1}{3} S_z.$$

Die Diagonalelemente können somit kleiner, gleich oder größer als Null sein. Sie stellen somit nicht Populationen dar, sondern die Abweichung der Populationen von der Gleichverteilung. In Experimenten misst man aber meist nicht Populationen, sondern Populationsdifferenzen, und diese sind die gleichen bei ρ und ρ' .

Die Entwicklungskoeffizienten s_x , s_y , und s_z sind die Komponenten eines Spinvektors. Wenn wir ein Spin-1/2 System betrachten, so entspricht dies genau den 3 kartesischen Komponenten des Drehimpulsvektors.

3.4.6 Pseudospin

Die Bewegungsgleichungen eines solchen Zweiniveausystems wurden erstmals von Felix Bloch genau diskutiert (F. Bloch, 'Nuclear induction', Phys. Rev. 70, 460-485 (1946).), und zwar für die Beschreibung der magnetischen Resonanz. Die Zweiniveausysteme waren in diesem Zusammenhang Spin-1/2 Systeme. Die resultierenden Bewegungsgleichungen sind deshalb als Blochgleichungen bekannt. Etwa 10 Jahre später zeigten Feynman, Vernon und Helwarth (FVH) daß jedes Zweiniveausystem den gleichen Bewegungsgleichungen gehorcht und deshalb mit Hilfe der Blochgleichungen diskutiert werden kann (R.P. Feynman, F.L. Vernon, and R.W. Helwarth, 'Geometrical representation of the Schrödinger equation for solving maser problems', J. Appl. Phys. 28, 49-52 (1957)). Aufgrund dieser Analogie bezeichnet man allgemein Zweiniveausysteme gerne als Pseudo-Spin 1/2 Systeme und diskutiert die Bewegungsgleichungen indem man Teile des Systems als Spin-Komponenten bezeichnet und die Wechselwirkung mit äußeren Feldern auf magnetische Wechselwirkungen zurückführt.

In diesem Bild entspricht der Grundzustand des Systems z.B. dem +1/2 Zustand des Pseudo-Spins, während der angeregte Zustand dem -1/2 Zustand entspricht. Die Energiedifferenz zwischen Grund- und angeregtem Zustand entspricht der Zeeman-Aufspaltung. Die z-Komponente des Pseudospins beschreibt die Populationsdifferenz zwischen den beiden Zuständen. Im Fall des optischen Zweiniveausystems beschreiben die x- und y-

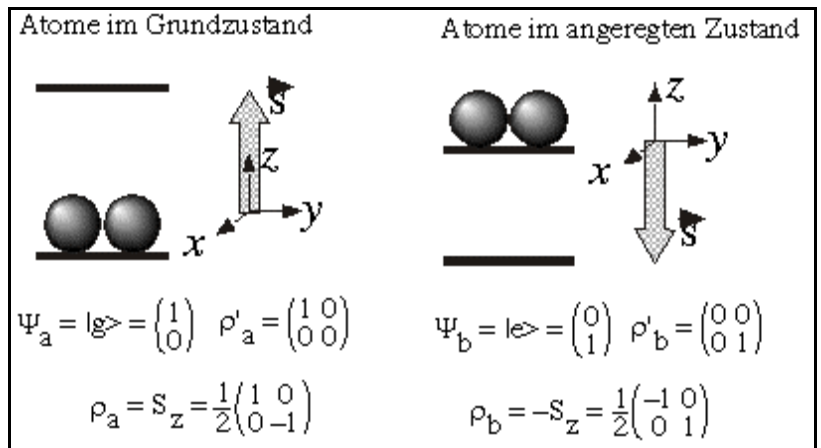
Komponenten die quantenmechanische Kohärenz zwischen den beiden Zuständen, welche physikalisch ein oszillierendes elektrisches Dipolmoment beschreibt. Dieser Pseudospin ist außerordentlich hilfreich für die Visualisierung der zeitlichen Entwicklung des Systems, welche exakt auf die Bewegung eines Drehimpulses zurückgeführt werden kann, der an ein magnetisches Moment gekoppelt ist.

Die Gleichungen werden deshalb als optische Blochgleichungen bezeichnet.

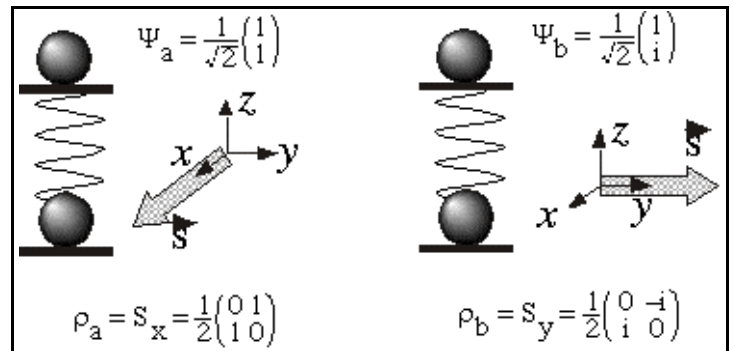
Handelt es sich um einen optischen Übergang, so gibt es keine solche Beziehung, aber, wie FVH gezeigt haben, können wir sie als die Komponenten eines Pseudo-Spins betrachten, welcher die Entwicklung des Systems beschreibt. Seine z-Komponente beschreibt die Populationsdifferenz: Für $s_z = 1$ sind alle Atome im Grundzustand $|g\rangle$, und die Energie des Systems erreicht ein Minimum,

$$\text{Sp}\{\mathcal{H}\rho\} = -\omega_0/2.$$

Die Figur illustriert die Orientierung des Pseudospins \vec{s} und zeigt die entsprechende Wellenfunktion und den Dichteoperator, der diesen Zustand beschreibt. Da wir den Teil eliminiert haben, der proportional zum Einheitsoperator ist, wird der Dichteoperator spurfrei. Für Atome im Grundzustand ist der Pseudospin nach oben orientiert ($s_z = +1/2$), für Atome im angeregten Zustand nach unten ($s_z = -1/2$).



Die transversalen Komponenten des Pseudo-Spins \vec{s} bezeichnen das optische Dipolmoment des Atoms und entsprechen dem quantenmechanischen Analogon der oszillierenden Dipolmomente der Lorentz-Lorenz Theorie. Wie in der Figur gezeigt bezeichnen sie eine kohärente Superposition der beiden Zustände.



Die Orientierung des Pseudospins in der transversalen Ebene bezeichnet die Phase des oszillierenden Dipolmomentes, in direkter Analogie zur komplexen Notation für die Beschreibung des elektrischen Feldes.

3.4.7 Der Hamiltonoperator des Pseudospins

Wir betrachten den Hamiltonoperator inklusive der Störung

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{atom}} + \mathcal{H}_{\text{ww}} = -\omega_0 S_z - 2\omega_x \cos(\omega_L t) S_x .$$

In der Spin-1/2 Analogie entspricht die elektronische Anregungsenergie

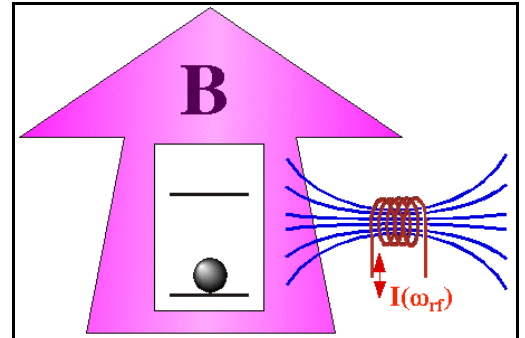
$$\omega_0 = \mu_z B_z$$

der Energiedifferenz $\mu_z B_z$ zwischen den Spinzuständen in einem Magnetfeld, welches parallel zur z-Achse orientiert ist.

Die Kopplung an das oszillierende Laserfeld ist äquivalent zur Wechselwirkung eines Spins 1/2 mit einem oszillierenden Magnetfeld parallel zur x-Achse, wobei die Kopplungsstärke

$$\omega_x = 1/2 \mu_x B_x$$

beträgt und B_x die Amplitude des magnetischen Wechselfeldes beträgt.



3.5 Bewegungsgleichung

3.5.1 Blochgleichung im Laborsystem

Die Bewegungsgleichung für den Dichteoperator lautet

$$\dot{\rho}(t) = -i[\mathcal{H}(t), \rho(t)]$$

Eine Lösung dieser Bewegungsgleichung würde in der Angabe der Zeitabhängigkeit aller vier Matrixelemente des Dichteoperators bestehen. Für die formale Beschreibung ist es aber nützlicher, nicht die eigentlichen Matrixelemente ρ_{ij} zu betrachten, sondern den Dichteoperator in einer Basis von Operatoren zu entwickeln. Meistens benutzt man dafür die Basis der Spinoperatoren. Die Basis selbst bleibt zeitunabhängig, während die Entwicklungskoeffizienten als zeitabhängig betrachtet werden:

$$\rho(t) = s_x(t) S_x + s_y(t) S_y + s_z(t) S_z .$$

Aus einem gegebenen Dichteoperator können diese Koeffizienten aufgrund der Orthogonalität der Spinoperatoren als Erwartungswerte berechnet werden:

$$s_\alpha(t) = 2 \text{Sp}\{\rho(t) S_\alpha\} \quad \alpha = x, y, z .$$

Diese Entwicklung erlaubt uns, die Schrödingergleichung in ein lineares System von gewöhnlichen Differentialgleichungen umzuformen, dessen Variablen die Entwicklungskoeffizienten des Dichteoperators sind:

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= \dot{s}_x(t) S_x + \dot{s}_y(t) S_y + \dot{s}_z(t) S_z = \\ &= -i[\mathcal{H}, \rho(t)] = -i[-\omega_0 S_z - 2 \omega_x \cos(\omega_L t) S_x, s_x(t) S_x + s_y(t) S_y + s_z(t) S_z] \\ &= -i\{-\omega_0 (s_x(t) [S_z, S_x] + s_y(t) [S_z, S_y] + s_z(t) [S_z, S_z]) \\ &\quad - 2 \omega_x \cos(\omega_L t) (s_x(t) [S_x, S_x] + s_y(t) [S_x, S_y] + s_z(t) [S_x, S_z])\} . \\ &= \{-\omega_0 (s_x(t) S_y - s_y(t) S_x) - 2 \omega_x \cos(\omega_L t) (s_y(t) S_z - s_z(t) S_y)\} . \end{aligned}$$

Für die Entwicklungskoeffizienten erhalten wir damit eine Bewegungsgleichung, die in Matrixschreibweise folgende Form hat:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \omega_0 & 0 \\ -\omega_0 & 0 & 2\omega_x \cos(\omega_L t) \\ 0 & -2\omega_x \cos(\omega_L t) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix}$$

Diese Gleichung ist identisch mit der klassischen Bewegungsgleichung für einen Drehimpuls. Die drei Entwicklungskoeffizienten sind die Komponenten eines Drehimpulsvektors im dreidimensionalen Raum. Die Kraft, welche dessen zeitliche Entwicklung bestimmt, entspricht somit einem Drehmoment. Die statische Komponente ω_0 wirkt entlang der z-Achse und die zeitabhängige ($2 \omega_x \cos(\omega_L t)$) entlang der x-Achse. Die beiden Komponenten haben üblicherweise eine sehr unterschiedliche Größenordnung. Die Stärke der statischen Komponente beträgt in der Optik etwa 10^{14} - 10^{15} Hz, die der oszillierenden ist üblicherweise kleiner als 10^9 Hz.

3.5.2 Freie Präzession

Die einzige analytische Lösung dieser Bewegungsgleichung finden wir für den trivialen Fall verschwindender Kopplung,

$$\omega_x = 0 \text{ ,}$$

d.h. für freie Atome. In diesem Fall ist die z-Komponente zeitunabhängig

$$s_z(t) = s_z(0) \text{ ,}$$

wie wir bereits bei der allgemeinen Diskussion der Zeitentwicklung gesehen hatten: die Diagonalelemente des Dichteoperators sind zeitunabhängig.

Es bleiben die beiden transversalen Komponenten, welche durch ω_0 aneinander gekoppelt sind:

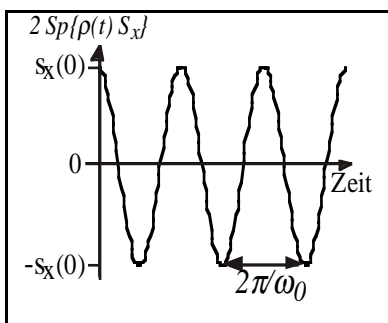
$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \omega_0 \\ -\omega_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \end{pmatrix} .$$

Die Kopplungsmatrix entspricht offenbar einer Drehmatrix. Die Lösung wird damit

$$s_x(t) = s_x(0) \cos(\omega_0 t) + s_y(0) \sin(\omega_0 t)$$

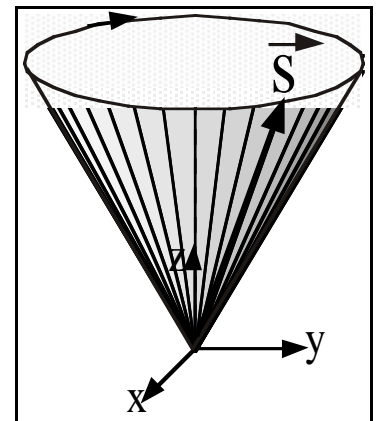
$$s_y(t) = s_y(0) \cos(\omega_0 t) - s_x(0) \sin(\omega_0 t) \text{ .}$$

Wenn wir dieses Resultat mit dem Resultat für die z-Komponente kombinieren, finden wir, daß der Pseudospin um die z-Achse präzediert, d.h. um das virtuelle Magnetfeld.



Für die optische Polarisation des Systems,

$$\begin{aligned} 2 \mu_E \text{Sp}\{\rho(t) S_x\} &= \mu_E s_x(t) = \\ &= \mu_E (s_x(0) \cos(\omega_0 t) + s_y(0) \sin(\omega_0 t)), \end{aligned}$$



entspricht diese Präzession einer Oszillation mit der Frequenz ω_0 , wie in der rechten Hälfte der Figur dargestellt. Diese Oszillation ist das quantenmechanische Analogon des oszillierenden Dipols der Lorentz-Lorenz Theorie.

3.5.3 Rotierendes Koordinatensystem

Die vorliegende Form der Bewegungsgleichung ist in zwei Beziehungen unbefriedigend: Im Fall verschwindender Kopplung finden wir eine Präzession des Pseudo-Spins mit der atomaren Resonanzfrequenz $\omega_0/2\pi$, welche im sichtbaren oder infraroten Teil des Spektrums von der Größenordnung von 10^{14} - 10^{15} Hz ist. Diese Präzessionsfrequenz ist nicht direkt beobachtbar. Hingegen maskiert sie langsamere Bewegungsprozesse, die eigentlich interessanter sind.

Das zweite Problem ist die Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators, resp. der Koeffizienten der Differentialgleichung: Dadurch existiert keine analytische Lösung. Beide Probleme können eliminiert werden wenn wir eine Koordinatentransformation auf die Bewegungsgleichungen anwenden, so daß sie nicht mehr im Laborsystem geschrieben werden. Wir verwenden statt dessen ein System, das gegenüber dem Laborsystem um die z-Achse rotiert. Indem wir uns mit diesem System mitdrehen klammern wir die schnelle Bewegung des pseudo-Spins aus der Betrachtung aus. Die selbe Transformation eliminiert gleichzeitig die Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators und ermöglicht es damit, eine analytische Lösung der Bewegungsgleichungen zu finden. Mathematisch entspricht diese Koordinatentransformation einer unitären Transformation, welche wir unten im Detail diskutieren. Physikalisch erhält man diese Transformation über eine Rotation des Koordinatensystems um die z-Achse. Weil ein rotierendes Koordinatensystem kein Inertialsystem ist, erwarten wir, daß die Bewegungsgleichungen korrigiert werden müssen wenn wir sie im rotierenden Koordinatensystem schreiben. Dies geschieht durch die Einführung eines zusätzlichen Terms, ähnlich wie der Zentrifugalkraft, resp. der Corioliskraft.

Für die Herleitung der Bewegungsgleichungen im rotierenden Koordinatensystem suchen wir zunächst die mathematische Form der Transformation. Anstelle der üblichen Basis $|g\rangle$, $|e\rangle$ benutzen wir eine zeitabhängige Basis

$$|g^r\rangle = |g\rangle e^{i\omega_L t/2} \quad |e^r\rangle = |e\rangle e^{-i\omega_L t/2} .$$

In Vektorschreibweise entspricht dies einer Transformation

$$\begin{pmatrix} |g^r\rangle \\ |e^r\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\omega_L t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_L t/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |g\rangle \\ |e\rangle \end{pmatrix} = U(t) \begin{pmatrix} |g\rangle \\ |e\rangle \end{pmatrix}$$

Wir können den Transformationsoperator U schreiben als

$$U(t) = e^{i\omega_L t S_z} ,$$

Tutorial: Funktion eines Operators

was einer Rotation um die z-Achse mit der Frequenz ω_L des Laserfeldes entspricht. Diese Wechselwirkungsdarstellung wird deshalb als rotierendes Koordinatensystem bezeichnet.

Zur Illustration berechnen wir die transversalen Komponenten $s_x(t)$, $s_y(t)$ eines Zustandes

$$\Psi(t) = \begin{pmatrix} e^{i\omega_L t/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\omega_L t/2} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega_L t/2} \\ e^{-i\omega_L t/2} \end{pmatrix}.$$

Wir erhalten

$$\langle \Psi | S_x | \Psi \rangle = c_1^* c_2 + c_2^* c_1 = \frac{1}{4} (e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t}) = \frac{1}{2} \cos(\omega_L t)$$

$$\langle \Psi | S_y | \Psi \rangle = -i c_1^* c_2 + i c_2^* c_1 = \frac{1}{2} \sin(\omega_L t),$$

also tatsächlich einen Zustand, der in der xy-Ebene um die z-Achse rotiert.

3.5.4 Transformation von Zuständen

Ein quantenmechanischer Zustand

$$\Psi(t) = c_g |g\rangle + c_e |e\rangle = c_g |g^r\rangle e^{-i\omega_L t/2} + c_e |e^r\rangle e^{i\omega_L t/2}$$

besitzt die beiden Darstellungen

$$\Psi^{\text{lab}}(t) = \begin{pmatrix} c_g \\ c_e \end{pmatrix} \quad \Psi^r(t) = \begin{pmatrix} c_g e^{-i\omega_L t/2} \\ c_e e^{i\omega_L t/2} \end{pmatrix} = U^{-1} \Psi^{\text{lab}}(t)$$

Der obere Index bezeichnet die Basiszustände, welche für die entsprechende Darstellung verwendet wurden. Die Transformation der Zustandsfunktion ist deshalb das Inverse der Transformation der Basiszustände.

3.5.5 Transformation von Operatoren

Die Transformation der Zustandsfunktion impliziert für die Transformation des Dichteoperators

$$\rho^r = (|\Psi\rangle\langle\Psi|)^r = U^{-1} |\Psi\rangle\langle\Psi| U = U^{-1} \rho U.$$

Die Transformationseigenschaften für die Observablen erhalten wir aus der Bedingung dass die Erwartungswerte unabhängig von der Basis sein müssen, in der sie berechnet werden:

$$\langle A \rangle = \text{Sp}\{\rho A\} = \text{Sp}\{\rho^r A^r\}.$$

Wir benutzen die Transformation für den Dichteoperator

$$\langle A \rangle = \text{Sp}\{\rho^r A^r\} = \text{Sp}\{U^{-1} \rho U A^r\} = \text{Sp}\{\rho U A^r U^{-1}\},$$

wobei im letzten Schritt die Invarianz der Spur unter zyklischen Vertauschungen verwendet wurde. Somit muß gelten

$$A = U A^r U^{-1} \quad \text{oder} \quad A^r = U^{-1} A U$$

Diese Beziehung gilt für alle Observablen. Lediglich der Hamiltonoperator ist eine Ausnahme, da er nicht nur eine Observable ist, sondern gleichzeitig der Erzeuger der Bewegung des Systems.

3.5.6 Transformation des Hamiltonoperators

Für die Herleitung der Bewegungsgleichung im rotierenden Koordinatensystem betrachten wir die zeitliche Ableitung des Zustandes

$$\frac{d}{dt} \Psi^r(t) = \frac{d}{dt} (U^{-1}(t) \Psi^{\text{lab}}(t)) = \dot{U}^{-1}(t) \Psi^{\text{lab}}(t) + U^{-1}(t) \frac{d}{dt} \Psi^{\text{lab}}(t) .$$

Wir benutzen die Schrödingergleichung im Laborsystem und schreiben den Zustand im rotierenden Koordinatensystem. Damit finden wir

$$\frac{d}{dt} \Psi^r(t) = \left(\dot{U}^{-1}(t) U(t) - U^{-1}(t) i \mathcal{H}^{\text{lab}} U(t) \right) \Psi^r(t) .$$

Der Hamiltonoperator soll der Erzeuger der zeitlichen Entwicklung bleiben. Deshalb müssen wir fordern, daß seine Darstellung im rotierenden Koordinatensystem gegeben ist durch

$$\mathcal{H}^r = U^{-1} \mathcal{H}^{\text{lab}} U + i \dot{U}^{-1} U .$$

Dies ist die allgemeine Form der Transformation des Hamiltonoperators. Zusätzlich zur üblichen Transformation eines Operators

$$U^{-1} \mathcal{H}^{\text{lab}} U$$

erhalten wir einen Korrekturterm

$$i \dot{U}^{-1} U ,$$

welcher nicht verschwindet wenn der Transformationsoperator U zeitabhängig ist.

- Er berücksichtigt die Tatsache daß das rotierende Koordinatensystem kein Inertialsystem darstellt und kann als eine Analogie zur Corioliskraft der klassischen Mechanik gesehen werden.
- Er hängt nicht vom Hamiltonoperator ab, sondern lediglich vom Transformationsoperator U .

3.5.7 Anwendung auf Blochgleichung

Wir wenden diese allgemeine Form auf den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{atom}} + \mathcal{H}_{\text{ww}} = -\omega_0 S_z - \omega_x S_x$$

an und finden

$$\mathcal{H}^r = U^{-1}(t) \mathcal{H}_{\text{atom}} U(t) + U^{-1}(t) \mathcal{H}_{\text{ww}} U(t) + i \dot{U}^{-1} U(t) .$$

Weil U und $\mathcal{H}_{\text{atom}}$ nur S_z enthalten ist der erste Term invariant unter der Transformation:

$$U^{-1}(t) \mathcal{H}_{\text{atom}} U(t) = \mathcal{H}_{\text{atom}} = -\omega_0 S_z .$$

Wegen

$$e^{-i\phi S_z} S_x e^{i\phi S_z} = S_x \cos\phi + S_y \sin\phi$$

gilt

$$\begin{aligned} U^{-1}(t) \mathcal{H}_{\text{ww}} U(t) &= -2 \omega_x \cos(\omega_L t) [S_x \cos(\omega_L t) + S_y \sin(\omega_L t)] \\ &= -2 \omega_x [S_x \cos^2(\omega_L t) + S_y \cos(\omega_L t) \sin(\omega_L t)] \\ &= -\omega_x S_x - \omega_x (S_x \cos(2\omega_L t) + S_y \sin(2\omega_L t)) . \end{aligned}$$

Schließlich ist

$$\dot{U}^{-1} U(t) = (d/dt e^{-i\omega_L t S_z}) e^{i\omega_L t S_z} = -i \omega_L S_z ,$$

so daß

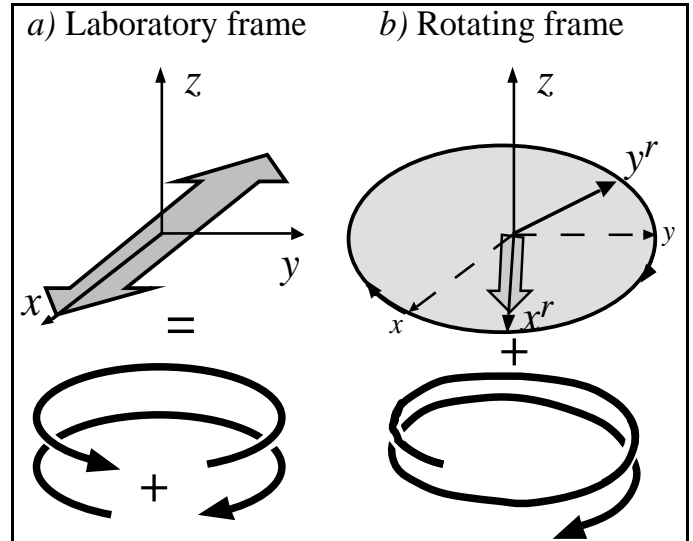
$$\mathcal{H}^r = -\Delta\omega_0 S_z - \omega_x S_x - \omega_x S_x \cos(2\omega_L t) - \omega_x S_y \sin(2\omega_L t)$$

mit

$$\Delta\omega_0 = \omega_0 - \omega_L .$$

Die Wechselwirkungsenergie mit dem statischen Magnetfeld ist somit um eine Photonenenergie reduziert. Da dieser Term die Präzession des Pseudospins um die z-Achse erzeugt bedeutet dies dass die Präzessionsgeschwindigkeit im rotierenden Koordinatensystem um die Laserfrequenz reduziert wurde - in Übereinstimmung mit der Erwartung für einen Übergang in ein rotierendes Koordinatensystem. Der Wechselwirkungsterm besteht aus zwei Teilen, einem zeitunabhängigen und einem zeitabhängigen Teil, der mit der doppelten Laserfrequenz um die z-Achse rotiert.

Diese Aufteilung hat auch eine physikalische Interpretation: Die beiden Beiträge entsprechen den zirkular polarisierten Komponenten eines linear polarisierten Feldes. Diejenige Komponente, welche im Laborsystem in die gleiche Richtung rotiert wie das Koordinatensystem wird im rotierenden System zeitunabhängig, während die andere Komponente hier mit der doppelten Frequenz rotiert.



3.5.8 Näherungsform

Wir können eine vereinfachte Bewegungsgleichung gewinnen wenn wir die rasch rotierende Komponente vernachlässigen. Man kann durch Störungsrechnung zeigen, daß diese Komponente in niedrigster Ordnung vernachlässigt werden kann, also dann wenn das Wechselfeld klein ist im Vergleich zum statischen Feld. Ich möchte mich hier aber auf qualitative Argumente beschränken: Die Möglichkeit, diesen Term zu vernachlässigen ergibt sich daraus, daß sein zeitlicher Mittelwert verschwindet. Diese Näherung ist die direkte Analogie zur Vernachlässigung derjenigen Terme des Jaynes-Cummings Operators, die nicht energieerhaltend sind, also z.B. denjenigen Term, der gleichzeitig das Atom anregt und ein Photon erzeugt.

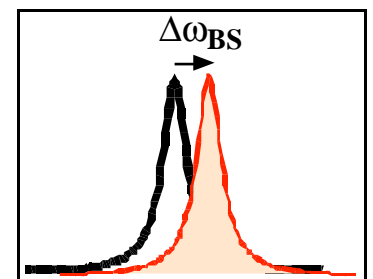
Der Hamiltonoperator für das rotierende Koordinatensystem wird dann

$$\mathcal{H}^r \approx -\Delta\omega_0 S_z - \omega_x S_x$$

Diese Näherung, bei der man die gegenläufig rotierende Komponente vernachlässigt, wird als „rotating wave approximation“ bezeichnet. In zweiter Ordnung erzeugt die gegenläufige Komponente eine Verschiebung der Resonanzfrequenz um den Betrag

$$\Delta\omega_{BS} = \omega_x^2 / (4\omega_L),$$

welche in der magnetischen Resonanz als Bloch-Siegert shift bezeichnet wird (F. Bloch and A. Siegert, 'Magnetic resonance for nonrotating Fields', Phys. Rev. 57, 522-527 (1940).) und in der Laserspektroskopie als dynamischer Stark-Effekt. Dieser nichtresonante Effekt skaliert invers proportional zur Resonanzfrequenz und direkt proportional mit der Intensität. Er ist vor allem dann wichtig wenn bei hohen Intensitäten mit hoher Auflösung gearbeitet wird.

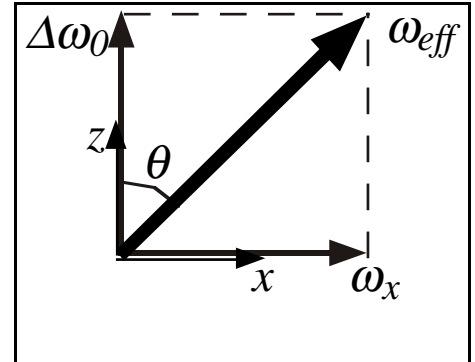


3.6 Laserpulse

3.6.1 Eigenwerte und Eigenvektoren

Wie andere lineare Differentialgleichungssysteme kann man die quantenmechanischen Bewegungsgleichungen dadurch lösen, daß man die Eigenwerte und Eigenvektoren bestimmt. Im Fall des Zweiniveausystems können wir dies direkt erreichen indem wir das Feynman-Vernon-Hellwarth Bild verwenden. Es liefert die Eigenwerte und Eigenvektoren über rein geometrische Überlegungen, ohne eine eigentliche Diagonalisierung des Hamiltonoperators.

Wie bei der Einführung des Pseudospins gezeigt und beim Übergang ins rotierende Koordinatensystem benutzt kann man die beiden Komponenten des Hamiltonoperator als Magnetfelder interpretieren, welche an das magnetische Moment des Pseudospins koppeln. Die beiden Komponenten sind parallel zur z-, resp. x-Achse ausgerichtet. In Frequenzeinheiten ist die z-Komponente durch die Frequenzverstimung $\Delta\omega_0 = \omega_0 - \omega_L$ gegeben und die x Komponente ω_x entspricht der Wechselwirkung zwischen dem atomaren Dipolmoment und dem Laserfeld. Ihre Vektorsumme liegt somit in der xz-Ebene. Das effektive Feld ω_{eff} , die Vektorsumme der beiden Komponenten, liegt in der xz Ebene, unter einem Winkel



$$\theta = \tan^{-1} (\omega_x / \Delta\omega_0)$$

von der z-Achse. Die Stärke dieses Feldes ist

$$\omega_{\text{eff}} = (\Delta\omega_0^2 + \omega_x^2)^{1/2} .$$

Wir wissen bereits, daß der Hamiltonoperator diagonal ist, wenn wir nur eine Feldkomponente haben, welche parallel zur z-Achse ausgerichtet ist. Es muß somit möglich sein, den Hamiltonoperator auf Diagonalform zu bringen indem wir die z-Achse des Koordinatensystems in Richtung des effektiven Feldes wählen. Ausgehend vom rotierenden Koordinatensystem xyz erreicht man dies, indem man eine (zeitunabhängige) Rotation um die y-Achse durchführt:

$$\mathcal{H}^d = e^{i\theta S_y} \mathcal{H}^r e^{-i\theta S_y} = - \omega_{\text{eff}} S_z' .$$

Die beiden Exponentialoperatoren rotieren den Hamiltonoperator um einen Winkel θ von der z-Achse in die Richtung des effektiven Feldes. Der obere Index d zeigt an, daß der Hamiltonoperator in dieser Basis diagonal ist.

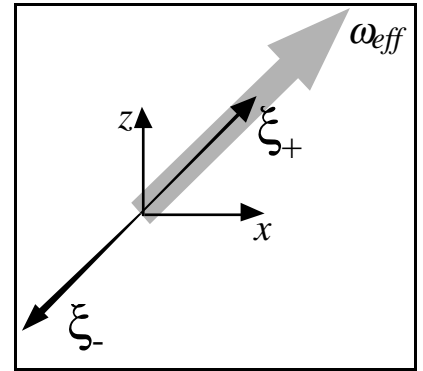
In dieser Basis sehen wir sofort, daß die Eigenwerte

$$\lambda_{\pm} = \pm 1/2 \omega_{\text{eff}} = \pm 1/2 (\omega_x^2 + \Delta\omega_0^2)^{1/2}$$

sind.

Die Eigenvektoren sind parallel, resp. antiparallel zur Richtung des effektiven Feldes. In der Basis des rotierenden Koordinatensystems ist ihre Darstellung

$$\xi_+ = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad \xi_- = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} \\ \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$



Diese Zustände sind Superpositionszustände zwischen Grund- und angeregtem Zustand. In einem quantenmechanischen Bild ist das Photon aufgrund der Wechselwirkung teilweise an das Atom gebunden, aber es wird nicht vollständig absorbiert. Man bezeichnet diese Zustände häufig als „dressed states“, also bekleidete Zustände, in Analogie zur Situation die wir beim Jaynes-Cummings Modell diskutiert haben.

3.6.2 Verstimmungsabhängigkeit der Energien

Die Energie dieses Zustandes hängt nicht nur vom internen Hamiltonoperator des Atoms ab, sondern auch von der Frequenz und der Amplitude des Laserfeldes.

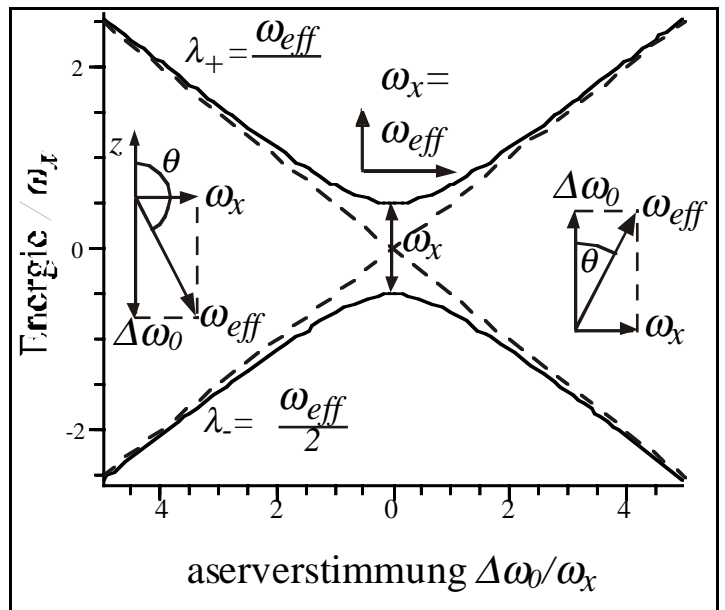
Die Figur zeigt die Abhängigkeit der Energien der bekleideten Zustände von der Laserfrequenz. Wir betrachten zunächst den Fall daß die Kopplung ans äußere Feld verschwindet, $\omega_x \rightarrow 0$. Die Eigenwerte werden dann

$$\lambda_{\pm} = \pm 1/2 \Delta\omega_0^2,$$

sind also direkt gleich der Laserverstimmung. Am Ursprung der x-Achse, bei $\Delta\omega_0 = 0$, sind die beiden Zustände somit entartet.

Wenn wir die Kopplung ans äußere Feld mit berücksichtigen, so verschwindet diese Entartung. Offenbar sind die Zustände an dieser Stelle um $\pm\omega_x$ aufgespalten.

Wird die Laserverstimmung groß gegenüber der Kopplungsstärke, so nähern sich die Energien wieder dem Fall des ungestörten Atoms, wie man leicht aus der geometrischen Darstellung der Feldkomponenten ersehen kann. Offenbar ist also der Einfluss der Kopplung auf die Energien am größten wenn die Laserverstimmung verschwindet, also dann wenn der Laser resonant mit dem atomaren Übergang ist.



Der Effekt des Lasers ist nicht nur für die Energien am größten, sondern auch für die Eigenvektoren. Dies kann man ebenfalls sehr einfach mit geometrischen Argumenten nachvollziehen: auf der Resonanz ist die Richtung des effektiven Feldes orthogonal zur

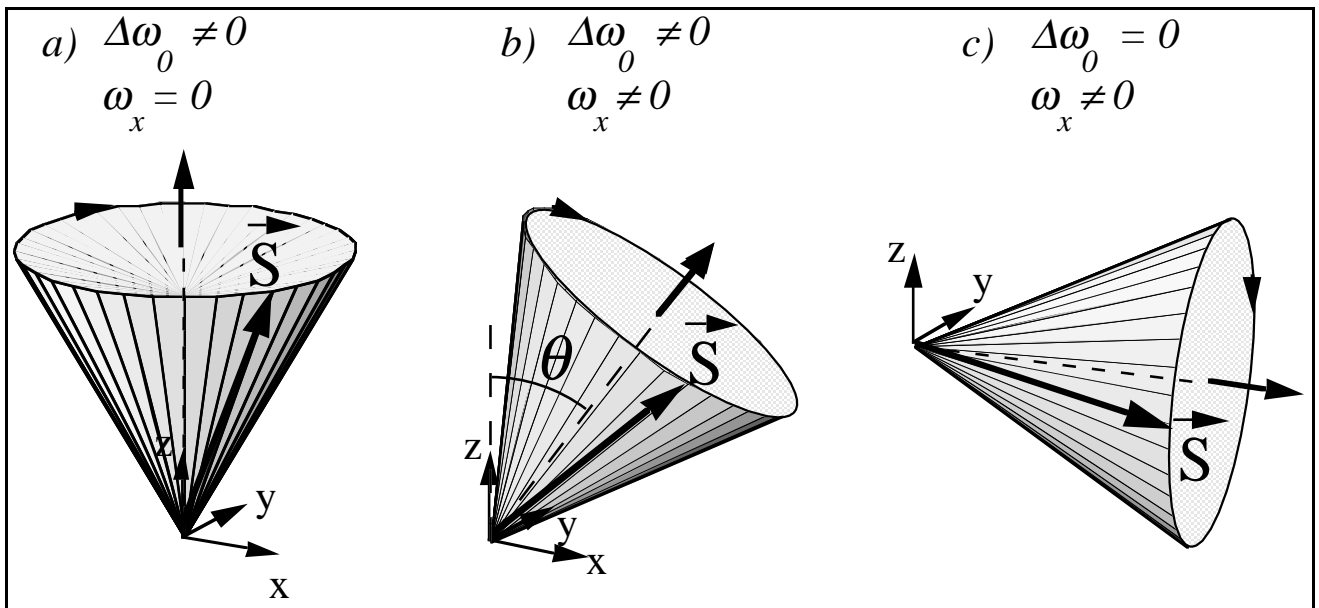
Richtung des statischen Feldes. Die Eigenvektoren des gekoppelten Systems, welche parallel zum effektiven Feld liegen, sind somit orthogonal zu den Eigenvektoren des ungekoppelten Systems. Dies ist in der Figur durch die kleinen Bilder dargestellt, welche die Richtung des effektiven Feldes für negative, verschwindende, und positive Laserverstimmung zeigen.

3.6.3 Präzession und Pulse

Die zeitliche Entwicklung des Systems ist damit beinahe trivial. Die Bewegungsgleichung für die Komponenten des Dichteoperators lautet

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & \omega_0 & \\ -\omega_0 & & \\ & -\omega_x & \omega_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix}.$$

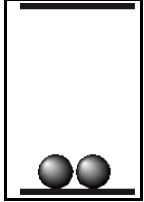
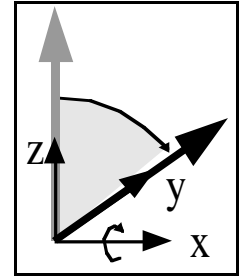
Wie wir beim freien Atom gesehen hatten erhalten wir in einem statischen Feld eine Präzessionsbewegung des Spinvektors um dieses Feld. Dies entspricht aber gerade der jetzigen Situation. Das Feld ω_{eff} ist hier um den Winkel θ von der z-Achse geneigt, so daß die Präzessionsbewegung um diese Richtung erfolgen muß.



Die Anfangsbedingungen bestimmen die Details dieser Präzessionsbewegung. Die Länge des Spinvektors und der Winkel zwischen dem Vektor und der Präzessionsachse bleiben hierbei konstant.

Eine besonders wichtige Anfangsbedingung ist das thermische Gleichgewicht. Der Pseudospinvektor ist dann parallel zur positiven z -Achse ausgerichtet. Wenn wir uns weiter auf den Fall der resonanten Einstrahlung konzentrieren sehen wir, daß das effektive Feld parallel zur x -Achse liegt, daß der Pseudospin somit in der yz -Ebene präzediert.

Die Präzessionsbewegung dauert so lange wie die Kopplung an das äußere Feld. Es ist somit möglich, beliebige Präzessionswinkel einzustellen, indem man die Stärke der Kopplung und die Dauer der Einstrahlung wählt. Ein wichtiger Fall ist z.B. die Drehung um 90 Grad, also ein Präzessionswinkel von $\pi/2$. Während der Ausgangszustand

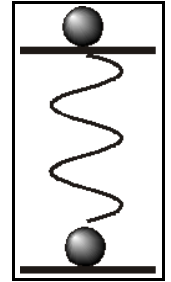


$$(s_x, s_y, s_z) = (0, 0, 1)$$

einer Populationsdifferenz entspricht, ist im Endzustand

$$(s_x, s_y, s_z) = (0, 1, 0)$$

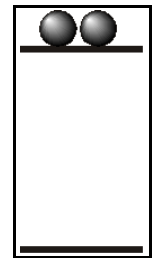
die Populationsdifferenz Null, doch die transversale Komponente des Pseudospins maximal. Wie wir gezeigt hatten entspricht diese im Fall des optischen Systems einem oszillierenden Dipolmoment. Eine Rotation um $\pi/2$ wird als 90 Grad oder $\pi/2$ Puls bezeichnet. Ein solcher Puls wird dazu verwendet, einen Zustand mit möglichst großem optischen Dipolmoment zu erzeugen.



Ein weiterer wichtiger Fall entspricht dem π -Puls, also einer Drehung um 180 Grad. Aus dem thermischen Anfangszustand erhält man somit den Endzustand

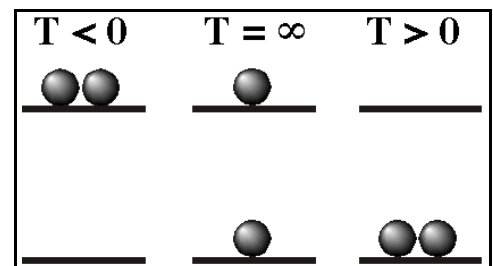
$$(s_x, s_y, s_z) = (0, 0, -1),$$

was offenbar einem Austausch der Populationen zwischen Grund- und angeregtem Zustand entspricht. Man spricht von einer Populationsinversion.



Als eine Art Nebenrechnung kann man versuchen, einen solchen Zustand durch eine Boltzmann-Verteilung darzustellen.

Wie man leicht sieht entspricht ein solcher Zustand einer negativen Temperatur. Da Zustände mit höherer Temperatur allgemein Zuständen mit höherer Energie entsprechen schließen wir, daß negative Temperaturen höher sind als alle positiven Temperaturen.



3.7 Stationäre Lösung

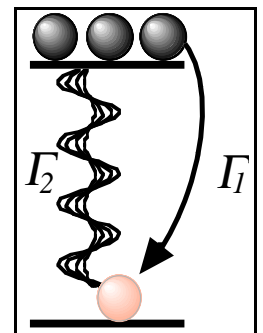
3.7.1 Relaxationsprozesse

Die Präzessionsbewegung, die wir als Lösung der Hamilton'schen Bewegungsgleichung kennengelernt haben erklärt natürlich nicht die Wechselwirkung zwischen Licht und Atomen allgemein. In tatsächlichen Experimenten erreichen die Systeme einen stationären Zustand, ihre Eigenschaften werden zeitunabhängig (abgesehen von der Oszillation des elektrischen Dipolmoments mit der Laserfrequenz). Die zeitliche Entwicklung zu diesem Gleichgewichtszustand und den Zustand selber können wir nur bestimmen wenn wir auch die Relaxationsprozesse berücksichtigen. Darunter faßt man alle Prozesse zusammen, die nicht im Hamiltonoperator enthalten sind. Wir gehen hier nicht auf die physikalischen Hintergründe ein, sondern beschreiben sie mit Hilfe der beiden phänomenologischen Parameter Γ_1 und Γ_2 .

Γ_1 ist die reziproke Lebensdauer des angeregten Zustandes und beschreibt den Transfer von Population vom angeregten Zustand zum Grundzustand

$$\dot{\rho}_{11} = -\dot{\rho}_{22} = \Gamma_1 \rho_{22} ,$$

d.h. pro Zeiteinheit fällt ein konstanter Anteil in den Grundzustand zurück.



Wir möchten die Relaxation in die Bewegungsgleichung für den Pseudospin einsetzen. Die longitudinale Relaxation betrifft zunächst nur die z-Komponente

$$s_z = (\rho_{11} - \rho_{22}) = ((1 - \rho_{22}) - \rho_{22}) = 1 - 2\rho_{22} ,$$

wobei wir benutzt haben daß die Summe der Populationen gleich 1 ist. Die Population des angeregten Zustandes kann somit geschrieben werden als

$$\rho_{22} = (1 - s_z)/2 .$$

Damit wird der Beitrag von Γ_1 zur Bewegungsgleichung

$$\dot{s}_z = \dot{\rho}_{11} - \dot{\rho}_{22} = 2 \Gamma_1 \rho_{22} = \Gamma_1 (1 - s_z) .$$

In freien Atomen wird dieser Prozeß durch die spontane Emission getrieben, aber die Wechselwirkung mit der Umgebung kann ebenfalls zu Relaxationsprozessen führen. Darunter fallen z.B. die Wechselwirkung mit anderen Atomen oder räumliche Bewegungen, wie z.B. Phononen in Festkörpern.

Die transversalen Komponenten zerfallen mit der Rate Γ_2

$$\dot{s}_x = -\Gamma_2 s_x \quad \dot{s}_y = -\Gamma_2 s_y ,$$

welche ebenfalls einen Beitrag der spontanen Emission beinhaltet: wenn der angeregte Zustand zerfällt muß auch die Superposition zwischen Grund- und angeregtem Zustand zerfallen. In freien Atomen beträgt die transversale Relaxationsrate die Hälfte der longitudinalen Rate,

$$\Gamma_2 = \Gamma_1/2.$$

Zusätzliche Beiträge stammen von der Wechselwirkung mit der Umgebung. Da bei der Relaxation der transversalen Komponenten keine Energieübertragung erfolgt, sind diese Prozesse meist effizienter als die Relaxation der Populationen, so daß die transversale Relaxationsrate meistens größer ist als die longitudinale, $\Gamma_2 > \Gamma_1$. Insbesondere führen auch inhomogene Wechselwirkungen wie der Dopplerschift zum Zerfall der Kohärenz.

3.7.2 Die optische Blochgleichung mit Relaxation

Um die vollständige Lösung zu erhalten gehen wir aus vom Hamilton'schen Teil der Bewegungsgleichung. Unter Berücksichtigung der Relaxationsprozesse wird daraus

$$\begin{aligned} \dot{s}_x &= \Delta\omega_0 s_y - \Gamma_2 s_x \\ \dot{s}_y &= -\Delta\omega_0 s_x + \omega_x s_z - \Gamma_2 s_y \\ \dot{s}_z &= -\omega_x s_y + \Gamma_1(1-s_z). \end{aligned}$$

Diese Bewegungsgleichung für das quantenmechanische Zweiniveausystem war von Felix Bloch untersucht worden, als er die magnetische Resonanz von Spin-1/2 Systemen betrachtete (F. Bloch, 'Nuclear induction', Phys. Rev. 70, 460-485 (1946)). Nachdem Feynman, Vernon und Hellwarth gezeigt haben, daß die gleichen Gleichungen auch optische Zweiniveausysteme beschreiben, wurden sie in der optischen Spektroskopie als die optischen Blochgleichungen bekannt (L. Allen and J.H. Eberly, 'Optical resonance and two-level atoms', Dover Publications, Mineola, NY (1987)).

3.7.3 Stationäre Lösung

Die Blochgleichung hat die folgende stationäre Lösung:

$$\begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix}_\infty = \frac{1}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 + \omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} \begin{pmatrix} \Delta\omega_0 \omega_x \\ \omega_x \Gamma_2 \\ \Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 \end{pmatrix}.$$

In freien Atomen beträgt die transversale Relaxationsrate die Hälfte der longitudinalen. In diesem Fall vereinfacht sich der Ausdruck zu

$$\begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix}_\infty = \frac{1}{\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2 + 2\omega_x^2} \begin{pmatrix} 4\Delta\omega_0\omega_x \\ 2\omega_x\Gamma_1 \\ \Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2 \end{pmatrix}.$$

Bevor wir diese Lösung im Detail diskutieren schreiben wir sie um indem wir den Sättigungsparameter

$$s = \frac{2\omega_x^2}{\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2}.$$

eingeführen. Der Zähler ist proportional zum Quadrat des Dipolmatrixelementes und zum Quadrat der Feldstärke, d.h. proportional zur Intensität des Lasers und damit zur Anzahl der einfallenden Photonen. Der Nenner enthält die Relaxationsrate und die Laserverstimmung und kann als die Tendenz des Systems, Photonen nicht aufzunehmen, resp. sie wieder zu emittieren verstanden werden. Der Sättigungsparameter ist eine dimensionslose Größe, welche proportional zur Intensität des Laserfeldes ist. Wir können ihn als Parametrisierung der Laserintensität betrachten, wobei die Einheiten an das System angepaßt sind.

Damit wird der stationäre Zustand

$$\begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix}_\infty = \frac{s}{1+s} \begin{pmatrix} 2\Delta\omega_0/\omega_x \\ \Gamma_1/\omega_x \\ 1/s \end{pmatrix}$$

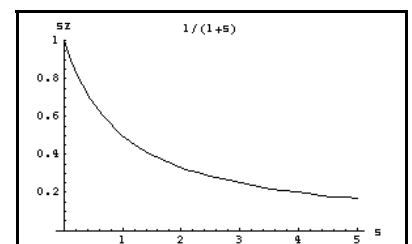
Für $s=1$ verringert sich die longitudinale Komponente $s_z = 1/(1+s)$ auf $1/2$, so daß sich ein Viertel der Atome sich im angeregten Zustand befindet ($3/4$ in $|g\rangle$). $s < 1$ entspricht offenbar "niedriger" Intensität, d.h. einer Intensität, die noch störungstheoretisch behandelt werden kann, während $s > 1$ starke Sättigung bedeutet.

3.7.4 Intensitätsabhängigkeit

Für freie Atome wird dieser Wert erreicht wenn

$$\omega_x^2 = 1/2 \Gamma_1^2 + 2 \Delta\omega_0^2.$$

Bei dieser Intensität wird also der Sättigungsparameter eins und die Populationsdifferenz ist auf die Hälfte reduziert. Für noch höhere Intensität nimmt die Populationsdifferenz weiter ab, doch sie verschwindet erst für unendlich hohe Intensität. Für alle endlichen Intensitäten bleibt die Population des angeregten Zustandes unter derjenigen des Grundzustandes - dies im Gegensatz zur Anregung durch einen π -Puls.



Eine weitere interessante Größe ist die Rate r , mit der Photonen gestreut werden. Wir berücksichtigen hier nur die spontane Emission aus dem angeregten Zustand. Die Zahl der Atome im angeregten Zustand beträgt

$$\rho_{22} = \frac{1}{2}(1 - s_{z\infty}) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 + \omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} \right) = \frac{\Gamma_2}{2\Gamma_1} \frac{\omega_x^2}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 + \omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} .$$

Diese multiplizieren wir mit der spontanen Emissionsrate Γ_1 und erhalten

$$r = \frac{\Gamma_2}{2} \frac{\omega_x^2}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 + \omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} .$$

Energieerhaltung erfordert daß diese Rate auch die Rate ist, mit der Photonen aus dem Laserstrahl entfernt werden, d.h. mit der sie absorbiert werden.

Bei geringer Intensität, $\omega_x \ll \Gamma_1, \Gamma_2$ können wir die Rate annähern mit

$$r \approx \frac{\omega_x^2 \Gamma_2}{2(\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2)} .$$

d.h. sie wird proportional zur Laserintensität. Für niedrige Intensitäten ist die Absorption (d.h. das Verhältnis von gestreuter zu einfallender Leistung) somit konstant. Wird der dritte Term im Nenner aber groß gegen die beiden ersten, so finden wir

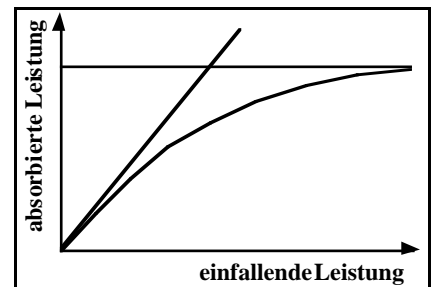
$$r \rightarrow = \frac{\Gamma_2}{2} \frac{\omega_x^2}{\omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} = \Gamma_1/2 .$$

Dies entspricht auch den Erwartungen: bei hoher Sättigung befindet sich die Hälfte der Atome im angeregten Zustand, so daß die Anzahl der gestreuten Photonen bei $\Gamma_1/2$ sätigt.

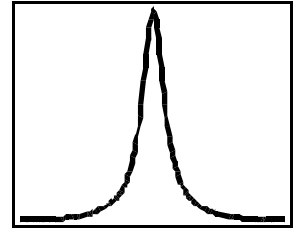
Die Streurrate fängt somit zunächst proportional zur Intensität an und nähert sich dem Grenzwert $\Gamma_1/2$.

3.7.5 Verstimmungsabhängigkeit

Die Verstimmungsabhängigkeit der Streurrate gibt uns somit die Form der Absorptionslinie. Man erkennt leicht, daß die Funktion ihr Maximum erreicht wenn die Verstimmung verschwindet, $\Delta\omega_0 = 0$.



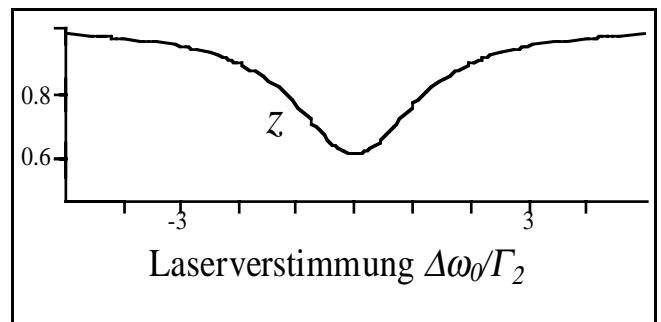
Für große Verstimmungen, $\Delta\omega_0 \gg \Gamma_2$, ω_x nimmt die Funktion quadratisch mit der Verstimmung ab. Ihre Form entspricht somit qualitativ der Lorentzlinie. Die Analogie wird exakt wenn man den Term $\omega_x^2 \Gamma_2 / \Gamma_1$ im Nenner vernachlässigt, was dann möglich ist, wenn die Intensität niedrig ist.



Die Populationsdifferenz s_z variiert mit der Verstimmung wie

$$s_{z\infty} = \frac{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 + \omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} = 1 - \frac{\omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 + \omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}}$$

Der Nenner wird auf der Resonanz minimal. Der Bruch wird somit maximal und die Funktion insgesamt wieder minimal. Mit zunehmender Verstimmung steigt die Funktion an und nähert sich asymptotisch dem Wert 1 wenn der Verstimmungsterm groß wird gegenüber den anderen Termen



$$\Delta\omega_0^2 \gg \Gamma_2^2 + \omega_x^2 \Gamma_2 / \Gamma_1.$$

Somit bleibt die Populationsdifferenz relativ ungestört wenn die Verstimmung groß wird.

3.7.6 Transversale Komponenten: Absorption / Dispersion

Wir haben aber bei der Diskussion des klassischen Lorentz-Lorenz Modells gesehen, daß die Absorption und die Dispersion aus dem oszillierende elektrischen Dipolmoment berechnet werden können. Dies ist auch im halbklassischen Modell möglich. Hier wird das Dipolmoment durch die transversalen Komponenten des Pseudospins beschrieben:

$$P = \text{Sp}\{\rho \hat{d}\} = 2 \mu_e \text{Sp}\{\rho S_x\} = \mu_e s_x .$$

Das Außerdiagonalelement des Dichteoperators gibt somit direkt die Amplitude des oszillierenden Dipolmomentes an.

Die Rechnungen, die wir hier durchführen, sind alle im rotierenden Koordinatensystem. Beim Übergang zum Laborsystem werden die x- und y-Komponenten gemischt. Beide bezeichnen das gleiche oszillierende Dipolmoment, sie sind lediglich um 90 Grad phasenverschoben. Für das transmittierte Lichtfeld ist deshalb direkt die komplexe optische Polarisation

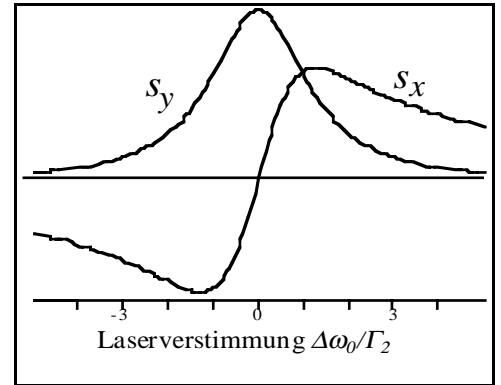
$$s_{xy} = s_x + i s_y$$

die Quelle des optischen Feldes. In direkter Analogie zur Diskussion von Absorption und Emission beim Lorentz-Lorenz Modell können wir auch hier voraussagen, daß Real- und Imaginärteil zu Dispersion und Absorption führen.

Bei den transversalen Termen

$$\begin{pmatrix} s_x \\ s_y \end{pmatrix}_\infty = \frac{\omega_x}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 + \omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}} \begin{pmatrix} \Delta\omega_0 \\ \Gamma_2 \end{pmatrix}.$$

beträgt der Gleichgewichtswert für große Verstimmung offenbar Null, da hier der Verstimmungsterm im Nenner dominiert. Allerdings fällt die x-Komponente mit $1/\Delta\omega_0$ ab, die y-Komponente mit $1/\Delta\omega_0^2$.



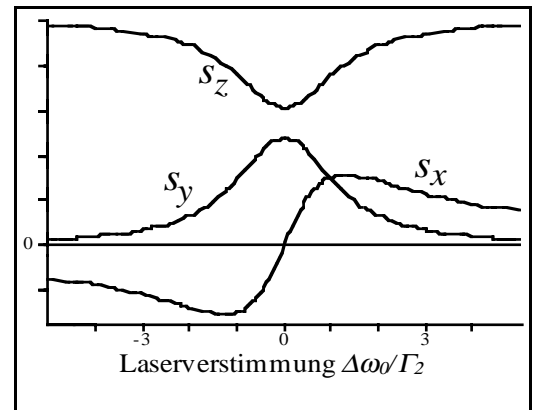
Das Verhalten bei der Resonanz ist für die beiden Terme unterschiedlich: Die x-Komponente, welche im Zähler proportional zu $\Delta\omega_0$ ist, weist auf der Resonanz einen Nulldurchgang auf, während die y-Komponente hier ihr Maximum erreicht.

Die beiden Kurven zeigen offenbar qualitativ das gleiche Verhalten wie im Falle des Lorentz-Lorenz Modells. Für kleine Intensitäten,

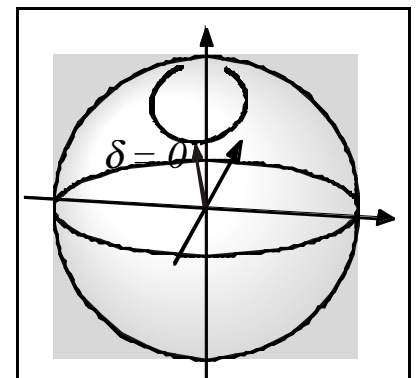
$$\omega_x^2 \ll \Gamma_1 \Gamma_2, \Delta\omega_0^2 \Gamma_1/\Gamma_2,$$

erhalten wir das bekannte Lorentzprofil der Breite Γ_2 . Der dritte Term im Nenner beschreibt den Effekt einer Leistungsverbreiterung, also einer Verbreiterung der Resonanzlinie bei hohen Leistungen.

Die Figur zeigt die Abhängigkeit der drei Komponenten des Pseudospins von der normierten Laserverstimmung $\delta = \Delta\omega_0/\Gamma_2$ für alle drei Komponenten. Die transversalen Komponenten beschreiben Absorption und Dispersion des Mediums. Im Grenzfall geringer Intensität ($s \rightarrow 0$), sind diese Resultate identisch wie diejenigen der Lorentz-Lorenz Theorie. Die z-Komponente, welche die Populationsdifferenz darstellt, strebt für große Verstimmung gegen 1, was zeigt, daß sich die Atome dann hauptsächlich im Grundzustand aufhalten. In der Nähe der Resonanz hingegen nimmt die Population des angeregten Zustandes mit zunehmender Laserintensität zu.



Mit der Verstimmung ändert sich bei niedriger Leistung die Amplitude des Pseudospin-Vektors nur wenig. Die Richtung hingegen kann stärker variieren. Hier ist die Richtung für eine Reihe von Verstimmungen dargestellt. Bei großen Verstimmungen liegt er nahe bei der z-Achse, während bei resonanter Einstrahlung (Pfeil) die Auslenkung am größten ist.



3.7.7 Vergleich klassisches / quantenmechanisches Modell

Der wichtigste Unterschied zwischen dem klassischen und dem quantenmechanischen Dipolmoment ist die maximale Größe, die das induzierte Dipolmoment erreichen kann. Im klassischen Fall hatten wir gefunden, daß das induzierte Dipolmoment proportional zum elektrischen Feld ist,

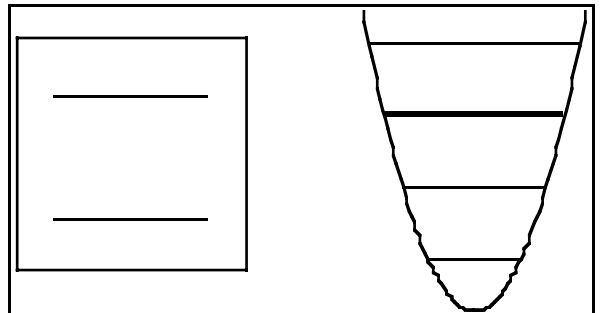
$$P = \chi \epsilon_0 \vec{E} .$$

Damit kann das induzierte Dipolmoment beliebig groß werden wenn nur das Anregungsfeld entsprechend stark ist. Im quantenmechanischen Fall hingegen kann das induzierte Dipolmoment eine maximale Größe nicht überschreiten. Mathematisch wird diese maximale Größe durch die Bedingung für die Spur des Dichteoperators gegeben

$$\text{Sp}\{\rho^2\} = 1/2(1+s_x^2+s_y^2+s_z^2) \leq 1 \text{ oder } s_x^2+s_y^2+s_z^2 \leq 1.$$

Im FVH-Bild impliziert diese Beziehung daß die Länge des Spinvektors beschränkt ist: Der Vektor muß innerhalb der Einheitskugel liegen. Endet er auf der Kugeloberfläche, so befindet sich das System in einem reinen Zustand, d.h. alle beteiligten Atome sind im gleichen quantenmechanischen Zustand. Dies sind genau diejenigen Zustände, die mit Hilfe eines Zustandsvektors beschrieben werden können. Für einen gemischten Zustand ($\text{Sp}\{\rho^2\} < 1$), kann der Vektor kürzer sein, aber nie länger.

Der Unterschied kann auch auf die Struktur der Energieniveaus zurückgeführt werden: Auch in der Quantenmechanik können Oszillatoren beliebig große Auslenkung erfahren, sofern es sich z.B. um harmonische Oszillatoren handelt. Der Grund ist der, daß ein harmonischer Oszillator ein nach oben unbegrenztes Spektrum besitzt. Ein Zweiniveausystem, hingegen, ist sowohl nach unten wie nach oben beschränkt. Jedes Atom kann deshalb maximal ein Photon absorbieren, während ein harmonischer Oszillator immer ein weiteres Photon absorbieren und damit in einen höheren Zustand übergehen kann. Die Beschränkung der Energieaufnahme durch die quantenmechanische Struktur limitiert auch die Oszillationsamplitude.



Für kleine Amplituden,

$$s_x, s_y \ll 1, \quad s_z \approx 1,$$

bei denen sich das System hauptsächlich im Grundzustand befindet, verhält sich das quantenmechanische Zweiniveausystem wie ein klassischer Dipol. Der stationäre Zustand wird hier

$$(s_x + i s_y)_\infty \sim \omega_x (\Delta\omega_0 + i \Gamma_2) / (\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2).$$

Wir vergleichen dies mit dem Lorentz-Lorenz Modell, wo die Schwingungsamplitude

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

beträgt. Offenbar sind die beiden Resultate voll kompatibel.

Dies ist auch der Bereich, in dem Störungsrechnung nützlich ist. Das Resultat der Störungsrechnung ist deshalb identisch zum Resultat des klassischen harmonischen Oszillators des Lorentz-Lorenz Modells (W. Heitler, 'The quantum theory of radiation', Dover Publications, New York (1953).). Bis zur Entwicklung des Lasers war es in der Optik selten möglich, diesen Bereich zu verlassen.