

Laserspektroskopie

Dieter Suter

Wintersemester 06/07

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	8
1.1	Organisatorisches	8
1.2	Literatur	8
1.3	Wechselwirkung von Licht und Materie	8
1.3.1	Absorption und Streuung	9
1.3.2	Dispersion	9
1.3.3	Materialeigenschaften und mikroskopische Theorien	10
1.4	Formen der Spektroskopie	11
1.4.1	Spektralbereiche	11
1.4.2	Wechselwirkungen	12
1.4.3	γ -Strahlen	12
1.4.4	Röntgenstrahlen	14
1.4.5	Sichtbares Licht	14
1.4.6	Infrarot	15
1.4.7	Mikrowellen	16
1.4.8	ESR	17
1.4.9	NMR	18
1.4.10	Informationsgehalt der NMR	19
1.4.11	Teilchen	20
1.5	Laser Anwendungen	20
1.5.1	Nichtphysikalische Anwendungen	20
1.5.2	Physikalische Anwendungen	20
2	Laser	22
2.1	Grundlagen	22
2.1.1	Absorption und Emission	22
2.1.2	Inversion und Verstärkung	22
2.1.3	Die Lasergleichung	23
2.1.4	Historische Entwicklung	24
2.1.5	Eigenschaften von Laserlicht	24
2.2	Moden und Resonatoren	25
2.2.1	Longitudinale Moden	25
2.2.2	Transversale Moden	25
2.2.3	Schmalbandige Laser	27
2.2.4	Pulslaser	28
2.2.5	Güteschaltung	29
2.2.6	Modenkopplung	29
2.2.7	Attosekunden-Pulse	30
2.3	Lasermedien	31

2.3.1	Farbstoffe	31
2.3.2	Molekulare Gaslaser	32
2.3.3	Atomare Gaslaser	33
2.3.4	Festkörperlaser: Festfrequenzlaser	34
2.3.5	Durchstimmbare Festkörperlaser	35
2.3.6	Halbleiterlaser	36
2.3.7	Freie Elektronen Laser (FEL)	38
2.4	Optische Frequenzmischung	38
2.4.1	Nichtlineare Optik	38
2.4.2	Phasenanpassung	39
2.4.3	Optischer parametrischer Oszillator (OPO)	40
3	Licht-Materie Wechselwirkung	41
3.1	Klassische Dispersionstheorie	41
3.1.1	Phänomenologie	41
3.1.2	Das Lorentz-Lorenz Modell	41
3.1.3	Bewegungsgleichung	43
3.1.4	Lösung	43
3.1.5	Resonanzlinien	43
3.1.6	Optische Polarisation	44
3.1.7	Lichtausbreitung	45
3.1.8	Absorption und Dispersion	46
3.2	Das Jaynes-Cummings Modell	47
3.2.1	System	47
3.2.2	Quantisierung des Feldes	47
3.2.3	Wechselwirkung	48
3.2.4	Reduzierte Wechselwirkung	49
3.2.5	Modell und Wirklichkeit	50
3.2.6	Zustände und Energien	50
3.2.7	Dynamik	51
3.2.8	Zustände der Feldmode	52
3.2.9	Kopplung an thermischen Zustand	53
3.2.10	Kopplung an kohärenten Zustand	54
3.2.11	Revival	54
3.2.12	Experimentelle Verifizierung	55
3.2.13	Vakuum-Rabi-Aufspaltung	56
3.3	Das halbklassische Zweiniveaumodell	57
3.3.1	Übersicht	57
3.3.2	Basisoperatoren	58
3.3.3	Hamiltonoperator	58
3.4	Der Dichteoperator	59
3.4.1	Beschreibung eines Ensembles	59
3.4.2	Definition des Dichteoperators	60
3.4.3	Dichteoperator für Ensembles	60
3.4.4	Zeitentwicklung	61
3.4.5	Erwartungswert	62
3.4.6	Darstellung in einer Basis	62

3.4.7	Pseudospin	63
3.4.8	Beispiel: Populationen	63
3.4.9	Kohärenzen	64
3.4.10	Der Hamiltonoperator des Pseudospins	64
3.5	Die optische Blochgleichung	65
3.5.1	Blochgleichung im Laborsystem	65
3.5.2	Freie Präzession	65
3.5.3	Rotierendes Koordinatensystem	66
3.5.4	Transformation von Zuständen	67
3.5.5	Transformation von Operatoren	67
3.5.6	Transformation des Hamiltonoperators	68
3.5.7	Anwendung auf Blochgleichung	68
3.5.8	Näherungsform	69
3.6	Laserpulse	70
3.6.1	Eigenwerte und Eigenvektoren	70
3.6.2	Verstimmungsabhängigkeit der Energien	71
3.6.3	Präzession und Pulse	72
3.7	Stationäre Lösung	73
3.7.1	Longitudinale Relaxation	73
3.7.2	Transversale Relaxation	74
3.7.3	Die optische Blochgleichung mit Relaxation	74
3.7.4	Stationäre Lösung	75
3.7.5	Intensitätsabhängigkeit	76
3.7.6	Verstimmungsabhängigkeit	77
3.7.7	Transversale Komponenten: Absorption / Dispersion	77
3.7.8	Vergleich klassisches / quantenmechanisches Modell	78
4	Optische Übergänge in Atomen, Molekülen und Festkörpern	80
4.1	Systeme	80
4.1.1	Frequenzen und Amplituden	80
4.1.2	Atome	81
4.1.3	2-atomige Moleküle	81
4.1.4	Polyatomare Moleküle	82
4.1.5	Festkörper	83
4.2	Symmetrie	83
4.2.1	Grundbegriffe	83
4.2.2	Parität	84
4.2.3	Rotationen	85
4.2.4	Kugelflächenfunktionen	85
4.2.5	Rotation der Kugelflächenfunktionen	86
4.2.6	Rotation von Operatoren	87
4.2.7	Das Wigner-Eckart Theorem	87
4.2.8	Irreduzible Tensoren	88
4.3	Drehimpuls	89
4.3.1	Drehimpuls und Polarisation des Lichts	89
4.3.2	Drehimpulserhaltung bei Absorption	90
4.3.3	Matrixelemente für Alkaliatome	91

4.3.4	Atomarer Drehimpuls	92
4.3.5	Atomare Feinstruktur	93
4.3.6	Hyperfeinstruktur	93
4.3.7	Matrixelemente	94
4.4	Systeme mit mehreren Elektronen	95
4.4.1	Orbitale, Energie und Erhaltungsgrößen	95
4.4.2	Moleküle	96
4.4.3	Farbige Defekte in dielektrischen Kristallen	97
4.4.4	Rubin	97
4.4.5	Kristallfeld	98
4.4.6	Elektron-Elektron Wechselwirkung	99
4.4.7	Seltene Erden	100
4.4.8	Halbleiter	100
5	Lichtkräfte und Laserkühlung	102
5.1	Lichtkräfte	102
5.1.1	Klassische Behandlung	102
5.1.2	Quantenmechanik: Impulserhaltung	102
5.1.3	Die Anfänge	103
5.1.4	Spontane Streukraft	104
5.1.5	Frequenzabhängigkeit und Dopplerverschiebung	104
5.1.6	Dopplerverbreiterung	105
5.1.7	Resonanzverschiebung durch Strahlungsrückstoß	105
5.1.8	Frequenzchirp und Zeeman-Tuning	106
5.2	Dopplerkühlung	107
5.2.1	Motivation	107
5.2.2	Das Prinzip	107
5.2.3	Reibungskraft	108
5.2.4	Viskosität	109
5.2.5	Geschwindigkeitsdiffusion: Phänomenologie	109
5.2.6	Temperatur des Ensembles	110
5.2.7	Dopplerlimite	111
5.2.8	Historische Entwicklung	111
5.3	Fallen	112
5.3.1	Motivation und Prinzip	112
5.3.2	Magneto-optische Fallen	113
5.3.3	Anwendungen: Präzisionsspektroskopie	114
5.3.4	Bose-Einstein Kondensation	115
5.3.5	Laserkühlung und BEC	116
5.3.6	BECs als kohärente Quellen	116
5.3.7	Interferenzeffekte	117
5.4	Konservative Kräfte	117
5.4.1	Optisches Potential	117
5.4.2	Eigenschaften der Dipolkraft	119
5.4.3	Optische Pinzetten	119
5.4.4	Stehwellen für Atome	121
5.4.5	Reflexion: Spiegel für Atome	121

5.4.6	Atomoptik	122
6	Nichtklassisches Licht	125
6.1	Einleitung	125
6.1.1	Übersicht und Motivation	125
6.1.2	Historische Entwicklung	125
6.1.3	QED: Moden und Energie	126
6.1.4	QED: Operatoren	127
6.1.5	QED vs. Maxwell	127
6.1.6	Unschärfe	128
6.1.7	Zustände einer Mode	129
6.1.8	Kohärente Zustände	129
6.2	Photonenstatistik	130
6.2.1	Phänomenologie	130
6.2.2	Poissonverteilung	131
6.2.3	Intensitätskorrelation	132
6.2.4	Antibunching	133
6.2.5	Experimenteller Nachweis	134
6.2.6	Antibunching an gespeicherten Ionen	135
6.2.7	Einzelmoleküle in Festkörpern	135
6.2.8	Der Übergang zu vielen Zentren	136
6.3	Experimente mit einzelnen Photonen	136
6.3.1	Motivation und Grundlagen	136
6.3.2	Erzeugung von Fock-Zuständen	138
6.3.3	Das Einstein-Podolsky-Rosen Paradox	138
6.3.4	Verletzung der Bell'sche Ungleichungen für Photonenpaare	139
6.4	Gequetschtes Licht	140
6.4.1	Unschärfe von Feldamplituden	140
6.4.2	Erzeugung	141
6.4.3	Parametrischer Oszillator	142
6.4.4	Messung	142
6.4.5	Heterodyn-Detektion	143
6.4.6	Squeezing an Na	144
6.4.7	Anwendung: Interferometrie	145
6.4.8	Gravitationswellen	146
6.4.9	Nachweis von Gravitationswellen	147
6.4.10	Weitere Anwendungen	147
6.5	Rückwirkungsfreie Messungen	148
6.5.1	Rückwirkung	148
6.5.2	Optische QND Messungen	149
6.5.3	QND für Squeezing	150
6.5.4	Empfindlichkeitssteigerung mit QND	151
6.5.5	Zusammenfassung und Literatur	151

7	Experimentelle Aspekte	153
7.1	Detektion	153
7.1.1	Prinzip	153
7.1.2	Empfindlichkeit	153
7.1.3	Detektoren für Licht	154
7.1.4	Photoeffekt	155
7.1.5	Halbleiterdetektoren	156
7.1.6	CCD	158
7.1.7	Streak Kamera	158
7.1.8	Weitere Detektionsmöglichkeiten	159
7.2	Modulatoren	160
7.2.1	Chopper	160
7.2.2	Akustooptische Modulatoren	160
7.2.3	Elektrooptische Modulatoren	160
7.2.4	Photoelastische Modulatoren	161
7.3	Spektrometer und Interferometer	161
7.3.1	Gitterspektrometer	161
7.3.2	Analysatoren: Fabry-Perot, Wavemeter,	162
7.4	Hochempfindliche Spektroskopie	162
7.4.1	Absorptionsquerschnitt und Absorptionslänge	162
7.4.2	Rauschen	163
7.4.3	Modulationstechniken	164
7.4.4	Phasenempfindliche Detektion	165
7.4.5	Erhöhung der Empfindlichkeit durch Modulation	166
7.4.6	Anwendungen	166
7.5	Laser-Sicherheit	167

1 Einführung

1.1 Organisatorisches

Die Vorlesung "Laserspektroskopie" soll eine Übersicht über spektroskopische Messungen im optischen Bereich geben. Dafür werden heute in vielen Fällen Laser verwendet. Eine mögliche Struktur der Vorlesung ist

1. Einleitung
2. Laser
3. Zweiniveaumatome
4. Experimentelle Techniken
5. Laserkühlung
6. Nichtklassisches Licht
7. Nichtlineare Laserspektroskopie

Es sind noch Wünsche möglich. So kann das Gewicht eher auf die Methodik oder auf Anwendungen gelegt werden. Ich kann mich ganz auf die Grundlagen konzentrieren oder wir diskutieren in der zweiten Hälfte mehrheitlich aktuelle Themen.

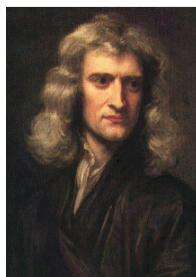
1.2 Literatur

Es gibt eine Reihe von guten Lehrbüchern und Nachschlagewerken, welche Teile des hier behandelten Stoffes abdecken. Ohne den Anspruch der Vollständigkeit können folgende Werke empfohlen werden:

- W. Demtröder : Laserspektroskopie, Springer-Verlag, 4.Auflage (2000).
- F. K. Kneubühl, M. W. Sigrist : Laser, Teubner Studienbücher Physik (1999).

- D. Meschede : Optik, Licht und Laser, Teubner Studienbücher Physik (1999).
- A. E. Siegmann: Lasers; University Science Books, 1986.
- J. H. Eberly : Optical resonance and two-level atoms; Dover Publications, 1975.
- D. Suter : The physics of laser-atom interaction; Cambridge University Press, 2005.

1.3 Wechselwirkung von Licht und Materie



Newton (1643 – 1727)



Goethe (1749-1832)

Abbildung 1.1: Newton und Goethe: 2 konkurrierende Farbenlehren.

Die Wechselwirkung zwischen elektromagnetischer Strahlung, insbesondere Licht, und Materie hat Philosophen und Naturwissenschaftler seit vielen Jahrhunderten beschäftigt, so z.B. Newton und Goethe. Ursprünglich wurde die Diskussion nur über die Wechselwirkung von Licht mit Materie geführt, da dies damals die einzige bekannte elektromagnetische Strahlung war; heute sehen wir dies als einen Bereich des elektromagnetischen Spektrums. Wir betrachten zunächst einmal die Phänomene, die hierbei auftreten.

1.3.1 Absorption und Streuung

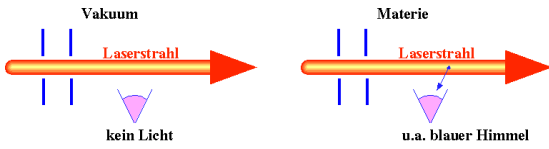


Abbildung 1.2: Lichtstreuung

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

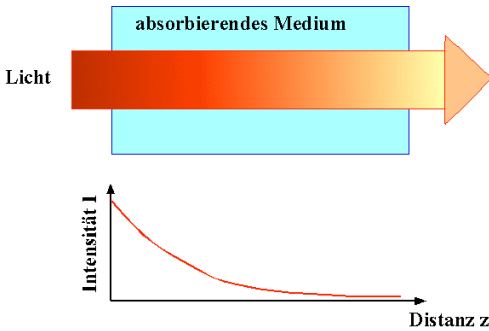


Abbildung 1.3: Abnahme der Intensität in einem absorbierenden Medium

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

Lichtes ist,

$$\frac{dI}{dz} = -\alpha I,$$

wobei die Proportionalitätskonstante α offenbar die Dimension einer inversen Länge aufweist. Die Lösung ist offenbar

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

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

Rein phänomenologisch stellt man fest, dass die Absorption von der Wellenlänge des Lichtes abhängt.

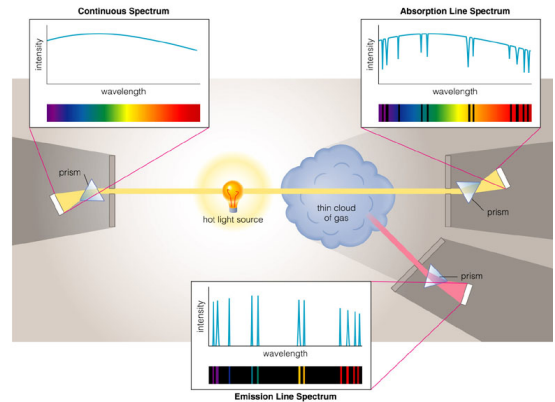


Abbildung 1.4: Absorption und Emission

Schickt man breitbandiges (z.B. weisses) Licht durch eine Probe, so findet man, dass im transmittierten Licht unterschiedliche Farben unterschiedlich stark abgeschwächt wurden.

Ein Teil der absorbierten Energie wird häufig wieder als Licht emittiert, allerdings meist bei größeren Wellenlängen, d.h. bei niedrigerer Energie. In atomaren und molekularen Systemen erfolgt diese Emission (=Fluoreszenz oder Phosphoreszenz) meist bei scharfen Linien.

1.3.2 Dispersion

Licht breitet sich in einem homogenen Medium geradlinig aus, wird aber an Grenzflächen gebro-

chen, sofern es nicht senkrecht darauf auftrifft:

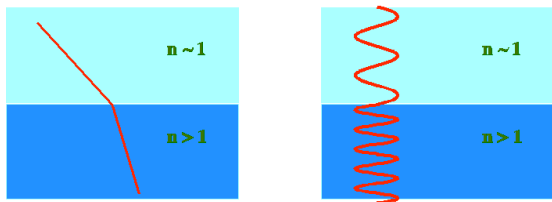


Abbildung 1.5: Brechung an einer Grenzfläche.

Wie in Physik III gezeigt wird kann die Brechung direkt darauf zurückgeführt werden kann, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit des Lichtes anders ist als im Vakuum. Die Feldamplituden hängen in diesem Fall vom Brechungsindex n des Systems ab:

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

In den meisten Fällen ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit c/n niedriger als die Lichtgeschwindigkeit c im Vakuum, sie kann aber auch höher sein. Dies ist typischerweise der Fall für Röntgenlicht.

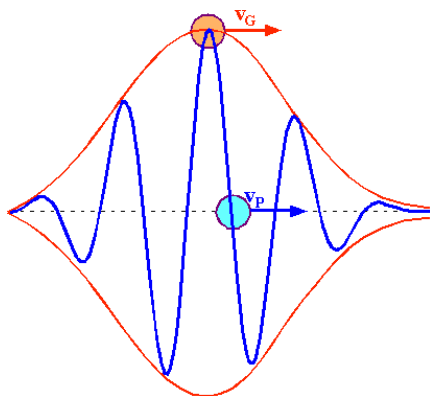


Abbildung 1.6: Phasen- und Gruppengeschwindigkeit.

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

geschwindigkeit gegeben als

$$v_P = \frac{\omega}{k} = \frac{\omega}{k_0 n}$$

und die Gruppengeschwindigkeit als

$$v_G = \frac{d\omega}{dk}.$$

Die beiden unterscheiden sich dann, wenn sie von der Wellenlänge abhängen, d.h. wenn der Brechungsindex $n(\lambda)$ von der Wellenlänge abhängt.

Beide können kleiner oder größer als die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum, c , sein. Die Relativitätstheorie verlangt jedoch, dass die Signalausbreitungsgeschwindigkeit nicht größer als c sein darf.

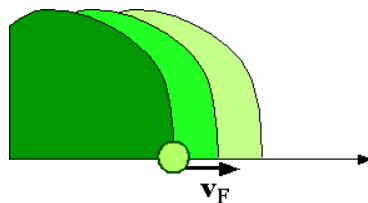


Abbildung 1.7: Frontgeschwindigkeit.

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

1.3.3 Materialeigenschaften und mikroskopische Theorien

Ausbreitungsgeschwindigkeit und Absorption werden durch das Material beeinflusst, in dem sich das Licht ausbreitet. Dabei findet man eine ausgeprägt Abhängigkeit von der Wellenlänge des Lichtes. Eine Erklärung für diese Effekte erhält man, wenn man die Wechselwirkung des elektromagnetischen Feldes mit mikroskopischen (atomaren oder molekularen) Bestandteilen der Materie betrachtet.

Das Interesse an diesen Effekten bezog sich ursprünglich in erster Linie auf die unterschiedliche Absorption und Brechung (d.h. Dispersion)

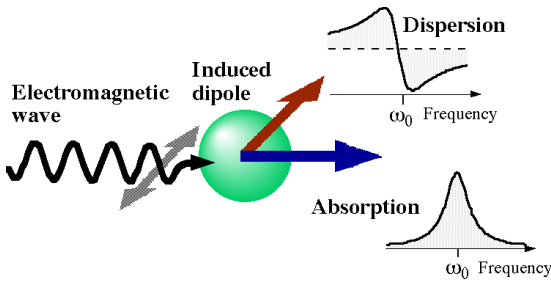


Abbildung 1.8: Schwingender elektrischer Dipol als mikroskopisches Modell für das Material.

verschiedener Materialien als Funktion der Wellenlänge:

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

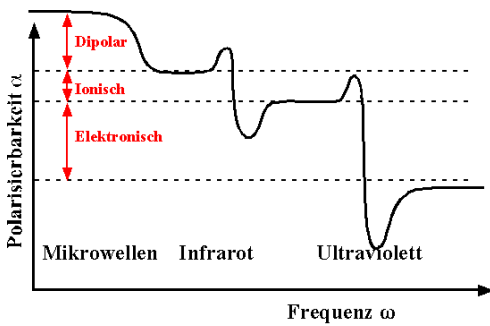


Abbildung 1.9: Überblick über die Wellenlängenabhängigkeit der Polarisierbarkeit schwingender elektrischer Dipole.

Ganz allgemein findet man ein resonantes Verhalten, d.h. eine hohe Verstärkung wenn die Wellenlänge in die Nähe einer charakteristischen Wellenlänge des Materials kommt. Diese Wellenlängen sind direkt an Energiedifferenzen des Materials gekoppelt und können deshalb Informationen über die mikroskopischen Bestandteile, d.h. die Atome oder Moleküle liefern. Hierin liegt auch ein wesentlicher Grund für das Interesse an unterschiedlichen Spektroskopien: in Verbindung mit einer geeigneten Theorie erlauben uns spektroskopische Messungen Rückschlüsse auf mikroskopische Materialeigenschaften.

1.4 Formen der Spektroskopie

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

1.4.1 Spektralbereiche

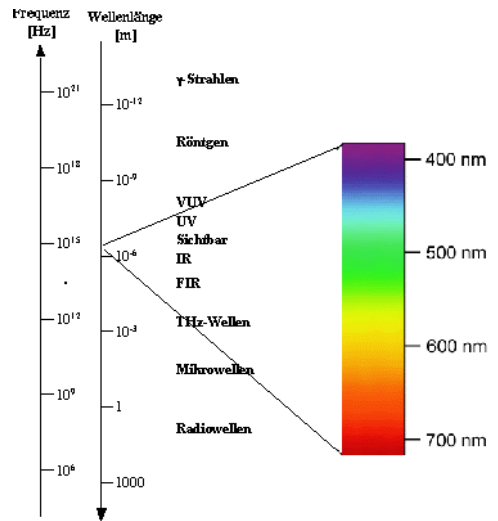


Abbildung 1.10: Frequenz- und Wellenlängenbereiche elektromagnetischer Strahlung.

Die elektromagnetische Skala kann nach Wellenlängen, Frequenzen oder Energien gegliedert werden. Im langwelligen, resp. niederenergetischen Bereich beginnt die Skala mit Radiowellen, deren Wellenlängen praktisch beliebig lang werden können. Im Bereich von ca. 1 GHz, resp. 30 cm Wellenlänge beginnt man üblicherweise von Mi-

krowellen zu sprechen. Im Bereich von einigen THz, resp. unterhalb eines Millimeters beginnt man von Millimeterwellen, THz-Wellen zu sprechen und etwas später von Fern-Infrarot. Ab einer Wellenlänge von ca. $10 - 0.75 \mu\text{m}$ spricht man von Infrarot und von 750 nm bis 400 nm findet man das sichtbare Licht. Daran schließt das UV, resp. daran das Vakuum-UV an, und schließlich Röntgen und Gamma-Strahlen. Ab diesem Bereich spricht man aber meistens nicht mehr von Wellen, sondern benutzt eher den Teilchencharakter der Strahlung.

1.4.2 Wechselwirkungen

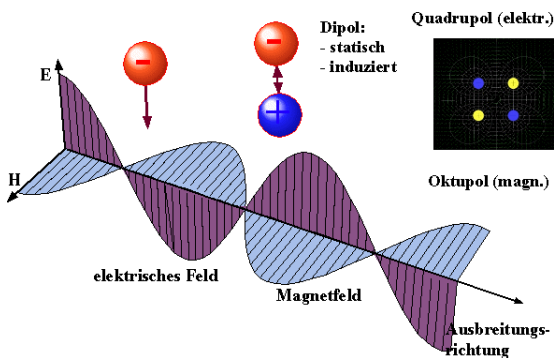


Abbildung 1.11: Wechselwirkung von elektromagnetischen Wellen.

Die elektromagnetischen Felder können über den elektrischen oder magnetischen Teil an entsprechende elektrische, resp. magnetische molekulare Dipole koppeln. Dazu gehören zum Beispiel elektrische Ladungen wie (quasi-)freie Elektronen. Dies ist zum Beispiel der Fall im Bereich der Röntgenstrahlen, welche die Elektronen treiben. Auch elektronische Dipolmomente, welche durch Elektronen und Kerne in Atomen oder Molekülen gebildet werden koppeln an elektromagnetische Wellen. So findet im Bereich des UV- und des sichtbaren Lichtes die Wechselwirkung in erster Linie über molekulare Dipolmomente statt, welche an die elektromagnetischen Felder koppeln. In den meisten Fällen handelt es sich dabei um induzierte Dipolmomente, d.h. diese entstehen erst unter dem Einfluss des elektro-

magnetischen Feldes. Im Gegensatz dazu werden bei der Rotationsspektroskopie statische elektrische Dipole angeregt. Im infraroten Bereich des Spektrums können sowohl statische wie induzierte Dipolmomente an das Strahlungsfeld ankopeln.

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

Die Dipolmomente sind die stärksten Momente der meisten Materialien, sofern sie nicht (z.B. aus Symmetriegründen) verschwinden. In diesen Fällen können höhere Momente eine Rolle spielen, wie z.B. das elektrische Quadrupolmoment oder das magnetische Oktupolmoment.

Bei anderen Sonden als elektromagnetischer Strahlung können auch andere Wechselwirkungen eine Rolle spielen. Im Falle von Neutronen ist z.B. die dominante Wechselwirkung die starke Kernkraft.

1.4.3 γ -Strahlen

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

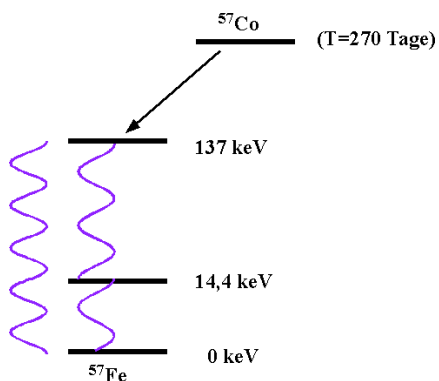


Abbildung 1.12: Kernzustände und Energiedifferenzen für den Zerfall $^{57}\text{Co} \rightarrow ^{57}\text{Fe}$.

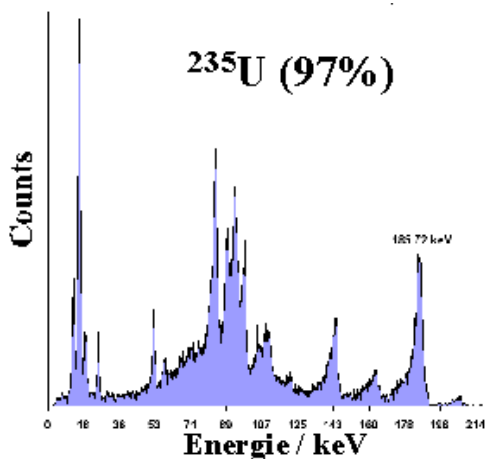


Abbildung 1.14: γ -Spektrum von ^{235}U .

durch die Lebensdauer der Zustände.

man bei solchen Messungen genau wissen muss, was man wirklich misst, und die erhaltenen Daten im Detail diskutieren.

Gamma energies (KeV)	Gamma intensities	Gamma energies (KeV)	Gamma intensities
353.0 ± 0.4		53.92 ± 0.4	2†
393.43 ± 0.2		380	11
494.4 ± 0.3	4.1 %	500	87
595.9 ± 0.4	0.08 %	595.6 ± 0.2	13
703.6	0.012 %	600	2
794.7	0.05 %	720	5
887.9 ± 0.4	0.12 %	870	4
		980	5
		1110	6
		1200	5
		1330	6
		1460	2
		1560	3
		1700	3
		1760	6
		1930	45
		2350	3
		2550	3
		2730	2
		2970	3
		3230	3
		3410	2

Abbildung 1.13: Energie und Intensitäten von γ -Strahlen für einige Isotope.

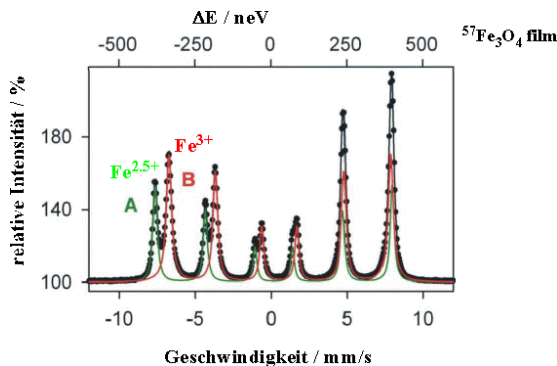


Abbildung 1.15: Mössbauer-Spektrum eines dünnen Fe_2O_3 -Films.

Durch die Messung des Spektrums der emittierten Strahlung kann man deshalb feststellen, welcher Kern zerfällt.

Eine weitere spektroskopische Anwendung der γ -Strahlen ist die Mössbauerspektroskopie. Hierbei werden γ -Strahlen von metastabilen Atomkernen emittiert und von den entsprechenden Kernen im Grundzustand wieder absorbiert. Man kann die Kerne und das Material darum so auswählen, dass die Absorption / Emission extrem scharf ist und auf diese Weise Resonanzlinien erhalten, die eine relative Breite $\Delta\nu/\nu < 10^{-13}$ aufweisen. Dies war für lange Zeit die höchste bekannte Auflösung im gesamten Spektralbereich und wurde u.a. für Präzisionsmessungen verwendet, welche eine Bestätigung der Relativitätstheorie erlaub-

In der Figur ist das γ -Spektrum von ^{235}U gezeigt. Ein berühmter Fall, wozu dies verwendet werden kann ist das Beispiel der kalten Fusion. Hier wurde das γ -Spektrum als "Beweis" aufgeführt, dass bei dem Experiment wirklich verschiedene Wasserstoffisotopen verschmolzen worden waren. Allerdings zeigt dieses Beispiel auch gleich, dass

ten.

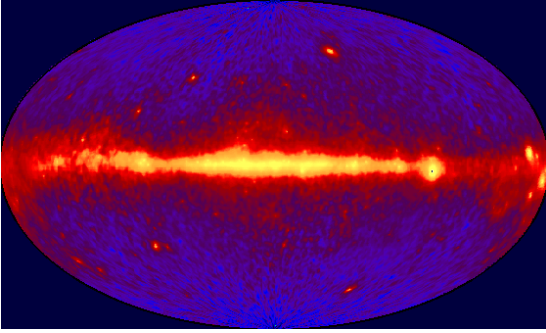


Abbildung 1.16: γ -Bild des Himmels (CGRO Satellit).

γ -Strahlen spielen auch in der Astronomie eine wichtige Rolle. In der Figur ist das Bild des Himmels im hochenergetischen Bereich des Spektrums dargestellt. Die hellsten Quellen erscheinen in der galaktischen Ebene.

1.4.4 Röntgenstrahlen

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

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

Röntgenstrahlen können aber auch für Röntgenfluoreszenz eingesetzt werden. Hierbei werden Elektronen aus niedrig liegenden Schalen der Atome angeregt, worauf in einem kaskadenartigen Prozess Elektronen aus höheren Schalen hinunterfallen und die frei gewordene Position einnehmen. Dabei werden mehrere Photonen niedrigerer Energie frei, welche gemessen werden können. Damit können Atome einer bestimmten Sor-

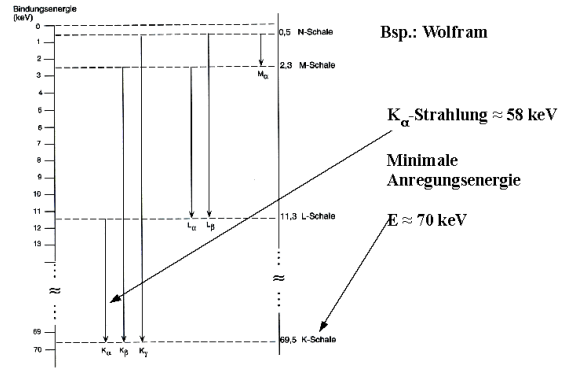


Abbildung 1.17: Röntgenfluoreszenz an Wolfram.

te in fast jeder chemischen Umgebung beobachtet werden.

1.4.5 Sichtbares Licht

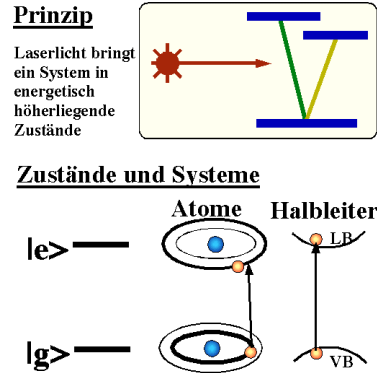


Abbildung 1.18: Laserspektroskopie: Messung von Energiedifferenzen mit optischen Photonen.

Mit ultraviolettem und sichtbarem Licht werden höher liegende Elektronen, insbesondere Valenzelektronen, in elektronisch angeregte Zustände gebracht. Dies kann sowohl in Atomen und Molekülen im gasförmigen Zustand geschehen, wie auch in Flüssigkeiten und Festkörpern. Die Position der Resonanzlinien gibt dabei Aufschluss über die Energien der beteiligten Zustände, während die Form von der Lebensdauer der Zustände abhängt. In kondensierter Materie erhält man

auch Informationen über die Umgebung der Atome.

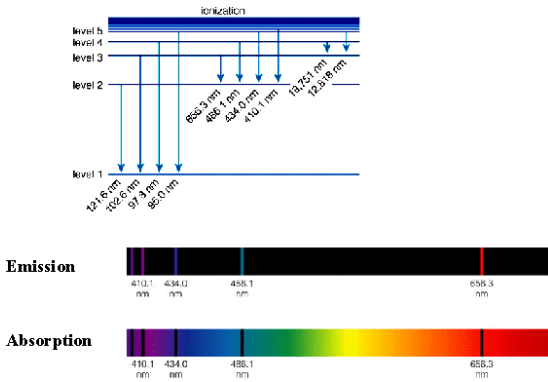


Abbildung 1.19: Absorptions- und Emissionslinien in atomarem Wasserstoff.

In der Figur ist das bekannte Beispiel des Wasserstoffatoms dargestellt. Je nachdem ob Licht absorbiert oder emittiert wird erhält man helle oder dunkle Banden bei den entsprechenden Wellenlängen.

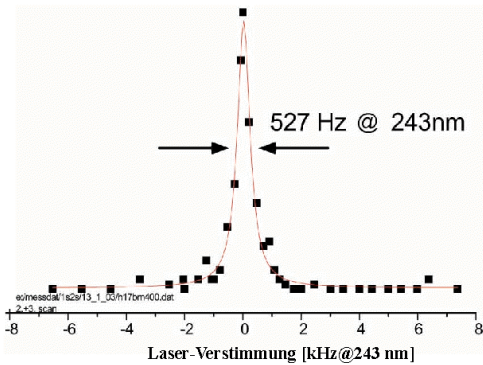


Abbildung 1.20: Absorptionslinie des 1s-2s Übergangs im Wasserstoffatom (Bild aus Nobelpreisvortrag Hänsch).

Während Resonanzlinien freier Atome sehr schmal sind (typischerweise $\Delta\nu/\nu < 10^{-8}$, in der gezeigten Figur ist $\Delta\nu/\nu = 4.3 \cdot 10^{-13}$) können die Linien in Festkörpern und Flüssigkeiten sehr breit werden ($\Delta\nu/\nu \approx 0.1$), da die Wechselwirkung mit der Umgebung die Energien der Zustände verschiebt.

1.4.6 Infrarot

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

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

wobei f die Kraftkonstante und m die bewegte Masse darstellt. Je größer die Masse desto kleiner wird also die Frequenz des entsprechenden Oszillators. Da atomare Massen um rund 4 Größenordnungen schwerer sind als eine Elektronenmasse erwarten wir Frequenzen, die um 2 Größenordnungen unterhalb der elektronischen Frequenzen liegen. Diese "naive" Erwartung entspricht auch in etwa den beobachteten Verhältnissen. Als Richtwert liegt die elektronische Anregung des Elektrons im Wasserstoff bei ca. 100 nm, während die energiereichste vibratorische Anregung (^1H -Streckschwingung) bei ca. $3.3 \mu\text{m}$ erscheint. Aus den gemessenen Spektren können Kraftkonstanten und Massen bestimmt werden.

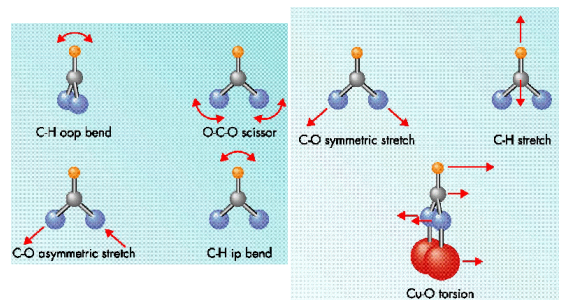


Abbildung 1.21: Molekulare Schwingungen.

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

Die Frequenzen von Normalschwingungen von Molekülen lassen sich nach relativ einfachen semiempirischen Regeln abschätzen. Die Messung von Schwingungsspektren ist deshalb zu

und die entsprechenden Übergangsenergien sind somit

$$\Delta E_n = 2(J + 1) \frac{\hbar^2}{2I}$$

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

Wir berechnen als Beispiel das Rotationspektrum von $^{127}\text{I}_2$. Dafür berechnen wir zunächst des Trägheitsmoment. Die einzige relevante Komponente des Trägheitstensors ist diejenige bezüglich der Achse senkrecht zur Symmetrieachse des Moleküls. Das Trägheitsmoment beträgt

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

Die Einheit der Rotationsenergie beträgt damit

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

In Frequenzeinheiten entspricht dies

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

Die Übergangsfrequenzen liegen somit im Mikrowellenbereich. Allerdings ist dieses Molekül schwierig zu messen, da es kein permanentes Dipolmoment besitzt.

Für nichtlineare Moleküle wird das Trägheitsmoment zu einem Trägheitstensor und das Spektrum entsprechend komplizierter.

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

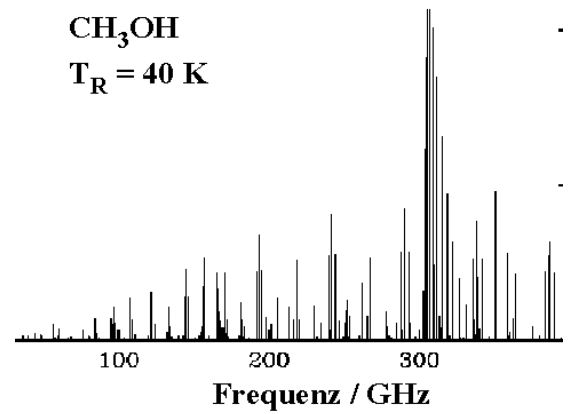
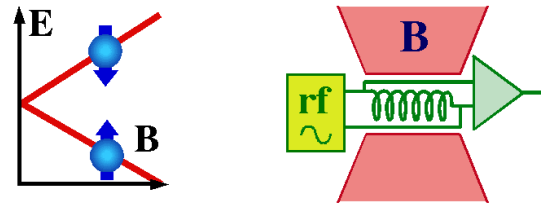


Abbildung 1.25: Rotationspektrum von Methanol (CH_3OH).

1.4.8 ESR



Prinzip

Die magnetische Resonanz erzeugt und misst Übergänge zwischen unterschiedlichen Spinzuständen, die durch ein externes Magnetfeld aufgespalten werden.

Ausführung

Statisches Magnetfeld (supraleitender Magnet)
rf-Feld
~10 MHz - 100 GHz

Abbildung 1.26: Prinzip der magnetischen Resonanz.

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

$$h\nu = \mu_B B.$$

Der Proportionalitätsfaktor ist das Bohrsche Magneton

$$\begin{aligned} \mu_B &= \frac{e\hbar}{2m} = \frac{1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C } 10^{-34} \text{ J s}}{2 \cdot 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}} \\ &= 9.27 \cdot 10^{-24} \text{ A m}^2, \end{aligned}$$

welches die Dimension eines magnetischen Dipols (resp. Ringstroms) besitzt.

Wir können diese Einheit umrechnen mit $AsV = J$ und $T = Vs/m^2$, d.h.

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

In dieser Form gibt die Größe die Resonanzfrequenz in einem Magnetfeld von 1 T an.

Für einen Spin muss diese Energie mit dem g-Faktor multipliziert werden, welcher für einen freien Elektronenspin etwas mehr als 2 beträgt. In einem Material wird er durch die Spin-Bahn Wechselwirkung und durch die Wechselwirkung mit anderen Elektronen modifiziert.

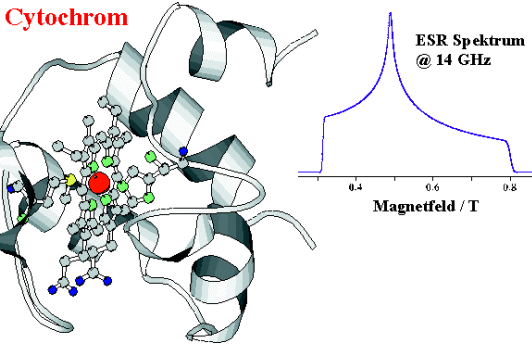


Abbildung 1.27: Elektronenspin in Cytochrom.

Die Elektronenspinresonanz erlaubt die Bestimmung der elektronischen Struktur, insbesondere die Verteilung eines ungepaarten Valenzelektrons. Natürlich kann man Elektronenspinresonanz nur dann untersuchen, wenn ein Spin vorhanden ist. Dies schließt insbesondere sämtliche Moleküle mit geschlossenen Schalen aus. Interessante Untersuchungsobjekte findet man insbesondere bei Biomolekülen, wo Radikale z.B. in der Photosynthese vorkommen. Auch in Festkörpern findet man häufig Defekte, welche lokalisierte paramagnetische Zentren erzeugen.

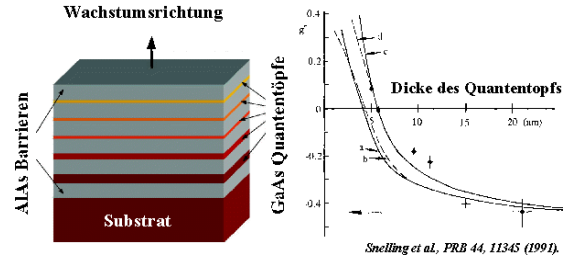


Abbildung 1.28: Änderung des g-Faktors in GaAs Quantenfilmen mit der Dicke der Filme.

In Halbleitern sind die g-Faktoren der Leitungselektronen von der Bandstruktur abhängig. In dünnen Filmen von GaAs, sogenannten Quantenfilmen, findet man z.B. dass der g-Faktor von +0.4 bis -0.4 variiert. Dies hängt u.a. davon ab wie weit die Wellenfunktion in die Barriere eindringt, welche einen anderen g-Faktor aufweist als das GaAs.

Da die Resonanzfrequenz proportional zur Feldstärke ist, wird der Frequenzbereich durch die vorhandenen Magnetfelder bestimmt. Weitere technische Randbedingungen sind durch die Geräte zur Erzeugung und zum Nachweis der Mikrowellen gegeben. Kommerzielle Geräte benutzen heute Frequenzen im Bereich von etwa 9 bis rund 90 GHz. In Forschungslaboratorien stehen Geräte, welche bei Frequenzen bis zu 600 GHz arbeiten.

1.4.9 NMR

Eine weitere Stufe zu niedrigeren Frequenzen führt zu Radiofrequenzen, also zu Frequenzen unterhalb von 1 GHz. Hier findet man Kernspinübergänge. Aufgrund der höheren Masse des Kerns sind deren magnetische Momente $\mu = \frac{e\hbar}{2M}$ schwächer als diejenigen des Elektrons und die entsprechenden Übergangsfrequenzen niedriger. Das entsprechende Arbeitsgebiet wird als Kernspinresonanz oder NMR bezeichnet. Man benutzt für diese Experimente möglichst hohe Magnetfelder, wobei man heute Felder bis etwa 20 T erreicht. Die entsprechenden Resonanzfrequen-

zen hängen vom Kern ab, wobei unterschiedliche Isotopen unterschiedliche Kopplungskonstanten und damit Resonanzfrequenzen aufweisen. Ein Kernresonanzspektrometer muss deshalb immer einen sehr breiten Bereich von Frequenzen abdecken.

Die Kernspinresonanz erlaubt primär die Messung der Frequenz von Kernspinübergängen. Die Übergangsfrequenzen liegen hierbei im Bereich von einigen MHz bis zu einigen 100 MHz, während die Linienbreiten sehr vom System abhängen. In Flüssigkeiten sind Breiten von weniger als einem Hertz möglich, d.h. man erreicht eine Auflösung von einigen *ppb* (10^{-9}). Aufgrund dieser hohen Auflösung kann dabei sehr genau die Stärke des lokalen Magnetfeldes bestimmt werden. Diese hängt wiederum von der lokalen Struktur ab, sowie von Kopplungen an benachbarte Spins.

Die physikalischen Grundlagen dieser Art von Experimenten sind seit den Pionierarbeiten von Bloch, Hahn, usw. vor bald 50 Jahren im Wesentlichen bekannt. Trotzdem wird auf diesem Gebiet noch intensiv gearbeitet. Die meisten Experimente, zielen aber nicht mehr auf ein besseres Verständnis der Grundlagen ab, sondern versuchen die magnetische Resonanz auf die unterschiedlichsten Systeme anzuwenden.

Struktur und Dynamik von Molekülen

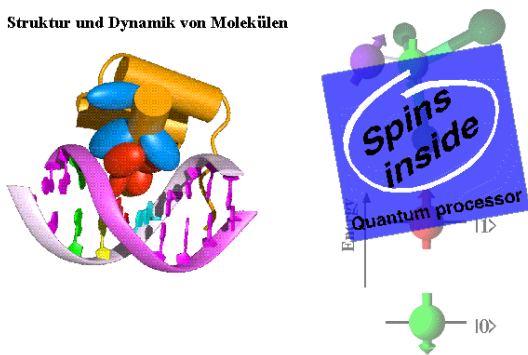


Abbildung 1.29: Zwei Anwendungen der NMR.

Der Grund dafür, dass die magnetische Resonanz für die Untersuchung so vieler unterschiedlicher Systeme so nützlich geworden ist, liegt im Wesentlichen darin, dass die Spinsysteme zwar ziemlich gut, aber nicht perfekt von den übrigen Freiheitsgraden des Systems entkoppelt sind.

Die Entkoppelung erlaubt eine theoretische Beschreibung der Dynamik des Spinsystems, welche wesentlich vollständiger und exakter ist, als wir uns aus anderen Bereichen der Physik gewöhnt sind. Dabei brauchen wir nur die Spin-Freiheitsgrade explizit zu berücksichtigen; die räumlichen Freiheitsgrade erscheinen nur in der Form von Parametern im Hamiltonoperator des Systems. Dass sie aber erscheinen, zeigt, dass die Entkoppelung nicht vollständig ist. Und genau diese Restkopplung erlaubt uns, über die spektroskopischen Messungen Rückschlüsse auf die Struktur und Dynamik der untersuchten Substanzen zu ziehen.

1.4.10 Informationsgehalt der NMR

So kann die genaue Resonanzfrequenz Aufschlüsse über die elektronische Struktur oder lokale Feldstärken geben. Kopplungen zwischen verschiedenen Spins enthalten Informationen über räumliche Strukturen oder die Natur von chemischen Bindungen. Relaxationsraten, resp. Linienbreiten geben Auskunft über Bewegungsprozesse. Die meisten Anwendungen findet man immer noch in der Chemie, wo die magnetische Resonanz wohl das wichtigste Hilfsmittel für die Aufklärung von molekularen Strukturen darstellt. Beispiele und Übungsaufgaben für die Bestimmung von molekularen Strukturen aus NMR- und IR Spektren findet man z.B. auf dem Internet, unter WebSpectra <http://www.chem.ucla.edu/~webspectra/#Problems>.

In einer breiten Öffentlichkeit wurde die Kernresonanz in den letzten Jahre sehr viel bekannter weil auch die Medizin die Möglichkeit entdeckte, die Kernresonanz zu verwenden. Sie wird dort inzwischen als nichtinvasive Untersuchungsmethode für verschiedene Anwendungen eingesetzt, vor allem für weiche Gewebe. In der Physiologie verwendet man sie in erster Linie als Spektroskopie zur Aufklärung von Stoffwechselfvorgängen.

Am bekanntesten ist sie aber zweifellos als bildgebende Methode in der Form der Kernspin Tomographie oder MRI (Magnetic Resonance Ima-



Abbildung 1.30: Kernspintomogramm (MRI-Bild) eines Gehirns.

ging) geworden. Dabei verwendet man einen Magnetfeldgradienten um den Ort eines Kernspins über seine Frequenz zu codieren. Das resultierende Spektrum enthält somit Informationen über die räumliche Verteilung der Kernspin. Aus einer genügend großen Zahl von solchen Projektionen auf die Richtung des Magnetfeldgradienten kann man das ursprüngliche Objekt rekonstruieren.

MRI kann nicht nur auf Festkörper und Flüssigkeiten angewendet werden, sondern auch auf Gase, wie z.B. ^3He . MRI kann nicht nur für die Darstellung von statischen Strukturen verwendet werden, es ist ebenso möglich, zeitabhängige Veränderungen zu untersuchen. Dabei nutzt man die Tatsache dass durch den erhöhten Sauerstoffverbrauch während eines gedanklichen Prozesses mehr Sauerstoff ins Gehirn gebracht wird.

1.4.11 Teilchen

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

1.5 Laser Anwendungen

Im Rahmen dieser Vorlesungen soll in erster Linie die optische Spektroskopie mit Hilfe von Lasern diskutiert werden. Allerdings ist es sinnvoll, sich auch zu überlegen, wozu Laser außerdem verwendet werden.

1.5.1 Nichtphysikalische Anwendungen

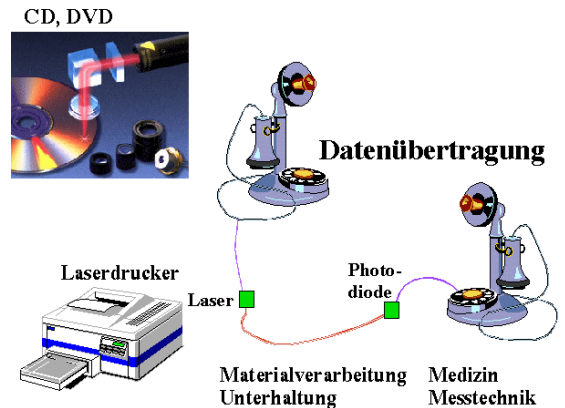


Abbildung 1.31: Anwendungen des Lasers.

Laser werden heute in sehr unterschiedlichen Bereichen verwendet. Die volumenmäßig wichtigste Anwendung dürfte die Telekommunikation sein. Außerdem spielen sie eine wichtige Rolle in der Datenverarbeitung (DVD, CD, Drucker, ...), in der Unterhaltung (Light Shows), Medizintechnik, Materialverarbeitung, Messtechnik etc.

1.5.2 Physikalische Anwendungen

Auch in der Physik werden Laser für eine Reihe von nicht-spektroskopischen Anwendungen eingesetzt. Insbesondere die mechanischen Kräfte von Licht werden zunehmend verwendet, wie z.B. bei der Laserkühlung und der Herstellung von Bose-Einstein Kondensaten. Auch Großprojekte wie die Trägheits-Fusion oder Gravitationswellendetektoren wären ohne spezielle Laser nicht möglich.

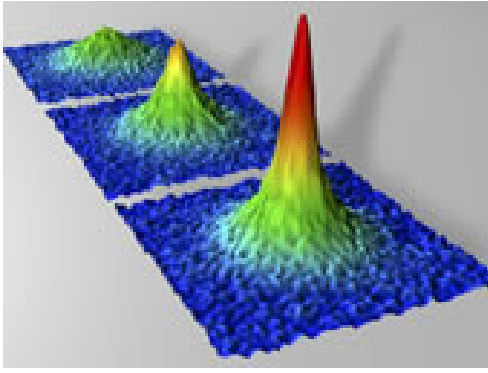


Abbildung 1.32: Bose-Einstein Kondensat

Diese vielfältige Verwendung des Lasers trieb die Entwicklungsarbeit und führte dazu, dass uns heute auch für physikalische Experimente eine breite Palette von Lasern zur Verfügung steht. Außerdem stellt jeder dieser Bereiche ein mögliches Berufsfeld für einen Laserphysiker dar.

2 Laser

2.1 Grundlagen

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

LASER = Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation

2.1.1 Absorption und Emission

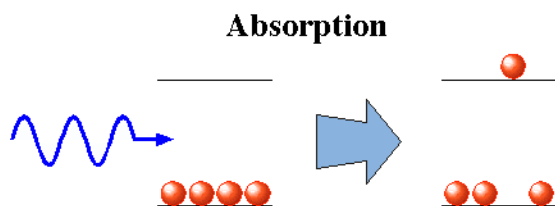


Abbildung 2.1: Absorption

In einem quantenmechanischen Bild wird bei der Absorption von Licht ein Photon vernichtet und dadurch ein materielles System aus einem niedrigen (meist aus dem Grundzustand) in einen energetisch höher liegenden Zustand gebracht. Daraus resultiert eine Abschwächung des Lichtes mit der Wahrscheinlichkeit

$$\frac{dI}{dz} = -\kappa I N_g,$$

wobei N_g die Population des Grundzustandes $[N_g] = m^{-3}$ und κ den Absorptionsquerschnitt darstellt.

Beim inversen Prozess geht das System aus dem angeregten Zustand in den Grundzustand über und emittiert dabei ein Photon. Dieser Prozess

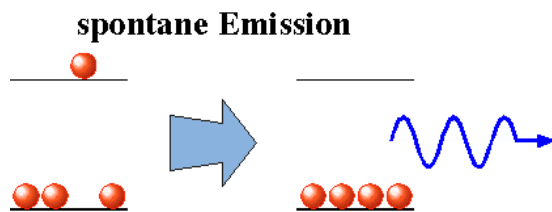


Abbildung 2.2: Spontane Emission

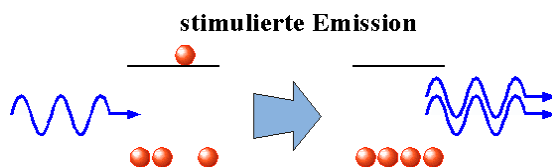


Abbildung 2.3: Stimulierte Emission.

kann ohne äußere Einwirkung stattfinden und wird dann als spontane Emission bezeichnet.

Emission kann aber auch stimuliert erfolgen: in diesem Fall induziert ein Photon den Übergang. Das emittierte Photon wird dabei eine Kopie des einfallenden Photons. Insbesondere sind Polarisation, Phase und Impuls identisch für die beiden Photonen. Somit erfolgt in diesem Fall eine Verstärkung des einfallenden Lichtes

$$\frac{dI}{dz} = \kappa I N_e,$$

wobei N_e die Population des angeregten Zustandes darstellt.

2.1.2 Inversion und Verstärkung

Ein Laser verwendet mehrfache stimulierte Emission um ein intensives optisches Feld zu erzeugen. Dazu muss das Licht mehrfach durch ein verstärkendes Medium geschickt werden.

Neben dem aktiven Medium umfasst ein Laser weitere Elemente, so insbesondere Spiegel, welche einen Resonator definieren. Sie dienen dazu, den entstehenden Laserstrahl mehrfach durch

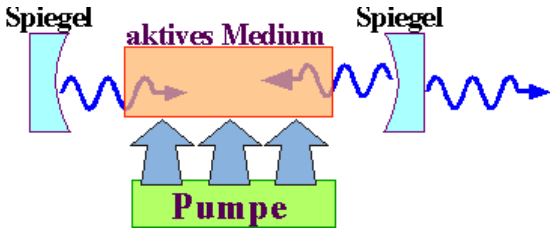


Abbildung 2.4: Funktionsprinzip des Lasers.

das aktive Medium zu lenken, so dass die Verstärkung groß genug ist. Der Resonator wird nicht benötigt, wenn die Verstärkung bei einem einzelnen Durchgang groß genug ist. Dies ist jedoch nur bei wenigen Lasertypen der Fall, z.B. bei dem geplanten Freie Elektronen Laser am DESY. Weiterhin wird eine Pumpquelle benötigt, welche die Populationsinversion erzeugt. Dazu kann man in besonders geeigneten Fällen elektrischen Strom verwenden. In vielen Fällen wird aber auch Licht verwendet, entweder von einer klassischen Blitzlampe oder von einem anderen Laser.

Das aktive Medium eines Lasers kann nur dann verstärken, wenn die Verstärkung aufgrund der induzierten Emission höher ist als die Abschwächung aufgrund der Absorption. Beide treten in einem gegebenen Medium mit der gleichen Wahrscheinlichkeit auf.

Über eine infinitesimale Streck dz ändert das aktive Medium die Lichtintensität um

$$\frac{dI}{dz} = \kappa I(N_e - N_g).$$

Somit resultiert eine Verstärkung wenn $N_e > N_g$.

Um eine Inversion zu erzeugen muss dem System Energie zugeführt werden um die Atome in den angeregten Zustand zu bringen. Dies kann nicht auf demjenigen Übergang geschehen, welcher für die Lasertätigkeit verwendet wird, sondern muss auf einem Übergang höherer Energie geschehen. Aus dem oberen Zustand des Pumpübergangs sollte das System mit hoher Effizienz in den oberen Zustand des Laserniveaus übergehen. Dieser Übergang kann z.B. ein Vibrationsübergang sein

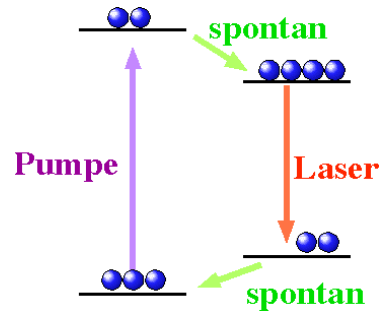


Abbildung 2.5: Laserzyklus.

(z. B. im Ti:Sa Laser) oder er kann stoßinduziert sein (z.B. HeNe Laser). Die Population des unteren Laserzustandes muss ebenfalls durch spontane Prozesse wieder entleert werden, damit die Populationsinversion aufrecht erhalten bleibt.

2.1.3 Die Lasergleichung

Erreicht man auf diese Weise, dass das einfallende Licht verstärkt wird, so muss die Verstärkung zunächst die Verluste ausgleichen, welche in jedem Resonator anfallen, u.a. durch Absorption und Streuung, Beugungsverluste, sowie durch die Auskopplung. Als einfaches Modell für die Verluste können wir annehmen dass bei jedem Umlauf im Resonator ein konstanter Anteil $-\Delta_L$ des Lichtes verloren geht. Pro Umlauf ändert sich dann die Intensität insgesamt um

$$\Delta I = I[\kappa d(N_e - N_g) - \Delta_L],$$

wobei d die Länge des aktiven Mediums darstellt. Verstärkung tritt demnach auf wenn

$$(N_e - N_g) > \frac{\Delta_L}{\kappa d},$$

Positive Verstärkung führt zu einem exponentiellen Wachstum der Laserintensität solange die hier verwendeten Parameter konstant sind. Natürlich muss dafür zunächst eine nicht verschwindende Anfangsintensität vorhanden sein. Diese kommt durch die spontane Emission zustande, welche hier nicht berücksichtigt wurde.

Das exponentielle Wachstum der Laserintensität hält an so lange die obige Gleichung gilt.

Was hier noch nicht berücksichtigt wurde ist, dass die Emissionsprozesse auch die Populationen ändern. Durch die Zunahme der Laserintensität und der damit verbundenen Zunahme der induzierten Übergänge wird die Population N_e des angeregten Zustandes reduziert. Dadurch stellt sich schließlich ein Gleichgewicht ein wenn

$$(N_e - N_g) = \frac{\Delta l}{\kappa d}.$$

Bei welcher Intensität dieses Gleichgewicht erreicht wird hängt u.a. von der Pumpquelle ab, welche eine endliche Leistung besitzt. Es kann aber auch durch das Medium bestimmt werden: Da nur ein Teil der Pumpenergie in der Form von Laserlicht wieder auf dem Medium austritt wird bei jedem Laserprozess im aktiven Medium auch Energie frei, was zu einer Erwärmung führt. Die erreichbare Leistung ist deshalb häufig dadurch limitiert dass man das aktive Medium nicht mehr stärker pumpen darf ohne Schäden zu erzeugen.

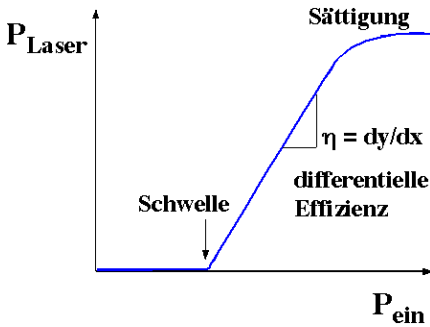


Abbildung 2.6: Ausgangsleistung vs. Eingangsleistung.

Eine typische Eingangs - Ausgangsleistungskurve enthält einen Bereich unterhalb der Laserschwelle, einen Bereich konstanter differentieller Effizienz und einen Bereich der Sättigung, wo die Ausgangsleistung kaum oder gar nicht mehr zunimmt.

2.1.4 Historische Entwicklung

Auf die Möglichkeit, einen Laser zu bauen, haben Schawlow und Townes 1958 hingewiesen. Die

- [1917](#) Albert Einstein liefert die erste theoretische Beschreibung der stimulierten Emission
- [1958](#) Vorschlag zur Verstärkung durch stimulierte Emission im optischen Bereich (A.L. Schawlow und C.H. Townes)
- [1959](#) Vorschlag zur Verwirklichung eines Gaslasers (A. Javan)
- [1959](#) Vorschlag zur Verwirklichung eines Halbleiterlasers (N.G. Basov, B.M. Wul, J.N. Popov)
- [1960](#) erster Festkörperlaser (Rubinlaser) (T.H. Maiman)
- [1961](#) erster He-Ne Laser (A. Javan, W. Bennett, D.R. Herriott)
- [1964](#) Nobelpreis an C.H. Townes, N.G. Basov, A.M. Prokhorov

„for fundamental work in the field of quantum electronics, which has led to the construction of oscillators and amplifiers based on the maser-laser principle“

Abbildung 2.7: Entwicklung des Lasers.

Entwicklung lief danach sehr schnell: nach nur 2 Jahren erfolgte die erste Demonstration. Die Möglichkeiten, die sich durch die neuartige Lichtquelle ergaben wurden schnell erkannt. Es wurden dementsprechend eine Reihe von weiteren Lasertypen entwickelt, und parallel dazu wurden die neu entwickelten Geräte angewendet, z.B. in der Medizin. Nach nur 6 Jahren wurde diese Entwicklung mit dem Nobelpreis ausgezeichnet.

2.1.5 Eigenschaften von Laserlicht

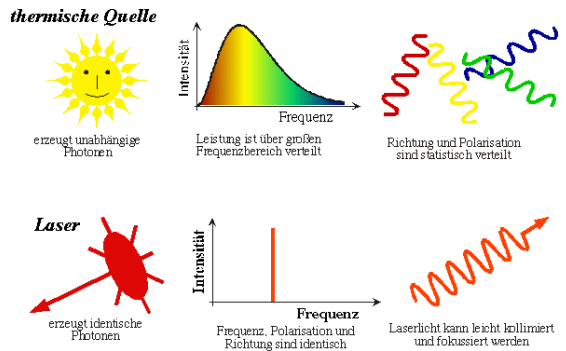


Abbildung 2.8: Eigenschaften von klassischem und Laserlicht

Während auch eine Lampe ein intensives Lichtfeld erzeugen kann, sind im Falle eines Wärmestrahlers die einzelnen Photonen unabhängig voneinander, während im Laser im Idealfall alle identisch sind. Die stellt den wichtigsten Unterschied zwischen einer klassischen Lichtquelle und

einem Laser dar. Man kann dies auf verschiedene Weise ausnutzen.

Das Phänomen wird allgemein als Kohärenz bezeichnet; damit bezeichnet man wohl definierte Phasenbeziehungen. Fixe Phasen gibt es im Laserlicht zwischen einzelnen Punkten im Raum (räumliche Kohärenz) und zwischen unterschiedlichen Zeiten (zeitliche Kohärenz). Die zeitliche Kohärenz sagt im Wesentlichen, dass das Laserfeld sehr monochromatisch ist, d.h. ein schmales Frequenzspektrum aufweist. Die räumliche Kohärenz ermöglicht Messungen, bei denen die Interferenz von unterschiedlichen Lichtfeldern genutzt wird. Dazu gehört u.a. auch die Fokussierung oder Kollimierung eines Laserstrahls.

2.2 Moden und Resonatoren

2.2.1 Longitudinale Moden

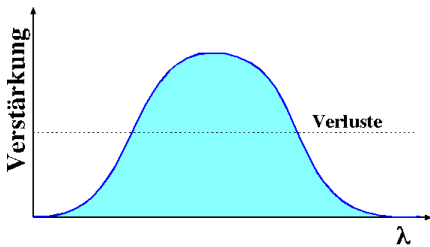


Abbildung 2.9: Die Verstärkung eines aktiven Mediums variiert mit der Wellenlänge.

Jedes aktive Medium eines Lasers besitzt eine gewisse Bandbreite, über welches es verstärken kann. Man bezeichnet dies als die Verstärkungsbandbreite. In vielen Fällen will man aber möglichst schmalbandiges Licht erzeugen. Dann ist es nötig, die Bandbreite einzuschränken. Ein erster Schritt dazu ist automatisch gegeben durch die Struktur des Laserresonators.

Aufgrund der Randbedingungen (z.B. Knoten an den Spiegeln) besitzt jeder Resonator bestimmte Moden. Der wichtigste Resonatortyp besitzt die gleichen Moden wie der Fabry-Perot Resonator (bekannt aus PIII). Normalerweise gibt

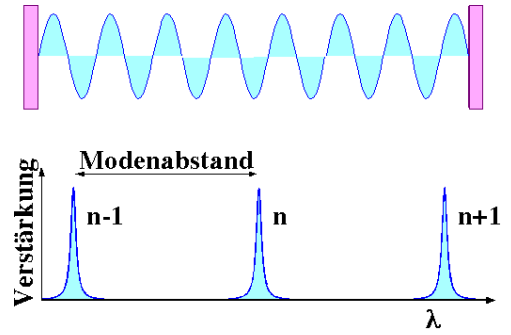


Abbildung 2.10: Resonatormoden

es viele Moden innerhalb der Verstärkungsbandbreite, auf denen der Laser arbeiten kann. Bei einem Farbstofflaser z.B. beträgt die Verstärkungsbandbreite eines Farbstoffes je nach Farbstoff etwa 20 nm . Der Modenabstand liegt bei etwa 80 MHz . Somit befinden sich rund 200000 Moden im Bereich der Verstärkungsbandbreite.

2.2.2 Transversale Moden

Ein wirklicher Laser hat eine endliche Größe. Deshalb spielt auch die Divergenz des Laserstrahls und die transversale Verteilung der Intensität eine Rolle. Die meisten Laserresonatoren verwenden gekrümmte Spiegel, welche innerhalb des Resonators einen oder mehrere Foci erzeugen um einen möglichst hohen Anteil des Lichts im Resonator zu halten.

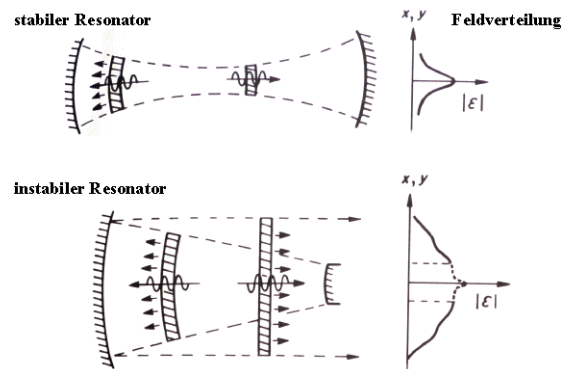


Abbildung 2.11: Stabiler und instabiler Resonator.

In der oberen Hälfte der Figur ist dargestellt,

wie in einem idealen Resonator die Lichtintensität verteilt ist. Die Divergenz des Strahls wird durch die beiden Spiegel exakt kompensiert. Betrachtet man einen "Lichtpuls" (dargestellt als dünne Scheibe), so ist seine Ausdehnung nach einem Umlauf exakt gleich.

In der unteren Hälfte der Figur ist die gegenteilige Situation dargestellt: in diesem Fall verlässt ein Teil des Lichtes den Resonator, da es nicht auf den zweiten Spiegel trifft. Solche Resonatoren kann man nur in Systemen mit entsprechend hoher Verstärkung verwenden.

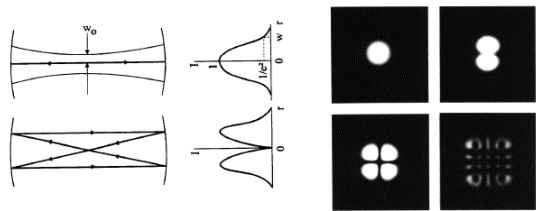


Abbildung 2.12: Transversale Moden

Neben der longitudinalen Modenstruktur besitzen Resonatoren auch eine transversale Modenstruktur. Die einzelnen Moden unterscheiden sich durch die Zahl der Knotenlinien (siehe rechte Bildhälfte). Die linke Bildhälfte stellt eine alternative Betrachtungsweise dar: bei höheren Moden muss das Licht als klassischer Strahl mehrere Umläufe durchführen, bis es sich wieder am Ausgangspunkt befindet.

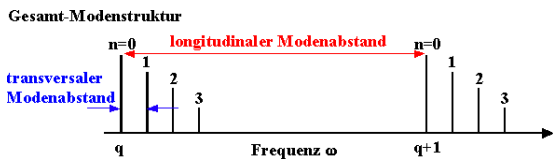


Abbildung 2.13: Frequenzspektrum von longitudinalen und transversalen Moden.

Genau wie die longitudinalen Moden besitzen auch die transversalen Moden unterschiedliche Frequenzen. Die Abstände zwischen diesen Moden können je nach Resonatortyp größer oder kleiner sein als zwischen den longitudinalen Moden. In der Figur ist ein typischer Fall darge-

stellt: jede Mode wird jetzt durch eine longitudinale und zwei transversale Quantenzahlen spezifiziert. Für effiziente Laseroperation sollte nur die Grundmode (00) angeregt sein.

Variable Modenstruktur in einem Ar-Ionen Laser

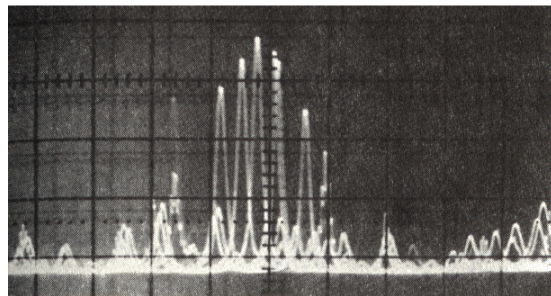


Abbildung 2.14: Modenstruktur eines Ar-Ionenlasers. Die überlagerten Bilder zeigen die Schwankungen auf.

Diese große Zahl von Lasermoden führt zu einer Reihe von unerwünschten Schwankungen: sind mehrer Moden gleichzeitig aktiv, so führt die Interferenz zwischen den Feldern mit unterschiedlichen Frequenzen zu einem Schwebungssignal, dem "mode-beating". Andere Effekte sind "mode-jumps": Der Laser springt von einer Mode auf eine andere.

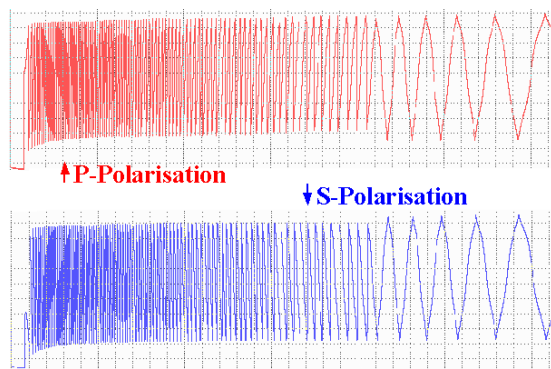


Abbildung 2.15: Polarisationsmoden in einem HeNe Laser,

In diesem Beispiel sieht man sehr schön den Wechsel zwischen zwei Polarisationsmoden in einem HeNe Laser. Dabei handelt es sich um zwei Moden, welche identische räumliche Struktur

aufweisen (longitudinal und transversal), aber orthogonale Polarisation. Dies tritt in HeNe Lasern häufig auf, ist in anderen Lasern aber eher untypisch: in den meisten Fällen besteht der Resonator aus Elementen, welche eine Polarisation bevorzugen (z.B. Fenster, die unter dem Brewsterwinkel orientiert sind). Dadurch wird die andere Polarisation effektiv unterdrückt.

2.2.3 Schmalbandige Laser

Wenn man den Laser so optimieren will, dass er nur auf einer dieser Moden arbeitet und damit möglichst schmalbandiges Licht erzeugt, muss man weitere frequenzselektive Elemente in der Resonator bringen. Damit kann man erreichen, dass alle Photonen, welche vom aktiven Medium emittiert werden, in die gleiche Mode des Resonators emittiert werden. Im Idealfall haben sie somit alle die gleiche Frequenz. In der Praxis muss man mehrere solche frequenzselektiven Elemente kombinieren.

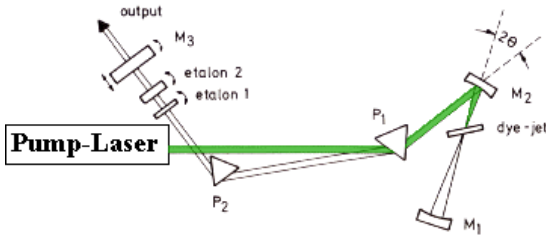


Abbildung 2.16: Resonator eines Farbstofflasers mit modenselektiven Elementen,

Die Figur stellt ein Beispiel dar: hier werden zwei Etalons, d.h. Platten unterschiedlicher Dicke in den Resonator gebracht. Für Wellenlängen, bei denen die Dicke der Etalons ein ganzzahliges Vielfaches der halben Wellenlänge darstellt, wird die Transmission maximal. Eines dieser Transmissionsmaxima sollte mit der Wellenlänge der gewünschten Mode übereinstimmen. Der Abstand zwischen den Moden ist indirekt proportional zur Dicke des Etalons,

Meist benötigt man zusätzlich ein breitbandig

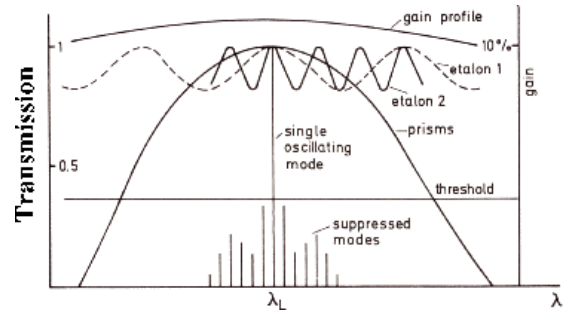


Abbildung 2.17:

abstimmbares Element. In diesem Beispiel wird dafür ein Prismenpaar verwendet, typischer sind abstimmbare Filter, wie z.B. ein Lyot-Filter. In der Figur ist dargestellt, wie man diese frequenzselektiven Elemente kombiniert, um eine Mode auszuwählen, welche dann allein über der Laser-grenze liegt.

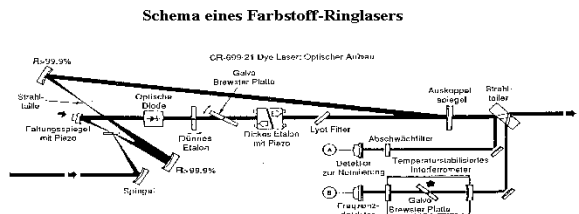


Abbildung 2.18: Schematischer Aufbau eines Farbstoff-Ringlasers

Der Resonator sieht in einem solchen System deshalb häufig sehr viel komplexer aus als auf dem einfachen Schema. In diesem Beispiel ist ein Ring-Farbstofflaser der Firma Coherent dargestellt. Als aktives Medium dient ein Farbstoffmolekül. Dieses wird in einer Flüssigkeit gelöst, welche durch den Resonator gepumpt wird. Dieses Zirkulationssystem ist die effizienteste Methode, um die Wärme abzuführen.

In einem linearen Resonator erhält man stehende Wellen, welche Knotenlinien aufweisen. An diesen Stellen findet keine Verstärkung statt, da hier keine Emission induziert werden kann. Es ist deshalb besser, Resonatoren mit umlaufenden Wellen zu verwenden. Dies ist möglich, wenn man den Resonator als Ring aufbaut und mit Hilfe einer "optischen Diode" eine der beiden Richtungen

gen etwas abschwächt, so dass die andere Umlaufrichtung bevorzugt wird.

Mit Hilfe weiterer selektiver Elemente (Galvos, Etalons, Lyot Filter) stellt man sicher, dass eine einzelne Mode über die anderen dominiert. Läuft der Laser auf einer einzelnen Mode ("single-mode operation"), so kann man sich bemühen, die verbleibenden Frequenzschwankungen zu reduzieren um einen möglichst monochromatischen Lichtstrahl zu erhalten. Heute erreichbar sind in kommerziellen Systemen Linienbreiten im Bereich von ca. 1MHz . In unserem Labor läuft ein System, dessen Linienbreite im Bereich von einigen kHz liegt, und Spezialsysteme erreichen Werte unterhalb von 1Hz . Diese Werte müssen verglichen werden mit der Frequenz des Lichtfeldes von etwas weniger als 10^{15}Hz .

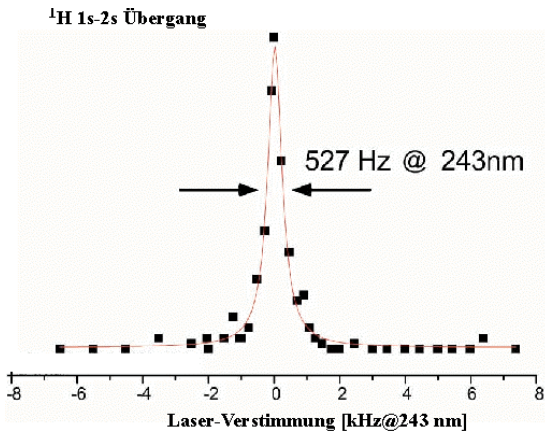


Abbildung 2.19: 1s-2s Übergang im ^1H -Atom.

In diesem Beispiel wurde ein schmalbandiger Laser verwendet um den 1s-2s Übergang des Wasserstoffatoms zu vermessen. Der Übergang ist besonders interessant weil er sich theoretisch recht gut berechnen lässt und über eine präzise Messung einige Naturkonstanten wie z. B. die Rydbergkonstante, den Lamb-Shift oder die Feinstrukturkopplungskonstante α bestimmt werden können.

2.2.4 Pulslaser

In anderen Fällen möchte man möglichst kurze Laserpulse erzeugen. Dies erlaubt einerseits

hohe Spitzenleistungen, andererseits gibt dies die Möglichkeit, schnelle Phänomene zu untersuchen. Mit Laborsystemen ("table-top") kann man heute Leistungen von einigen Terawatt (10^{12}W) erreichen, während einzelne Lasersysteme bis in den Petawatt Bereich (10^{15}W) vorstoßen. Hier bemüht man sich also, dafür zu sorgen, dass alle Photonen zur gleichen Zeit erzeugt werden. In der Praxis wichtiger ist wohl die Möglichkeit, schnelle Prozesse im Bereich von einigen fs zu untersuchen.

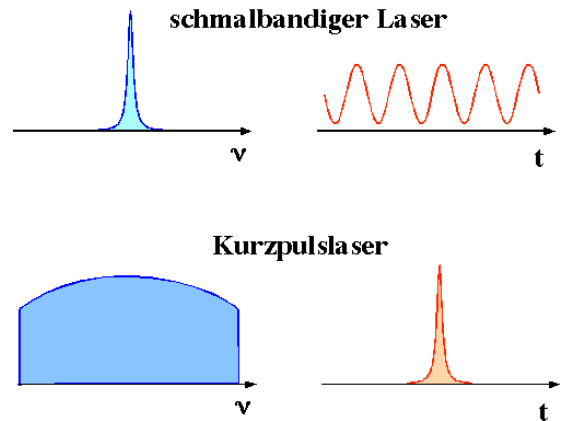


Abbildung 2.20: Verteilung der Laserpulse im Frequenz- und Zeitraum.

Bei einem schmalbandigen Laser bedingt eine schmale Verteilung im Frequenzraum eine kontinuierliche Operation: das Feld muss eine große Verteilung im Zeitraum (dem fouriertransformierten Raum) aufweisen. Bei einem Kurzpulslaser hat man umgekehrt eine schmale Verteilung im Zeitraum. Aus den Eigenschaften der Fouriertransformation ist somit klar dass die Verteilung im Frequenzraum breit sein muss ($\Delta\nu \Delta t > 1$). Ein Puls von 10fsec Dauer bedingt eine Unschärfe von 10^{14}s^{-1} und damit bei einer Wellenlänge von 800nm etwa ein 200nm breites Spektrum. Damit Licht mit einem so breiten Spektrum erzeugt werden kann muss das aktive Medium ein entsprechend breites Verstärkungsprofil besitzen.

Die einfachste Möglichkeit, kurze Pulse zu erzeugen, ist die Verwendung kurzer Pumppulse. Das klassische Beispiel dafür ist ein Blitzlampen-

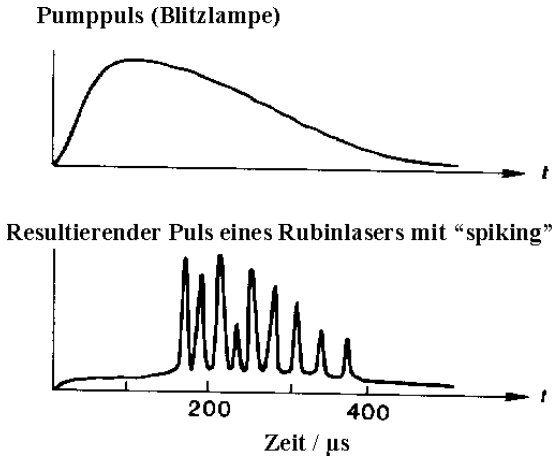


Abbildung 2.21: Pumpimpuls und resultierender Laserimpuls beim Rubinlaser.

gepumpter Rubinlaser. Damit erhält man Pulse mit hoher Energie; allerdings sind sie nicht besonders kurz und die Pulsform ist sehr unregelmäßig. Diese "Spikes" stellen Oszillationen dar: die Lichtleistung steigt exponentiell an wenn eine Inversion vorhanden ist. Durch die zunehmende Laserintensität steigt die stimulierte Emissionsrate, die Inversion wird abgebaut und die Verstärkung geht zurück. Die Zeitkonstante dieses Prozesses wird dominiert durch die Umlauf- und Zerfallszeit des Laserresonators. Auf einer langsameren Zeitskala wird die Inversion durch den Pumpimpuls wieder hergestellt und der nächste Spike entsteht.

2.2.5 Güteschaltung

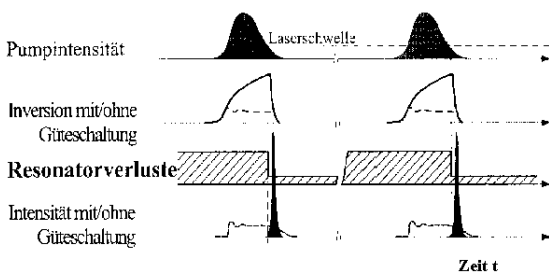


Abbildung 2.22: Modulation der Verstärkung

Eine Verbesserung erhält man indem man die Verluste des Resonator moduliert, z.B. indem

man einen schnell schaltbaren Absorber in den Resonator einbaut. Man unterscheidet zwischen aktiven Güteschaltern (z.B. elektrooptische Modulatoren, akustooptische Modulatoren) und passiven Güteschaltern, typischerweise sättigbaren Absorbern: in diesem Fall sinkt der relative Verlust wenn die Intensität eine gewisse Schwelle überschreitet.

Bei einem aktiven Güteschalter werden die Resonatorverluste hoch gehalten solange der Pumpimpuls dauert. Damit wird verhindert dass der Laser die Schwelle überschreitet und die Populationsinversion abbaut. Am Ende des Pumpimpulses, wenn die Inversion ihren Maximalwert erreicht hat, werden die Resonatorverluste ausgeschaltet. Aufgrund der jetzt sehr hohen Verstärkung kann die Laserintensität sehr schnell ansteigen, so dass eine hohe Spitzenleistung erreicht wird und ein kurzer Puls entsteht. Diese Technik wird als "Güteschaltung" oder "Q-switching" bezeichnet. Damit können Pulse von einigen J Energie und einigen $nsec$ Länge erzeugt werden.

Dies ist allerdings nur möglich wenn der Resonator sehr klein gehalten wird: Da der Auskoppelspiegel jeweils nur einen Teil des Lichtes auskoppelt muss der Puls mehrmals im Resonator umlaufen bevor er ihn ganz verlassen kann. Mit einigen $nsec$ Dauer hat man damit eine Grenze erreicht, welche u.a. durch die Größe des Resonators limitiert ist. Man kann dies auch im Frequenzraum ausdrücken: ein kürzerer Puls würde eine breitere Resonatormode benötigen.

2.2.6 Modenkopplung

Man kann aber auch in einem großen Resonator sehr kurze Pulse erzeugen, deren Dauer kurz ist im Vergleich zur Zerfallszeit des Resonators sowie zur Umlaufzeit im Resonator. In diesem Fall ist die räumliche Ausdehnung der Pulse somit klein im Vergleich zur Größe des Resonators.

Dies erreicht man mit Hilfe der Modenkopplung: wenn die verschiedenen Moden des Resonators phasenstarr aneinander gekoppelt sind addieren sie sich so, dass das Feld meistens verschwindet;

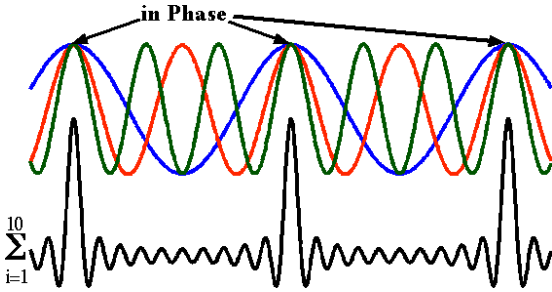


Abbildung 2.23: Gekoppelte Resonatormoden

lediglich für eine sehr kurze Zeit enthält man ein endliches Feld, einen kurzen Puls. In einem typischen Laser hat man bis zu einer Million Moden zur Verfügung (Modenabstand $\approx 10^8 \text{ Hz}$, Bandbreite $\approx 10^{14} \text{ Hz}$) und kann damit sehr kurze Pulse erzeugen.

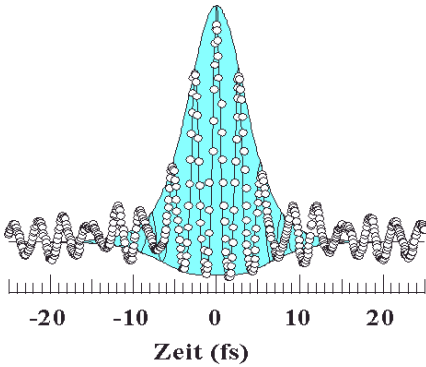


Abbildung 2.24: fs-Laserpuls.

Die Grenze liegt heute Werte im Bereich von etwa 5 fsec . In diesem Fall enthält der Puls nur noch etwa 5 Oszillationen. Dargestellt ist die Autokorrelationsfunktion, welche direkt gemessen werden kann. Der eigentliche Puls ist noch etwas kürzer.

Experimentell bestimmt man die Länge eines solchen Punktes über seine räumliche Ausdehnung. Diese beträgt für einen Puls von einigen fsec nur noch wenige μm . Man muss sich einen solchen Laserpuls somit eher als eine "Lichtscheibe" vorstellen als einen Lichtstrahl. Ein solcher Laserpuls muss offenbar anders diskutiert werden als ein kontinuierlicher Laserstrahl. Insbesondere kann man einen solchen Puls nicht einer einzelnen Mode des Laserresonators zuordnen. Die

Pulse können besser im Zeitbereich als im Frequenzbereich beschrieben werden. In einem modengekoppelten Laser läuft ein einzelner Laserpuls um, von dem mit einer fixen Wiederholrate ein Teil ausgekoppelt wird. Somit haben die einzelnen Pulse einer solchen Pulsfolge eine fixe Wiederholrate und eine feste Phasenbeziehung.

Die spektrale Breite des Lasers sollte hier im idealen Fall nur durch das aktive Medium begrenzt werden, d.h. der Resonator sollte möglichst breitbandig sein. Dies stellt insbesondere an die Spiegel einen großen Anspruch, da diese ja gleichzeitig eine hohe Reflektivität aufweisen müssen.

2.2.7 Attosekunden-Pulse

In den letzten Jahren ist es auch gelungen, noch kürzere Pulse zu erzeugen. Diese entstehen jedoch nicht in einem Laser, sondern extern.

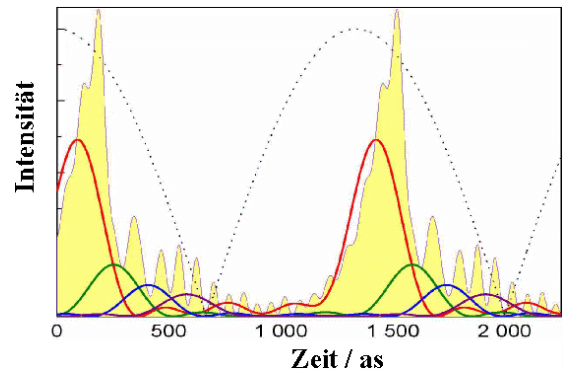


Abbildung 2.25: as Pulszug.

Man fokussiert dafür einen Puls mit sehr hoher Intensität in ein Edelgas (z.B. Xe). Aufgrund der hohen Laserintensität werden die Atome ionisiert und die Elektronen bewegen sich quasi-frei im elektrischen Feld des Lasers. Bei jedem Laserzyklus fliegen sie zweimal am Atomkern vorbei. Das Potenzial des Kerns erzeugt eine zusätzliche Beschleunigung. Dadurch strahlen die Elektronen in der Nähe des Kerns zusätzliche Energie ab. Aufgrund der kurzen Vorbeiflugzeit sind erhält man dabei sehr kurze Pulse.

2.3 Lasermedien

Eine weitere Unterscheidung von Lasertypen besteht in der Art des aktiven Mediums. Da jedes dieser Medien nur einen gewissen Parameterbereich abdeckt, bezüglich Leistung, Kohärenz, Wellenlängenbereich etc., existiert kein "ideales" Medium, sondern man muss je nach Anwendung das geeignete Medium auswählen.

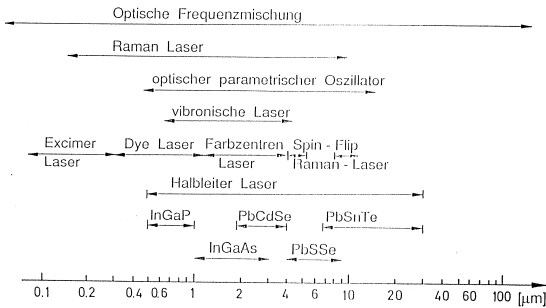


Abbildung 2.26: Wellenlängenbereiche unterschiedlicher Lasermedien

Ein wesentliches Kriterium für die Wahl eines Lasermediums ist der Wellenlängenbereich, der damit abgedeckt werden kann. Weiterhin spielen aber auch die Pulsdauer, Leistung, verfügbare Pumpquelle, etc. eine wichtige Rolle. In allen Fällen besteht die Notwendigkeit, eine Bevölkerungsinversion zu erzeugen. Die wichtigsten Medien sollen im folgenden kurz diskutiert werden.

2.3.1 Farbstoffe

Für das Erzeugen einer Besetzungsinversion kann man z.B. molekulare Zustände verwenden. Dabei bilden vibratorische Zustände von 2 elektronischen Zuständen ein 4-Niveausystem: Man pumpt den Übergang vom Grundzustand in einen elektronisch und vibratorisch angeregten Zustand. Relaxation des Vibrations-Freiheitsgrades bringt das Molekül in einen Zustand, der nur noch elektronisch angeregt ist. Der eigentliche Laserübergang findet von diesem Zustand in einen vibratorisch angeregten Zustand des elektronischen Grundzustandes statt. Dieser

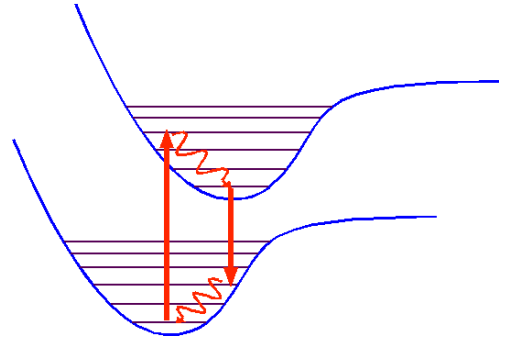


Abbildung 2.27: 4-Niveau Laser in einem molekularen System.

muss anschließend schnell entvölkert werden, damit die Populationsinversion erhalten bleibt.

Wichtige Beispiele für molekulare Systeme sind Farbstofflaser, bei denen das Farbstoffmolekül in einer Flüssigkeit gelöst ist. Sie bieten einen breiten Abstimmbereich für Dauerstrichlaser und die Möglichkeit, kurze Pulse zu erzeugen.

Bei molekularen Lasermedien nutzt man Übergänge zwischen Zuständen, welche sich sowohl durch elektronische als auch durch vibratorische Quantenzahlen unterscheiden. Der obere Zustand des Pumpübergangs sowie der untere Zustand des Laserübergangs sind vibratorisch angeregt. Populationsinversion kann in solchen Systemen relativ leicht erreicht werden weil die Schwingungsrelaxation, d.h. die Reduktion der vibratorischen Anregung auf null, in Flüssigkeiten meist sehr schnell ist. Pumpet man in einen elektronisch angeregten Zustand, so relaxieren die Moleküle sehr schnell in den vibratorischen Grundzustand. Der untere Zustand des Laserübergangs ist ein vibratorisch angeregter Zustand des elektronischen Grundzustandes und wird deshalb auch sehr schnell durch Vibrationsrelaxation (induziert durch Stöße) entleert.

Dabei handelt es sich typischerweise um aromatische Moleküle. Hier ist die Struktur eines der beliebtesten Farbstoffmoleküle dargestellt: Rhodamin 6G. Der Chromophor, d.h. der Bereich des Moleküls, welcher für die Absorption und Emission verantwortlich ist, wird durch den aromatischen Bereich bestimmt. Man pumpt im Be-

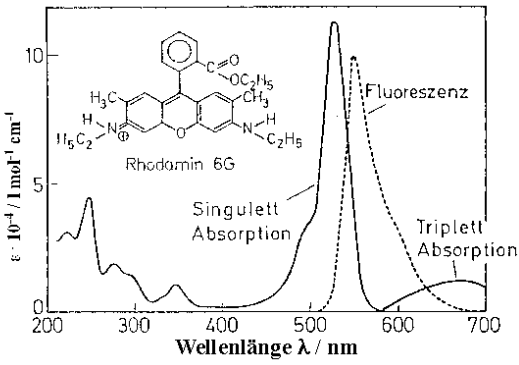


Abbildung 2.28: Rhodamin 6G

reich der Singulett Absorption, z.B. mit einer Wellenlänge von 514nm (Ar-Ionen Laser). Für die Emission ist die Stokes-verschobene Fluoreszenzlinie relevant, wobei der Bereich, der stark mit der Absorptionskurve überlappt, nicht nutzbar ist.

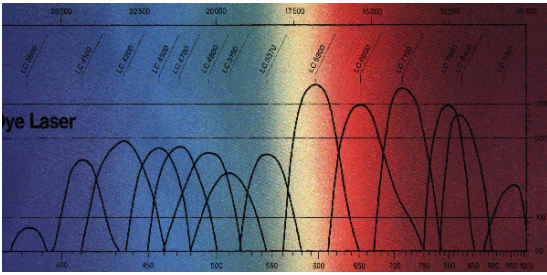


Abbildung 2.29: Übersicht über Laserfarbstoffe.

Es steht eine große Auswahl an Laserfarbstoffen zur Verfügung, mit denen sowohl für gepulste wie auch für Dauerstrichlaser ein relativ großer Wellenlängenbereich abgedeckt werden kann. Ein Molekül kann typischerweise über einen Wellenlängenbereich von etwa 50nm verwendet werden. Aufgrund des großen Bereiches über den Verstärkung verfügbar ist kann jeder Farbstofflaser über einen relativ breiten Wellenlängenbereich abgestimmt werden und die Bandbreite ermöglicht relativ kurze Pulse.

Der große Nachteil von Farbstofflasern ist dass sie meist mit einem Laser gepumpt werden müssen. Die Pump-Wellenlänge ändert auch mit dem Molekül, der Bereich, in dem gepumpt werden kann, ist jedoch meist mindestens so breit wie

Pumpe	Abstimm-bereich [nm]	Puls-dauer [ns]	Spitzen-leistung [W]	Puls-energie [mJ]	Pulsfolge-frequenz [s ⁻¹]	Mittlere Ausgangs-leistung [W]
Exzimer-Laser	370-985	10-200	≤10 ⁷	≤300	20-200	0.1-10
N ₂ -Laser	370-1020	1-10	<10 ⁵	<1	<10 ³	0.01-0.1
Blitz-lampen	300-800	300-10000	10 ² -10 ⁴	<5000	1-100	0.1-200
Ar ⁺ Laser Kr ⁺ Laser	400-1100	cw	cw	-	cw	0.1-5
Nd:YAG-Laser λ/2:530nm λ/3:355nm	400-920	10-20	10 ⁵ -10 ⁷	10-100	10-30	0.1-1
Kupfer dampf-laser	530-890	30-50	≈10 ⁴ -10 ⁶	≈1mJ	≤10 ⁴	≤10

Abbildung 2.30: Farbstofflaserdaten für verschiedene Pumpquellen.

der Verstärkungsbereich.

2.3.2 Molekulare Gaslaser

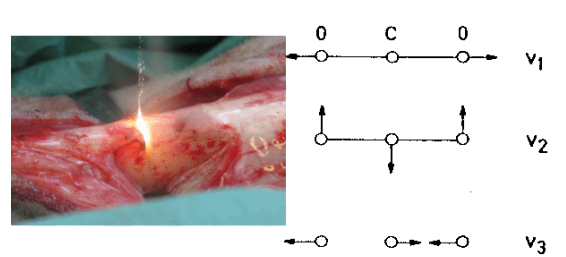


Abbildung 2.31: CO₂-Laser: Anwendung, molekulare Schwingungen.

Molekulare Medien werden auch in gasförmigem Zustand verwendet. Das klassische Beispiel dafür ist der CO₂-Laser, bei dem Molekülschwingungen des CO₂-Moleküls verwendet werden.

Die Schwingungen werden indirekt angeregt, indem zunächst Stickstoffmoleküle über Elektronenstoß angeregt werden. Von diesen wird die Anregung durch Stöße auf die CO₂-Moleküle übertragen. Damit können sehr hohe Leistungen erreicht werden, welche im industriellen Bereich z.B. für Schweißanlagen verwendet werden.

Die Wellenlängen liegen im Infraroten, bei etwa 10 μm. Die erreichbaren Wellenlängen sind diskret, d.h. ein CO₂ Laser ist nicht oder fast nicht

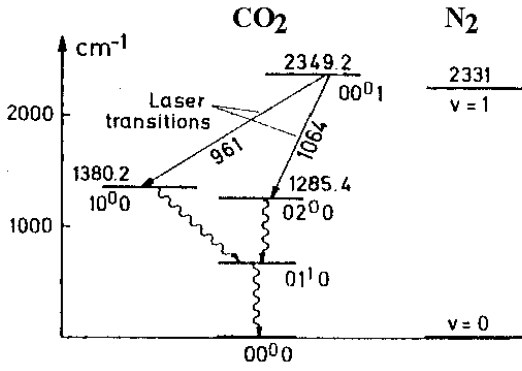


Abbildung 2.32: Rotationszustände im CO_2 -Laser

abstimmbar. Eine gewisse Struktur ist durch die Rotationszustände gegeben, welche diskrete Seitenbanden in einem Bereich von etwa $1.5 \mu m$ erzeugen. Bei hohem Druck kann man diese Linien soweit verbreitern, dass man die Wellenlänge über einen gewissen Bereich durchstimmen kann.

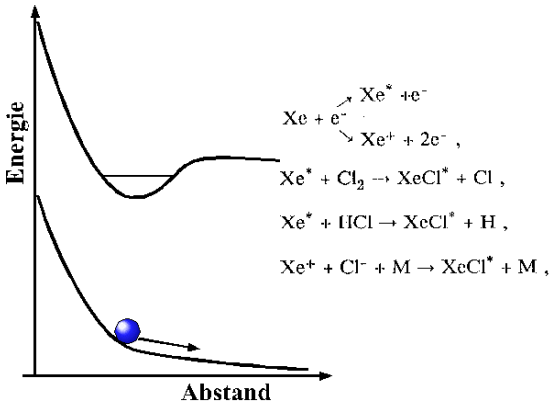


Abbildung 2.33: Excimer Laser

Ein anderes Beispiel ist der Excimerlaser. Der Name ist eine Abkürzung für "excited dimer", also ein angeregtes Dimer. Dabei handelt es sich um Moleküle, die nur im angeregten Zustand existieren, während der elektronische Grundzustand schnell dissoziiert und so die Entvölkerung des niedrig liegenden Laserniveaus sicherstellt.

Ein typisches Beispiel einer Excimer Mischung enthält Xenon, Cl_2 und HCl Gas. Über mehrere Pfade kann in diesem Gemisch durch Elektronenstoß angeregtes $XeCl^*$ entstehen. Dieses kann als

oberer Zustand des Laserübergangs dienen.

LasermEDIUM	F_2	ArF	$KrCl$	KrF	$XeCl$	XeF
Wellenlänge [nm]	157	193	222	248	308	357
Pulsenergie [mJ]	15	≤ 500	≤ 60	≤ 1000	≤ 500	200

Pulsbreiten: 10–200 ns
 Repetitionsraten: 1–200 Hz je nach Ausstattung
 Strahldivergenz: 1×3 mrad
 Schwankung der Pulsenergie von Pulse zu Puls: 3–10%
 Zeitjitter: ≈ 1 –3 ns

Abbildung 2.34: Daten einiger Excimerlaser

Durch unterschiedliche Kombinationen eines Edelgases mit einem Halogenatom können unterschiedliche Excimer-Moleküle erzeugt werden, welche Übergänge im ultravioletten Bereich des Spektrums besitzen. Excimerlaser werden immer gepulst betrieben und werden u.a. für die Augenchirurgie eingesetzt oder für die Chipherstellung. Excimerlaser haben die kürzeste Wellenlänge von Laborlasern. Allerdings ist die Strahlqualität sehr schlecht, d.h. die räumliche Kohärenz ist gering, so dass der Strahl nur begrenzt fokussierbar ist.

2.3.3 Atomare Gaslaser

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

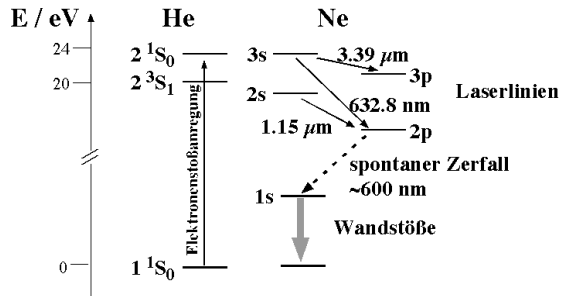


Abbildung 2.35: Niveaus des HeNe-Lasers.

Dieser Lasertyp dürfte vielen schon aus der Mittelschule, aus der Vorlesung oder aus dem Praktikum bekannt sein; man regt hierbei He Atome durch Elektronenstoß an. Diese übertragen die

Energie anschließend auf Ne Atome, und diese stellen das eigentliche aktive Medium dar.

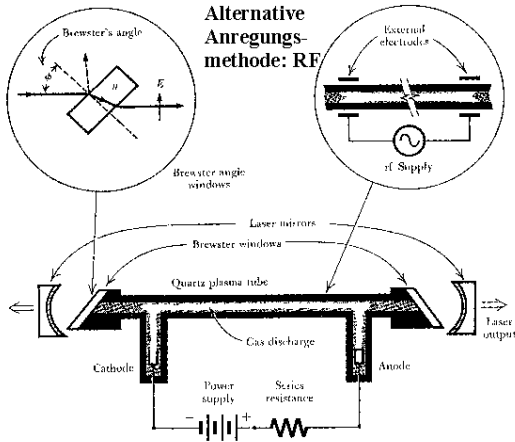


Abbildung 2.36: HeNe Laser: Resonatoraufbau.

HeNe Laser sind auch gut geeignet für die Diskussion von grundsätzlichen Aspekten, da sie relative einfach aufgebaut sind. Das Rohr, in dem die Plasma-Entladung stattfindet, muss relativ lang sein um genügend hohe Verstärkung zu erhalten. Außerdem muss der Querschnitt relativ gering sein, damit genügend Stöße der Atome mit der Wand stattfinden. Die Austrittsfenster sind im Brewsterwinkel montiert um die Reflexionsverluste klein zu halten.

Ähnlich funktioniert der Ar-Ionenlaser. Dieser emittiert im sichtbaren und ultravioletten Teil des Spektrums. Er erreicht relativ hohe Leistungen (bis ca. 20 W cw). Allerdings ist die Effizienz relativ gering, d.h. für 10 W optische Leistung benötigt man mehr als 20 kW elektrische Leistung.

2.3.4 Festkörperlaser: Festfrequenzlaser

Der Rubinlaser war der erste Laser überhaupt. Er wurde von einer Blitzlampe gepumpt, d.h. hier stellte Licht die Pumpenergie zur Verfügung.

Die Blitzlampe pumpt in diesem Fall den Übergang vom Grundzustand in verschiedene ange-

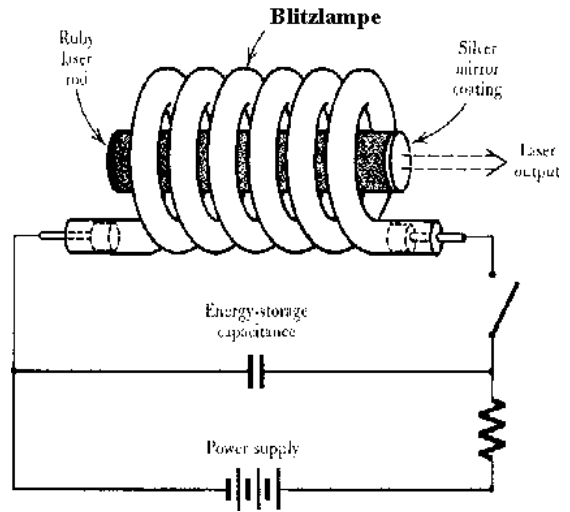


Abbildung 2.37: Rubinlaser : Prinzipieller Aufbau.

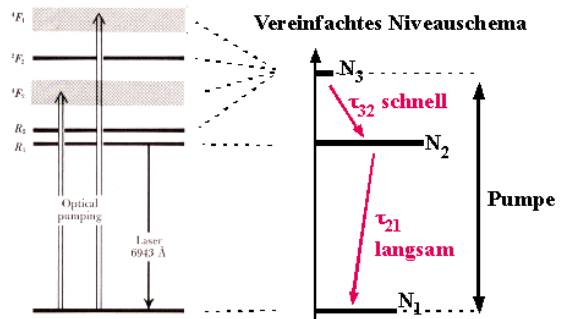


Abbildung 2.38: Niveauschema des Rubins. Links: reales System; rechts: vereinfachtes 3-Niveausystem.

regte Zustände, welche in der Figur mit den Termensymbolen R_2 , 4F_2 , 2F_2 , 4F_1 markiert sind. Aus diesen Zuständen relaxiert das System relativ rasch in den Zustand R_1 , der eine relativ lange Lebensdauer besitzt. Dadurch kann sich in diesem Zustand eine große Population ansammeln und es entsteht eine Inversion des Übergangs von R_1 in den Grundzustand. Bei geeigneter Rückkopplung stellt sich hier Lasertätigkeit ein. Da der Grundzustand dabei wieder gefüllt wird kann dieses System (3-Niveau-Laser) nicht im Dauerstrichbetrieb genutzt werden.

Die Seltenen Erden bieten eine relativ große Aus-

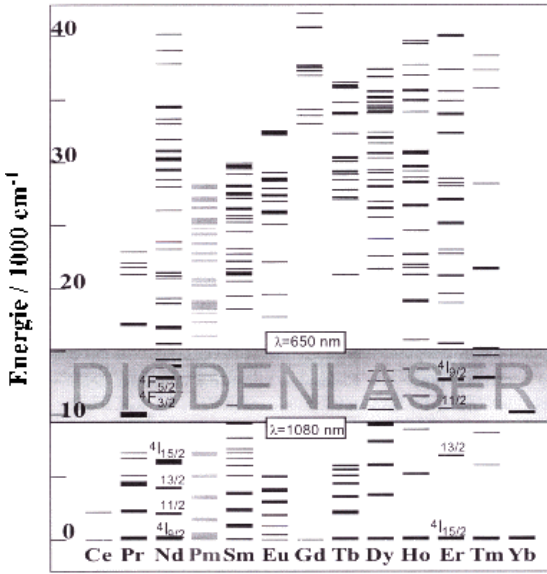


Abbildung 2.39: Energien seltener Erden.

wahl an möglichen Lasermedien.

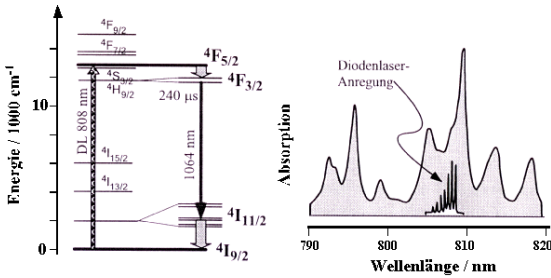


Abbildung 2.40: Zustände und Absorptionsspektrum von Nd:YAG.

Einer der wichtigsten Lasertypen heute ist der Nd:YAG Laser: Der Laserübergang geschieht hier zwischen zwei elektronischen Zuständen des atomaren Ions Nd, welches in einer Matrix aus Yttrium-Aluminium-Granat (Yttrium-Aluminium-Garnet, YAG) eingebettet ist. Da die atomaren Übergänge in diesem Fall relativ schmal sind ist dieser Lasertyp praktisch ein Festfrequenzlaser. Nd:YAG wird praktisch nur bei 1.064 μm verwendet, oder bei der zweiten Harmonischen (532 nm, grün).

Diese frequenzverdoppelten, diodengepumpten Laser werden vor allem als Pumpquelle verwendet, z.B. zum Pumpen von Ti:Sa Lasern (siehe

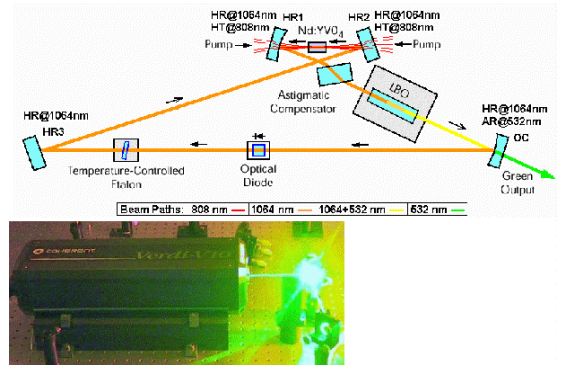


Abbildung 2.41: Frequenzverdoppelter Nd:YVO₄ Laser (Verdi; Coherent).

he nächster Abschnitt). Miniaturisierte Versionen davon werden in grünen Laserpointern verwendet.

2.3.5 Durchstimmbare Festkörperlaser

Lasermedium	Formel	Abstimmbereich [nm]	Betriebs temperatur	Pumpquelle
Ti:Saphir	Al ₂ O ₃ :Ti ³⁺	660-986	RT	Ar-Laser
Alexandrit	BeAl ₂ O ₄ :Cr ³⁺	710-820	22-300°C	Blitzlampe
		720-842	RT	Kr-Laser
	SrAlF ₆ :Ce ³⁺	825-1010	RT	Kr-Laser
	K ₂ NaF ₃ :Co ²⁺	1650-2070	77K	cw Nd:Y Laser
F ₂ ⁺ F-zentren	NaCl/OH ⁻	1400-1750	77K	cw Nd:YAG-Laser
F ₂ ⁺ II	" RbCl:Li	2,6-3,3 μm	77K	Kr ⁺ -Laser
F ₂ ⁺ A	" K:Li	2,38-3,99 μm	77K	Er:YLF-Laser
F ₂ ⁺	" LiF	500-640nm	77K	Farbstofflaser

Abbildung 2.42: Daten einiger durchstimmbarer Festkörperlaser.

Gerade auf dem Gebiet der Festkörperlaser hat in den letzten Jahren ein erheblicher Entwicklungsschub stattgefunden und es wurden neue Lasermaterialien entwickelt, die ein relativ breites Verstärkungsprofil aufweisen. Ein besonders wichtiges Material ist Ti:Saphir, bei dem Ti-Ionen in einer Saphir (=Al₂O₃) Matrix eingebettet sind.

Die Absorption dieses Materials ist gegenüber der Emissionswellenlänge um mehrere 100nm

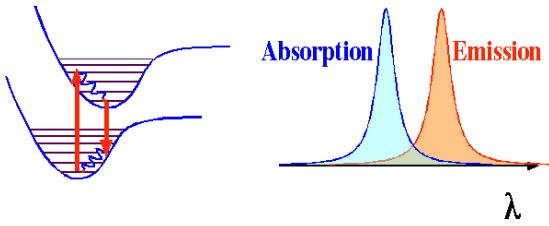


Abbildung 2.43: Absorption und Emission im TiSa-Laser.

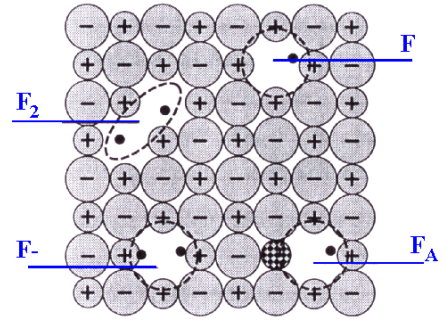


Abbildung 2.45: Farbzentren.

verschoben, weil die Minima des Grund- und angeregten Zustandes bei unterschiedlichen Kernkoordinaten liegen.

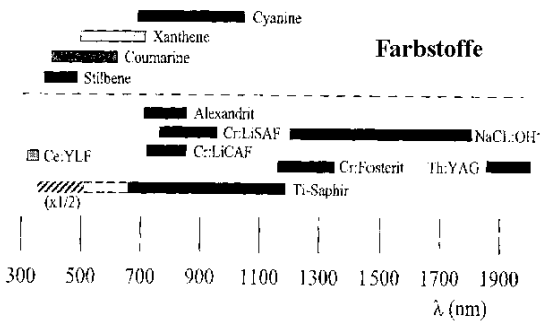


Abbildung 2.44: Verstärkungsbandbreite unterschiedlicher Lasermedien.

Da das Medium einen breiten Wellenlängenbereich abdeckt, kann diese Art von Lasern von etwa 700 bis 950 nm betrieben werden. Wie im Falle des Farbstofflasers wird die Frequenz durch den Resonator festgelegt; im Coherent Ringlaser Modell 899 kann man wahlweise eine Farbstoffdüse oder einen Ti:Sa Kristall einbauen.

Das gleiche Material ist aber auch eine ideale Basis für einen Kurzpulslaser, da seine große Bandbreite kurze Pulse ermöglicht. Eine Gruppe von Materialien liefert ähnliches Verhalten in unterschiedlichen Wellenlängenbereichen. Dazu gehören vor allem die beiden Materialien Cr:LiSAF und Cr:Fosterit.

Eine weitere Klasse von Festkörperlaser sind die Farbzentrenlaser. Die aktiven Zentren sind hier Defekte in Alkali-Halogenid Kristallen, wie z.B. Kochsalz. Diese emittieren im Infraroten.

Sie sind für diesen Wellenlängenbereich relativ attraktiv, da sie auch durchstimmbare sind. Allerdings müssen sie bei tiefen Temperaturen betrieben werden.

Festkörperlaser bieten gegenüber Farbstofflasern den Vorteil, dass sie weniger wartungsintensiv sind und höhere Ausgangsleistungen erlauben.

2.3.6 Halbleiterlaser

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

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

Man braucht dazu lediglich durch die Diode in Vorwärtsrichtung einen Strom zu leiten. Im Bereich des p/n Übergangs besteht dann eine Inversion.

Ein einfacher p/n Übergang reicht prinzipiell, um Lasertätigkeit zu erzielen. Allerdings ist es meistens nützlich, den Strom und auch das Licht

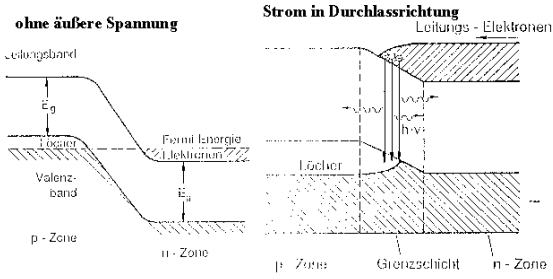


Abbildung 2.46: Halbleiterlaser

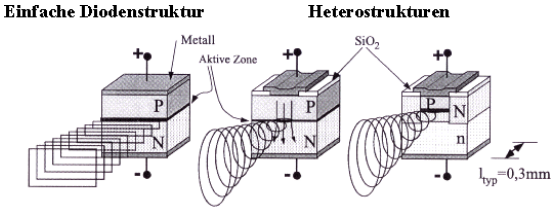


Abbildung 2.47: Einfache Laserdiodenstrukturen

auf eine kleinere Region zu begrenzen, um eine höhere Verstärkung zu erhalten und Verlustmechanismen zu begrenzen. Man erreicht dies über verschiedene Materialkombinationen.

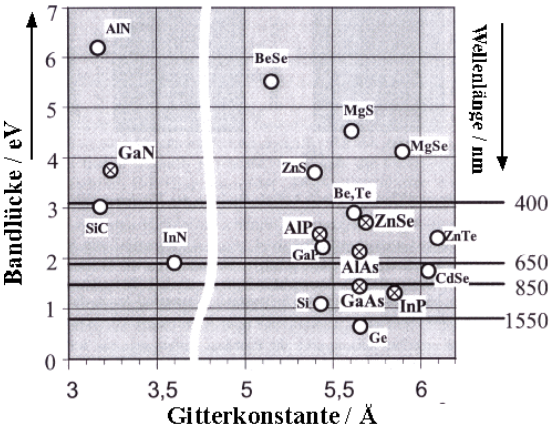


Abbildung 2.48: Übersicht über verschiedene Halbleitermaterialien.

Die Wellenlänge der Emission kann über die Bandlücke des Materials eingestellt werden. Halbleiterlaser können mit den meisten direkten Halbleitern hergestellt werden. Indirekte Halbleiter, wie z.B. Silizium, sind hingegen zu wenig effizient. Die wichtigsten Basismaterialien im sichtbaren und nahen infraroten Bereich des Spek-

trums sind GaAs, AlGaAs, InGaAs und weitere III/V Verbindungen. Für kürzere Wellenlängen bis ca. 400 nm können II/VI Materialien verwendet werden. Da sowohl die Dotierung wie auch das Wachstum dieser Materialien erheblich schwieriger zu kontrollieren ist als für III/V Systeme sind diese Systeme erst in den letzten Jahren zum Einsatz gekommen.

Für längere Wellenlängen sind vor allem Bleiverbindungen im Einsatz, die allerdings teilweise auch gekühlt werden müssen. Es gibt aber auch neuere Systeme, die auf GaAs basieren, das so strukturiert ist, dass die Bandlücke "unterteilt" wird und damit Photonen mit niedrigerer Energie erzeugt werden. Im Vergleich zu anderen Lasermaterialien haben Halbleiter eine sehr hohe Verstärkung: Über eine Distanz von wenigen 100 µm werden Verstärkungsfaktoren von bis zu zwei erreicht. Deshalb müssen Laserdioden nicht entspiegelt werden: die reflektierte Leistung an der Facete des Kristalles reicht aus um genügend Leistung im Resonator aufzubauen.

Halbleiterlaser haben verschiedene attraktive Vorteile:

- sie können in großen Mengen hergestellt werden (Chipproduktion)
- sie sind sehr kompakt (typische Dimensionen 5µm x 20 µm x 100 µm)
- sie sind sehr effizient: Bis zu 50% der elektrischen Energie kann in Licht umgewandelt werden. Halbleiterlaser sind somit die effizientesten Lichtquellen überhaupt.

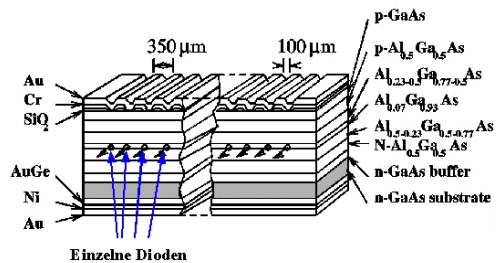


Abbildung 2.49:

Man kann heute Halbleiter-Lasersysteme mit $> 100\text{ W}$ Leistung herstellen. Dazu werden viele Dioden als Arrays zusammenschaltet.

2.3.7 Freie Elektronen Laser (FEL)

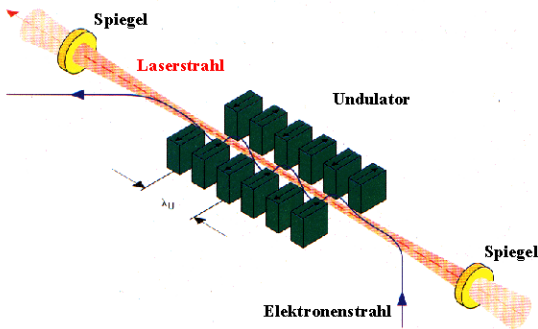


Abbildung 2.50: Arbeitsprinzip eines FEL.

Eine weitere Möglichkeit, Laserlicht zu erzeugen, verwendet einen Strahl aus relativistischen Elektronen, welche durch eine periodische Anordnung von Magneten durchgeschickt werden. Durch die Ablenkung der Elektronen in der Magnetstruktur strahlen sie weisses Licht aus. Die an den verschiedenen Magneten abgestrahlten Photonen überlagern sich und regen die Elektronen wiederum zu verstärkter Emission an.

FEL können einen extrem breiten Frequenzbereich abdecken: vom Infraroten bis in den Röntgenbereich. Werden sie im Infraroten oder sichtbaren Bereich betrieben, so kann man auch einen optischen Resonator verwenden. Da im Röntgenbereich keine effektiven Spiegel zur Verfügung stehen werden diese FEL ohne Resonator gebaut.

Das Interesse an solchen Laserquellen ist vor allem im Bereich der Strukturbestimmung sehr hoch: man hofft, durch die hohe Brillianz von kohärenter Strahlung, Messungen durchführen zu können, welche mit konventionellen Quellen nicht möglich sind. Dazu gehören z.B. Strukturbestimmungen an sehr kleinen Kristallen oder einzelnen Molekülen.

Gegenwärtig existieren FEL mit Wellenlängen bis in den Bereich von etwa 13 nm , mit Harmonischen bis zu 2.3 nm . Ein Röntgen-FEL (XFEL)

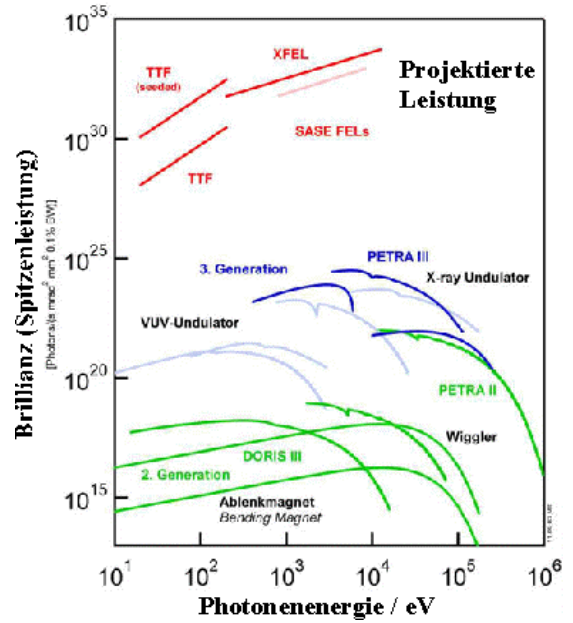


Abbildung 2.51: Brillianz von Röntgen-FEL im Vergleich mit konventionellen Röntgenquellen.

mit Wellenlängen bis zu 0.1 nm ist am DESY geplant.

2.4 Optische Frequenzmischung

2.4.1 Nichtlineare Optik

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

Die Grundlage für diese Frequenz-Konversionsprozesse ist immer eine nichtlineare Antwort des Mediums auf die externe Störung. In der Nähe des Gleichgewichts verhalten sich die meisten Systeme wie harmonische Oszil-

latoren, d.h. die Auslenkung ist proportional zur externen Kraft. Kein natürliches System ist jedoch über den gesamten Bereich harmonisch. So ist typischerweise ds Potenzial als Funktion des Abstands zwischen 2 Atomen auf der Seite des kurzen Abstandes Steiler als auf der Seite, wo der Abstand gegen Unendlich geht.

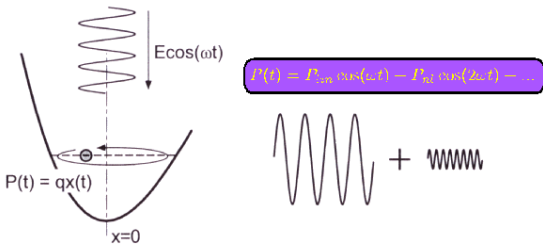


Abbildung 2.52: Polarisation des Mediums außerhalb des harmonischen Bereiches.

Bei einer monochromatischen Anregung schwingt das System im linearen Bereich mit der Frequenz der Anregung. Treibt man es aus dem linearen Bereich hinaus, so findet man auch höhere Harmonische. Die Polarisation des Systems kann dann geschrieben werden als

$$P(t) = P_{lin} \cos(\omega t) + P_{nl} \cos(2\omega t) + \dots$$

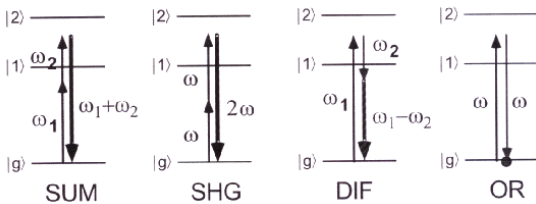


Abbildung 2.53: 3-Wellenmischprozesse.

Regt man das System mit mehreren Frequenzen an, so können im nichtlinearen Bereich auch Summen und Differenzen der eingestrahnten Frequenzen beobachtet werden.

Die wichtigsten Möglichkeiten der nichtlinearen Optik sind:

- Frequenzverdopplung / Erzeugung der zweiten Harmonischen: hier werden z.B. 2 Pho-

tonen addiert um eines der doppelten Frequenz zu erzeugen.

- Höhere Harmonische, insbesondere 3. Harmonische.
- Summenfrequenzerzeugung: Hier werden zwei Photonen unterschiedlicher Frequenz addiert, resp. subtrahiert (Differenzfrequenzerzeugung).
- parameterische Oszillatoren: Die entspricht dem inversen Prozess der Summenfrequenzerzeugung: ein Photon wird in zwei aufgespalten.

Allgemein werden diese Prozesse auch als 3-, resp. 4-Wellen-Mischprozesse bezeichnet. Dabei werden die einfallenden wie auch die auslaufenden Wellen gezählt. Frequenzverdopplung z.B. ist ein 3-Wellen-Mischprozess, da zwei einlaufende Photonen zu einem auslaufenden summiert werden.

2.4.2 Phasenanpassung

Wichtig ist in all diesen Fällen, dass alle Prozesse Energie und Impuls der Photonen erhalten müssen:

$$\nu_0 = \nu_1 + \nu_2$$

$$k_0 = k_1 + k_2.$$

Frequenz und Wellenvektor sind über die Beziehung $\nu = nck$ aneinander gekoppelt. Da der Brechungsindex $n(\lambda)$ im Allgemeinen wellenlängenabhängig ist bedingt die erste Gleichung nicht automatisch die zweite; es ist im Gegenteil häufig schwierig, beide Bedingungen zu erfüllen.

Man verwendet dafür z.B. die Polarisationsabhängigkeit des Brechungsindex. Um die Bedingung $n_{\perp}(\lambda) = n_{\parallel}(\lambda)$ zu erfüllen muss i.A. ein weiterer Parameter, wie z.B. Temperatur oder Kristallorientierung, angepasst werden.

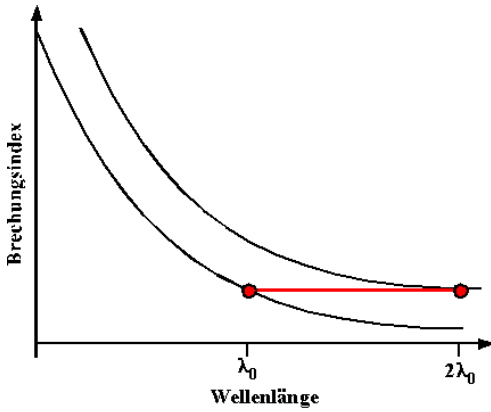


Abbildung 2.54: Phasenanpassung für Frequenzverdopplung oder OPO.

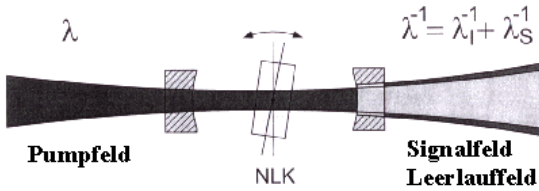


Abbildung 2.55: Aufbau eines optischen parametrischen Oszillators.

2.4.3 Optischer parametrischer Oszillator (OPO)

Eine der wichtigsten Methoden, breitbandig abstimmbares kohärentes Licht zu erzeugen bieten optische parametrische Oszillatoren. Dabei wird ein Photon in zwei Photonen geringerer Energie aufgespalten. Diese sind aus Gründen der Energieerhaltung über die Beziehung

$$\lambda^{-1} = \lambda_s^{-1} + \lambda_l^{-1}$$

verbunden. Die drei Wellenlängen beziehen sich auf Pumpwelle, Signal- und Leerlaufwelle im Vakuum.

Benötigt wird dafür in erster Linie ein geeignetes nichtlineares Material. Damit die Umwandlung ablaufen kann darf das Material kein Symmetriezentrum aufweisen. Effiziente Umwandlung erhält man in ferroelektrischen Materialien.

Ein beliebtes Material ist Beta-Barium Borat (β -BaB₂O₄, BBO). In der Figur ist dargestellt, wel-

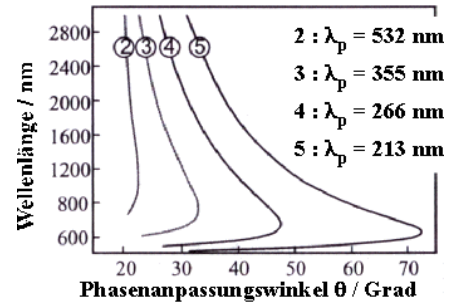


Abbildung 2.56: erreichbare Wellenlängen in BBO.

che Wellenlängen man damit bei einer geeigneten Pump-Wellenlänge erreichen kann.

3 Licht-Materie Wechselwirkung

3.1 Klassische Dispersionstheorie

3.1.1 Phänomenologie

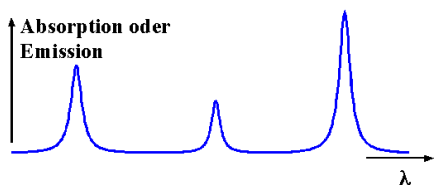


Abbildung 3.1: Resonanzen

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. Allgemein bekannt sind die schmalen Änderungen der Absorption, resp. Emission von atomaren Spektren.

Brechungsindex in Rb

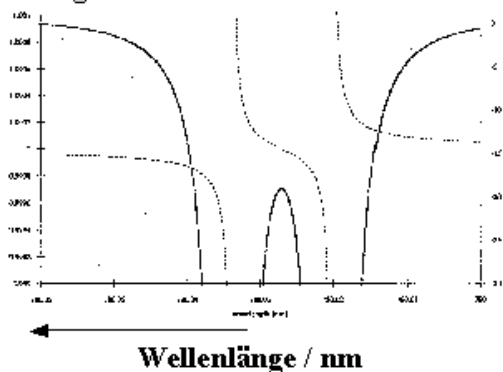


Abbildung 3.2: Variation des Brechungsindex in der Nähe der Resonanz von Rb Atomen (Steinberg und Chiao, Phys. Rev. A 49, 2071 (1994)).

Beim Brechungsindex ist man ebenso gewohnt,

dass in transparenten Materialien wie Glas der Brechungsindex mit der Wellenlänge (schwach) abnimmt, wobei die Variation über den gesamten Bereich des sichtbaren Spektrums in der Größenordnung von 0.1 liegt. In Materialien mit Absorptionslinien ist jedoch diese Variation sehr viel stärker. In der Figur ist die Wellenlängenabhängigkeit des Brechungsindex in der Nähe der Absorptionslinien von Rb Gas dargestellt. Sie führt dazu, dass die Ausbreitungsgeschwindigkeit von Licht in diesem Bereich entsprechend stark variiert. Sie kann sogar negativ werden, d.h. ein Puls erreicht das Ende einer entsprechenden Zelle bevor er am Eingang eintrifft.

Eine Interpretation dieser Effekte benötigt eine detaillierte Theorie darüber, wie die gemessenen Resonanzlinien zustande kommen. Eine vollständige Theorie liefert die Quantenmechanik. Allerdings ist die vollständige quantenmechanische Theorie nicht analytisch lösbar; lediglich ein stark vereinfachtes Modell, das Jaynes-Cummings Modell ist für analytische Beschreibungen (und damit für die Diskussion im Rahmen einer Vorlesung) zugänglich. Dieses Modell wird im Kapitel 3.2 im Detail dargestellt 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.

3.1.2 Das Lorentz-Lorenz Modell

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.

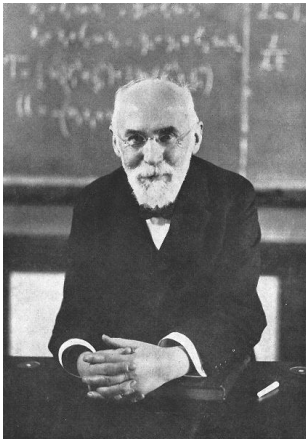


Abbildung 3.3: Hendrik Antoon Lorentz (1853-1928).

H.A. Lorentz hat weitere wichtige Beiträge zur Physik geliefert: er hat das Elektron postuliert; auf dieser Basis konnte der Zeeman-Effekt erklärt werden. Dafür erhielt er 1902 den Nobelpreis für Physik. Außerdem hat er die nach ihm benannte Lorentz-Kontraktion beschrieben. Seine Lorentz-Transformation bildete die Grundlage für die spezielle Relativitätstheorie.

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

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

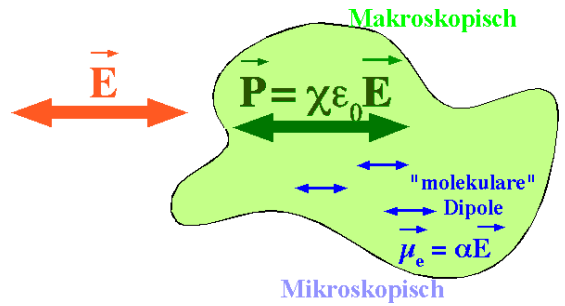


Abbildung 3.4: Polarisation des Mediums.

Die Proportionalitätskonstante χ wird als Suszeptibilität bezeichnet. Sie enthält die material-spezifischen 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 $\vec{\mu}_e$ 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.

3.1.3 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.

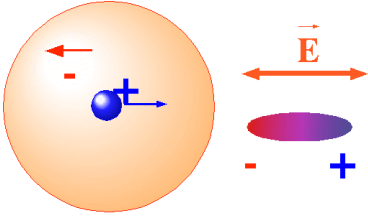


Abbildung 3.5: Dipol in einem oszillierenden Feld.

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

$$F = m\ddot{x} = -fx - eE_0 e^{i\omega t} - 2\gamma m\dot{x},$$

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 Koppungsterm 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.

3.1.4 Lösung

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

$$-m\omega^2 x_0 = -fx_0 - 2i\gamma m\omega x_0 - eE_0.$$

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 $\gamma \ll \omega_0$.

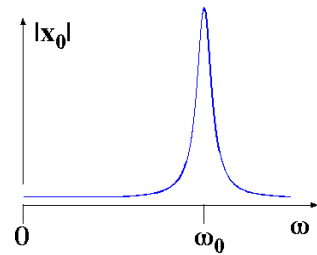


Abbildung 3.6: Verhalten der Amplitude für $\omega \approx \omega_0$.

Dann wird der Nenner sehr klein für $\omega \rightarrow \omega_0$, d.h. die Amplitude wird bei dieser Frequenz resonant verstärkt.

3.1.5 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

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

Wir betrachten kurz typische Größenordnungen dieser Variablen für den Fall freier Atome. Für optische Frequenzen sind $\omega, \omega_0 \approx 10^{15} s^{-1}$, $\gamma \approx 10^7 s^{-1}$, während die Laserverstimmung über einen Bereich von der Größenordnung von $|\Delta| \leq 10^9 s^{-1}$ verstimmt wird.

Es ist deshalb sinnvoll, für die weitere Betrachtung die Näherung $\omega_0 \gg \Delta, \gamma$ zu machen und Terme mit Δ^2 oder $\Delta\gamma$ zu vernachlässigen. Damit erhalten wir einen vereinfachten Ausdruck für die stationäre Amplitude:

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

Die Amplitude ist somit komplex. Auf der Resonanz ($\Delta = 0$) verschwindet der Realteil,

$$x_0(\Delta = 0) = i \frac{eE_0}{2m\gamma\omega_0}.$$

Der Dipol ist somit 90 Grad außer Phase.

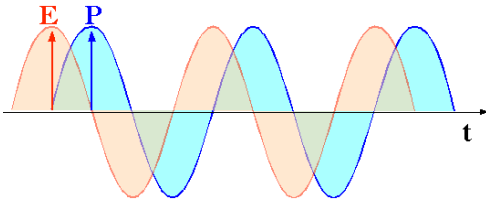


Abbildung 3.7: Polarisation und Feld bei resonanter Anregung.

3.1.6 Optische Polarisation

Diese oszillierenden Elektronen erzeugen somit ein Dipolmoment

$$\mu_e = \alpha E = -ex_0.$$

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

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

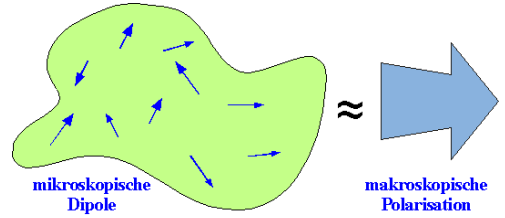


Abbildung 3.8: Mikroskopische Dipole und makroskopische Polarisation.

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

$$P_\omega = N\mu_e = -Nex_0.$$

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:

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

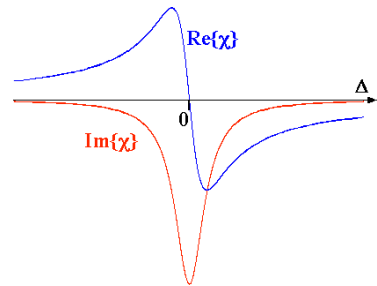


Abbildung 3.9: Realteil und Imaginärteil der Suszeptibilität als Funktion der Verstimmung.

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 Betragsmaximum auf und ist symmetrisch bezüglich der Verstimmung.

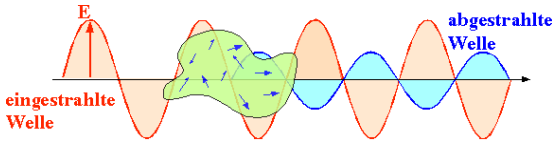


Abbildung 3.10: Polarisation, einfallende und auslaufende Wellen.

3.1.7 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:

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

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_e \quad \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0.$$

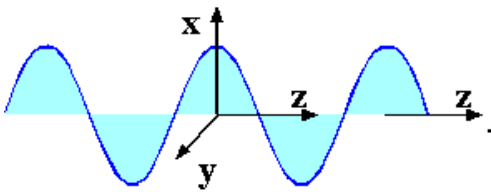


Abbildung 3.11: Lösungsansatz : ebene Welle || z.

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

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

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

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

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

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

$$\vec{\nabla} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix},$$

so können wir für den Fall der ebenen Welle die Ableitungen nach x und y zu 0 setzen und erhalten so den vereinfachten Ausdruck

$$\vec{\nabla}_{eW} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix}.$$

Angewendet auf einen transversalen Vektor wie das E -Feld wird

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

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.

3.1.8 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

$$k_z = \frac{\omega}{c} \sqrt{1 + \chi} = k_0 \sqrt{1 + \chi} \approx k_0 \left(1 + \frac{\chi}{2}\right)$$

sein, wobei wir die Beziehungen

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

für die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum und

$$k_0 = \frac{\omega}{c}$$

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

$$\vec{E} = \text{Re} \left[\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\omega t} e^{-ik_0 z (1 + \chi/2)} \right].$$

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

$$n = 1 + \frac{1}{2} \text{Re}[\chi] = 1 - \frac{Ne^2}{4m\epsilon_0\omega_0} \frac{\Delta}{\Delta^2 + \gamma^2}.$$

und für den Imaginärteil

$$\alpha = -\frac{\omega}{2c} \text{Im}[\chi] = \frac{Ne^2}{4cm\epsilon_0} \frac{\gamma}{\Delta^2 + \gamma^2}.$$

Die komplexe Suszeptibilität ist dann eine Funktion dieser reellen Größen:

$$\chi = 2(n - 1) - \frac{2ic\alpha}{\omega}.$$

Die Welle wird damit

$$\vec{E} = \text{Re} \left[\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\omega t} e^{-ik_0 z} e^{-\alpha z} \right].$$

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.

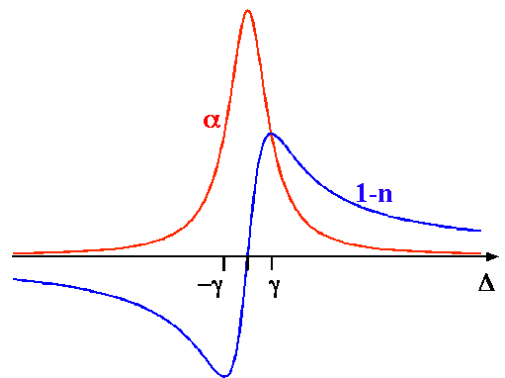


Abbildung 3.12: Absorption und Brechungsindex in der Nähe der Resonanz.

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.

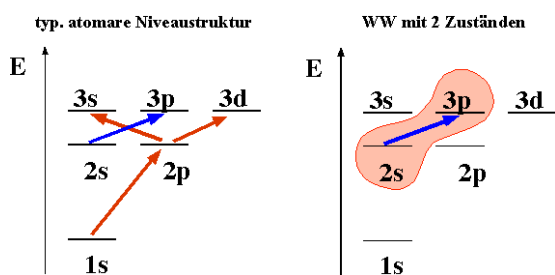


Abbildung 3.13: Zustände in einem realen Atom (links) und 2 relevante Zustände (rechts).

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 $|e\rangle$.

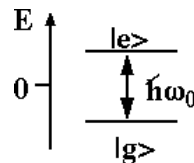


Abbildung 3.14: Das Zweiniveausystem.

Für dieses Zweiniveausystem können wir somit einen Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_{atom} = -\frac{\hbar}{2}\omega_0\sigma_z$$

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.

3.2.2 Quantisierung des Feldes

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

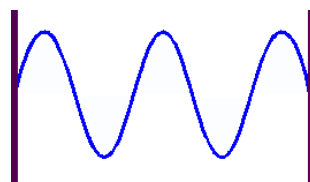


Abbildung 3.15: Einzelne Resonatormode.

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.

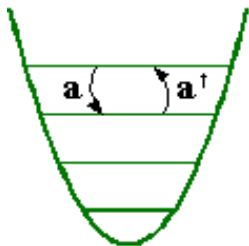


Abbildung 3.16: Quantenmechanischer harmonischer Oszillator.

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. Das elektrische Feld dieser Mode ist proportional zu

$$E \propto a^\dagger + a.$$

Für die Energie erhalten wir

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

Das Produkt $a^\dagger a$ aus Auf- und Absteigeoperator zählt die Anzahl der Photonen und wird deshalb auch als "Zahl-Operator" bezeichnet. ω_L stellt die Laserfrequenz dar; somit ist $\hbar\omega_L$ die Energie eines einzelnen Photons.

Damit haben wir die beiden Bestandteile des Jaynes-Cummings Modells diskutiert. 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. Im Folgenden diskutieren wir die Wechselwirkung zwischen diesen beiden Teilen.

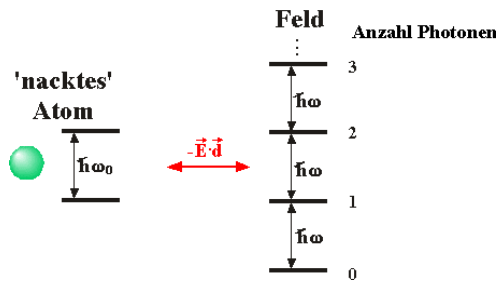


Abbildung 3.17: Das Jaynes-Cummings - Modell.

3.2.3 Wechselwirkung

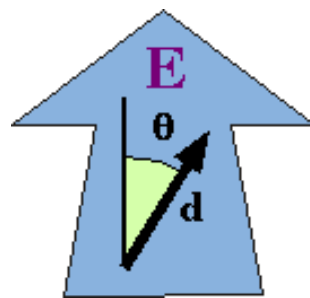


Abbildung 3.18: Dipol im elektrischen Feld.

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.

Atome besitzen kein permanentes elektrisches Dipolmoment. Somit verschwinden die Diagonal-

elemente des Dipoloperators,

$$\langle e|\vec{r}|e\rangle = \langle g|\vec{r}|g\rangle = 0.$$

Dagegen nehmen wir an, dass die Außerdiagonalelemente nicht verschwinden.

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

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

$$E \propto a + a^\dagger.$$

Damit können wir den Wechselwirkungsoperator schreiben als

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ww} &= \hbar\omega_1(a + a^\dagger)(\sigma_+ + \sigma_-) \\ &= \hbar\omega_1(a\sigma_+ + a\sigma_- + a^\dagger\sigma_+ + a^\dagger\sigma_-), \end{aligned}$$

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

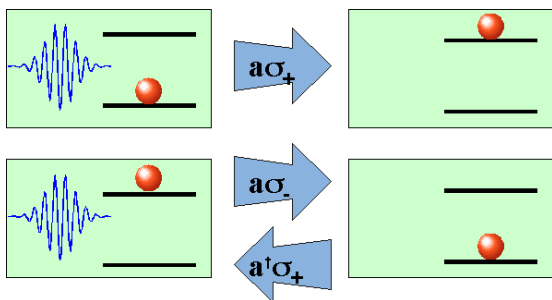


Abbildung 3.19: Wechselwirkungsprozesse des Kopplungsoperators.

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.

3.2.4 Reduzierte Wechselwirkung

Eine wesentlich 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

$$\mathcal{H}_{ww} \approx \hbar\omega_1(a\sigma_+ + a^\dagger\sigma_-).$$

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

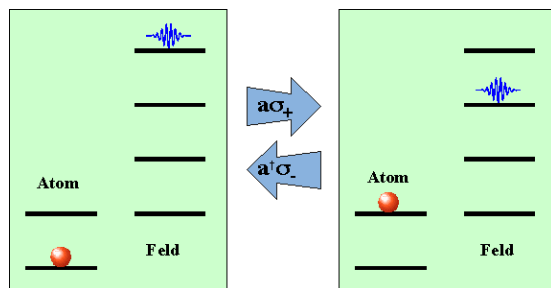


Abbildung 3.20: Wechselwirkungsprozesse.

Der Wechselwirkungsoperator kann direkt mit einem physikalischen Prozess verknüpft werden. Der eine Term 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.

3.2.5 Modell und Wirklichkeit

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.

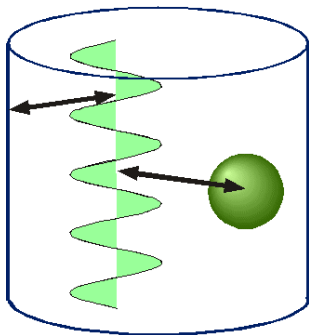


Abbildung 3.21: Mikrowellenresonator für die experimentelle Realisierung.

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).

3.2.6 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

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{Atom} + \mathcal{H}_{Feld} + \mathcal{H}_{WW}$$

eine Block-diagonale Struktur.

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

$n = 1, 2, 3, \dots$

Abbildung 3.22: Blockstruktur des Hamiltonoperators.

Jeder einzelne Block umfasst zwei Zustände und hat die Form

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

wobei als Basis für diesen Block die Zustände

$$\begin{pmatrix} |n, g\rangle \\ |n-1, e\rangle \end{pmatrix}$$

verwendet wurden.

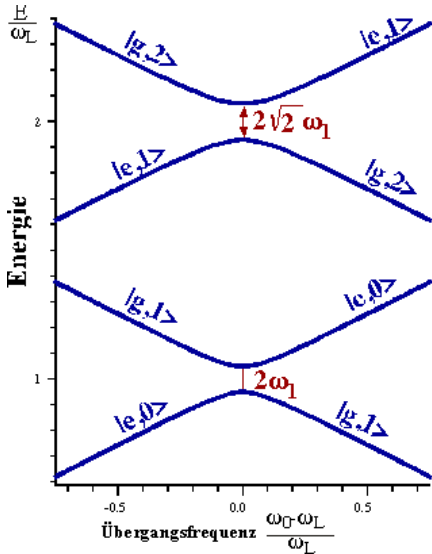


Abbildung 3.23: Energie der Eigenzustände des JC-Hamiltonoperators als Funktion der atomaren Übergangsfrequenz ω_0 .

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

$$\begin{aligned} \frac{E_1 - E_2}{\hbar} &= (n + \frac{1}{2})\omega_L - \frac{\omega_0}{2} - [(n - \frac{1}{2})\omega_L + \frac{\omega_0}{2}] \\ &= \omega_L - \omega_0, \end{aligned}$$

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

Betrachten wir die Eigenzustände, so werden die Energien durch die Kopplung verschoben. Der Einfluss ist gering wenn die Verstimmung $\omega_L - \omega_0$ groß ist, wird aber wichtig wenn die Laserfrequenz gleich der atomaren Übergangsfrequenz ist. Dann erzeugt die Kopplung eine Aufspaltung

von $2\sqrt{n}\omega_1$. Im allgemeinen Fall wird die Aufspaltung

$$\Delta = \sqrt{4n\omega_1^2 + (\omega_L - \omega_0)^2},$$

d.h. sie nimmt mit zunehmender Photonenzahl zu.

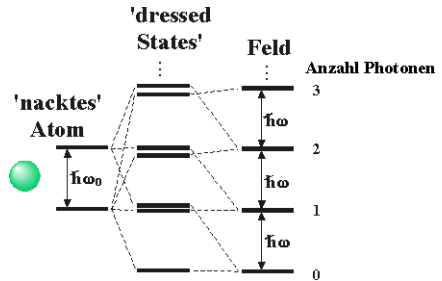


Abbildung 3.24: "Dressed states" als Eigenzustände des JC-Modells.

Das gekoppelte 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.

3.2.7 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.

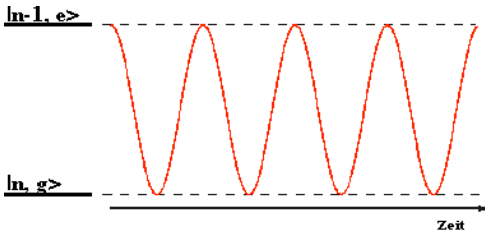


Abbildung 3.25: Oszillation der Aufenthaltswahrscheinlichkeit zwischen den beiden Zuständen.

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.

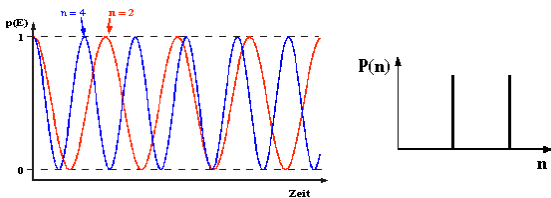


Abbildung 3.26: Abhängigkeit der Oszillationsfrequenz von der Photonenzahl n .

3.2.8 Zustände der Feldmode

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.

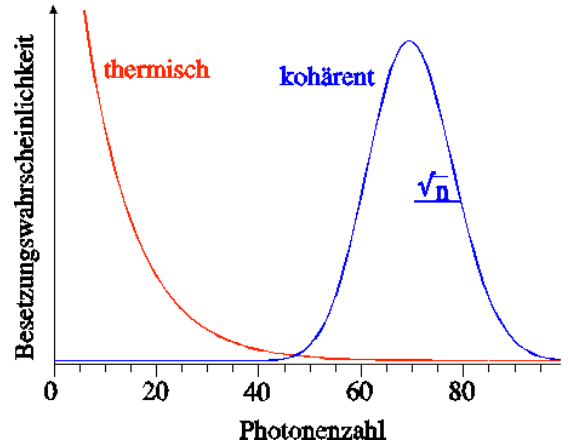


Abbildung 3.27: Photonenzahlstatistik für die beiden wichtigsten Zustände des Feldes.

In der Figur sind die beiden für die Praxis wichtigsten Zustände eines optischen Feldes dargestellt. Die rote Kurve zeigt die Wahrscheinlichkeitsverteilung für einen thermischen Zustand. Solche Zustände werden erzeugt wenn sich das Feld im thermischen Gleichgewicht befindet. Beispiele dafür sind die Lichtfelder von klassischen Lichtquellen, wie z.B. Sonne oder Glühbirne. 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 einer dieser Zustände 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.

3.2.9 Kopplung an thermischen Zustand

Das Feld, welches von einer klassischen Lichtquelle erzeugt wird, kann in guter Näherung durch einen thermischen Zustand beschrieben werden, d.h. durch die Bose-Einstein Statistik. Bei einer gegebenen Temperatur T findet man in einer Mode im Durchschnitt

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Photonen. Die entsprechende Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(n)$ ist jedoch sehr breit. Sie lautet

$$P(n) = \frac{\langle n \rangle^n}{(\langle n \rangle + 1)^{n+1}}.$$

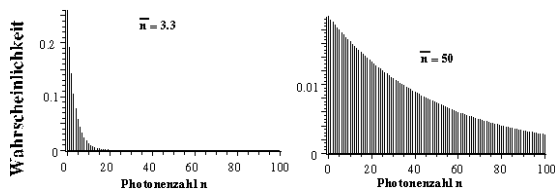


Abbildung 3.28: Thermische Zustände unterschiedlicher Temperatur.

In der Figur ist diese Verteilung für zwei unterschiedliche mittlere Photonenzahlen dargestellt. Die wichtigsten Aspekte sind:

- Die Wahrscheinlichkeit $P(n)$ ist immer am größten für $n=0$.

- Die Breite der Verteilung, d.h. die Schwankung der Photonenzahl ist von der gleichen Größenordnung wie ihr Mittelwert.

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.

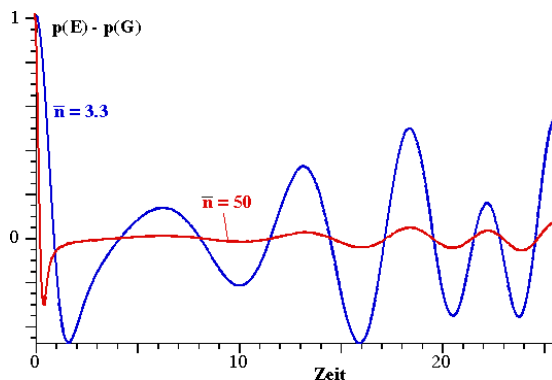


Abbildung 3.29: Thermischer Kollaps für zwei unterschiedliche Temperaturen.

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 Rahmen des Jaynes-Cummings Modells diskutieren wir die Wechselwirkung mit einer einzelnen Mode. Hier bleibt das Photon deshalb mit 50%iger Wahrscheinlichkeit auf dem Atom. 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.

3.2.10 Kopplung an kohärenten Zustand

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. In diesem Fall lautet die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(n)$ dafür, dass man n Photonen misst,

$$P(n) = \frac{\langle n \rangle^n}{n!} e^{-\langle n \rangle}.$$



Abbildung 3.30: Verteilung der Photonenzahl für einen kohärenten Zustand mit 10 Photonen.

Wie in der Figur gezeigt ist in diesem Fall der Wert der höchsten Wahrscheinlichkeit nahe beim klassischen Wert. Die Breite der Verteilung ist von der Größenordnung $\sqrt{\langle n \rangle}$.

Auch hier 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

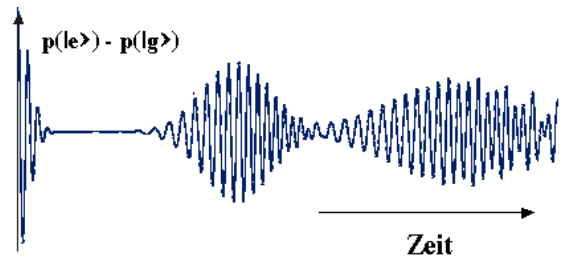


Abbildung 3.31: Kollaps und Revival für kohärenten Anfangszustand.

Grundzustand und die andere Hälfte im angeregten Zustand befindet. Nach diesem sogenannten Cummings Kollaps bleibt die Besetzungszahl konstant bei je 50%.

3.2.11 Revival

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.

Vergleicht man die Zerfalls- und Revival Kurven für Zustände mit unterschiedlicher Photonenzahl, so findet man genau die Unterschiede, die man auf Grund der Eigenschaften der Fouriertransformation erwartet. Nimmt die mittlere Photonenzahl zu, so steigt die Rabi-Frequenz.

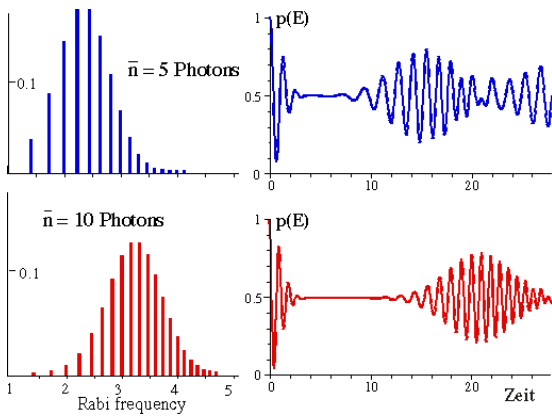


Abbildung 3.32: Kollaps und Revival für kohärente Zustände mit unterschiedlicher mittlerer Photonenzahl (=Energiedichte).

Gleichzeitig wird die Breite der Verteilung größer und damit zerfällt die Oszillation schneller. Der Abstand benachbarter Moden im Frequenzraum nimmt ab (sowohl absolut wie auch relativ) und deshalb nimmt die Zeit zu, bei der das "Echo" auftritt.

3.2.12 Experimentelle Verifizierung

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 nachwiesen.

Sie verwendeten dafür einen Mikrowellenresonator extrem hoher Güte ($Q \approx 10^{10}$) (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.

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 prä-

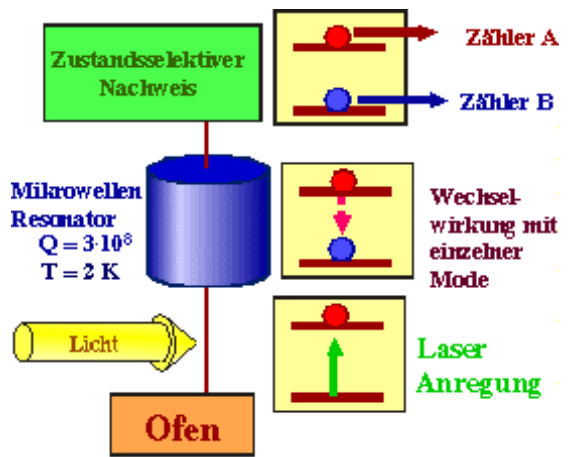


Abbildung 3.33: Experimenteller Aufbau für die Untersuchung des Jaynes-Cummings Systems.

pariert. 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.

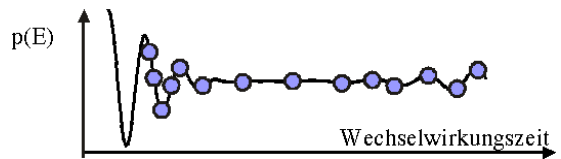


Abbildung 3.34: Besetzungswahrscheinlichkeit des angeregten Zustandes.

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 Re-

sonator. 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.

3.2.13 Vakuum-Rabi-Aufspaltung

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. Diese Kopplung an eine "leere" Mode ist der eigentliche Grund für das Auftreten von spontaner Emission, welche rein klassisch nicht erklärt werden kann.

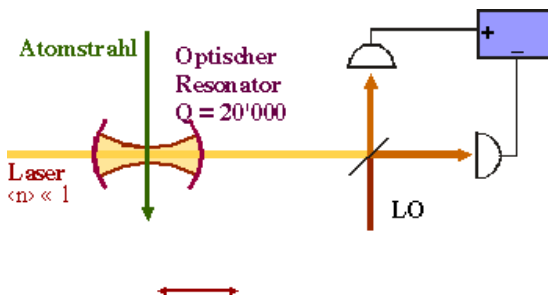


Abbildung 3.35: Experimenteller Aufbau für die Messung der Vakuum-Rabi Aufspaltung.

Die Aufspaltung dieser 'dressed states' aufgrund der Kopplung an den Vakuumzustand kann auch experimentell nachgewiesen werden. Erste Experimente dieser Art wurden im Mikrowellenbereich durchgeführt. Experimente im optischen Bereich wurden möglich, nachdem Spiegel mit extrem hoher Reflektivität verfügbar wurden ($R > 99.999\%$).

Um dem Jaynes-Cummings Modell möglichst nahe zu kommen, wurde für diese Experimente das Atom in einen optischen Resonator gebracht. Durch die räumliche Eingrenzung 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.

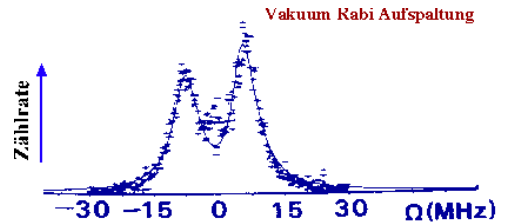


Abbildung 3.36: Messung der Vakuum-Rabi Aufspaltung.

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 Das halbklassische Zweiniveaumodell

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.

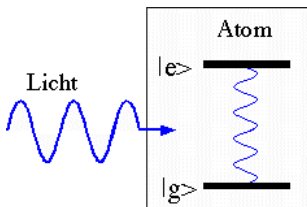


Abbildung 3.37: Klassische elektromagnetische Welle koppelt an Zweiniveaumodell.

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 einstrahlenden 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.

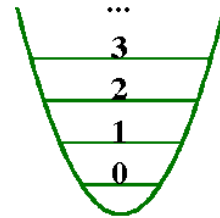


Abbildung 3.38: Quantenmechanischer harmonischer Oszillator.

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 die Matrixelemente

$$\langle e|\hat{d}|g\rangle = \langle g|\hat{d}|e\rangle = \mu_e$$

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

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 2×2 Matrizen dargestellt werden.

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

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.

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 (besser: orthogonale) Operatoren in Betracht. Eine besonders nützliche Basis besteht aus der Einheitsmatrix, sowie aus den drei Operatoren

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

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

Die Matrixelemente sind somit

$$\langle g|S_x|g\rangle = 0 \quad \langle g|S_x|e\rangle = \frac{1}{2} \quad \langle e|S_x|e\rangle = 0$$

$$\langle g|S_y|g\rangle = 0 \quad \langle g|S_y|e\rangle = -\frac{i}{2} \quad \langle e|S_y|e\rangle = 0$$

$$\langle g|S_z|g\rangle = \frac{1}{2} \quad \langle g|S_z|e\rangle = 0 \quad \langle e|S_z|e\rangle = -\frac{1}{2}.$$

Es handelt sich somit jeweils um die Pauli-Matrizen, multipliziert mit $1/2$, $S_\alpha = \frac{1}{2}\sigma_\alpha$.

Wie man leicht feststellen kann erfüllen diese Operatoren die Vertauschungsrelationen

$$[S_x, S_y] = iS_z \quad \text{und cycl.},$$

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

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

3.3.3 Hamiltonoperator

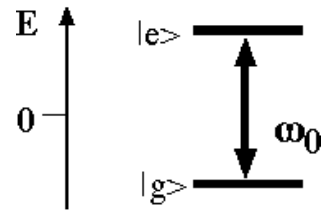


Abbildung 3.39: Atomares Zweiniveausystem.

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

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

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 und suchen die Zustandsfunktion, welche das Gesamtsystem beschreibt. Man könnte versucht sein, diesen Zustand mit der Funktion

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

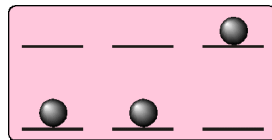


Abbildung 3.40: Einfaches Ensemble von 3 Atomen

zu schreiben.

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

$$\begin{aligned} \langle d \rangle &= \langle \psi | \hat{d} | \psi \rangle = \langle = \frac{\mu_E}{5} \begin{pmatrix} 2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\mu_E}{5} \begin{pmatrix} 2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{4\mu_E}{5}. \end{aligned}$$

Man würde also voraussagen, dass ein Dipolmoment in Richtung der x-Achse vorliegen würde. Dies entspricht nicht der Beobachtung und wäre auch nicht zu verstehen: das Dipolmoment eines Atoms in einem Eigenzustand des Hamiltonoperators verschwindet. Deshalb muss das Dipolmoment auch für das Ensemble verschwinden. Dies 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.

$$\begin{aligned} \langle d \rangle &= \sum_i \langle d_i \rangle = \frac{\mu_E}{5} [2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}] \\ &= \frac{\mu_E}{5} [2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}] = 0. \end{aligned}$$

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

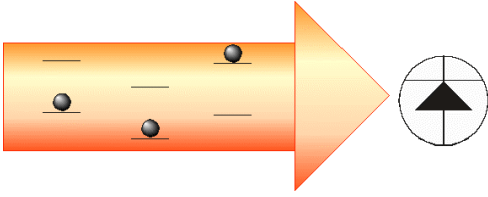


Abbildung 3.41: Messung an einem Ensemble.

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

$$\rho = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\psi_i\rangle \langle \psi_i| .$$

(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

$$\begin{aligned} \langle g|\rho|g\rangle &= \langle g|(a|g\rangle + b|e\rangle)(a^* \langle g| + b^* \langle e|)|g\rangle \\ &= (a \langle g|g\rangle + b \langle g|e\rangle)(a^* \langle g|g\rangle + b^* \langle e|g\rangle) = |a|^2 , \end{aligned}$$

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

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

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

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

oder in Matrixschreibweise

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

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 Dichteoperator für einen einzelnen Zustand ist ein Projektor:

$$|\psi\rangle \langle \psi| \varphi = \langle \psi| \varphi \rangle |\psi\rangle ,$$

d.h. das Resultat ist die Projektion des Vektors $|\varphi\rangle$ auf den Vektor $|\psi\rangle$. Für den Dichteoperator eines Einzelsystems gilt damit, wie für jeden Projektor, $\rho^2 = \rho$.

3.4.3 Dichteoperator für Ensembles

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

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

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.

Man überprüft leicht, dass für den Dichteoperator eines Ensembles das Quadrat nicht mehr gleich dem Operator ist, $\rho^2 \neq \rho$. Man kann dies verwenden, um zu prüfen, ob ein gegebener Dichteoperator ein Einzelsystem oder ein (echtes, gemischtes) Ensemble beschreibt; man spricht von reinen, resp. gemischten Zuständen.

Der Dichteoperator des Systems beschreibt ein gemittelt 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.

Wechselwirkungen

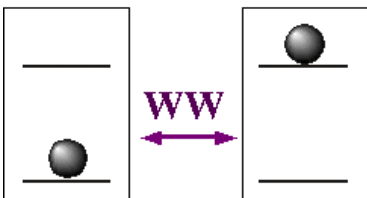


Abbildung 3.42: Wechselwirkung zwischen Atomen des Ensembles.

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.

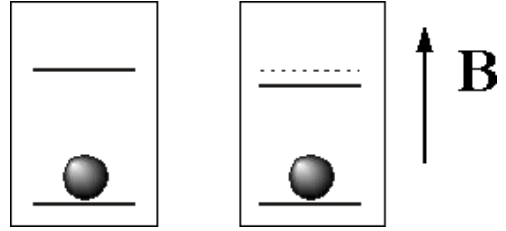


Abbildung 3.43: Inhomogenitäten.

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.

3.4.4 Zeitentwicklung

Ausgehend von der Schrödingergleichung

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

welche bekanntlich die Lösung

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

hat, finden wir die Bewegungsgleichung für den Dichteoperator als

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

Diese Gleichung ist auch als Liouville-Schrödinger Gleichung bekannt.

Die Lösung finden wir durch Einsetzen der Lösung der Schrödingergleichung:

$$\begin{aligned} \rho(t) &= |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| = e^{-i\mathcal{H}t} |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| e^{i\mathcal{H}t} \\ &= e^{-i\mathcal{H}t} \rho(0) e^{i\mathcal{H}t}. \end{aligned}$$

3.4.5 Erwartungswert

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

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

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

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

Daraus folgt zum Beispiel

$$\begin{aligned} Sp\{\rho(t)A\} &= Sp\{e^{-i\mathcal{H}t} \rho(0) e^{i\mathcal{H}t} A\} \\ &= Sp\{\rho(0) e^{i\mathcal{H}t} A e^{-i\mathcal{H}t}\} = Sp\{\rho(0) A(t)\} \end{aligned}$$

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.

3.4.6 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

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

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,

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

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

$$\begin{aligned} \rho' &= \frac{1}{2} \mathbf{1} + s_x S_x + s_y S_y + s_z S_z. \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} s_z & s_x - i s_y \\ s_x + i s_y & -s_z \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Der Einheitsoperator $\mathbf{1}$ 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:

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

Die Diagonalelemente können somit kleiner, gleich oder größer als Null sein. Sie stellen nicht Populationen dar, sondern die Abweichung der Populationen von der Gleichverteilung. In spektroskopischen 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- $\frac{1}{2}$ System betrachten, so entspricht dies genau den 3 kartesischen Komponenten des Drehimpulsvektors.

3.4.7 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- $\frac{1}{2}$ 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- $\frac{1}{2}$ 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 $+\frac{1}{2}$ Zustand des Pseudo-Spins, während der angeregte Zustand dem $-\frac{1}{2}$ Zustand entspricht. Die Energiedifferenz zwischen Grund- und angeregtem Zustand entspricht der Zeeman-Aufspaltung. Die z-Komponente des Pseudo-spins 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 (\rightarrow Kap. 3.5).

3.4.8 Beispiel: Populationen

Befindet sich das Atom im Grundzustand, so ist die Zustandsfunktion

$$\psi_a = |g\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und die entsprechende Dichtematrix

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

Die entsprechende reduzierte Dichtematrix ist

$$\rho_a = S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Für diesen Zustand gilt somit $s_x = s_y = 0$ und $s_z = 1$. Falls dieser Dichteoperator ein Ensemble beschreibt, so sind alle Atome im Grundzustand $|g\rangle$, und die Energie des Systems erreicht ein Minimum,

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

Für den angeregten Zustand gilt

$$\psi_b = |e\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

und die entsprechende Dichtematrix

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

Die entsprechende reduzierte Dichtematrix ist

$$\rho_b = -S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die Figur illustriert die Orientierung des Pseudospins und zeigt die entsprechende Zustandsfunktion 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 ($s_z = +\frac{1}{2}$), für Atome im angeregten Zustand nach unten ($s_z = -\frac{1}{2}$).

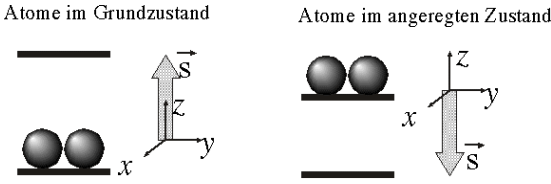


Abbildung 3.44: Atome im Grundzustand, resp. angeregten Zustand.

3.4.9 Kohärenzen

Die transversalen Komponenten des Pseudospins bezeichnen das optische Dipolmoment des Atoms und entsprechen dem quantenmechanischen Analogon der oszillierenden Dipolmomente der Lorentz-Lorenz Theorie.

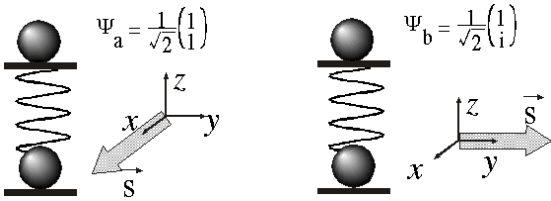


Abbildung 3.45: Kohärenz und Dipolmoment

Wie in der Figur gezeigt bezeichnen sie eine kohärente Superposition der beiden Zustände. In der linken Bildhälfte ist eine Überlagerung mit identischen Phasen dargestellt,

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Dem entspricht eine reduzierte Dichtematrix

$$\rho_a = S_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Auf der rechten Seite sind die beiden Koeffizienten imaginär, respektive reell:

$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}.$$

Dem entspricht eine reduzierte Dichtematrix

$$\rho_b = S_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

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.

3.4.10 Der Hamiltonoperator des Pseudospins

Wir betrachten den Hamiltonoperator inklusive der Störung

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

In der Spin- $\frac{1}{2}$ 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.

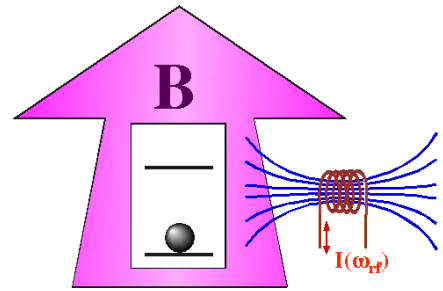


Abbildung 3.46: Spin-Analog der Wechselwirkungen.

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

$$\omega_x = \frac{1}{2} \mu_x B_x$$

beträgt und B_x die Amplitude des magnetischen Wechselfeldes bezeichnet.

3.5 Die optische Blochgleichung

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,

$$Sp\{S_\alpha S_\beta\} = \frac{1}{2}\delta_{\alpha\beta}$$

als Erwartungswerte berechnet werden:

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

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

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

Ausmultiplizieren ergibt

$$\dot{\rho} = -i\{-\omega_0[s_x(t)[S_z, S_x] + s_y(t)[S_z, S_y]$$

$$\begin{aligned} &+ s_z(t)[S_z, S_z]] - 2\omega_x \cos(\omega_L t)[s_x(t)[S_x, S_x] \\ &+ s_y(t)[S_x, S_y] + s_z(t)[S_x, S_z]]\} \end{aligned}$$

Mit Hilfe der Kommutatoren schreiben wir dies als

$$\begin{aligned} \dot{\rho} &= -\omega_0(s_x(t)S_y - s_y(t)S_x) \\ &\quad - 2\omega_x \cos(\omega_L t)(s_y(t)S_z - s_z(t)S_y). \end{aligned}$$

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

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

Diese Gleichung ist identisch mit der klassischen Bewegungsgleichung für einen Drehimpuls, auf den ein Drehmoment wirkt. Die drei Entwicklungskoeffizienten s_x , s_y und s_z 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 $10^{14} - 10^{15} \text{ Hz}$, die der oszillierenden ist für kontinuierliche Laser kleiner als 10^9 . Lediglich bei gepulsten Hochleistungslasern kann diese Komponente sehr groß werden. In diesen extremen Fällen ist jedoch die 2-Niveau Näherung für die Beschreibung des Materials nicht mehr gültig.

3.5.2 Freie Präzession

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

verschwindender Kopplung, $\omega_x = 0$, d.h. für freie Atome. In diesem Fall ist die z -Komponente zeitunabhängig, $s_z(t) = s_z(0)$, 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:

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

Die Kopplungsmatrix entspricht offenbar einer Drehmatrix. Die Lösung wird damit

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

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

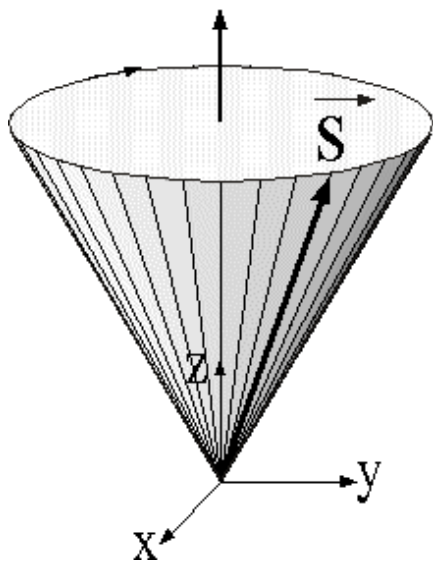


Abbildung 3.47: Freie Präzession des Pseudospins.

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,

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

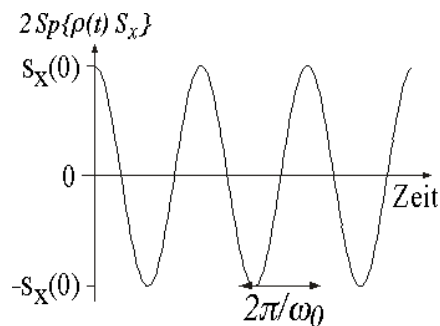


Abbildung 3.48: Zeitabhängigkeit des elektrischen Dipolmomentes.

entspricht diese Präzession einer Oszillation mit der Frequenz ω_0 , wie in der Figur dargestellt.

Diese Oszillation ist das quantenmechanische Analogon des oszillierenden Dipols der Lorentz-Lorenz Theorie. Allerdings betrachten wir hier den Fall ohne Laserfeld, d.h. das Atom muss vorher in diesen kohärenten Zustand gebracht werden.

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 $5 \cdot 10^{14} \text{ Hz}$ 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 Bewe-

gung des Pseudospins 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. Da es sich mit dem Feld mitdreht erscheint dieses im neuen Koordinatensystem statisch.

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

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

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

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

Wir erhalten

$$\begin{aligned} \langle \psi | S_x | \psi \rangle &= c_1^* c_2 + c_2^* c_1 = \frac{1}{4} (e^{i\omega_L t} + e^{i-\omega_L t}) \\ &= \frac{1}{2} \cos(\omega_L t), \end{aligned}$$

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

3.5.4 Transformation von Zuständen

Ein quantenmechanischer Zustand

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \begin{pmatrix} c_g \\ c_e \end{pmatrix} = c_g |g\rangle + c_e |e\rangle \\ &= c_g |g^r\rangle e^{-i\omega_L t/2} + c_e |e^r\rangle e^{i\omega_L t/2} \end{aligned}$$

besitzt die beiden Darstellungen

$$\begin{aligned} \psi^{lab}(t) &= \begin{pmatrix} c_g \\ c_e \end{pmatrix} \\ \psi^r(t) &= \begin{pmatrix} c_g e^{-i\omega_L t/2} \\ c_e e^{i\omega_L t/2} \end{pmatrix} = U^{-1} \psi^{lab}(t). \end{aligned}$$

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:

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

Wir benutzen die Transformation für den Dichteoperator

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= Sp\{\rho^r A^r\} = Sp\{U^{-1}\rho U A^r\} \\ &= Sp\{\rho U A^r U^{-1}\}, \end{aligned}$$

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

$$A = U A^r U^{-1}$$

oder

$$A^r = U^{-1} A U.$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi^r(t) &= \frac{\partial}{\partial t} (U^{-1}(t) \psi^{lab}(t)) = \\ &= \dot{U}^{-1}(t) \psi^{lab}(t) + U^{-1}(t) \frac{\partial}{\partial t} \psi^{lab}(t). \end{aligned}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi^r(t) = [\dot{U}^{-1}(t) U(t) - U^{-1}(t) i \mathcal{H}^{lab} U(t)] \psi^r(t).$$

Der Hamiltonoperator soll der Erzeuger der zeitlichen Entwicklung bleiben. Deshalb müssen wir

fordern, dass seine Darstellung im rotierenden Koordinatensystem gegeben ist durch

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

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

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

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

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

an und finden

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

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

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

Wegen

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

gilt

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

Schließlich ist

$$\dot{U}^{-1}(t)U(t) = \frac{\partial}{\partial t}(e^{-i\omega_L t S_z})e^{i\omega_L t S_z} = -i\omega_L S_z,$$

so dass

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

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.

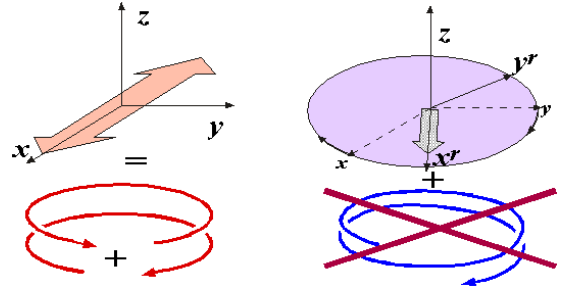


Abbildung 3.49: Effektives Laserfeld im Laborsystem (links) und im rotierenden Koordinatensystem (rechts).

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. desjenigen Terms, 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

$$\Delta\omega_{BS} = \frac{\omega_x^2}{2\omega_L}.$$

Diese Verschiebung der Resonanz wird in der magnetischen Resonanz als Bloch-Siegert shift bezeichnet (F. Bloch and A. Siegert, 'Magnetic resonance for nonrotating Fields', Phys. Rev. 57, 522-527 (1940).) und in der Laserspektroskopie als dynamischer Stark-Effekt.

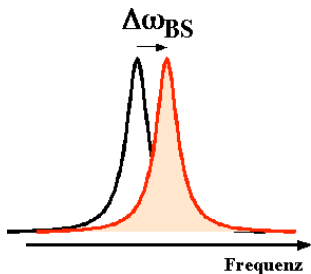


Abbildung 3.50: Bloch-Siegert Shift.

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

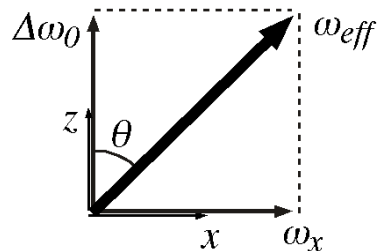


Abbildung 3.51: Effektives Feld.

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. Das effektive Feld ω_{eff} , die Vektorsumme der beiden Komponenten, liegt in der xz Ebene, unter einem Winkel

$$\theta = \tan^{-1} \frac{\omega_x}{\Delta\omega_0}$$

von der z -Achse. Die Stärke dieses Feldes ist

$$\omega_{eff} = \sqrt{\Delta\omega_0^2 + \omega_x^2}.$$

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 Diagonalfom 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:

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

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

$$\lambda_{\pm} = \pm \frac{1}{2} \omega_{eff} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\Delta\omega_0^2 + \omega_x^2}$$

sind.

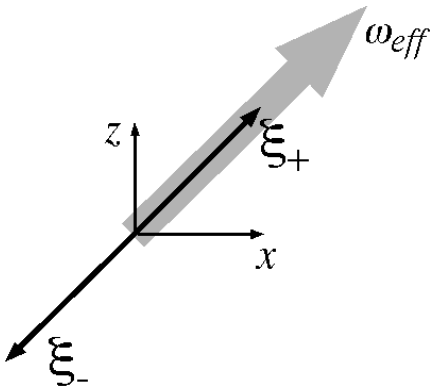


Abbildung 3.52: Eigenvektoren entlang der Richtung des effektiven Feldes.

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

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

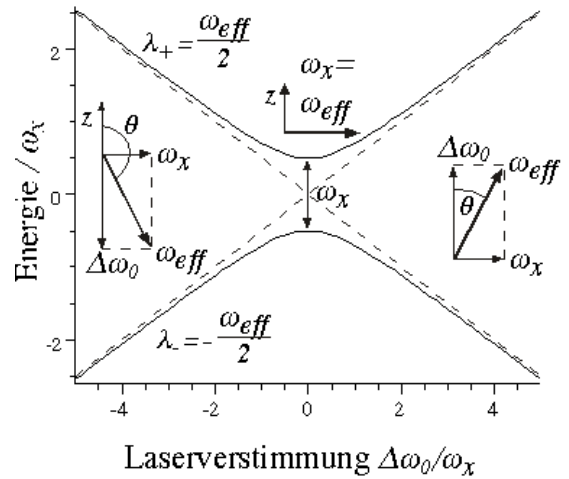


Abbildung 3.53: Energien und Eigenzustände im rotierenden Koordinatensystem als Funktion der Laserverstimmung.

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 ω_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

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Delta\omega_0 & \Delta\omega_0 & \omega_x \\ \Delta\omega_0 & -\Delta\omega_0 & \omega_x \\ -\omega_x & \omega_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix}.$$

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.

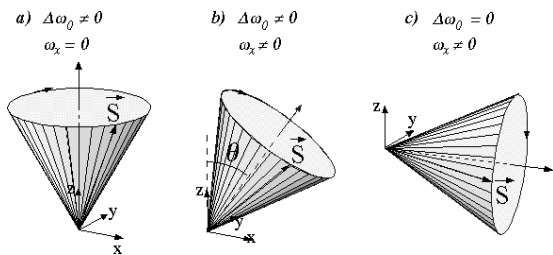


Abbildung 3.54: Präzession des Pseudospins um die Achse des effektiven Feldes für unterschiedliche Verstimmung und Laserintensität. Die Anfangsbedingung entspricht jeweils der Bestzung des Grundzustandes.

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.

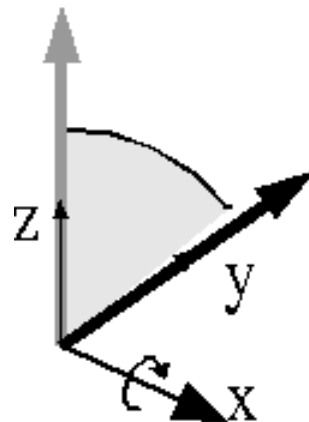


Abbildung 3.55: Rotation durch Laserpuls

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 $\frac{\pi}{2}$. Während der Ausgangszustand

$$\begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

einer Populationsdifferenz entspricht, ist im Endzustand

$$\begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

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.

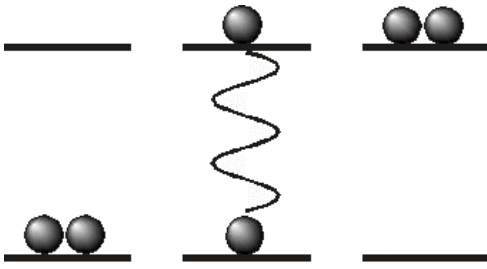


Abbildung 3.56: Zustand des Systems für Pulswinkel $0, \pi/2$ und π .

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

$$\begin{pmatrix} s_x \\ s_y \\ s_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix},$$

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.

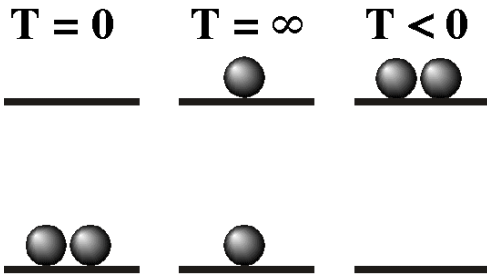


Abbildung 3.57: Zustände unterschiedlicher Temperatur.

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 Longitudinale Relaxation

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 .

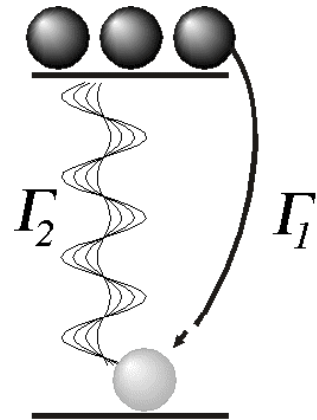


Abbildung 3.58: Relaxationsprozesse

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

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

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.

3.7.2 Transversale Relaxation

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.

3.7.3 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

$$\dot{s}_x = \Delta\omega_0 s_y - \Gamma_2 s_x$$

$$\dot{s}_y = -\Delta\omega_0 s_x + \omega_x s_z - \Gamma_2 s_y$$

$$\dot{s}_z = -\omega_x s_y + \Gamma_1(1 - s_z).$$

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 Feynmann, 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).).

Die allgemeine Lösung dieser Gleichung ist etwas umfangreich und soll deshalb hier nicht behandelt werden. Der einfachste Spezialfall ist wiederum derjenige, bei dem das Laserfeld ausgeschaltet bleibt. In diesem Fall ist die z -Komponente wieder von den transversalen Komponenten entkoppelt und man findet

$$s_z(t) = 1 - (1 - s_z(0))e^{-\Gamma_1 t}.$$

Für die transversalen Komponenten erhalten wir

$$s_x(t) = (s_x(0)\cos(\omega_0 t) + s_y(0)\sin(\omega_0 t))e^{-\Gamma_2 t}$$

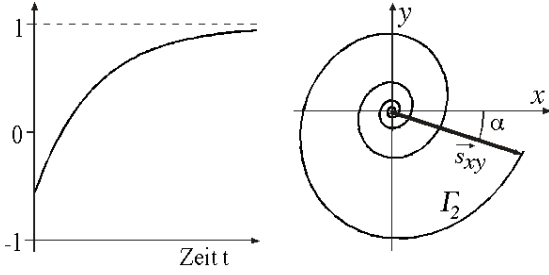


Abbildung 3.59: Zeitentwicklung der longitudinalen Komponente (links) und der transversalen Komponenten (rechts).

$$s_y(t) = (s_y(0)\cos(\omega_0 t) - s_x(0)\sin(\omega_0 t))e^{-\Gamma_2 t}.$$

Die beiden Komponenten bewegen sich somit mit den Zeitkonstanten Γ_1^{-1} , resp. Γ_2^{-1} auf das Gleichgewicht zu.

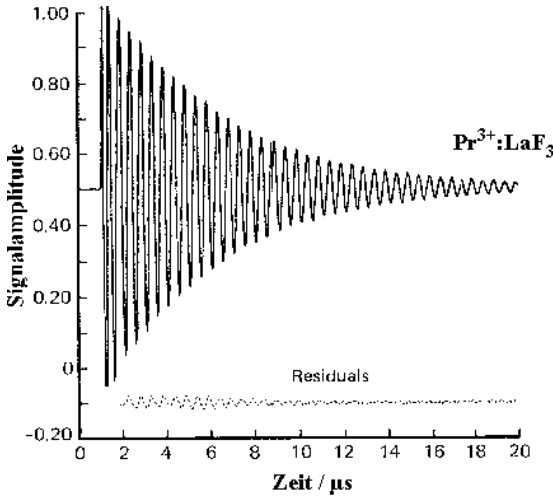


Abbildung 3.60: Experimenteller optischer FID gemessen in $\text{Pr}:\text{LaF}_3$ von DeVoe und Brewer (PRL 50, 1269 (1984)).

Dieser Verhalten lässt sich in zeitaufgelösten optischen Messungen beobachten. In der Figur ist eine der frühesten Messungen eines optischen FIDs gezeigt. Die gemessene Komponente entspricht der x -Komponente des Pseudospins. Das System wurde durch einen Laserpuls angeregt. Für die Detektion wurde die Laserfrequenz ver-

schohen, so dass das Schwebungssignal zwischen der Laserfrequenz und der atomaren Resonanzfrequenz beobachtet wird.

3.7.4 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, $\Gamma_2 = \frac{1}{2}\Gamma_1$. 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.

3.7.5 Intensitätsabhängigkeit

Für freie Atome wird dieser Wert erreicht wenn

$$\omega_x^2 = \frac{1}{2}\Gamma_1^2 + 2\Delta\omega_0^2.$$

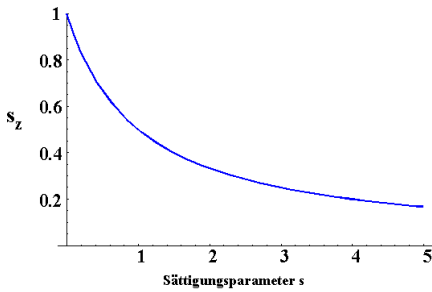


Abbildung 3.61: Abhängigkeit der Populationsdifferenz vom Sättigungsparameter s .

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

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

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

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

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 $\Gamma_1/2$ sättigt.

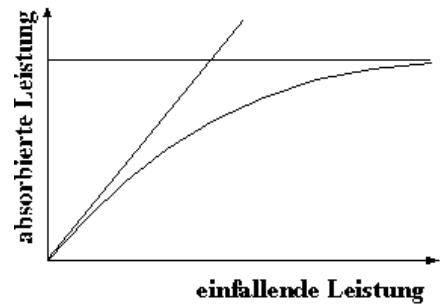


Abbildung 3.62: Absorbierte vs. einfallende Leistung.

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

3.7.6 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, $\Delta\omega_0 = 0$.

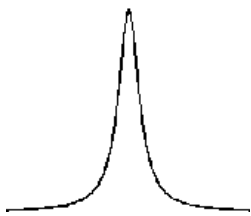


Abbildung 3.63: Verstimmungsabhängigkeit

Für große Verstimmungen, $\Delta\omega_0 \gg \Gamma_2, \omega_x$ 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

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

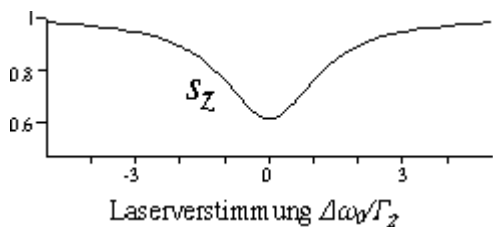


Abbildung 3.64: Verstimmungsabhängigkeit der Populationsdifferenz.

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 ande-

ren Termen

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

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

3.7.7 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:

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

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

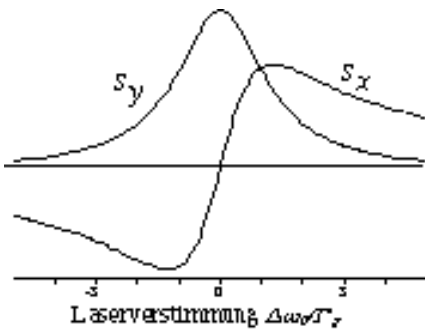


Abbildung 3.65: Verstimmungsabhängigkeit der transversalen Komponenten.

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 $\Delta\omega_0$, 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,

$$\omega_x^2 \ll \Gamma_1\Gamma_2, \Delta\omega_0^2 \frac{\Gamma_1}{\Gamma_2},$$

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 Pseudospin-Vektors von der normierten Laserverstimmung $\delta = \Delta\omega_0/\Gamma_2$. 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.

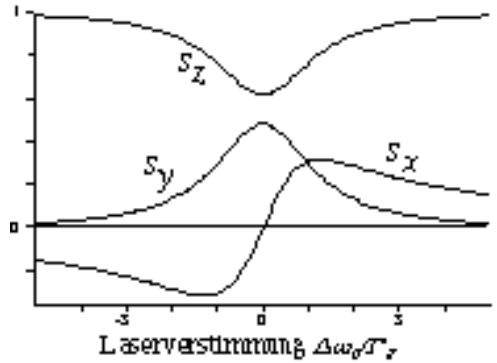


Abbildung 3.66: Verstimmungsabhängigkeit der 3 Komponenten der Gleichgewichtspolarisation.

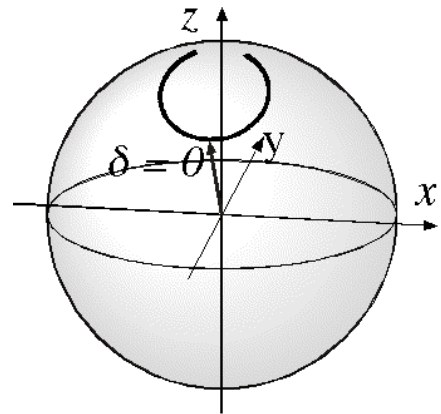


Abbildung 3.67: Gleichgewichtsvektor in der Einheitskugel für unterschiedliche Verstimmungen.

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.

3.7.8 Vergleich klassisches / quantenmechanisches Modell

Der wichtigste Unterschied zwischen dem klassischen und dem quantenmechanischen Dipolmo-

ment 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

$$Sp\{\rho^2\} = \frac{1}{2}(1 + s_x^2 + s_y^2 + s_z^2) \leq 1$$

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 $Sp\{\rho^2\} < 1$, kann der Vektor kürzer sein, aber nie länger.

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,

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

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

$$(s_x + is_y)_\infty \approx \omega_x \frac{\Delta\omega_0 + i\Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2}.$$

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

$$x_0 = e \frac{E_0}{2m\omega_0} \frac{\Delta + i\gamma}{\Delta^2 + \gamma^2}$$

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.

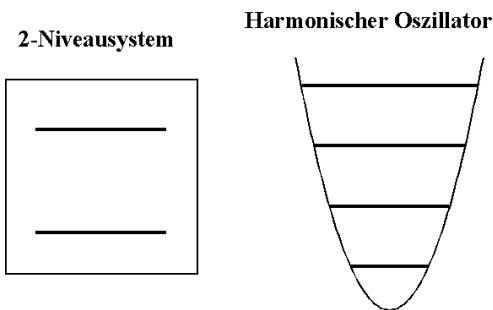


Abbildung 3.68: Vergleich Zweiniveausystem und harmonischer Oszillator.

Der Unterschied kann auch auf die Struktur der Energieniveaus zurückgeführt werden: Auch in

4 Optische Übergänge in Atomen, Molekülen und Festkörpern

4.1 Systeme

4.1.1 Frequenzen und Amplituden

Bei der Diskussion von Zweiniveausystemen verwendet man zwei Systemparameter: die Resonanzfrequenz und das Dipolmoment. Im Lorentz-Lorenz Modell, in den optischen Blochgleichungen wie auch im Jaynes-Cummings Modell tauchen diese Größen als Parameter auf, über die das Modell nichts aussagt. In diesem Kapitel sollen diese Größen für verschiedene Systeme diskutiert werden.

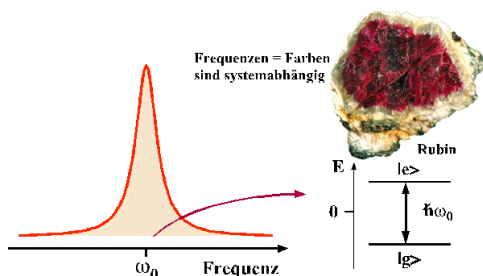


Abbildung 4.1: Resonanzfrequenz als Energiedifferenz.

Die Resonanzfrequenz ist gegeben als die Differenz der Energien der beteiligten Zustände, d.h. der Eigenwerte des Hamiltonoperators. Sie bestimmt z.B. als Absorptions- oder Emissionsfrequenz die Farbe von Materialien wie z.B. Rubin.

Die Amplituden der Übergänge sind gegeben durch die Quadrate der Matrixelemente des elektrischen Dipoloperators: Zum einen ist (im stationären Zustand) die transversale Polarisierung proportional zum Matrixelement

$$s_{y\infty} = \frac{\omega_x \Gamma_2}{\Gamma_2^2 + \Delta\omega_0^2 + \omega_x^2 \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1}},$$

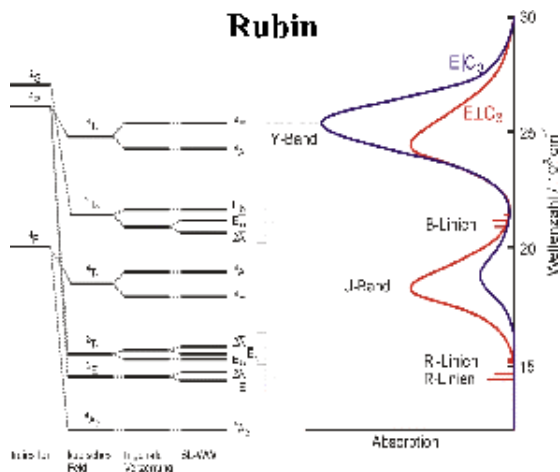


Abbildung 4.2: Spektrum von Rubin

zum anderen ist die Absorption proportional zu

$$A \propto \mu_e s_x \propto \mu_e^2.$$

Um die Matrixelemente zu berechnen muss der Dipoloperator in die Eigenbasis des Hamiltonoperators transformiert werden. Dazu muss man natürlich die Eigenzustände kennen.

Neben Frequenz und Amplitude ist auch die Linienbreite ein wichtiger Parameter für die Beschreibung der Spektren. Sie ergibt sich aus den Relaxationsprozessen. Da deren Diskussion relativ aufwändig ist verzichten wir jedoch an dieser Stelle auf eine mikroskopische Beschreibung.

Während Frequenzen und Amplituden für jedes spezifische System einzeln berechnet werden müssen, gibt es einige allgemeine Regeln, nach denen sie bestimmt sind. In diesem Kapitel besprechen wir diese Regeln. Die wichtigste Grundlage ist die Gruppentheorie, also die Lehre von der Symmetrie in den entsprechenden physikalischen Systemen.

4.1.2 Atome

Am einfachsten ist dieses Vorgehen an atomaren Spektren zu erklären. Dies liegt zum einen daran, dass diese Systeme relativ wenige Freiheitsgrade aufweisen, zum anderen an der hohen Symmetrie: ohne äußere Felder besitzt der Hamiltonoperator eines Atoms die volle Symmetrie des Raums, d.h. er ist invariant bezüglich Translationen wie auch Rotationen.

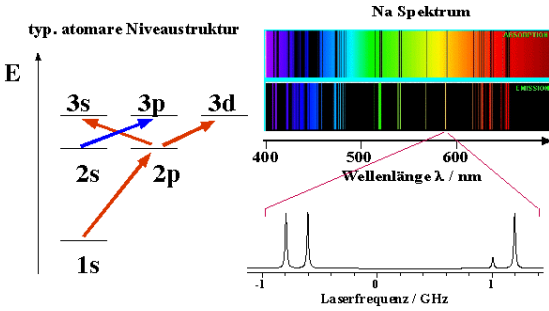


Abbildung 4.3: Typisches atomares Niveausystem (links) und Spektrum von atomarem Natrium (rechts).

In der Figur ist ein typisches atomares Niveausystem dargestellt, in dem einige Übergänge "erlaubt" sind. Dies bedeutet, dass das elektrische Dipolmoment zwischen diesen Zuständen relativ große Matrixelemente aufweist.

Die experimentelle beobachtbaren Konsequenzen davon sind für das System atomares Natrium in der rechten Hälfte der Figur dargestellt: man beobachtet in der oben gezeigten Darstellung nur die "erlaubten" Übergänge. Mit entsprechend höherer Empfindlichkeit können jedoch auch die "verbotenen" Übergänge beobachtet werden, bei denen die Matrixelemente nie ganz verschwinden, aber um viele Größenordnungen kleiner sind.

Unten rechts ist ein Bereich des Natriumspektrums mit (sehr viel) höherer Auflösung dargestellt. Hier sieht man, dass die "einzelne" Linie eine Unterstruktur (Hyperfeinstruktur) aufweist. Die einzelnen Linien sind alle "erlaubt", aber nicht alle gleich stark. Die Hyperfeinstruktur und auch die Amplituden der Linien kom-

men durch die verschiedenen Drehimpulse des Systems zustande: elektronischer Bahndrehimpuls, elektronischer Spin, Kernspin und Spin des Photons spielen eine Rolle. Aus der Berücksichtigung aller dieser Drehimpulse ergibt sich die Lage und Amplitude der verschiedenen Resonanzlinien.

4.1.3 2-atomige Moleküle

Genau wie bei Atomen findet man auch bei Molekülen eine aus den spektroskopischen Daten die Energien und Konfigurationen der elektronischen Zustände.

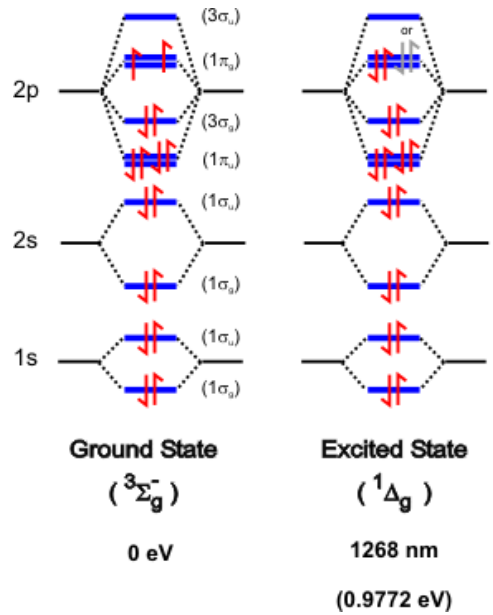


Abbildung 4.4: Elektronische Zustände im O₂-Molekül.

In einem homonuklearen zweiatomigen Molekül wie z.B. Sauerstoff (O₂) bilden die atomaren Zustände (=Atomorbitale) neue Zustände, die Molekülorbitale, welche man in erster Näherung als Linearkombination von wenigen Atomorbitalen beschreiben kann.

In diesem Beispiel kombinieren die 1s Orbitale der beiden Atome zu zwei Molekülorbitalen, welche durch die Kopplung zwischen den beiden Atomen etwas aufgespalten sind. Bei den

2s Orbitalen geschieht das gleiche, und bei den 2p Orbitalen bilden sich aus den insgesamt sechs Orbitalen Molekülorbitale mit unterschiedlichen Energien.

Im Falle des Sauerstoffs besitzt jedes der beiden Atome 8 Elektronen. Die insgesamt 16 Elektronen besetzen die 8 niedrigsten Zustände des Systems. Weil der 8. und 9. Zustand entartet sind (beide $1\pi_g$) können die beiden obersten Elektronen zwei unterschiedliche Zustände besetzen und haben deshalb parallelen Spin: das Sauerstoffmolekül ist paramagnetisch.

Besetzen die beiden Elektronen mit der höchsten Energie das gleiche Orbital mit entgegengesetztem Spin, so ist die Energie des Zustandes ($^1\Delta_g$) um 0.9772 eV höher als die Energie des Grundzustandes. Weitere höher angeregte Zustände entsprechen unterschiedlichen Drehimpulszuständen und unterschiedlichen Besetzungen der Orbitale.

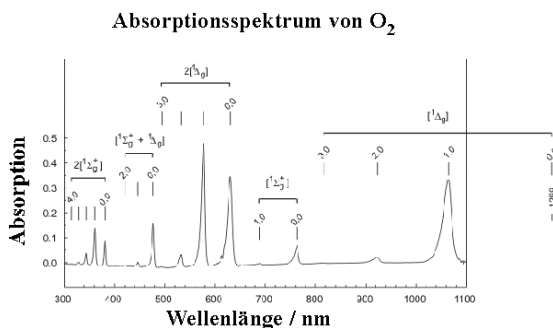


Abbildung 4.5: Spektrum des O₂-Moleküls.

Die Übergänge zu diesen Zuständen können spektroskopisch gemessen werden, wobei die Übergangsstärken sehr gering sind, da es sich durchwegs um "verbotene" Übergänge handelt.

Diese Übergänge können nicht nur im Labor beobachtet werden, sondern teilweise auch in der Natur: in der Aurora werden Gase der Atmosphäre durch Beschuss mit energiereichen Teilchen von der Sonne angeregt. Diese Energie geben sie anschließend durch Emission von Photonen wieder ab. Ein Teil dieser Photonen wird im sichtbaren Bereich emittiert. Neben neutralen Molekülen tragen auch ionisierte Moleküle zum



Aurora Emission Lines

Emission (nm)	Type	Description
630.0	O	Mersey red band in aurora (photo above)
557.7	O	Mersey green band in aurora (photo above)
777.4	O	Aurora emission
844.6 + 438.6	O	Aurora and seen in twilight emission (weak)
732.0 + 372.2	OIII	Twilight emission (weak)
500.7 + 495.9	OIII	Astronomical nebula

Abbildung 4.6: Aurora

Spektrum bei.

4.1.4 Polyatomare Moleküle

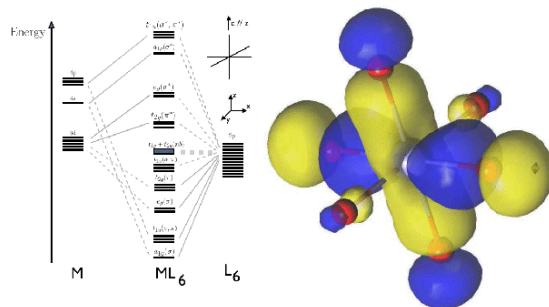


Abbildung 4.7: Zustände und Orbitale von FeO₆.

Das gleiche Prinzip kann man bei komplizierteren Molekülen verwenden: die elektronischen Zustände des Moleküls können als Linearkombination der atomaren Zustände beschrieben werden. In diesem Beispiel sind die Zustände des Moleküls FeO₆ dargestellt. Die Energien der molekularen Zustände kann man in erster Näherung dadurch berechnen, dass man die Elektronen unabhängig voneinander in das Energieniveausystem einfüllt. Allerdings muss für eine exakte Berechnung die Wechselwirkung zwischen den Elektronen, d.h. die Korrelationsenergie berücksichtigt werden.

In der Figur ist das Spektrum eines recht kompli-

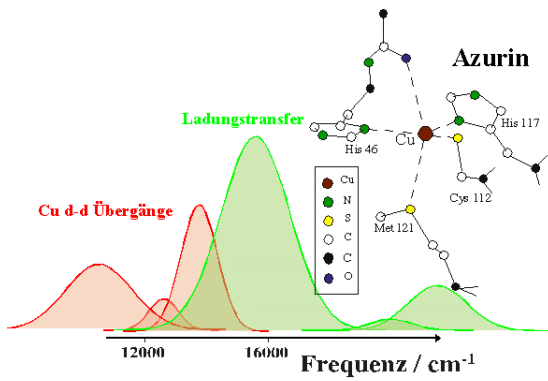


Abbildung 4.8: Spektrum von Azurin

zierten Moleküls dargestellt (Azurin). Dabei können die beobachteten Übergänge mit elektronischen Zuständen identifiziert werden, welche am Cu-Ion im aktiven Zentrum lokalisiert sind. Bei den Übergängen mit relativ geringer Energie (rot eingezeichnet) werden Elektronen zwischen unterschiedlichen d-Orbitalen des Übergangsmetallions Cu verschoben. Bei den energetisch höher liegenden Übergängen werden Elektronen zwischen Orbitalen des Cu und der benachbarten Ligandenatome verschoben. Man bezeichnet diese als "charge-transfer" Übergänge.

4.1.5 Festkörper

In Festkörpern spielen optische Übergänge in sehr unterschiedlichen Systemen eine Rolle. In molekularen Festkörpern findet man die Übergänge der einzelnen Moleküle, wie wir sie bereits oben andiskutiert haben. In dielektrischen Kristallen findet man im optischen Bereich vor allem Übergänge von Übergangsmetallen oder seltenen Erden, sowie von Defekten wie z.B. Farbzentren (gebundenen Elektronen). Diese isolierten Systeme kann man wie die oben diskutierten atomaren oder molekularen Systeme behandeln.

Betrachtet man hingegen Festkörper mit einer Bandstruktur, wie z.B. Halbleiter, so muss man das Gesamtsystem diskutieren. Die Energien der Bänder kann man sich prinzipiell als Grenzwert eines unendlich großen Moleküls vorstellen. Allerdings sind in diesem System die Elektronen

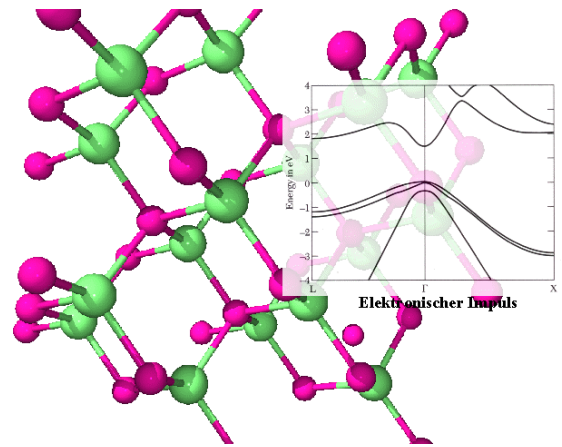


Abbildung 4.9: Struktur und Bandstruktur von GaAs

nicht mehr lokalisiert, so dass als zusätzlicher Freiheitsgrad der Impuls der Elektronen eine Rolle spielt.

Wir werden uns in diesem Kapitel darauf beschränken, Übergänge für $k = 0$ zu diskutieren, bei denen der Impuls keine Rolle spielt. In diesem Grenzfall erhalten wir ein System, welches qualitativ ähnlich wie die oben diskutierten atomaren und molekularen Systeme diskutiert werden kann.

In allen diesen Fällen lohnt es sich, bei der Berechnung von Übergangsmatrixelementen die Symmetrie des Systems zu berücksichtigen. Wird wiederholen deshalb hier einige Aspekte der Symmetrietheorie, d.h. der Gruppentheorie.

4.2 Symmetrie

4.2.1 Grundbegriffe

Ohne äußere Felder sind die Gleichungen, welche physikalische Systeme beschreiben, immer isotrop: es gibt keine bevorzugte Richtung im Raum. Ein System, das sich gemäß der Schrödingergleichung entwickelt behält seine anfängliche Symmetrie bei. Eine Berücksichtigung der Symmetrie kann deshalb wesentlich zur Lösung des Problems beitragen. Häufig ist es sogar möglich,

allein aufgrund der Symmetrie relevante Aussagen zu machen, ohne überhaupt eine Bewegungsgleichung zu lösen.

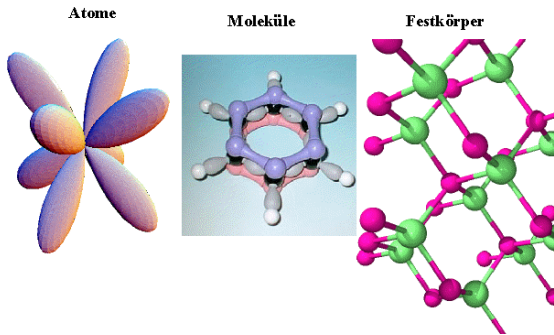


Abbildung 4.10: Symmetrie von elektronischen Zuständen und Strukturen in Atomen, Molekülen und Festkörpern.

Solche Symmetrien treten in unterschiedlicher Form in allen physikalischen Systemen auf. Wir interessieren uns hier vor allem für die Symmetrie von Orbitalen, d.h. elektronischen Zuständen, aber auch für die Symmetrie von Strukturen.

Jede Symmetrie entspricht auch einer Erhaltungsgröße. Im Falle der Rotationssymmetrie ist dies der Drehimpuls. Die mathematischen Grundlagen für diese Möglichkeiten werden von der Gruppentheorie geliefert. Natürlich ist es an dieser Stelle nicht möglich, im Detail die Gruppentheorie zu behandeln. Wir möchten aber doch die wichtigsten Resultate diskutieren.

Im Bereich des klassischen Elektromagnetismus beschreibt das Coulomb'sche Gesetz die Wechselwirkung geladener Teilchen wie Elektronen und Kerne mit externen Feldern. Im halbklassischen Formalismus kann der Hamiltonoperator, der die Wechselwirkung beschreibt, zwei mögliche Formen haben:

$$\mathcal{H}_{int}^{(1)} = -e\vec{E} \cdot \vec{r}. \quad \mathcal{H}_{int}^{(2)} = -\frac{e}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}.$$

Die erste Form erhält man direkt über das Korrespondenzprinzip aus der klassischen Form der Wechselwirkung zwischen einem elektrischen Dipolmoment $e\vec{r}$ und dem elektrischen Feld \vec{E} . Die

zweite Form beschreibt die Wechselwirkung über die Kopplung zwischen dem elektronischen Impuls \vec{p} und dem elektromagnetischen Vektorpotential \vec{A} und kann aus der Quantisierung der Bewegungsgleichung in einem externen Vektorpotential hergeleitet werden. Wenn man diese Form in eine Multipolreihe entwickelt findet man, dass in niedrigster Ordnung die beiden Formen übereinstimmen. Nur in ganz speziellen Fällen gibt es Unterschiede zwischen den beiden Formen, welche auf die unterschiedlichen Eichungen des elektromagnetischen Feldes zurückzuführen sind (W.E. Lamb, R.R. Schlicher, and M.O. Scully, 'Matter-field interaction in atomic physics and quantum optics', Phys. Rev. A 36, 2763-2772 (1987)).

Für diese Analyse berücksichtigen wir nur homogene Felder und benutzen die elektrische Dipolform $\vec{E} \cdot \vec{r}$ des Wechselwirkungsoperators.

4.2.2 Parität

Wir können nun Symmetrieeigenschaften diskutieren, welche dazu führen, dass wir die meisten Matrixelemente dieses Operators vorhersagen können. Die erste Symmetrieoperation ist die Parität, eine Inversion am Zentrum des Koordinatensystems. Dadurch wird der Ortsvektor

$$\vec{r} = \{x, y, z\} \rightarrow -\vec{r} = \{-x, -y, -z\}.$$

Polare Vektoren wie der Ortsvektor \vec{r} haben negative Parität, sie wechseln das Vorzeichen unter Inversion am Ursprung.

Matrixelemente $\langle \psi_a | \vec{r} | \psi_b \rangle$ sind Skalare, d.h. sie besitzen positive Parität. Da die Parität eines Produktes durch das Produkt der Paritäten gegeben ist müssen die Paritäten der beiden Zustandsfunktionen ψ_a und ψ_b entgegengesetztes Vorzeichen haben. Deshalb müssen z.B. alle Matrixelemente verschwinden für $\psi_a = \psi_b$. Eine Konsequenz davon ist dass Atome kein statisches elektrisches Dipolmoment aufweisen. Der Stark-effekt, d.h. die Verschiebung der Energieniveaus durch ein elektrisches Feld ist deshalb in niedrigen Feldern immer eine quadratische Funktion

des Feldes. Eine lineare Verschiebung erhält man erst wenn die Wechselwirkung größer wird als die Nullfeldaufspaltung der betroffenen Zustände.

4.2.3 Rotationen

Als zweite Symmetrieoperation betrachten wir die Rotationssymmetrie. Rotationen können auf unterschiedliche Arten beschreiben werden: entweder so dass sie ein Objekt rotieren, oder so dass sie das Koordinatensystem rotieren. Während es natürlicher erscheint, das Objekt zu rotieren ist es oft mathematisch einfacher, die Rotation auf das Koordinatensystem anzuwenden. Dies ist insbesondere dann der Fall wenn die mathematische Struktur des Objekts kompliziert oder ev. gar nicht explizit bekannt ist, wie z.B. bei einer quantenmechanischen Zustandsfunktion.

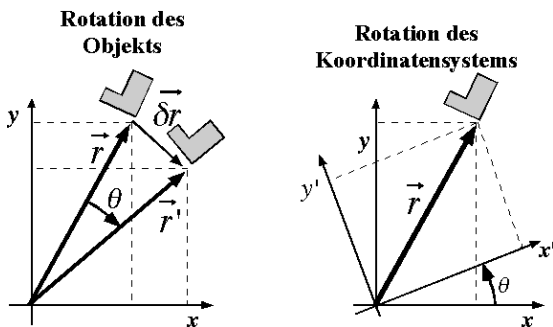


Abbildung 4.11: Rotation des Objekts vs. Rotation des Koordinatensystems.

Die beiden Arten von Rotationen sind eng miteinander verbunden. Eine Rotation eines Objekts im Uhrzeigersinn ändert seine Koordinaten genau gleich wie eine Rotation des Koordinatensystems im Gegenuhrzeigersinn.

Die Objekte, deren Rotationseigenschaften uns interessieren, sind Zustandsfunktionen $\psi(\vec{r})$. Wir schreiben eine Rotation der Zustandsfunktion um den Winkel θ um die z -Achse als

$$\psi'(\vec{r}) = P_R(z, \theta)\psi(\vec{r}).$$

Um deren Rotationseigenschaften zu finden beginnen wir mit einer Rotation des Argumentes,

d.h. des Koordinatenvektors \vec{r} . Eine Koordinatentransformation ergibt

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = R(z, \theta)\vec{r} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Die Rotation der Zustandsfunktion und die Transformation der Koordinaten hängen direkt voneinander ab: Wenn wir beide gleichzeitig rotieren muß die mathematische Form der Zustandsfunktion konstant bleiben.

$$P_R(z, \theta)\psi(R(z, \theta)\vec{r}) = \psi'(\vec{r}') = \psi(\vec{r}).$$

Wir benutzen diese Beziehung um die Rotation eines Objekts zu beschreiben, dessen mathematische Form nicht trivial ist, indem wir es durch eine Koordinatenrotation ausdrücken. Wir multiplizieren die Gleichung von links mit $P_R(z, -\theta)$ und berücksichtigen, dass

$$P_R(z, -\theta)P_R(z, \theta) = 1.$$

Damit erhalten wir

$$\psi(R(z, \theta)\vec{r}) = P_R(z, -\theta)\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}').$$

Diese Beziehung ist eine mathematische Darstellung der gleichen Tatsache die in der Figur graphisch dargestellt ist: Anstelle einer Rotation des Objekts im Uhrzeigersinn um den Winkel θ kann man auch eine gegenläufige Rotation des Koordinatensystems durchführen.

4.2.4 Kugelflächenfunktionen

Da die Rotation einer allgemeinen Funktion relativ aufwendig sein kann ist es häufig sinnvoll, diese Funktionen in einer irreduziblen Basis darzustellen. Diese ist bekanntlich durch die sphärischen Harmonischen oder Kugelflächenfunktionen Y_{lm} definiert. Die ersten Funktionen sind

$$\begin{array}{ll}
 l & m \\
 0 & 0 \\
 1 & 0 \\
 1 & \pm 1 \\
 2 & 0
 \end{array}
 \begin{array}{l}
 Y_{lm} \\
 \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \\
 \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\
 \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\
 \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1)
 \end{array}$$

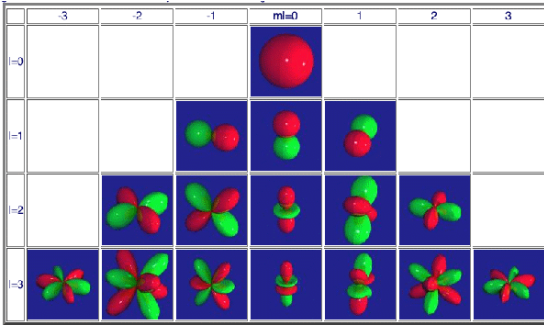


Abbildung 4.12: Graphische Darstellung der Kugelflächenfunktionen.

Die wichtigsten Eigenschaften dieser Funktionen, die wir im Folgenden brauchen werden, beinhalten

- Die Kugelflächenfunktionen bilden ein vollständiges Orthonaormalsystem. Dies bedeutet, dass man alle dreidimensionalen Funktionen in diesem System entwickeln kann.
- Das Integral aller Y_{lm} im dreidimensionalen Raum verschwindet, mit Ausnahme von Y_{00} .
- Die Kugelflächenfunktionen sind Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators.
- Die Kugelflächenfunktionen transformieren besonders einfach unter Rotationen.

4.2.5 Rotation der Kugelflächenfunktionen

Am einfachsten sind die Rotationen um die z -Achse:

$$P_R(z, \alpha) Y_{lm}(\theta, \phi) = e^{im\alpha} Y_{lm}(\theta, \phi).$$

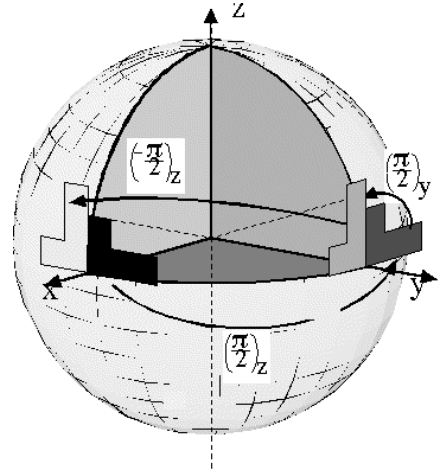


Abbildung 4.13: Rotationen um verschiedene Achsen.

Etwas aufwendiger sind Rotationen um andere Achsen. In der Figur wird anhand eines Beispiels gezeigt, dass jede Rotation durch eine Sequenz von maximal drei Rotationen um zwei feste Achsen dargestellt werden kann. In diesem Beispiel wird eine Rotation $(\pi/2)_x$ um die x -Achse durch eine Sequenz $(\pi/2)_z(\pi/2)_y(-\pi/2)_z$ ersetzt. Das schwarze Objekt stellt den Ausgangszustand dar, das weiße den Endzustand und die beiden grauen Zwischenzustände.

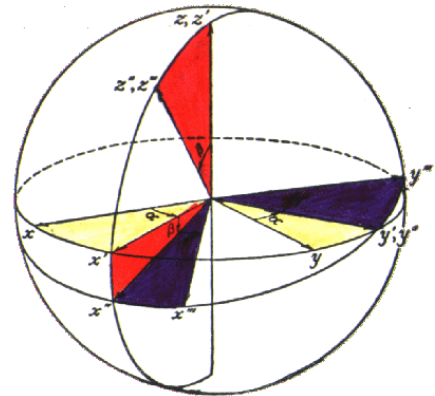


Abbildung 4.14: Definition der Eulerwinkel.

Dies verwendet man bei der Definition der Eulerwinkel. Sie stellen eine Möglichkeit dar, beliebige Rotationen um beliebige Achsen durch eine Sequenz von drei Rotationen um die y - und z -Achse beschreiben. Für Rotationen um

die y -Achse findet man

$$P_R(y, \beta) Y_{lm}(\theta, \phi) = \sum_{m'} d_{m'm}^l(\beta) Y_{lm'}(\theta, \phi).$$

Hierbei werden somit Funktionen mit dem gleichen Drehimpuls l und verschiedener Quantenzahl m gemischt. Die Rotationsmatrix $d_{m'm}^l(\beta)$ hat die Dimension $(2l+1) \times (2l+1)$ für eine Gruppe von Zuständen mit Drehimpuls l . Die Matrixelemente sind tabelliert, z.B. in (M. Weissbluth, 'Atoms and molecules', Academic Press, San Diego (1978); D.M. Brink and G.R. Satchler, 'Angular Momentum', Clarendon Press, Oxford (1962); A.R. Edmonds, 'Angular momentum in quantum mechanics', Princeton University Press, Princeton (1974)).

4.2.6 Rotation von Operatoren

Wie in der Vorlesung Physik IV gezeigt wurde werden die Rotationsoperatoren um eine Achse α durch den entsprechenden Drehimpulsoperator erzeugt,

$$R(\alpha, \theta) = e^{i\theta J_\alpha}.$$

Etwas anders gestalten sich Rotationen von Operatoren. Wir hatten dies bereits beim Übergang ins rotierende Koordinatensystem gefunden. Da Erwartungswerte unabhängig von einer gleichzeitigen Rotation von Operator und Zustandsfunktion sein müssen gilt

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle \psi' | A' | \psi' \rangle.$$

Für eine Rotation $e^{-i\theta J_z}$ um die z -Achse muss gelten

$$|\psi'\rangle = e^{i\theta J_z} |\psi\rangle$$

und

$$\langle \psi' | = \langle \psi | e^{-i\theta J_z}$$

und damit

$$\langle A \rangle = \langle \psi' | A' | \psi' \rangle = \langle \psi | e^{-i\theta J_z} A' e^{i\theta J_z} | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi | A | \psi \rangle,$$

so dass der rotierte Operator

$$A' = e^{i\theta J_z} A e^{-i\theta J_z}$$

wird. Wenn wir $A = J_z$ setzen finden wir sofort dass die z -Komponente des Drehimpulses unter Drehungen um die z -Achse invariant ist. Dies gilt natürlich analog für die anderen Achsen und ist eine einfache Konsequenz davon, dass der Drehimpuls selber der Generator der Rotationen ist.

4.2.7 Das Wigner-Eckart Theorem

Das Wigner-Eckart Theorem (C. Eckart, 'The application of group theory to the quantum dynamics of monatomic systems', Rev. Mod. Phys. 2, 305-380 (1930); E.P. Wigner, 'Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren', Vieweg, Braunschweig (1931).) ist ein außerordentlich mächtiges Hilfsmittel für die Berechnung der Matrixelemente von Operatoren mit bekannten Rotationseigenschaften. Es erlaubt uns, die Matrixelemente hinzuschreiben, wenn wir nur ein einziges nichtverschwindendes Element kennen. Es benutzt die Invarianz der Erwartungswerte unter Rotationen: Die Erwartungswerte selbst sind Skalare, also nicht von der Wahl des Koordinatensystems abhängig. Wir möchten hier keine mathematisch exakte Herleitung des Theorems durchführen, aber wenigstens die Idee nachvollziehen.

Die sphärischen Harmonischen stellen eine vollständige Basis dar, so dass wir alle dreidimensionalen Funktionen in dieser Basis entwickeln können:

$$|\psi\rangle = \sum_{lm} c_{lm} Y_{lm}.$$

Dies lohnt sich deshalb weil wir Erwartungswerte durch Integration über den ganzen Raum berechnen :

$$\langle A \rangle = \int \int \int r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \psi^* A \psi.$$

Wenn man den Integranden als Summe von sphärischen Harmonischen darstellt

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int \int \int r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \{ c_{00} Y_{00} \\ &+ c_{0-1} Y_{1-1} + c_{10} Y_{10} + \dots \} \\ &= c_{00} \int \int \int r^2 dr \end{aligned}$$

sieht man leicht, dass das Resultat direkt gegeben ist durch c_{00} , also durch den vollständig symmetrischen Teil des Integranden. Man kann deshalb die Berechnung der Matrixelemente erheblich vereinfachen wenn man die Orthogonalitätsrelationen für sphärische Harmonische verwendet.

Wir müssen somit das Produkt $\psi^* A \psi$ in der Basis der Kugelflächenfunktionen entwickeln. Bei den Zustandsfunktionen ψ bedeutet dies, dass wir als Basis die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators verwenden, also die Kugelflächenfunktionen. Den Winkelanteil einer Funktion

$$\psi_z = z = r \cos \theta$$

kann man in Kugelflächenfunktionen darstellen als

$$\psi_z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}.$$

Die beiden anderen Komponenten entsprechend

$$\psi_x = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (-Y_{11} + Y_{1-1})$$

und

$$\psi_y = i \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{11} + Y_{1-1}).$$

4.2.8 Irreduzible Tensoren

Die Operatoren A sind keine Funktionen und können deshalb nicht in Kugelflächenfunktionen entwickelt werden. Die zu den Drehimpuls-Eigenfunktionen analogen Größen unter den

Operatoren sind die irreduziblen Tensoroperatoren. Diese transformieren unter Rotationen genau so wie die Kugelflächenfunktionen.

Das wichtigste Beispiel für die Spektroskopie ist der Dipoloperator. Dabei handelt es sich um einen Vektoroperator, d.h. er transformiert wie ein Vektor und besteht deshalb aus den drei Komponenten $T_0^{(1)}$ und $T_{\pm 1}^{(1)}$. Die Matrixelemente dieser drei Komponenten sind proportional zu denjenigen der sphärischen Vektorkomponenten r_0 und $r_{\pm 1}$.

Die Matrixelemente aller dieser Operatoren in der Basis der Kugelflächenfunktionen sind bekannt; sie können geschrieben werden als

$$\begin{aligned} &\langle \alpha, L, m | T_q^{(k)} | \alpha', L', m' \rangle \\ &= (-1)^{L-m} \begin{pmatrix} L & k & L' \\ -m & q & m' \end{pmatrix} \langle \alpha, L || T^{(k)} || \alpha', L' \rangle. \end{aligned}$$

Dabei stellt L den Drehimpuls des Zustandes dar, m die z -Komponente, und α alle übrigen Quantenzahlen.

Die Größe in Klammern stellt ein 3J-Symbol dar. Es ist eine symmetrisierte Form der Vektorkopplungskoeffizienten der klassischen Drehimpulsvektoren. In der oberen Zeile stehen die Drehimpulsquantenzahlen der beiden Zustände und des Operators, in der unteren Zeile die magnetische Quantenzahl (z -Komponente).

Zu den wichtigsten Eigenschaften der 3J-Symbole gehört die Tatsache, dass sie verschwinden wenn die Addition der z -Komponenten nicht gegeben ist, d.h. für alle Elemente bei denen

$$-m + q + m' \neq 0.$$

Diese Eigenschaft eliminiert bereits die meisten Matrixelemente.

Weitere wichtige Symmetrieeigenschaften sind:

Der Wert des 3J Symbols bleibt bei zyklischer Vertauschung der Kolonnen gleich:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} &= 0 \quad \text{if } j_1 + j_2 + j_3 \text{ is odd} \\ \begin{pmatrix} j+1/2 & j & 1/2 \\ m & -m-1/2 & 1/2 \end{pmatrix} &= (-1)^j m \cdot \frac{\sqrt{(j-m+1/2)(j+m+1/2)}}{\sqrt{(2j+1)(2j+2)}} \\ \begin{pmatrix} j-1 & j & 1 \\ m & -m-1 & 1 \end{pmatrix} &= (-1)^j m \cdot \frac{\sqrt{(j-m)(j-m-1)(j+m+1)}}{\sqrt{(2j+3)(2j+2)(2j+1)}} \\ \begin{pmatrix} j+1 & j & 1 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} &= (-1)^j m \cdot \frac{(j+m+1)(j-m-1)}{\sqrt{(2j+3)(j+1)(2j+1)}} \\ \begin{pmatrix} j & j & 1 \\ m & -m & 1 \end{pmatrix} &= (-1)^j m \cdot \frac{(j-m)(j+m+1)}{\sqrt{(j+1)(2j+1)(2j)}} \\ \begin{pmatrix} j & j & 1 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} &= (-1)^j m \cdot \frac{m}{\sqrt{(2j+1)(j+1)}} \\ \begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & m & 0 \end{pmatrix} &= (-1)^j m \cdot \frac{1}{\sqrt{2j-1}} \\ \begin{pmatrix} j & j & 2 \\ m & m & 0 \end{pmatrix} &= (-1)^{j-m} \cdot \frac{3m^2 - j(j+1)}{\sqrt{(2j+3)(j-1)(2j+1)(2j)}} \end{aligned}$$

Abbildung 4.15: Spezielle Werte für 3J-Symbole.

j_1	j_2	j_3	m_1	m_2	m_3		j_1	j_2	j_3	m_1	m_2	m_3	
1	1	0	0	0	0	*01	3/2	3/2	1	1/2	-3/2	1	*101
2	1	1	0	0	0	111	3/2	3/2	1	1/2	-1/2	0	*211
2	2	0	0	0	0	001	3/2	3/2	1	3/2	-3/2	0	211
2	2	2	0	0	0	*1011	3/2	3/2	1	3/2	-1/2	-1	*101
2	2	1	0	0	0	*2111	2	1	1	-1	0	1	*101
3	3	0	0	0	0	*001	2	1	1	0	-1	1	111
3	3	2	0	0	0	2111	2	1	1	0	0	0	111
3	2	2	0	0	0	1211	2	1	1	1	-1	0	*101
3	3	1	0	0	0	*201	2	1	1	1	0	-1	*101
3	3	3	0	0	0	*1001	2	1	1	2	-1	-1	001
3	3	3	0	0	0	02	2	3/2	1/2	0	-1/2	1/2	*101
4	4	2	0	0	0	*2211	2	3/2	1/2	1	-3/2	1/2	201
4	4	4	0	0	0	1201	2	3/2	1/2	1	-1/2	-1/2	211
1/2	1/2	0	1/2	-1/2	0	1	2	3/2	1/2	2	-3/2	-1/2	*001

Abbildung 4.16: Numerische Werte für 3J Symbole (Aus Weissbluth).

$$= \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}$$

Numerische Werte dafür findet man in der Literatur (z. B. M. Weissbluth, 'Atoms and molecules', Academic Press, San Diego (1978); D.M. Brink and G.R. Satchler, 'Angular Momentum', Clarendon Press, Oxford (1962); A.R. Edmonds, 'Angular momentum in quantum mechanics', Princeton University Press, Princeton (1974).). In der Tabelle werden nur die Exponenten der Quadrate der Werte in einer Primzahldarstellung

dargestellt. So bedeutet z.B. *101

$$i\sqrt{2^{-1}3^{0}5^{-1}} = i\frac{1}{\sqrt{10}}$$

Das 3J-Symbol enthält alle orientierungsabhängigen Informationen. Das reduzierte Operatorelement

$$\langle \alpha, L || T^{(k)} || \alpha', L' \rangle$$

hängt nicht von der Orientierungs-Quantenzahl m ab, kann aber von zusätzlichen Quantenzahlen abhängen, welche unter dem Symbol α zusammengefasst sind. Dieses reduzierte Operatorelement erhalten wir sobald wir ein einziges Matrixelement explizit kennen. Das WE-Theorem liefert alle übrigen Matrixelemente sobald wir eines kennen. Wie man ein solches Matrixelement explizit berechnen kann sehen wir im nächsten Kapitel.

4.3 Drehimpuls

4.3.1 Drehimpuls und Polarisation des Lichts

Weil die Auswahlregeln für elektronische Übergänge in erster Linie durch die Erhaltung des Drehimpulses gegeben ist müssen wir zunächst diskutieren, wo Drehimpuls eine Rolle spielt. Er tritt sowohl in den Atomen und Molekülen, wie auch im Strahlungsfeld auf. Letzteres können wir relativ kurz behandeln.

In der klassischen (d.h. Maxwell'schen) Beschreibung des Strahlungsfeldes ist der Drehimpuls gegeben durch

$$\vec{r} \times \vec{p},$$

wobei \vec{r} die Position und den \vec{p} linearen Impuls beschreibt. Beim Strahlungsfeld beträgt der lineare Impuls

$$\vec{p} = \vec{E} \times \vec{B}.$$

Der Drehimpuls ist damit gegeben als das Integral von

$$\vec{r} \times \vec{E} \times \vec{B}.$$

Wichtig wurde der Drehimpuls des Lichtes aber erst im Rahmen der quantenmechanischen Beschreibung. Man unterscheidet allgemein internen Drehimpuls, welcher als Spin bezeichnet wird, sowie externen, also Bahndrehimpuls. Letzterer entspricht dem oben berechneten und hängt von der Wahl des Koordinatensystems ab. Er soll uns hier nicht weiter beschäftigen. Spindrehimpuls hingegen ist unabhängig von der Wahl des Koordinatensystems und wird von entscheidender Bedeutung sein.

Jedes Photon besitzt einen Spin von

$$S = \hbar \quad m = 0, \pm 1.$$

Die drei möglichen Spinzustände entsprechen orthogonalen Polarisationszuständen des Lichtes. Ist das Licht linear polarisiert, so kann der elektrische Feldvektor beschrieben werden als

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} \cos(\omega t - kz) \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Von zirkularer Polarisation spricht man, wenn die Felder sich verhalten wie

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = E_0 \begin{pmatrix} \cos(\omega t - kz) \\ \sin(\omega t - kz) \end{pmatrix}.$$

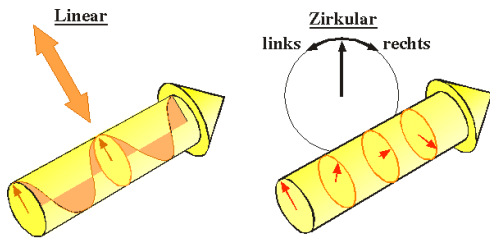


Abbildung 4.17: Lineare (links) und zirkulare (rechts) Polarisation.

In diesem Fall schwingt das Feld nicht in einer Ebene, sondern dreht sich mit konstanter Länge, sowohl als Funktion des Ortes wie auch als

Funktion der Zeit. Diese Polarisationszustände werden mit den Buchstaben

$$\pi, \sigma_+, \sigma_-$$

bezeichnet. Da Photonen relativistische Teilchen sind gibt es eine Einschränkung: Wenn wir die Quantisierungsachse parallel zur Ausbreitungsrichtung des Lichtes wählen kann der Zustand $m=0$ nicht bevölkert sein. Dies entspricht der Bedingung dass die Komponenten von E und B parallel zur Ausbreitungsrichtung des Lichtes verschwinden, dass also das Feld transversal ist. Sämtliche möglichen Polarisationszustände können durch die verbleibenden zwei Spinzustände ausgedrückt werden, welche zirkular polarisiertes Licht beschreiben.

4.3.2 Drehimpulserhaltung bei Absorption

Während wir explizite Rechnungen im halbklassischen Formalismus durchführen ist es oftmals nützlich, gewisse Aspekte rein quantenmechanisch zu diskutieren. Wir benutzen diese Methode für die Herleitung der Auswahlregeln für optische Übergänge. Im quantenmechanischen Formalismus wird die Wechselwirkung zwischen dem elektromagnetischen Feld und dem Material durch Photonen vermittelt.

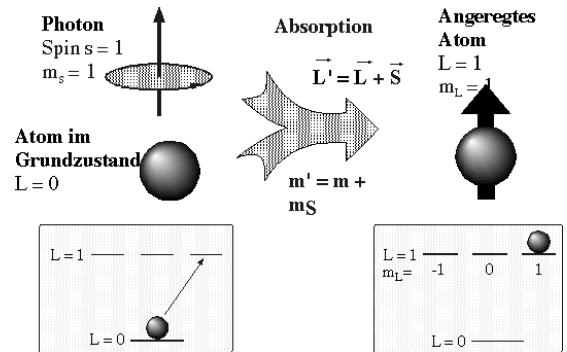


Abbildung 4.18: Drehimpuls vor und nach einem Absorptionsprozess.

Wir betrachten ein Atom, welches sich zu Beginn im elektronischen Grundzustand befindet. Dieser

sei von sphärischer Symmetrie (ein s -Zustand), so dass sein Drehimpuls verschwindet. Es absorbiert ein Photon, dessen Drehimpuls \hbar parallel zur Quantisierungsachse orientiert ist. Drehimpulserhaltung bedingt, dass das Atom nicht nur die Energie des Photons aufnimmt, sondern auch seinen Drehimpuls. Damit ist es nach der Absorption im gleichen Drehimpulszustand wie das Photon vorher. Der entsprechende Zustand hat also die Quantenzahlen $L=1$ und $m_L = 1$.

Allgemein ist der resultierende Drehimpulszustand des Atoms durch die Vektorsumme aus dem Drehimpuls des Atoms und demjenigen des Photons gegeben. Die untere Hälfte der Figur illustriert die Konsequenzen für ein einfaches atomares Energieschema: Der Grundzustand ist nicht entartet, während der angeregte Zustand aus drei Drehimpulszuständen besteht. Die Wechselwirkung mit zirkular polarisiertem Licht bevölkert selektiv denjenigen angeregten Zustand, dessen Drehimpulszustand gerade dem gesamten Drehimpuls von Grundzustand plus Photon entspricht.

Bei der Absorption eines Photons bestimmt die Energieerhaltung den Bereich der Energieskala, innerhalb dessen verschiedene Zustände aneinander gekoppelt werden können. In analoger Weise bestimmt die Erhaltung des Drehimpulses, welche Drehimpulszustände aneinander gekoppelt werden können. Die Stärke der Wechselwirkung hängt deshalb sowohl von den magnetischen Quantenzahlen wie auch von der Polarisation des Lichtes ab. Da Photonen einen Spin von $\hbar=1$ besitzen müssen sich die beiden Zustände um

$$\Delta L = L' - L = 0, \pm 1$$

unterscheiden und außerdem können nicht beide Zustände den Wert $L' = L = 0$ annehmen. Die magnetischen Quantenzahlen müssen die Bedingung $\Delta m_L = 0, \pm 1$ erfüllen. Für Einelektronensysteme wie z.B. Alkaliatome gilt außerdem $\Delta l \neq 0$.

4.3.3 Matrixelemente für Alkaliatome

Die einfachsten physikalischen Systeme, in denen diese Prozesse beobachtet werden können, bestehen aus einem einzelnen Elektron, welches an einen positiv geladenen Kern gebunden ist, also dem Wasserstoffatom. In diesem Fall sind jedoch die Übergangsfrequenzen so hoch, dass sie nicht mehr im sichtbaren Bereich des Spektrums liegen, sondern im tiefen Ultravioletten ($\lambda \leq 121.56 \text{ nm}$). Für die meisten Zwecke verhalten sich jedoch die "wasserstoffähnlichen" Atome praktisch identisch (mit skalierten Parametern). Von wasserstoffähnlichen Atomen spricht man bei Atomen mit einem Valenzelektron, also bei den Alkaliatomen oder bei einfach geladenen Erdalkaliatomen. Wir diskutieren hier als Beispiel Alkaliatome.

Wir betrachten als konkretes Beispiel den Übergang eines einzelnen Elektrons vom s - in ein p -Orbital: sein Drehimpuls ändert sich dabei von 0 zu 1. Wird dieser Übergang durch zirkular polarisiertes Licht angeregt, so gilt $\Delta m_L = \pm 1$, und der angeregte Zustand kann nur die Quantenzahlen $|L = 1, m_L = 1\rangle$ haben.

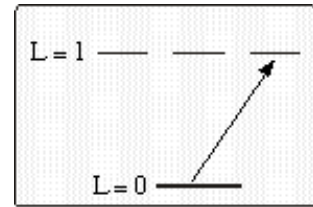


Abbildung 4.19: Übergang durch zirkular polarisiertes Licht.

Für zirkular polarisiertes Licht, das an einen $L = 0 \leftrightarrow L' = 1$ Übergang ankoppelt, gibt es damit nur einen einzigen möglichen Übergang. Das elektrische Dipolmoment zwischen dem Grundzustand und dem elektronisch angeregten Zustand hat somit ein einziges nicht verschwindendes Matrixelement

$$\langle e; L = 1, m_L = 1 | r_+ | g; L = 0, m_L = 0 \rangle = d_L.$$

Die Situation wird etwas komplizierter wenn der Ausgangszustand nicht kugelsymmetrisch

ist. Für den allgemeinen Fall, in dem der Ausgangszustand Drehimpuls L und der Endzustand den Drehimpuls L' besitzt, wird das Matrixelement

$$\langle e; L', m_L | T_q^{(k)} | g; L, m_L \rangle,$$

wobei für Dipolübergänge $k = 1$ ist. Nichtverschwindende Matrixelemente erhält man dann, wenn die Vektorsumme der Drehimpulse erhalten bleibt, d.h. wenn

$$\vec{L}' = \vec{L} + \vec{S},$$

wobei \vec{S} den Spin des Photons darstellt.

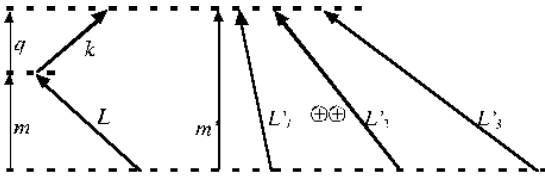


Abbildung 4.20: Drehimpuls-Vektorsummen.

Die Kopplung zweier Drehimpulsvektoren $|L, m\rangle, |k, q\rangle$ ergibt drei mögliche resultierende Drehimpulsvektoren $|L'_{123}, m'\rangle$. Gemäß der Schwartz'schen Ungleichung muß dieser resultierende Drehimpuls den Betrag $L' = L$ oder $L \pm 1$ haben. Für $L = 1$ beispielsweise ergibt sich $L' = 0, 1$ oder 2 . Da sich auch die z -Komponenten addieren muss die Summe der beiden z -Komponenten gleich der z -Komponente der Summe sein. Außerdem muss der Betrag des Drehimpulses größer oder gleich den Komponenten sein. Damit muss für den Anfangszustand $|g; L = 1, m_L = 1\rangle$ und zirkular polarisiertes Licht gelten

$$\langle e; L_e = 2, m_L = 2 | r_+ | g; L_g = 1, m_L = 1 \rangle = d_L.$$

Die Matrixelemente für alle anderen Endzustände verschwinden. Für π -Licht gilt

$$\langle e; L_e, m_L = 1 | r_0 | g; L_g = 1, m_L = 1 \rangle \neq 0.$$

$$L_e = 1, 2.$$

Das Matrixelement für $L_e = 0$ verschwindet wegen der Regel $m_L \leq L$. Für Einelektronensysteme verschwindet auch das Matrixelement für $L_e = 1$ aus Paritätsgründen.

Für σ_- erhält man 2 mögliche Übergänge

$$\langle e; L_e, m_L = 0 | r_{-1} | g; L_g = 1, m_L = 1 \rangle \neq 0.$$

$$L_e = 0, 2.$$

Den Wert der Matrixelemente erhält man mit Hilfe des Wigner-Eckart Theorems.

4.3.4 Atomarer Drehimpuls

Die Atome, resp. Moleküle enthalten ebenfalls Drehimpuls. Man unterscheidet hier verschiedene Reservoirs. In Molekülen enthält die Rotation des Gesamtmoleküls Drehimpuls. In Atomen findet man elektronischen Drehimpuls aufgrund der Bahnbewegung der Elektronen, aber auch internen, also Spin-Drehimpuls der Elektronen und Kerne. Der elektronische Drehimpuls wird mit den Symbolen L und S für Bahn- und Spindrehimpuls bezeichnet, sowie J für den Gesamtdrehimpuls

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}.$$

Der Spin-Drehimpuls der Kerne wird meist mit I bezeichnet und der gesamte atomare Drehimpuls mit

$$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} = \vec{L} + \vec{S} + \vec{I}.$$

Im Bohr-Sommerfeld Modell des Atoms erschienen die Elektronen als Teilchen, welche um den Kern rotierten und so offensichtlich Drehimpuls enthielten. Im quantenmechanischen Modell ist diese Beziehung weniger offensichtlich, aber ihre praktische Bedeutung umso größer. Im freien Raum müssen Eigenzustände des Hamiltonoperators immer auch Eigenzustände des Drehimpulses sein. Wie beim Wasserstoffatom werden alle Einelektronenzustände entsprechend ihrem Bahndrehimpuls $l = 0..n-1$ als $s, p, d \dots$ Orbitale bezeichnet. Die Existenz von Orbitalen mit verschwindendem Bahndrehimpuls ist übrigens ein direkter Widerspruch zum Bohr-Sommerfeld Modell: Dort müssten Elektronen mit verschwindendem Bahndrehimpuls in den Kern stürzen.

Jedem Bahndrehimpuls l entsprechen $2l + 1$ magnetische Quantenzahlen $m = -l..l$. Zustände mit gleichem Drehimpuls l aber unterschiedlicher magnetischer Quantenzahl m sind in freien Atomen ohne externe Felder entartet.

4.3.5 Atomare Feinstruktur

Spin- und Bahndrehimpuls eines Elektrons koppeln aneinander: während die Energie nicht von ihrer absoluten Orientierung abhängt, spielt die relative Orientierung eine Rolle. Diese Wechselwirkung wird beschrieben durch den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_F = f \vec{L} \cdot \vec{S},$$

wobei f die Kopplungskonstante darstellt. Die Wechselwirkung erniedrigt die Symmetrie des Hamiltonoperators: Die Energie ist nur noch dann konstant, wenn die beiden Teile gemeinsam rotiert werden. Dies bedeutet auch, dass der reine Bahndrehimpuls keine Erhaltungsgröße mehr ist; lediglich der Gesamtdrehimpuls ist erhalten.

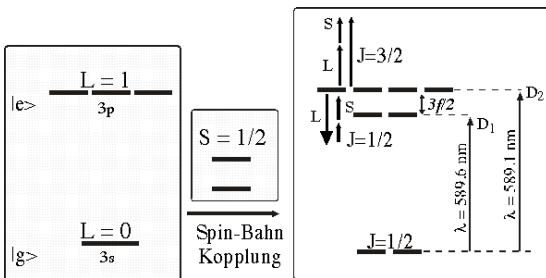


Abbildung 4.21: Spin-Bahn Kopplung.

Wir betrachten als Beispiel die niedrigsten Zustände von Natrium. Der elektronische Grundzustand ist ein s Zustand, besitzt also keinen Bahndrehimpuls und einen gesamten elektronischen Drehimpuls $J = L + S = 1/2$. Da der Bahndrehimpuls verschwindet, existiert hier auch keine Kopplung.

Der angeregte $3p$ Zustand besitzt hingegen einen Bahndrehimpuls $L = 1$. Je nach relativer Orientierung der beiden Komponenten \vec{L} und \vec{S} wird die Summe $J = 3/2$ oder $J = 1/2$. Die Aufspaltung zwischen den beiden Zuständen beträgt $\frac{3f}{2}$,

wie man aus dem Hamiltonoperator findet. Diese Aufspaltung wird als Feinstruktur bezeichnet und führt zur Aufspaltung der Na D -Linie in die D_1 und D_2 Linien. Die Aufspaltung beträgt bei Na 500 GHz und wesentlich mehr für die schwereren Alkaliatome.

4.3.6 Hyperfeinstruktur

Eine ähnliche Kopplung existiert zwischen dem elektronischen Drehimpuls und dem Kernspin. Da sie kleiner ist als die Feinstruktur, spricht man von der Hyperfeinkopplung. Der Hamiltonoperator lautet

$$\mathcal{H}_{HF} = A \vec{J} \cdot \vec{I}.$$

Die Hyperfeinkopplungskonstante A hängt vom elektronischen Zustand ab. Für den Grundzustand von Na ist sie $A_g = 900$ MHz und für den $P_{1/2}$ angeregten Zustand 95 MHz.

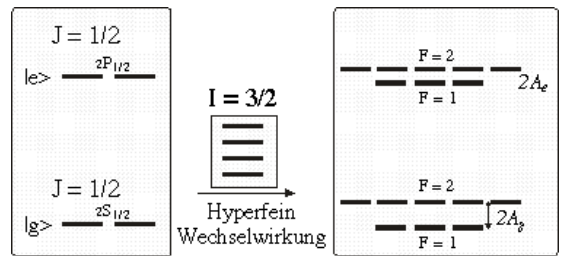


Abbildung 4.22: Hyperfeinkopplung

Im Grund- wie im angeregten Zustand koppelt ein $J = 1/2$ elektronischer Drehimpuls an einen Kernspin $I = 3/2$, so dass wir zwei mögliche Gesamtdrehimpulse $F = 1$ und $F = 2$ erhalten. Die Aufspaltung zwischen diesen beiden Zuständen ist gegeben durch die Kopplungskonstante A .

Im Gegensatz zur Feinstruktur ist die Hyperfeinstruktur zu klein, um in einem Spektrometer gemessen zu werden; sie verschwindet sogar innerhalb der Dopplerlinienbreite. Mit Hilfe hochauflösender Laserspektroskopie kann sie aber sehr exakt gemessen werden.

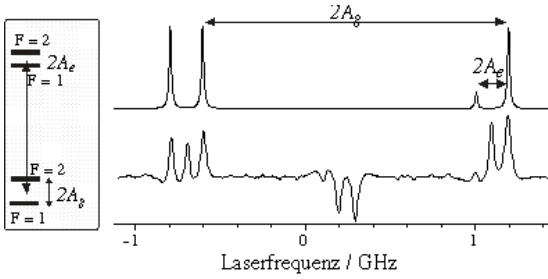


Abbildung 4.23: Experimentelles Spektrum der Na-D₂ Linie.

4.3.7 Matrixelemente

Da die Kopplung zwischen Atom und Laserfeld (das elektrische Dipolmoment) unabhängig ist vom Spin kann sich der Spin bei einem optischen Übergang auch nicht ändern. Somit muss bei einem erlaubten optischen Übergang die Spinquantenzahl für den Grund- und den angeregten Zustand die gleiche sein.

Wir diskutieren hier lediglich den Fall der LS-Kopplung. Die Berücksichtigung des Spins ändert dann lediglich die Niveaustuktur, nicht aber die Auswahlregeln.

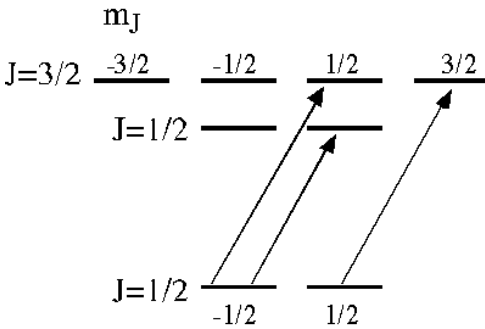


Abbildung 4.24: Übergänge in einem Einelektronenatom.

Auch unter Berücksichtigung der Spin-Bahn Kopplung muss die Drehimpulserhaltung gelten. Für den einfachsten Fall, mit einem $J = 1/2$ Grundzustand und einem $J = 1/2$, resp. $J = 3/2$ angeregten Zustand ist bei der Anregung mit σ_+ Licht für drei Übergänge der Drehimpuls erhalten. Wir können die entsprechenden Matrixele-

mente bestimmen z.B. indem wir die Zustände in die Basiszustände zerlegen. Für den letzten Übergang finden wir

$$\begin{aligned} \langle e; J = 3/2, m_J = 3/2 | r_+ | g; J = 1/2, m_J = 1/2 \rangle &= \\ &= \langle e; L = 1, m_L = 1, S = 1/2, m_S = 1/2 | \\ &| r_+ | g; L = 0, m_L = 0, S = 1/2, m_S = 1/2 \rangle \\ &= d_L. \end{aligned}$$

Für den ersten Übergang finden wir

$$\begin{aligned} \langle e; J = 3/2, m_J = 1/2 | r_+ | g; J = 1/2, m_J = -1/2 \rangle &= \\ &= \sqrt{\frac{1}{3}} \langle e; L = 1, m_L = 1, S = 1/2, m_S = -1/2 | \\ &| r_+ | g; L = 0, m_L = 0, S = 1/2, m_S = -1/2 \rangle \\ &+ \sqrt{\frac{2}{3}} \langle e; L = 1, m_L = 0, S = 1/2, m_S = 1/2 | \\ &| r_+ | g; L = 0, m_L = 0, S = 1/2, m_S = -1/2 \rangle. \end{aligned}$$

Der zweite Term verschwindet aufgrund der Orthogonalität der Spinzustände. Wir erhalten somit

$$\begin{aligned} \langle e; J = 3/2, m_J = 1/2 | r_+ | g; J = 1/2, m_J = -1/2 \rangle &= \\ &= \sqrt{\frac{1}{3}} d_L \end{aligned}$$

und analog

$$\begin{aligned} \langle e; J = 1/2, m_J = 1/2 | r_+ | g; J = 1/2, m_J &= \\ = -1/2 \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} d_L. \end{aligned}$$

Anstelle dieser schrittweisen Berechnung kann man die Matrixelemente für die einzelnen Übergänge auch mit Hilfe des Wigner-Eckart Theorems berechnen. Für Übergänge von J_g nach J_e erhält man

$$\begin{aligned} \langle e; J_e, m_{J_e} | r_q | g; J_g, m_{J_g} \rangle &= \\ = (-1)^{J-m_J} \begin{pmatrix} J_e & 1 & J_g \\ -m_{J_e} & q & m_{J_g} \end{pmatrix} \langle e; J_e || r_q || g; J_g \rangle \end{aligned}$$

Die reduzierten Matrixelemente ergeben sich aus dem Kopplungsschema von Spin- und Bahndrehimpuls. In geschlossener Form lauten sie

$$|\langle e; J_e || r_q || g; J_g \rangle|^2 = (2J_g + 1)(2J_e + 1) \left\{ \begin{matrix} J_g & 1 & J_e \\ L_e & S & L_g \end{matrix} \right\}^2 |\langle e; L_e || r || g; L_g \rangle|^2,$$

sofern der Spin S für beide Zustände identisch ist, und sonst Null. Das Symbol in geschweiften Klammern ist ein $6J$ Symbol; numerische Werte findet man in der Literatur.

j_1	j_2	j_3	l_1	l_2	l_3		j_1	j_2	j_3	l_1	l_2	l_3	
1/2	1/2	0	0	0	1/2	*1	2	1	1	1	1	1	22
1/2	1/2	0	1/2	1/2	0	*2	2	1	1	2	1	1	222
1	1/2	1/2	0	1/2	1/2	2	2	3/2	1/2	0	1/2	3/2	2
1	1/2	1/2	1	1/2	1/2	22	2	3/2	1/2	1/2	1	1	21
1	1	0	0	0	1	01	2	3/2	1/2	1	1/2	3/2	221
1	1	0	1/2	1/2	1/2	11	2	3/2	1/2	1	3/2	1/2	1
1	1	0	1	1	0	02	2	3/2	1/2	1	3/2	3/2	*201
1	1	0	1	1	1	*02	2	3/2	1/2	3/2	1	1	211
1	1	1	1/2	1/2	1/2	*02	2	3/2	1/2	2	3/2	1/2	202
1	1	1	1	0	1	*02	2	3/2	1/2	2	3/2	3/2	*202
1	1	1	1	1	0	*02	2	3/2	3/2	0	3/2	3/2	*2
1	1	1	1	1	1	22	2	3/2	3/2	1/2	1	1	*21
3/2	1	1/2	0	1/2	1	*11	2	3/2	3/2	1	1/2	3/2	*201
3/2	1	1/2	1/2	1	1/2	*02	2	3/2	3/2	1	3/2	1/2	*201
3/2	1	1/2	1	1/2	1	*22	2	3/2	3/2	1	3/2	3/2	202
3/2	1	1/2	3/2	1	1/2	*22	2	3/2	3/2	3/2	1	1	*122

Abbildung 4.25: Numerische Werte für $6J$ -Symbole

Für die D_1 Linie erhält man

$$\left\{ \begin{matrix} J_g & 1 & J_e \\ L_e & S & L_g \end{matrix} \right\} (D_1) = \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & 1 & \frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} & 0 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{\sqrt{6}}.$$

Somit wird die Übergangsstärke

$$|\langle e; J_e || r_q || g; J_g \rangle|^2 = \frac{2}{3} |\langle e; L_e || r || g; L_g \rangle|^2$$

und doppelt so groß für den D_2 Übergang.

Berücksichtigt man zusätzlich den Kernspin, so erhält man in völliger Analogie das reduzierte Matrixelement als

$$|\langle e; F_e || r || g; F_g \rangle|^2 = (2F_g + 1)(2F_e + 1) \left\{ \begin{matrix} F_g & 1 & F_e \\ J_e & I & J_g \end{matrix} \right\}^2 |\langle e; J_e || r || g; J_g \rangle|^2.$$

In der Figur werden die Übergangsstärken für das Natriumatom dargestellt. Die beiden oberen Teile entsprechen zirkularer Polarisation des Lichtes, die untere linearer Polarisation parallel zur Quantisierungsachse.

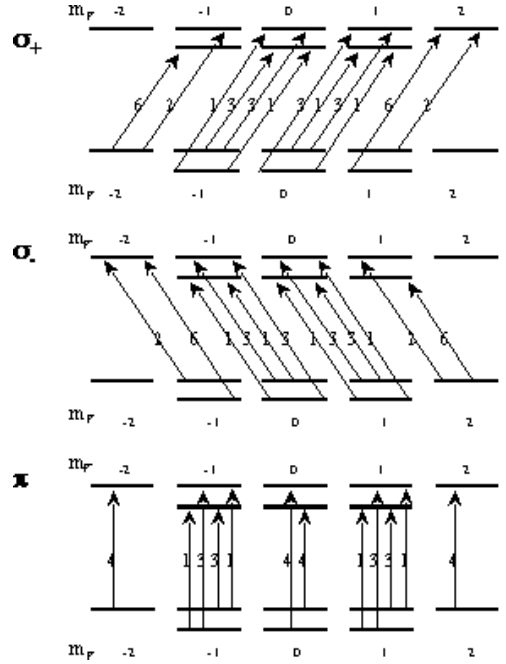


Abbildung 4.26: Übergangsstärken des Na-Atoms für 3 unterschiedliche Polarisationen,

4.4 Systeme mit mehreren Elektronen

4.4.1 Orbitale, Energie und Erhaltungsgrößen

Elektronische Übergänge finden zwischen den höchsten besetzten und den niedrigsten unbesetzten Zuständen statt. Bei den wasserstoffähnlichen Atomen ist dies meistens ein Übergang von einem s- in ein p-Orbital. Bei diesen Systemen reicht es im Allgemeinen, wenn man dieses eine Elektron betrachtet, da die Elektronen in den tiefer liegenden Zuständen an diesen Übergängen praktisch nicht beteiligt sind, d.h. sie bleiben bei der Anregung des Valenzelektrons praktisch inert.

Dies gilt nicht mehr wenn sich mehrere Elektronen in den äußeren Schalen befinden. In diesem Fall kann die Energie der einzelnen Elektronen nur noch als erste Näherung für die Gesamtenergie des Systems betrachtet werden. Die Über-

gangsfrequenzen, d.h. die Absorptionswellenlängen, werden jedoch von der Gesamtenergie des Systems bestimmt:

$$h\nu = E_1^{tot} - E_0^{tot},$$

wobei E_i^{tot} die Gesamtenergie des Systems bezeichnet.

Die Gesamtenergie des Systems kann in erster Näherung durch die Summe der Energien der besetzten Orbitale angenähert werden. Zusätzlich muss jedoch noch die Wechselwirkungsenergie der Elektronen berücksichtigt werden. Den wichtigsten Beitrag dazu liefert die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen,

$$\mathcal{H}_{ee} = \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_i|}.$$

Außerdem muss das Pauli-Prinzip berücksichtigt werden, d.h. die gesamte Zustandsfunktion muss antisymmetrisch sein bezüglich der Vertauschung von 2 Elektronen.

Die Elektron-Elektron Wechselwirkung \mathcal{H}_{ee} vertauscht nicht mit dem Bahndrehimpuls der einzelnen Elektronen. Deshalb ist der Bahndrehimpuls der einzelnen Elektronen keine Erhaltungsgröße, d.h. den Eigenzuständen des Hamiltonoperators können keine Drehimpulse für die einzelnen Elektronen zugeordnet werden. Der gesamte Bahndrehimpuls $L = \sum_i l_i$ bleibt jedoch eine Erhaltungsgröße so lange die Spin-Bahn Wechselwirkung nicht berücksichtigt wird. Unter Berücksichtigung der Spin-Bahn Wechselwirkung ist nur noch der Gesamtdrehimpuls eine Erhaltungsgröße.

Die einzelnen Elektronenkonfigurationen werden mit den Termsymbolen $^{2S+1}L_J$ bezeichnet. Dabei bezeichnet $2S + 1$ die Spin-Multiplizität, L den Gesamt-Bahndrehimpuls, und J den gesamten elektronischen Drehimpuls, d.h. $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

4.4.2 Moleküle

Der wesentlichste Unterschied zwischen Atomen und Molekülen ist dass letztere nicht sphärische Symmetrie aufweisen. Damit fällt u.a. die

Drehimpulserhaltung weg, d.h. die Summe von elektronischem Drehimpuls und Drehimpuls des Lichtes ist nicht mehr erhalten. Der gesamte Drehimpuls ist natürlich weiterhin erhalten, doch muss dafür auch der Rotationsdrehimpuls des Moleküls berücksichtigt werden.

Aufgrund der reduzierten Symmetrie können die Übergangsmatrixelemente nicht mehr aus der Erhaltung des Drehimpulses bestimmt werden. Viele Moleküle weisen aber andere Symmetrieelemente auf, welche Auswahlregeln zur Folge haben. Für jeden konkreten Fall bestimmt man zunächst die Symmetriegruppe des Moleküls. Dies bestimmt die irreduziblen Darstellungen, welche als Basis für die Berechnung von Übergangs-Matrixelementen dienen.

Die Regel für einen erlaubten Übergang ist wie bei den Atomen die dass das Matrixelement die totalsymmetrische Darstellung enthalten muss.

Charaktertabelle für Gruppe C_3

C_3 (3)	E	C_3	C_3^2	$\epsilon = \exp(2\pi i/3)$	
A	1	1	1	z, R_z	$x^2 + y^2, z^2$
E	$\begin{pmatrix} 1 & \epsilon & \epsilon^* \\ & 1 & \epsilon \\ & & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \epsilon & & \\ & \epsilon^* & \\ & & \epsilon \end{pmatrix}$		$(x, y)(R_x, R_y)$	$(x^2 - y^2, xy)(yz, xz)$

Produktregeln

2. Für $C_2, C_3, C_6, D_2, D_3, C_{2v}, C_{3v}, C_{6v}, C_{2h}, C_{3h}, C_{6h}, D_{2h}, D_{3h}, D_{6h}, S_6$

	A_1	A_2	B_1	B_2	E_1	E_2
A_1	A_1	A_2	B_1	B_2	E_1	E_2
A_2		A_1	B_2	B_1	E_1	E_2
B_1			A_1	A_2	E_2	E_1
B_2				A_1	E_2	E_1
E_1					$A_1 + [A_2] + E_2$	$B_1 - B_2 - E_1$
E_2						$A_1 + [A_2] - E_2$

Abbildung 4.27: Charaktertabelle.

Für die Bestimmung der Auswahlregeln müssen zunächst die einzelnen stationären Zustände bestimmten irreduziblen Darstellungen zugewiesen werden. Dafür verwendet man Tabellen zur Gruppentheorie wie hier für das Beispiel C_3 dargestellt. Irreduzible Darstellungen, die mit dem Buchstaben A gekennzeichnet sind, sind nicht entartet, während E eine zweifach entartete Darstellung bezeichnet. Funktionen, die rotations-

symmetrisch bezüglich der dreifachen Achse sind (wie z.B. z) transformieren entsprechend A . Die Funktionen x und y gehören zur Darstellung E .

Ein Produkt von zwei totalsymmetrischen Darstellungen (AA) ist ebenfalls totalsymmetrisch. Ein Produkt AE transformiert gemäß E , während ein Produkt EE zweimal die totalsymmetrische Darstellung und einmal E enthält.

Interessieren wir uns für die Matrixelemente der z -Komponente des Dipoloperators so müssen wir Produkte

$$\langle \psi_1 | z | \psi_2 \rangle$$

finden, welche die totalsymmetrische Darstellung A enthalten. Da z zu A gehört muss das Produkt $\psi_1 \psi_2$ ebenfalls zu A gehören. Somit treten nur Übergänge von A nach A oder E nach E auf. Für die Komponenten x, y muss hingegen das Produkt in E liegen, so dass nur Übergänge von A nach E und umgekehrt auftreten.

4.4.3 Farbige Defekte in dielektrischen Kristallen

In Festkörpern ist das Vorgehen grundsätzlich das gleiche. Metalle sind für optische Spektroskopie im Allgemeinen nicht interessant. Bei Isolatoren sind resonante optische Effekte primär an Defekten und Verunreinigungen zu betrachten. Die Farbe von vielen kristallinen Substanzen, wie z.B. Edelsteinen, wird durch Defekte erzeugt.

Diamant besteht im Idealfall aus einem reinen Kohlenstoffgitter. Stickstoff-Verunreinigungen geben ihm eine gelbe Farbe, Bor und Wasserstoff eine blaue Farbe. Rosa diamanten erhalten ihre Farbe durch N/V Defekte: hier substituiert ein Stickstoffatom für ein Kohlenstoffatom, und ein benachbartes Atom fehlt.

In verschiedenen anderen Edelsteinen sorgen Cr^{3+} Verunreinigungen für die Farbe. Die Cr-Ionen substituieren dabei einzelne Al-Ionen an ihren Gitterplätzen. Ein neutrales Cr Atom besitzt die Elektronenkonfiguration $[\text{Ar}] 3d^5 4s^1$. Im dreifach geladenen Ion reduziert sich dies auf $[\text{Ar}]$



Abbildung 4.28: Farbige Diamanten und Struktur des N/V Zentrums, das für die Farbe in den rosa Diamanten sorgt.

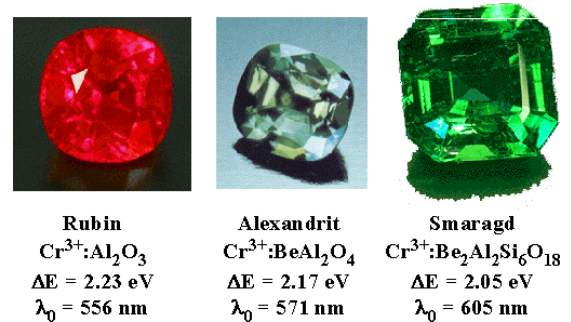


Abbildung 4.29: Unterschiedliche Edelsteine, die Cr^{3+} -Ionen enthalten.

$3d^3$. Gemäß den Hundschen Regeln besetzen diese 3 Elektronen im Grundzustand des Atoms drei unterschiedliche d -Orbitale und ihr Spin wird maximal, d.h. $S = 3/2$. Der gesamte Bahndrehimpuls wird ebenfalls maximal, d.h. $L = 3$ und, da die d -Schale weniger als zur Hälfte besetzt ist, wird der gesamte elektronische Drehimpuls minimal, $J = L - S = 3/2$. Das entsprechende Termsymbol lautet somit ${}^4F_{3/2}$.

4.4.4 Rubin

Die Analyse ist in diesem Fall analog zu freien Atomen oder Molekülen, außer dass die Symmetrie durch die Matrix bestimmt wird: das System hat nicht mehr die Symmetrie des freien Raums (volle Rotationssymmetrie), sondern nur

noch die Symmetrie des Kristallgitters.

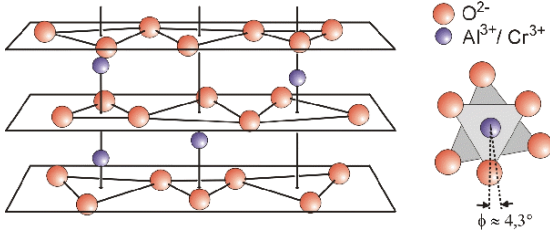


Abbildung 4.30: Kristallstruktur von Rubin

Die Kristallstruktur des Rubins ($\text{Cr}^{3+}:\text{Al}_2\text{O}_3$) ist rhomboedrisch. Die Einheitszelle enthält zwei Moleküle Al_2O_3 . Einige der Aluminium-Ionen (Al^{3+}) sind durch Chrom-Ionen (Cr^{3+}) ersetzt. Sie sind von sechs Sauerstoff-Ionen (O^{2-}) als nächste Nachbarn umgeben, die ein trigonal verzerrtes Oktaeder um das Al^{3+} - bzw. Cr^{3+} -Ion bilden. Die Symmetrie des verzerrten Oktaeders ist C_3 , mit der Hauptachse entlang der Spitzen des Einheits-Rhomboeders.

Die vier Gitterplätze des Al^{3+} in der Elementarzelle sind energetisch äquivalent, da die vier verzerrten Oktaeder durch Translation bzw. sowohl Translation als auch Rotation am zentralen Ion ineinander überführt werden können. Es befinden sich drei O^{2-} -Ionen im Dreieck in der Ebene oberhalb des Cr^{3+} -Ions und drei O^{2-} -Ionen im Dreieck in der Ebene unterhalb des Cr^{3+} -Ions. Die Dreiecke unterscheiden sich etwas in ihrer Größe und sind bezüglich exakter Symmetrie um einen Winkel von $\phi \approx 4.3^\circ$ zueinander verdreht.

4.4.5 Kristallfeld

Befindet sich ein Atom oder Ion in einem Kristallgitter, so enthält sein Hamiltonoperator einen Potenzialterm

$$\mathcal{H}_{\text{pot}} = V(\vec{r}),$$

wobei das Potenzial V die Symmetrie des Kristallgitters aufweist. Dabei spielt hier vor allem die Sitesymmetrie, also die lokale Symmetrie am Ort des Atoms eine Rolle. Die wichtigsten Symmetrieelemente sind hier meist diskrete Rotationsachsen C_n . Dies bedeutet, dass das Potenzial

in sich selber übergeht wenn die Umgebung um den Winkel $\phi = \frac{2\pi}{n}$ rotiert wird.

Eine wichtige Konsequenz davon ist, dass in diesem Fall der Drehimpuls keine Erhaltungsgröße mehr ist. Dies sieht man daran, dass der Drehimpulsoperator nicht mehr mit dem Hamiltonoperator vertauscht. Würde er dies tun, so würde

$$e^{-iJ_\alpha\beta}\mathcal{H}e^{iJ_\alpha\beta} = \mathcal{H},$$

d.h. der Hamiltonoperator würde bei beliebigen Drehwinkeln β invariant bleiben. Da er dies nicht ist schließen wir, dass er nicht mit dem Drehimpuls vertauscht. Ein Eigenzustand des Drehimpulsoperators ist deshalb i.A. nicht gleichzeitig Eigenzustand des Hamiltonoperators. Die Eigenzustände haben deshalb keinen wohl definierten Drehimpuls

Die Cr^{3+} -Ionen besitzen 3 d-Elektronen. In freien Atomen sind die 5 d-Orbitale entartet. In einem Festkörper ist jedoch die Umgebung nicht mehr isotrop und die Energien der Orbitale deshalb nicht mehr gleich. Wir betrachten nun, wie sich die Energie dieser Orbitale verschiebt, wenn sie mit dem Feld wechselwirken, welches die benachbarten Ionen erzeugen. Als einfaches Modell beschreiben wir die benachbarten Atome als Punktladungen der Ladung $-Ze$ (wobei Z i.A. keine ganze Zahl ist).

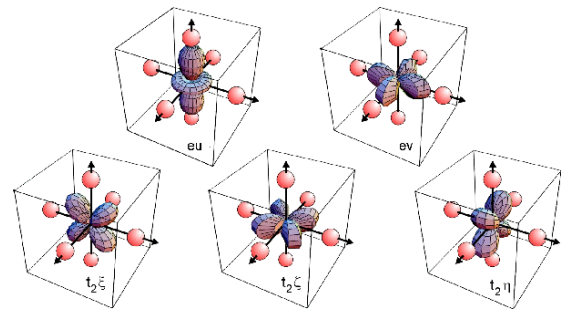


Abbildung 4.31: d-Orbitale im Rubin

Die Figur zeigt die d-Orbitale der Cr-Ionen bezüglich der benachbarten O-Ionen. Für diese Behandlung wurde zunächst eine oktaedrische Umgebung angenommen. Die e-Orbitale erfahren eine stärkere Abstoßung als die t_2 -Orbitale aufgrund ihrer höheren Aufenthalts-

Wahrscheinlichkeit am Ort der negativ geladenen Sauerstoff-Atome.

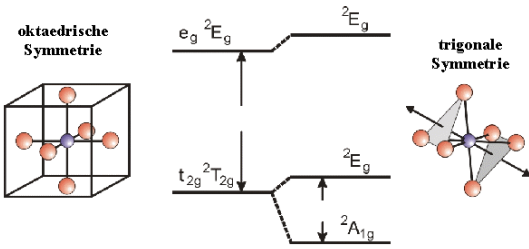


Abbildung 4.32: Verschiebung der Energieniveaus im Kristallfeld.

Aufgrund dieser unterschiedlichen Verschiebung der Energien spalten die Zustände im Kristallfeld auf. Aufgrund der trigonalen Verzerrung spalten auch die t_2 -Orbitale nochmals auf.

4.4.6 Elektron-Elektron Wechselwirkung

Die Orbitale beschreiben die Zustände von Elektronen, die voneinander unabhängig sind. Für die Gesamtenergie eines Atoms spielen jedoch auch die Wechselwirkungen zwischen den Elektronen eine Rolle. Der elektronische Hamiltonoperator enthält dann die Terme

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_0(\vec{r}_i) + \sum_{i < j} \mathcal{H}'(\vec{r}_i, \vec{r}_j).$$

Hier stellt \mathcal{H}_0 den Einelektronen-Hamiltonoperator dar und $\mathcal{H}'(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ die Coulomb-Abstoßung zwischen den Elektronen. Diese Wechselwirkung wird als kleine Störung von \mathcal{H}_0 behandelt.

Wenn wir die Zustandsfunktion des Gesamtsystems berechnen müssen wir Produkte der Zustände der Einzelektronen bilden und dies antisymmetrisieren (z.B. über Slater-Determinanten). Bei der Produktbildung muss wie bei den Alkaliatomen die Vektoraddition der Drehimpulse berücksichtigt werden. Im Fall der drei besetzten d-Orbitale kann der Drehimpuls für parallele Spins maximal $L = 2 + 1 + 0 = 3$ betragen, d.h. der Zustand niedrigster Energie ist

ein 4F -Zustand. Zustände, bei denen die Drehimpulse anders addiert werden haben höhere Energie, z.B. 4P , 2P .

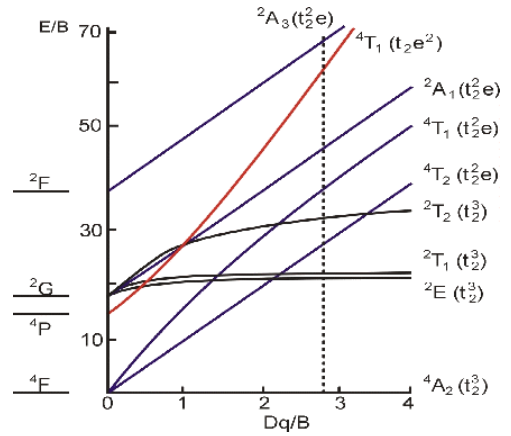


Abbildung 4.33: Energie der d^3 -Zustände als Funktion der Stärke der Kristallfeldaufspaltung.

Die resultierenden Zustände haben Energien, die einerseits von der Stärke der Wechselwirkung abhängen, andererseits von der Stärke der Kristallfeldaufspaltung. Der vertikale Strich zeigt den Wert für Rubin. Wie man erkennen kann reagieren nicht alle Zustände gleich stark auf das Kristallfeld. Insbesondere steigt die Energie derjenigen Zustände, die ein Elektron in einem e-Zustand haben (t_2^2e) stark an, während die Zustände die alle 3 Elektronen in den t -Zuständen haben (t_2^3), praktisch gleich bleibt (gegenüber dem Grundzustand). Dies führt dazu, dass die Reihenfolge der Zustände sich ändert.

Bei anderen Systemen kann dies auch zu einer Änderung des Grundzustandes führen. Das bekannteste Beispiel ist Fe^{3+} , ein System mit 5 d-Elektronen. Bei freien Ionen, resp. geringer Kristallfeldaufspaltung gilt die Hundtsche Regel, nach der alle Spins parallel ausgerichtet sind und der Grundzustand hat den Gesamtspin $S = 5/2$ (high spin). Bei starker Kristallfeldaufspaltung wird es energetisch günstiger, 3 Elektronen in den energetisch niedrigeren Orbitalen unterzubringen. Damit sinkt der Gesamtspin auf $S = 1/2$ (low spin).

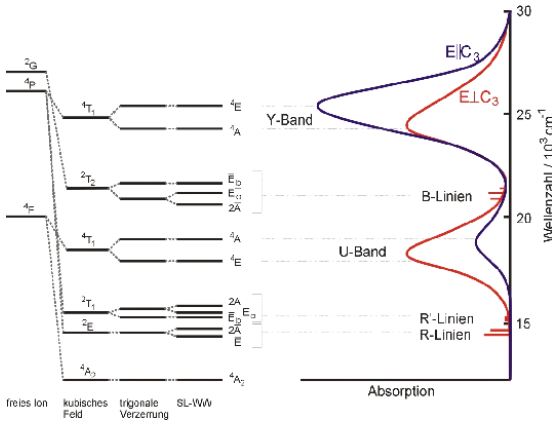


Abbildung 4.34: Spektrum von Rubin

Die Berechnung der Übergangsamplituden erfolgt analog zum Einelektronen-Atom indem man den Dipoloperator in die Eigenbasis transformiert. In der Figur sind auch die Linienbreiten dargestellt. Diese hängen zum einen von der Übergangsstärke ab, zum anderen von der Empfindlichkeit der Energiedifferenzen bezüglich Kristallfeld-Verzerrungen: Eine hohe Empfindlichkeit (=steile Kurve in der Figur E vs. D) bedeutet, dass geringe Verzerrungen der Umgebung (z.B. durch Defekte) eine wesentliche Verschiebung der Übergangsenergie erzeugen. Im statistischen Mittel über den Kristall erzeugt dies eine breite Gesamtlinie.

4.4.7 Seltene Erden

Bei den seltenen Erden findet man eine ähnliche Situation wie bei den Übergangsmetallionen: in diesem Fall werden die höchsten besetzten und die niedrigsten unbesetzten Zustände durch teilweise besetzte f-Zustände gebildet. Der wichtigste Unterschied im Vergleich zu den Übergangsmetallen ist, dass in diesem Fall die Spin-Bahn Wechselwirkung wesentlich stärker ist als bei den Übergangsmetallionen. Das liegt vor allem daran, dass die Spin-Bahn Wechselwirkung mit zunehmender Kernladungszahl ansteigt.

Alle seltenen Erden weisen eine große Zahl von Zuständen auf, welche sich nur durch die unterschiedliche Besetzung der 4f Orbitale unterschei-

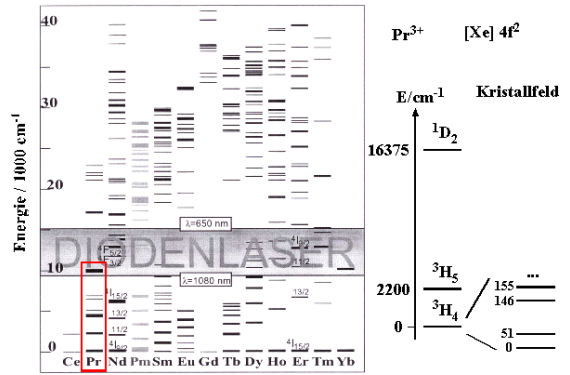


Abbildung 4.35: Energien von seltenen Erden, spezielle Pr^{3+} im Kristallfeld.

den.

Als Beispiel betrachten wir Pr^{3+} . Dieses Ion besitzt 2 4f Elektronen. Gemäß den Hundschens Regeln haben diese parallelen Spin, $S = 1$. Der maximale Bahndrehimpuls ist $3 + 2 = 5$, d.h. der Grundzustand ist ein 3H_4 Zustand, wobei wir auch die dritte Hundschs Regel berücksichtigt haben, $J = L - S$.

Der Grundzustand des freien Ions ist somit $2J + 1 = 9$ -fach entartet. Im Kristallfeld, welches z.B. im Gastkristall YAlO_3 eine niedrige Symmetrie aufweist, wird die Entartung dieser Zustände aufgehoben und die Zustände spalten auf.

4.4.8 Halbleiter

Zum Schluss soll noch ansatzweise der Fall eines Festkörpers mit Bandstruktur behandelt werden. Da Metalle und Isolatoren für optische Spektroskopie wenig interessant sind bleiben vor allem Halbleiter. Dabei diskutieren wir nicht den allgemeinen Fall, sondern lediglich der relativ einfache aber wichtige Fall von kubischer Symmetrie wie er z.B. in GaAs auftritt. In diesem Fall ist die Symmetrie hoch genug dass weiterhin Drehimpulserhaltung gilt, so dass die Auswahlregeln praktisch vom freien Atom übernommen werden können.

In GaAs hat das Valenzband p -Charakter, d.h. die Elektronen (und Löcher) im Valenzband be-

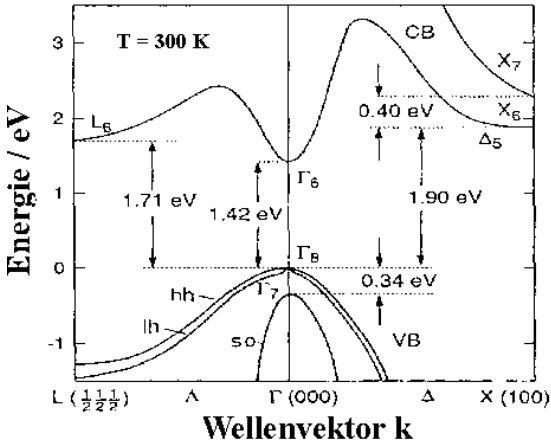


Abbildung 4.36: Bandstruktur von GaAs

sitzen einen Drehimpuls $L_v = 1$. Das Leitungsband hat s Charakter, d.h. die Elektronen besitzen $L_c = 0$. Unter Berücksichtigung des Spins erhält man für das Valenzband die möglichen Drehimpulszustände $J_v = 1/2$ und $J_v = 3/2$. Die Spin-Bahn Wechselwirkung führt zu einer Aufspaltung, welche für GaAs 0.34 eV beträgt (für $k = 0$). Der $J = 1/2$ Zustand hat die niedrigere Energie und bildet ein zweifach entartetes Subband, während das obere Subband ($J = 3/2$) für $k = 0$ vierfach entartet ist.

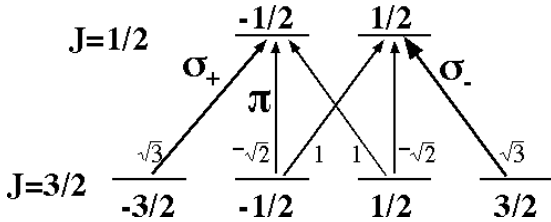


Abbildung 4.37: Übergangsstärken in GaAs.

Die Übergangsmatrixelemente sind praktisch identisch wie bei der D_2 Linie der Alkaliatome wenn man berücksichtigt dass hier der $J = 3/2$ Zustand unten und $J = 1/2$ oben liegt.

5 Lichtkräfte und Laserkühlung

5.1 Lichtkräfte

Licht kann starke mechanische Kräfte auf Atome ausüben. Dies wurde in den letzten Jahren intensiv genutzt, u.a. für die Laserkühlung (Nobelpreis 1997), welche auch zur Bose-Einstein Kondensation von Atomen, Atomlasern etc. geführt hat (Nobelpreis 2001). Eine andere wichtige Entwicklungslinie sind optische Pinzetten, welche z.B. für die Untersuchung von einzelnen DNS-Molekülen verwendet werden.

5.1.1 Klassische Behandlung

Klassisch können wir die Kraft, welche auf ein Atom in einem Laserstrahl wirkt, als Gradient der potentiellen Energie berechnen:

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}U = \vec{\nabla}(E \cdot \vec{d}).$$

Obwohl Atome kein permanentes Dipolmoment besitzen wird durch die Einstrahlung eines induziert, so dass das Skalarprodukt im Allgemeinen einen nicht verschwindenden Wert aufweist. Es verschwindet hingegen auf der Resonanz, da dort Feld und Dipol 90 Grad außer Phase sind.

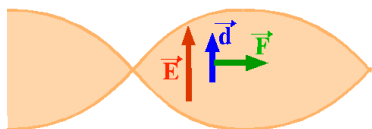


Abbildung 5.1: Elektrischer Dipol im elektrischen Feld.

Der Gradient kann groß werden und damit große Kräfte erzeugen wenn der Laserstrahl inhomogen ist, also z.B. in einem Fokus, einer evaneszenten Welle, oder in einer stehenden Welle.

In einer ebenen Welle verschwinden die transversalen Ableitungen, so dass die Kraft in Aus-

breitungsrichtung wirkt. Allerdings ist sie periodisch mit der Lichtfrequenz, so dass sie im Mittel verschwindet. Dies ändert sich jedoch wenn man die Absorption durch das Atom selber berücksichtigt: Das Feld ist dann hinter dem Atom schwächer als davor, so dass der Gradient einen nicht verschwindenden zeitlichen Mittelwert erhält und eine endliche Kraft auf das Teilchen wirkt, welche mit der Absorptionsrate zunimmt. Da ein elektromagnetisches Feld Impuls in Ausbreitungsrichtung besitzt kann man das direkt als Impulsübertrag vom Feld auf das Atom interpretieren.

5.1.2 Quantenmechanik: Impulserhaltung

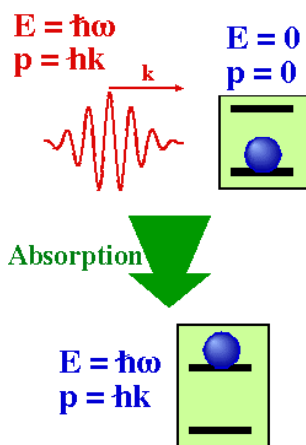


Abbildung 5.2: Impulserhaltung bei der Absorption.

Die Diskussion wird aber wesentlich einfacher wenn wir den Impuls von Photonen betrachten: er beträgt $\hbar k$ und ist in Ausbreitungsrichtung orientiert. Wenn ein Atom Licht absorbiert, nimmt es dabei sowohl Energie, wie auch Impuls des Photons auf. Sowohl Energie, wie auch

Impuls sind Erhaltungsgrößen; d.h. sie können nicht einfach erzeugt oder vernichtet werden. Bei der Absorption von Licht verschwinden Photonen und ihre Energie und ihr Impuls gehen dabei auf das Atom über. Man kann sich das so vorstellen, dass mit einer Kugel auf das Atom geschossen wird. Wenn die Kugel darin stecken bleibt - das entspricht dem Fall der Absorption -, so erhält das Atom eine Bewegungskomponente in der Ausbreitungsrichtung des absorbierten Photons. Wenn sich das Atom vor der Absorption in Ruhe befand, bewegt es sich anschließend vom Laser weg - es wird somit beschleunigt.

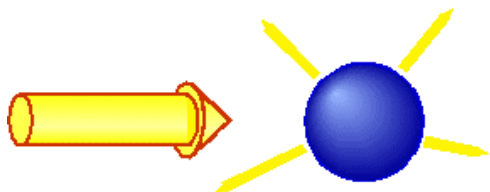


Abbildung 5.3: Streuung eines Laserstrahls an einem Atom.

Der Impuls eines sichtbaren Photons ist klein. Er beträgt z.B. für ein Photon der Wellenlänge 589 nm

$$p_{Ph} = \hbar k = \frac{h}{\lambda} = \frac{6.6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{5.89 \cdot 10^{-7} \text{ m}} = 1.12 \cdot 10^{-27} \text{ m kg s}^{-1}$$

Wird dieser Impuls auf ein Na-Atom übertragen, so ändert sich seine Geschwindigkeit um

$$\Delta v = \frac{p_{Ph}}{m_{Na}} = \frac{1.12 \cdot 10^{-27} \text{ m kg s}^{-1}}{3.84 \cdot 10^{-26} \text{ kg}} = 2.9 \frac{\text{cm}}{\text{s}}$$

und bei schwereren Atomen ist der Betrag noch kleiner.

Da ein Laserstrahl eine sehr große Zahl von Photonen enthält und das absorbierte Photon nach wenigen nsec wieder abgestrahlt wird, kann dieser Prozess sehr schnell wiederholt werden. Ein Na Atom, z.B., kann jede Sekunde bis zu 60 Mio. Stöße durch die Absorption von Photonen erfahren. Es wird dann mit

$$a = 6 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1} \Delta v = 1.7 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} = 170000 \text{ g}$$

beschleunigt.

Wenn wir den Einfluss der Absorption diskutieren müssen wir natürlich auch den Einfluss der Emission berücksichtigen. Der Impulsübertrag eines Einzelprozesses ist bei der Emission genau gleich groß wie bei der Absorption. Da bei der Absorption aus einem Laserstrahl aber alle Photonen den gleichen Impuls aufweisen addiert sich deren Beitrag zur Impulsänderung linear mit der Anzahl absorbierter Photonen. Die spontan emittierten Photonen werden in alle Raumrichtungen emittiert, so dass deren gemittelter Beitrag zur atomaren Impulsänderung klein bleibt, resp. nur mit der Wurzel der Intensität (und zufälliger Richtung) ansteigt. Wir können diesen Beitrag zur Kraft vorläufig vergessen und der Gesamteffekt ist lediglich durch den Beitrag der Absorption bestimmt.

5.1.3 Die Anfänge

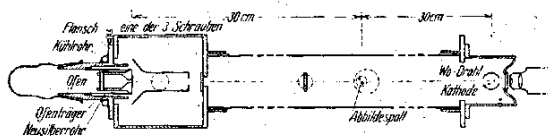
Eine erste Abschätzung der Größenordnung des Effektes wurde bereits von Einstein durchgeführt (A. Einstein, 'Zur Quantentheorie der Strahlung', Phys. Zeitschrift 18, 121-128 (1917)).

(Untersuchungen zur Molekularstrahlmethode aus dem Institut für physikalische Chemie der Hamburgischen Universität. Nr. 80.)

Experimenteller Nachweis des Einsteinschen Strahlungsrückstoßes.

Von R. Frisch in Hamburg.

Mit 6 Abbildungen. (Eingegangen am 22. August 1933.)



R. Frisch. Z. Phys. 86, 42-48 (1933).

Abbildung 5.4: Aufbau zur Beobachtung des Strahlungsrückstoßes.

Zum erstenmal beobachtet wurde der Effekt 1933 von Frisch. (R. Frisch, 'Experimenteller Nachweis des Einsteinschen Strahlungsrückstoßes', Z. Phys. 86, 42-48 (1933)). Dazu verwendete er einen Atomstrahl, welchen er seitlich mit Licht bestrahlte.

Er konnte feststellen, dass der Atomstrahl bei

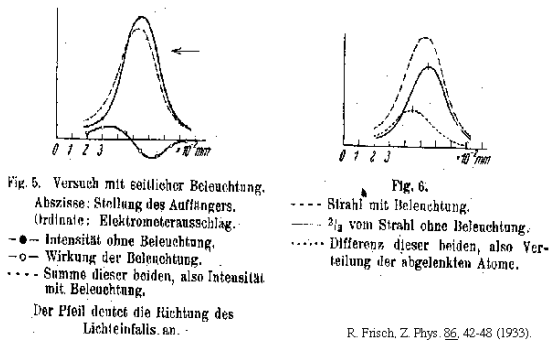


Abbildung 5.5: Beobachtung des Effektes.

eingeschaltetem Licht leicht (um Bruchteile des Strahldurchmessers) verschoben wurde. Frisch hatte zu dieser Zeit keine Laser zur Verfügung, sondern musste eine Natriumdampfampe verwenden. Deshalb war der gemessene Effekt relativ klein. Im Durchschnitt konnten die Atome nur gerade $\frac{1}{3}$ Photon absorbieren, so dass die beobachtete Verschiebung des Atomstrahls kleiner war als sein Querschnitt.

5.1.4 Spontane Streukraft

Unter der spontanen Streukraft versteht man die Kraft, welche durch die stimulierte Absorption von Photonen aus einem Laserstrahl und spontane Reemission erzeugt wird. Wie bereits erwähnt ist der mittlere Impulsübertrag der Emission null, während die Impulsüberträge der absorbierten Photonen kohärent addieren.

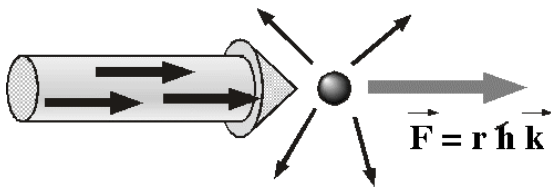


Abbildung 5.6: Spontane Streukraft.

Damit wird die Kraft \vec{F} , welche bekanntlich gleich Impulsübertrag pro Zeiteinheit ist, gleich dem Impulsübertrag eines einzelnen Photons multipliziert mit der Rate r .

$$\vec{F} = \hbar \vec{k} r,$$

wobei \vec{k} den Wellenvektor des Laserstrahls darstellt.

Ein Atom, das mit der Geschwindigkeit eines Düsenflugzeuges auf den Laserstrahl auftrifft, wird deshalb auf einer Distanz von wenigen Zentimetern zum Stehen gebracht.

5.1.5 Frequenzabhängigkeit und Dopplerverschiebung

Die Rate r , mit der Photonen gestreut werden, hängt von der Frequenz und der Intensität des Laserstrahls ab. Für freie Atome kann sie geschrieben werden als

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

Hier bedeutet Γ_1 die inverse Lebensdauer des angeregten Zustandes, ω_x die Rabi-Frequenz. Der Ausdruck ω_x^2 ist proportional zur Intensität des Laserstrahls. $\Delta\omega_0$ ist die Differenz zwischen der Laserfrequenz und der Resonanzfrequenz des Atoms. Nicht berücksichtigt wurde hier die Sättigung, d.h. der Ausdruck gilt nur für kleine Intensitäten.

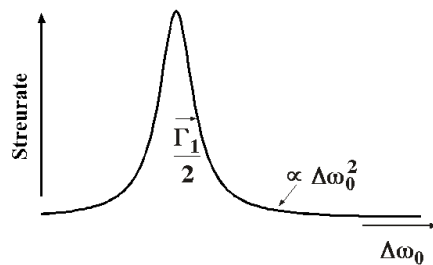


Abbildung 5.7: Abhängigkeit der Streureate von der Laserverstimmung.

Die Abhängigkeit der Streureate von der Laserfrequenz entspricht damit der bekannten Lorentzlinie: sie ist maximal auf der Resonanz und sinkt auf die Hälfte wenn die Verstimmung gerade der halben spontanen Emissionsrate entspricht.

Da die Atome sich nicht in Ruhe befinden muss die Resonanzfrequenz um die Dopplerverschiebung korrigiert werden. Wir schreiben für die

Verstimmung des Lasers gegenüber der Resonanzfrequenz des ruhenden Atoms $\Delta\omega_0$. Für ein Atom, das sich mit einer Geschwindigkeit \vec{v} in Richtung des Laserstrahls bewegt verschiebt sich die Verstimmung zu $\Delta\omega_0 + \vec{k} \cdot \vec{v}$, wobei \vec{k} den Wellenvektor des Laserstrahls darstellt. Damit wird die Rate für fliegende Atome

$$r = \Gamma_1 \frac{\omega_x^2}{\Gamma_1^2 + 4(\Delta\omega_0 + kv)^2}.$$

Die spontane Streukraft als Funktion der Geschwindigkeit hat damit die Form

$$F = \hbar k r = \hbar k \Gamma_1 \frac{\omega_x^2}{\Gamma_1^2 + 4(\Delta\omega_0 + kv)^2}.$$

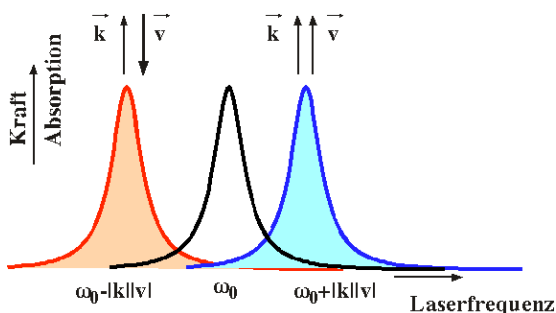


Abbildung 5.8: Abhängigkeit der Streukraft von der Laserfrequenz.

Sie erreicht ein Maximum wenn die Atome sich mit der Geschwindigkeit

$$v = -\frac{\Delta\omega_0}{k}$$

bewegen, d.h. wenn die Dopplerverschiebung sie zur Resonanz mit dem Laserfeld bringt.

5.1.6 Dopplerverbreiterung

In einem atomaren Gas besitzen die einzelnen Atome unterschiedliche Geschwindigkeiten. Die Geschwindigkeitsverteilung wird durch die Maxwell-Boltzmann Verteilung beschrieben

$$dN(v) = N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT} v^2 dv.$$

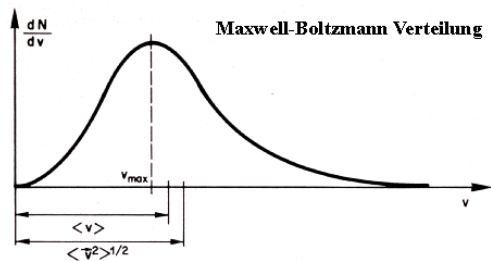


Abbildung 5.9: Maxwell-Boltzmann Geschwindigkeitsverteilung

Da mittlere thermische Geschwindigkeiten von der Größenordnung von einigen 100 m/s sind führt dies zu Verschiebungen der Resonanz von der Größenordnung von

$$\Delta\omega = vk = 2\pi \frac{v}{\lambda} \approx 6 \cdot \frac{300}{6 \cdot 10^{-7}} s^{-1} = 2\pi \cdot 500 \text{ MHz}$$

also zu Linienverbreiterungen von einigen GHz für leichte (und damit schnelle) Atome, und einigen 100 MHz für schwere (und damit langsame) Atome.

5.1.7 Resonanzverschiebung durch Strahlungsrückstoß

Diese Kraft kann also Atome sehr stark beschleunigen, resp. verzögern. Allerdings funktioniert dies nur für wenige Zyklen:

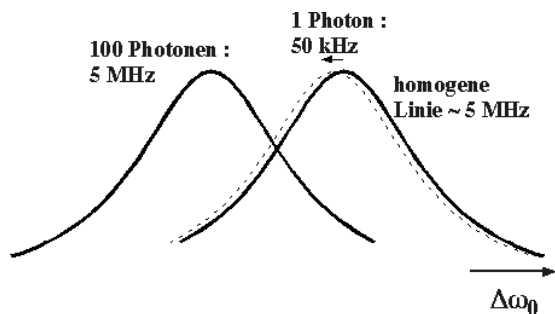


Abbildung 5.10: Verschiebung der Resonanzfrequenz aufgrund des Impulsübertrags.

Der Impulsübertrag bei der Streuung eines Photons verschiebt die Resonanzfrequenz des Atoms

aufgrund des Dopplereffekts um rund 50 kHz. Nach rund 100 Photonen beträgt die Verschiebung somit rund 5 MHz, was der natürlichen Linienbreite entspricht. Somit werden nur noch wenige Photonen absorbiert und die Kraft nimmt stark ab. Die Geschwindigkeit hat sich dabei um lediglich 3 m/sec geändert.

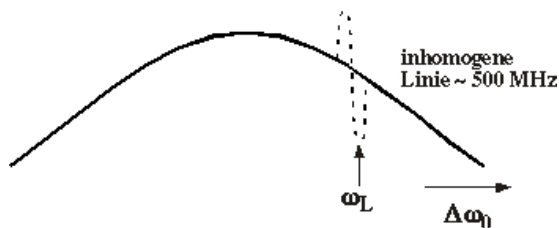


Abbildung 5.11: Effekt auf die Dopplerverbreiterte Linie.

Dies entspricht rund 1% der mittleren thermischen Geschwindigkeit. Dies kann auch leicht über die gesamte, aufgrund des Dopplereffekts inhomogen verbreiterte Linie verglichen werden: Der Photonenrückstoß beeinflusst nur Atome, deren Resonanzfrequenz sich um etwa eine homogene Linienbreite von der Laserfrequenz unterscheidet. Der Strahlungsrückstoß führt deshalb zu einem "Loch" in der inhomogen verbreiterten Linie, welches den Atomen entspricht, deren Geschwindigkeit geändert wurde.

Wenn man die Atome stärker als 3 m/s abbremsen will muss man eine Möglichkeit finden, die Atome in der Resonanz zu halten.

5.1.8 Frequenzchirp und Zeeman-Tuning

Eine Möglichkeit besteht darin, die Laserfrequenz nicht konstant zu halten, sondern so zu variieren, dass er mit den Atomen resonant bleibt. Wie in der Figur gezeigt kann man damit erreichen, dass alle Atome schließlich in die gleiche Geschwindigkeitsgruppe geschoben werden.

Auch wenn es mit einem gechirpten Laser möglich ist, Atome soweit abzubremesen, dass sie sich in Ruhe befinden, hat die Methode doch auch

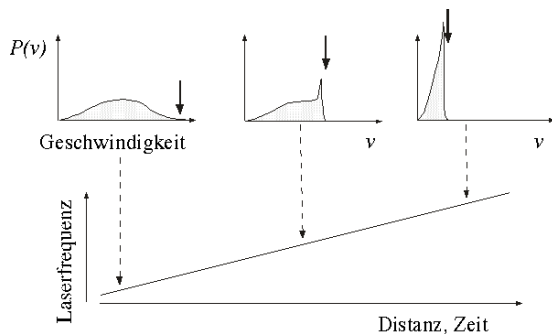


Abbildung 5.12: Frequenzchirp.

Nachteile. Insbesondere kann sie nur gepulst verwendet werden, da der Laser immer nur mit einer Geschwindigkeitsgruppe resonant ist.

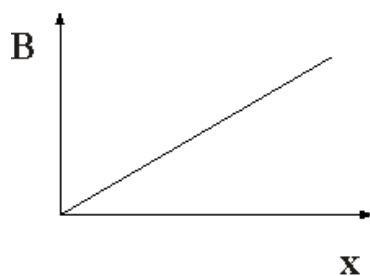


Abbildung 5.13: Variables B-Feld

Dieses Problem kann dadurch gelöst werden, dass die Laserfrequenz fix gelassen wird und stattdessen die Resonanzfrequenz der Atome variiert wird. Dies wird meist über einen Magnetfeldgradienten erreicht, welcher auf eine Strecke von ca. 1 m angelegt wird: Die Energie der atomaren Zustände kann dadurch über den Zeemaneffekt um mehrere 100 MHz verschoben werden, je nach Stärke des Magnetfeldes und der Magnetfeldabhängigkeit der beteiligten Zustände.

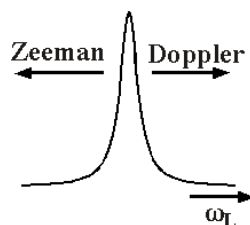


Abbildung 5.14: Kompensation der Verschiebungen.

Durch eine geeignete Wahl der Parameter kann man erreichen, dass die Verschiebung der atomaren Resonanzfrequenz aufgrund des Zeeman Effektes die zunehmende Dopplerverschiebung gerade kompensiert und die Atome über die gesamte Strecke mit dem Laser in Resonanz bleiben.

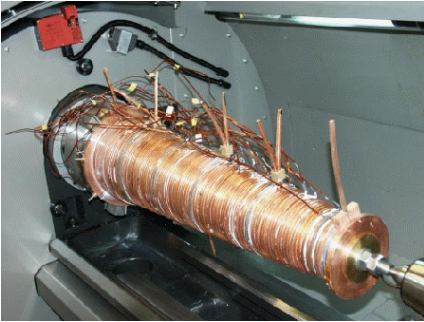


Abbildung 5.15: Magnetfeldgradient für einen "Zeeman-Slower".

Experimentell realisiert man solche Magnetfeldgradienten z.B. indem man Spulen mit variabler Anzahl von Wicklungen herstellt.

5.2 Dopplerkühlung

5.2.1 Motivation

Die ideale Versuchsanlage für die präzise Messung von atomaren (und molekularen) Übergangsfrequenzen ist ein einzelnes Atom, welches sich an einem wohl definierten Punkt im Raum in Ruhe befindet. Typische Versuchsanordnungen weichen stark davon ab. Im einfachsten Fall untersucht man ein atomares Gas. In diesem Fall besitzen die Atome eine Geschwindigkeit, die gemäß Maxwell-Boltzmann gegeben ist durch

$$dN(v) = N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT} v^2 dv.$$

Daraus ergeben sich 2 Konsequenzen:

1. Jedes Atom befindet sich nur für eine beschränkte Zeit in Wechselwirkung mit dem Laser. Dies limitiert die Genauigkeit, mit

der Übergangsfrequenzen gemessen werden können, d.h. es verbreitert die Linie.

2. Ein Atom mit Geschwindigkeit \vec{v} hat eine um $\Delta\omega = \vec{v} \cdot \vec{k}$ verschobene Frequenz, wobei \vec{k} den Wellenvektor des Laserstrahls darstellt. Diese Verschiebung wird als Dopplerverschiebung bezeichnet. Da unterschiedliche Atome unterschiedliche Geschwindigkeiten haben führt dies zu einer Verbreiterung der Resonanzlinie. Man spricht von Dopplerverbreiterung.

5.2.2 Das Prinzip

Auch dieser Zeeman-Tuner ist nicht für alle Experimente optimal, besonders wenn man Atome mit der Geschwindigkeit Null benötigt. Der Grund ist dass die Geschwindigkeit Null gegenüber anderen Geschwindigkeiten nicht ausgezeichnet ist. Abbremsen mit einem Zeeman-Tuner erlaubt zwar die Atome auf identische Geschwindigkeiten zu bringen, d.h. die Dopplerverbreiterung zu verringern, aber die mittlere Geschwindigkeit ist schwer zu kontrollieren.

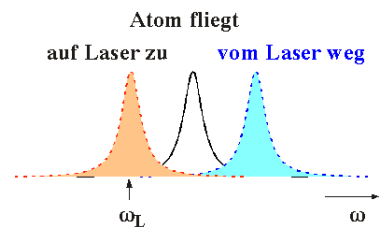


Abbildung 5.16: Resonanz von Dopplerverschobenen Atomen.

Eine Alternative ergibt sich wenn man den Effekt der Dopplerverschiebung betrachtet: fliegt ein Atom auf den Laser zu so ist seine Resonanzkurve rotverschoben, d.h. zu niedrigeren Frequenzen. Fliegt es vom Laser weg, so ist es umgekehrt blau verschoben. Verwendet man einen Laser, der gegenüber der Resonanzkurve der unbewegten Atome zu längeren Wellenlängen verschoben ist, so wird er somit bevorzugt von Atomen absorbiert, die sich auf den Laser zu bewegen; diese Atome werden somit bevorzugt abgebremst.

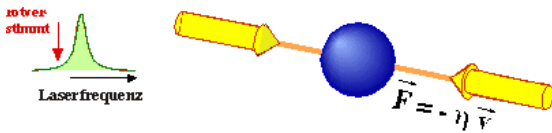


Abbildung 5.17: Atom in gegenläufigen Laserstrahlen.

Um auch Atome abzubremsen, die sich in die entgegengesetzte Richtung bewegen verwendet man zwei gegenläufige Strahlen, welche gegenüber der atomaren Resonanzfrequenz rot verstimmt sind.

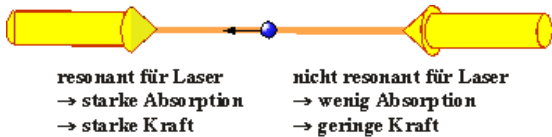


Abbildung 5.18: Lichtkräfte in gegenläufigen Laserstrahlen.

Nur diejenigen Atome, welche sich im Bezugssystem des Lasers in Ruhe befinden, sehen beide Laserstrahlen bei der gleichen Frequenz. Dadurch absorbieren sie gleich viele Photonen aus den beiden Strahlen und werden durch die Lichtkraft in erster Näherung nicht beeinflusst.

Bewegt sich ein Atom gegen einen der beiden Laser, so wird es für diesen Laser durch den Dopplereffekt näher zur Resonanz gestimmt, für den kopropagierenden Laser weiter von der Resonanz weg. Somit absorbiert es mehr Photonen aus dem gegenläufigen Laser als aus dem mitlaufenden und wird dadurch abgebremst. Da die Kraft gegen die Geschwindigkeit wirkt und, wie wir noch sehen werden, über einen gewissen Bereich proportional zur Geschwindigkeit ist, wirken die Laser auf die atomare Bewegung wie ein sehr viskoses Medium. Diese Anordnung wird deshalb allgemein als optische Molasse bezeichnet.

Werden zwei gegenläufige Laserstrahlen verwendet so existiert die Bremswirkung zunächst nur für die Geschwindigkeitskomponente entlang der Laserstrahlrichtung.

Das Prinzip lässt sich jedoch relativ einfach auf drei Dimensionen erweitern: Es werden in die

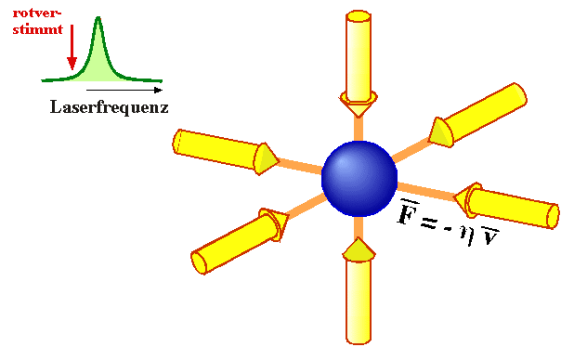


Abbildung 5.19: Optische Molasse in 3D.

sem Fall drei Paare von gegenläufigen Laserstrahlen verwendet, welche sich in einer Region überschneiden. In dieser Region werden alle drei Geschwindigkeitskomponenten der Atome verlangsamt.

5.2.3 Reibungskraft

Für die Berechnung der Kraft (in einer Dimension) nehmen wir an, dass wir die beiden gegenläufigen Strahlen unabhängig betrachten dürfen. Dann sind die beiden Kräfte

$$F_{\pm} = \pm \hbar k r_{\pm},$$

wobei die Raten

$$r_{\pm} = \frac{\Gamma_1 \omega_x^2}{\Gamma_1^2 + 4(\Delta\omega_0 \pm kv)^2}$$

sich auf die aus den beiden Strahlen gestreuten Photonen beziehen. Die Gleichung gilt für niedrige Intensitäten. Wir können die beiden Beiträge zusammenziehen und erhalten die Gesamtkraft

$$F_{om} = \hbar k \Gamma_1 \omega_x^2 \left\{ \frac{1}{\Gamma_1^2 + 4(\Delta\omega_0 + kv)^2} - \frac{1}{\Gamma_1^2 + 4(\Delta\omega_0 - kv)^2} \right\}.$$

Diese Funktion besitzt offenbar ein Maximum wenn $\Delta\omega_0 = -kv$ und ein negatives Maximum bei $\Delta\omega_0 = kv$.

Die Figur stellt die Kraft als Funktion der atomaren Geschwindigkeit dar. Es sind Daten für zwei

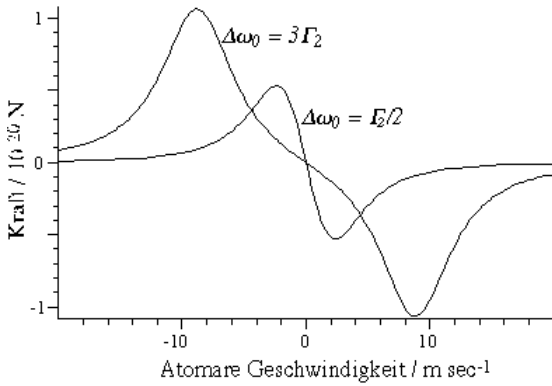


Abbildung 5.20: Reibungskraft als Funktion der Geschwindigkeit.

Laserverstimmungen (beide zu größeren Wellenlängen, d.h. rotverstimmt) und eine Rabi Frequenz von $\omega_x = 3 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$ dar. Die Kraft verschwindet für ruhende wie auch für sehr schnelle Atome. Sie erreicht ihr Maximum dann, wenn einer der beiden Strahlen in Resonanz mit dem Atom gelangt.

Die Zone zwischen den beiden Maxima wird als Einfangbereich bezeichnet: Atome in diesem Geschwindigkeitsbereich werden effizient abgebremst. Die Breite dieser Region ist

$$|v_{\text{capture}}| \leq \left| \frac{\Delta\omega_0}{k} \right|.$$

Offenbar nimmt die Breite dieses Bereiches zu wenn die Verstimmung (zu rot) zunimmt. Der Betrag der maximalen Kraft wird jedoch für große Verstimmungen maximal, wenn die Atome nur mit einem Laserstrahl in Wechselwirkung sind.

5.2.4 Viskosität

Innerhalb des Einfangbereichs ist die Kraft in erster Näherung proportional zur Geschwindigkeit der Atome,

$$F_{om} \approx -\eta v.$$

Dies entspricht formal dem Fall der Stokesschen Reibung, wobei η die Viskosität darstellt. Wir

können sie aus der obigen Gleichung bestimmen indem wir die erste Ableitung

$$\eta = -\left. \frac{\partial F_{om}}{\partial v} \right|_{v=0}$$

bestimmen. Dazu führen wir die Rate r_0 ein, mit der ein Atom in Ruhe Photonen aus einen der beiden Laserstrahlen absorbiert

$$r_0 = \frac{\Gamma_1 \omega_x^2}{\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2}.$$

Damit erhalten wir für die Viskosität

$$\eta = 16 r_0 \hbar k^2 \frac{\Delta\omega_0}{\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2}.$$

Sie hat offenbar eine dispersionsartige Abhängigkeit von der Laserverstimmung (bezüglich dem ruhenden Atom) und ändert das Vorzeichen wenn die Laserverstimmung durch den Nullpunkt geht.

5.2.5 Geschwindigkeitsdiffusion: Phänomenologie

Im Rahmen des einfachen Modells, das wir bisher benutzt haben, sollte die Geschwindigkeit des Atoms immer abnehmen und exponentiell gegen Null fallen. Damit sollte es möglich sein, beliebig niedrige Temperaturen zu erreichen.

In Wirklichkeit wirken eine Reihe von Mechanismen diesem Kühlprozess entgegen, die wir bisher nicht berücksichtigt haben, und führen zu einer endlichen Grenztemperatur. Dazu gehören zum einen technische Probleme, wie z.B. Laserfrequenzrauschen. Diese können prinzipiell weitgehend unterdrückt werden.

Es gibt aber auch fundamentale Grenzen. Eine liegt in der diskreten, also quantenmechanischen Natur des Strahlungsfeldes und wird als Geschwindigkeitsdiffusion bezeichnet.

Wir hatten oben erklärt, dass die spontane Emission keinen Effekt hat auf die mittlere Geschwindigkeit. Sie führt jedoch zu einer Verbreiterung der Geschwindigkeitsverteilung. Man kann dies

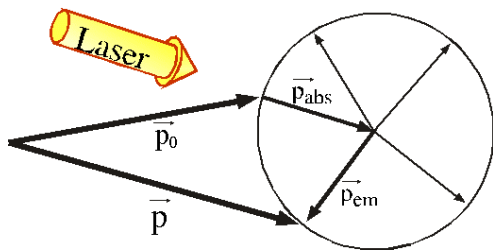


Abbildung 5.21: Impulsübertragung bei Absorption und Emission.

an einem einfachen Photonenbild sehen: wir betrachten ein Ensemble von Atomen mit Impuls \vec{p}_0 . Nach der Absorption eines Photons aus dem Laser beträgt der Impuls $\vec{p}_0 + \vec{p}_{abs}$. Das spontan emittierte Photon kann in jede Richtung abgestrahlt werden. Es bringt den gesamten Impuls deshalb irgendwo auf eine Kugelschale mit Zentrum $\vec{p}_0 + \vec{p}_{abs}$ und Radius \vec{p}_{em} . Eine Reihe von spontanen Emissionsprozessen entspricht deshalb einer Brown'schen Bewegung im Geschwindigkeitsraum.

Durch einen Absorptions-Emissionszyklus ändert der atomare Impuls um

$$\vec{p} - \vec{p}_0 = \hbar \vec{k}_L - \hbar \vec{k}_{se},$$

wobei der Wellenvektor \vec{k}_L den Laserstrahl bezeichnet und \vec{k}_{se} das spontan emittierte Photon. Das anfänglich homogene Ensemble besitzt somit nach einem Zyklus eine Verteilung von Geschwindigkeiten. Damit ändert auch die mittlere kinetische Energie. Für einen Zyklus ist die Änderung

$$\begin{aligned} \Delta E_t &= \frac{1}{2m} \Delta \langle p \rangle^2 = \frac{1}{2m} (\langle (\vec{p}_0 + \hbar \vec{k}_L - \hbar \vec{k}_{se})^2 \rangle - \langle p_0^2 \rangle) \\ &= \frac{1}{2m} \hbar [2 \langle \vec{p}_0 \vec{k}_L \rangle - 2 \langle \vec{p}_0 \vec{k}_{se} \rangle + \hbar \vec{k}_L^2 + \hbar \vec{k}_{se}^2 - 2 \hbar \vec{k}_L \vec{k}_{se}]. \end{aligned}$$

Da die drei Vektoren \vec{p}_0 , \vec{k}_L , und \vec{k}_{se} nicht miteinander korreliert sind verschwinden sämtliche Kreuzterme im Mittel. Die restlichen Terme ergeben

$$\Delta E_t = \frac{(\hbar k)^2}{m}.$$

Für jedes gestreute Photon wächst die kinetische Energie somit um den doppelten Betrag des Rückstoßeffektes, da sowohl die Absorption wie auch die Emission dazu beitragen.

5.2.6 Temperatur des Ensembles

Da die Anzahl der Absorptions-Emissionszyklen sehr groß ist können wir die Bewegungsgleichungen für den kontinuierlichen Grenzfall herleiten. Wenn ein Atom in einer eindimensionalen optischen Molasse Photonen mit der Summe der Raten für die einzelnen Strahlen streut erhalten wir

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} = \frac{r_+ + r_-}{m} (\hbar k)^2,$$

d.h. eine Erhöhung der kinetischen Energie und damit der Temperatur der Atome. Dies ist der wichtigste Beitrag der die Temperatur der Atome limitiert.

Sind die Geschwindigkeiten der Atome eines Ensembles thermisch verteilt, so gilt für die mittlere kinetische Energie pro Freiheitsgrad

$$E_t = \frac{k_B T}{2} = \frac{m}{2} \langle v^2 \rangle.$$

Diese Beziehung kann man umgekehrt verwenden, um die Translationstemperatur eines Gases zu definieren

$$T_t = 2 \frac{E_t}{k_B} = \frac{m}{k_B} \langle v^2 \rangle.$$

Für die Herleitung dieser Beziehung hatten wir eine Boltzmann-Verteilung angenommen. Die Beziehung wird allerdings auch verwendet wenn dies nicht der Fall ist.

Die viskose Reibung ändert die Geschwindigkeit gemäß

$$F = -\eta v = m \frac{dv}{dt}.$$

Somit ist

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{\eta}{m} v.$$

Daraus können wir den Effekt der Reibung auf die Temperatur des Ensembles berechnen:

$$\frac{dT_t}{dt} = \frac{m}{k_B} 2v \frac{dv}{dt} = -\frac{2\eta}{k_B} v^2.$$

Diesen Effekt müssen wir zum Aufheizeffekt auf Grund der spontanen Emission addieren. Damit wird die zeitliche Änderung der translatorischen Temperatur

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_t}{\partial t} &= \frac{m}{k_B} \frac{\partial \langle v^2 \rangle}{\partial t} = \frac{m}{k_B} \frac{2}{m} \frac{\partial E_t}{\partial t} = \\ &= \frac{2}{k_B} \left\{ \frac{r_+ + r_-}{m} (\hbar k)^2 - \eta v^2 \right\}. \end{aligned}$$

Der erste Beitrag stammt von der Geschwindigkeitsdiffusion, der zweite von der optischen Molasse

5.2.7 Dopplerlimite

Die Geschwindigkeitsdiffusion ist erst bei relativ niedrigen Temperaturen ein wesentlicher Beitrag. Die Dopplerverbreiterung ist dann klein im Vergleich zur homogenen Linienbreite, so dass wir die gesamte Streurate gleich der Streurrate bei der Geschwindigkeit Null setzen können,

$$r_+ + r_- = 2r_0.$$

Damit erhalten wir

$$\frac{\partial T_t}{\partial t} = \frac{4r_0}{k_B m} (\hbar k)^2 - 16 r_0 \hbar k^2 \frac{\Delta\omega_0}{\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2} \frac{2}{m} T_t.$$

Der erste Term auf der rechten Seite ist unabhängig von der Temperatur und stellt die Aufheizung durch die Geschwindigkeitsdiffusion dar. Der zweite Term, der proportional ist zur Temperatur, ist der Kühleffekt der optischen Molasse. Aufgrund der unterschiedlichen Temperaturabhängigkeit erhalten wir eine Gleichgewichtstemperatur, bei der die beiden Beiträge sich gegenseitig aufheben:

$$\frac{\partial T_t}{\partial t} = 0 \rightarrow$$

$$(\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2) \hbar = 8\Delta\omega_0 k_B T_t.$$

Auflösen nach der Temperatur ergibt

$$T_t = \hbar \frac{\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2}{8\Delta\omega_0 k_B}.$$

Die Gleichgewichtstemperatur hängt somit ab von der Laserfrequenz, aber nicht von der Laserintensität. Dies gilt allerdings nur für einen bestimmten Bereich: Die Intensität muss klein sein gegenüber der Sättigungsintensität, und sie muss groß genug sein, dass Effekte, die unabhängig sind von der Intensität (z.B. Stöße mit Hintergrundatomen) vernachlässigbar bleiben.

Die niedrigste Temperatur wird dann erreicht, wenn die Laserverstimmung einer halben homogenen Linienbreite entspricht, d.h. für $\Delta\omega_0 = \Gamma_2 = \Gamma_1/2$. Dann erhalten wir

$$T_D = \hbar \frac{\Gamma_1}{2k_B},$$

was als Dopplerlimite bekannt ist. Für die Na D-Linien entspricht diese

$$\begin{aligned} T_D(Na) &= \frac{10^{-34} J_s}{16 ns \cdot 2 \cdot 1.4 \cdot 10^{-34} JK^{-1}} \\ &= \frac{1 K}{4500} = 240 \mu K. \end{aligned}$$

Das bisher Gesagte gilt exakt nur für Kühlung in einer Dimension, in zwei oder drei Dimensionen ändert sich die Gleichgewichtstemperatur um Faktoren in der Nähe von eins.

5.2.8 Historische Entwicklung

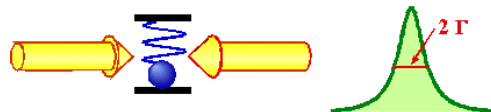


Abbildung 5.22: Molasse in 1D.

Die Möglichkeit, Laser für Kühlzwecke einzusetzen, wurde zuerst von Hänsch und Schawlow [T.W. Hänsch and A.L. Schawlow, 'Cooling of gases by laser radiation', Optics Commun. 13, 68-69 (1975).] vorgeschlagen für die Kühlung

von atomaren Gasen. Unabhängig und praktisch gleichzeitig schlugen auch Wineland und Dehmelt [D. Wineland and H. Dehmelt, 'Proposed $10^{-14} \Delta\nu/\nu$ laser fluorescence spectroscopy on Ti^+ monoion oscillator III', Bull. Am. Phys. Soc. 20, 637-637 (1975).] vor, Laser zur Kühlung von Ionen in elektromagnetischen Fallen zu verwenden. Erste Resultate wurden 1978 publiziert von Dehmelts und Winelands Gruppe [W. Neuhauser, M. Hohenstatt, P. Toschek, and H. Dehmelt, 'Optical-sideband cooling of visible atom cloud confined in parabolic well', Phys. Rev. Lett. 41, 233-236 (1978); D.J. Wineland, R.E. Drullinger, and F.L. Walls, 'Radiation-pressure cooling of bound resonant absorbers', Phys. Rev. Lett. 40, 1639-1642 (1978).]. Erste Resultate zur Verzögerung von Atomen in einem Atomstrahl wurden von Balykin und Mitarbeitern 1980 publiziert [V.I. Balykin, V.S. Letokhov, and V.I. Mishin, 'Cooling of sodium atoms by resonant laser emission', Sov. Phys. JETP 51, 692-696 (1980); V.I. Balykin, V.S. Letokhov, and V.I. Mishin, 'Observation of the cooling of free sodium atoms in a resonance laser field with scanning frequency', JETP letters 29, 650-654 (1980).], wobei sie einen gerichteten Laserstrahl verwendeten. Phillips und Metcalf erreichte den gleichen Effekt mit einer etwas anderen Technik [W.D. Phillips, J.V. Prodan, and H.J. Metcalf, 'Laser cooling and electromagnetic trapping of neutral atoms', J. Opt. Soc. Am. B 2, 1751-1767 (1985).]. 1985 zeigte die russische Gruppe auch transversales Kühlen (senkrecht zum Atomstrahl) in einer und zwei Dimensionen [V. Balykin, V.S. Letokhov, V.G. Minogin, Y.V. Rozhdestvensky, and A.I. Sidorov, 'Radiative Collimation of atomic beams through two-dimensional cooling of atoms by laser-radiation pressure', J. Opt. Soc. Am. B 2, 1776-1783 (1985).]. Im gleichen Jahr gelang Steven Chu und Mitarbeitern bei AT&T Bell Labs auch Kühlung in 3 Dimensionen [S. Chu, L. Hollberg, J.E. Bjorkholm, A. Cable, and A. Ashkin, 'Three-dimensional viscous confinement and cooling of atoms by resonance radiation pressure', Phys. Rev. Lett. 55, 48-51 (1985).]. Sie stellten bereits in diesen Experimenten fest, dass die Translationstemperatur im Bereich der Doppler-

limite lag.

Wenig später, nach einer Verbesserung der Messung, wurden auch Temperaturen unterhalb der Dopplerlimite gefunden: $40 \mu\text{K}$ in Natrium [P.D. Lett, R.N. Watts, C.I. Westbrook, W.D. Phillips, P.L. Gould, and H.J. Metcalf, 'Observation of atoms laser cooled below the Doppler limit', Phys. Rev. Lett. 61, 169-172 (1988).] und $2.5 \mu\text{K}$ in Cäsium [C. Salomon, J. Dalibard, W. Phillips, A. Clarion, and S. Guellati, 'Laser cooling of cesium atoms below $3\mu\text{K}$ ', Europhys. Lett. 12, 683-688 (1990).]. Beide Messungen entsprechen einem mittleren atomaren Impuls von lediglich 3.5 Photonenimpulsen. Daraus konnte geschlossen werden, dass es weitere Mechanismen gab, welche effizienter waren als die bisher diskutierte Dopplerkühlung. Die Theoretiker fanden bald darauf solche Mechanismen [J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, 'Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models', J. Opt. Soc. Am. B 6, 2023-2045 (1989); P.J. Ungar, D.S. Weiss, E. Riis, and S. Chu, 'Optical molasses and multilevel atoms: theory', J. Opt. Soc. Am. B 6, 2023-2071 (1989); S.Q. Shang, B. Sheehy, H. Metcalf, P.v. Straten, and G. Nienhuis, 'Velocity-selective resonances and sub-Doppler laser cooling', Phys. Rev. Lett. 67, 1094-1097 (1991).]. Diese Mechanismen können im Rahmen des Zweiniveau-Atommodells nicht verstanden werden, sondern verwenden eine detailliertere Beschreibung der atomaren Niveaustuktur.

Diese Entwicklungen wurden 1997 mit dem Nobelpreis für drei der am stärksten beteiligten Forscher belohnt.

5.3 Fallen

5.3.1 Motivation und Prinzip

Für viele Anwendungen ist es nicht ausreichend, Atome zu kühlen, man möchte sie auch an einer Stelle im Raum festhalten. Dies setzt voraus, dass die Kraft, welche auf die Atome wirkt, nicht nur von der Geschwindigkeit, sondern auch

von der Position der Atome abhängt. Man kann dafür einen Mechanismus verwenden, der bereits für die Kühlung der Atome in einem Atomstrahl verwendet wurde: Die Verstimmung der Energiezustände mit Hilfe eines Magnetfeldes.

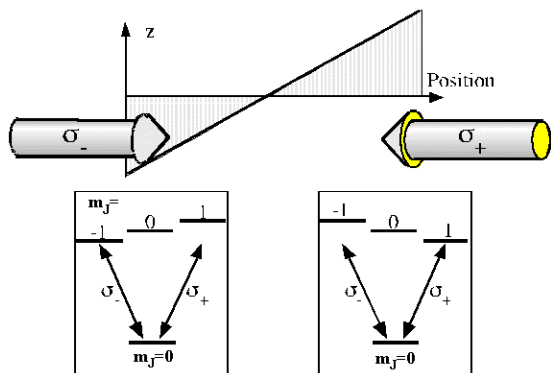


Abbildung 5.23: Verstimmung der Energien durch einen Magnetfeldgradienten.

In einer Dimension benötigt man lediglich ein Magnetfeld dessen Stärke linear mit der Distanz variiert, sowie zwei gegenläufige Laser mit entgegengesetzt zirkular polarisiertem Licht, welche beide rot verstimmt sind. Das Magnetfeld verschiebt die Zustände derart, dass für Atome, welche aus dem Zentrum herausdiffundieren die Wechselwirkung mit demjenigen Laserstrahl dominiert, welcher das Atom zurück ins Zentrum treibt.

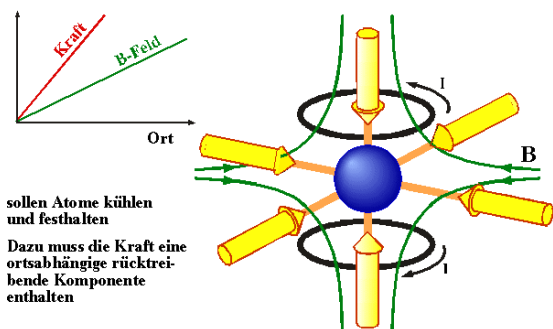


Abbildung 5.24: Magnetooptische Falle.

Um den gleichen Effekt in drei Dimensionen zu erzielen kann man drei gegenläufige Laserstrahlen in jeweils zueinander orthogonalen Richtun-

gen überlagern. Das zugehörige Magnetfeld kann z.B. von zwei Spulen in anti-Helmholtz Anordnung erzeugt werden. Diese erzeugen zwei entgegengesetzt ausgerichtete Magnetfelder, welche im Zentrum der Falle einen feldfreien Punkt ergeben, während seine Stärke nach außen näherungsweise linear zunimmt. In z-Richtung ist die Variation dabei doppelt so groß wie entlang der x- und y-Achsen.

5.3.2 Magnetooptische Fallen

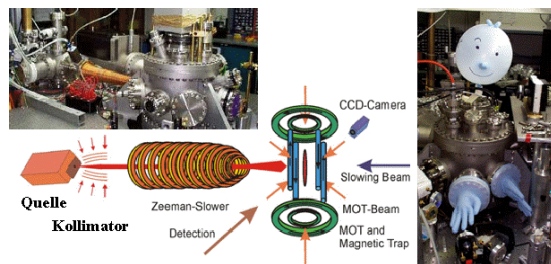


Abbildung 5.25: Aufbau einer magnetooptischen Falle mit Atomstrahl und Zeeman-tuner.

Diese Fallen können auf unterschiedliche Weise gefüllt werden. Man kann z.B. die Atome aus dem Hintergrundgas einfangen oder man füllt sie mit Atomen aus einem Atomstrahl. In diesem Fall müssen die Atome des Strahls zuerst abgebremst werden, damit sie mit genügender Effizienz eingefangen werden können.

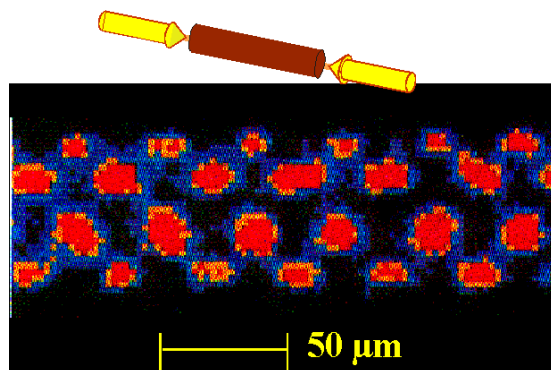


Abbildung 5.26: Kristalline Anordnung von gekühlten Ionen.

Für atomare Ionen gibt es außerdem die Möglichkeit, elektromagnetische Felder für das Einfangen zu verwenden. In diesem Fall ist die Wechselwirkung zwischen den Atomen natürlich wesentlich stärker als im Falle der neutralen Atome. Dies kann z.B. dazu führen, dass sie sich in einer stabilen kristallinen Anordnung ordnen.

5.3.3 Anwendungen: Präzisionsspektroskopie

Spektroskopische Messungen können am genauesten durchgeführt werden, wenn die untersuchten Objekte sich in Ruhe befinden und alle Wechselwirkungen mit der Umgebung unter experimenteller Kontrolle sind. Atome in einer Falle nähern diesen Zustand recht gut an. Die Laserstrahlen, welche sie im Zentrum festhalten, können auch kurzfristig ausgeschaltet werden, so dass auch die Wechselwirkung mit dem Licht entfällt. Natürlich fallen die Atome dann unter dem Einfluss der Schwerkraft herunter.

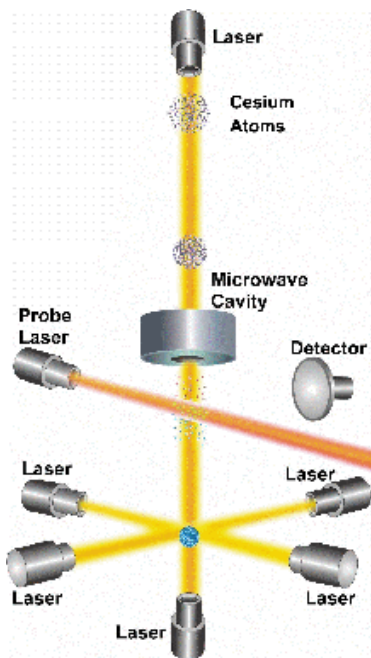


Abbildung 5.27: Atomarer Springbrunnen.

Möglichst lange wechselwirkungsfreie Zeiten erreicht man, wenn man die Atome zunächst "hinauf schießt" und sie anschließend wieder her-

unterfallen. Dieses Experiment wird als atomarer Springbrunnen bezeichnet. Auf diese Weise konnten sehr präzise Messungen durchgeführt werden.

Um die Auflösung zu optimieren verwendet man das sogenannte Ramsey-Experiment. Dabei werden die Atome nicht kontinuierlich mit einem Laser, resp. einer Mikrowelle bestrahlt, sondern mit zwei zeitlich getrennten Pulsen. Deren Effekt kann man am besten mit Hilfe des Pseudo Spin-1/2 Modells betrachten: Dieser ist zu Beginn des Experimentes entlang der z-Achse orientiert. Der erste Puls dreht ihn um 90 Grad, zur x-Achse. In der darauf folgenden freien Präzessionsperiode dreht er sich um die z-Achse:

$$\vec{S}(t) = S_x \cos(\Delta\omega_0 t) + S_y \sin(\Delta\omega_0 t).$$

Der zweite Puls am Ende der freien Evolution dreht das System wieder um 90 Grad, in umgekehrter Richtung. Somit wird der Zustand nach diesem Puls

$$\vec{S}(t+) = S_z \cos(\Delta\omega_0 t) + S_y \sin(\Delta\omega_0 t).$$

Misst man z.B. die Population eines der beiden Zustände, so zeigt diese eine Variation mit

$$p \propto \cos(\Delta\omega_0 t).$$

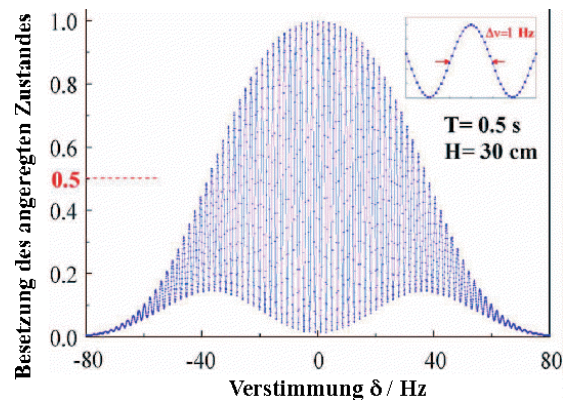


Abbildung 5.28: Ramsey-Interferenzen eines atomaren Springbrunnens.

In der Figur ist ein solches Beispiel dargestellt. Hier wurde eine Springhöhe von 30 cm verwendet, was einen Pulsabstand von 0.5 s ergab.

Die meisten dieser Messungen verfolgen die Bestimmung fundamentaler Konstanten (z.B. Rydberg, Feinstruktur) oder die Untersuchung fundamentaler Wechselwirkungen (z.B. Test der QED, Paritätsverletzung, Symmetrie Materie-Antimaterie). Es gibt aber auch einige Arbeiten, welche wesentliche Konsequenzen außerhalb der Physik haben könnten. So kann man mit kalten Atomen die Schwerkraft sehr viel genauer bestimmen als mit anderen Methoden. Dies erlaubt Anwendungen in der Geologie oder der Erschließung von Bodenschätzen. Außerdem basieren die gegenwärtig präzisesten Zeitstandards (Cs-Atomuhren) auf atomaren Springbrunnen. Damit werden Unsicherheiten von der Größenordnung 10^{-15} erreicht.

5.3.4 Bose-Einstein Kondensation

Aufgrund eines Fehlers in einer Vorlesung über die Plancksche Strahlungsformel realisierte Satyendra Nath Bose (1894-1974), dass nicht-unterscheidbare Teilchen mit ganzzahligen Spin (=Bosonen) einer anderen Statistik gehorchen als unterscheidbare Teilchen. Er versuchte, dieses Resultat zu publizieren, aber die Herausgeber der Zeitschrift lehnten die Arbeit ab. Darauf sandte er sie zu Einstein. Dieser übersetzte sie auf Deutsch und schickte sie zusammen mit einer eigenen Arbeit zu diesem Thema zur "Zeitschrift für Physik".

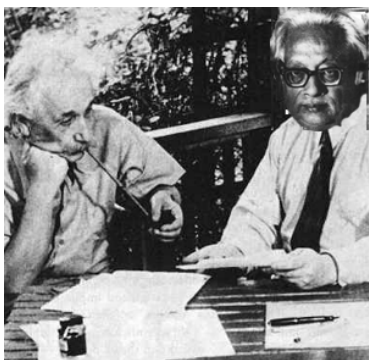


Abbildung 5.29: Bose und Einstein.

Gemäß der Bose-Einstein Statistik ist die Wahrscheinlichkeit für die Besetzung eines Zustandes

$|i\rangle$ gegeben durch

$$p_i = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_i - \mu}{k_B T}} - 1}$$

Hier stellt ϵ_i die Energie des Zustandes dar und μ das chemische Potenzial.

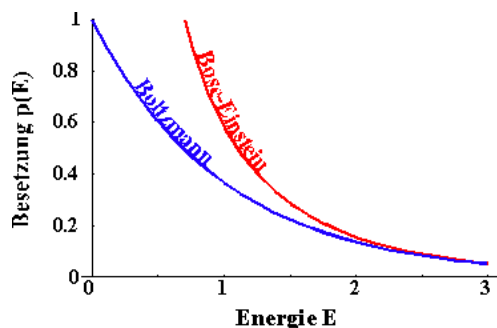


Abbildung 5.30: BE-Statistik vs. Boltzmann Statistik (für unterscheidbare Teilchen).

Für tiefe Temperaturen divergiert diese Wahrscheinlichkeit, d.h. alle Teilchen besetzen den gleichen Zustand und das gesamte System wird durch die gleiche Zustandsfunktion beschrieben. Dies wird als Bose-Einstein Kondensation bezeichnet.

Ein bekanntes Beispiel für dieses Verhalten ist die Supraleitung. Schwach wechselwirkende Atome können ebenfalls einen entsprechenden Phasenübergang durchlaufen, sofern die Temperatur genügend tief (nK) und die Dichte genügend hoch ist.

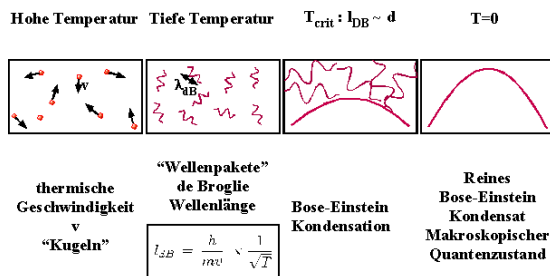


Abbildung 5.31: Wellenbild für Atome bei verschiedenen Temperaturen.

Eine qualitative Vorstellung des Prozesses ist in der Figur 5.31 dargestellt: Bei hohen Temperaturen kann man Atome in guter Näherung als harte Kugeln betrachten. Mit abnehmender Temperatur werden die Welleneigenschaften relevant. Die Kohärenzlänge dieser Wellenpakete ist von der Größenordnung

$$l_{dB} = \frac{h}{mv} \propto \frac{1}{\sqrt{T}}.$$

Die Größe der Wellenpakete nimmt somit mit abnehmender Temperatur zu, so dass sie ab einer gewissen Kombination aus Temperatur und Dichte überlappen. Quantitativ bedeutet dies, dass die Kohärenzlänge ungefähr gleich dem mittleren Abstand zwischen den Atomen wird:

$$T_{crit} : l_{dB} \approx d.$$

Dies ist die kritische Temperatur T_{crit} , bei welcher der Phasenübergang stattfindet. Bei der Temperatur $T = 0$ befinden sich alle Teilchen im Grundzustand und werden durch eine einheitliche Zustandsfunktion beschrieben.

5.3.5 Laserkühlung und BEC

Da die kritische Temperatur sehr niedrig ist kann man sie nur mit Hilfe von Laserkühlung erreichen.

Dies wurde auch bald nach der Entwicklung der Laserkühlung versucht und in den 90er Jahren wurden die erreichten Dichten kontinuierlich gesteigert. Da die Streuung eines einzelnen Photons schon eine zu große Störung ist mussten die kalten Gase in "dunklen", rein magnetischen Fallen gespeichert und dort weiter gekühlt werden.

1995 gelang es mehreren Arbeitsgruppen, den Effekt nachzuweisen. Man bildet dafür die Geschwindigkeitsverteilung des atomaren Ensembles ab, nachdem man die Falle ausgeschaltet hat. Die Verteilung ist deutlich anders für ein BEC als für ein thermisches Ensemble. In der Figur stellt der erste Teil ein thermisches Ensemble dar. Wird es weiter gekühlt, so sieht man

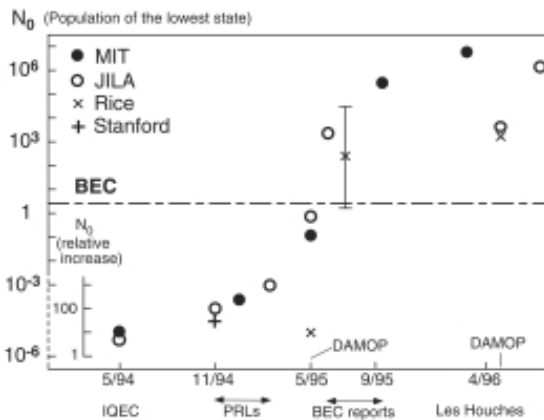


Abbildung 5.32: Fortschritte bei der Realisierung der BEC in atomaren Gasen.

einen schmalen Teil, welcher das BEC darstellt, darunter einen breiten Teil der zum thermischen Anteil gehört. Ganz rechts ist der thermische Anteil praktisch verschwunden.

5.3.6 BECs als kohärente Quellen

Weil BECs sich in einem quantenmechanischen Zustand befinden verhalten sie sich qualitativ anders als klassische Systeme. Die Kohärenz des Zustandes kann auf unterschiedliche Weise genutzt werden.

Koppelt man aus einem solchen BEC Atome aus, so erhält man ein Quelle von Atomen in identischem Quantenzustand. Dies wird deshalb als Atom-Laser bezeichnet.

Man kann BECs auch verwenden, um Materiewellen zu verstärken. Dazu muss das Ensemble durch einen Laserstrahl "aktiviert" werden. Der Verstärker kann somit kontrolliert werden.

In der Figur ist die Verstärkung einer kleinen atomaren Wolke durch ein BEC dargestellt. In beiden Teilfiguren wurde eine Wolke mit einer gegebenen Anzahl von Atomen durch ein BEC geschickt. In der rechten Hälfte wurde zusätzlich ein Laserfeld angelegt, welches die Verstärkung des BECs aktivierte. Man sieht dass in diesem

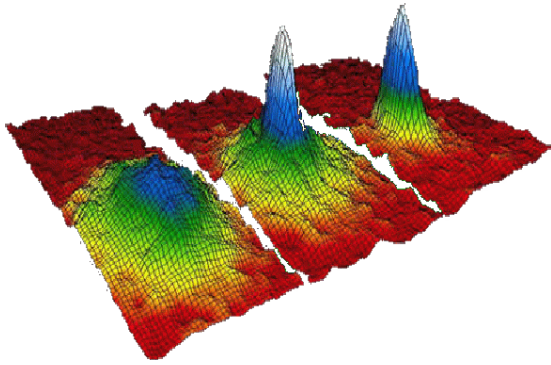


Abbildung 5.33: Bose-Einstein Kondensation: Dargestellt ist die gemessene Impulsverteilung für ein thermisches Ensemble (links), einen Zustand, der einen thermischen und einen BEC-Anteil enthält (mitte) und einen praktisch reinen kondensierten Zustand (rechts).

Fall die Zahl der Atome um etwa 2 Größenordnungen erhöht wurde.

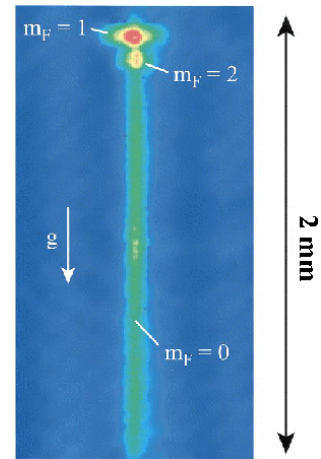


Abbildung 5.34: Kohärenter Strahl von Atomen.

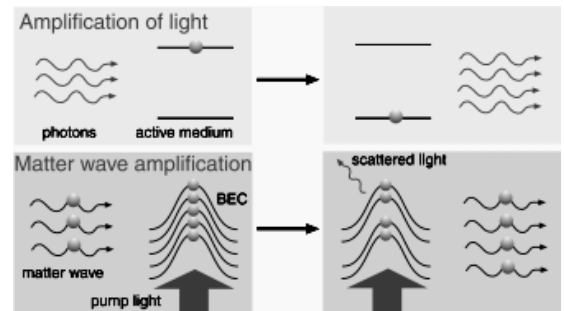


Abbildung 5.35: Verstärkung von Materiewellen in einem BEC. Der Laser schaltet die Verstärkung ein.

5.3.7 Interferenzeffekte

Die Kohärenz eines BECs lässt sich am besten über Interferenzeffekte nachweisen.

In der Figur ist die Dichte einer Überlagerung von 2 BECs dargestellt. Diese erhält man am einfachsten indem man ein BEC mit Hilfe eines Lasers in 2 Teile teilt und diese anschließend zur Überlagerung bringt. Die deutlich sichtbaren Interferenzstreifen sind der klarste Beweis dafür, dass sich die BECs als kohärente Systeme verhalten.

Wird ein BEC rotiert, so verhält es sich ebenfalls anders als ein klassisches System. Die Quantisierung des Drehimpulses führt dazu, dass sich "Flusslinien" ausbilden, analog zu den Flusslinien in TypII Supraleitern.

5.4 Konservative Kräfte

5.4.1 Optisches Potential

Bisher haben wir die Möglichkeit diskutiert, die sogenannte spontane Streukraft für das Abbremsen und Einfangen von Atomen und Ionen zu nutzen. Dabei wird im Wesentlichen Entropie umverteilt: das atomare Ensemble wird in einen höher geordneten Zustand gebracht, auf Kosten der Photonen, welche gestreut werden.

In diesem Kapitel diskutieren wir einen weiteren Aspekt der Wechselwirkung zwischen Licht und Materie, welcher ebenfalls eine Reihe von Anwendungen besitzt. Dabei muss kein Licht absorbiert (und emittiert) werden, sondern es spielt

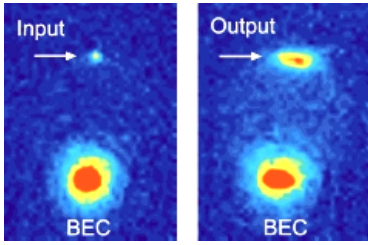


Abbildung 5.36: Verstärkung eines atomaren Ensembles durch ein BEC.

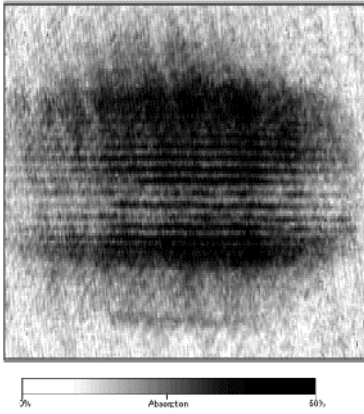


Abbildung 5.37: Interferenz 2er BECs.

lediglich die Wechselwirkung zwischen dem elektrischen Feld des Lasers und dem elektrischen Dipolmoment der Atome eine Rolle.

Wir diskutieren die Situation halbklassisch. Der Wechselwirkungsoperator wird dann abgeleitet aus der klassischen Energie eines elektrischen Dipols in einem äußeren Feld

$$E_{pot} = -\vec{d} \cdot \vec{E}$$

Da Atome kein permanentes Dipolmoment aufweisen muss es sich um ein induziertes Dipolmoment handeln. Mit Hilfe der Polarisierbarkeit α wird die Energie des Dipols

$$E_{port} = -\frac{\alpha}{2} E^2$$

Die Polarisierbarkeit kann aus der Theorie der Zweiniveaumatome hergeleitet werden. Wir benötigen hier nur die Komponente, welche in Phase mit der äußeren Anregung ist.

$$s_{x\infty} = \frac{4\Delta\omega_0\omega_x}{\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2 + 2\omega_x^2}$$

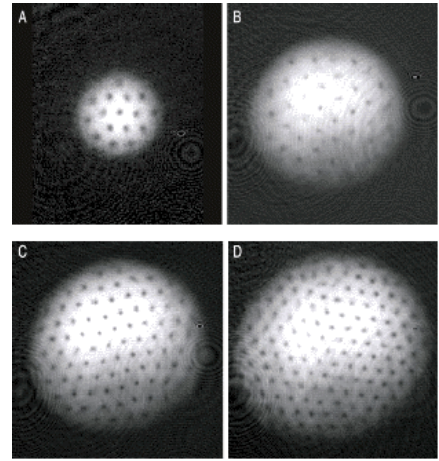


Abbildung 5.38: "Flusslinien" in einem rotierenden BEC.

Damit wird

$$E_{pot} = -\frac{\mu_E E}{2} \frac{4\Delta\omega_0\omega_x}{\Gamma_1^2 + 4\Delta\omega_0^2 + 2\omega_x^2}$$

Somit kann die potentielle Energie des Atoms positiv oder negativ sein, je nach Verstimmung $\Delta\omega_0$ des Laserfeldes.

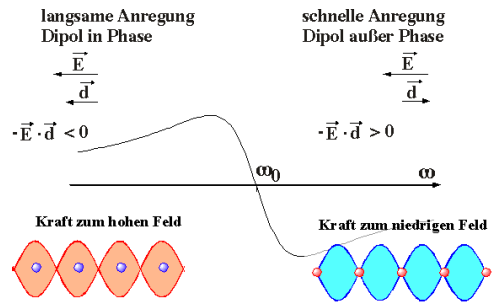


Abbildung 5.39: Phasenlage des Dipols als Funktion der Laserfrequenz.

Diesen Effekt können wir auch klassisch verstehen: für einen rotverstimmtten Laser ($\Delta\omega_0 > 0$) ist das induzierte Moment in Phase mit dem treibenden Feld, so dass das Skalarprodukt von Feld und Dipol positiv wird. In diesem Fall kann das Atom seine Energie erniedrigen indem es in ein möglichst starkes Feld geht. Bei einem blauverstimmtten Laser hinkt die Phase des Dipols um 180 Grad hinter dem Feld her, das Skalar-

produkt wird negativ, und das Atom sucht nun ein möglichst niedriges Feld.

Wenn wir die Dipolkraft möglichst unabhängig von der spontanen Streukraft untersuchen wollen ist es nützlich, die Laserverstimmung möglichst groß zu wählen. Unter dieser Bedingung wird der Nenner im obigen Ausdruck dominiert durch den Verstimmungsbeitrag und wir erhalten die vereinfachte Form

$$E_{pot} = -\frac{\mu_E E}{2} \frac{\omega_x}{\Delta\omega_0}.$$

Wenn wir berücksichtigen, dass $\omega_x = \mu_e E$, wird

$$E_{pot} = -\frac{\mu_E^2 E^2}{4} \frac{1}{\Delta\omega_0}.$$

5.4.2 Eigenschaften der Dipolkraft

Die Kraft ist proportional zum Gradienten der Energie. Damit erhalten wir in einer Dimension

$$F = -\vec{\nabla} E_{pot} = \frac{\mu_E^2}{2\Delta\omega_0} E \frac{\partial E}{\partial x}.$$

Somit ist die Dipol- oder Gradientenkraft proportional zur Stärke des Feldes, zum Gradienten, und indirekt proportional zur Laserverstimmung.

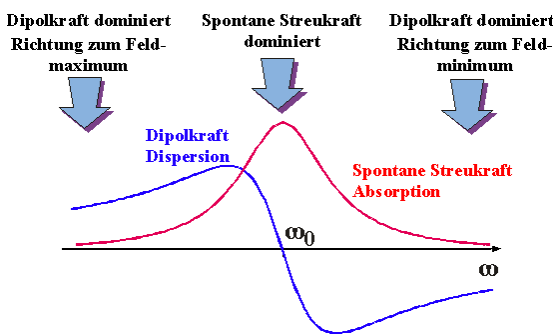


Abbildung 5.40: Verstimmungsabhängigkeit der beiden Kräfte.

Die Dipolkraft unterscheidet sich von der spontanen Streukraft bezüglich ihrer Abhängigkeit von der Laserverstimmung: Sie verhält sich dispersiv, d.h. sie verschwindet auf der Resonanz. Die

spontane Streukraft erreicht dort ihr Maximum. Grundsätzlich wirken immer beide Kräfte. Es ist jedoch möglich, die experimentellen Parameter so zu wählen, dass eine der beiden dominiert.

Da die Stärke der Dipolkraft proportional zum Gradienten des Lichtfeldes ist verschwindet sie in einem homogenen Feld (wiederum im Gegensatz zur spontanen Streukraft). Um sie zu maximieren benötigt man ein Feld, das auf kleine Strecken möglichst rasch variiert.

Da die kürzeste Distanz, über die sich die Stärke eines Lichtfeldes wesentlich ändern kann, durch seine Wellenlänge gegeben ist, wird die Kraft am stärksten in einer evaneszenten Welle, in einer stehenden Welle, oder in einem stark fokussierten Strahl. Je nach Vorzeichen der Laserverstimmung wird das Atom in die intensive Region hineingezogen oder daraus hinausgestoßen.

Im Gegensatz zur spontanen Streukraft ist die Stärke der stimulierten Kraft nicht durch die Lebensdauer des angeregten Zustandes limitiert - sie kann beliebig stark werden sofern genügend Laserintensität zur Verfügung steht. Da sie keine spontane Emission beinhaltet führt sie nicht zu einer Aufheizung der Atome. Umgekehrt kann Sie jedoch auch nicht zur Kühlung von Atomen eingesetzt werden, da keine Energie dissipiert wird.

5.4.3 Optische Pinzetten

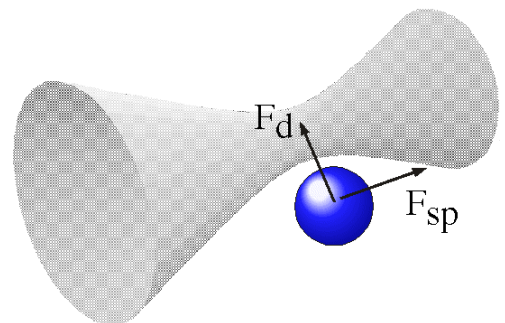


Abbildung 5.41: Dipolkraft beim Fokus eines Lasers.

Die Dipolkraft wurde als erstes zum Einfangen von lasergekühlten Atomen verwendet. Diese wurden im Fokus eines rotverstimmten Lasers eingefangen. Da das Potential, welches ein Dauerstrichlaser erzeugen kann, nicht sehr hoch ist müssen die Atome in einer optischen Molasse gekühlt werden damit sie eingefangen werden können.

Eine weitere interessante Eigenschaft der Dipolkraft liegt darin, dass sie nicht resonant ist. Dadurch hängt sie (im Gegensatz zur spontanen Streukraft) nur wenig von den Einzelheiten der Niveaustuktur des Systems ab. Insbesondere ist sie nicht nur auf Atome, sondern auch auf Moleküle und sogar makroskopische Objekte anwendbar.

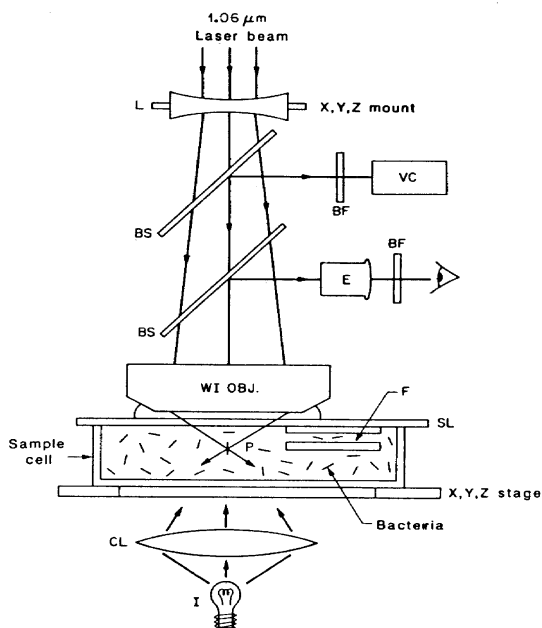


Abbildung 5.42: Aufbau einer optischen Pinzette.

Aus dieser Möglichkeit wurden sogenannte optische Pinzetten entwickelt: ein Laser wird stark fokussiert und das zu untersuchende Objekt wird mit dem Fokus des Lasers aufgenommen. Der Laserfokus erzeugt ein dreidimensionales Potenzialminimum, welches das Objekt festhält. Die Stärke der Kraft hängt vom Dipolmoment der Probe und der Laserintensität ab.

Dieses Prinzip erlaubt z.B. die gezielte Manipulation von Makromolekülen. Dazu werden die Moleküle chemisch an ein Kunststoffkugelchen gebunden, welches im Laserfokus gefangen werden kann. Entsprechende Untersuchungen werden in einem Mikroskop durchgeführt, in welches ein geeigneter Laserstrahl eingekoppelt und auf rund $1 \mu\text{m}$ fokussiert wird.

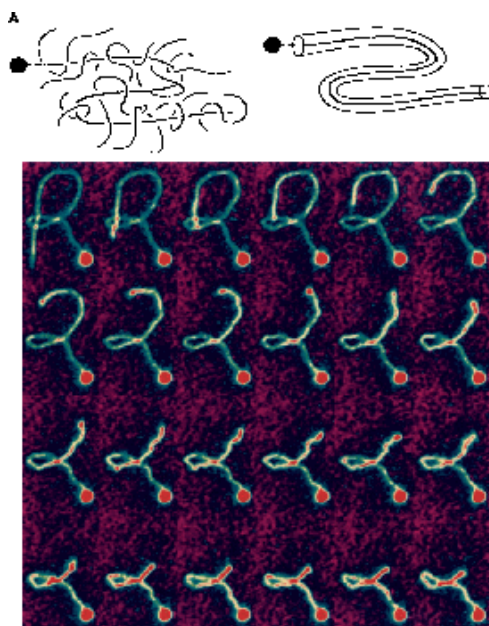


Abbildung 5.43: DNA Molekül in einer optischen Pinzette.

In der Figur ist als Beispiel dargestellt wie ein einzelnes DNA Molekül mit einer optischen Pinzette erfasst und durch eine Matrix aus Polymermolekülen gezogen. Das Interessante daran ist, dass das Molekül gedehnt wird und erst mit Verzögerung dem Laserstrahl folgt.

Es benutzt aber den gleichen Weg, was zeigt, dass es in einer Art "Röhre" gefangen ist, welche durch die Umgebung erzeugt wird.

Auf diese Weise manipuliert können sogar lebende Zellen manipuliert werden. Hier wurde in einem Bakterium eine Zell-Organelle mit einer optischen Pinzette "gepackt" und weggezogen (siehe Pfeile). Nach Ausschalten des Lasers bewegt es sich zurück. Mit solchen Experimenten untersuchen Biologen den Aufbau von Zellen.

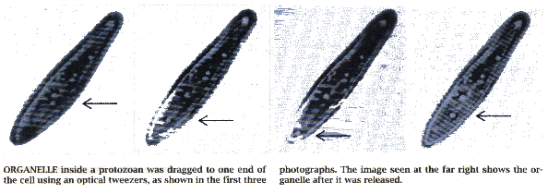


Abbildung 5.44: Manipulation in einer lebenden Zelle mit Hilfe einer optischen Pinzette.

5.4.4 Stehwellen für Atome

Eine effiziente Methode zum Einfangen und Manipulieren von Atomen sind stehende Wellen. Ist der Laser gegenüber der atomaren Resonanz rot-verstimmt, so werden die Atome in den Bäuchen der Stehwelle eingefangen.

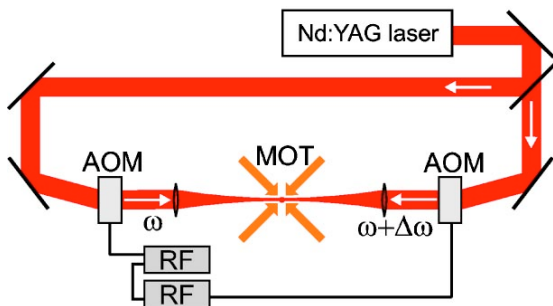


Abbildung 5.45: Experimenteller Aufbau für das Einfangen von Atomen in einer stehenden Welle (PRA 67, 033403 (2003)).

Für das Einfangen in einer stehenden Welle spaltet man einen Laser in zwei gegenläufige Teilstrahlen und überlagert diese so, dass sie eine stehende Welle bilden. In der Figur wird gezeigt, wie man die Teilstrahlen zusätzlich in der Frequenz verschieben kann: dies wird mit Hilfe von akustooptischen Modulatoren erreicht (AOM). Damit kann man anstelle einer stehenden Welle eine laufende Welle erzeugen und so die Stellen, an denen die Atome festgehalten werden, verschieben. In Ausbreitungsrichtung der Welle werden die Atome in den Bäuchen des Laserstrahls festgehalten; in transversaler Richtung kann man

sie durch Fokussierung des Laserstrahls auf einige μm ebenfalls einfangen.

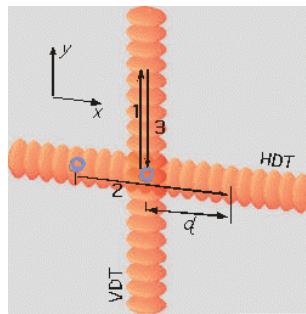


Abbildung 5.46: Zwei gekreuzte Stehwellen (schematisch Nature 442, 151 (2006).)

Verwendet man zwei orthogonale Stehwellen, so wird es möglich, Atome nicht nur einzufangen, sondern auch gezielt zu manipulieren.

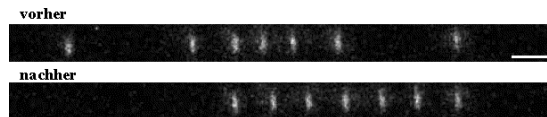


Abbildung 5.47: Sortieren von Atomen in einer Stehwelle.

Dafür wurden sie mit Hilfe der vertikalen Stehwelle aus dem horizontalen Schieberegister herausgenommen und an der geeigneten Stelle wieder eingefügt.

Damit gelingt es z.B., Atome in ein regelmäßiges Gitter anzuordnen. Im Bild sind experimentelle Resultate gezeigt. Erfolgreich war der Algorithmus offenbar dann wenn der Anfangsabstand mehr als etwa $10 \mu\text{m}$ betrug; unterhalb dieser Schranke ist die Auflösung der vertikalen Stehwelle nicht fein genug.

5.4.5 Reflexion: Spiegel für Atome

Eine andere Anwendung verwendet eine evaneszente optische Welle. Diese fällt über eine Distanz von der Größenordnung der optischen Wellenlänge auf Null ab.

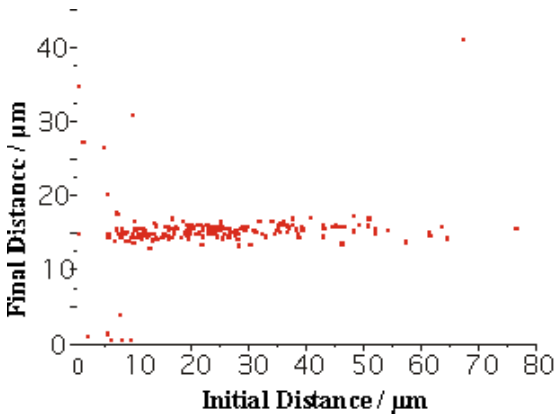


Abbildung 5.48: Vergleich der interatomaren Abstände vor und nach dem Sortierprozess.

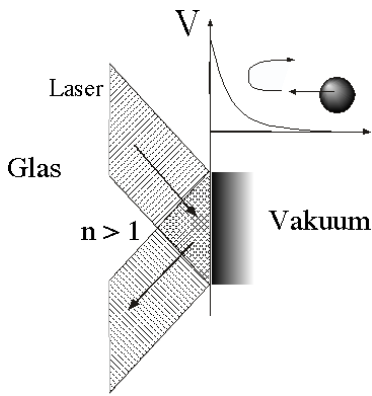


Abbildung 5.49: Reflexion von Atomen an einer evaneszenten Welle.

Der starke Gradient in diesem schnell abfallenden Feld ergibt eine große Kraft. Verschiedene Experimente haben diesen Ansatz benutzt um Atome zu reflektieren. Die erreichbaren Laserintensitäten erzielen zwar große Beschleunigungen ($> 10^6 g$), aber aufgrund der geringen Distanz bleibt das Potenzial relativ klein, so dass nur langsame Atome reflektiert werden können.

Die vielleicht spektakulärste Anwendung bestand im Fallenlassen von gekühlten Atomen auf eine evaneszente Welle.

Es konnte beobachtet werden, wie die Wolke von Atomen wiederholt von der Oberfläche reflektiert wurde.

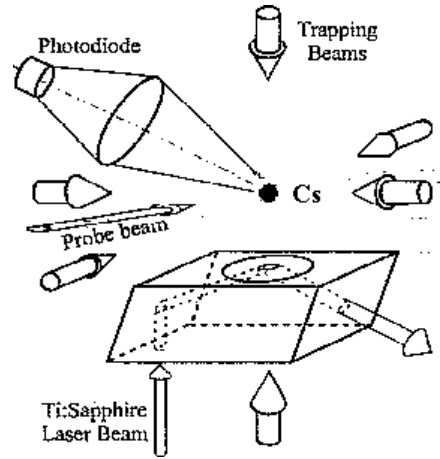


Abbildung 5.50: Resonator für Cs-Atome.

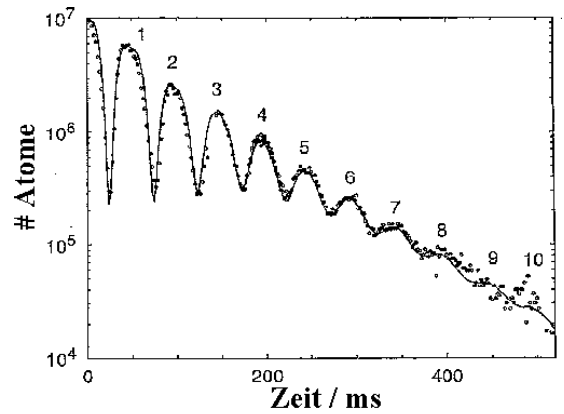


Abbildung 5.51: Atomare Wolke wird von evaneszenter Welle reflektiert.

Dieses Experiment kann man nicht nur mit einem thermischen Ensemble durchführen, sondern auch mit einem Bose-Einstein Kondensat. Dabei stellt man fest, dass sich dieses deutlich idealer reflektiert wird: Da alle Atome im gleichen Quantenzustand sind, verhalten sie sich identisch, während im thermischen Ensemble die unterschiedlichen Impulse der einzelnen Atome zu einem zerfließen führen.

5.4.6 Atomoptik

Gemäß der Beziehung von de Broglie hat jedes Teilchen eine bestimmte Wellenlänge, die von seinem Impuls und seiner Masse abhängt. Dies

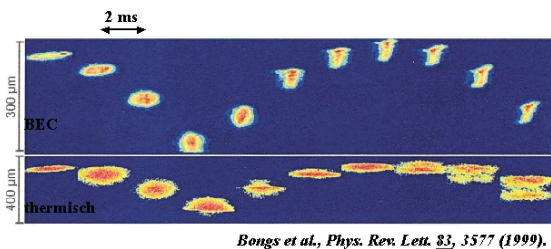


Abbildung 5.52: Vergleich von Reflexionen eines BECs mit der Reflexion eines thermischen Ensembles.

hat man vor allem für Elektronen und Neutronen benutzt, z.B. in einem Elektronenmikroskop oder bei der Neutronenbeugung in der Kristallographie. Das gleich gilt aber auch für Atome. Das heißt, dass man Atome z.B. fokussieren kann, wenn man eine Linse dafür konstruiert.

An einem Strahlteiler wird ein Atom in zwei Teilstrahlen zerlegt, welche z.T. durch makroskopische Distanzen getrennt sind. Das heißt nun nicht, dass das Atom mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit nach links und einer anderen Wahrscheinlichkeit nach rechts geht, sondern es geht durch beide Arme. Das kann man zeigen, indem man die beiden Teilstrahlen wieder zusammenbringt und Interferenzerscheinungen misst. Diese Experimente sind primär von konzeptionellem Interesse, da sie den Wellencharakter der Materie aufzeigen. Es gibt aber auch Vorschläge und erste Experimente, wie man derartige Experimente zu Präzisionsmessungen benutzen kann, z.B. für eine sehr genaue Messung der Erdbeschleunigung.

Auch in stehenden Lichtwellen erreicht man schnelle Intensitätsvariationen. Wenn die Intensität hoch genug ist kann man erreichen, dass die Atome sich nur in den Knoten oder Bäuchen der stehenden Welle aufhalten. Wenn man die Welleneigenschaften der Atome berücksichtigt findet man, dass die stehende Welle in diesem Fall als Beugungsgitter wirkt. Die einzelnen Teilstrahlen erhalten einen zusätzlichen Impuls von $2\hbar k$ senkrecht zur ursprünglichen Ausbreitungsrichtung, d.h. parallel zur Richtung der stehenden Welle.

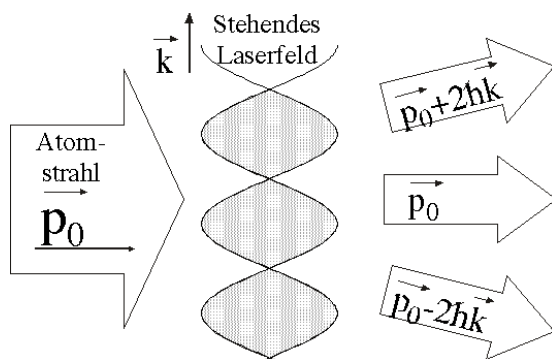


Abbildung 5.53: Stehwelle als Strahlteiler.

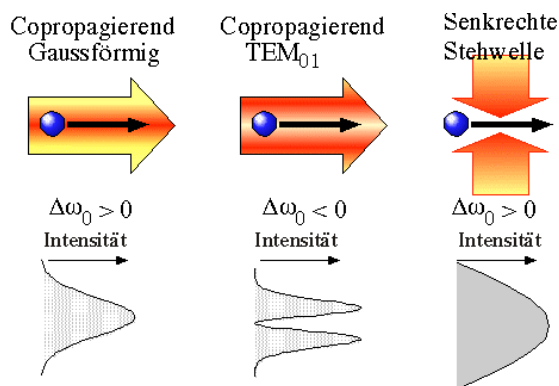


Abbildung 5.54: Linsen und Wellenleiter für Atome.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, einen Atomstrahl zu fokussieren indem man ein Potential erzeugt, welches quer zum Atomstrahl näherungsweise quadratisch ist. Die einfachste Möglichkeit ist die Verwendung eines Gaußförmigen Laserstrahls, der dem Atomstrahl überlagert wird. Die Laserfrequenz muss in diesem Fall rot verstimmt sein, so dass die Atome ins Zentrum hineingezogen werden. Eine andere Möglichkeit liegt in der Verwendung eines hohlen Strahls, der blau verstimmt ist, so dass die Atome wieder ins Zentrum hineingedrückt werden. Die dritte Möglichkeit liegt in der Verwendung einer stehenden Welle, ähnlich wie beim Strahlteiler.

Eine möglicherweise realisierbare Anwendung solcher Linsen liegt in der Chipherstellung, wo Atomstrahlen zum Schreiben von kleinen Strukturen verwendet werden könnten.

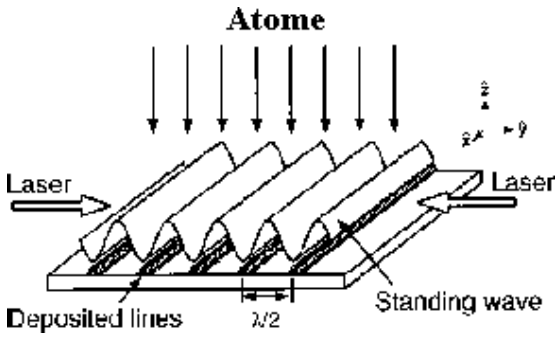


Abbildung 5.55: Schreiben von atomaren Linien auf einem Chip.

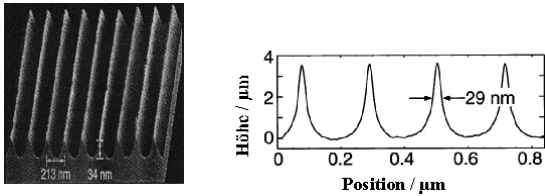


Abbildung 5.56: Linien auf einem Halbleitersubstrat.

Wie hier gezeigt erhält man damit räumlich periodische Muster. Das Prinzip lässt sich leicht auf zwei Dimensionen ausweiten. Die Periodizität ist gegeben durch die Wellenlänge des Lichtes, während die Auflösung durch die Fokussierung des Atomstrahls definiert ist.

6 Nichtklassisches Licht

6.1 Einleitung

6.1.1 Übersicht und Motivation

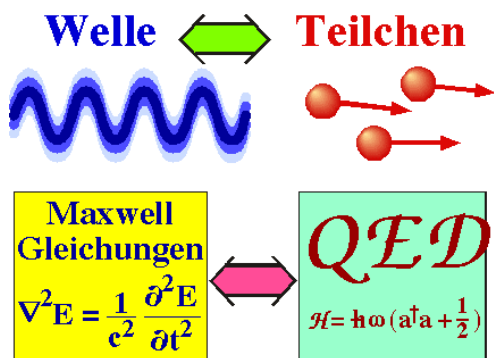


Abbildung 6.1: Nichtklassische Aspekte des Lichtes.

Im größten Teil der Vorlesung wurde Licht als klassisches elektromagnetisches Feld diskutiert, dessen Ausbreitung mit Hilfe der Maxwell-Gleichungen beschrieben werden kann. Seit Planck ist aber bekannt, dass diese Beschreibung nicht vollständig ist. Während die Arbeiten von Planck und Einstein zur Wechselwirkung von Licht mit Materie die ersten Schritte für die Entwicklung der Quantenmechanik bildeten wurde die ausformulierte Quantenmechanik von Schrödinger und Heisenberg zunächst auf massive Teilchen angewendet. Erst in den 1940er Jahren entwickelten Richard Feynman, Freeman Dyson, Julian Schwinger und Sin-Itiro Tomonaga eine Quantentheorie des Lichtes, die Quanten-Elektrodynamik (QED). Diese ist inzwischen die am genauesten getestete physikalische Theorie. Sie beschreibt Phänomene auf einem extremen Bereich von Größenskalen (von Subatomare bis zur Größe des Universums).

Für die weitaus meisten optischen Phänomene geben die Maxwell-Gleichungen eine völlig kor-

rekte Beschreibung und man benötigt die QED nicht. Der Photoeffekt und die Schwarzkörperstrahlung gehören zu den wenigen Ausnahmen. Allerdings nimmt die Zahl der beobachtbaren Phänomene, für deren Erklärung man die QED benötigt, seit der Entwicklung des Lasers stark zu und inzwischen sind auch technische Anwendungen wie die Telekommunikation in einen Bereich gelangt, wo diese Effekte relevant werden.

In diesem Kapitel sollen diese Phänomene kurz vorgestellt und diskutiert werden.

6.1.2 Historische Entwicklung

In einem etwas weiteren Rahmen ist dies eine Fortführung der Diskussion über die Natur des Lichtes, welche Wissenschaftler und Philosophen seit Jahrhunderten beschäftigt. Insbesondere gab es einen langen Streit, ob Licht eine Welle sei, oder aus einen Strom von Teilchen bestehe.

Schon im 17. Jhd. wurden die ersten optischen Beugungsexperimente durchgeführt, welche eigentlich auf eine Wellennatur hindeuteten. Auch Newton beschäftigte sich intensiv mit der Frage. Er erklärte unter anderem die unterschiedlichen Farben des Lichtes mit einer Theorie, welche Wellen- und Teilchenaspekte mischte. Unterschiedliche Farben entsprachen bei ihm unterschiedlichen Teilchen, welche den Äther in Schwingungen versetzten. Dabei war er starken Angriffen von Hooke ausgesetzt, so dass seine Arbeit (Opticks) erst ein Jahr nach Hookes Tod publiziert wurde.

Der Wellenaspekt trat bei Newton später aber in den Hintergrund, und der Teilchenaspekt wurde stärker gewichtet. Auch die praktisch zeitgleich entstandene Arbeit von Huygens (eine Wellentheorie) wurde weniger stark beachtet. Euler, und vor allem Young und Fresnel griffen die Wel-

Welle oder Teilchen ?

Robert Hooke (1635-1703)

Beobachtet Interferenz und Beugung; Wellentheorie

Isaac Newton (1642-1727)

Teilchentheorie mit WellenASPEKTEN

Thomas Young (1773-1829)

Augustin Jean Fresnel (1788-1827)

Wellentheorie erklärt Interferenzeffekte

James Clerk Maxwell (1831-1879)

Elektrodynamik: Ausbreitung elektromagnetischer Wellen

Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858-1947)

1900: Erklärung der Schwarzkörperstrahlung mit Hilfe von 'Lichtquanten'

Albert Einstein (1879-1955)

1905: Erklärung des photoelektrischen Effekts mit Hilfe von 'Lichtquanten'. Ab 1926 werden diese als 'Photonen' bezeichnet (G.N. Lewis).

Abbildung 6.2: Welle oder Teilchen in der historischen Entwicklung.

lentheorie wieder auf. Es gelang ihnen, Interferenz und Beugung damit zu erklären. Ihre größte Schwierigkeit war, dass damals nur Longitudinalwellen, v.a. Schallwellen, bekannt waren, also skalare Wellen. Damit war es aber nicht möglich, Polarisierungseffekte zu erklären, welche im 18. u. 19. Jahrhundert intensiv untersucht wurden. Mit dem Hinweis auf die Autorität Newton wurden sie deshalb heftig angegriffen. Die eigentlichen theoretischen Grundlagen für die Beschreibung des Lichtes als elektromagnetische Welle wurden dann von Maxwell geschaffen, und Faraday und Hertz konnten zeigen, dass Licht als elektromagnetische Welle verstanden werden kann.

Die Maxwell Theorie hatte aber auch Schwierigkeiten, vor allem bei der Beschreibung der Wechselwirkung mit materiellen Systemen. Ein wichtiges Beispiel ist die sogenannte Abhängigkeit der von einem schwarzen Strahler emittierten Leistung als Funktion von Temperatur und Wellenlänge. Im 19. Jh. war es nicht möglich, die gemessene Verteilung mit einem theoretischen Modell in Übereinstimmung zu bringen. Planck löste dieses Problem, indem er postulierte, dass die

Energie der Strahlung nicht kontinuierlich emittiert werde. Diese Annahme wurde auch von Einstein bei der Erklärung des photoelektrischen Effektes verwendet.

6.1.3 QED: Moden und Energie

Die quantenmechanische Theorie, welche das Verhalten des Lichtes befriedigend erklären kann, ist die Quantenelektrodynamik. Grundlage der QED ist eine Zerlegung des Feldes in Moden. Die Form der Moden wird durch die Randbedingungen bestimmt; beim Laser z.B. sind es Resonatorspiegel, welche die Randbedingungen definieren. Um Probleme im freien Raum zu diskutieren kann man die Schranken nach Unendlich laufen lassen. Wir diskutieren hier der Einfachheit halber eine ebene Welle, wobei das E-Feld in x -Richtung und das H -Feld in y -Richtung polarisiert sei:

$$\begin{aligned}\vec{E} &= E_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(\omega t - k_z z)} \\ \vec{H} &= H_0 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(\omega t - k_z z)} \\ &= E_0 \frac{k_z}{\mu_0 \omega} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i(\omega t - k_z z)}.\end{aligned}$$

Die Energiedichte eines solchen Feldes ist bekanntlich

$$w = \frac{1}{2}(\epsilon_0 E_0^2 + \mu_0 H_0^2).$$

Unter Verwendung des Korrespondenzprinzips erhält man daraus den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \int_V dV (\epsilon_0 E_0^2 + \mu_0 H_0^2).$$

Die Proportionalität der zeitlichen Ableitung von E mit H in den Maxwell Gleichungen

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

legt nahe, im Hamiltonoperator folgende Identifizierung vorzunehmen:

$$\int_V dV (\epsilon_0 E_0^2) = \Omega^2 q^2$$

$$\int_V dV (\mu_0 H_0^2) = p^2.$$

Damit wird

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}(\Omega^2 q^2 + p^2),$$

formal somit identisch zu einem harmonischen Oszillator.

6.1.4 QED: Operatoren

Jede Mode des elektromagnetischen Feldes entspricht somit einem harmonischen Oszillator. Im Rahmen der QED beschreibt man diese meist nicht mit Ort und Impuls, sondern man verwendet Linearkombinationen davon: Den Vernichtungsoperator

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\Omega}}(\Omega q + ip)$$

und den Erzeugungsoperator

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\Omega}}(\Omega q - ip).$$

Die Namen "Erzeugungs-" und "Vernichtungsoperator" beziehen sich darauf, dass

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,$$

d.h. dass a die Zahl der Photonen in der Mode um 1 reduziert. Umgekehrt gilt

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,$$

d.h. a^\dagger erzeugt ein zusätzliches Photon. $|n\rangle$ ist ein sogenannter Zahlzustand, d.h. ein Zustand mit genau n Photonen in der Mode. Man verifiziert leicht dass

$$a^\dagger a|n\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n}|n\rangle = n|n\rangle.$$

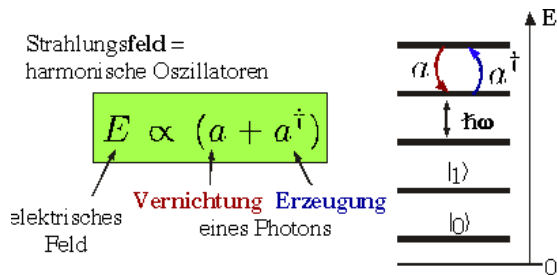


Abbildung 6.3: QED: Mode des Strahlungsfeldes als harmonischer Oszillator.

Mit Hilfe des Erzeugungs- und Vernichtungsoperators kann der Hamiltonoperator geschrieben werden als

$$\mathcal{H} = \hbar\Omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) = \hbar\Omega(n + \frac{1}{2}).$$

Jede Mode des Feldes entspricht einem harmonischen Oszillator, wobei die Oszillatorfrequenz durch die Schwingungsfrequenz des Feldes gegeben ist. Dementsprechend ist die Energie des niedrigsten Zustandes ($n = 0$) $\hbar/2$. Diese Nullpunktenergie kann dem Feld zwar nicht entzogen werden, hat aber doch beobachtbare Auswirkungen. Der Zahloperator misst die Zahl der elementaren Anregungen, welche als Photonen bezeichnet werden. Pro Photon besitzt die Mode die Energie $\hbar\Omega$.

Aus der Definition der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren folgt, dass die Feldstärke der Mode proportional zur Summe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperator ist,

$$E \propto (a + a^\dagger).$$

6.1.5 QED vs. Maxwell

Die Quanten-Elektrodynamik ist inzwischen eine der am genauesten überprüften physikalischen Theorien überhaupt. Bisher hat man noch keine Widersprüche zwischen ihren Voraussagen und experimentell beobachteten Resultaten gefunden. Die meisten Arbeiten auf dem Bereich der Optik werden aber nach wie vor mit theoretischen Modellen beschrieben, welche auf den klassischen Maxwell Gleichungen basieren. Es gibt

somit einen Bereich der Optik, in dem die Maxwell-Gleichungen die beobachteten Phänomene sehr genau wiedergeben. Wir wissen aber auch, dass die klassische Theorie nicht den ganzen Bereich abdeckt, sondern dass es auch einen Bereich gibt, wo die Beobachtungen nur noch quantenmechanisch erklärt werden können.

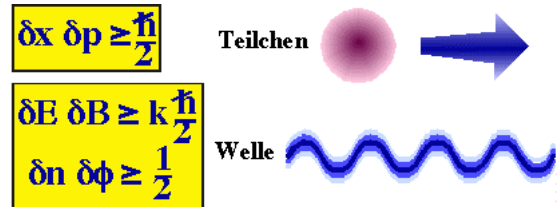
Die wesentlichste Schwierigkeit der QED liegt in der Tatsache, dass das zu behandelnde System streng genommen immer eine unendlich große Dimension hat, da ja jedes Teilchen auch an das Kontinuum aller Moden des Strahlungsfeldes gekoppelt ist. Wegen der Nullpunktenergie des Strahlungsfeldes kann diese Wechselwirkung nicht einfach vernachlässigt werden, nicht einmal wenn keine Photonen vorhanden sind, also wenn sich das Feld im Vakuumzustand befindet. Um dennoch etwas rechnen zu können, muss jeweils eine gute Näherung gefunden werden. Bei der Elimination der Nullpunktenergie des Strahlungsfeldes bleiben dabei einige Reste zurück, wie die spontane Emission, Änderungen im magnetischen Moment des Elektrons oder Verschiebungen der Energien von atomaren Zuständen. Bei dieser Reduktion geht auch die Eichinvarianz der Theorie verloren (W.E. Lamb, R.R. Schlicher, and M.O. Scully, Phys. Rev. A 36, 2763 (1987)).

In diesem Kapitel soll die Frage untersucht werden wo denn die Grenze verläuft, jenseits welcher nur noch die Quantenmechanik eine befriedigende Erklärung der Phänomene liefert. Das Interesse an dieser Fragestellungen ist zum einen natürlich grundsätzlicher Natur. Andererseits sind durch die raschen Fortschritte, welche optische Methoden seit der Entwicklung des Lasers gemacht haben, viele Messverfahren in einem Bereich angelangt, wo die quantenmechanische Natur des Lichtes beobachtbare Konsequenzen hat. Kenntnisse über diese Unterschiede, werden deshalb zunehmend wichtiger. Optische Interferometer, z.B., welche für die exakte Messung von Distanzen benutzt werden oder in der Form von Lasergyroskopen als Beschleunigungssensoren benutzt werden, arbeiten heute an der Schrottauschgrenze, also in einem Bereich, wo die

Empfindlichkeit dieser Geräte an fundamentale Grenzen stößt. Eine Weiterentwicklung ist somit nur möglich, wenn dabei die quantenmechanische Natur des Lichtes berücksichtigt wird. Das gleiche gilt für die kohärente optische Datenübertragung.

6.1.6 Unschärfe

Die grundlegendsten Unterschiede zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Theorie gehen auf die Unschärfenbeziehung zurück.



Beispiel: Beugung am Spalt

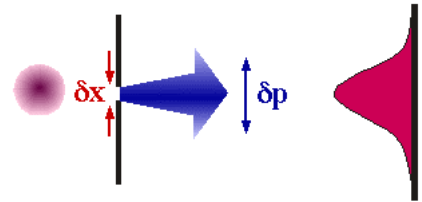


Abbildung 6.4: Unschärfe

In der QED ist das elektromagnetische Feld ein Operator, welcher der Heisenberg'schen Unschärfenbeziehung unterliegt. Somit haben die Felder keinen scharfen Wert, sondern sind mit Unsicherheiten, resp. Unschärfen behaftet, wie Ort und Impuls eines Teilchens:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Für elektromagnetische Wellen gelten Unschärferelationen insbesondere für das Produkt zwischen elektrischem und magnetischem Feld,

$$\Delta E \Delta H \geq \text{const.} \frac{\hbar}{2}.$$

Eine analoge Beziehung kann man formulieren zwischen den Quadraturamplituden oder zwischen Amplitude (Photonenzahl) und Phase.

Außerdem ist die Quantenelektrodynamik, wie alle quantenmechanischen Theorien, nicht lokal; so existieren z.B. Zustände des Strahlungsfeldes, bei denen Korrelationen zwischen räumlich getrennten Photonen auftreten.

Grundsätzlich ist es in der Quantenmechanik häufig möglich, die entsprechende klassische Theorie als Grenzfall für große Quantenzahlen wieder zu erhalten. In diesem Fall entspricht der Grenzfall demjenigen von großen Photonenzahlen, also hohen Intensitäten. Für diesen Grenzfall erhält man in diesem Fall die Maxwell Gleichungen. Diese Näherung wird im allgemeinen um so besser, je niedriger die Frequenz, also je niedriger die Photonenenergie wird.

6.1.7 Zustände einer Mode

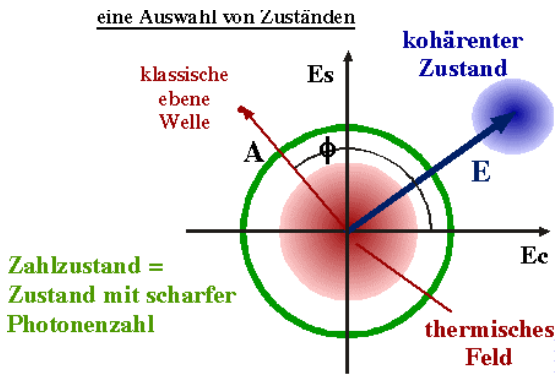


Abbildung 6.5: Zustände einer Mode

Die Zustände, welche zu diesem Hamiltonoperator gehören, können in der komplexen Ebene dargestellt werden. Entlang den beiden Achsen trägt man die Quadraturamplituden des elektrischen Feldes auf, also diejenigen Komponenten, welche mit dem \cos , resp. \sin der Referenzfrequenz schwingen. Äquivalent ist die Polardarstellung mit Amplitude und Phase.

In dieser Darstellung entspricht ein klassischer Zustand, bei dem Amplitude und Phase scharf bestimmt sind, einem Punkt. Quantenmechanisch würde ein Punkt jedoch die Heisenbergbeziehung verletzen. Hier entspricht die Unschärfe eines Zustandes der Fläche in der komplexen

Ebene. Die Heisenberg Beziehung legt die minimale Größe dieser Fläche fest.

Prinzipiell ist es aber auch möglich, Zustände mit scharfer Photonenzahl, sogenannte Fock-Zustände, zu erzeugen. Diese sind Eigenzustände des Hamiltonoperators und haben somit eine scharfe Energie - im Bild entsprechen sie einem Kreis, d.h. in diesem Fall ist die Intensität scharf, aber die Phase ist vollständig unbestimmt.

Weitere mögliche Zustände sind z.B. ein thermischer Zustand, bei dem also die Population der einzelnen Zustände durch eine thermische Verteilung gegeben ist. In diesem Fall beträgt die Wahrscheinlichkeit, n Photonen zu messen

$$P_{th}(n) = \frac{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}}{e^{-n\frac{\hbar\omega}{kT}}}.$$

Die Breite der Verteilung ist gleich ihrem Mittelwert: $\sigma^2 = \bar{n}^2 + \bar{n}$. Wie in der Figur angedeutet ist die Phase eines thermischen Zustandes nicht bestimmt. Damit verschwindet auch der Erwartungswert für die Amplitude, nicht aber für die Energie.

6.1.8 Kohärente Zustände

Aufgrund der quantenmechanischen Unschärfebeziehung ist es nicht möglich, Zustände zu erzeugen, bei denen das elektromagnetische Feld scharf definiert ist und die sich somit verhalten wie von der klassischen Theorie vorausgesagt. Es gibt aber eine Klasse von Zuständen, deren Eigenschaften denjenigen klassischer Zustände relativ nahe kommen. Dabei handelt es sich um symmetrische Zustände, d.h. um Zustände, bei denen die Unschärfe gleichmäßig auf die beiden Quadraturkomponenten verteilt ist; in der hier verwendeten Darstellung in der komplexen Ebene sind dies Zustände somit rund. Außerdem entspricht ihre Unschärfe gerade dem quantenmechanischen Minimum.

Diese Zustände wurden erstmals von Roy Glauber beschrieben und können in der Basis der

Zahl- oder Fock Zustände als eine Reihe entwickelt werden:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

Der Parameter α ist komplex und definiert das Zentrum der Feldverteilung in der komplexen Ebene. Die Feldverteilung ist symmetrisch und das Produkt der Unschärfen entspricht gerade dem Gleichheitszeichen der Heisenberg Beziehung, also dem quantenmechanischen Minimum.

Die Feldverteilung und die Photonenstatistik für kohärente Zustände können mit den entsprechenden Funktionen für thermische Lichtfelder verglichen werden. Dort ist die mittlere Amplitude null, und die häufigste Photonenzahl ist ebenfalls null - beides für kurze Messintervalle. Der wesentliche Unterschied ist offenbar der, dass ein kohärenter Zustand einen nicht verschwindenden Erwartungswert für die Quadraturamplituden hat, während diese für einen sogenannten chaotischen Zustand, wie er von einer thermischen Lichtquelle erzeugt wird, verschwinden. Noch in einem weiteren Sinn gleicht der kohärente Zustand einem klassischen Feld: die Intensitäten an unterschiedlichen Orten, resp. Zeiten sind statistisch unabhängig. Diese Eigenschaft wurde von Glauber für die Definition der kohärenten Zustände verwendet.

Kohärente Zustände sind aus verschiedenen Gründen wichtig: zum einen erzeugt ein idealer Laser weit oberhalb der Laserschwelle Licht, welches in guter Näherung durch einen kohärenten Zustand beschrieben werden kann. Betrachten wir lediglich den Schwerpunkt, d.h. den Erwartungswert des Zustandes, so verhält sich ein kohärenter Zustand klassisch: Die Bewegung des Schwerpunktes kann durch die Maxwellgleichungen beschrieben werden.

Die Fläche, welche die Amplitudenunschärfe darstellt, ist unabhängig von der Position in der Ebene der Zustände. Dies zeigt, dass diese quantenmechanischen Effekte auch für große Amplituden überleben. Dass der Vakuumzustand auch

als kohärenter Zustand ($\alpha \rightarrow 0$) verstanden werden kann, ist deshalb wichtig, weil bei einer Aufteilung an einem Strahlteiler i.a. der Vakuumzustand zugemischt wird. Dadurch wird ein einfallender kohärenter Zustand mit einem anderen kohärenten Zustand überlagert und die beiden auslaufenden Zustände stellen wiederum einen kohärenten Zustand dar.

6.2 Photonenstatistik

6.2.1 Phänomenologie

Die quantenmechanische Unschärfe macht sich auf unterschiedliche Art bemerkbar. Wir betrachten zunächst die Unschärfe der Intensität, welche wir über Schwankungen in der Photonenzahl quantifizieren.

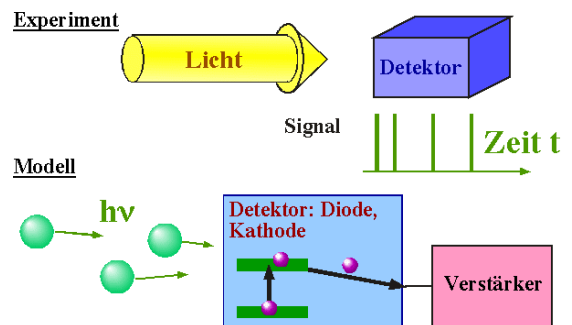


Abbildung 6.6: Intensitätsmessung als Photonenstatistik.

Dazu betrachten wir den Prozess einer Intensitätsmessung etwas genauer. Quantenmechanische Unschärfe manifestiert sich dann besonders stark wenn die Intensität gering ist. Ein passendes Modell wäre dann dass ein Lichtstrahl auf einen Photomultiplier fällt. Dort wird pro einfallendem Photon ein Elektron aus einem tiefliegenden quantenmechanischen Zustand in einen höher liegenden Zustand angehoben, z.B. aus dem Valenzband eines Halbleiterdetektors ins Leitungsband oder aus dem Leitungsband einer Photokathode ins Vakuum. Von dort wird es abgeleitet und elektronisch verstärkt.

In einem halbklassischen Modell kann man nicht voraussagen, zu welchem Zeitpunkt ein Photon auf dem Detektor eintrifft, d.h. wann ein Elektron freigesetzt wird. Man kann lediglich aussagen wie groß der mittlere Abstand zwischen zwei Photonen ist. Für einen Laserstrahl mit 1 pW Leistung und einer Wellenlänge von 532 nm, z.B., treffen pro Sekunde

$$N = \frac{E}{h\nu} = \frac{E\lambda}{hc} = \frac{10^{-12} \text{ J } 5.32 \cdot 10^{-7} \text{ m}}{6.62 \cdot 10^{-34} \text{ Js } 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}}$$

$$= 2.7 \cdot 10^6$$

Photonen ein. Der mittlere Abstand beträgt somit 0.370 μsec .

6.2.2 Poissonverteilung

Diese Wahrscheinlichkeit ist unabhängig davon ob unmittelbar vorher ein Photon eingetroffen ist oder nicht, d.h. die einzelnen Photonen sind statistisch unabhängig voneinander. Dies gilt natürlich nur für ein Lichtfeld, das keine klassischen Schwankungen aufweist.

Die präziseste mögliche Art der Intensitätsmessung ist eine Zählung der Anzahl Photonen pro Zeiteinheit. Diese Zahl ist eine Zufallsvariable, und die Quantenmechanik erlaubt nur statistische Aussagen über ihre Messung. Für eine gegebene Messzeit und Intensität kann die mittlere Photonenzahl nach obiger Rechnung bestimmt werden. Wiederholt man die Messung mehrfach, so findet man nicht immer den gleichen Wert, sondern eine Verteilung. Wie in der Kombinatorik gezeigt wird, ist die relevante Verteilung die Poisson-Verteilung

$$p(n; k) = e^{-k} \frac{k^n}{n!}.$$

Hier stellt k den Erwartungswert, d.h. die mittlere Zahl von Photonen für das gegebene Messintervall dar und n die effektiv gemessene Zahl von Photonen.

In der Figur ist die Verteilung für zwei unterschiedliche Erwartungswerte gezeigt.

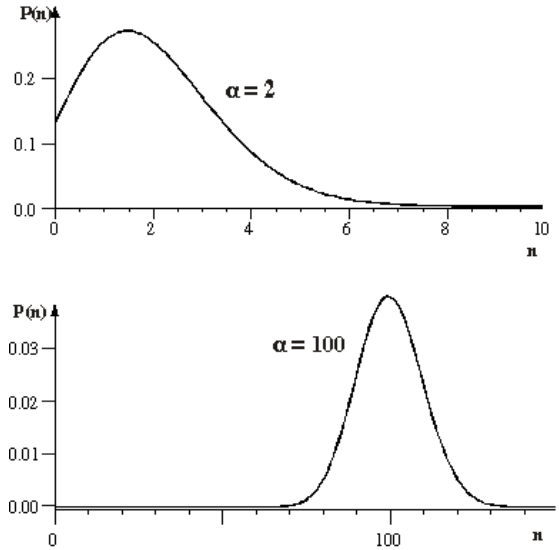


Abbildung 6.7: Poisson Statistik.

Eine solche Verteilung erhält man gerade für einen kohärenten Zustand

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

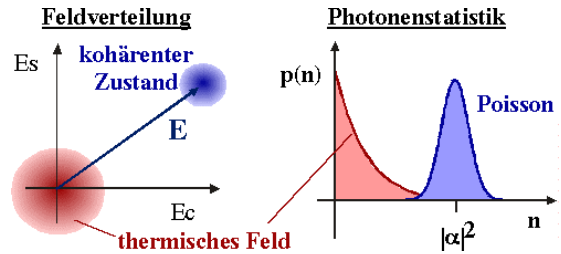


Abbildung 6.8: Phasenraumdarstellung und Photonenstatistik für kohärente Zustände.

Damit wird die Wahrscheinlichkeit, im gegebenen Messintervall für diesen Zustand gerade n Photonen zu messen

$$p(n) = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!},$$

d.h. sie ist durch die Poissonverteilung gegeben. Hier stellt $|\alpha|^2$ den Erwartungswert dar, also die mittlere Photonenzahl. Die Breite der Verteilung ist proportional zu $|\alpha|$ und damit zur Wurzel aus

der mittleren Photonenzahl, wie bei einem klassischen Feld. Für große Mittelwerte geht sie in die Gaussverteilung mit Mittelwert $|\alpha|^2$ und Breite (FBHH) $\sqrt{2\alpha}$ über.

Die Unschärfe der Intensität (Photonenzahl) ist analog zu den elektrischen Schwankungen in einer elektronischen Schaltung, welche auf die diskrete Natur der Ladungsträger (Elektronen) zurückgeführt werden. In beiden Fällen spricht man vom Schrotrauschen. Die physikalische Ursache ist in beiden Fällen die Quantisierung - im Falle der Elektronik die Ladungsquantisierung, im Falle des Lichtes die Quantisierung der elektromagnetischen Energie.

Die Verteilung ist das Resultat der Annahme, dass die Photonen statistisch voneinander unabhängig sind. Die Unmöglichkeit, über den Zeitpunkt des Eintreffens der Photonen etwas auszusagen ist nicht auf experimentelles Unvermögen zurückzuführen, sondern es ist prinzipiell unmöglich, etwas darüber auszusagen - jedenfalls im Rahmen dieses halbklassischen Modells, wo die Ausbreitung des Lichtes mit Hilfe der Maxwell Gleichungen beschrieben wird: bei der Ausbreitung kommen ja keine Photonen vor, diese entstehen ja - immer im Rahmen dieses Modells - erst bei der Wechselwirkung mit dem Detektor. Das gleiche Resultat erhalten wir für einen kohärenten Zustand: dessen Photonenzahlstatistik ist identisch zu derjenigen des (zeitunabhängigen) klassischen Feldes. Die Annahme, dass die Photonen statistisch unkorreliert seien, war der Ausgangspunkt für Roy Glauber für die "Konstruktion" der Zustände.

Bei der Herleitung sind wir weiter davon ausgegangen dass das klassische Feld absolut stabil sei, dass also während der Messzeit keine Intensitätsschwankungen auftreten. Bei einem realen Feld sind Intensitätsschwankungen unvermeidlich. Sie führen zu einer Verbreiterung der gemessenen Verteilung gegenüber der Poissonverteilung. Die Breite der Poissonverteilung stellt somit eine untere Grenze dar für die gemessenen Schwankungen eines klassischen Feldes.

6.2.3 Intensitätskorrelation

Eine andere statistische Analyse der Photonverteilung ist die Intensitäts-Korrelationsfunktion.

$$\langle I(t) I(t + \tau) \rangle,$$

wobei die eckigen Klammern bedeuten, dass über alle Zeiten t gemittelt wird. Bei einer idealen ebenen Welle ist die Intensität und damit auch deren Korrelationsfunktion konstant. Dies bedeutet, dass die Photonen unabhängig voneinander beim Detektor eintreffen, also einer Poisson-Statistik folgen, und damit die Abstände zwischen den einzelnen Photonen schwanken. Experimentell erzeugtes Licht weist aber auch im klassischen Bereich immer gewisse Intensitätsschwankungen auf. Solche Intensitätsschwankungen führen zu einer Korrelation der Intensitäten für kurze Zeiten.

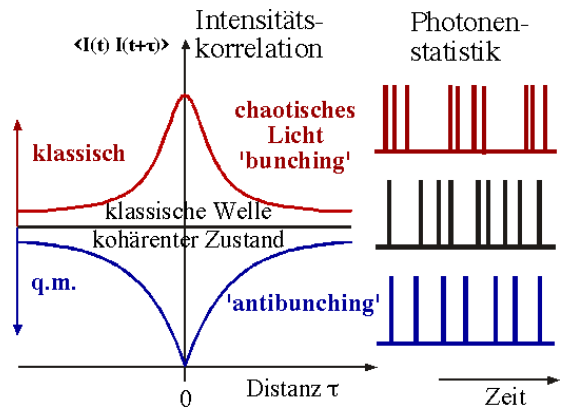


Abbildung 6.9: Intensitätskorrelationen.

Neben diesen "experimentellen Fehlern" gibt es aber auch quantenmechanische Ursachen für positive Intensitätskorrelationen. Im Photonbild entspricht eine positive Intensitätskorrelationsfunktion einer Tendenz der Photonen in Paaren einzutreffen; man spricht von "bunching". Auf ein Stichwort zusammengefasst ist die Ursache dafür die Bosonnatur der Photonen: Auf einer sehr kurzen Zeitskala betrachtet wird die Photonenzahlstatistik durch eine Bose-Einstein Verteilung beschrieben.

Eine statistische Analyse der Korrelationsfunktion im Rahmen eines halbklassischen Modells ergibt, dass die normierte Korrelationsfunktion

$$g^{(2)} = \frac{\langle I(t) I(t + \tau) \rangle}{\langle I(t) \rangle^2}$$

für kurze Zeiten durch Mittelwert \bar{n} und Varianz σ^2 der Photonenzahl beschrieben werden kann:

$$g^{(2)}(0) = 1 + \frac{\sigma^2 - \bar{n}}{\bar{n}^2}.$$

Bei einem thermischen Feld, wo $\sigma^2 = \bar{n}^2 + \bar{n}$ wird somit $g^{(2)}(0) = 2$. Die Korrelationsfunktion fällt auf den Wert 1 ab für größere Zeiten, wobei die Korrelationszeit durch die inverse Linienbreite gegeben ist.

Im Gegensatz zu thermischem Licht ist bei kohärentem Licht $\sigma^2 = \bar{n}$ und somit $g^{(2)}(0) = 1$. Die Intensitäts-Korrelationsfunktion ist somit zeitudabhängig - wiederum ein Resultat der statistischen Unabhängigkeit der Photonen. Die statistischen Eigenschaften des kohärenten Zustandes sind somit wieder die gleichen wie bei einer idealen klassischen ebenen Welle. Im Rahmen eines klassischen Bildes ist es offensichtlich dass die Funktion $g^{(2)}$ nie weniger als 1 betragen kann, da sämtliche Variationen der Intensität zu "bunching" Effekten führen, also zu positiven Abweichungen. Der Bereich unterhalb der Geraden ist somit "klassisch verboten".

6.2.4 Antibunching

In der Quantenmechanik sind Zustände mit $g^{(2)} < 1$ möglich. Das entspricht also dem Fall, dass die Photonen in gleichmäßigeren Zeitintervallen eintreffen, als man aufgrund einer Poissonverteilung erwarten würde. Bezogen auf die Intensitätsverteilung heißt das, dass man für kurze Zeiten eine Antikorrelation beobachtet: ein regelmäßiges Eintreffen bedeutet ja, dass kurz nach einem gemessenen Photon die Chance sehr klein ist, ein weiteres zu messen. Dieser Effekt wird als 'antibunching' bezeichnet. Er stellt ein weiteres Beispiel für ein elektromagnetisches Feld dar,

welches klassisch nicht beschreibbar ist. Offensichtlich sind in diesem Fall die Photonen nicht unabhängig voneinander, sondern antikorreliert; die Korrelationszeit entspricht der Breite des Loches.

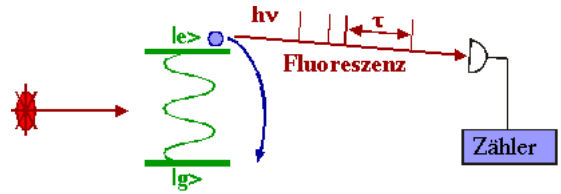


Abbildung 6.10: Fluoreszenzmessung

Zustände mit Antibunching, also Antikorrelation der Photonen erhält man u.a. bei der Resonanz-Fluoreszenz eines einzelnen Atoms. Wenn dieses mit einem Laser resonant angeregt wird, emittiert es spontan Photonen. Die zeitlichen Abstände zwischen diesen Photonen haben eine Verteilung, welche regelmäßiger ist als bei einer klassischen Welle mit konstanter Intensität. Die Wahrscheinlichkeit im Abstand τ nach dem letzten Photon wieder eines zu messen, beträgt

$$P(\tau) = 1 - e^{-(\gamma + \Gamma)\tau/2} \cos(R_0\tau).$$

Hier stellt τ den Abstand zwischen den Photonen dar, R_0 die Rabi-Frequenz, und $\gamma + \Gamma$ die Zerfallsrate.

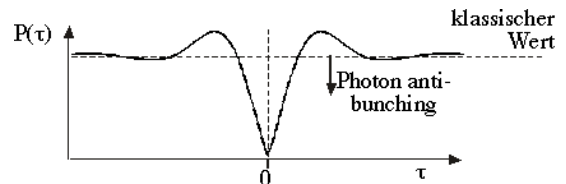


Abbildung 6.11: Antibunching Kurve.

Eine exakte Beschreibung dieses Vorganges müsste natürlich quantenmechanisch erfolgen und ist recht aufwendig. Auf einer qualitativen Ebene kann man aber trotzdem verstehen, wie der Effekt zustande kommt. Damit das Atom ein Photon emittieren kann, muss es sich zunächst im angeregten Zustand befinden. Unmittelbar nach der Emission befindet es sich sicher im Grundzustand und die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines weiteren Photons ist somit null. D.h.

ein einzelnes Atom sendet nie kurz hintereinander zwei Photonen aus.

Dieses Verhalten unterscheidet sich also schon einmal grundsätzlich von dem einer klassischen Welle - die Photonen sind demnach nicht unabhängig voneinander, sondern antikorreliert. Die erwartete Korrelationsfunktion ist in der Figur gezeigt: Die Wahrscheinlichkeit, zwei Photonen unmittelbar nacheinander zu messen, strebt für kurze Abstände τ gegen null. Für längere Zeiten findet man eine Oszillation, welche im Wesentlichen der Rabi Oszillation entspricht und mit den Zerfallsraten des Übergangs gedämpft ist. Für kurze Zeiten erwartet man also ein antibunching, dazwischen gibt es Bereiche positiver Korrelation. Die Anstiegszeit hier ist direkt ein Maß dafür, wie lange das Atom braucht, um wieder in den angeregten Zustand überzugehen und hängt deshalb von der Stärke des Übergangs sowie von der Laserintensität ab.

6.2.5 Experimenteller Nachweis

Bei einem experimentellen Nachweis dieses Effektes besteht das grösste Problem darin, dass mit einzelnen Atomen gearbeitet werden muss, da sonst das Antibunching durch statistische Mittelung verwischt wird.

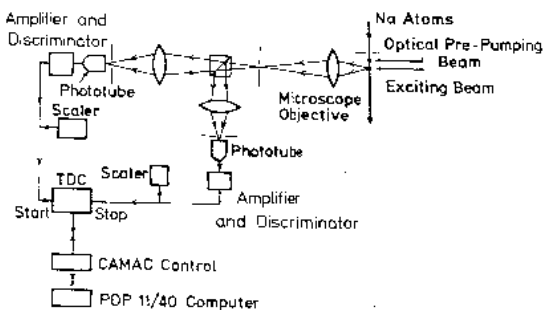


Abbildung 6.12: Experimenteller Aufbau zum Nachweis des Antibunchings in der Resonanzfluoreszenz einzelner Atome.

Dies gelang zum ersten mal der Gruppe von Mandel an der Universität Rochester (H.J. Kim-

ble, M. Dagenais, and L. Mandel, 'Photon Antibunching in resonance fluorescence', Phys. Rev. Lett. 39, 691-695 (1977).). Sie benutzten für ihre Messung einen Atomstrahl mit sehr geringer Intensität. Dadurch wurde es möglich, Messungen durchzuführen, bei denen nur sehr wenige, im Schnitt weniger als ein Atom, gleichzeitig mit dem Laserstrahl in Wechselwirkung trat. Die Fluoreszenzphotonen wurden gesammelt und auf zwei Detektoren geschickt. Die Elektronik diente dann dazu, eine Statistik der zeitlichen Abstände zu erstellen.

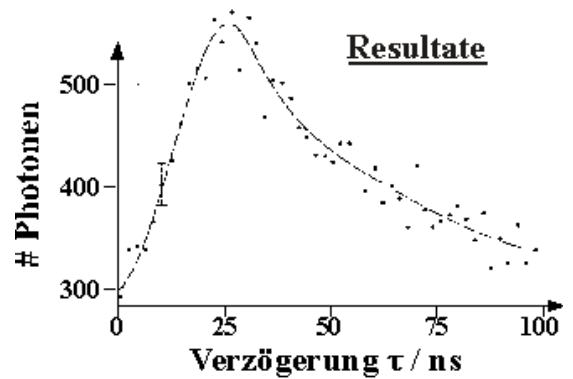


Abbildung 6.13: Experimentelle Photonen-Korrelationsfunktion.

In den experimentellen Resultaten sieht man deutlich das nichtklassische Verhalten für kurze Zeiten, also das antibunching. Für grössere Zeiten sollte die Korrelationsfunktion ja gegen einen konstanten Wert streben, während die experimentellen Daten deutlich abfallen. Hierbei handelt es sich um ein experimentelles Problem: die Atome sind verlassen den Laserstrahl grösstenteils innerhalb einer Zeitspanne von weniger als 100 nsec und tragen deshalb nicht mehr zur Fluoreszenz bei. Ein weiteres Problem ist die Zahl der Atome, welche sich zu einem bestimmten Zeitpunkt. In einem Atomstrahl ist diese Zahl nicht konstant, sondern folgt einer Poisson Statistik. Dies führt zu einem teilweisen Auswaschen des Signals.

6.2.6 Antibunching an gespeicherten Ionen

Beide Probleme, die statistische Verteilung der Anzahl Atome im Laserstrahl, wie auch die endliche Verweildauer, können umgangen werden, indem nicht mit einem Atomstrahl experimentiert wird, sondern mit einzelnen ionisierten Atomen, welche z.B. in einer Paul Falle aufbewahrt werden. Dadurch kann man erreichen, dass genau 1 Ion für eine praktisch unbegrenzte Zeit zur Verfügung steht. Die Messungen können so mit sehr viel höherer Präzision durchgeführt werden.

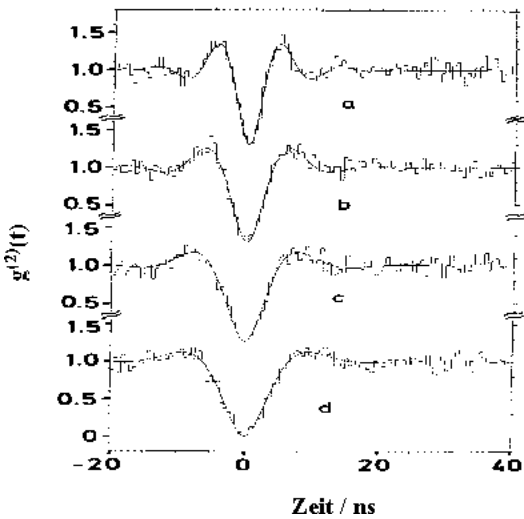


Abbildung 6.14: Antibunching eines gespeicherten Ions.

Messungen dieses Effekts wurden u.a. am MPI für Quantenoptik in Garching bei München durchgeführt. Für dieses Experiment wurde ein einzelnes Barium Atom in einer elektromagnetischen Falle eingefangen und mit einem Laserstrahl angeregt. Die spontan emittierten Photonen wurden gemessen und ihre Korrelationsfunktion gemessen. Die Kurven zeigen die Korrelationsfunktion für eine Reihe unterschiedlicher Laserintensitäten. Man sieht deutlich das antibunching, also die geringe Wahrscheinlichkeit, dass zwei Photonen kurz hintereinander emittiert werden. Auch sonst stimmen die experimentellen Kurven sehr gut mit den gerechneten überein.

Für zunehmende Laser-Intensitäten wird das Antibunching-Loch enger. Dies ist ebenfalls intuitiv leicht verständlich, da es ja dann nach der Emission weniger Zeit braucht, bis das Atom sich wieder im angeregten Zustand befindet und erneut emittieren kann. Mit dem gleichen experimentellen Aufbau konnte auch gezeigt werden, dass die Fluoreszenz sub-Poissonstatistik aufweist. Diese Eigenschaft tritt zwar häufig auf, wenn antibunching vorliegt, ist aber prinzipiell unabhängig davon (R. Short und L. Mandel, Phys. Rev. Lett. 51, 384 (1983).).

6.2.7 Einzelmoleküle in Festkörpern

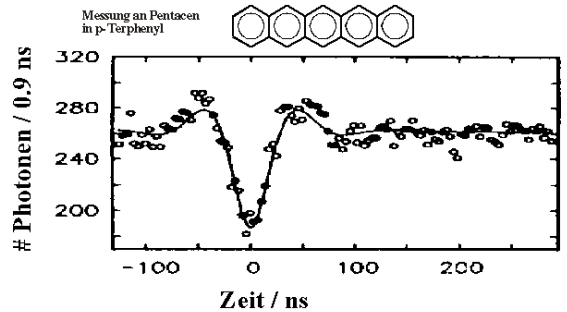


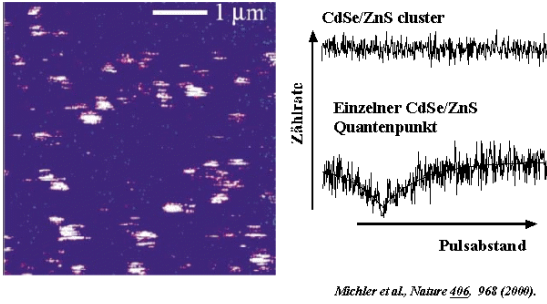
Abbildung 6.15: Antibunching in der Fluoreszenz von Pentacen.

Dieses Phänomen des anti-bunching tritt nicht nur bei Atomen auf, welche sich im Vakuum befinden, sondern genauso bei Molekülen in einem Festkörper (T. Basche, W.E. Moerner, M. Orrit, and H. Talon, 'Photon Antibunching in the Fluorescence of a Single Dye Molecule Trapped in a Solid', Phys. Rev. Lett. 69, 1516-1519 (1992).). Die Messungen wurden an Pentacen durchgeführt, einem aromatischen Molekül, welches eine sehr gute Fluoreszenzausbeute zeigt und damit leicht nachgewiesen werden kann. Das Pentacen-Molekül wurde in eine Matrix aus p-Terphenyl eingebaut, welches einen guten Kristall liefert, der durch die Fremdmoleküle nur wenig gestört wird. Man beobachtet das gleiche Verhalten wie bei den gespeicherten Ionen.

Anstelle von einzelnen Atomen, Ionen oder Molekülen kann man solche Experimente auch mit

”künstlichen Atomen” durchführen. So bezeichnet man Quantenpunkte, also Halbleiterkristalle von wenigen nm Größe.

PL von CdSe/ ZnS quantenpunkten



Michler et al., Nature 406, 968 (2000).

Abbildung 6.16: Lumineszenzbild (links) und Korrelationsmessung (rechts) an CdSe Cluster (oben), resp. an einem einzelnen Quantenpunkt.

Im Falle eines Clusters können viele Anregungen gleichzeitig erzeugt werden. In einem Quantenpunkt jedoch ist nur Platz für eine Anregung. Hier findet man deshalb eine klare Signatur von antibunching.

6.2.8 Der Übergang zu vielen Zentren

Diese Experimente zeigen, dass Antibunching ein wesentlicher Bestandteil der Fluoreszenz von einzelnen Atomen oder Molekülen ist. Im Falle einer Fluoreszenzlampe, deren Licht ebenfalls durch Fluoreszenz entsteht, findet man jedoch ein klassisches Bunching. Der Grund dafür liegt nun nicht bei irgendwelchen Unterschieden im Prozess selber, sondern darin, dass Fluoreszenzlampen nicht nur aus einem Atom bestehen, sondern aus einer sehr großen Zahl. Wie dadurch der antibunching Effekt verschwindet wurde sehr schön von Walther und Mitarbeitern gezeigt indem sie Messungen an einer kleinen Zahl von gespeicherten Ionen vornahm. Je größer die Anzahl der Ionen (Atome, Moleküle), die zum Signal beitragen, desto geringer ist der Einfluss der Emission eines einzelnen Photons auf die Besetzungswahrscheinlichkeit. Im Grenzfall vieler Teilchen wird

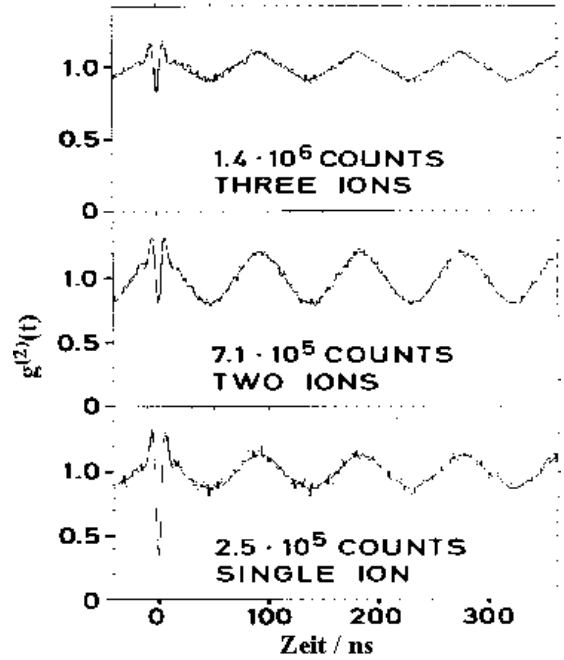


Abbildung 6.17: Abhängigkeit des Antibunching Verhaltens von der Zahl der Ionen.

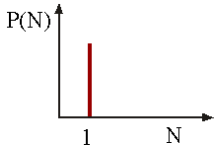
sie nicht mehr beeinflusst. Die einzelnen Photonen werden von verschiedenen Teilchen erzeugt. Sie sind damit unabhängig voneinander und man erhält eine Poisson-Statistik.

6.3 Experimente mit einzelnen Photonen

6.3.1 Motivation und Grundlagen

Die quantenmechanische Natur des Lichtes wird natürlich dann besonders deutlich, wenn das Feld von genau einem Photon besetzt ist. Um Experimente mit einzelnen Photonen durchführen zu können, kann man aber nicht einfach eine gewöhnliche Lichtquelle verwenden, und diese genügend abschwächen, da durch das ’bunching’, also die Tendenz der Photonen, in Gruppen aufzutreten, die Wahrscheinlichkeit für das gleichzeitige Eintreffen mehrerer Photonen zu groß wird. Mit chaotischem Licht erhält man deshalb

in einem solchen Experiment nie ein Verhalten, das klassisch nicht erklärbar wäre.



Photonen als Teilchen

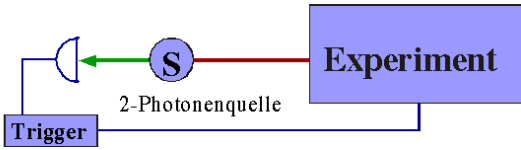


Abbildung 6.18: Experimente mit einzelnen Photonen

Es ist jedoch möglich, einzelne Photonen zu erzeugen auf eine Weise, dass man genau weiss, wann sich ein (und nur eines!) Photon im Experiment befindet. Dazu verwendet man eine Lichtquelle, welche Photonen in Paaren erzeugt, welche unter einem gegebenen Winkel auseinanderfliegen. Wenn eines dieser Photonen beobachtet wird weiß man, dass sich in diesem Moment das andere Photon in der Messapparatur befindet. Es gibt verschiedene Lichtquellen, welche diese Forderung erfüllen. Eine Gruppe vom Institut d'Optique in Orsay hat dafür eine sogenannte atomare Kaskade benutzt (P. Grangier, G. Roger, and A. Aspect, Europhys. Lett. 1, 173 (1986).). Die zweite Gruppe, von der Universität Rochester, benutzte parametrische Fluoreszenz in einem optisch nichtlinearen Kristall (C.K. Hong and L. Mandel, Phys. Rev. Lett. 56, 58 (1986).).

Einzelphotonen können z.B. verwendet werden um die Frage zu untersuchen ob Licht Wellen- oder Teilchencharakter hat.

Schickt man das einzelne Photon auf einen gewöhnlichen Strahlteiler, so kann es natürlich nur einmal detektiert werden. Man erwartet deshalb bei einem solchen Aufbau eine perfekte Antikorrelation der beiden Detektoren, und das findet man auch experimentell. Dieses Experiment "belegt" somit den Teilchencharakter eines Photons:

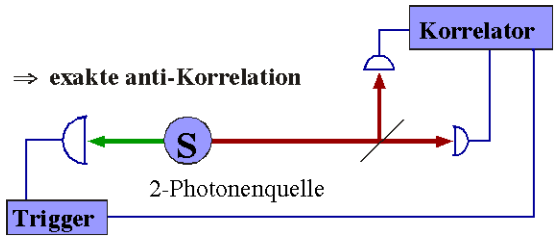


Abbildung 6.19: Exakte anti-Korrelation an einem Strahlteiler: Photonen sind nicht-teilbare Teilchen!

es "entscheidet" am Strahlteiler ob es transmittiert oder reflektiert wird.

Mit einem fast identischen Aufbau kann man aber auch den Wellencharakter einzelner Photonen nachweisen.

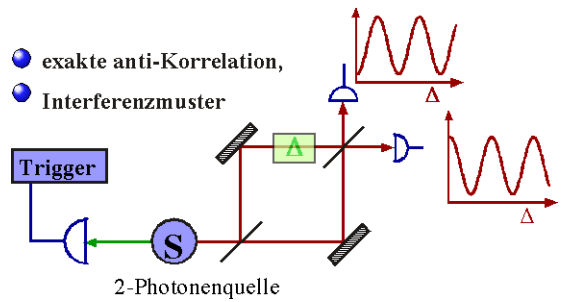


Abbildung 6.20: Mach-Zehnder Interferometer mit Korrelationsmessung: Photonen sind Teilchen und Welle!

Mit einem zweiten Strahlteiler und zwei Spiegeln entsteht ein Interferometer. Durch Variation des optischen Weges in einem der beiden Arme kann man auf dem Detektor ein Interferenzmuster erzeugen, welches nur zustande kommen kann, wenn das Photon durch beide Arme des Interferometers läuft. Ein einzelnes Photon hat somit auch einen Wellencharakter. Diese beiden Experimente lassen sich deshalb weder mit einem reinen Wellenbild, noch mit einem reinen Korpuskelbild interpretieren: am ersten Strahlteiler geht das Photon offenbar in beide Richtungen gleichzeitig, am zweiten entscheidet es sich für eine der beiden Möglichkeiten.

6.3.2 Erzeugung von Fock-Zuständen

Zustände mit einzelnen Photonen können verallgemeinert werden zu Zahlzuständen, welche auch als Fock-Zustände bezeichnet werden. Prinzipiell können diese auf die gleiche Weise wie die Einzelphotonenzustände erzeugt werden. Allerdings ist die zeitliche Statistik nicht vorhersagbar.

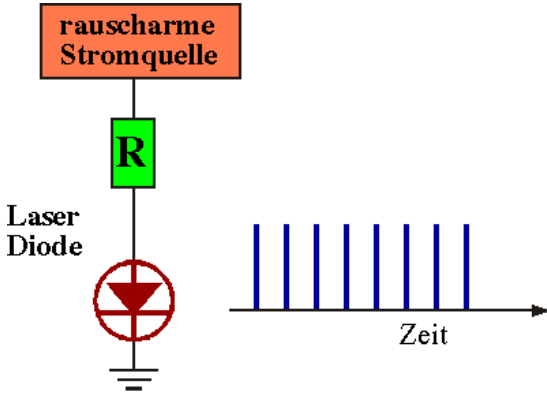


Abbildung 6.21: Sub-Poisson Licht aus einem Halbleiterlaser.

Wahrscheinlich die einfachste Methode, um Licht mit sub-Poisson Statistik zu erzeugen besteht darin, zunächst einen elektrischen Strom mit sub-Poisson Statistik zu erzeugen. Mit einem perfekten Halbleiterlaser (Quantenausbeute = 100%) könnte die entsprechende Elektronenstatistik direkt auf die Photonenstatistik übertragen werden. Heute sind Ausbeuten in der Größenordnung von 60-80% erreichbar, so dass ein wesentlicher Teil der Statistik übertragen werden kann.

Der Umweg über die Erzeugung eines rauscharmen Stroms lohnt sich deshalb, weil ein Strom mit sub-Poisson Statistik sehr viel leichter zu erzeugen ist, als ein entsprechender Lichtstrahl. Der Grund hängt damit zusammen, dass Elektronen Fermionen sind und deshalb einer anderen Statistik unterliegen, als Photonen. Die Aufteilung eines Lichtstrahls mit sub-Poisson Statistik an einem Strahlteiler, z.B., erhöht die relativen Fluktuationen in Richtung Poisson-Statistik, während die Aufteilung eines Stroms am Knoten eines elektrischen Netzwerkes das Rauschen auch

relativ verringert. Außerdem ist es heute möglich, mit Einzelelektron-Gattern einzelne Elektronen zu transportieren und so eine beliebige Statistik zu erzielen, wie z.B. Elektronen in konstanten Abständen.

Literatur: A. Imamoglu and Y. Yamamoto, 'Turnstile device for heralded single photons: Coulomb blockade of electron and hole tunneling in quantum confined p-i-n heterojunctions', Phys. Rev. Lett. 72, 210-213 (1994); J. Kim, O. Benson, H. Kan, and Y. Yamamoto, 'A single-photon turnstile device', Nature 397, 500-503 (1999).

6.3.3 Das Einstein-Podolsky-Rosen Paradox

Nichtklassische Korrelationen spielen eine wichtige Rolle in einem der berühmtesten Paradoxa der Quantenmechanik. Es wurde zuerst von Einstein, Podolsky und Rosen aus dem Jahre 1935 (A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, 'Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete?', Phys. Rev. 47, 777 (1935).). Darin konstruierten sie ein Gedankenexperiment, welches zeigen sollte, dass die Quantenmechanik keine vollständige Theorie sei. Dieser Einwand konnte die weitere Entwicklung der Quantenmechanik zwar nicht aufhalten, aber er wirkte doch sehr beunruhigend und inspirierte viele Versuche, diese Unvollständigkeit zu korrigieren, indem sogenannte verborgene Variablen eingeführt wurden.

John Bell gelang es, den Widerspruch zwischen den Voraussagen der Quantenmechanik und einer sehr allgemeinen Gruppe von klassischen Theorien in eine Ungleichung zu fassen und damit eine mathematische Grundlage für experimentelle Tests zu schaffen. Die Anforderungen, welche er an die klassischen Theorien stellte waren lediglich dass sie lokal im Sinne der Relativitätstheorie sein sollten, sowie "realistisch" im Sinne von EPR, d.h. dass physikalische Eigenschaften wie z.B. die Orientierung eines Spins unabhängig von der Messapparatur definiert sein sollten. Aus

diesen sehr allgemeinen Anforderungen konnte er zeigen, dass verborgene Variablen nicht beliebige Messresultate erklären können, sondern dass alle Theorien, welche als realistisch und lokal bezeichnet werden können, nur Messresultate innerhalb bestimmter Schranken erklären können. Diese Schranken werden durch Ungleichungen spezifiziert, welche allgemein als Bell'sche Ungleichungen bezeichnet werden.

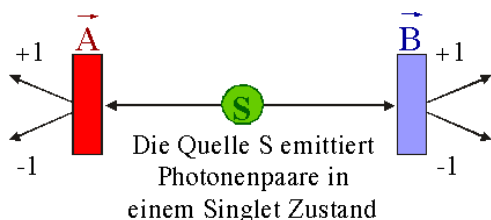


Abbildung 6.22: Gedankenexperiment von Einstein, Podolsky und Rosen.

Überträgt man das Gedankenexperiment von EPR auf ein Paar von korrelierten Photonen so eignet sich besonders ein antikorreliertes Paar in einem Singlet-Zustand. Hier sind die einzelnen Spins nicht definiert, die Messung eines Spins legt jedoch sofort den anderen Spin fest. Führt man gleichzeitig an beiden Photonen Messungen der Spin-Orientierung durch indem man sie durch einen Polarisator schickt, so erwartet man offensichtlich dass die Koinzidenzrate als Funktion der unterschiedlichen Orientierung der beiden Polarisatoren mit

$$\frac{R(\alpha - \beta)}{R_0} = \frac{1}{4}[1 + \cos(2(\alpha - \beta))]$$

variiert: sie ist maximal bei paralleler Stellung und verschwindet bei gekreuzten Polarisatoren. R_0 ist die Koinzidenzrate ohne Polarisatoren.

6.3.4 Verletzung der Bell'sche Ungleichungen für Photonpaare

Aus dem Bell'schen Ungleichungen ergibt sich, dass z.B. für

$$|R(22.5^\circ) - R(67.5^\circ)| \leq \frac{1}{4}.$$

Quantenmechanisch findet man

$$|R(22.5^\circ) - R(67.5^\circ)| = \frac{1}{4}\left[1 + \frac{1}{\sqrt{2}} - \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\right)\right] = \frac{\sqrt{2}}{4} = 0.354 > 0.25,$$

also einen klaren Widerspruch. Ob die Natur den Gesetzen der Quantenmechanik gehorcht oder lokal und realistisch ist muss experimentell untersucht werden.

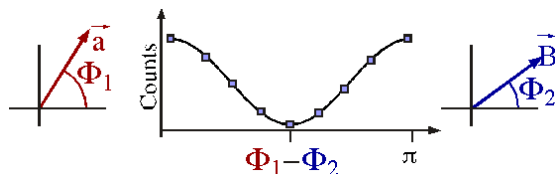


Abbildung 6.23: Ergebnis der Experimente Aspects.

Verschiedene solche Tests wurden durchgeführt, die meisten in enger Anlehnung an das ursprüngliche Gedankenexperiment. Es wurden optische Photonen, γ -Quanten, aber auch Protonen verwendet. Eines dieser Experimente wurde vor etwa 1981 Jahren von einer Gruppe der Université Paris-Sud mit einem experimentellen Aufbau durchgeführt, welcher auf dem gleichen Prinzip basiert wie die vorhin besprochenen Einphotonenexperimente. Die 2-Photonenquelle emittierte in diesem Fall Photonen in einem Singletzustand, sodass eine Korrelation zwischen den Photonspins bestand. Die beiden Photonen wurden durch zwei Polarisatoren geschickt. Dahinter wurden die Zählraten als Funktion der Orientierung dieser Polarisatoren gemessen. Quantenmechanisch erwarte man einen sinusförmigen Verlauf der Koinzidenz-Zählrate als Funktion des relativen Drehwinkels zwischen den beiden Polarisatoren. Eine solche Abhängigkeit von der relativen Orientierung verletzt die Bell'schen Ungleichungen und schließt damit eine Erklärung aufgrund lokaler realistischer Theorien aus.

Die experimentellen Resultate, welche hier skizziert sind, waren in ausgezeichneter Übereinstimmung mit den quantenmechanischen Voraussagen und verletzten die Bell-Ungleichung um viele Standardabweichungen. Ähnlich Messungen

wurden inzwischen von vielen anderen Gruppen wiederholt. Insgesamt konnten diese Experimente klar belegen, dass die Quantenmechanik korrekt ist und dass die beobachteten Phänomene nicht mit lokalen, realistischen Theorien übereinstimmen können.

6.4 Gequetschtes Licht

6.4.1 Unschärfe von Feldamplituden

Betrachtet man die Darstellung von Erzeugungs- und Vernichtungsoperator in der Basis der Zahlzustände

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle,$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle,$$

so sieht man, dass diese beiden Operatoren nicht miteinander vertauschen:

$$aa^\dagger|n\rangle = (n+1)|n\rangle,$$

$$a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle,$$

d.h.

$$[a, a^\dagger] = 1.$$

Daraus folgt auch, dass die Feldamplituden nicht miteinander vertauschen,

$$[E_c, E_s] \neq 0.$$

Allgemein findet man dass die Heisenberg'sche Unschärfenrelation für zwei Quadraturamplituden einer einzelnen Mode lautet

$$\sqrt{\langle \Delta E^2(0) \rangle \langle \Delta E^2(\phi) \rangle} \geq \frac{1}{4} \epsilon_c^2 |\sin \phi|.$$

Hier stellt ϕ die Phase des Feldoperators dar und ϵ_c das Feld eines Photons. Für einen kohärenten Zustand ist die Unschärfe unabhängig von der Phase. Da es sich um einen Zustand minimaler Unschärfe handelt, gilt somit

$$\langle \Delta E^2(\phi) \rangle_{coh} = \frac{1}{4} \epsilon_c^2.$$

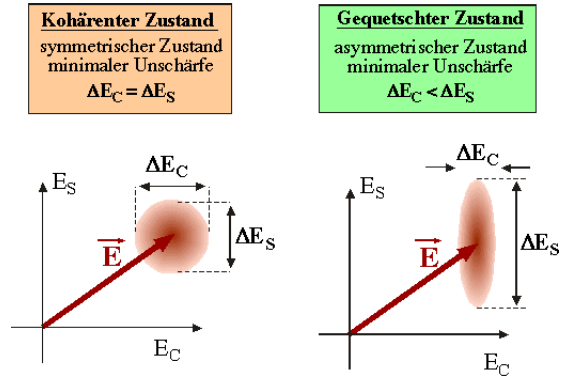


Abbildung 6.24: Unsicherheit für kohärenten und gequetschten Zustand.

Dies stellt den so genannten "standard quantum limit" dar, also die Grenze für die Genauigkeit, mit der eine elektrische Feldkomponente gemessen werden kann.

Die Unschärfe muss jedoch nicht symmetrisch verteilt sein. Zustände mit asymmetrisch verteilter Unschärfe haben den Namen "gequetschte Zustände" (engl.: "squeezed states") erhalten: die Unschärfe wird in eine Richtung reduziert, in die andere Richtung vergrößert. Ihre Eigenschaft kann am besten durch einen graphischen Vergleich mit einem kohärenten Zustand charakterisiert werden. In Abbildung 6.24 ist auf der linken Seite ein kohärenter Zustand dargestellt. Wie bereits erwähnt, ist dies der Zustand, der einer klassischen Welle am nächsten kommt. Diese Scheibe soll wiederum die Unschärfe des Zustandes andeuten; ihre Fläche ist durch die Heisenberg-Beziehung bestimmt. Ein Beispiel für einen gequetschten Zustand, welcher ebenfalls die Heisenberg-Beziehung erfüllt, ist rechts dargestellt: in diesem Fall wurde die Unschärfe der cos-Komponente auf Kosten der sin Komponente verkleinert oder zusammengequetscht.

In kohärenten Zuständen sind die Photonen statistisch nicht korreliert. Wenn die Unschärfe in einer Richtung kleiner ist als bei einem kohärenten Zustand, können diese Felder also nicht mehr aus unabhängigen Photonen bestehen. Squeezing entsteht deshalb aus Korrelationen zwischen Photonen-Paaren.

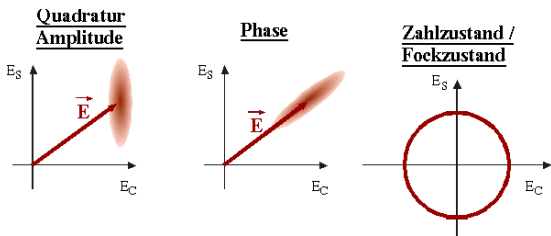


Abbildung 6.25: Eine Auswahl nichtklassischer Zustände.

Licht kann auf unterschiedliche Weise gequetscht werden, wobei die entsprechenden Rauscheigenschaften für unterschiedliche Experimente nützlich sein können. Zustände mit reduziertem Rauschen einer Quadraturamplitude sind z.B. interessant für kohärente optische Kommunikation. Eine andere Möglichkeit ist reduziertes Phasenrauschen. Solche Zustände sind z.B. für interferometrische Messungen interessant.

Zahlzustände (Fockzustände) sind Zustände mit reduzierten Intensitätsfluktuationen. Dafür ist die Phase dieser Zustände völlig unbestimmt. Solche Zustände eignen sich z.B. für hochempfindliche Absorptionsmessungen, da hier die Phase nicht relevant ist und sie durch das Schrotrauschen begrenzt sein können, welches in Fockzuständen eliminiert wird.

6.4.2 Erzeugung

Die Erzeugung von gequetschtem Licht ist in der Theorie relativ einfach. Man benutzt dafür einen 'squeezing' Operator.

Dieser hat im einfachsten Fall die Form

$$e^{ra^2 - r^* a^{\dagger 2}},$$

d.h. er enthält die zweite Potenz des Erzeugungs- und Vernichtungsoperators. Photonen werden somit in Paaren erzeugt, resp. vernichtet. Der Squeezing-Parameter r misst den Grad des squeezing.

Für das Experiment bedeutet dies, dass man nichtlineare optische Prozesse verwenden muss,

Theorie: Quetschen des Vakuumzustandes

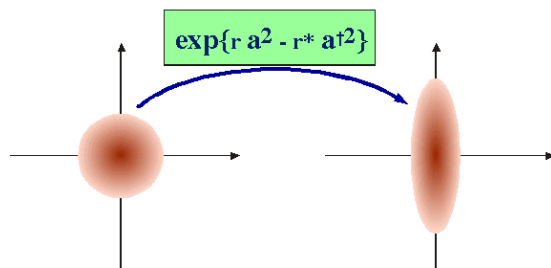


Abbildung 6.26: Quetschen des Vakuumzustandes.

um das Licht zu 'quetschen'. Dazu braucht man natürlich ein entsprechendes Medium. In den bisher realisierten Experimenten benutzte man dazu entweder nichtlineare dielektrische Kristalle, oder aber resonante atomare Medien. Prinzipiell kann aber bei praktisch jedem nichtlinear optischen Prozess "squeezing" entstehen. Man kann deshalb davon ausgehen, dass gequetschtes Licht in vielen Fällen entsteht ohne dass die Erzeuger es bemerken. In vielen Fällen wird es durch klassische Fluktuationen überdeckt.

Experiment: Nichtlineare Optik z. B. Intensitätsabhängige Phasenverschiebung

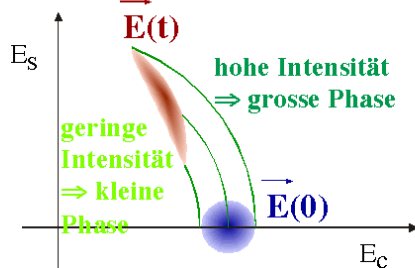


Abbildung 6.27: Quetschen als nichtlineare Transformation.

Ein möglicher Weg zu gequetschtem Licht, der besonders anschaulich erklärt werden kann, beruht auf dem optischen Kerr Effekt, einer intensitätsabhängigen Phasenverschiebung. Man geht von einem kohärenten Zustand aus, hier im Bild als runde Scheibe dargestellt. Läuft dieses Licht durch ein Kerr Medium, so erfährt es je nach Intensität eine unterschiedlich große Phasenverschiebung - in diesem Diagramm also eine Dre-

hung um den Ursprung des Koordinatensystems. Diejenigen Teile dieser Scheibe, welche hohen Intensitäten entsprechen, also die äußeren Teile, erfahren dabei die größere Phasenverschiebung, werden also in dieser Darstellung weiter gedreht als der Teil näher beim Ursprung des Koordinatensystems. Auf diese Weise erhält man einen Zustand erzeugt, der in einer Richtung eine kleinere Unschärfe aufweist, als der kohärente Zustand.

Die Fläche dieser Kreisscheibe, also die gesamte Unschärfe des Zustandes ist unabhängig von der Entfernung vom Ursprung. Squeezing kann also bei allen Intensitäten auftreten, was natürlich eine wesentlich Voraussetzung für die Erzeugung von gequetschten Zuständen über nichtlinear optische Prozesse darstellt.

6.4.3 Parametrischer Oszillator

Der am häufigsten benutzte Prozess, um gequetschtes Licht herzustellen, benutzt einen parametrischen Oszillator.

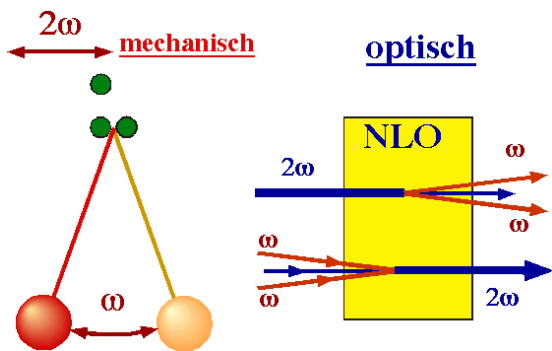


Abbildung 6.28: Parametrischer Oszillator

Den parametrischen Oszillator kann man auch mechanisch realisieren. Das entsprechende Modell besteht im Wesentlichen aus einem gewöhnlichen Pendel, dessen Pendellänge periodisch verkürzt und verlängert werden kann. Wie einem gewöhnlichen Pendel kann man auch diesem Pendel resonant Energie zuführen. In diesem Fall geschieht die, indem man die Pendellänge periodisch ändert. Die Resonanzbedingung ist dabei anders als bei einer direkten Anregung: man

muss die Pendellänge mit der doppelten Pendelfrequenz modulieren. Es gibt außerdem noch einen wesentlichen Unterschied: wenn das Pendel zu Beginn nicht ausgelenkt ist, so kann es auch keine Energie aufnehmen. Das parametrische Pendel wird nur angeregt wenn es bereits ausgelenkt ist. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die Dynamik dieses Pendels nichtlinear ist; parametrische Prozesse erfüllen deshalb eine Voraussetzung für die Erzeugung von gequetschtem Licht.

Das optische Analogon dieses mechanischen Modells besteht aus zwei gekoppelten Moden des Strahlungsfeldes, wobei die Frequenz der einen Mode doppelt so groß ist wie die der anderen. Durch die Kopplung, welche über ein optisch nichtlineares Medium geschieht, ist es möglich, z.B. ein blaues Photon in zwei rote Photonen mit der halben Energie umzuwandeln. Auch der umgekehrte Prozess ist möglich, nämlich die Umwandlung von zwei roten Photonen in ein blaues mit der doppelten Energie.

Für den Zweck dieser Betrachtungen spielt es keine Rolle, wie diese Prozesse im Detail ablaufen. Wesentlich ist praktisch nur, dass es sich um nichtlineare Prozesse handelt. Lineare optische Prozesse führen nämlich kohärente optische Zustände in andere kohärente Zustände über. Nichtlineare Prozesse, hingegen, können zu einer Verzerrung der Form des Zustandes führen und damit squeezing ermöglichen.

6.4.4 Messung

Mindestens so schwierig wie die Erzeugung von gequetschtem Licht ist dessen Nachweis.

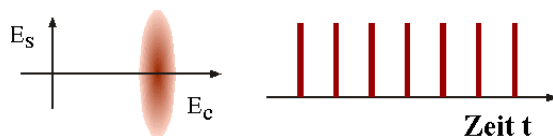


Abbildung 6.29: Photonenzählung: Antibunching.

Am einfachsten ist dies, wenn der Zustand in

Richtung der kohärenten Anregung gequetscht ist, wie in diesem Beispiel dargestellt. Offensichtlich ist in diesem Fall die Intensität 'gequetscht'. Dies kann man in einem Photonen-Korrelationsexperiment nachweisen, da ein solcher Zustand eine sub-Poisson Statistik ergibt: die Photonen zeigen "antibunching", d.h. sie kommen in regelmäßigeren Abständen an, als bei einer klassischen Welle möglich wäre.

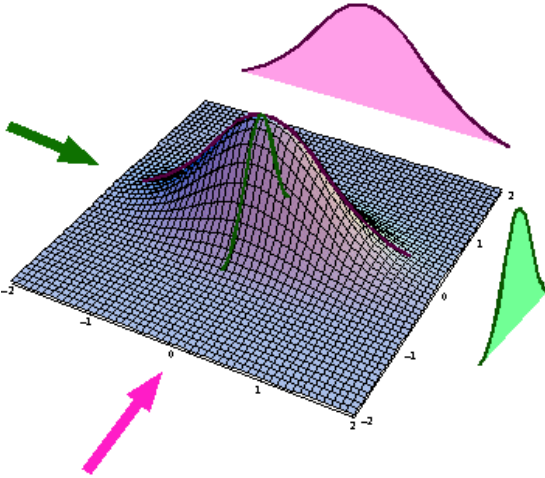


Abbildung 6.30: Tomographie eines gequetschten Zustandes.

Bei einer allgemeinen Orientierung des gequetschten Zustandes wird die Photonenzahlstatistik eher super-Poisson sein. Die gemessene Unschärfe der Photonenzahl δn kann als Interferenz der Amplitudenunschärfe δE mit der kohärenten Anregung E verstanden werden:

$$\delta n = |E \delta E|,$$

d.h. als Projektion auf die Richtung der kohärenten Anregung.

Um hier die gequetschte Unschärfe zu sehen, muss man eine phasenempfindliche Messmethode anwenden: Der Zustand wird auf eine andere Achse projiziert als auf die Richtung der Anregung.

6.4.5 Heterodyn-Detektion

Dies ist möglich mit Hilfe eines sogenannten Heterodyn Nachweises. Dabei wird dem zu messenden Signal ein starkes zusätzliches Feld überlagert, der sogenannte Lokalszillator:

$$E = E_{sig} + E_{lo}.$$

Das Signal ist proportional zur Intensität und damit zu

$$\begin{aligned} |E|^2 &= |E_{sig} + E_{lo}|^2 \\ &= |E_{sig}|^2 + 2\text{Re}\{E_{sig}E_{lo}^*\} + |E_{lo}|^2. \end{aligned}$$

Der mittlere Term hängt von der relativen Phase von Signal- und LO-Feld ab:

$$2\text{Re}\{E_{sig}E_{lo}^*\} = 2|E_{sig}||E_{lo}|\cos(\phi_{sig} - \phi_{lo}).$$

In den meisten Fällen verwendet man für den Lokalszillator eine andere Frequenz als für das Signal. Damit wird der zweite Term zeitabhängig: er oszilliert mit der Differenzfrequenz zwischen den beiden Feldern. Dadurch kann er leicht von den beiden anderen Termen abgetrennt werden, welche zeitunabhängig sind.

Betrachtet man dieses Heterodynsignal als eigentliche Messgröße, so sieht man, dass es proportional zur Feldstärke des Lokalszillators ist. Über die Phase ϕ_{lo} kann ausgewählt werden, welche Komponente des Signals beobachtet wird: es erfolgt eine Projektion auf die Richtung des Lokalszillators. Je nach Wahl der Phase kann man also die minimalen oder maximalen Fluktuationen messen.

Werden Signal und Lokalszillator auf einem 50/50 Strahlteiler überlagert, so erhält man in den beiden Ausgängen zwei Überlagerungen, deren relative Phasen sich um 180 Grad unterscheiden. Damit besitzt der Interferenzterm auf den beiden Detektoren ein unterschiedliches Vorzeichen, während die Terme, die nur von einem Strahl stammen, gleiches Vorzeichen besitzen. Eine Differenzmessung ergibt somit ein Signal, das nur den Interferenzterm (=Heterodyn Term) enthält.

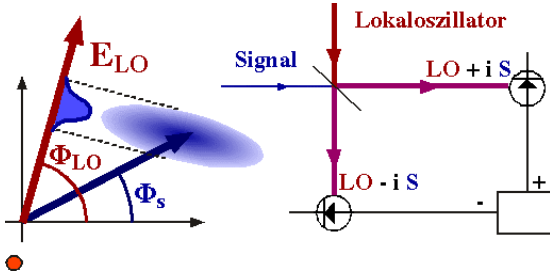


Abbildung 6.31: Heterodyn Nachweis eines gequetschten Zustandes mit allgemeiner Phase.

Zusätzlich zum kohärenten Signal misst man auch Rauschen. Klassisches Rauschen des Lokaloszillators ist auf beiden Detektoren identisch und wird deshalb bei der Differenzbildung eliminiert. Das Schrotrauschen des Lokaloszillators ist hingegen auf den beiden Detektoren antikorreliert, da die Photonen nur auf dem einen oder anderen Detektor eintreffen können. Die Differenzbildung addiert deshalb die beiden Beiträge. Die Messung mit einem Strahlteiler und einem Differenzdetektor ermöglicht deshalb im Allgemeinen eine Messung des Schrotrauschens.

Die Überlagerung des gequetschten Signalstrahls über den Lokaloszillator ändert die Rauscheigenschaften:

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = 4|\alpha_L|^2 \langle [\Delta E(\phi)]^2 \rangle.$$

Hier stellt $|\alpha_L|$ die Amplitude des Lokaloszillators dar und $\Delta E(\phi)$ die Fluktuation des Signalstrahls in der durch die Phase ϕ bestimmten Richtung.

Ist der Signalstrahl der Vakuumzustand (d.h. kein Licht) oder ein anderer kohärenter Zustand, so ist

$$\langle (\Delta n)^2 \rangle = |\alpha_L|^2 \epsilon_c^2.$$

Hier stellt ϵ_c^2 die Feldamplitude der Grundzustandsschwankungen dar.

Fällt statt dessen gequetschtes Licht auf den Strahlteiler, so kann das Rauschen kleiner oder größer werden. Ändert man die Phase des Lokaloszillators, so kann man sämtliche Quadraturkomponenten des Signalfeldes messen.

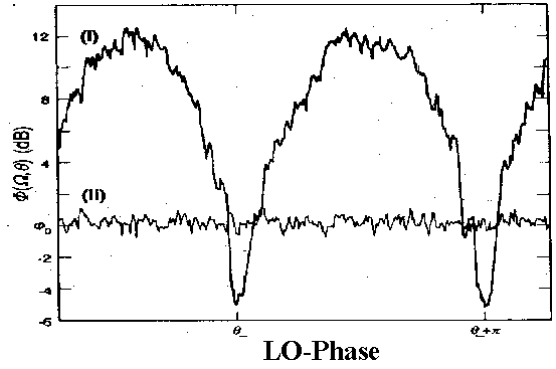


Abbildung 6.32: Rauschsignale als Funktion der LO-Phase.

Die konstante Spur (II) zeigt das Rauschen ohne Signalfeld, die Spur (I) das Rauschen mit Signalfeld als Funktion der Phase des lokalen Oszillators. Squeezing erkennt man hier ganz einfach daran, dass das gemessene Rauschen bei einer geeigneten Phase kleiner ist als ohne Signalfeld. Dies zeigt noch einmal deutlich die nichtklassische Natur des Lichtes: Klassisch addieren sich die Rauschleistungen unabhängiger Signale immer; hier findet man aber eine niedrigere Rauschleistung, wenn man das Signal einschaltet, als wenn es verschwindet. Quantenmechanisch drückt man dies so aus, dass, wenn das Signal hier nicht einfällt, dieser Eingang nicht einfach leer ist im klassischen Sinn, sondern dass in diesem Fall der Vakuumzustand hier einfällt - und dieser hat selber ein Rauschen, nämlich aufgrund der Grundzustandsenergie des harmonischen Oszillators.

6.4.6 Squeezing an Na

Die erste experimentelle Beobachtung eines gequetschten Zustandes wurde von den Bell Labs publiziert. Die Gruppe benutzte dazu Vierwellenmischung an einem Natrium Atomstrahl. Um die Effekte zu verstärken, wurde das Experiment in einem optischen Resonator durchgeführt. Ein starker Pumpstrahl dient dazu, das Medium in einen nichtlinearen Bereich zu treiben, sodass das squeezing auf dem zweiten, wesentlich schwächeren Strahl erfolgen kann.

Vierwellenmischung an einem Na-Atomstrahl

R.E. Slusher, L.W. Hollberg, B. Yurke, J.C. Mertz, and J.F. Valley,
Phys. Rev. Lett. **32**, 2409 (1965).

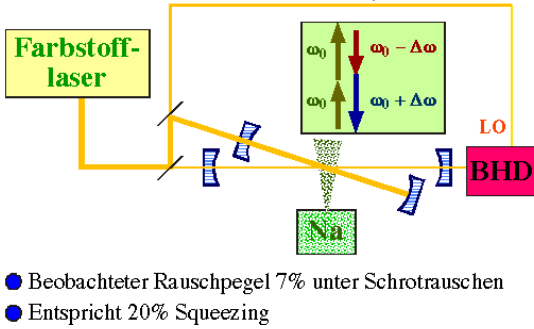


Abbildung 6.33: 4-Wellenmisch Experiment an einem Na-Atomstrahl.

Durch die nichtlineare Wechselwirkung zwischen den optischen Moden und den Na Atomen werden zwei Photonen des Pumpstrahls in zwei Seitenbandphotonen umgewandelt, d.h. in Photonen, deren Energie gegenüber dem Pumplicht um einen Betrag $\Delta\omega$ verschoben ist. Dadurch entsteht also eine Korrelation zwischen diesen Photonen, welche letztlich zum squeezing Effekt führt.

Die Signalwelle wurde, wie oben gezeigt, in einen Heterodyn-Detektor gebracht, welcher zur Analyse des Amplitudenrauschens benutzt wurde. Als Lokaloszillator wurde ein Teilstrahl des gleichen Lasers verwendet. Die Gruppe maß eine Reduktion des Rauschens unter die Schrotrauschgrenze um 7%. Daraus kann man, unter Berücksichtigung der Detektorempfindlichkeiten, auf das Squeezing zurückrechnen und erhält eine Zahl von rund 20%. Maximales Squeezing sollte für hohe Leistungen erreicht werden, aber andererseits wird natürlich der Nachweis bei hohen Leistungen um so schwieriger.

6.4.7 Anwendung: Interferometrie

Die ersten experimentell demonstrierten Anwendungen von gequetschtem Licht stammen zum einen ebenfalls aus den Bell Labs, zum andern aus Texas. Dass interferometrische Experimente mit Hilfe von gequetschtem Licht höhere Empfindlichkeiten erreichen können, war seit länge-

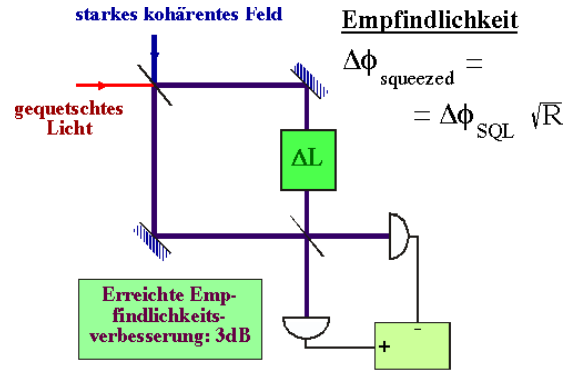


Abbildung 6.34: Interferometrie mit gequetschtem Licht

rem bekannt und eine der stärksten Motivationen für die Arbeiten auf diesem Gebiet. Der hier gezeigte Aufbau entspricht im Wesentlichen einem Mach-Zehnder Interferometer, also einem Gerät zur genauen Messung von Distanzunterschieden. Der Messtrahl wird an einem ersten Strahlteiler aufgeteilt und die beiden Teilstrahlen auf einem zweiten Strahlteiler wieder zusammengeführt. Je nach Weglängenunterschied fällt der Strahl hinter diesem Strahlteiler auf den einen oder anderen Detektor. Wie beim gewöhnlichen Heterodyn-Nachweis ist das resultierende Rauschen des Detektors durch das Quantenrauschen des schwachen Strahls beschränkt, welcher am ersten Strahlteiler dem starken Messtrahl überlagert wird. In einem gewöhnlichen Mach-Zehnder Interferometer befindet sich diese Mode im Vakuumzustand, d.h. man erhält im Idealfall ein Schrotrausch-limitiertes Signal. Wenn man statt dessen einen gequetschten Zustand einfallen lässt, erhält man ein Rauschen, das um den Betrag \sqrt{R} kleiner ist, wobei R das squeezing parametrisiert. $R = 1$ entspricht einem kohärenten Zustand, z.B. dem Vakuumzustand, $R = 0$ einem perfekt gequetschten Zustand.

Mit einem solchen Aufbau gelang es 1987 zwei Gruppen, interferometrische Messungen unterhalb der Schrotrauschgrenze durchzuführen. Die mittlere Spur stellt das Rauschen ohne gequetschtes Licht dar, d.h. mit dem Vakuumzustand am zweiten Eingang. Die beiden durch-

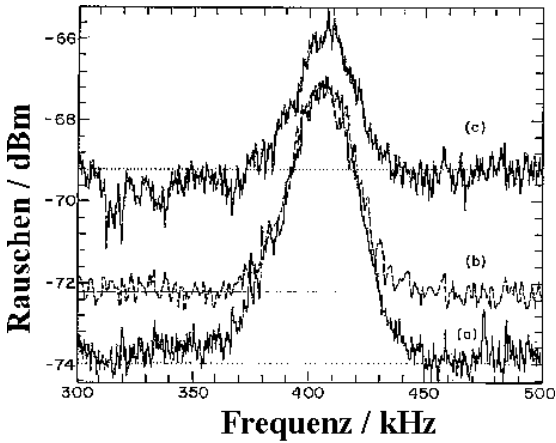


Abbildung 6.35: Empfindlichkeitssteigerung in der Interferometrie.

gezogenen Kurven entsprechen zwei Quadraturamplituden des gequetschten Zustandes, welche eine Erniedrigung, resp. Erhöhung des Rauschens zeigen. In diesem Beispiel wurden 2 dB, in anderen Experimenten auch mehr Rauschunterdrückung erreicht. Die erhöhte Rauschleistung bei 400 kHz ist ein Störsignal, welches dadurch zustande kommt, dass mit 400 kHz die Polarisation rotiert wird.

Andere interferometrische Messungen, welche bereits an der Schrotrauschgrenze durchgeführt werden und somit von solchen Experimenten profitieren könnten, umfassen Lasergyroskope oder phasenempfindliche Detektoren in der kohärenten optischen Kommunikation. Ein wesentliches Problem bei solchen Experimenten ist immer die Tatsache, dass gequetschte Zustände sehr empfindlich sind. Jegliche Art von Verlusten, wie z.B. nicht 100% effiziente Detektoren, vermindern das effektive Squeezing. Wenn man einen perfekten Zahlzustand, also einen Zustand mit wohldefinierter Photonenzahl und damit verschwindenden Intensitätsschwankungen, auf einen Detektor mit einer Quantenausbeute von 50% misst, erhält man das gleiche Rauschen wie bei einem kohärenten Zustand mit der gleichen mittleren Photonenzahl - d.h. dadurch ist der gesamte squeezing-Effekt verschwunden.

6.4.8 Gravitationswellen

Eine der Anwendungen, welche möglicherweise stark von gequetschtem Licht profitieren könnte ist der Nachweis von Gravitationswellen. Die allgemeine Relativitätstheorie erklärt ja die Schwerkraft als eine Verzerrung des Raumes. Bewegte Massen sollten deshalb zu zeitlich veränderlichen Verzerrungen führen, die sich außerdem durch den Raum ausbreiten. Diese Gravitationswellen sind bisher aber erst theoretisch vorausgesagt worden; der experimentelle Nachweis ist sehr aufwendig, denn die theoretisch vorausgesagten Längenänderungen sind sehr klein. Diejenigen Prozesse, welche die größten Effekte erzeugen sollten, sind astrophysikalische Vorgänge, bei denen große Massen in kurzer Zeit große Veränderungen erfahren.

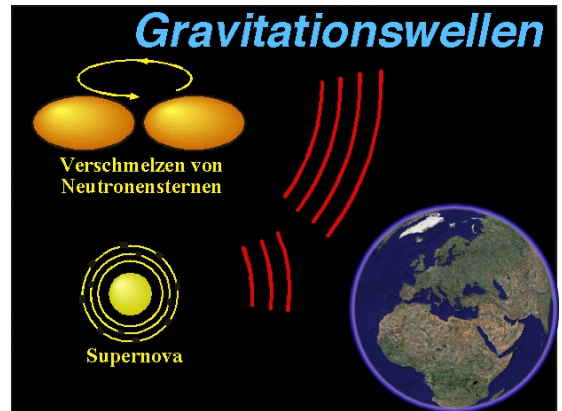


Abbildung 6.36: Entstehung von Gravitationswellen.

Zu den wichtigsten Beispielen gehören das Verschmelzen von zwei Neutronensternen oder die Explosion einer Supernova. Im ersten Fall würden sich die beiden Neutronensterne zunächst um ihren gemeinsamen Schwerpunkt drehen, wobei sie durch Gezeiteneffekte unter dem Einfluss ihrer gegenseitigen Anziehung stark verformt wären. Dabei würden also zwei sehr große, kompakte Massen rasche Bewegungen ausführen und dadurch Energie in der Form von Gravitationswellen abstrahlen. Durch diesen Energieverlust wird die Bahn immer enger, bis die beiden Sterne verschmelzen.

Bei einer Supernova werden natürlich ebenfalls sehr große Massen rasch bewegt und erzeugen dadurch Gravitationswellen, welche wiederum einen erheblichen Teil der freiwerdenden Energie abführen. Diese Gravitationswellen breiten sich dann mit Lichtgeschwindigkeit aus, bis sie auf die Erde treffen, wo wir sie nachweisen können.

6.4.9 Nachweis von Gravitationswellen

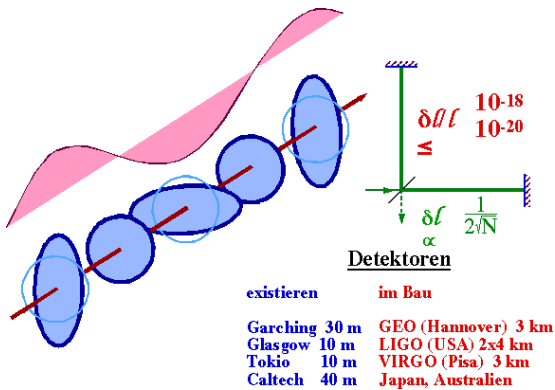


Abbildung 6.37:

Die Gravitationswelle kann man sich ähnlich wie eine elektromagnetische Welle vorstellen, wobei der Raum in orthogonalen Richtungen gestreckt, resp. verkürzt wird. An einem fixen Ort sieht man also periodische Verzerrungen, wobei die Periode von der Art der Quelle abhängt. Für die erwähnten astrophysikalischen Quellen liegen die erwarteten Perioden etwa in der Gegend einer ms, was Wellenlängen von einigen hundert bis einigen tausend km entspricht.

Um solche Wellen nachzuweisen, könnte man prinzipiell den hier gezeigten Aufbau eines Michelson Interferometers benutzen. Allerdings muss man dafür recht genau arbeiten, da man bei den wahrscheinlichsten Prozessen mit relativen Längenänderungen von $\delta l/l \approx 10^{-20}$ rechnet, welche auf einer Zeitskala von etwa 1 ms ablaufen. Die optimale Größe des Resonators würde einer halben Wellenlänge entsprechen, also einigen km.

Um die Gravitationswellen nachweisen zu können, muss man in einem solchen Resonator Län-

genänderungen von der Größe $1/100$ des Durchmessers eines Atomkerns nachweisen können. Als Vergleich kann man dies auf die Distanz Sonne-Erde beziehen, die man auf einige Atomdurchmesser genau bestimmen müsste.

Die Länge der Interferometerarme wird über die optische Phase gemessen, welche für 'klassisches' Licht mit einer Genauigkeit von $\frac{1}{2\sqrt{n}}$ gemessen werden kann (Y. Yamamoto and H.A. Haus, 'Preparation, measurement and information capacity of optical quantum states', Rev. Mod. Phys. 58, 1001-1020 (1986).). Je größer die Anzahl der Photonen, desto genauer kann also die Armlänge bestimmt werden.

Heute stehen bereits mehrere Prototypen von solchen Detektoren in Betrieb. Sie dienen im wesentlichen dazu, Erfahrungen zu sammeln und die Technik auszutesten. Es sind aber auch schon mehrere größere Systeme im Bau.

Ein Squeezing von 20% würde die Chance für eine erfolgreiche Messung um einen Faktor 3 erhöhen. Inzwischen wurden auch schon höhere Werte erreicht, welche bei einer Anwendung im Gravitationswelleninterferometer die Nachweischancen um rund eine Größenordnung erhöhen würden.

6.4.10 Weitere Anwendungen

Ein weiteres Beispiel, welches hohe Anforderungen an die Messgenauigkeit stellt, ist die kohärente optische Kommunikation. Hier werden heute schon hunderte von Milliarden bit pro Sekunde übermittelt, wobei Leistungen in der Größenordnung von einem Milliwatt benutzt werden. Pro Bit stehen also nur noch einige tausend Photonen zur Verfügung und das Schrotrauschen limitiert deshalb bald die mögliche Messgenauigkeit, resp. Bit-Fehler Rate. Prinzipiell kann man das Signal zu Rausch Verhältnis verbessern indem man höhere Leistungen, also größere Photonenraten, verwendet. Es dürfte aber klar sein, dass dies nicht beliebig weit getrieben werden kann. Eine Alternative besteht darin, nichtklassisches Licht

zu verwenden, bei dem die erreichbare Messgenauigkeit nicht mehr durch das Schrotrauschen, resp. durch die Poisson-Statistik beschränkt ist.

Als letzter Punkt sollte auch erwähnt werden, dass anhand einiger Beispiele gezeigt wurde, dass gequetschtes Licht empfindlichere Spektroskopie erlaubt.

6.5 Rückwirkungsfreie Messungen

6.5.1 Rückwirkung

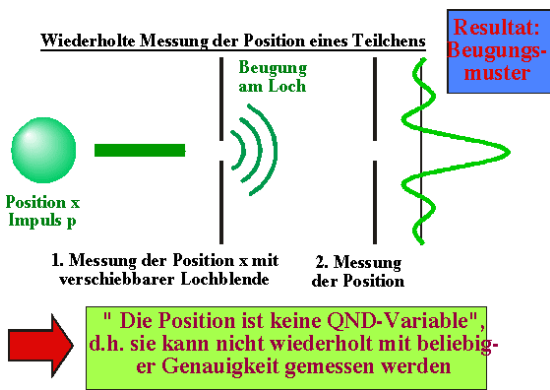


Abbildung 6.38: Positionsmessung: eine Messung beeinflusst spätere Messungen.

Eine weitere Möglichkeit für Messungen unterhalb der Schrotrauschgrenze hängt eng zusammen mit dem Konzept der sogenannten QND, Quantum Nondemolition Detection oder, wie man das vielleicht übersetzen könnte, rückwirkungsfreie oder rückwirkungsarme Messungen.

Ich möchte das Konzept zunächst anhand eines mechanischen Beispiels erläutern. Betrachten wir also ein Teilchen mit Position x und Impuls p . Klassisch wie auch quantenmechanisch kann man die Position des Teilchens - der Einfachheit halber in einer Dimension - im Prinzip beliebig genau messen, z.B. indem man es durch einen Spalt passieren lässt. In dem Moment, wo das Teilchen

durch den Spalt tritt, wissen wir mit Bestimmtheit, dass es sich an der Stelle des Spaltes befindet.

Wenn diese Messung sehr genau ist, dann erhält aber der Impuls des Teilchens eine entsprechende Unschärfe gemäß der Heisenberg Beziehung. 'Genau' ist übrigens in diesem Zusammenhang sehr gut definiert: Es bedeutet, dass die Breite des Spaltes vergleichbar sein muss mit der deBroglie Wellenlänge des Teilchens. Zunächst stört uns diese Unschärfe des Impulses nicht weiter - wir wollten ja die Position des Teilchens messen, der Impuls interessiert uns vorläufig nicht. Wenn wir die Position aber ein weiteres mal messen wollen, so finden wir anstelle der scharfen Position bei der Position des Schlitzes ein Beugungsmuster, das um so breiter ist, je schmaler der Schlitz bei der ersten Messung war. Je genauer wir die Position des Teilchens bei der ersten Messung bestimmen, desto ungenauer werden die späteren Messungen ausfallen. Es ist also prinzipiell nicht möglich, die Position eines freien Teilchens wiederholt mit beliebiger Genauigkeit zu messen.

Dies ist nicht für alle Variablen der Fall. Im gleichen Beispiel eines freien Teilchens kann man den Impuls wiederholt mit beliebiger Genauigkeit messen. Dabei wird zwar jeweils die Ortsunschärfe sehr groß, doch diese hat keinen Einfluss auf spätere Messungen des Impulses. Der Unterschied zwischen den beiden Variablen liegt im Hamiltonoperator begründet:

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m}.$$

Der Impuls (und somit seine Unschärfe) bestimmt die Entwicklung des Teilchens. Ein Eigenzustand des Impulses (wie er aus einer idealen Messung resultiert) kommutiert mit dem Hamiltonoperator und ist deshalb zeitunabhängig. Ein Eigenzustand des Ortes (mit einer entsprechend großen Impuls-Unschärfe) hingegen kommutiert nicht mit dem Hamiltonoperator und ist deshalb zeitabhängig. Eine weitere Messung gibt deshalb ein anderes Resultat. Man drückt dies so aus, dass der Impuls eines freien Teilchens eine QND-Variable sei, nicht aber die Position. Allgemein

bezeichnet man Operatoren als QND-Variablen für ein bestimmtes System wenn ihre Messung wiederholt mit beliebiger Genauigkeit durchgeführt werden kann.

6.5.2 Optische QND Messungen

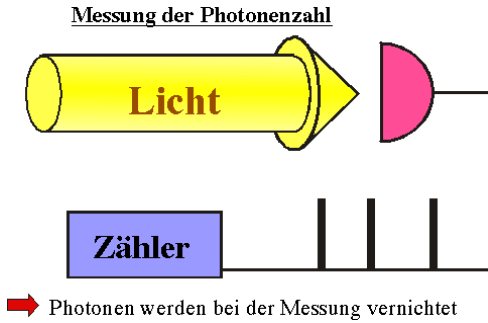


Abbildung 6.39: Messung der optischen Leistung (non QND).

Das gleiche Problem stellt sich auch in der Optik. Wenn wir zum Beispiel die Photonenzahl, d.h. die Intensität eines Laserstrahls messen wollen, so geschieht das üblicherweise indem man das Licht auf einen Detektor fallen lässt, wo die Photonen in Elektronenimpulse umgewandelt werden. Dieser Prozess kann mit sehr hoher Quantenausbeute stattfinden und damit eine recht genaue Messung der Photonenzahl, also der Intensität, ermöglichen. Er ist aber ein sehr destruktiver Prozess: wir wissen jetzt, wie viele Photonen vor der Messung vorhanden waren, aber eine weitere Messung würde konsistent das Resultat Null ergeben.

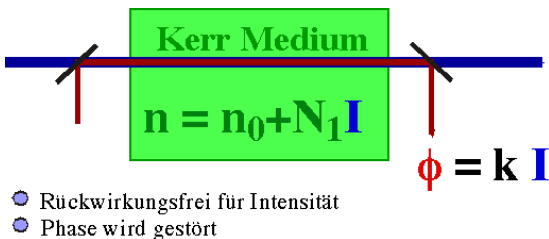


Abbildung 6.40: QND Messung der Intensität über optischen Kerr Effekt.

Dies ist aber nicht zwingend der Fall. Es gibt auch in der Optik bestimmte Variablen, die rückwirkungsfrei gemessen werden können, und dazu gehören die Amplituden optischer Felder oder ihre Intensität.

Eine mögliche Messanordnung ist hier skizziert: Man benutzt dazu ein sogenanntes Kerr Medium. Dabei handelt es sich um ein Material, dessen Brechungsindex von der Intensität des Lichtes abhängt, $n = n(I)$. Die Lichtintensität ändert also den Brechungsindex, und dieser kann mit Hilfe eines zweiten Laserstrahls gemessen werden. Dieser Hilfslaserstrahl kann nachher gewöhnlich detektiert werden, und wir erhalten dadurch ein Signal, welches die Intensitätsinformation enthält, obwohl der Laserstrahl, dessen Intensität wir nun kennen, immer noch vorhanden ist.

Die Messung des Brechungsindex erfolgt z.B. indem man interferometrisch die optische Weglänge

$$l_{opt} = l n(I)$$

bestimmt. Hier stellt l die geometrische Länge des Kristalls dar. Die optische Phasendifferenz, welche der Laserstrahl beim Durchgang durch den Kristall akkumuliert, ist

$$\Delta\phi = k l n(I).$$

Natürlich ist diese Information auch nicht gratis: wir haben zwar die Intensität nicht gestört, aber die konjugierte Variable, in diesem Fall also die optische Phase wurde gestört. Diese Störung kommt dadurch zustande, dass der Teststrahl umgekehrt auch einen Kerr-Effekt erzeugt und durch seine Fluktuationen die optische Weglänge "unscharf" macht. Dies hat aber i.a. keine Rückwirkung auf die Intensität und diese Messanordnung stellt deshalb eine QND-Messung dar.

Solche Experimente wurden z.B. im IBM Labor in San José durchgeführt, wobei als Kerr Medium eine optische Faser benutzt wurde, um eine möglichst hohe Wechselwirkung zwischen den beiden Laserstrahlen zu erhalten. Andere Experimente (P. Grangier, J.F. Roch, and G. Roger,

Phys. Rev. Lett. 66, 1418 (1991).) wurden mit resonanten atomaren Medien durchgeführt. In diesem Fall gelang es insbesondere, Intensitätskorrelationen zwischen Laserstrahlen von zwei unabhängigen Lasern zu erzeugen.

6.5.3 QND für Squeezing

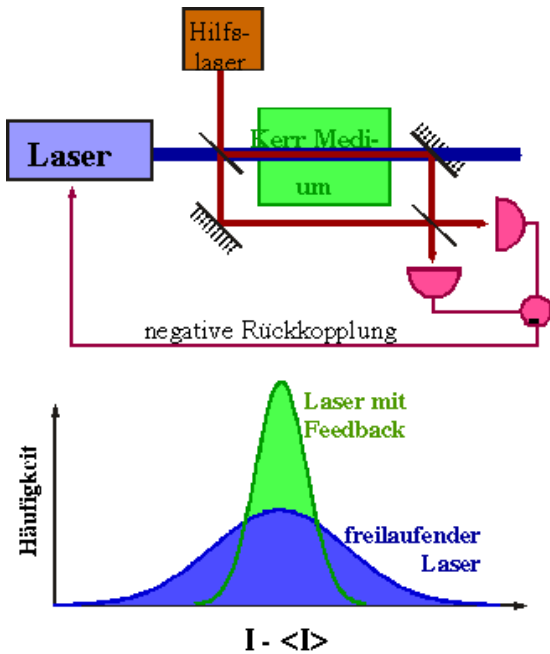


Abbildung 6.41: Squeezing durch QND Messung und Rückkopplung.

Da man mit einer solchen Messung die Intensität eines Laserstrahls beliebig genau messen kann, ohne sie zu stören, stellt dies eine ideale Voraussetzung dar, um die Intensität eines Lasers zu stabilisieren. Ein möglicher Versuchsaufbau ist hier gezeigt. Wie vorher prinzipiell gezeigt, kann man die Intensität des blauen Lasers dadurch messen, dass man ihm einen Hilfs-Laser überlagert. Diese Anordnung dient zur Messung der optischen Phase. Wie vorhin erläutert, erhält man aus der optischen Phase des roten Lasers die Intensität des blauen Lasers. Das Signal kann man natürlich mit einem Sollwert vergleichen und das entsprechende Fehlersignal als Rückkopplung auf den Laser bringen und damit

die Intensität stabilisieren. Ein idealer Laser erzeugt im freilaufenden Betrieb, weit oberhalb der Laserschwelle, Licht, dessen Intensität durch das Schrotrauschen limitiert ist. Durch diese Rückkopplung kann man die Intensität stabilisieren und näher zum gewünschten Wert bringen.

Solche Intensitätskorrekturen kann man natürlich nicht nur am Laser selber durchführen, sondern auch am Laserstrahl - es muss im Prinzip nicht einmal ein Laserstrahl sein, es könnte auch eine konventionelle Lichtquelle sein. Allerdings sollte sie schon möglichst in der Nähe der Schrotrauschgrenze arbeiten.

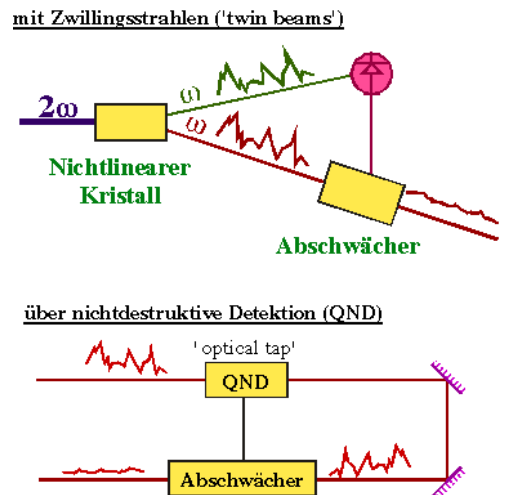


Abbildung 6.42: 2 Methoden für die Reduktion von Amplitudenschwankungen.

Bisher wurden zwei Methoden vorgeschlagen oder demonstriert. Im einen Fall benutzt man korrelierte Laserstrahlen, welche wiederum in einem nichtlinearen optischen Prozess hergestellt werden: in einem optisch nichtlinearen Kristall werden aus einem Photon durch 'parametric down-conversion' zwei Photonen mit niedrigerer Energie hergestellt. Diese beiden Photonen sind sozusagen Zwillinge: da sie aus dem gleichen Mutterphoton entstehen, haben sie genau die gleiche Geburtszeit; die beiden Intensitäten sind deshalb exakt gleich, d.h. die Schwankungen sind vollständig korreliert. Durch eine Messung der Intensität des einen Strahls weiß man also genau die Intensität des anderen Strahls und

kann somit ein Korrektursignal auf einen steuerbaren Abschwächer schicken, welcher die Amplitude korrigieren kann. Dabei kann man einen gewöhnlichen, destruktiven Detektor benutzen - man will ja den zweiten Strahl korrigieren.

Wenn man keine Zwillingstrahlen zur Verfügung hat, kann man trotzdem eine solche Messung durchführen. Man muss dann aber wiederum eine QND-Messung benutzen. Das erlaubt dann sogar eine 'feed-forward' Korrektur der Intensität, d.h. man kann hier - im Prinzip - mit beliebig großer Bandbreite korrigieren.

6.5.4 Empfindlichkeitssteigerung mit QND

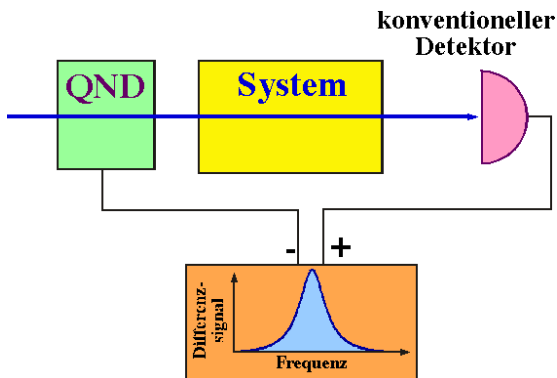


Abbildung 6.43: QND als Hilfsmittel zur Steigerung der Empfindlichkeit.

QND-Messungen erlauben es aber auch, mit konventionellem Licht Messungen durchzuführen, die nicht durch die Schrotrauschgrenze limitiert sind. Prinzipiell kann dies so ablaufen: man führt zunächst eine QND-Messung, z.B. der Intensität des Laserstrahls durch, der anschließend mit dem zu untersuchenden System in Wechselwirkung tritt. Danach kann man eine gewöhnliche Messung der verbleibenden Intensität durchführen. Diese Messung ist zwar mit Quantenrauschen behaftet, aber dank der ersten Messung kennen wir dieses Quantenrauschen und können es in der Verarbeitung der Daten subtrahieren. Zum mindesten in linearen Systemen kann man

auf diese Weise Messresultate erhalten, die nicht durch das Quantenrauschen verfälscht sind.

6.5.5 Zusammenfassung und Literatur

Als abschließende Diskussion betrachten wir 2 Fragen:

- Wo liegen die Grenzen der klassischen Theorie ?

- Die Maxwell Gleichungen sind lokal. Korrelationen zwischen Photonen werden deshalb nicht erklärt. Beispiele sind EPR-Korrelationen, Photon-Antibunching, Squeezing
- Nullpunktenergie des freien Feldes: Die Wechselwirkung des Vakuumzustandes mit materiellen Systemen führt zu spontaner Emission, Lamb Shift, $g-2$.

- Wann hilft die Quantenmechanik weiter ?

- Die Empfindlichkeit kann über der "Schrotrauschgrenze" liegen. Zustände des elektromagnetischen Feldes, die klassisch nicht beschreibbar sind ("squeezed states"), ermöglichen Experimente mit einer Empfindlichkeit, die unterhalb der Schrotrauschgrenze liegt. Beispiele: Laser-Gyroskop, Gravitationswellendetektor,
- kohärente optische Kommunikation
- Quanten-Kryptographie ermöglicht eine Datenübertragung, welche prinzipiell abhörsicher ist.

Weiterführende Literatur

Für diejenigen, welche sich noch genauer mit der Materie auseinandersetzen möchten, gibt es eine Reihe von Lehrbüchern und Übersichtsartikeln. Zur quantenmechanischen Natur des

Photonenstatistik

Quantenoptik

P. Meystre and M. Sargent III, 'Elements of Quantum Optics', Springer, Berlin (1990).

Nichtlineare Optik

Squeezing

P. Grangier, 'Spectroscopy Squeezed Beyond the Shot-Noise Limit', *Physics World* AUG.1992, 18-19 (1992).

QND

V.B. Braginsky, Y.I. Vorontsov, and K.S. Thorne, 'Quantum Nondemolition Measurements', *Science* 209, 547 (1980).

Abbildung 6.44: Weiterführende Literatur.

Lichtes, insbesondere seinen Rauscheigenschaften, gibt es ein ausgezeichnetes Lehrbuch von Meystre und Sargent. Nichtklassische Zustände des Lichtes, die ich hier behandelt habe, beruhen alle auf Korrelationen zwischen Photonen. Um diese Korrelationen zu erzeugen, benötigt man nichtlineare optische Prozesse. Die wichtigsten dieser Prozesse sind z.B. in diesem Buch von Ron Shen zusammengestellt. Eine Beschreibung von gequetschten Zuständen des Lichts gibt es zum einen im Buch von Meystre und Sargent. Es gibt aber auch einen Einführungsartikel von Dan Walls in *Nature*, welcher die wesentlichen Aspekte darstellt. Dieser Artikel ist sehr anschaulich und leicht verständlich geschrieben. Er ist allerdings schon 10 Jahre alt und enthält deshalb noch keine experimentellen Resultate, sondern faßt die theoretischen Voraussagen zusammen. Zum Thema der rückwirkungsfreien Messungen, sogenannten QND-Experimenten, gibt es ebenfalls einen etwas älteren Übersichtsartikel, welcher das Prinzip in leicht verständlicher Form darstellt.

7 Experimentelle Aspekte

7.1 Detektion

7.1.1 Prinzip

Wir hatten in den bisherigen Abschnitten diskutiert, wie eine Resonanz in einem atomaren Gas oder einem anderen Medium angeregt wird, nicht aber wie eine solche Resonanz nachgewiesen wird. Es gibt dafür sehr viele Möglichkeiten. Eine Übersicht erhält man am ehesten wenn man sich überlegt, wie das Medium auf eine solche Anregung reagiert und was die Rückwirkung auf das Laserfeld ist:

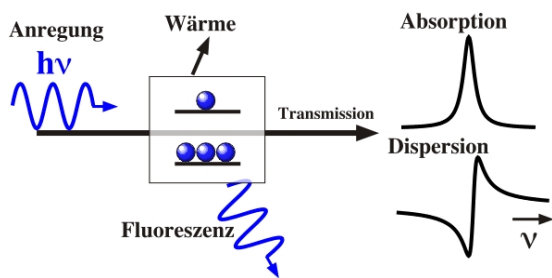


Abbildung 7.1: Prinzip spektroskopischer Messungen.

Im Medium werden zunächst angeregte Zustände bevölkert und oszillierende Dipole angeregt. Diese sorgen wiederum dafür dass das transmittierte Laserfeld abgeschwächt wird und eine Phasenverschiebung erhält, d.h. für Absorption und Dispersion. Außerdem muss die eingetragene Energie wieder aus dem System entfernt werden. Dies kann in Form von Strahlung (als Fluoreszenz) oder strahlungslos (in Form von Wärme) geschehen.

Wenn wir eine resonante Anregung nachweisen wollen haben wir somit 4 Möglichkeiten: Wir können die Anregung im Medium nachweisen, Abschwächung oder Phasenverschiebung des transmittierten Lichtes oder das gestreute Licht,

d.h. die Fluoreszenz nachweisen. Alle 4 Möglichkeiten werden effektiv angewendet. Welche Möglichkeit die beste ist hängt von einer langen Liste von Kriterien ab, welche von Experiment zu Experiment variieren. Wir werden im folgenden die wichtigsten Möglichkeiten diskutieren und auch einige der Kriterien ansprechen, welche zur Wahl der einen oder andern Möglichkeit führen.

7.1.2 Empfindlichkeit

Ein naheliegendes Kriterium für die Güte einer Messung ist die Empfindlichkeit. In vielen Fällen ist es wesentlich, dass man eine möglichst geringe Zahl von Atomen oder Molekülen nachweisen kann. Das ist z.B. bei der Analyse von Spurengasen interessant (Umweltanalytik), oder für Messungen an einzelnen Atomen oder Molekülen. Die Empfindlichkeit hängt wiederum von der Signalgröße ab, die man mit einem gegebenen Aufbau erhält, und damit von vielen Einzelheiten des Materials, aber auch von experimentellen Einzelheiten. Da es aber immer möglich ist, ein Signal, welches normalerweise durch eine elektrische Spannung repräsentiert ist, um einen beliebigen Betrag zu verstärken, ist das wirklich relevante Kriterium nicht die Stärke des Signals, sondern das Verhältnis von Signalstärke zu Rauschen oder Untergrund. Als Rauschen bezeichnet man dabei stochastisch schwankende Störsignale, wie z.B. thermisches Rauschen oder Schrotrauschen, während Untergrund Beiträge zum Signal sind, welche nicht direkt mit dem gesuchten Effekt in Zusammenhang stehen.

Unterschiedliche Messmethoden müssen deshalb auch in Bezug auf den Untergrund verglichen werden. Als Beispiel vergleichen wir die Anregung eines schwachen optischen Übergangs wenn wir einen Laserstrahl durch eine Probe schicken. Die meisten Photonen werden transmittiert, ein

kleiner Teil (z.B. 10^{-10}) werden absorbiert und als Fluoreszenz wieder emittiert.

Die Messung der transmittierten Intensität ist prinzipiell meist am einfachsten und effizientesten: Da der Laserstrahl gut kollimiert ist braucht man nur einen Detektor in den transmittierten Strahl zu stellen und kann damit praktisch alle Photonen in ein elektrisches Signal umwandeln. Die Messung der Änderung der transmittierten Leistung ist trotzdem schwierig: Um festzustellen, ob die transmittierte Intensität geringer ist als die einfallende müsste sie auf 10^{-10} genau bekannt sein. Dies ist in der Praxis nie der Fall. So liegen z.B. die Schwankungen der Laserintensität um viele Größenordnungen höher und machen deshalb einen direkten Nachweis sehr aufwändig. Auch bei einem perfekt stabilen Laser wäre es praktisch nicht möglich, einen Detektor zu bauen, der so kleine Änderungen messen könnte. Eine Absorptionsmessung in solchen Systemen ist deshalb sehr aufwändig und nur möglich, wenn das Verfahren eine Form der Differenzbildung beinhaltet.

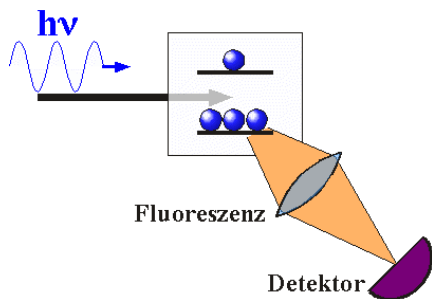


Abbildung 7.2: Prinzip einer Fluoreszenzmessung

Eine mögliche Alternative ist die Messung der Fluoreszenz. Wenn wir einen Laserstrahl im sichtbaren Bereich des Spektrums benutzen, der eine Leistung von 1 mW besitzt, so entspricht das einem Photonenfluss von etwa 3.1015 Photonen pro sec. Damit werden 3.105 Photonen pro sec als Fluoreszenz emittiert. Es ist allgemein nicht möglich, alle Fluoreszenzphotonen zu detektieren.

Die Nachweiseffizienz hängt u.a. von der Geome-

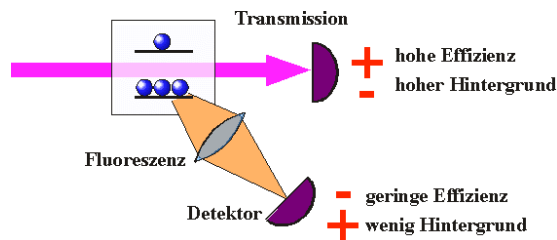


Abbildung 7.3: Vor- und Nachteile unterschiedlicher Detektionsarten.

trie des Experiments ab. Wenn wir beim obigen Beispiel von einer Effizienz von 10^{-3} ausgehen stehen pro sec rund 300 Photonen als Signal zur Verfügung, was experimentell leicht nachweisbar ist: die Grenze liegt bei ca. 1 Photon pro Stunde.

Allerdings findet man i.a. auch einen Hintergrund von nicht resonant gestreutem Licht. Die Qualität des Fluoreszenznachweises ist deshalb zu einem wesentlichen Teil durch die Effizienz der Unterdrückung dieses Hintergrundes bestimmt. Relativ leicht ist dies, wenn die Fluoreszenz bei einer anderen Wellenlänge als diejenige des Lasers erscheint: man kann die beiden Arten von Licht dann mit Filtern oder Spektrometern trennen.

7.1.3 Detektoren für Licht

Der einfachste Ansatz für den Nachweis einer optischen Resonanz führt immer über das Lichtfeld. Wir diskutieren deshalb zunächst die vorhandenen Möglichkeiten des Nachweises von optischer Strahlung. Dies kann natürlich nur eine sehr kurze Zusammenfassung sein - ein vollständiger Überblick würde mehrere Semester benötigen. Weitere Information findet man auch z.B. in W. Demtröder, 'Laser Spectroscopy', Springer, Berlin (1982), Kapitel 4: Spectroscopic Instrumentation.

Die frühesten Detektoren für Licht (neben dem menschlichen Auge) waren fotografische Filme, also dünne Schichten von lichtempfindlichem Material, in dem beim Auftreffen von Licht eine chemische Umwandlung stattfindet. Diese haben

eine recht hohe Empfindlichkeit und können in einer Fläche Licht detektieren. Heute werden sie aber im Labor kaum mehr verwendet, weil die Information erst nach dem Entwicklungsprozess zur Verfügung steht.

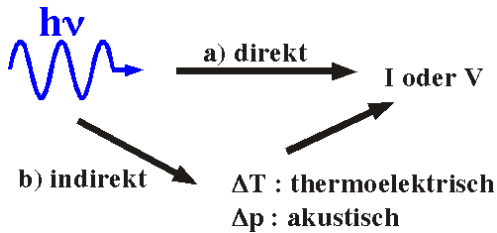


Abbildung 7.4: Nachweis als Umwandlung von Licht in elektrische Signale.

Heute ist bei praktisch allen verwendeten Detektoren das resultierende Signal eine elektrische Spannung und steht somit unmittelbar für die Messung zur Verfügung. Während einige Detektoren direkt Photonen in einen Strom oder eine Spannung umwandeln benutzen andere Detektoren verschiedene Zwischenstufen. So kann das einfallende Licht zunächst in Wärme umgewandelt werden und anschließend wird die Temperaturerhöhung in ein elektrisches Signal umgewandelt. Solche Detektoren kommen u.a. dann zur Anwendung wenn der Detektor über einen möglichst großen Wellenlängenbereich eine konstante Empfindlichkeit aufweisen soll. Eine weiterer Anwendungsbereich ist der Nachweis von Strahlung im infraroten Teil des Spektrums, wo Detektoren, die direkt ein elektrisches Signal erzeugen, eine zu geringe Empfindlichkeit aufweisen.

7.1.4 Photoeffekt

Aus der Grundvorlesung ist sicher allen der photoelektrische Effekt bekannt: Photonen lösen aus der Oberfläche eines Metalls Elektronen heraus. Eine solche Metalloberfläche wirkt also als Quelle für Elektronen und wird als Photokathode bezeichnet.

Man kann die emittierten Elektronen auf einer Anode einfangen und den so erzeugten Photo-

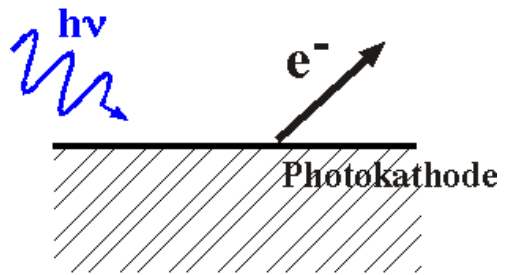


Abbildung 7.5: Photoemission

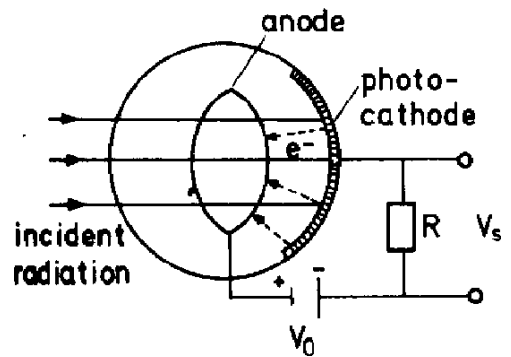


Abbildung 7.6: Detektion über Photokathode

strom direkt messen. Dafür muss sich das Elektrodenpaar im Vakuum befinden.

Wenn die Lichtintensität relativ gering ist kann es aber vorteilhaft sein, das Signal noch zu verstärken. Die geschieht meistens über einen Elektronenvervielfacher:

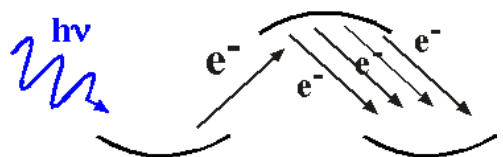


Abbildung 7.7: Vervielfacherstufe für Elektronen

Dabei werden die freiwerdenden Elektronen in einem Potential beschleunigt und auf die Oberfläche einer sekundären Elektrode (Dynode) fokussiert. Elektronen, die mit einigen 100 eV auftreffen lösen aus der Metalloberfläche wiederum mehrere Elektronen heraus, welche anschließend wiederum beschleunigt werden können.

Eine Reihe solcher Vervielfacherstufen kann somit pro Photon z.B. 10^7 Elektronen erzeugen,

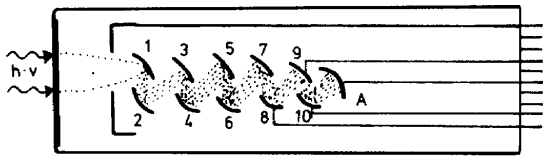


Abbildung 7.8: Sekundärelektronenvervielfacher

welche anschließend sehr viel einfacher detektiert werden können.

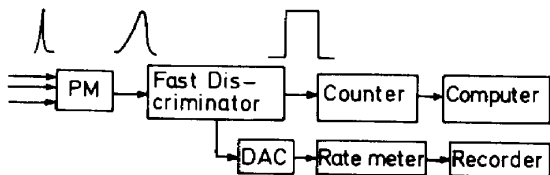


Abbildung 7.9: Ausleseelektronik

Ein solcher elektrischer Puls kann anschließend auch über eine Elektronik für das Zählen von Einzelphotonen verwendet werden.

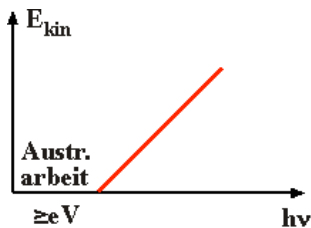


Abbildung 7.10: Austrittsarbeit

Die Energie der erzeugten Photoelektronen ist bekanntlich gleich der Energie des Photons minus die Austrittsarbeit. Somit werden nur dann Elektronen erzeugt, wenn die Photonenenergie grösser oder gleich der Austrittsarbeit ist. Detektoren dieser Art sind deshalb nur für Photonen mit einer relativ hohen Energie geeignet.

Der Wellenlängenbereich, über den Photokathoden und Photomultiplier eingesetzt werden können, hängt im wesentlichen von der Austrittsarbeit ab und ist deshalb gegen lange Wellenlängen begrenzt. Meist liegt die Grenze im Sichtbaren. Da es häufig interessant ist, auch relativ lange Wellenlängen zu detektieren verwendet man gerne Material mit einer geringen Austrittsarbeit. Dies sind vor allem Alkalimetalle.

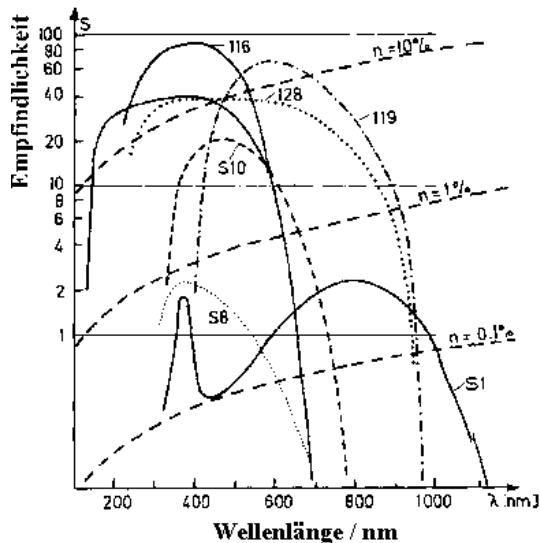


Abbildung 7.11: Empfindlichkeit als Funktion der Wellenlänge für unterschiedliche Photokathoden.

7.1.5 Halbleiterdetektoren

Eine andere Gruppe von Detektoren wandelt Photonen in einen elektrischen Strom um, indem in einem Halbleiter durch Einfangen der Photonen Elektron-Loch Paare erzeugt werden.

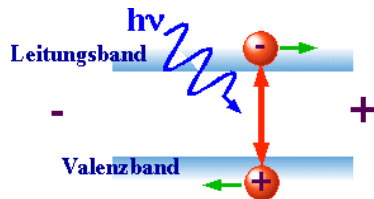


Abbildung 7.12: Anregung in einem Halbleiter

Die so erzeugten Ladungen machen das Material photoleitend. Es ist somit möglich, das Licht durch die Änderung des Widerstandes zu detektieren.

Wenn die in der Nähe eines p-n Übergangs geschieht, so werden die Ladungen getrennt, so dass die Rekombination vermieden wird und ein elektrischer Strom fließt. Nach diesem Prinzip arbeiten Photodioden und Solarzellen. Photodioden sind heute der weitaus häufigste Detektortyp. Sie benötigen im Gegensatz zu einem Pho-

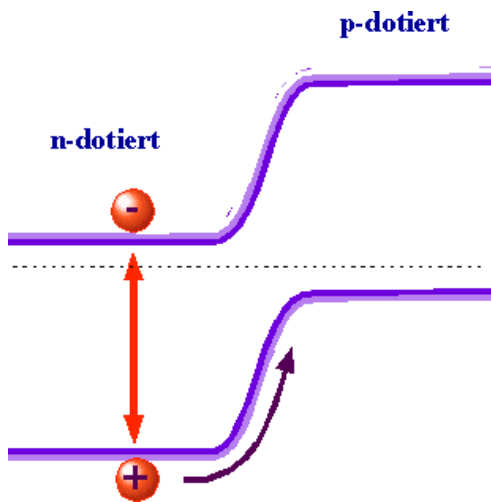


Abbildung 7.13: Anregung an einem p-n Übergang.

tomultiplier keine Hochspannung und kein Vakuum, sondern sind reine Festkörperdetektoren. Damit sind sie sehr viel zuverlässiger und werden außerdem nicht durch Magnetfelder beeinflusst. Sie sind sehr kompakt und billig. Die Quantenausbeute kann mehr als 90% betragen, sofern die Oberfläche mit einer Antireflexbeschichtung versehen wird: typische Halbleiter haben einen hohen Brechungsindex (z.B. GaAs $n = 3.6$), so dass bei unbehandelten Oberflächen auch bei senkrechtem Einfall 25% des Lichtes an der Oberfläche reflektiert wird.

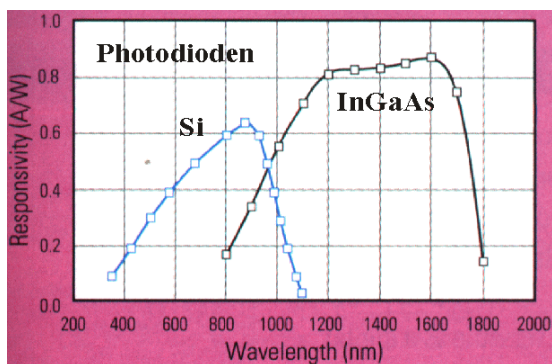


Abbildung 7.14: Wellenlängenabhängigkeit der Empfindlichkeit für Si und GaAs

Die Empfindlichkeit als Funktion der Wellenlänge hängt von der Bandlücke des verwendeten Materials ab.

Neben der Empfindlichkeit spielt auch die Geschwindigkeit eines Detektors eine wesentliche Rolle. Die Zeitkonstante eines Detektors ist die kürzeste Zeit, über die eine Variation des einfallenden Lichtes noch in eine entsprechende Variation des Signals umgesetzt wird.

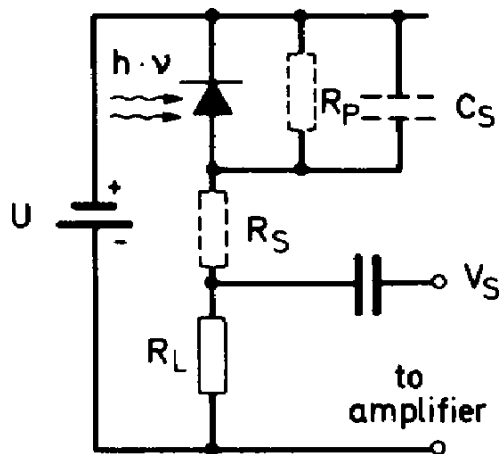


Abbildung 7.15: Schaltung für Photodiode.

Um das Auftreten einer solchen Zeitkonstante zu verstehen betrachtet man sinnvollerweise das Ersatzschaltbild. Man kann den idealen Detektor als eine Stromquelle darstellen, dessen Strom proportional zur einfallenden Lichtintensität ist. Bei einer Photodiode bildet die Grenzschicht immer auch eine Kapazität, welche im Ersatzschaltbild für den Photostrom einen Kurzschluß darstellt. Parasitäre Widerstände parallel und in Serie zur Stromquelle stellen weitere Nichtidealitäten dar. Die eigentliche Signalspannung fällt über dem Lastwiderstand R_L ab. Eine hohe Grenzfrequenz wird bei der Messung schneller Signale benötigt. Sie kann u.a. durch eine Verringerung der Grenzschichtkapazität erreicht werden. Diese ist aber u.a. proportional zur Fläche der Diode, so dass eine Verringerung auch die Empfindlichkeit verringert wenn das Licht nicht ideal fokussierbar ist. Heute sind Photodioden in der Lage, Signale bis in den Bereich von 60 GHz zu detektieren. Gegenüber Photo-

multipliern besitzen Sie immer noch den Nachteil eines größeren Dunkelstroms, so dass sie für den Nachweis kleiner Signale weniger geeignet sind. Immerhin ist es auch bei Photodioden möglich, die erzeugten Photoelektronen zu vervielfachen, indem man an geeignete Photodioden eine hohe Spannung anlegt. In diesen Avalanche-Photodioden können die beschleunigten Elektronen ihrerseits wieder Ladungsträger erzeugen, so dass ein Photon einen hohen Spannungspuls erzeugen kann, ähnlich wie bei Photomultipliern. Allerdings findet die Verstärkung hier im Festkörper statt, nicht im Vakuum.

7.1.6 CCD

Einer der populärsten Detektoren ist heute der CCD (=Charge Coupled Device). CCD's bestehen aus einzelnen lichtempfindlichen Elementen, die in einem zweidimensionalen Raster angeordnet sind.

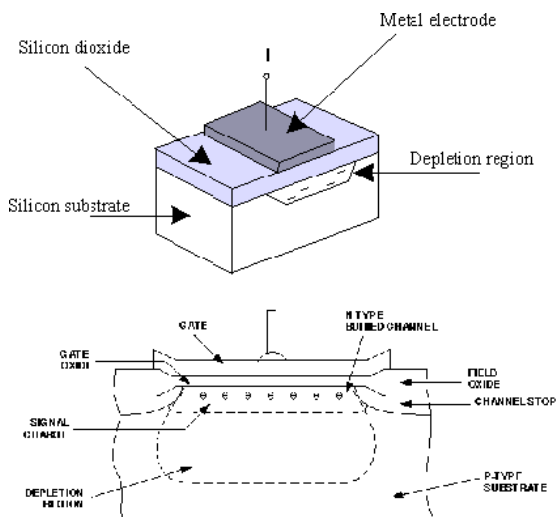


Abbildung 7.16: CCD Zelle

Die einzelnen Elemente sind enthalten eine Silizium-Verarmungszone, in der das einfallende Licht Ladungen erzeugt. Durch eine geeignete Vorspannung und Dotierung wird eine Ansammlung der Ladungen unterhalb der Oberfläche erreicht.

Nachdem das gesamte Bild belichtet ist werden die einzelnen Pixel ausgelesen indem man die ge-

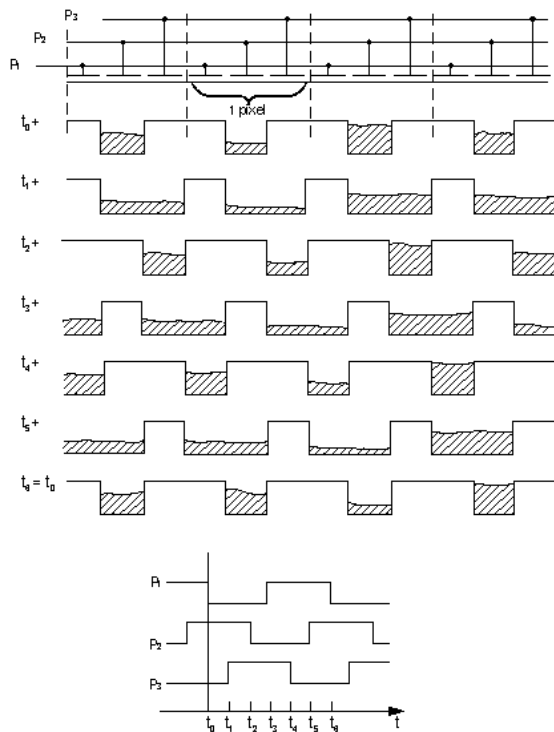


Abbildung 7.17: Auslesen eines CCD Arrays.

speicherten Ladungen in einer Richtung über den Chip schiebt. Am Schluss landen sie in einem Ausleseregister und von dort in einem ADC.

7.1.7 Streak Kamera

Während Photomultiplier typische Anstiegszeiten von 1 nsec aufweisen können Photodioden Zeiten bis zu einigen psec auflösen. Für die Beobachtung noch schnellerer Signale kann man Streak Kameras verwenden.

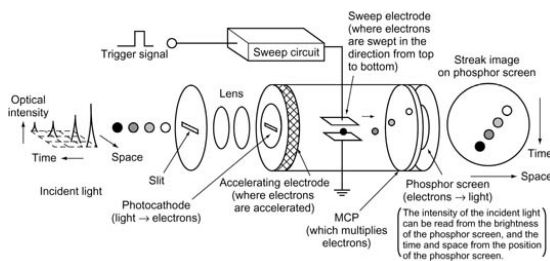


Abbildung 7.18: Streakkamera

Diese verwenden elektronische Ablenkung eines

Elektronenstrahls um ein zweidimensionales Bild zu erzeugen, bei dem die eine Dimension einer räumlichen Position, die zweite die Zeitachse entspricht.

7.1.8 Weitere Detektionsmöglichkeiten

Wenn man anstelle des Lichtes die Anregung im Material detektieren will, gibt es ebenfalls eine Reihe von Möglichkeiten, welche aber stark systemabhängig sind. Eine nützliche Methode, welche auf atomare und molekulare Systeme anwendbar ist, besteht darin, das Atom oder Molekül zu ionisieren. Man unterscheidet verschiedene Möglichkeiten.

Photoionisation

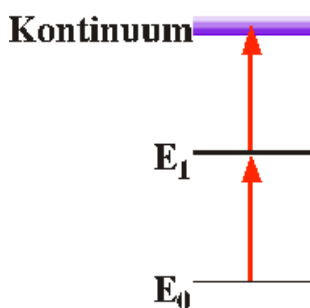
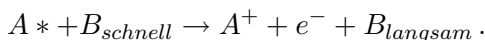
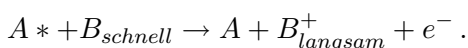


Abbildung 7.19: Photoionisation

Bei der Photoionisation bringt ein zusätzliches optisches Feld die Atome über die Ionisationsgrenze. Die so erzeugten Ionen können relativ leicht detektiert werden indem man über Elektroden eine Spannung anlegt. Die Ionen werden dann zur Kathode beschleunigt und erzeugen somit einen elektrischen Strom.



Liegt der angeregte Zustand nur wenig unter der Ionisationsgrenze kann auch eine Kollision die zusätzlich benötigte Energie liefern. Dabei kann auch der Kollisionspartner ionisiert werden, indem die Anregungsenergie auf diesen übertragen wird. Dies geschieht z.B. bei der Penning-Ionisation.



Eine weitere Möglichkeit ist die Feldionisation: Wenn der angeregte Zustand in der Nähe der Ionisationsgrenze liegt, kann auch ein mäßig starkes elektrisches Feld das Atom ionisieren.

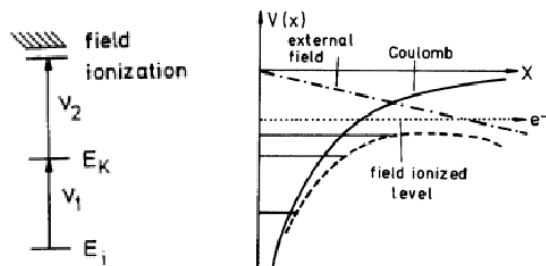


Abbildung 7.20: Feldionisation

Diese Methode liefert eine Nachweiseffizienz für absorbierte Photonen, die nahe bei 1 liegt.

In Molekülen und Festkörpern werden die absorbierten Photonen häufig nicht mehr in der Form von Fluoreszenz emittiert, sondern die Energie wird in thermische Anregung umgewandelt, d.h. sie führen zu einer Erwärmung der Probe. Man kann diese Erwärmung in geeigneten Systemen recht effizient nachweisen.

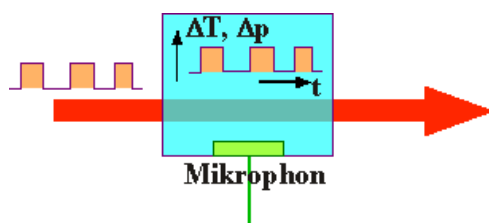


Abbildung 7.21: Photoakustischer Nachweis.

Man nutzt dies vor allem dadurch, dass man den Laserstrahl nicht kontinuierlich einstrahlt, sondern durch einen Chopper mit einer Frequenz von einigen Hz bis einigen kHz moduliert. Die wechselnde Erwärmung und Abkühlung, d.h. Ausdehnung und Kompression, erzeugen im Gas eine akustische Welle, welche über ein empfindliches Mikrofon nachgewiesen werden kann. Dieses Verfahren wird vor allem im infraroten Bereich des Spektrums als Nachweismethode für die empfindliche Messung von Spurengasen eingesetzt.

7.2 Modulatoren

7.2.1 Chopper

Die einfachste Möglichkeit, einen Laserstrahl ein- und aus zu schalten ist immer noch der mechanische Chopper: eine rotierende Scheibe mit unterschiedlichen Öffnungen. Chopper haben verschiedene Nachteile, insbesondere können sie mechanische Vibrationen erzeugen und sind relativ langsam. Daneben weisen sie aber immer noch wesentliche Vorteile auf: sie sind exakt digital, schalten also von Transmission eins auf Transmission 0 und sind billig.

7.2.2 Akustooptische Modulatoren

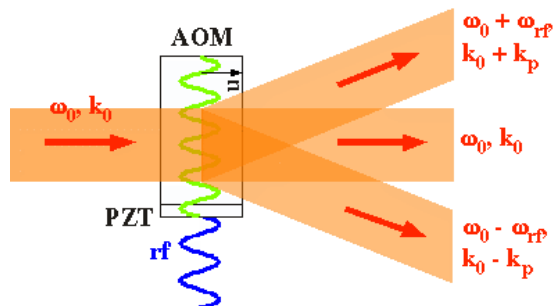


Abbildung 7.22: Beugung eines Laserstrahls an einer Dichtewelle in einem akustooptischen Modulator.

In einem akustooptischen Modulator werden Lichtwellen an einem Beugungsgitter abgelenkt, welches aus akustischen Wellen besteht. Diese wird erzeugt indem man ein Radiofrequenzfeld über einen piezoelektrischen Kristall an den elektrooptischen Kristall ankoppelt. Die akustische Welle erzeugt Dichteschwankungen, welche eine entsprechende Modulation des Brechungsindex bewirken. Diese wirken für die Lichtwelle als ein Phasengitter, so dass neben dem normalen transmittierten Strahl auch weitere Strahlen auftreten, deren Ablenkwinkel durch das Verhältnis aus akustischer Wellenlänge zu Lichtwelle gegeben ist. Gleichzeitig wird die Frequenz des Lichtes um die eingestrahelte Radiofrequenz verschoben.

ben. Man kann den gesamten Prozess auch als Absorption oder Emission eines Phonons durch die Lichtwelle verstehen.

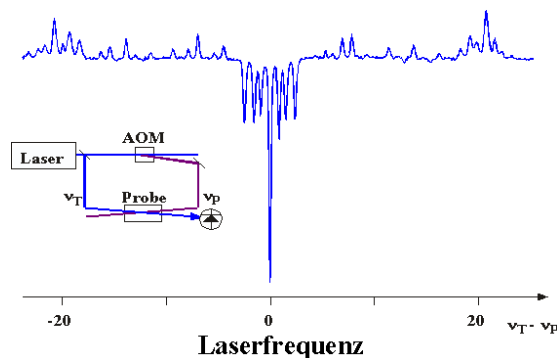


Abbildung 7.23: Präziser Frequenzscan mit Hilfe eines akustooptischen Modulators.

Akustooptische Modulatoren werden in spektroskopischen Experimenten verwendet um die Intensität des Lasers zu modulieren, aber auch um die Frequenz zu verschieben. Sie erlauben einem u.a. Frequenzvariationen um einige 10 MHz, wie z.B. in diesem Lochbrennspektrum. Bei dieser Art von Spektroskopie muss die Frequenz eines Laserstrahls gegenüber der Frequenz eines anderen Strahls um ca. ± 25 MHz verschoben werden. Dafür zwei unabhängige Laser zu verwenden wäre nicht nur aufwändig und teuer, sondern auch ungenau, da die Frequenzdifferenz durch die Schwankungen der beiden Laser beeinflusst wird. Verwendet man dagegen einen akustooptischen Modulator, so ist die Differenzfrequenz der beiden Laserstrahlen praktisch exakt festgelegt durch die RF Frequenz. Die erreichbare Schaltzeit liegt in der Größenordnung von 100 nsec, die Ablenkeffizienz in die erste Ordnung bei ca. 70%.

7.2.3 Elektrooptische Modulatoren

Elektrooptische Modulatoren verwenden Kristalle, deren Brechungsindex beim Anlegen eines elektrischen Feldes anisotrop ändert. Das Feld liegt in der Größenordnung von 1 kV und ändert

den Brechungsindex gemäß

$$n_x(E) = n_{x0}; \quad n_y(E) = n_{y0} + n_{y1}E.$$

Ist das angelegt Feld statisch so erhält man einen doppelbrechenden Kristall, den man u.a. für die Rotation der Polarisation und, in Kombination mit einem Polarisator zum Schalten des Lichtes verwenden kann. Dies wird in einer Pockels-Zelle verwendet.

Das angelegt Feld kann auch zeitabhängig sein. Da die Phase der transmittierten Welle vom Brechungsindex abhängt kann sie dann geschrieben werden als

$$\begin{aligned} \phi(L) &= e^{iknL} = e^{ik[n_0+n_1E_0 \cos(\omega_m t)]L} \\ &= e^{ikn_0L} e^{ikn_1E_0 \cos(\omega_m t)L}. \end{aligned}$$

Die Exponentialfunktion der cos Funktion kann in einzelne Frequenzkomponenten zerlegt werden. Die Lichtwelle enthält hinter dem Kristall zusätzliche Frequenzkomponenten:

$$E(t) = A_0 \{ J_0(kn_1E_0) e^{i\omega_L t} + \sum_n J_n(kn_1E_0) e^{i(\omega_L + n\omega_m)} \}$$

Elektrooptische Modulatoren können deshalb u.a. als Frequenzmodulatoren verwendet werden. In diesem Fall verwendet man meist einen relativ geringen Modulationshub, so dass man sich primär auf die ersten beiden Seitenbanden konzentrieren kann.

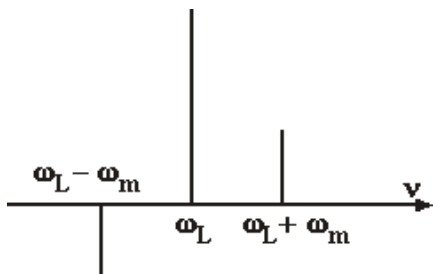


Abbildung 7.24: Seitenbanden eines elektrooptischen Modulators.

Diese befinden sich im Abstand ω_m von der Laserfrequenz. Da es sich um reine Frequenzmodulation handelt sieht man auf einem einfachen Detektor zunächst kein Signal. Wird aber der modulierte Laserstrahl durch ein resonantes Medium geschickt, welches ein Seitenband bevorzugt

abschwächt (z.B. in der Nähe einer Resonanz), so kann die Frequenzmodulation in eine Amplitudenmodulation und damit in ein beobachtbares Signal umgewandelt werden.

7.2.4 Photoelastische Modulatoren

In Photoelastischen Modulatoren wird die Phase einer Polarisationsrichtung der transmittierten Welle periodisch verzögert, ähnlich wie beim elektrooptischen Modulator.

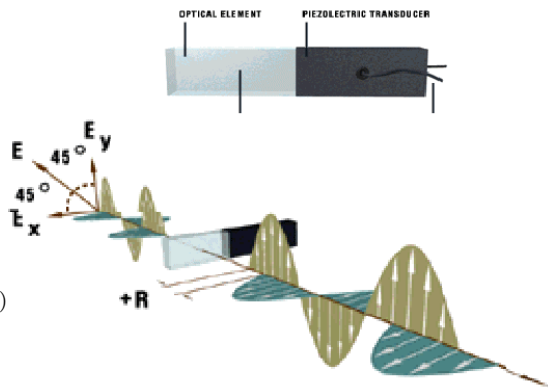


Abbildung 7.25: Photoelastischer Modulator

Die Verzögerung wird hier aber wie beim akustooptischen Modulator durch eine akustische Dichtewelle erzeugt. Um Verzögerungen von etwa einer Wellenlänge zu erreichen verwendet man resonante Anregung; photoelastische Modulatoren besitzen deshalb fixe Arbeitsfrequenzen (typischerweise 50 kHz). Sie werden vor allem für die phasenempfindliche Polarisationsanalyse verwendet.

7.3 Spektrometer und Interferometer

7.3.1 Gitterspektrometer

Spektrometer dienen der spektralen Analyse von kohärentem wie inkohärentem Licht. Sie enthalten ein wellenlängenselektives Element, wobei meistens ein Strichgitter verwendet wird.

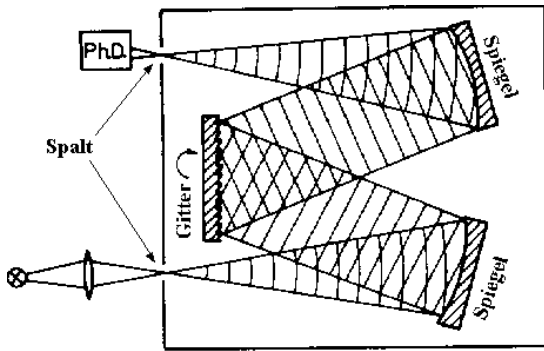


Abbildung 7.26: Aufbau eines Gitterspektrometers

Der übliche Aufbau umfaßt neben dem Gitter zwei fokussierende Spiegel sowie einen Eintritt- und Austrittspalt. Das zu analysierende Licht wird durch den Eintrittspalt auf den ersten Spiegel geworfen, welcher es möglichst parallel auf das Gitter bringt. Dieses ist drehbar und kann so eingestellt werden, dass die zu messende Wellenlänge durch den zweiten Spiegel auf den Austrittspalt fokussiert wird. Die Auflösung wird durch das Gitter, die Größe des Spektrometers (d.h. die Länge der beiden Arme) und die Breite von Ein- und Austrittspalte definiert und kann bei weniger als 0.1 nm liegen.

Während beim oben gezeigten Aufbau jede Wellenlänge einzeln detektiert werden muss kann man auch einen Detektor verwenden, der mehrere Pixel enthält, typischerweise eine CCD Kamera. Diese wird dann anstelle des Austrittspaltes montiert.

7.3.2 Analysatoren: Fabry-Perot, Wavemeter,

7.4 Hochempfindliche Spektroskopie

7.4.1 Absorptionsquerschnitt und Absorptionslänge

Die Nachweisgrenze einer spektroskopischen Messung ist dadurch gegeben, dass das gemessene

Signal deutlich stärker sein soll als das Rauschen. Maximale Empfindlichkeit wird somit erreicht wenn nicht nur das Signal maximiert wird, sondern gleichzeitig das Rauschen so klein als möglich gemacht wird. Bei einer Absorptionsmessung ist die Größe des Signals gegeben durch die Anzahl Moleküle im Strahl mal die Wahrscheinlichkeit, dass ein Molekül ein Photon absorbiert. Diese Wahrscheinlichkeit kann z.B. durch den Absorptionsquerschnitt angegeben werden: Ein Absorptionsquerschnitt von $1 \mu\text{m}^2$ bedeutet, dass ein Molekül so viel Licht absorbiert wie eine perfekt absorbierende Scheibe mit den Massen $1 \mu\text{m} \times 1 \mu\text{m}$. Dabei der Absorptionsquerschnitt für eine stark erlaubte Linie etwa beim Quadrat der entsprechenden Wellenlänge. Die optische Fläche eines Atoms oder Moleküls ist demnach wesentlich größer als die wirkliche Querschnittsfläche. Bei schwachen Absorptionslinien ist der Absorptionsquerschnitt entsprechend kleiner.

Damit kann man bei gegebener Molekülkonzentration die Absorption einer Probe bestimmen. Beträgt die Teilchendichte N und der Absorptionsquerschnitt A , so wird durch eine dünne Schicht der Dicke d ein Anteil

$$\delta I = N A d \ll 1$$

der Intensität absorbiert. Allgemein nimmt die Intensität beim Durchgang durch ein resonantes Medium um den Faktor

$$\frac{I(d)}{I(0)} = e^{-N A d} = e^{-d/L}$$

ab. Dabei stellt

$$L = \frac{1}{N A}$$

die Absorptionslänge dar, also die Distanz, über die die Intensität auf $1/e$ absinkt. Je kürzer die Absorptionslänge, desto einfacher der Nachweis. Für schwache Übergänge kann er aber im Bereich von vielen km liegen.

Um ein möglichst großes Signal zu erhalten muss bei gegebener Absorptionslänge die Weglänge d möglichst lang gewählt werden.

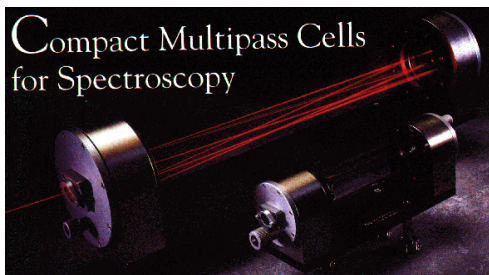


Abbildung 7.27: Multipass-Absorptionszelle für die Messung schwacher Absorptionslinien.

Dafür muss man nicht unbedingt eine sehr lange Absorptionszelle wählen, man kann auch den Laserstrahl mehrfach durch die gleiche Zelle schicken. In diesem Beispiel läuft der Laserstrahl 182 mal durch die Zelle.

Statt den Laserstrahl mehrfach auf unterschiedlichen Pfaden durch die gleiche Zelle zu schicken kann man ihn auch mehrfach über den gleichen Pfad schicken.

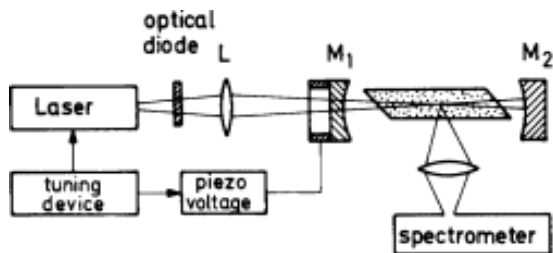


Abbildung 7.28: Probe in einem optischen Resonator.

Das entspricht dem Fall eines optischen Interferometers, z.B. einem Fabry-Perot Interferometer. Dafür muss allerdings der Resonator auf die Laserfrequenz stabilisiert werden. Die effektive Absorptionslänge wird dann durch den Q-Faktor des Resonators bestimmt.

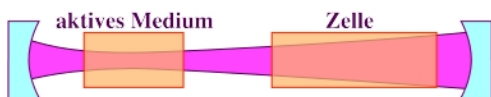


Abbildung 7.29: Probe im Laserresonator.

Man kann dafür auch gleich den Laserresonator verwenden. Dadurch eliminiert man die Notwendigkeit, den externen Resonator auf die Laserwellenlänge anzupassen. Außerdem ist im Laserresonator durch die Verstärkung die effektive Weglänge noch sehr viel größer.

7.4.2 Rauschen

Die größte Schwierigkeit bei der Messung eines Absorptionsspektrums ist die Instabilität der Laserintensität:

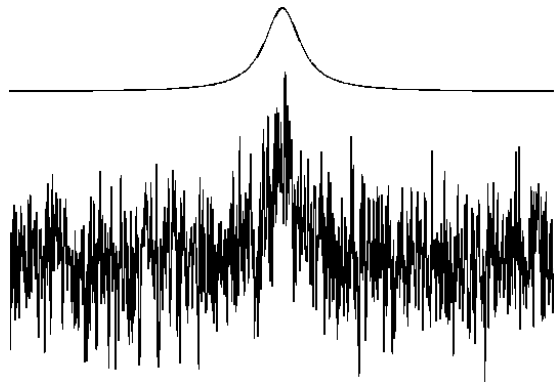


Abbildung 7.30: Rauschen überlagert das Signal.

Wenn man die Laserwellenlänge verstimmt, um die transmittierte Leistung als Funktion der Wellenlänge zu messen, enthält das Messsignal nicht nur die Änderungen der transmittierten Leistung aufgrund der Änderung der Wellenlänge, sondern gleichzeitig die Änderungen aufgrund der Schwankungen der Laserintensität. Es gibt eine Reihe von Möglichkeiten, dieses Problem zu eliminieren. Die beste wäre es zweifellos, den Laser so gut zu stabilisieren, dass die Intensitätsschwankungen nicht mehr stören. Dies ist allerdings auch die aufwendigste Möglichkeit.

Eine einfachere Möglichkeit verwendet eine Differenzmessung: Man misst gleichzeitig die Intensität des Laser vor und nach der Zelle. Da beide Messwerte fast gleich groß sind kann die Division häufig durch eine Subtraktion ersetzt werden.

In der Figur ist das Eingangs- und Ausgangssignal für eine Absorptionsmessung an Nd:YAG

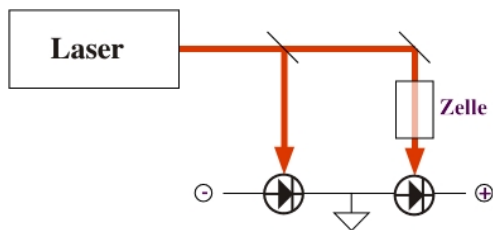


Abbildung 7.31: Differenzmessung

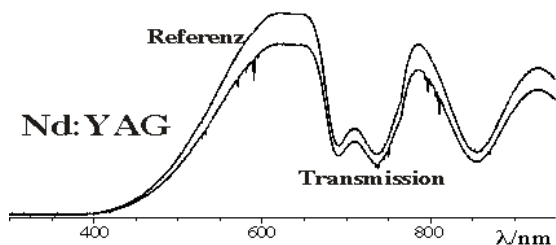


Abbildung 7.32: Spektrum von YAG und Referenzspektrum

dargestellt. Offenbar sind die beiden Kurven praktisch identisch (bis auf einen Skalierungsfaktor).

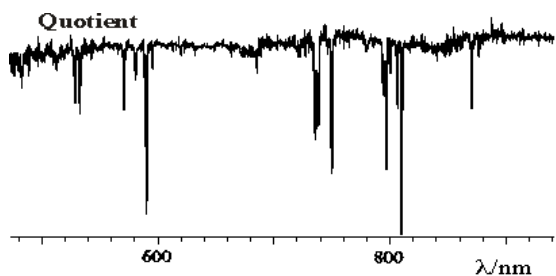


Abbildung 7.33: YAG Spektrum als Quotient der beiden Datensätze.

Werden die beiden Funktionen durcheinander dividiert, so können diese Schwankungen effektiv eliminiert werden. In diesem Beispiel wurden beide Kurven separat digitalisiert und im Rechner dividiert.

7.4.3 Modulationstechniken

Man kann den Effekt des Rauschens auch dadurch reduzieren, dass man die Referenzmessung

nicht mit einem unabhängigen Strahl macht, sondern dass man den gleichen Strahl zu unterschiedlichen Zeiten misst.

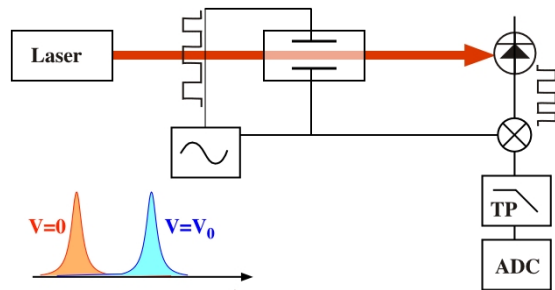


Abbildung 7.34: Modulation der Absorption mit phasempfindlichem Nachweis.

Man führt eine solche Messung durch indem man wiederholt zwischen der Situation "mit Absorption" und der Referenzmessung "ohne Absorption" hin und her schaltet, resp. moduliert. Das eigentliche Signal ist in diesem Fall durch den Anteil gegeben, der mit der Modulationsfrequenz variiert. Man extrahiert diesen Teil mit einem phasempfindlichen Detektor, einem sogenannten Lock-in Verstärker.

Eine Möglichkeit, die Absorption ein- und auszuschalten liegt in der Modulation der Absorptionswellenlänge über die Wechselwirkung mit externen Felder. Es wird sowohl die Starkmodulation (elektrisches Feld) wie auch Zeemanmodulation (magnetisches Feld) verwendet.

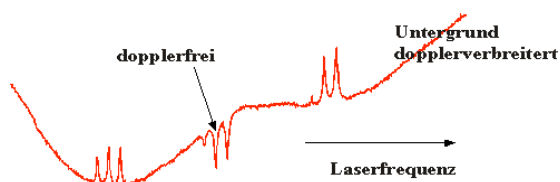


Abbildung 7.35: Sättigungsspektrum mit gegenläufigen Laserstrahlen.

Auch ein zweiter Laser kann verwendet werden um entweder die Frequenz oder die Amplitude der Absorption zu modulieren. Das wird z.B. bei der dopplerfreien Spektroskopie verwendet. wo

man mit einem Laser die Populationen der Atome moduliert und sie mit einem anderen, gegenläufigen, abfragt.

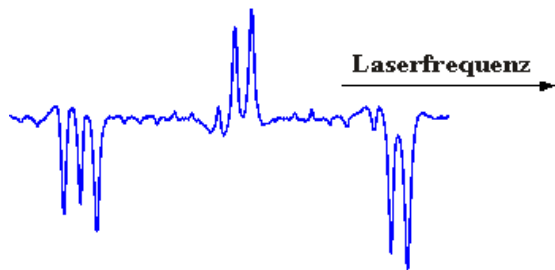


Abbildung 7.36: Dopplerfreies Spektrum nach Demodulation.

Als Alternative zum Ein- und Ausschalten der Absorption kann auch die Laserfrequenz zwischen verschiedenen Frequenzen hin- und her geschoben werden. Dies kann z.B. mit einem elektrooptischen Modulator erreicht werden: Anlegen einer Hochspannung variiert hier den optischen Weg im Kristall und erzeugt so über eine Phasenmodulation des transmittierten Lichtes eine Frequenzmodulation.

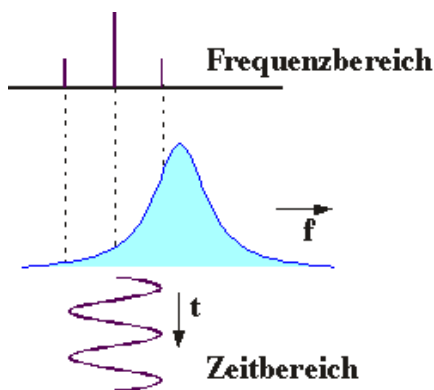


Abbildung 7.37: Differenzierung mit Hilfe der Frequenzmodulation.

Damit prägt man einem zunächst monochromatischen Laserstrahl Seitenbanden bei der Modulationsfrequenz und ihren Harmonischen auf. Auf einem Detektor sieht man zunächst aber keinen Effekt, da die Intensität dadurch nicht verändert wird. Wenn die Modulationsfrequenz vergleichbar ist mit der Linienbreite ist die Absorption

der Seitenbanden unterschiedlich.

Im Zeitbereich kann das so interpretiert werden, dass die Frequenz zwischen einem Wert niedriger Absorption und einem Wert hoher Absorption hin- und her springt. Dadurch entsteht auf dem Detektor eine zeitabhängige Komponente bei der Modulationsfrequenz. Ist diese auch hoch genug, dass sie außerhalb des Bereiches des Laserrauschens liegt, so kann man eine Empfindlichkeit erreichen, die praktisch nur noch durch das Schrotrauschen begrenzt ist.

7.4.4 Phasenempfindliche Detektion

Das Ziel einer Modulationstechnik ist es, dem interessierenden Signalanteil eine bestimmte Zeitabhängigkeit aufzuprägen, um ihn dadurch von den übrigen Signalanteilen unterscheiden zu können. Man erhält damit ein Signal

$$S_{\Sigma}(t) = S_0 + S \cos(\omega_m t).$$

Hier bezeichnet S_{Σ} das gesamte detektierte Signal, S_0 das nicht modulierte Hintergrundsignal (das aber auch zeitabhängig ist) und S den relevanten Signalanteil.

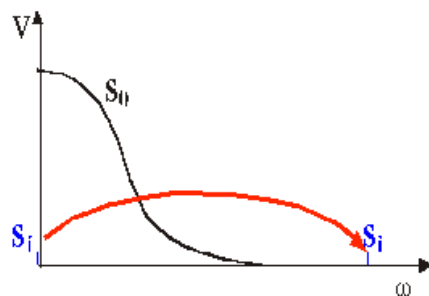


Abbildung 7.38: Verschiebung der Trägerfrequenz.

Prinzipiell ist es jetzt möglich, den interessierenden Signalanteil S_i vom Hintergrundsignal S_0 zu trennen indem man ein schmalbandiges Filter bei der Frequenz ω_m verwendet. Allerdings sind so schmalbandige Filter meist nicht erhältlich und die Frequenz ω_m ist nicht immer genügend stabil. Es ist deshalb einfacher und wirksamer, einen phasenempfindlichen Verstärker zu

verwenden (?Lock-In Verstärker?), der die Zeitabhängigkeit $\cos(\omega_m t)$ verwendet um genau den Signalanteil zu verstärken, der in Phase mit diesem Signalanteil moduliert ist. Dazu kann man einen Mischer verwenden, welcher die beiden Signale multipliziert. Das Signal nach dem Mischer lautet somit

$$S_M(t) = S_\Sigma(t) \cos(\omega_m t) = (S_0 + S \cos(\omega_m t)) \cos(\omega_m t) \quad (7.4.6)$$

Es enthält somit Signalteile bei den Frequenzen 0 , ω_m und $2\omega_m$. Ein Tiefpassfilter kann den zeitunabhängigen Teil herausfiltern, welcher das gewünschte Signal enthält.

7.4.5 Erhöhung der Empfindlichkeit durch Modulation

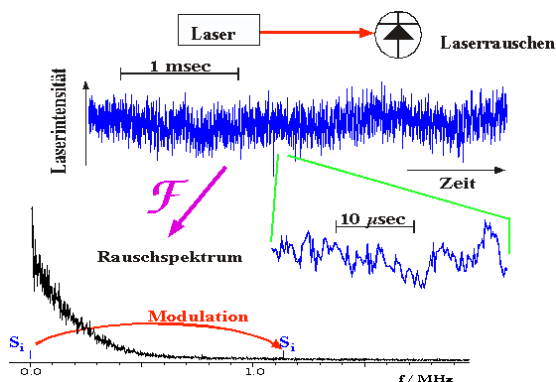


Abbildung 7.39: Rauschen bei verschiedenen Frequenzen.

Modulation kann die Empfindlichkeit wesentlich erhöhen indem unerwünschte Störungen eliminiert werden. Der einfachste Fall ist die Eliminierung von Laserrauschen durch Modulation des Signals. In der Figur ist ein typisches Rauschsignal eines Farbstofflasers dargestellt. Auf der Zeitskala der oberen Spur sind die Intensitätswerte völlig unkorreliert. Auf einer kürzeren Zeitskala stellt man aber fest dass die Schwankungen nicht beliebig schnell sind. Zwei unmittelbar aufeinanderfolgende Messungen sind damit korreliert.

Die sieht man genauer wenn man das Signal Fourier transformiert: Der weitaus größte Teil des

Rauschens besitzt Frequenzen von weniger als 0.5 MHz. Moduliert man das Signal mit mehr als 1 MHz und wendet phasempfindliche Detektion, so kann man die Messung offenbar in einem Bereich durchführen wo das Rauschen relativ gering ist.

7.4.6 Anwendungen

Eine der wichtigsten Anwendungen der Laserspektroskopie außerhalb der Physik ist seit einigen Jahren der Nachweis von Spurengasen in der Atmosphäre. Dabei handelt es sich vor allem um Verunreinigungen wie Stickoxide, Schwefeldioxid, Lösungsmittel etc. Der Nachweis dieser Substanzen im Labor ist natürlich einfach, doch der Nachweis in der Atmosphäre stellt erhebliche Anforderungen. Ein wesentliches Problem ist die Tatsache, dass die gesuchten Substanzen nur geringe Verunreinigungen darstellen. Die Nachweismethode muss also sehr selektiv sein und die Empfindlichkeit darf durch andere Substanzen nicht beeinflusst werden.

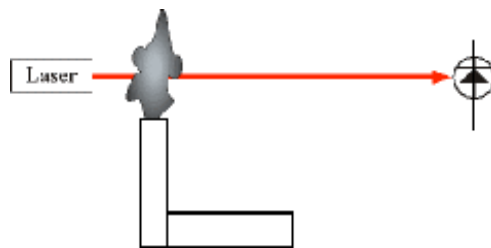


Abbildung 7.40: Transmissionsmessung mit Laserstrahl.

Der Nachweis ist relativ einfach wenn man einen Laserstrahl über eine große Distanz schicken und dort entweder einen Detektor oder einen Retroreflektor installieren kann. Damit wird das Experiment relativ analog zu einem Laborexperiment, mit dem wesentlichsten Unterschied, dass die Bedingungen im Strahlweg nicht kontrollierbar sind.

Die Messanordnung ist aber nicht mehr möglich, wenn es z.B. um Messungen in höheren Luftschichten geht, oder wenn man die Luftqualität

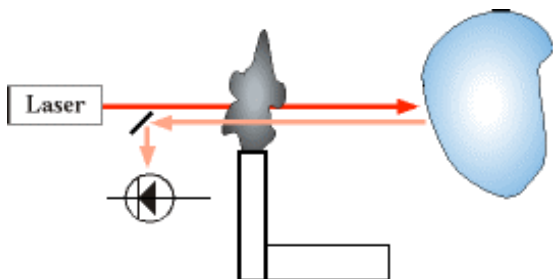


Abbildung 7.41: LAsER-Reflexionsmessung

über einer Stadt ortsaufgelöst messen möchte. Hier bleibt als einzige Möglichkeit die Messung der Rückstreuung an Aerosolen.

mensional in der Atmosphäre die Konzentration verschiedener Spurengase nachzuweisen.



Abbildung 7.43: LIDAR Messwagen des ISAS am Campusfest der UniDO.

Geräte dieser Art sind heute an vielen Orten im Einsatz und werden meist mobil aufgebaut.

7.5 Laser-Sicherheit

Laserklassen

Auge

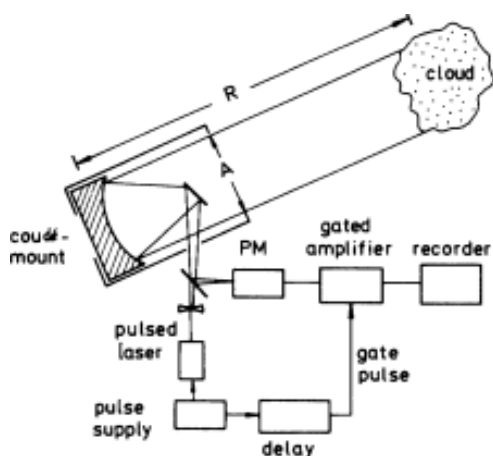


Abbildung 7.42: LIDAR Prinzip

Dieses Experiment wird als LIDAR (light detection and ranging) bezeichnet. Man verwendet dazu einen gepulsten Laser. Der Laserpuls wird durch ein Teleskop geschickt. Der Teil des Lichtes, der zurückgestreut wird, wird durch das gleiche Teleskop wieder fokussiert und auf einen Detektor gebracht. Wenn das zurückgestreute Licht zeitaufgelöst analysiert wird, kann man aus der Laufzeit den Ort feststellen, an dem das Licht gestreut wurde. Indem man die Wellenlänge des Pulses variiert kann die Absorption als Funktion der Wellenlänge gemessen werden. Aus der Messung bei zwei Wellenlängen (auf einer Resonanzlinie und daneben) kann die Konzentration der Substanz als Funktion des Ortes gemessen werden. Auf diese Weise ist es somit möglich, dreidi-