

Atomphysik (P6)

Zimmermann, Uni Tübingen
SS2000

- 1 Einleitung⁽¹⁾
Größe, Masse, Dichte, Energie, „back of the envelope“ Abschätzungen
- 2 Schrödinger-Gleichung und Wasserstoffatom⁽²⁾
2.1 Quantenmechanische Beschreibung des Elektrons
2.2 Reduzierte Masse
2.3 Schrödinger-Gleichung im rotationssymmetrischen Zentralpotential
2.4 Elektron im Coulomb-Potential
- 3 Einige Methoden zur Beobachtung atomarer Spektren
Dieses Kapitel fehlt im Skript. Die Themen sind aber im Skript zur ExpIII behandelt
3.1 Frank-Hertz-Versuch⁽³⁾
3.2 Photoeffekt⁽⁴⁾
3.3 Wasserstoff-Gasentladung
3.4 Absorptionsspektroskopie⁽⁵⁾
3.5 Dopplerfreie Sättigungsspektroskopie⁽⁵⁾
- 4 Was ist ein Photon⁽⁶⁾
4.1 klassische Hamiltonfunktion
4.2 Quantisierung
- 5 Einfache Anwendungen des Photonenbildes⁽⁷⁾
5.1 Spektrum einer thermischen Lichtquelle, (Planck, Wien, Stefan-Boltzmann)
5.2 Ratengleichungen (Einstein)
5.3 Laser im Ratengleichungsbild
- 6 Das Wasserstoffatom II: relativistische Theorie⁽⁸⁾
6.1 Relativistische Wellengleichungen
6.2 Elektron im Coulomb-Potential
6.3 Nichtrelativistischer Grenzfall
6.4 Bedeutung der σ -Matrizen
6.5 Dirac-Gleichung mit elektromagnetischem Feld
6.6 Spin-Bahn-Kopplung
6.7 Weitere Korrekturen in α^4
- 7 Einflüsse des Kerns
7.1 Isotropie und Volumeneffekt⁽⁹⁾
7.2 Hyperfeinstruktur⁽¹⁰⁾
- 8 Mehrerelektronenatome⁽¹¹⁾
8.1 Schalenmodell
8.2 Alkaliatome
8.3 Helium
8.4 jj-Kopplung
8.5 Exotische Atome⁽¹²⁾
- 9 Das Elektron im Magnetfeld
9.1 Landau-Niveaus⁽¹³⁾
9.2 Halbklassisches Modell⁽¹³⁾
9.3 Spin im homogenen Magnetfeld⁽¹³⁾
9.4 Zusätzliches Wechselfeld⁽¹³⁾
9.5 Penning-Falle und g-2 Messung⁽¹⁴⁾
9.6 Weitere Experimente (Rabi Apparatur, Doppelresonanz, optisches Pumpen)⁽¹⁵⁾

- 9.7 Kernspin-Tomographie ⁽¹⁵⁾
- 10 Atome im statischen Feld
 10.1 Zeeman und Paschen-Back-Effekt ⁽¹⁶⁾
 10.2 Allgemeine Lösungsstruktur ⁽¹⁷⁾
 10.3 Muonium und Positronium Grundzustand ⁽¹⁸⁾
 10.4 Stark-Effekt ⁽¹⁹⁾
- 11 Optische Übergänge
 11.1 Optische Blochgleichungen ⁽²⁰⁾
 11.2 Anregung und Übergangsrate ⁽²¹⁾
 11.3 Leistungsverbreiterung ⁽²²⁾
 11.4 Kopplungsoperator und Auswahlregeln ⁽²³⁾
 11.5 Hanle Effekt ⁽²⁴⁾
 11.6 Andere Verbreiterungsmechanismen ⁽²⁵⁾
 11.7 Optische Ramsey-Spektroskopie ⁽²⁶⁾
- 12 Lichtkräfte ⁽²⁹⁾
 12.1 Strahlungsdruck
 12.2 Magnetooptische Falle
 12.3 Optische Potentiale
 12.4 Kühlen unter die Dopplergrenze
 12.5 Kühlen unter die Rückstoßgrenze

Literatur

- 1) B Kapitel 2
- 2) A. Kapitel 9-12 und B Kapitel 3
- 3) C Kapitel 8.8
- 4) C Kapitel 5.3
- 5) D Kapitel 7.3
- 6) F 2.4.2 und E Kapitel 4
- 7) B Kapitel 6.3 und E Kapitel 1
- 8) F Kapitel 2 und H Kapitel 1
- 9) G Kapitel XI Complement D
- 10) C Kapitel 20.3
- 11) C Kapitel 17
- 12) B Kapitel 11
- 13) G Kapitel IV einschließlich Complement A bis F
- 14) B Kapitel 5.4
- 15) C Kapitel 20.6 und 20.7
- 16) B Kapitel 9.2
- 17) I Kapitel 1 oder 2?
- 18) G Kapitel XII Complement C
- 19) A Kapitel 16
- 20) E Kapitel 2.6
- 21) E Kapitel 2.3 und 2.4
- 22) E Kapitel 2.8
- 23) B Kapitel 6.2 und siehe Stichwort Auswahlregeln im Register
- 24) C Kapitel 22.5
- 25) B Kapitel 6.4
- 26) D Kapitel 14
- 27) C Kapitel 12.11 und 15.5; sowie K
- 28) J Kapitel 3
- 29) C Kapitel 22.6

- A) S. Gasiorowicz, Quantenphysik, Oldenbourg, München.
- B) T. Mayer-Kuckuk, Atomphysik, Teubner, Stuttgart.
- C) Haken und Wolf, Atom und Quantenphysik, Springer, Heidelberg.
- D) W. Demtröder, Laserspektroskopie, Springer, Heidelberg
- E) R. Loudon, The Quantum Theorie of Light, Clarendon Press, Oxford.
- F) H. Friedrich, Theoretische Atomphysik, Springer, Heidelberg
- G) C. Cohen- Tannoudji, Quantum Mechanics, Wiley, New-York.
- H) P. Schmüser Feynman-Graphen und Eichtheorien für Experimentalphysiker, Springer, Heidelberg.
- I) Döring, Quantenmechanik und Atomphysik
- J) F. Engelke, Teubner Stuttgart
- K) J.D. Bjorken, S. D. Drell, Relativistische Quantenmechanik, BI Wissenschaftsverlag

Der erste Teil der Vorlesung beinhaltet das übliche Pensum, wie es etwa in Prüfungen verlangt wird. Entsprechend gibt es viele mehr oder minder gute Lehrbücher. Die Stoffauswahl ist in B) ganz gut und entspricht ziemlich genau dem bisher üblichen Prüfungsstoff. An vielen Stellen ist die Darstellung knapp und teilweise sehr verkürzt, was das Verständnis erschwert. Das genaue Gegenteil ist G): sehr didaktisch, sehr genau und für Kapitel 9 wärmstens zu empfehlen, ansonsten sehr umfangreich. Die Bücher A, E, F, H, I, J und K behandeln die Theorie, wobei A eine sehr gelungene Mischung aus Knaptheit und Verständlichkeit ist. F ist noch knapper und bringt die Dinge auf wenigen Seiten auf den Punkt. Die Themenauswahl ist etwas unkonventionell und für ein Lernen auf die Prüfung nicht ideal. E ist ein typisches Quantenoptiklehrbuch und ein Klassiker, allerdings in Englisch. H ist was für künftige Teilchenphysiker. Es beginnt mit Diracgleichung und arbeitet sich über Eichtheorien und Higgs Boson bis zur QCD vor. Sehr zu empfehlen für Experimentalphysiker und als Einstieg ins Gebiet. Für Atomphysiker ist das erste Kapitel mit seiner kompakten und balastfreien Darstellung der Dirac-Theorie interessant. Der zweite Teil der Vorlesung beinhaltet unter anderem Themen der heutigen Forschung. Naturgemäß gibt es für diese Themen bisher noch keine etablierten Lehrbücher. Hier muß man findig sein und teilweise Originalarbeiten lesen (etwas für besonders Interessierte, die Atomphysik als Schwerpunkt weitermachen wollen).

Kapitel 1 Einleitung

Wovon reden wir?

Zunächst wollen wir uns die Begriffe und Größenordnungen vergegenwärtigen, die für die Beschreibung und das Verständnis von Atomen von Bedeutung sind.

Atome bestehen aus einem Kern und einer Elektronenhülle. Betrachten wir die Eigenschaften dieser beiden Teile eines Atoms:

Der Kern

- besteht aus Protonen und Neutronen.
- kann in einem vereinfachten Bild aufgefasst werden als positiv geladene, weitgehend kugelförmige und isotrope Ladungsverteilung mit einem Drehimpuls (Spin) und einem magnetischen Moment.
- ist schwer, d.h. der Kern enthält fast die gesamte Masse des Atoms.
- ist klein, d.h. nimmt nur einen vernachlässigbar kleinen Teil des atomaren Volumens ein.
- definiert den Namen und Charakter des Atoms. Er bildet eine charakteristische "elektromagnetische Falle" für Elektronen.
- ist unter "normalen Bedingungen" statisch, d.h. ändert seine Eigenschaften nicht.

Die Elektronenhülle

- besteht je nach Element aus einem oder vielen Elektronen. Die Elektronen sind punktförmig, negativ geladen und leicht.
- bestimmt die Größe, d.h. das Volumen des Atoms.
- reagiert auf äußere Einflüsse d.h. verändert seine Form und seine Eigenschaften unter Einfluß von Licht oder statischer und dynamischer elektromagnetischer Felder.

Zahlen

Die **Größe** des Atomkernes beträgt ungefähr

$$r_K = 5 \cdot 10^{-15} \text{ m} = 5 \text{ fm}$$

und ist damit 20.000mal kleiner als die Elektronenhülle.

Die **Ausdehung** der Elektronenhülle beträgt etwa

$$r_H = 1 \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ Å}^0$$

und ist damit 5000mal kleiner als die Wellenlänge von sichtbarem Licht und etwa ein Million mal kleiner als der Durchmesser eines Haars.

Anschaulich bedeuten diese Verhältnisse, daß bei einem angenommenen Kerndurchmesser von 1 m die Elektronenhülle eines Atoms die Ausdehnung einer Großstadt hätte (etwa 20 km).

Die **Massen** der Bausteine eines Atoms betragen:

$$\text{Elektron: } m_e = 9,10956 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

Proton:

$$m_p = 1,67261 \cdot 10^{-27} \text{ kg} = 1836 \text{ } m_e$$

$$\text{Neutron: } m_n = 1,67482 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$\text{Kern: } m_K \simeq 1 \text{ bis } 200 \cdot m_p$$

Bemerkung: Die Tatsache, daß die Masse eines Atoms vom Kern, die Größe aber von der Hülle bestimmt wird erlaubt sofort eine Aussage über die Dichte von normaler Materie zu machen. Schätzt man z.B. den Abstand zwischen zwei Atomen in metallischem Lithium mit ungefähr 3 Å ab, so erhält man für die Dichte den Wert

$$n \approx \frac{7 \cdot m_p}{(3 \text{ Å})^3} = 0,4 \frac{\text{g}}{\text{cm}^3},$$

was dem tatsächlichen Wert von 0,542 g/cm³ erstaunlich gut trifft. Dagegen beträgt in einem Neutronenstern die Dichte

$$n \sim \frac{1 \text{ } m_p}{(1 \cdot 10^{-15})^3} = 1,67 \cdot 10^{15} \frac{\text{g}}{\text{cm}^3}.$$

Bestünde die Erde aus Atomen ohne Elektronenhülle würde sie auf einen Kubus von etwa 150 m Kantenlänge schrumpfen.

Die **Energie** eines Elektrons im elektrischen Feld des Atomkerns setzte sich aus kinetischer und potentieller Energie zusammen. Die potentielle Energie beträgt

$$U \sim \int_{\infty}^{r_H} F ds = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{r_H}$$

d.h. für $z = 1$ und $r_H = 0.5 \text{ \AA}$ erhält man $U \sim 10^{-18} \text{ J} \sim 6 \text{ eV}$. Nimmt man als kinetische Energie noch einmal denselben Betrag an, so ergibt sich für die Bindungsenergie des Elektrons etwa 12 eV.

Im thermischen Gleichgewicht gilt $U \sim kT$. Damit errechnet sich aus der Bindungsenergie eine Temperatur von etwa 150 000 K. Erhitzt man ein atomares Gas auf diese Temperatur, beginnen die Elektronen abzudampfen und man erhält zunächst geladene Atome, Ionen und schließlich ein **Plasma**. Unter "normalen" Bedingungen sind Atome also stabil.

Ist eine **quantenmechanische Beschreibung** nötig? Wir schätzen die Nullpunktenergie ab: Die Orts-Impuls-Unschärfe $\Delta x \cdot \Delta p > \hbar$ ergibt eine Untergrenze für den Elektronenimpuls p_e :

$$r_H \cdot p_E > \hbar \Rightarrow p_e > \frac{\hbar}{r_H}$$

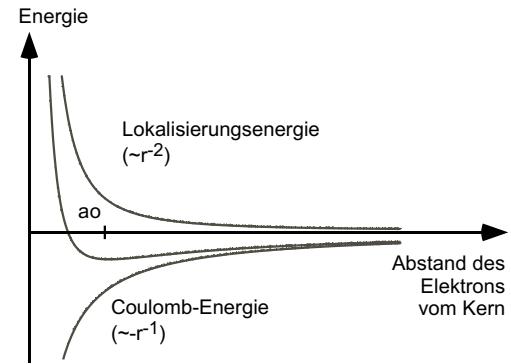
Mit dem Impuls ist eine Nullpunktenergie verbunden:

$$\frac{p_e^2}{2m_e} \sim \frac{\hbar^2}{2m_e \cdot r_H^2}$$

$$\sim 12 \cdot 10^{-19} \text{ J} = 7.5 \text{ eV}$$

Dies ist vergleichbar mit der klassischen Bindungsenergie von 13.7 eV.

Dies suggeriert folgendes Bild: Das „Fallenpotential“ des Kerns komprimiert das Elektron auf einen sehr kleinen Raum. Dabei steigt die Nullpunktenergie aufgrund der Unschärferelation. Die Größe des Atoms ist durch das Gleichgewicht zwischen potentieller Energie und Nullpunktenergie gegeben.



Ist eine **relativistische Beschreibung** nötig? Um eine Vorstellung von der Geschwindigkeit des Elektrons zu bekommen benutzen wir das Äquipartitionstheorem der Thermodynamik.

$$\left\langle p \cdot \frac{dH}{dp} \right\rangle = \left\langle r \cdot \frac{dH}{dr} \right\rangle$$

wobei H die Hamiltonfunktion ist. In unserem Fall gilt:

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r}$$

und wir erhalten folgenden Zusammenhang für die Mittelwerte:

$$\underbrace{\left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle}_{\text{doppelte mittlere kinetische Energie}} = \underbrace{\left\langle \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r} \right\rangle}_{\text{mittlere potentielle Energie}}$$

Um einen Ausdruck für den Radius r zu erhalten verwenden wir die Unschärferelation und erhalten eine untere Grenze für die Ausdehnung der Wellenfunktion

$$r_H > \frac{\hbar}{p_e}$$

Mit der Annahme, daß das H-Atom den Fall kleinster Unschärfe realisiert, d.h. $r_H = \frac{\hbar}{p_e}$ folgt

$$\left\langle \frac{p_e^2}{m} \right\rangle = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \cdot \left\langle \frac{e^2 p_e}{\hbar} \right\rangle,$$

und, falls p_e zeitlich konstant ist,

$$\frac{p_e}{m} = v_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{\hbar} \quad \text{bzw.}$$

$$\frac{v_e}{c} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{\hbar c} =: \alpha \simeq \frac{1}{137} .$$

Der genaue Wert der Feinstrukturkonstanten
 $\alpha = 7.29735308 \cdot 10^{-3}$. Sie ist dimensionslos und
daher in jedem Einheitensystem gleich groß.
Also: Im Wasserstoff bewegt sich das Elektron
im Grundzustand mit einem 137-tel der Lichtge-
schwindigkeit. Relativistische Effekte sind zu er-
warten, aber klein.

Kapitel 2 Schrödinger-Gleichung und Wasserstoffatom

2.1 Quantenmechanische Beschreibung des Elektrons

Der Ort eines Elektrons wird durch eine komplexwertige Funktion $\psi(\vec{r}, t)$ beschrieben, wobei $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der man das Elektron zur Zeit t am Ort \vec{r} antrifft. Das Elektron ist punktförmig. Die Wellenfunktion gehorcht der **Schrödinger-Gleichung**

$$\left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m_e} + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)$$

Der Hamilton setzt sich aus einer Summe von Operatoren zusammen, von denen jeder von einer anderen Variablen abhängt. Man kann dann die Variablen trennen, d.h. für jede Variable eine unabhängige Differentialgleichung finden. Dazu macht man zunächst den Produktansatz

$$\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) \cdot T(t).$$

Nach Einsetzen in die Schrödinger-Gleichung ergibt sich

$$\left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m_e} + V(\vec{r}) \right) u(\vec{r}) \cdot T(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u(\vec{r}) \cdot T(t)$$

und nach Division durch $u(\vec{r}) \cdot T(t)$ folgt

$$\underbrace{\frac{1}{u(\vec{r})} \left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m_e} + V(\vec{r}) \right) u(\vec{r})}_{\text{unabhängig von } t} = \underbrace{i\hbar \frac{1}{T(t)} \frac{\partial}{\partial t} T(t)}_{\text{unabh. von } \vec{r}}$$

Da beide Seiten jeweils nur von einer der beiden Variablen abhängen ist das Gleichheitszeichen für beliebige Orte und Zeiten nur erfüllt, wenn beide Seiten konstant sind. Wir nennen die Konstante E und erhalten je eine Gleichungen für $T(t)$ und $u(\vec{r})$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} T(t) = E \cdot T(t)$$

und

$$H u(\vec{r}) = E u(\vec{r})$$

wobei wir die Definition

$$H \equiv -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m_e} + V(\vec{r})$$

für den **Hamilton-Operator** verwendet haben. Die Lösung der zeitabhängigen Gleichung (2.1) lautet

$$T(t) = C \cdot e^{-iE/\hbar t}.$$

Gleichung (2.2) heißt **zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung** und stellt eine Eigenwertgleichung mit dem Spektrum E_n und den Lösungen $u_E(\vec{r})$ dar. Die Lösungen $u_E(\vec{r})$ bilden einen Satz von Basisvektoren. Ein allgemeiner Elektronenzustand setzt sich als Linearkombination der **Basisfunktionen**

$$c_n = u_E(\vec{r}) e^{-iE_n/\hbar t}$$

zusammen. Die Basisfunktionen sind Zustände mit scharfer Energie. Ihre Wahrscheinlichkeitsverteilung ist

$$|c_n|^2 = |u_n(\vec{r}) \cdot e^{-iE_n/\hbar t}|^2 = |u_n(\vec{r})|^2 \cdot \underbrace{|e^{-iE_n/\hbar t}|^2}_1.$$

und damit zeitlich konstant. Die Basisfunktionen bilden also stationäre Zustände. In wie weit lässt sich die klassische Vorstellung eines Elektrons, das den Kern wie ein Satellit umkreist in die quantenmechanische Beschreibung hinübertragen? Etwas genauer formuliert stellt sich die Frage, ob stationäre Zustände einen Teilchenstrom tragen können.

Teilchenstrom

Zur Herleitung des Teilchenflußdichte-Operators betrachtet man zunächst die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte an einem Ort in Abwesenheit eines äußeren Potentials:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(r, t)|^2 &= \psi \cdot \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} \\ &= \frac{1}{i\hbar} (\psi \cdot \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi^* - \psi^* \cdot \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi) \\ &= -\vec{\nabla} \cdot \underbrace{\frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)}_{:= \vec{j}(\vec{r})} \\ &\equiv -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Bezeichnet man die Wahrscheinlichkeitsverteilung als $|\psi(\vec{r}, t)|^2 \equiv \rho(\vec{r}, t)$ erhält man daher die **Kontinuitätsgleichung**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r})$$

mit einer sinnvollen physikalischen Interpretation des so definierten Teilchenflußdichte-Operators \vec{j} . Beispiel: Für die Wellenfunktion eines freien Elektrons

$$\psi(\vec{r}, t) = c \cdot e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}$$

erhält man die Teilchenflußdichte

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (i\vec{k} \psi^* \psi + i\vec{k} \psi \psi^*) = \frac{\hbar \vec{k}}{m} \rho(\vec{r}, t)$$

oder

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\langle \vec{p} \rangle}{m} \rho(\vec{r}, t) = \langle \vec{v} \rangle \rho(\vec{r}, t).$$

In genauer Analogie zur Ladungsstromdichte in der Elektrodynamik erhält man für die Wahrscheinlichkeitsstromdichte das Produkt aus Geschwindigkeit und Wahrscheinlichkeitsdichte. Der Operator \vec{j} funktioniert also. Auch im Atom tragen die stationären Zustände des Elektrons einen Teilchenstrom. In diesem Sinn umrundet das Elektron den Kern.

2.2 Die reduzierte Masse

Elektron und Kern bilden ein Gesamtsystem. Am einfachsten wäre die Beschreibung im Koordinatensystem, in dem der Kern ruht. Im Laborsystem betrachtet bewegt sich allerdings sowohl das Elektron als auch der Kern auf einer Kreisbahn. Beim Übergang vom Laborsystem zum Kernsystem begibt man sich also in ein beschleunigtes System. Es erfolgt dann aber kein Übergang von einem Inertialssystem in ein anderes, so daß Scheinkräfte auftreten können. Sinnvoller ist daher der Übergang in das **Schwerpunktsystem**, welches sich unbeschleunigt relativ zum Laborsystem bewegt. Es zeigt sich, daß das die Struktur der Schrödinger-Gleichung nicht ändert, sondern lediglich die Masse des Elektrons durch eine effektive Masse ersetzt werden muß.

Zur Beschreibung des Gesamtatoms machen wir für den Hamilton-Operator den Ansatz

$$H = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}_e^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}_K^2}{2m_K} + V(|\vec{r}_e - \vec{r}_K|)$$

Das Potential V hängt nur vom *Abstand* zwischen Kern und Elektron ab.

Wir definieren die Schwerpunktvariablen

$$\begin{aligned} \vec{R} &:= \frac{m_e}{m_e + m_K} \cdot \vec{r}_e + \frac{m_K}{m_e + m_K} \cdot \vec{r}_K \\ &= \underbrace{\frac{m_e \cdot m_K}{m_e + m_K}}_{:=\mu} \left(\frac{1}{m_K} \cdot \vec{r}_e + \frac{1}{m_e} \cdot \vec{r}_K \right) \end{aligned}$$

und

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_K.$$

Die Orte des Elektrons und des Kerns schreiben sich dann als

$$\vec{r}_e = \vec{R} + \frac{\mu}{m_e} \cdot \vec{r}$$

bzw.

$$\vec{r}_K = \vec{R} - \frac{\mu}{m_K} \cdot \vec{r}.$$

Außerdem lautet nun die Wellenfunktion des Elektrons

$$\varphi(\vec{r}_e, \vec{r}_K) = \varphi\left(\vec{r}_e(\vec{R}, \vec{r}), \vec{r}_K(\vec{R}, \vec{r})\right) = \tilde{\varphi}(\vec{R}, \vec{r}).$$

Für die kinetische Energie rechnet man sich aus

$$\begin{aligned} \vec{\nabla}_{r_e}^2 &= \vec{\nabla}_R^2 \left(\frac{\mu}{m_K} \right)^2 + \vec{\nabla}_r^2 \\ \text{und} \quad \vec{\nabla}_{r_K}^2 &= \vec{\nabla}_R^2 \left(\frac{\mu}{m_e} \right)^2 + \vec{\nabla}_r^2. \end{aligned}$$

(siehe Bemerkung am Ende des Abschnitts).

Eingesetzt in den Hamilton ergibt das

$$H = \underbrace{\frac{-\hbar^2}{2(m_e + m_K)} \vec{\nabla}_R^2}_{\stackrel{:=H_S}{\text{nur von } \vec{R} \text{ abhängig.}} \text{ (Schwerpunktsbewegung)}} + \underbrace{\frac{-\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_r^2}_{\stackrel{:=H_i}{\text{nur von } \vec{r} \text{ abhängig.}} \text{ (innere Energie)}} + V(\vec{r}).$$

Wieder erhält man eine Summe von Operatoren mit der Möglichkeit zur Variablen-trennung von

\vec{r} und \vec{R} . Die Lösung kann man also als das Produkt der Schwerpunktswellenfunktion und Relativwellenfunktion schreiben:

$$\tilde{\varphi}(\vec{R}, \vec{r}) = \phi(\vec{R}) \cdot \varphi(\vec{r}),$$

wobei

$$\frac{-\hbar^2 \vec{\nabla}_R^2}{2(m_e + m_K)} \phi(\vec{R}) = E_s \phi(\vec{R})$$

und

$$\left(-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}_r^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right) \varphi(\vec{r}) = E_i \varphi(\vec{r}).$$

Die Lösung $\phi(\vec{R})$ der Schwerpunktbewegung ist die eines freien Teilchens der Masse $m_e + m_K$

$$\phi(\vec{R}) = C \cdot e^{i(\vec{K}\vec{R} - E_s/\hbar t)},$$

mit

$$E_s = \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2(m_e + m_K)}.$$

Die Herleitung der Lösung der inneren Bewegung ist schwieriger und wird nun ausführlich dargestellt werden.

Bemerkung: Berechnung von $\vec{\nabla}_e^2$ und $\vec{\nabla}_K^2$

Für die x, y, z -Komponenten von $\vec{r}, \vec{R}, \vec{r}_e$ gilt unabhängig:

$$X = \frac{\mu}{m_K} \cdot x_e + \frac{\mu}{m_e} \cdot x_K$$

$$x = x_e - x_K$$

und analog für Y, Z und y, z .

Gesucht ist nun der Nabla-Operator

$$\vec{\nabla}_e^2 = \left(\frac{\partial^2}{\partial x_e^2}, \frac{\partial^2}{\partial y_e^2}, \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \right)$$

und der entsprechende Ausdruck für $\vec{\nabla}_K^2$.

Zunächst berechnen wir die einzelnen Differentiale des Nabla-Operators, also

$$\frac{\partial^2}{\partial x_e^2} \varphi(\vec{R}, \vec{r}) = \frac{\partial}{\partial x_e} \left(\frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial x_e} \right)$$

Die Anwendung der Kettenregel ergibt

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial x_e} &= \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial X} \cdot \frac{\partial X}{\partial x_e} + \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial x_e} + \\ &\quad + \cancel{\frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial Y} \cdot \frac{\partial Y}{\partial x_e} + \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x_e} +} \\ &\quad + \cancel{\frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial Z} \cdot \frac{\partial Z}{\partial x_e} + \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial z} \cdot \frac{\partial z}{\partial x_e}} = 0 \\ &= \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial X} \cdot \frac{\partial X}{\partial x_e} + \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial x_e} \end{aligned}$$

und mit der obigen Zerlegung der Schwerpunktskoordinaten nach kartesischen Koordinaten ist

$$\frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial X} = \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial X} \cdot \frac{\mu}{m_K} + \frac{\partial \varphi(\vec{R}, \vec{r})}{\partial x_e}.$$

Auf gleiche Weise erhält man für die gesuchte zweite Ableitung

$$\frac{\partial^2}{\partial x_e^2} = \frac{\partial^2}{\partial X^2} \cdot \left(\frac{\mu}{m_K} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2 \frac{\mu}{m_K} \frac{\partial^2}{\partial x \partial X}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_K^2} = \frac{\partial^2}{\partial X^2} \cdot \left(\frac{\mu}{m_e} \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2 \frac{\mu}{m_e} \frac{\partial^2}{\partial x \partial X}$$

und die entsprechenden Ausdrücke für die y - und z -Koordinaten.

Der Nabla-Operator lautet damit

$$\vec{\nabla}_e^2 = \vec{\nabla}_r^2 + \left(\frac{\mu}{m_K} \right)^2 \vec{\nabla}_R^2 + 2 \frac{\mu}{m_K} \vec{\nabla}_r \vec{\nabla}_R$$

$$\vec{\nabla}_K^2 = \vec{\nabla}_r^2 + \left(\frac{\mu}{m_e} \right)^2 \vec{\nabla}_R^2 - 2 \frac{\mu}{m_e} \vec{\nabla}_r \vec{\nabla}_R.$$

2.3 Die Schrödinger-Gleichung mit kugelsymmetrischen Zentralpotential

Der Kern des Atoms erzeugt das Potenzial

$$V(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi e_0} \cdot \frac{Z \cdot e^2}{r}.$$

Da das Potential kugelsymmetrisch ist, ist es sinnvoll in der weiteren Beschreibung Polarkoordinaten zu verwenden:

$$\begin{aligned} x &= r \cdot \cos \varphi \sin \theta \\ y &= r \cdot \sin \varphi \sin \theta \\ z &= r \cdot \cos \theta. \end{aligned}$$

Desweiteren muß der Laplace-Operator in Kugelkoordinaten umgerechnet werden. Man erhält nach einiger Rechnung den Ausdruck

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{1}{r^2} \cdot \left(\frac{L}{\hbar} \right)^2$$

mit

$$\left(\frac{L}{\hbar} \right)^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

L ist der Drehimpuls-Operator, der als

$$\vec{L} := \vec{r} \times \vec{p}$$

definiert ist. Damit lautet die Schrödinger-Gleichung:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + V(r) + \frac{1}{2\mu \cdot r^2} \cdot L^2 \right\} \Psi = E\Psi$$

Interessant ist, daß die gesamte Winkelabhängigkeit von H nur in L steckt. Da der Drehimpuls-Operator L unabhängig von r ist gilt

$$[H, L] = 0.$$

Der Drehimpuls ist also in einem radialsymmetrischen Potential eine Erhaltungsgröße.

Wieder können wir Variablen separieren. Mit

$$\psi(r, \varphi, \theta) = R(r) \cdot Y(\varphi, \theta)$$

erhalten wir

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V) \right\} R \cdot Y$$

$$= \left(\frac{L}{\hbar} \right)^2 \cdot R \cdot Y$$

Die Division durch $R \cdot Y$ ergibt

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \cdot R + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2} (E - V) &= \\ \text{nur } r &= \\ \frac{1}{Y} \left(\frac{L}{\hbar} \right)^2 Y &= \text{const.} \\ \text{nur } \varphi, \theta & \end{aligned}$$

Zunächst erhalten wir die bekannte Eigenwertgleichung für L^2

$$L^2 \cdot Y = \hbar^2 \cdot \text{const} \cdot Y,$$

Mit den bekannten Eigenwerten

$$\text{const.} = I(I+1)$$

und den **Kugelflächenfunktionen** $Y_{l,m}(\varphi, \theta)$ als Eigenfunktionen.

Für den **Radialteil** ergibt die Variablen-trennung die Gleichung

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \cdot \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 I(I+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right\} R &= \\ \frac{V_z(r)}{ \left[\frac{\hbar^2 I(I+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right] } &= E R. \end{aligned}$$

Zusammenfassend gilt, daß in einem kugelsymmetrischen Potential die Lösungen der Schrödinger-Gleichung aus dem Produkt der Kugelflächenfunktionen $Y_{l,m}(\varphi, \theta)$ und der Radialfunktion

$R(r)$ bestehen, die vom jeweiligen Potential abhängt und Lösung der radialem Schrödinger-Gleichung sind.

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung im Zentralpotenzial reduziert sich also auf ein **eindimensionales** Problem mit einem Teilchen der reduzierten Masse μ in einem effektiven Potential

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_z(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}).$$

Daraus folgt:

Der erste Term ist das sogenannte Zentrifugalpotential

$$V_z(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{I(I+1)}{r^2}.$$

Es geht mit r^2 ist repulsiv und wächst mit zunehmenden Drehimpuls.

$$R(\rho) \sim e^{-\rho/2}.$$

Für $\rho \rightarrow 0$ gilt

$$\left(\frac{d}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} - \frac{I(I+1)}{\rho^2} \right) \cdot R(\rho) = 0$$

Versuchen wir einen Potenzansatz:

$$R(\rho) \sim \rho^s$$

Eingesetzt ergibt sich

$$s(s-1) \rho^{s-2} + \frac{2}{\rho} \cdot s \rho^{s-1} - \frac{I(I+1)}{\rho^2} \cdot \rho^s = 0$$

oder

$$s^2 + s - I(I+1) = 0,$$

mit den Lösungen

$$s_{1/2} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + I^2 + I} = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(I + \frac{1}{2}\right)^2}.$$

Die erste Lösung heißt "reguläre" Lösung:

$$s_1 = I, \quad R(\rho) \sim \rho^I.$$

Sie verhält sich für kleine Abstände vernünftig

$$R(0) = 0.$$

Die zweite Lösung ist die irreguläre Lösung:

$$s_2 = -I-1, \quad R(\rho) \sim \rho^{-(I+1)}.$$

Sie divergiert für kleine Abstände

$$R(0) = \infty$$

und ist deshalb physikalisch wenig sinnvoll.

Als allgemeinen Ansatz für $R(\rho)$ setzen wir

$$R(\rho) = e^{-\rho/2} \cdot \rho^I \cdot \sum_{j=1}^{\infty} a_j \cdot \rho^j$$

$e^{-\rho/2}$: beschreibt Verhalten für $\rho \rightarrow \infty$

ρ^I : beschreibt Verhalten für $\rho \rightarrow 0$

Um einen vernünftigen Lösungsansatz zu erraten untersuchen wir zunächst wie die Lösung für **große** und für **kleine** Abstände des Elektrons vom Kern aussieht. Für $\rho \rightarrow \infty$ gilt

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4} \right) R(\rho) \simeq 0$$

$$\sum_{j=1}^{\infty} a_j \cdot \rho^j \text{ beschreibt Verhalten für den Rest } := H(\rho).$$

Interessant ist nun, daß das Polynom eine endliche Ordnung haben muß, denn für $\rho \rightarrow \infty$ wird $R(\rho)$ nur dann von $e^{-\rho/2}$ dominiert, wenn die Taylorreihe bei einem bestimmten j_{\max} abbricht. Daher gilt

$$H(\rho) = \sum_{j=0}^{j_{\max}} a_j \cdot \rho^j.$$

Man muß also nur eine **endliche** Zahl von Koeffizienten a_n ausrechnen und kann das Problem so lösen.

Im weiteren wollen wir berechnen, wie groß j_{\max} ist. Dazu setzen wir den allgemeinen Ansatz in die Schrödinger-Gleichung ein, was zu einer Rekursionsformel für die Koeffizienten a_j führt:

$$a_{j+1} = a_j \cdot \frac{j+I+1-\lambda}{(j+1)(j+2I+2)}$$

Für $j > j_{\max}$ müssen die a_j verschwinden, es muß also gelten

$$a_{j_{\max}+1} = a_{j_{\max}} \frac{j_{\max}+I+1-\lambda}{(j_{\max}+1)(j_{\max}+2I+2)} = 0$$

und daher folgt

$$j_{\max} + I + 1 - \lambda = 0 \text{ oder } j_{\max} = \lambda - I - 1.$$

Da j_{\max} und $I \in \mathbb{N}$, ist λ eine natürliche Zahl! Man nennt λ die **Hauptquantenzahl** n . Weiter muß $j_{\max} \geq 0$ sein, da wir nur reguläre Lösungen zulassen. Um diese Bedingung zu erfüllen muß gelten

$$n > 0 \quad (n_{\min} = 1 \text{ für } I = 0)$$

und

$$I + 1 > 0 \quad (I_{\min} = 0 \text{ für } n = 1).$$

Die Energie des Wasserstoffatoms ergibt sich aus der Definition von λ mit der Ersetzung $\lambda = n$

$$E = -\frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}.$$

Sie ist **quantisiert**, das heißt die Energie des Elektrons kann nur **diskrete** Werte annehmen. Der Ausdruck für die Energie ist negativ, da das Atom im Grundzustand, also für $n = 1$, den Zustand minimaler Energie einnimmt. Die Ruheenergie eines Teilchens der Masse μ ist μc^2 . Im Grundzustand ($n = 1$) beträgt die Energie etwa $\alpha^2 \simeq \frac{1}{137^2}$ der Ruhemasse des Elektrons ($\mu \simeq m_e$).

Wie lauten nun die Lösungsfunktionen? Den Koeffizienten a_0 erhält man durch Normierung der Grundzustandswellenfunktion.

$$R_{1,0}(\rho) = e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot \rho^0 \cdot a_0$$

als

$$a_0 = \frac{\hbar}{\mu c \alpha}.$$

Zur Normierung muß man zurückkehren in die Ortsvariable r . Die Grundzustandswellenfunktion lautet dann

$$R_{1,0}(r) = 2 \cdot a_0^{-\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{r}{a_0}}.$$

Die Koeffizienten a_j mit $j > 0$ berechnen sich aus obiger Rekursionsformel. Man findet, daß die Funktion $H(\rho)$ gerade den zugeordneten **Laguerre-Polynomen** $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ entspricht. Die Wellenfunktionen der niedrigsten Zustände lauten

$$n=1, l=0: \quad R_{1,0}(r) \sim e^{-r/a_0}$$

$$n=2, l=0: \quad R_{2,0}(r) \sim \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$$

$$n=2, l=1: \quad R_{2,1}(r) \sim \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

$$n=3, l=0:$$

$$R_{3,0}(r) \sim \left[1 - \frac{2}{3} \frac{r}{a_0} + \frac{2}{27} \left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right] e^{-r/3a_0}$$

$$n=3, l=1: \quad R_{3,1}(r) \sim \frac{r}{a_0} \cdot \left(1 - \frac{r}{6a_0}\right) e^{-r/3a_0}$$

$$n=3, l=2: \quad R_{3,2}(r) \sim \left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0}$$

usw.

Die Größe des Wasserstoffatoms im Grundzustand läßt sich aus der Wahrscheinlichkeit W ableiten, das Elektron im Abstand r vom Kern zu finden. Das Volumen einer infinitesimalen Kugelschale ist $r^2 dr$, also ist

$$W \, dr \sim R_{10}^2(r) \cdot r^2 \, dr,$$

also

$$W(r) \sim \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2.$$

$W(r)$ hat ein Maximum bei

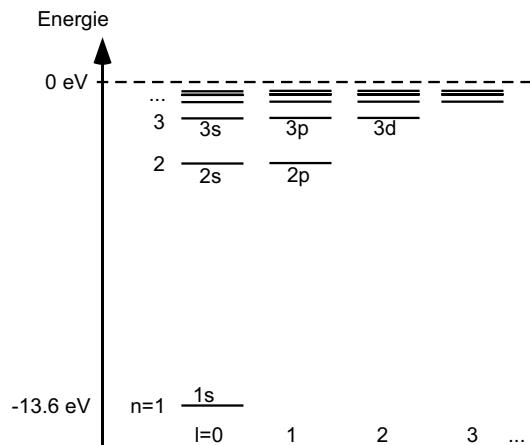
$$r = a_0 = \frac{\hbar}{\mu c \alpha} = 0,52917\ldots \text{Å}.$$

Zur Bestimmung der Anzahl der Nullstellen beachten wir, daß nur das Polynom $H(\rho)$ Null-durchgänge macht. Die Zahl der Knoten in radia-ler Richtung entspricht der Ordnung des Poly-noms $j_{\max} = n - l - 1$.

Wie viele Zustände mit gleicher Energie gibt es? Jeder Zustand mit der Drehimpulsquantenzahl l hat $2l + 1$ Unterzustände. Zustände mit gleicher Energie heißen **entartet**. Die Zahl der Zustände mit gleicher Energie bezeichnet man als **Entar-tungsgrad** g_n :

$$\begin{aligned} g_n &= \sum_{l=0}^{n-1} 2l + 1 = \sum_{l=0}^{n-1} 1 + 2 \sum_{l=0}^{n-1} l = \\ &= n + 2 \cdot \frac{1}{2} (n-1)n = n^2. \end{aligned}$$

Die Notation der Zustände zu den Quantenzahlen n und l und die Lage der Zustände im Spektrum ist in Abb. 2.1 gezeigt.



Kapitel 4

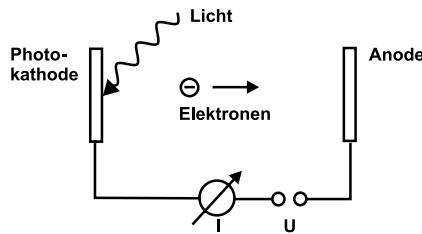
Was ist ein Photon?

4.1 Experimente

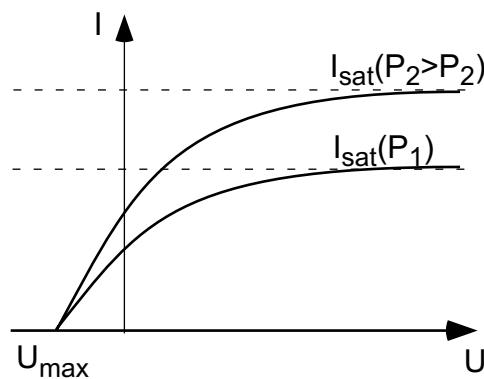
Licht besteht in sofern aus Teilchen, als es seine Energie, seinen Impuls und seinen Drehimpuls in ganz bestimmten Paketen mit seiner Umwelt austauscht. Eine solches Paket heißt Photon. Es hat also Teilcheneigenschaften wie Impuls, Energie und Drehimpuls (den wir hier allerdings nicht betrachten).

Beginnen wir mit Experimenten, die eine Quantierung des Lichts nahe legen.

Photoeffekt

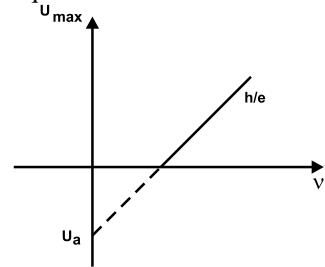


Das Licht schlägt Elektronen aus der Photokathode. Die Elektronen werden von der Anode eingesammelt und fließen als Strom zurück zur Kathode. Bei positiver Spannung werden die Elektronen zur Anode gesaugt. Der Strom steigt mit der Spannung an und sättigt bei einem Wert, der von der Lichtleistung abhängt.



Interessanter ist der Fall negativer Spannung. Die Elektronen müssen dann einen Potenzialberg erklimmen um zur Anode zu gelangen. Die Höhe des Potenzialbergs U_{\max} , bei dem der Strom aufhört zu fließen, entspricht gerade der kinetischen Energie E_{kin} , die die Elektronen unmittelbar nach Austritt aus der Kathode haben. U_{\max} ist unabhän-

gig von der Lichtleistung, hängt aber linear von der Lichtfrequenz ab.



Der experimentelle Befund lautet:

$$U_{\max} = A \cdot \nu - U_a$$

oder

$$E_{\text{kin}} = e \cdot U_{\max} = e \cdot A \cdot \nu - e \cdot U_a$$

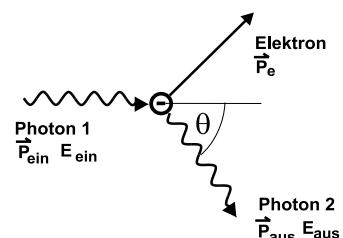
Interpretiert man den letzten Term als Austrittsarbeit, die ein Elektron leisten muss um aus dem Kathodenmetall freizukommen, so ergibt sich die vom Licht auf ein Elektron übertragene Energie δE als

$$\delta E = E_{\text{kin}} + e \cdot U_a = e \cdot A \cdot \nu .$$

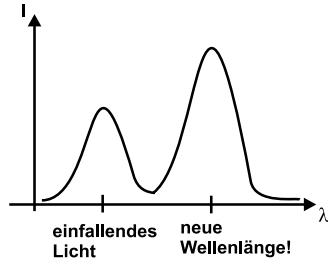
Die Konstante $e \cdot A$ ist materialunabhängig und stellt sich als die Plancksche Konstante h heraus. Die Kathode übernimmt also aus dem Lichtfeld die Energie in Portionen von $h\nu$, bzw. $\hbar\omega$.

Compton-Streuung

Um die These zu untermauern, dass das Licht selber in Einheiten von $\hbar\omega$ gequantelt ist, betrachten wir die Compton-Streuung.



Ein ruhendes Elektron befindet sich in Röntgenlicht. Man beobachtet Streuung des Lichts aus der Richtung des einfallenden Lichts heraus in neue Richtungen. Die Wellenlänge des gestreuten Lichts hängt vom Streuwinkel θ ab und ist immer größer als die des einfallendes Lichts.



Klassisch ist das nicht zu erklären. Demnach verleiht das einfallende Licht das Elektron in Schwingungen mit einer Frequenz die identisch mit der des treibenden Feldes sein muss. Das Auftreten von Licht einer neuen Frequenz bzw. Wellenlänge ist so nicht zu erklären.

Eine korrekte Interpretation geht davon aus, dass das einfallende Photon vernichtet wird und ein neues Photon erzeugt wird. Die Frequenz des neuen Photons wird durch die Energie und die Impulserhaltung gegeben.

Für eine quantitativer Analyse benötigen wir eine Hypothese für den Impuls des Photons. Hierzu verwenden wir die relativistische Energie-Impulsbeziehung

$$E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$$

und verlangen vom Photon, dass es sich mit Lichtgeschwindigkeit bewegt und also keine Ruhemasse hat ($m=0$).

$$E = \sqrt{p^2 c^2} = p \cdot c .$$

Wenn also gelten soll, dass $E = \hbar\omega$ so folgt daraus für den Betrag des Impuls:

$$p = E/c = \hbar\omega/c = \hbar k .$$

Damit können wir folgende Bilanzen aufmachen. Energieerhaltung:

$$E_{\text{ein}} + mc^2 = E_{\text{aus}} + \sqrt{m^2 c^4 + p_e^2 c^2}$$

oder

$$\hbar\omega_{\text{ein}} + mc^2 = \hbar\omega_{\text{aus}} + \sqrt{m^2 c^4 + p_e^2 c^2} .$$

Impulserhaltung:

$$\vec{p}_{\text{ein}} = \vec{p}_e + \vec{p}_{\text{aus}}$$

$$\vec{p}_e^2 = \vec{p}_{\text{ein}}^2 + \vec{p}_{\text{aus}}^2 - 2 \cdot \vec{p}_{\text{ein}} \cdot \vec{p}_{\text{aus}}$$

$$\vec{p}_e^2 = \vec{p}_{\text{ein}}^2 + \vec{p}_{\text{aus}}^2 - 2 \cdot p_{\text{ein}} p_{\text{aus}} \cos \theta$$

$$\vec{p}_e^2 = (\hbar k_{\text{ein}})^2 + (\hbar k_{\text{aus}})^2 - 2\hbar^2 k_{\text{ein}} k_{\text{aus}} \cos \theta .$$

$$\vec{p}_e^2 = \frac{1}{c^2} [(\hbar\omega_{\text{ein}})^2 + (\hbar\omega_{\text{aus}})^2 - 2\hbar^2 \omega_{\text{ein}} \omega_{\text{aus}} \cos \theta]$$

Eingesetzt in die Energiebilanz ergibt den Ausdruck

$$\hbar^2 \omega_{\text{ein}} \omega_{\text{aus}} (1 - \cos \theta) = mc^2 (\omega_{\text{ein}} - \omega_{\text{aus}})$$

oder in Wellenlängen

$$\lambda_{\text{aus}} - \lambda_{\text{ein}} = \lambda_{\text{comp}} \cdot (1 - \cos \theta)$$

mit

$$\lambda_{\text{comp}} = \frac{h}{mc} .$$

Dies ist die Compton-Wellenlänge des Elektrons. Sie beträgt $2,4263 \cdot 10^{-12} \text{ m}$.

Die so berechnete Wellenlängendifferenz entspricht dem beobachteten Wert und stützt die These von der Quantelung des Lichtfeldes in Energie und Impulsportionen.

4.2 Quantisierung des Lichtfeldes

Physikalisches Bild

Die Zustände der Wellenmechanik finden ihre Entsprechung in Moden, d.h. Raumbereiche in denen Photonen vorkommen können. Sie sind Lösungen der Maxwellgleichungen unter den gegebenen Randbedingungen. Die Dynamik der Mode als Ganzes ist deterministisch und durch die Maxwellgleichungen gegeben. Die Bewegung der Photonen innerhalb der Mode ist **prinzipiell** unbekannt. Alles was man wissen kann ist die Wahrscheinlichkeit, mit der man ein Photon bei einer Messung an einem bestimmten Ort zu einer bestimmten Zeit antrifft. Jede Mode kann mit verschiedenen vielen Photonen besetzt sein. Solche Zustände heißen Nummern-Zustände. Es kann aber auch Linearkombinationen von Nummernzuständen geben. Die Anzahl der Photonen in der Mode ist dann unscharf.

Klassische Hamiltonfunktion

Die Maxwellgleichungen in Coulomb-Eichung ohne Quellen (also $\rho = \vec{j} = 0$) führen zur Wellengleichung

$$\nabla^2 \vec{A} = \frac{1}{c^2} \ddot{\vec{A}}.$$

Die allgemeine Lösung ist eine Überlagerung ebener Wellen

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \sum_n (a_n \vec{A}(\vec{r}) e^{-i\omega_n t} + a_n^* \vec{A}(\vec{r}) e^{+i\omega_n t}),$$

wobei $\vec{A}_n(\vec{r}) = L^{-3/2} \cdot \vec{\varepsilon}_n \cdot e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}}$

mit

$$\omega_n = c |\vec{k}_n|.$$

Der Vektor $\vec{\varepsilon}_n$ ist der Polarisationsvektor des Lichtfeldes. Die Normierungsbedingung ist

$$\int_{L^3} d\vec{r} |\vec{A}_n(\vec{r})|^2 = 1.$$

Periodische Randbedingungen im „Kasten“ der Kantenlänge L erleichtern das Rechnen.

Die normierten Funktionen $A_n(\vec{r})$ sind die **Moden** des Lichtfeldes. Sie bilden so etwas wie "vorgefertigte" räumliche Formen für das Feld. Die Zahl a_n gibt den Feldinhalt an. Ein Photon kann in dieser Betrachtungsweise als ein Energiequant in einer dieser „Schubladen“ aufgefasst werden.

Betrachten wir die Energie solcher Photonen. Sie lautet gemäß der klassischen Elektrodynamik:

$$\varepsilon = \frac{1}{8\pi} \int_{L^3} d\vec{r} (E^2 + B^2)$$

Ersetzen wir die elektromagnetischen Feldvektoren durch

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \dot{\vec{A}} \text{ und } \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$$

folgt

$$\varepsilon = \sum_n \varepsilon_n = \sum_n \frac{\omega_n^2}{2\pi c^2} \cdot a_n^* a_n$$

Die Energie enthält nur noch die Amplituden a und a^* . Die Form der Moden $\vec{A}_n(\vec{r})$ und das Normierungsvolumen tauchen nicht mehr auf.

Als letzten Schritt unserer Umformulierung machen wir den Übergang zu neuen Variablen. Wir definieren

$$Q_n := \frac{1}{\sqrt{4\pi c^2}} (a_n^* + a_n)$$

$$P_n := \frac{i\omega_n}{\sqrt{4\pi c^2}} (a_n^* - a_n)$$

und setzen die neuen Variablen in den Ausdruck für die Energie ein. Wir erhalten für die Energie der n -ten Mode den Ausdruck

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2} (P_n^2 + \omega_n^2 Q_n^2).$$

Formal hat dieser Ausdruck große Ähnlichkeit mit der Energie eines harmonischen Oszillators. Für die Energie einer Masse an einer Feder gilt zum Beispiel

$$\varepsilon = \frac{1}{2m} (P^2 + m^2 \omega^2 Q^2)$$

wobei P der Impuls und Q die Auslenkung aus der Ruhelage ist.

Quantisierung

Wie kann man die Energie ε_n in Einheiten (Photonen) zerlegen und wie groß sind die Einheiten?

Der kreative Schritt besteht darin, die Größen P_n und Q_n als Operatoren zu interpretieren. Anders als komplexe Zahlen sind Operatoren nicht komutativ. Um die Operatoren vollständig festzulegen muss man also noch die Vertauschungsrelationen angeben. Hier nehmen wir die Vertauscher des harmonischen Oszillators an:

$$[\hat{Q}_n, \hat{P}_m] = i\hbar \delta_{nm}.$$

Schauen wir uns die Konsequenzen an. Man erhält jetzt statt der Hamiltonfunktion einen Hamiltonoperator:

$$H = \sum H_n$$

mit

$$H_n = \frac{1}{2} (\hat{P}_n^2 + \omega_n^2 \hat{Q}_n^2)$$

Der Hamiltonoperator für die n-te Mode hat die Form eines harmonischen Operators. Man kann ihn daher, unabhängig von der Darstellung, mit der Methode der Erzeuger und Vernichter lösen:

Wir definieren als

$$\text{Vernichter: } \hat{A}_n = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_n}} (\omega_n \hat{Q}_n + i\hat{P}_n)$$

$$\text{Erzeuger: } \hat{A}_n^+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_n}} (\omega_n \hat{Q}_n - i\hat{P}_n)$$

Der Hamilton lautet dann:

$$\hat{H} = \sum_n \hbar\omega_n \left(\hat{A}_n^+ \hat{A}_n + \frac{1}{2} \right),$$

Für die neuen Operatoren lauten die Vertauschungsrelationen

$$\text{i) } [\hat{A}_n, \hat{A}_m^+] = \delta_{nm}$$

$$\text{ii) } [\hat{H}, \hat{A}_n] = -\hbar\omega_n \hat{A}_n \quad \text{und}$$

$$[\hat{H}, \hat{A}_n^+] = \hbar\omega_n \hat{A}_n^+$$

Die Zustände $|\dots, m_n, \dots\rangle$, auf die der Hamilton wirkt seien Eigenzustände zum Hamiltonoperator \hat{H} .

Wie lauten die **Eigenwerte** zu den Eigenzuständen $|\dots, m_n, \dots\rangle$?

Aus ii) folgt, dass

$$(\hat{H}\hat{A}_n^+ - \hat{A}_n^+\hat{H})|\dots, m_n, \dots\rangle = \hbar\omega_n \hat{A}_n^+ |\dots, m_n, \dots\rangle$$

und daher

$$\hat{H}\hat{A}_n^+ |\dots, m_n, \dots\rangle = (\hbar\omega_n + E_{m_n}) \hat{A}_n^+ |\dots, m_n, \dots\rangle,$$

wobei $\hat{A}_n^+ |\dots, m_n, \dots\rangle$ der neue Eigenzustand ist.

Man sieht, dass sich die Energie in Schritten von $\hbar\omega_n$ erhöht. Die Energie des Grundzustandes ergibt sich aus der Bedingung, dass $\hat{A}|0\dots0\rangle = 0$ zu

$$\langle 0\dots0 | H | 0\dots0 \rangle = \sum_n \frac{1}{2} \hbar\omega_n.$$

Damit lauten die Energieniveaus für die n-te Mode:

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_n \left(m_n + \frac{1}{2} \right)$$

Die **Eigenfunktionen** konstruieren wir aus dem Grundzustand mittels des Erzeugers \hat{A}^+ . Dann ist

$$\hat{A}^+ |0\dots0\rangle = K_0 |1\dots0\rangle,$$

oder allgemein

$$\hat{A}^+ |m_n, \dots\rangle = K_m |m_{n+1}, \dots\rangle$$

Die Konstante K_m erhält man aus der Bedingung

$$\langle \dots, m_n, \dots | H | \dots, m_n, \dots \rangle = \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_n$$

Nach Einsetzen des Hamiltonoperators ergibt sich

$$\langle \dots, m_n, \dots | \hbar\omega_n \left(\hat{A}_n^+ \hat{A}_n + \frac{1}{2} \right) | \dots, m_n, \dots \rangle = \hbar\omega_n \left(m + \frac{1}{2} \right)$$

oder

$$\langle \dots, m_n, \dots | \hat{A}_n^+ \hat{A}_n | \dots, m_n, \dots \rangle = m.$$

Wir wenden den Vertauscher $[\hat{A}_n, \hat{A}_m^+]$ an,

$$\langle \dots, m_n, \dots | \hat{A}_n \hat{A}_n^+ - 1 | \dots, m_n, \dots \rangle = m$$

und erhalten

$$\langle \dots, m_n, \dots | \hat{A}_n \hat{A}_n^+ | \dots, m_n, \dots \rangle = m + 1.$$

Da

$$\hat{A}_n^+ |m_n, \dots\rangle = K_m |m_{n+1}, \dots\rangle$$

und

$$\langle \dots, m_n, \dots | \hat{A}_n = \langle \dots, m_n + 1, \dots | K_m$$

folgt für den obigen Ausdruck

$$K_m^2 \underbrace{\langle \dots, m_n + 1, \dots | \dots, m_n + 1, \dots \rangle}_{=1 \text{ (Normierung)}} = m + 1$$

und schließlich $K_m = \sqrt{m + 1}$.

Damit findet man

$$\hat{A}_n^+ |..., m_n, ... \rangle = \sqrt{m+1} |..., m_n + 1, ... \rangle$$

und entsprechend

$$\hat{A}_n^- |..., m_n, ... \rangle = \sqrt{m} |..., m_n - 1, ... \rangle$$

Abschließend können wir folgende wichtigen Resultate zusammenfassen:

An jedem Ort wird die zeitliche Schwingung des Vektorpotentials durch einen abstrakten quantenmechanischen, harmonischen Oszillator beschrieben, der nur durch die Vertauschungsrelationen definiert ist.

Die Änderung der Phase dieses Operators mit dem Ort ist durch die Modenfunktion festgelegt. Die zeitliche Änderung des Operators hängt von Verwendung des Heisenberg- oder Schrödinger- oder Wechselwirkungsbildes ab.

Kapitel 5

Einfache Anwendungen des Photonenbildes

5.1 Das Spektrum einer thermischen Lichtquelle

Im thermischen Gleichgewicht tauscht jede Mode Energie mit einem Reservoir der Temperatur T aus. Die Wahrscheinlichkeit m Photonen in einer Mode der Frequenz ω vorzufinden beträgt

$$P_m = \frac{1}{\sum_m e^{-E_m/k_B T}} \cdot e^{-E_m/k_B T}.$$

Normierungsfaktor

Mit $E_m = m \cdot \hbar\omega$ und $U := e^{-\hbar\omega/k_B T}$ erhält man

$$P_m = \frac{U^m}{\sum_m U^m}.$$

Da $\sum_m U^m = \frac{1}{1-U}$ (geometrische Reihe), folgt

$$P_m = (1-U) \cdot U^m.$$

Die mittlere Besetzungszahl einer Mode ist dann

$$\begin{aligned} \bar{m} &= \sum_m m P_m = (1-U) \sum_m m U^m \\ &= (1-U) U \frac{d}{dU} \sum_m U^m \\ &= U / (1-U) \\ &= 1 / (U^{-1} - 1) \end{aligned}$$

und insgesamt

$$\bar{m} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}.$$

Zur Berechnung der Strahlungsenergie im Frequenzintervall $\omega + d\omega$ benötigen wir die Zahl der Moden, die in diesem Intervall existieren. Betrachten wir die Modendichte in einem eindimensionalen Potentialtopf der Länge L . Es können nur Wellen existieren mit Knoten an den Wänden

$$n \cdot \frac{\lambda}{2} = L.$$

oder

$$k = n \frac{\pi}{L}.$$

Erweitern wir das Problem auf den dreidimensionalen Potentialkasten, so gilt in kartesischen Koordinaten

$$k_i = n_i \cdot \frac{\pi}{L}, \quad \text{mit } i = x, y, z.$$

Die möglichen Werte für den Vektor k liegen auf einem Gitter, dessen Zellen das Volumen $\left(\frac{\pi}{L}\right)^3$ haben. Die Anzahl N der Zustände innerhalb einer Kugel mit Radius k beträgt dann

$$N = \frac{4}{3} \pi \cdot k^3 / \left(\frac{\pi}{L}\right)^3 \cdot \frac{1}{8}.$$

Der Faktor 1/8 ergibt sich aus der Bedingung, daß nur positive Werte von k zugelassen sind, und somit nur das Segment mit positiven Achsenabschnitten im k -Raum zu N beiträgt.

Die Anzahl der Zustände im Intervall $k + dk$ beträgt dann

$$\frac{dN}{dk} = \frac{1}{2} k^2 \cdot \frac{L^3}{\pi^2} \cdot 2,$$

wobei wir zusätzlich die zwei Polarisationsrichtungen des Photons berücksichtigt haben.

Als spektrale Modendichte ergibt sich dann

$$\rho dk := dN = \frac{L^3}{\pi^2} k^2 dk.$$

Berücksichtigt man, daß $\omega = c \cdot k$, erhalten wir schließlich für die Anzahl der Moden $\rho_\omega d\omega$ im Frequenzintervall $\omega + d\omega$

$$\rho_\omega d\omega = \frac{L^3}{\pi^2 c^3} \cdot \omega^2 d\omega.$$

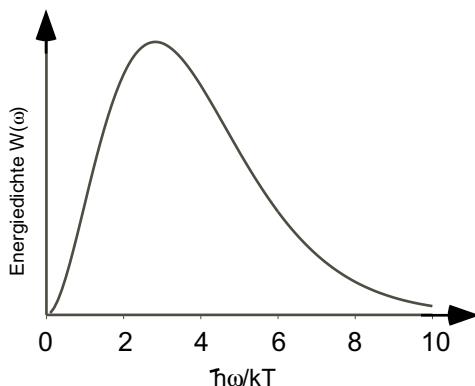
Multipliziert man die Anzahl der Moden mit der Energie $\hbar\omega$ eines Photons und der mittleren Besetzungszahl einer Mode erhält man die **Energie** im Frequenzintervall $\omega + d\omega$. Wir interessieren uns hier für die **Energiedichte** $W(\omega)$ und dividieren daher noch durch das Volumen L^3 .

$$W(\omega) d\omega = \bar{m} \cdot \hbar\omega \cdot \rho_\omega d\omega$$

oder

$$W(\omega) d\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega.$$

Diese Beziehung für die **spektralen Energiedichte** $W(\omega)$ wurde erstmals von M. Planck abgeleitet und wird daher auch **Plancksche Strahlungsformel** genannt.



Das Maximum des Energiespektrums liegt bei

$$\hbar\omega_{\max} = 2,8 k_B T$$

und ist linear von der Temperatur abhängig. Diese Abhängigkeit des maximalen Wertes des Energiespektrums bezeichnet man als das **Wiensche Verschiebungsgesetz**.

Um die gesamte Energiedichte W_t der Lichtstrahlung zu berechnen integriert man über alle möglichen Frequenzen und erhält mittels der Substitution $x := \hbar\omega/k_B T$.

$$W_t = \int_0^\infty W(\omega) d\omega = \frac{(k_B T)^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Die Lösung des Integrals ergibt

$$W_t = \frac{\pi^2}{15 c^3 \hbar^3} k_B^4 T^4.$$

Die abgestrahlte Leistungsdichte P_t einer Fläche in eine bestimmte Richtung beträgt

$$P_t = c \cdot W_t \cdot \sin \theta,$$

wobei θ den Winkel zwischen der Abstrahlrichtung und der Flächenebene angibt und c die

Lichtgeschwindigkeit ist. Nach Integration über den Halbraum erhalten wir das **Stefan-Boltzmann-Gesetz**

$$P_t = \frac{c}{4} \cdot W_t = \frac{2\pi^5}{15c^3\hbar^3} k_B^4 T^4 := \sigma \cdot T^4.$$

Die insgesamt über alle Frequenzen abgestrahlte Leistung bei der Temperatur T ist also proportional zur vierten Potenz der Temperatur.

Die Proportionalitätskonstante σ hat den Wert

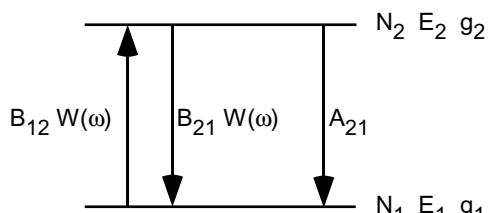
$$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2 \text{ K}^4.$$

Berechnen wir als Beispiel die Strahlungsleistung einer Glühbirne. Die Wendel der Glühbirne bestehe aus Wolfram, das einen Schmelzpunkt von 3683 K hat. Wir betreiben die Wendel sicherheitshalber bei einer Temperatur von $T = 3000$ K. Die Länge des Drahtes sei $l = 10$ mm und der Radius der Wendel $r = 0,05$ mm. Für solch eine Glühbirne erhält man als Strahlungsleistung $P = \sigma \cdot l \cdot 2\pi r \cdot T^4 = 144$ W, was mit der zum Betrieb einer Glühbirne üblichen elektrischen Leistung gut übereinstimmt.

Im folgenden Abschnitt werden wir uns mit der Photonenstatistik für ein Quantensystem mit nur zwei Zuständen beschäftigen.

5.2 Einsteins Ratenbild

Photonen können von Atomen erzeugt und vernichtet werden. Betrachten wir ein sehr vereinfachtes Modell. Das Atom hat nur zwei Energieniveaus. Zu jedem der beiden Energieniveaus existieren g_i ($i = 1, 2$) Zustände, die Energieniveaus könne also entartet sein. Man bezeichnet g_i als Entartungszahlen der Niveaus. Die Niveaus seien durch die Energie $\hbar\omega$ eines Photons getrennt.



Das Modell von **Einstein** postuliert drei Vorgänge. Aus dem Zustand 2 kann das System durch **spontane Emission** eines Photons in den energieärmeren Zustand 1 übergehen. Durch die **induzierte Absorption** eines Photons kann das System aus dem unteren Zustand in den oberen

angeregt werden. Drittens nehmen wir an, dass es auch eine durch das Lichtfeld **induzierte** Emission gibt. Die Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen Prozesse sind durch die Übergangskoeffizienten B_{12} , B_{21} und A_{21} gegeben.

Zur Berechnung der Koeffizienten stellen wir die Ratengleichung für das System auf:

$$\dot{N}_1 = N_2 A_{21} - N_1 B_{12} W(\omega) + N_2 B_{21} W(\omega)$$

wobei N_1 die Besetzungszahl des Grundzustands ist. Im Gleichgewicht muß gelten $\dot{N}_1 = 0$, und man erhält einen Ausdruck für die Energiedichte:

$$W(\omega) = \frac{A_{21}}{(N_1 / N_2) B_{12} - B_{21}}.$$

Die Bestimmung der Besetzungszahl des Systems erfolgt unter der Annahme, daß beide Zustände thermisch besetzt sind und daher gilt

$$N_i \sim g_i \cdot e^{-E_i / k_B T} \quad \text{mit } i = 1, 2.$$

Das Verhältnis der Besetzungszahlen lautet dann

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{g_1}{g_2} e^{\hbar\omega / k_B T}.$$

Damit ist die spektrale Energiedichte

$$\begin{aligned} W(\omega) &= \frac{A_{21}}{\frac{g_1}{g_2} \cdot B_{12} e^{\hbar\omega / k_B T} - B_{21}} \\ &= \frac{A_{21}}{B_{21}} \cdot \frac{1}{\frac{g_1}{g_2} \cdot \frac{B_{12}}{B_{21}} e^{\hbar\omega / k_B T} - 1} \end{aligned}$$

Zur Bestimmung der Übergangskoeffizienten vergleichen wir diesen Ausdruck mit der Planckschen Strahlungsformel und finden

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$$

sowie

$$g_1 \cdot B_{12} = g_2 \cdot B_{21}.$$

Zwei wichtige Folgerungen aus diesen Gleichungen sind die Existenz der stimulierten Emission und der Zerfall des angeregten Zustands. Der Zerfall erfolgt exponentiell mit einer Lebensdauer

$$\tau = \frac{1}{A_{21}}$$

also mit dem Kehrwert des Einstein-Koeffizienten.

Aus einer Messung der Lebensdauer kann die Absorptionsrate bestimmt werden zu

$$\dot{N}_{12} = B_{12} \cdot W(\omega) = \frac{g_2}{g_1} \cdot \frac{1}{\tau} \cdot \frac{\pi^2 c^3}{\hbar\omega^3} \cdot W(\omega).$$

Praktisch ist der Begriff des **Wirkungsquerschnitts**. Dazu definiert man zunächst eine spektrale **Photonenflußdichte**

$$j := \frac{c}{\hbar\omega} \cdot W(\omega) \Delta\omega.$$

Sie gibt an wieviele Photonen mit Frequenzen im Intervall $\omega + \Delta\omega$ durch eine Einheitsfläche treten. Mit diesem Ausdruck erhält man

$$\dot{N}_{12} = \frac{B_{12} \hbar\omega}{c \cdot \Delta\omega} \cdot j \equiv \sigma \cdot j.$$

Der **Übergangswirkungsquerschnitt** σ hat die Einheit $[\sigma] = \text{m}^2$ und lautet

$$\sigma := \frac{\hbar\omega}{c \cdot \Delta\omega} B_{12} = \frac{g_2}{g_1} \left(\frac{\lambda}{2} \right)^2 \cdot \frac{1}{\tau \Delta\omega}.$$

Anschaulich kann man sich um jedes Atom eine Kreisfläche der Größe σ vorstellen. Immer wenn diese Fläche von einem Photon getroffen wird erfolgt ein Übergang.

Welchen Wert für das Frequenzintervall $\Delta\omega$ muß man sinnvollerweise ansetzen? Aufgrund der Energie-Zeit-Unschärfe ist die Übergangsfrequenz nur bis auf die natürliche Linienbreite δ definiert. Zum Photonenfluß tragen daher nur Photonen im Frequenzintervall $\Delta\omega \sim \delta = 1/\tau$ bei. Damit gilt $\tau \Delta\omega \sim 1$, und für den Absorptionswirkungsquerschnitt folgt

$$\sigma \sim \frac{g_2}{g_1} \cdot \left(\frac{\lambda}{2} \right)^2.$$

Für ein Zweiniveausystem hängt damit der Wirkungsquerschnitt nur von der Wellenlänge des resonanten Lichts also dem Energieabstand der beiden Niveaus ab!

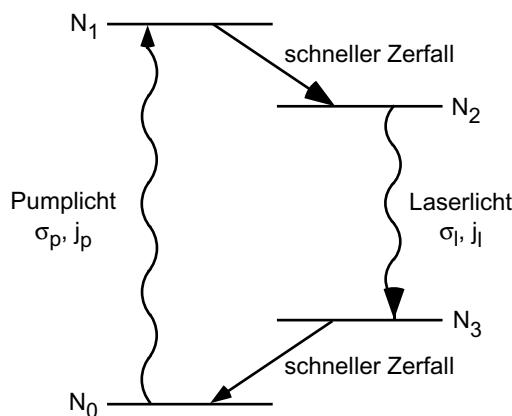
Aufgrund von Beugung kann man einen Lichtstrahl im Idealfall maximal auf einen Fleck der Größenordnung λ^2 fokussieren. In diesem Fall könnte man einen bis an die Beugungsgrenze ge-

bündelten Lichtstrahl durch ein einziges Atom abschatten! Allerdings geht das nur solange keine Sättigung im Spiel ist, also nur bei sehr kleinen Leistungen. Solche Experimente werden beispielsweise in München (Max-Planck-Institut für Quantenoptik) und in Los Angeles (CalTech) durchgeführt. Einzelne Atome fliegen dabei durch einen optischen Resonator in dem nur eine Mode mit wenigen Photonen besetzt ist. Das Atom kann die Lichtmode im Resonator fast vollständig dämpfen.

(z.B. <http://www.mpq.mpg.de/qdynamics/>)

5.3. Der Laser im Ratengleichungsbild

Eine wichtige Anwendung der Existenz von stimulierter Emission ist die Verstärkung von Licht im Laser (Abk. engl. light amplified stimulated emission of radiation). Betrachten wir ein System, aus vier energetisch getrennten Niveaus.



Durch Einstrahlung von Pumplicht, charakterisiert durch den Photonenfluss j_p , werden die Teilchen des Lasermaterials (Atome, Moleküle, Ionen) aus dem Grundzustand (0), in den obersten Zustand (1) angeregt. Der angeregte Zustand zerfällt sofort in einen energetisch tieferliegenden Zustand (2). Für dieses "obere Laserniveau" ist im folgenden die Lebensdauer wichtig, sie sei hier mit τ bezeichnet. Außerdem ist noch das zu verstärkende Licht anwesend, das wir als "Laserlicht" bezeichnen mit einem entsprechenden Photonenfluss j_L . Durch stimuliertes Emission werden die Teilchen vom oberen in das untere Laserniveau (3) befördert und geben dabei Photonen ab, die mit den Photonen, die den Übergang stimulieren **exakt identisch** sind. Die stimulierenden Photonen werden "geklont". Dadurch wird das eingestrahlte Laserlicht verstärkt, ohne dass seine Eigenschaften geändert werden. Selbst wenn man als Pumplicht das Licht einer thermi-

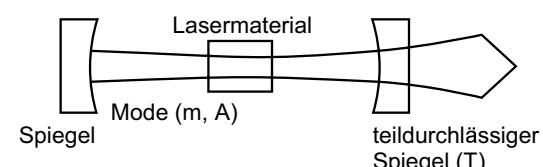
schen Lichtquelle verwendet (Lampe) kann man monochromatisches Licht verstärken.

Der Übergang in den Grundzustand erfolgt wieder schnell, so daß näherungsweise für die Besetzungszahlen gilt

$$N_1 = N_3 = 0.$$

Die schnelle Entleerung der Zustände führt dazu, daß keine Reabsorption von Laserlicht vom Zustand (3) nach (2) stattfindet. Außerdem ist keine stimulierte Entvölkering vom Zustand (1) in den Grundzustand möglich.

Mit einem solchen Lichtverstärker kann man in einem weiteren Schritt eine Quelle für monochromatisches Licht konstruieren, wenn man das erzeugte Laserlicht mit einem optischen Resonator rückkoppelt. Im einfachsten Fall geschieht das durch zwei gegenüberliegende Spiegel, zwischen denen das Licht hin und her läuft. Einer der beiden Spiegel reflektiert das Licht mit bestmöglichlicher Reflexion, während der andere Spiegel einen kleinen Anteil des Lichtes nach außen durchläßt, also auskoppelt. Den Anteil des ausgekoppelten Lichtes bezeichnet die Transmission T , die je nach Anwendung zwischen unter 1% und einigen 10% liegt.



Analysieren wir das System mit Hilfe des Ratenmodells. Die Ratengleichung für den oberen Laserzustand (2) lautet

$$\dot{N}_2 = +N_0 \sigma_p j_p - N_2 \cdot \frac{1}{\tau} - N_2 \sigma_L j_L.$$

Die Besetzungszahlen N_i beschreiben die Anzahl der Atome im entsprechenden Zustand. Die Gesamtatomzahl im Medium sei N . Im Gleichgewicht gilt $\dot{N}_2 = 0$. Damit erhält man einen Ausdruck für den Photonenfluß des Laserlichts in Abhängigkeit der Besetzung des oberen Laserniveaus N_2 .

$$j_L = \frac{1}{N_2 \sigma_L} \left(N_0 \sigma_p j_p - \frac{N_2}{\tau} \right).$$

Welcher Wert für N_2 stellt sich ein? Um diese Frage zu beantworten müssen wir die Rückkopp-

lung miteinbeziehen. Die Besetzung N_2 und der Photonenfluß j_L hängen dann wechselseitig von einander ab: Vergrößert sich die Besetzung nimmt die Verstärkung zu und damit auch der Laser-Photonenfluß. Der allerdings mindert die Besetzung, da die stimulierte Emission zunimmt. Es stellt sich am Ende ein Gleichgewicht ein.

Um diesen Sachverhalt zu beschreiben benötigen wir eine Ratengleichung für die Photonenzahl im Resonator. Besitzt die Mode des Lasers m Photonen und eine Querschnittsfläche A_L , so gilt für die Zahl \dot{m}_t der ausgekoppelten Photonen

$$\dot{m}_t = T \cdot j_L \cdot A_L.$$

Für die Änderung der Photonenzahl im Resonator erhält man also den Ausdruck

$$\dot{m} = N_2 \sigma_L j_L - (T + L) A_L j_L,$$

wobei L die Verluste im Resonator etwa durch Streuung an den optischen Oberflächen oder durch unerwünschte Absorption im Lasermedium bezeichnen. Im Gleichgewicht gilt $\dot{m} = 0$ woraus folgt

$$N_2 \sigma_L = (T + L) \cdot A_L.$$

Mit dem so ermittelten Wert für die Besetzung kann man jetzt den Photonenfluss im Resonator und damit auch den ausgekoppelten Photonenfluß j_{out} berechnen.

$$j_{out} \equiv T \cdot j_L = \frac{T}{T + L} \cdot \frac{N_0 \sigma_p j_p}{A_L} - \frac{T}{\sigma_L \tau}.$$

Bei nicht zu starker Anregung hält sich das Atom meistens im Grundzustand auf, so dass oft näherungsweise $N_0 \approx N$.

Zur Vereinfachung der Beschreibung des Photonenflusses aus dem Laserresonator formen wir in praktische Größen um. Mit der Leistung

$$P = \hbar \omega \cdot j \cdot A$$

und dem Absorptionskoeffizienten

$$\alpha := \frac{N_0 \cdot \sigma_p}{A_p}$$

können wir die **ausgekoppelte Leistung** als

$$P_{out} = \frac{T}{T + L} \frac{\omega_L}{\omega_p} \cdot \alpha \cdot P_p - \frac{\hbar \omega_L \cdot A_L}{\sigma_L \cdot \tau} \cdot T$$

schreiben, oder einfach

$$P_{out} = \varepsilon (P_p - P_s),$$

mit der dimensionslosen **Effizienz**

$$\varepsilon := Q \cdot \alpha \cdot \frac{T}{T + L},$$

der **Pumpschwelle**

$$P_s := \frac{1}{g} \cdot (T + L),$$

der **Kleinsignalverstärkung**

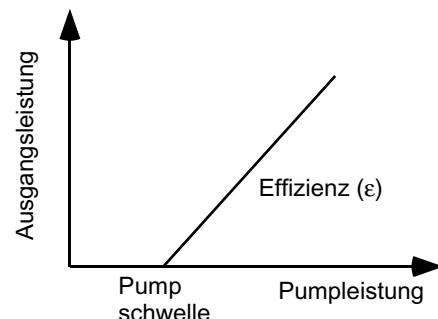
$$g := \frac{1}{\hbar \omega_p} \cdot \frac{\alpha}{A_L} \cdot \sigma_L \cdot \tau,$$

und dem sogenannten **Quantendefekt**

$$Q := \frac{\omega_L}{\omega_p}.$$

Man erkennt, dass für hohe Frequenzen die Verstärkung sinkt. Deshalb ist die Entwicklung eines Lasers im ultravioletten Spektralbereich schwierig. Das Produkt $\sigma_L \tau$ ist eine Größe, die das Lasermaterial charakterisiert. Zur Optimierung der Lasereffizienz wählt man Materialien mit hoher Lebensdauer τ des oberen Laserniveaus. Als technischer Parameter geht in die Verstärkung der Quotient aus Absorptionsquerschnitt und Querschnittsfläche des Resonators ein.

Die Pumpschwelle P_s gibt den Einsatzpunkt der Lasertätigkeit an. Oberhalb der Schwelle nimmt die Ausgangsleistung linear mit der Pumpleistung zu.



Im optimalen Fall sind der Absorptionskoeffizient $\alpha = 1$ und die Resonatorverluste $L = 0$. Dann gilt für die Effizienz

$$\varepsilon = Q = \frac{\hbar\omega_L}{\hbar\omega_p},$$

das heißt, oberhalb der Pumpschwelle wird jedes Pumpphoton in ein Laserphoton umgewandelt.

Zum Abschluß dieses Kapitels fassen wir die wesentlichen Resultate zusammen. Unsere Annahmen waren die Quantelung der Energie einer elektromagnetischen Mode und die Energie-Zeit-Unschärfe. Aus einer Analyse des schwarzen Strahlers folgte die Existenz der stimulierten Emission und die Werte für die Übergangsraten oder Einstein-Koeffizienten

Bislang fehlt uns noch eine mikroskopische Theorie der beschriebenen Phänomene. Weiter werden wir uns mit der Frequenz- und Polarisationsabhängigkeit der atomaren Anregung beschäftigen müssen. Schließlich fehlen noch die Auswahlregeln, die die Kopplung zwischen unterschiedlichen Zuständen beschreiben.

Kapitel 6

Das Wasserstoffatom, Teil II

6.1 Die relativistische Wellengleichung für ein freies Teilchen

Die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen basiert auf der nichtrelativistischen Energie-Impuls-Beziehung

$$E = \frac{p^2}{2m}$$

und den quantenmechanischen Definitionen für die Operatoren für Energie und Impuls

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

und

$$\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}.$$

Wie könnte eine relativistische Wellengleichung aussehen?

Als naheliegender Ansatz kann man die Definition der Operatoren in die relativistische Energie-Impuls-Beziehung

$$E^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4$$

einsetzen und erhält

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 = c^2 \left(-i\hbar \vec{\nabla} \right)^2 + m_0^2 c^4,$$

bzw.

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \vec{\nabla}^2 + \left(\frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \right) \phi = 0$$

Dies ist die Klein-Gordon-Gleichung. Sie wird verwendet um Teilchen mit Spin=0 zu beschreiben.

Es gibt aber noch einen weiteren, zwar etwas komplizierteren aber auch viel spannenderen Ansatz der auf Dirac zurückgeht. Ausgangspunkt ist die Frage, ob man nicht auch einen Ansatz machen kann, der linear in \hat{E} und \hat{P} ist:

$$E = \alpha_1 c p_x + \alpha_2 c p_y + \alpha_3 c p_z + \beta m_0 c^2.$$

ersetzt man Energie und Impuls durch die entsprechenden Operatoren erhält man:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -i\hbar \left(\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \right) \phi + \beta m_0 c^2 \phi$$

Die obige relativistische Energie-Impuls-Bedingungen ist erfüllt, wenn

$$\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \beta^2 = 1$$

$$\alpha_i \cdot \alpha_j + \alpha_j \cdot \alpha_i = 0 \quad \text{für } i \neq j$$

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 0.$$

Wenn α_i und β Zahlen sind, kann man diese Gleichungen nicht erfüllen. Nehmen wir z.B. die mittlere Gleichung mit $i=1$ und $j=2$:

$$2\alpha_1 \alpha_2 = 0.$$

Es muß also entweder $\alpha_1 = 0$ oder $\alpha_2 = 0$. Dies widerspricht der ersten Gleichung, die fordert daß

$$\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = 1.$$

Dirac's geniale Idee war, daß es sich bei den Größen α_i und β um Matrizen handeln könnte. Diese Matrizen wirken als Operatoren auf entsprechende Zustände, die nicht mehr eine skalare Funktion sind, sondern ein komplexwertiger Vektor. Jede Komponente des Vektors ist eine Wellenfunktion im üblichen Sinn. Der Hilbertraum wird erweitert und ist jetzt der Produktraum aus den üblichen Ortswellenfunktionen und einem endlichdimensionalen Vektorraum.

Bemerkung: Um kurz zu zeigen wie hier die Algebra funktioniert betrachten wir ein völlig willkürliches Beispiel. Als Operator nehmen wir das Produkt

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{\partial}{\partial x}$$

und als Vektor

$$\begin{pmatrix} \exp(ik_1 x) \\ \exp(ik_2 x) \end{pmatrix}.$$

Wendet man den Operator auf den Zustandsvektor an erhält man

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \cdot \begin{pmatrix} \exp(ik_1 x) \\ \exp(ik_2 x) \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \exp(ik_1 x) \\ \exp(ik_2 x) \end{pmatrix} = \\ \begin{pmatrix} 0 + \frac{\partial}{\partial x} \exp(ik_2 x) \\ \frac{\partial}{\partial x} \exp(ik_1 x) + 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ik_2 \exp(ik_2 x) \\ ik_1 \exp(ik_1 x) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Zurück zu Dirac. Die Größen α_i und β sind nun Matrizen, die obigen Bedingungen gehorchen müssen. Man kann zeigen, daß die Matrizen dazu mindestens vierdimensional sein müssen und die Form haben:

$$\begin{aligned} \alpha_j &= \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix} \\ \beta &= \begin{pmatrix} \hat{E} & 0 \\ 0 & -\hat{E} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

In dieser Schreibweise sind die Komponenten der Matrizen wieder Matrizen:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

und

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

Der Zustandsvektor muß ebenfalls vierdimensional sein. Man unterscheidet zwei "große" und zwei "kleine" Komponenten.

$$\phi(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} \phi_1(\vec{r}, t) \\ \phi_2(\vec{r}, t) \\ \chi_1(\vec{r}, t) \\ \chi_2(\vec{r}, t) \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} &\text{große Komponenten} \\ &\text{kleine Komponenten} \end{aligned}$$

Diese Bezeichnung klärt sich später. Man kann die Dirac-Gleichung jetzt folgendermaßen schreiben:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \vec{\phi} \\ \vec{\chi} \end{pmatrix} = \left(c \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} \vec{\phi} \\ \vec{\chi} \end{pmatrix}.$$

Hier wurden die σ -Matrizen als dreidimensionaler Vektor mit den Komponenten σ_x , σ_y und σ_z zusammengefasst. Dieser Vektor codiert den Eigendrehimpuls des Teilchens. Wie das genau aussieht kommt später.

Im Rahmen des Standardmodells geht man davon aus, daß Materie aus Fermionen zusammengesetzt ist, die durch die Dirac-Gleichung beschrieben werden. Die Wechselwirkung zwischen den Fermionen wird durch Teilchen mit ganzzahligem Spin, also Bosonen vermittelt. Bosonen gehorchen der Klein-Gordon-Gleichung.

Die Nichtdiagonalmatrix

$$\begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} & 0 \end{pmatrix}.$$

koppelt sowohl die großen und die kleinen Komponenten. Wir betrachten den Spezialfall, in dem die Funktionen $\phi_1(\vec{r}, t)$, $\phi_2(\vec{r}, t)$, $\chi_1(\vec{r}, t)$, $\chi_2(\vec{r}, t)$ alle Eigenfunktionen des Impulsoperators zum Eigenwert 0 sind (Wellen mit beliebig langer Wellenlänge). Die Nichtdiagonalmatrix verschwindet dann und die Dirac-Gleichung zerfällt in zwei unabhängige Gleichungen

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\phi} = m_0 c^2 \cdot \vec{\phi}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \vec{\chi} = -m_0 c^2 \cdot \vec{\chi}.$$

Dies sind Energie-Eigenwertsgleichungen mit den Eigenwerten $+m_0 c^2$ und $-m_0 c^2$. Die Zustände negativer Energie werden als Antiteilchen interpretiert. Für nichtverschwindenden Impuls werden die Zustände für ruhende Teilchen bzw. Antiteilchenzustände durch die Nichtdiagonalmatrix gemischt.

Ähnlich wie bei der Schrödinger-Gleichung kann man zu einer stationären Dirac-Gleichung gelangen indem man die Zeitvariable absepariert. Wir machen in weiser Vorrausicht der Lösung gleich den Ansatz einer Exponentialfunktion für den Zeitanteil:

$$\phi(\vec{r}, t) = \phi(\vec{r}) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

und erhalten die gekoppelten Gleichungen

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{\chi}(\vec{r}) &= \frac{1}{c} (E - m_0 c^2) \vec{\phi}(\vec{r}) \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{\phi}(\vec{r}) &= \frac{1}{c} (E + m_0 c^2) \vec{\chi}(\vec{r}). \end{aligned}$$

6.2 Elektron im Coulomb-Potential

In der Atomphysik interessieren wir uns natürlich in erster Linie für Elektronen, die in einem Potential (Kern) gebunden sind. Wir müssen also ein elektrostatisches Potential in die Dirac-Gleichung einführen. Die stationäre Diracgleichung mit Potential lautet:

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{\chi}(\vec{r}) &= \frac{1}{c} (E - V(\vec{r}) - m_0 c^2) \vec{\phi}(\vec{r}) \\ (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \vec{\phi}(\vec{r}) &= \frac{1}{c} (E - V(\vec{r}) + m_0 c^2) \vec{\chi}(\vec{r}) \end{aligned}$$

Genau wie beim Aufstellen der Schrödinger-Gleichung haben wir einfach die potenzielle Energie als skalare Größe hinzugefügt. Für das Coulomb-Potential

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

lässt sich die Dirac-Gleichung sogar algebraisch lösen (siehe z.B. Friedrich, Theoretische Atomphysik) mit dem Ergebnis:

$$E_{n,j} = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{\alpha}{n - \delta_j}\right)^2}}$$

$$\delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}$$

wobei $j = I \pm \frac{1}{2}$ für $I > 0$

und

$$j = \frac{1}{2} \quad \text{für } I = 0.$$

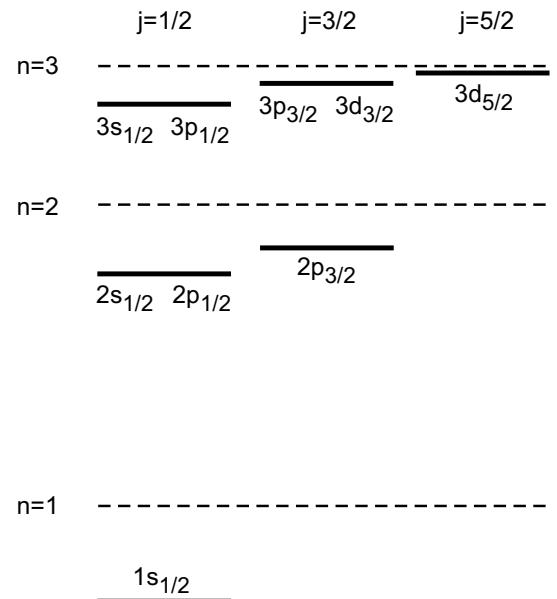
Dieser Ausdruck ist nicht sehr anschaulich, man sollte sich aber merken, daß die Energie jetzt von zwei Quantenzahlen abhängt. Die Drehimpulsenartung ist aufgehoben, die neue Quantenzahl

neben der Hauptquantenzahl n ist die Quantenzahl für den Gesamtdrehimpuls j .

Den etwas unübersichtlichen Ausdruck für die Energie kann man nach Potenzen von α entwickeln.

$$E_{n,j} = m_0 c^2 \left(1 - \underbrace{\frac{\alpha^2}{2n^2}}_{\text{Schrödinger}} - \frac{\alpha^4}{2n^3} \underbrace{\left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right)}_{\text{Feinstruktur}} + \dots \right)$$

Man findet dann zunächst die Energie der Schrödingerschen Theorie wieder. Darüber hinaus gibt es Korrekturterme in Potenzen von α . Das neue Termschema sieht folgendermaßen aus.



Die Bezeichnung der Niveaus folgt dabei der Regel nl_j , also z.B. ist der Zustand $3d_{5/2}$ ein Zustand mit der Hauptquantenzahl $n=3$, einem Drehimpuls $l=2$ und einem Gesamtdrehimpuls $j=5/2$.

Zustände mit gleichem j sind entartet. Für große n und für große j verschwindet die Feinstruktur.

6.3 Nichtrelativistischer Grenzfall

Wie kann man nun die Dirac-Gleichung interpretieren? Wir wollen sie zunächst mit der Schrödinger-Gleichung in Verbindung bringen. Um zu einer nichtrelativistischen Gleichung zu kommen müssen wir zunächst die Ruheenergie loswerden. Dazu separieren wir eine schnelle Oszillation ab, de-

ren Frequenz der Ruhemasse des Elektrons entspricht. Wir machen den folgenden Ansatz, wobei u und v schwach zeitabhängig sein sollen:

$$\phi = e^{-i\omega_0 t} \begin{pmatrix} u(\vec{r}, t) \\ v(\vec{r}, t) \end{pmatrix}, \quad \hbar\omega_0 = m_0 c^2$$

Für $\dot{\phi}$ erhält man:

$$i\hbar\dot{\phi} = \begin{pmatrix} m_0 c^2 \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} + i\hbar \begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} \end{pmatrix} e^{-i\omega_0 t}$$

Dies wird in die Diracgleichung eingesetzt

$$\begin{pmatrix} m_0 c^2 \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} + i\hbar \begin{pmatrix} \dot{u} \\ \dot{v} \end{pmatrix} \end{pmatrix} e^{-i\omega_0 t} = \\ c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) \begin{pmatrix} v \\ u \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} u \\ -v \end{pmatrix} e^{-i\omega_0 t}$$

und ergibt schließlich

$$i\hbar\dot{u} = c(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})v$$

Da u und v nur schwach zeitabhängig sein sollen sind die Ableitungen der linken Seite kleine Größen. Die Forderung, dass beide Ableitungen ganz verschwinden sollen ist zu stark. Sie führt nur zur trivialen Lösung $u=0$ und $v=0$. Die erste nichttriviale Lösung erhält man für die Forderung $dv/dt=0$. Die untere Gleichung lautet dann

$$v = \frac{1}{2m_0 c} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) u.$$

Eingesetzt in die obere Gleichung ergibt:

$$i\hbar\dot{u} = c \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2}{2m_0 c} u.$$

Nun berechnen wir noch den Ausdruck $(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2$.

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) = \begin{pmatrix} p_z & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & -p_z \end{pmatrix} \\ \Rightarrow (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 = \vec{p}^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Eingesetzt in die Gleichung für u ergibt gerade die Schrödinger-Gleichung für ein freies Teilchen.

$$i\hbar\dot{u} = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} u.$$

Wieso wird die u -Komponente als „große“ Komponente bezeichnet? Es gilt

$$v^+ v = \frac{1}{(2m_0 c)^2} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})^2 u^+ u \\ = \frac{1}{2m_0 c^2} \frac{\vec{p}^2}{2m_0} u^+ u$$

$$\text{und da } \frac{\vec{p}^2}{2m_0} \ll m_0 c^2 \text{ folgt sofort } v^+ v \ll u^+ u.$$

In dieser nichtrelativistischen Näherung sind die oberen Komponenten viel größer als die unteren. Die Mischung zwischen Teilchen und Antiteilchen wird erst wichtig, wenn

$$\frac{\vec{p}^2}{2m_0} \approx m_0 c^2$$

bzw.

$$\frac{1}{2} m_0 v^2 \approx m_0 c^2 \text{ oder } |v| \approx c$$

Dem Elektron werden erst dann kleine Komponenten beigemischt, wenn es sich der Lichtgeschwindigkeit nähert. Im Wasserstoffatom gilt etwa für den Grundzustand $v/c = \alpha \sim 1/137$. Die Beimischung kleiner Komponenten ist also klein. Im obigen Ausdruck für die Energie des Elektrons im Coulomb-Potential ist der letzte Term positiv und $\sim 1/n^4$. Er beschreibt die Lockerung der Bindung durch Beimischung kleiner Komponenten. Der zweite Term ist die sogenannte Spin-Bahn-Kopplung. Um diesen Anteil besser zu verstehen müssen wir uns aber zunächst die σ -Matrizen genauer anschauen.

6.4 Welche Bedeutung haben die σ -Matrizen?

Wir betrachten den Operator

$$\vec{S} := \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma}$$

und berechnen die Vertauschungsrelationen seiner drei Komponenten. Mit

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

und

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

ergibt sich die Kommutatorrelation:

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = i\hbar S_z. \end{aligned}$$

Allgemein gilt: $[S_i, S_j] = \varepsilon_{i,j,k} i\hbar S_k$.

Interessant ist der Vergleich mit der Vertauschungsrelation des Bahndrehimpulses L :

$$[L_i, L_j] = \varepsilon_{i,j,k} i\hbar L_k$$

Dies suggeriert einen verallgemeinerten Begriff des Drehimpulses: Jeder dreikomponentige Vektoroperator, der die obigen Vertauschungsrelationen erfüllt, ist danach ein Drehimpuls. Tatsächlich lässt sich dieser Ansatz sehr gut mit einer allgemeinen Forderung nach Symmetrie unter Raumdrehungen begründen, was wir hier aber nicht vertiefen wollen.

Was sind die Eigenwerte von S_z ? Stellen wir die Eigenwertgleichung für S_z auf.

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = m_s \hbar \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}$$

Die Eigenwerte sind offensichtlich

$$m_s = \pm \frac{1}{2}$$

Der Spin ist also ein halbzahliges Drehimpuls!

Dies ist eine völlig neue Art von Drehimpuls und ist in der üblichen Definition des Bahndrehimpulses $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ nicht enthalten.

Man kann zwar die Eigenfunktionen des Drehimpulsoperators auf halbzahliges Werte erweitern, z.B.

$$Y_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \sim \sqrt{\sin \theta} \cdot e^{\frac{i}{2}\varphi}.$$

Wendet man jedoch den Abwärtsoperator

$$L_- = \hbar e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cos \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

auf den Zustand an, erhält man

$$L_- Y_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} \sim \frac{\cos \theta}{\sqrt{\sin \theta}} e^{-\frac{i}{2}\varphi}.$$

Dies ist jedoch nicht proportional zum Zustand $Y_{1/2, -1/2}$. Der ergibt sich nämlich aus dem Zustand $Y_{1/2, 1/2}$ durch

$$Y_{1/2, -1/2} = \sqrt{-1} \cdot Y_{1/2, 1/2}^* \sim i \sqrt{\sin \theta} \cdot e^{-\frac{i}{2}\varphi}.$$

Im Ortsraum gibt es also keine Drehimpulseigenfunktionen mit halbzahligem Eigenwert!

Der Spin ist eine zusätzliche Struktur zum Ortsraum und genauso „normal“ wie der Begriff der Polarisation von Licht, oder allgemein des elektromagnetischen Feldes. Ist nun mit dem Spin auch ein magnetisches Moment verbunden? Dazu müssen wir das elektromagnetische Feld in die Dirac-Gleichung einbauen.

6.5 Diracgleichung im elektromagnetischen Feld

Die Kopplung an das elektromagnetische Feld geschieht durch Übergang von

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} - q\vec{A}.$$

Dies ist eine Konsequenz der Forderung nach Einheitlichkeit. Dieses Prinzip ist ähnlich fundamental wie das Prinzip der kleinsten Wirkung und integraler Bestandteil des Standardmodells. Wir wollen das hier nicht besprechen sondern benutzen nur das Resultat. Neben der Ersetzung des Impulses müssen wir noch das skalare Potential $q \cdot U$ hinzufügen und erhalten für die Dirac-Gleichung im äußeren elektromagnetischen Feld

$$i\hbar\dot{\phi} = \left(c \cdot \vec{\alpha} \underbrace{(\vec{p} - \vec{q} \cdot \vec{A})}_{:= \vec{\pi}} + mc^2\beta + \vec{q} \cdot \vec{U} \right) \vec{\phi}$$

Die Gleichung für die große Komponente lautet im nichtrelativistischen Grenzfall (abweichend von oben bezeichneten wir hier die großen Komponenten nicht mit u sondern mit ϕ):

$$i\hbar\dot{\phi} = \frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{\pi})^2}{2m} \vec{\phi} + \vec{q} \cdot \vec{U} \vec{\phi}$$

mit $[\sigma_1, \sigma_2] = i\sigma_3$, $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ und $e = -q$ erhält man nach einiger Rechnung die sogenannte Pauligleichung

$$i\hbar\dot{\phi} = \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + e\vec{A} \right)^2 + \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} - eU \right) \vec{\phi}.$$

Wir vergleichen den zweiten Term mit der Energie eines magnetischen Moments im B -Feld

$$E = \vec{\mu} \cdot \vec{B}.$$

Dies legt folgenden Zusammenhang zwischen Spin und magnetischen Moment nahe:

$$\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} = \frac{e}{m} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

also

$$\vec{\mu}_e = -\frac{e}{m} \cdot \vec{S}.$$

Definiert man den g-Faktor eines Systems mit einem beliebigen Drehimpuls J als

$$\frac{\vec{\mu}}{\mu_{\text{Bohr}}} = g \cdot \frac{\vec{J}}{\hbar},$$

mit

$$\mu_{\text{Bohr}} = \frac{e\hbar}{2m},$$

so erhält man

$$g_e = 2.$$

Dies ist der g-Faktor des Elektrons.

Wie fundamental ist nun ein Elektron? Ist es ein Elementarteilchen oder besitzt es wie Proton und Neutron eine innere Struktur?

$$g_{\text{Proton}} = 5.5858$$

$$g_{\text{Neutron}} = -3.8261$$

Neutron und Proton sind ebenfalls Fermionen (Spin 1/2) aber gehorchen nicht der Diracgleichung! Eine Abweichung von $g=2$ weist also auf eine innere Struktur hin. Könnte das auch für das Elektron gelten? Wie kann man g messen? Diese Fragen heben wir uns für später auf.

6.6 Spin-Bahn-Kopplung

Da mit dem Spin des Elektrons ein magnetisches Moment verbunden ist und das Atom bewegte Ladungen enthält, können wir uns nach **magnetischen Effekten** im Atom fragen. Sie sind in der Schrödinger-Gleichung sicher nicht enthalten, wohl aber in der Dirac-Gleichung. Bei der Berechnung der Energie des Elektrons im Coulomb-Potential haben wir nur das elektrostatische Potential des Kerns berücksichtigt. Das war auch korrekt, denn ein **externes** Magnetfeld war nicht Teil des Modells und daher gab es auch kein Vektorpotential. Der innere Magnetismus des Atoms ist bereits vollständig in der Dirac-Gleichung enthalten.

Beim Übergang zur nichtrelativistischen Näherung verschwinden der inneratomare Magnetismus aus der Gleichung. Man kann jedoch die führende Korrektur zur Schrödinger-Gleichung, die sogenannte Spin-Bahn-Kopplung, "von Hand" wieder einführen, wenn man in der Pauli-Gleichung das Magnetfeld berücksichtigt, das im Atom selbst erzeugt wird. Das wollen wir jetzt besprechen. Man erhält dadurch einen Einblick in die physikalischen Ursachen dieser Korrektur.

Aus der Sicht des Elektrons kreist der positiv geladene Kern um das Elektron und erzeugt ein Magnetfeld \vec{B} . In diesem Feld orientiert sich das magnetische Moment des Elektrons. Damit ist eine Energie verbunden

$$H_{LS} = 2\mu_{\text{Bohr}} \frac{1}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B}_e = \frac{e}{m} \vec{S} \cdot \vec{B}$$

Dies ist die gesuchte Korrektur zur Schrödinger-Gleichung.

Wie ermittelt man nun das Magnetfeld \vec{B} am Ort des Elektrons? Ein Strom I entlang eines Streckenelements $d\vec{l}$ erzeugt nach Biot-Savart ein Feld:

$$d\vec{H} = \frac{1}{4\pi} \cdot I \cdot \frac{d\vec{l} \times \vec{r}}{r^3}$$

Für einen Kreisstrom ergibt sich das Magnetfeld:

$$|\vec{H}| = \frac{1}{4\pi} \cdot I \cdot \int_0^{2\pi r} \frac{1}{r^2} dl = \frac{1}{4\pi} \frac{I}{r^2} \int_0^{2\pi r} dl = \frac{1}{2} \frac{I}{r}$$

Der Strom ist definiert als Ladung pro Zeit. Da pro Umlaufzeit T das Proton einmal vorbeikommt gilt

$$I = \frac{e}{T} = \frac{e\omega}{2\pi} = \frac{e\omega mr^2}{2\pi mr^2}.$$

Damit ergibt sich das Magnetfeld am Ort des Elektrons

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e}{m} \frac{1}{r^3} \vec{L}$$

bzw. der Wechselwirkungsoperator

$$H_{LS} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{e^2}{m^2} \frac{1}{r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}.$$

Dies kann man umformen in

$$H_{LS} = B(r) \cdot \vec{L} \cdot \vec{S},$$

mit der Abkürzung

$$B(r) = \frac{1}{2} \alpha \frac{\hbar}{m^2 c} \frac{1}{r^3}.$$

Hier haben wir noch einen Faktor 1/2 eingefügt. Dieser sogenannte Thomas-Faktor berücksichtigt die Transformation vom Ruhesystem des Elektrons in das Ruhesystem des Kerns. Eine genaue Herleitung ist schwierig. Wir betrachten den Faktor hier als heuristische Korrektur, die am Ende zum richtigen Ergebnis führt.

Nach der Einführung des Spins muß der Hilbertraum der Einteilchenwellenfunktionen entsprechend erweitert werden. Die Wellenfunktionen sind jetzt das Produkt aus Ortswellenfunktionen und Spineigenvektoren:

$$\vec{\phi}_{n,l,m} = \underbrace{R_{n,l}(r)}_{\text{Ortsraum}} \underbrace{Y_{l,m}(\theta, \phi)}_{\text{Spinraum}} \begin{pmatrix} \mathbf{s}_1 \\ \mathbf{s}_2 \end{pmatrix}$$

Der neue Hilbertraum ist das Tensorprodukt aus Orts- und Spinraum.

Der Hamiltonoperator für das Wasserstoffatom inklusive Spin-Bahn-Kopplung hat nun die Form:

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(r) + \underbrace{A(r) \vec{L}^2}_{\text{Zentrifugalpotential}} + \underbrace{B(r) \vec{L} \cdot \vec{S}}_{\text{Spin-Bahn-Kopplung}},$$

wobei

$$A(r) := \frac{1}{2\mu r^2}.$$

Um den Hamilton zu diagonalisieren benötigen wir die gemeinsame Eigenfunktionen von \vec{L}^2 und $\vec{L} \cdot \vec{S}$. Da für das Quadrat des Gesamtdrehimpuls \vec{J}^2 gilt:

$$\begin{aligned} \vec{J}^2 &= (\vec{L} + \vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S} \\ \Rightarrow \vec{L} \cdot \vec{S} &= \frac{1}{2} (\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2) \end{aligned}$$

ist das äquivalent damit gemeinsame Eigenfunktionen von \vec{J}^2 , \vec{L}^2 und \vec{S}^2 zu finden. Diese kennt man aus der Theorie der Drehimpulsaddition. Sie sind bestimmte Linearkombinationen der Funktionen $Y_{l,m}(\theta, \phi) \begin{pmatrix} \mathbf{s}_1 \\ \mathbf{s}_2 \end{pmatrix}$.

Für uns genügt es zu wissen, daß sie existieren und das in dieser Basis der Hamiltonian diagonal ist. Die Drehimpuls-Operatoren kann man dann durch ihre Eigenwerte ersetzen. Man erhält so die Gleichung für den Radialteil:

$$\left\{ \frac{p^2}{2m} + A(r) \cdot \hbar^2 \cdot I(I+1) + B(r) \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - I(I+1) - s(s+1)) \right\} R_{n,l}(r) = E \cdot R_{n,l}(r)$$

Die Energieverschiebung aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung ergibt sich durch Störungsrechnung in erster Ordnung zu:

$$\begin{aligned} E_{LS} &\approx \langle R_{n,l}(r) | H_{LS} | R_{n,l}(r) \rangle \\ &= \xi_{n,l} \cdot (j(j+1) - I(I+1) - s(s+1)) \end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned} \xi_{n,l} &= \frac{\hbar^2}{2} \frac{\alpha \hbar}{2m^2 c} \cdot \int_0^{\infty} R_{n,l}^* \frac{1}{r^3} R_{n,l} r^2 dr \\ &= \frac{1}{4} m c^2 \alpha^4 \frac{1}{n^3 l \left(l + \frac{1}{2} \right) (l+1)} \end{aligned}$$

Diese Korrektur ist proportional zu α^4 und ist abhängig von der Drehimpulsquantenzahl l . Die Drehimpulsentartung der Schrödinger-Gleichung ist damit aufgehoben.

Dies ist gerade der dritte Term in der Entwicklung des exakten Ergebnis der Dirac-Gleichung!

6.7 Weitere Korrekturen in α^4

Es gibt weitere Korrekturen in α^4 die relativistischer Natur sind. Dies sieht man, wenn man vom Hamilton die Ruhemasse abzieht und den Rest nach p entwickelt:

$$\begin{aligned} H &= \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2 + V \\ &= \frac{p^2}{2m} - \underbrace{\frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2}}_{\text{rel. Korrektur } H_{\text{rel}}} + \dots + V \end{aligned}$$

Die mit H_{rel} verbundene Energie ergibt sich wieder durch Störungsrechnung in erster Ordnung:

$$\begin{aligned} E_{\text{rel}} &= \langle \phi | H_{\text{rel}} | \phi \rangle \\ &= - \int \phi_{n,l,m}^* \frac{\hbar^4}{8m^3 c^2} \vec{\nabla}^4 \phi_{n,l,m} r^2 dr d\phi d\cos\theta \\ &= -\frac{mc^2}{2} \alpha^4 \left(\frac{1}{n^3 \left(l + \frac{1}{2} \right)} - \frac{3}{4n^4} \right) \end{aligned}$$

Neben dieser relativistischen Korrektur und der Spin-Bahn-Kopplung gibt es noch eine weitere Korrektur, die proportional zu α^4 ist. Dies ist der sogenannte Darwin-Term. Er wirkt nur auf s-Zustände. Sein physikalischer Ursprung basiert auf der Tatsache, daß man ein Elektron nicht besser als die Compton-Wellenlänge lokalisieren kann. Nimmt man für das Elektron eine geladene Kugel von der Größe der Comptonwellenlänge an erhält man bereits für das klassische Problem eine Energieverschiebung von

$$E_{\text{Darwin}} = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m_e^2 c^2} |\psi(0)|^2.$$

Nur s-Zustände haben eine von Null verschiedene Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(0)|^2$ am Kernort. Alle Terme ergeben zusammen die sogenannte Feinstruktur:

$$\begin{aligned} E_{FS} &= E_{LS} + E_{\text{rel}} + E_{\text{Darwin}} \\ &= -\frac{1}{2} mc^2 \alpha^4 \frac{1}{n^3} \left(\frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \end{aligned}$$

Kapitel 7

Einflüsse des Kerns

Den Kern haben wir bisher nur als punktförmige Quelle eines Coulomb-Potenzials betrachtet. Wir besprechen jetzt drei Effekte, die durch die innere Struktur des Kerns zustande kommen. Isotopieverschiebung: Die Kernmasse führt über die reduzierte Masse zu einer Skalierung des Energieschemas als ganzes. Die relative Verschiebung beträgt zwischen 10^{-3} und 10^{-5} . Verschiedene Isotope des selben Atoms sind relativ zueinander energetisch verschoben.

Volumeneffekt: Ein wesentlich kleinerer Effekt im Bereich einer relativen Verschiebung von 10^{-8} bis 10^{-10} entsteht durch die Kernausdehnung und die damit verbundene Abweichung von einem reinen Coulomb-Potenzial im Kern.

Hyperfeinstruktur: Sie kommt durch das magnetische Moment des Kerns zustande, der sich im Magnetfeld der Hülle ausrichtet und ist etwa 1000 mal kleiner als die Feinstruktur.

7.1 Isotopie und Volumeneffekt

Im Schrödinger-Modell ist die Energie

$$E = -\frac{1}{2} \mu c^2 \left(\frac{\alpha^2}{n^2} + \dots \right),$$

proportional zur reduzierten Masse μ . Vergleicht man z.B. die beiden Isotope Wasserstoff und Deuterium mit ihren reduzierten Massen

$$\mu_H = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p}$$

und

$$\mu_D = \frac{m_e (m_n + m_p)}{m_e + (m_n + m_p)}$$

so ergibt sich für das Energieverhältnis in der Näherung $m_p = m_n = m_N$:

$$\begin{aligned} \frac{E_H}{E_D} &= \frac{\mu_H}{\mu_D} = 1 - \frac{1}{2} \frac{m_e}{m_e + m_N} \\ &\simeq 1 - \frac{1}{2} \frac{m_e}{m_N} \\ &\simeq 1 - \frac{1}{2} \frac{1}{1836} \end{aligned}$$

Allgemein gilt für die Energieverschiebung zwischen zwei Kerne mit den Kernmassenzahlen A und $A+1$:

$$m_K = A \cdot m_N$$

und

$$m_{K'} = (A+1) \cdot m_N$$

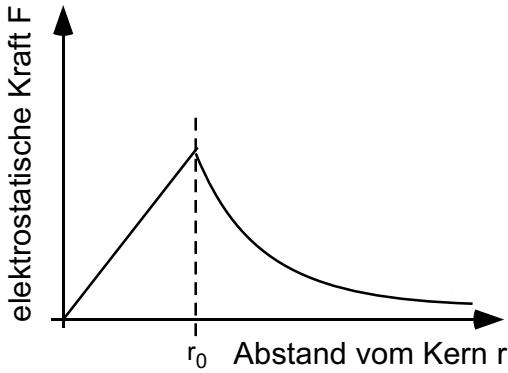
$$\begin{aligned} \frac{\mu_K}{\mu_{K'}} &= \frac{\frac{m_e \cdot A \cdot m_N}{m_e + A \cdot m_N}}{\frac{m_e \cdot (A+1) \cdot m_N}{m_e + (A+1) \cdot m_N}} \\ &= 1 - \frac{1}{A+1} \cdot \frac{m_e}{m_e + A m_N} \\ &\simeq 1 - \frac{1}{A(A+1)} \cdot \frac{m_e}{m_N} \end{aligned}$$

Die relative Verschiebung wird damit für große A näherungsweise

$$\frac{\Delta E}{E} \simeq -\frac{1}{A^2} \cdot \frac{1}{1836}$$

Die Isotopieverschiebung ist für schwere Kerne klein, für Wasserstoff liegt sie etwas unter einem Promille.

Zu Beschreibung des Volumeneffekts benötigen wir das Potential des endlich ausgedehnten Kerns. Als Modell betrachten wir den Kern als homogen geladene Kugel mit einer Gesamtladung $Z \cdot e$ und einem Radius r_0 .



Für die Kraft auf das Elektron erhält man

$$F = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^3} \cdot r & r < r_0 \\ -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r^2} & r > r_0 \end{cases}.$$

Sie entspricht einem Potential

$$V_{\text{eff}} = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} & r > r_0 \\ \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2r_0} \left(\left(\frac{r}{r_0} \right)^2 - 3 \right) & r < r_0 \end{cases},$$

das sich durch Integration der Kraft ergibt, wobei die Integrationskonstante so gewählt werden muss, dass das Potential an r_0 stetig ist. Die Energieverschiebung berechnen wir wieder in erster Ordnung Störungstheorie angewandt auf einen Störoperator, der die Abweichung vom reinen Coulomb-Potenzial angibt.

$$\Delta V := V_{\text{eff}} - V_{\text{Coulomb}} = \begin{cases} 0 & r > r_0 \\ \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 2r_0} \left(\left(\frac{r}{r_0} \right)^2 + \frac{2r_0}{r} - 3 \right) & r < r_0 \end{cases}$$

Man erhält dann

$$\begin{aligned} \Delta E &= \langle \phi_{n,l,m} | \Delta V | \phi_{n,l,m} \rangle \\ &= \underbrace{\langle Y_{l,m} | Y_{l,m} \rangle}_1 \cdot \langle R_{n,l} | \Delta V | R_{n,l} \rangle. \end{aligned}$$

Da im Bereich $r < r_0$ gilt $R_{n,l}(r) \sim R_{n,l}(0)$ erhält man

$$\begin{aligned} \Delta E &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2r_0} |R_{n,l}(0)|^2 \cdot \\ &\quad \cdot \int_0^{r_0} r^2 dr \left(\left(\frac{r}{r_0} \right)^2 + \frac{2r_0}{r} - 3 \right) \\ &= \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{r_0^2}{10} \cdot |R_{n,l}(0)|^2 \end{aligned}$$

Wie groß ist $|R_{n,l}(0)|^2$?

Für Wasserstoff kennen wir die radiale Wellenfunktion

$$R_{1,0}(r) \sim e^{-\kappa r} \cdot r^l \cdot H(\kappa r).$$

Man erhält also

$$R_{1,0}(r=0) = 0 \quad \text{für } l > 0$$

Der Volumeneffekt kommt nur bei den s-Zuständen zum tragen. Betrachten wir z.B. den Wasserstoffgrundzustand und benutzen

$$R_{1,0}(r=0) = 2a_0^{-\frac{3}{2}},$$

erhält man

$$\Delta E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \underbrace{\frac{r_0^2}{10}}_{\frac{\hbar^2}{ma_0}} (2a_0^{-\frac{3}{2}})^2$$

Der Vergleich mit der Grundzustandsenergie

$$E_{1s} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{1}{a_0^2}$$

liefert

$$\frac{\Delta E}{E_{1s}} = \frac{4}{5} \cdot \frac{r_0^2}{a_0^2}.$$

Mit den Zahlenwerten für das Wasserstoffatom $a_0 = 0.05 \text{ nm}$ und $r_0 = 1.3 \text{ fm}$ bekommen wir eine relative Verschiebung

$$\frac{\Delta E}{E_{1s}} = 5.4 \cdot 10^{-10}.$$

Dies ist extrem klein. Aus der Kernphysik übernehmen wir für große Kerne mit der Kernmasenzahl A:

$$r_0 \sim 1.3 \text{ fm} \cdot A^{1/3}$$

Die relative Verschiebung lautet damit

$$\frac{\Delta E}{E_{1s}} \sim A^{2/3}.$$

Für A=200 erhält man eine relative Verschiebung von 10^{-8} .

(siehe auch Lithium Halokerne:
<http://www-aix.gsi.de/~laserweb/lithium/lithium.html>)

7.2 Hyperfeinstruktur

Mit dem Kernspin ist ein magnetisches Moment verbunden. Wir benutzen wieder die Schreibweise unter Einführung eines g-Faktors

$$\vec{\mu} = g \cdot \mu_K \cdot \frac{\vec{I}}{\hbar}.$$

Das Bohrsche Magneton ist hier entsprechend durch das Kernmagneton ersetzt

$$\mu_K := \frac{1}{2} \frac{e}{m_p} \cdot \hbar.$$

Für die Quantenzahl des Kernspins erhält man Werte je nach Kern zwischen 0 und $15/2$.

Mit dem magnetischen Moment und dem Magnetfeld das die Hülle am Ort des Kerns erzeugt ist eine Energie verbunden. Der Hamiltonoperator lautet

$$H_{\text{HFS}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}_{\text{Hülle}}.$$

Der Betrag des Magnetfelds am Ort des Kerns ist für die meisten Atome schwer zu berechnen. Wir können aber eine Aussage über die Richtung machen. Das Gesamt magnetfeld entsteht durch die Beiträge der Bahndrehimpulse und der Eigendrehimpulse aller Elektronen. Aufgrund des anomalen g-Faktors des Elektrons trägt allerdings ein Spin doppelt soviel zum Magnetfeld bei wie ein Bahndrehimpuls dersel-

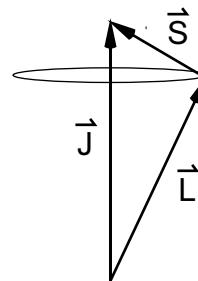
ben Größe. Wir können also nicht einfach den Gesamtdrehimpuls als Maß für das Magnetfeld nehmen sondern müssen Spin und Bahnbeitrag getrennt behandeln.:

$$\vec{B}_{\text{Hülle}} \sim \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S$$

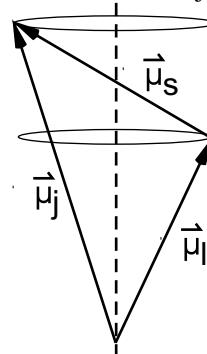
wobei

$$\vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S \sim -(\vec{L} + 2\vec{S})$$

Dieses gesamte magnetische Moment ist allerdings keine Erhaltungsgröße. Dies erkennt man wenn man sich klar macht, dass bereits der Gesamtdrehimpuls eine Erhaltungsgröße ist. Den Gesamtdrehimpuls haben wir ja gerade eingeführt um den Hamilton mit Spin-Bahn-Wechselwirkung zu lösen. Die Spin-Bahn-Kopplung sorgt dafür, dass \vec{L} und \vec{S} umeinander mit der Frequenz $\hbar\omega = E_{\text{FS}}$ präzidieren.



Das gesamte magnetische Moment ist daher eine Größe, die ebenfalls in der x-y-Ebene präzidiert. Im zeitlichen Mittel heben sich dann die Komponenten in der x-y-Ebene auf und es bleibt nur die Projektion auf die z-Achse.



Das zeitlich gemittelte Moment steht parallel zu \vec{J} und wir können ansetzen:

$$\vec{B}_{\text{Hüle}} = -B_0 \cdot \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|}$$

Damit lautet der Hamiltonoperator der Hyperfeinstruktur

$$\begin{aligned} H_{\text{HFS}} &= g_p \mu_K \frac{\vec{I}}{\hbar} B_0 \cdot \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|} \\ &= \frac{g_p \mu_K B_0}{\hbar^2 \sqrt{j(j+1)}} \vec{I} \cdot \vec{J} \\ &= \frac{g_p \mu_K B_0}{\hbar^2 \sqrt{j(j+1)}} \frac{1}{2} (\vec{F}^2 - \vec{I}^2 - \vec{J}^2) \end{aligned}$$

Wie bei der Behandlung der Feinstruktur schreiben wir den Operator unter Einführung eines Gesamtdrehimpulses F als Summe von Quadraten von Drehimpulsen. Im gemeinsamen Eigenzustand dieser drei Operatoren wird der Hamilton diagonal und wir erhalten den Energieniveaue.

$$\begin{aligned} E_{\text{HFS}} &= \frac{g_p \mu_K B_0}{\sqrt{j(j+1)}} \times \\ &\quad \frac{1}{2} (F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)) \\ &= \frac{A_{\text{HFS}}}{2} (F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)) \end{aligned}$$

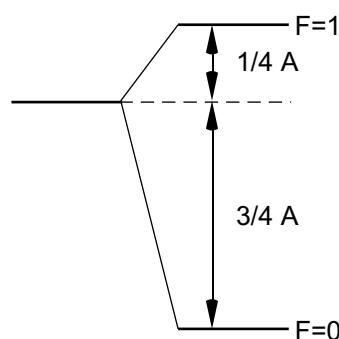
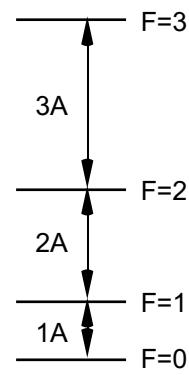
Betrachten wir als Beispiel wieder den Wasserstoffgrundzustand. Die Elektron- und Kerndrehimpulsquantenzahlen lauten für das Elektron $l=0$, $s=1/2$, $J=1/2$ und für den Kern also das Proton $I=1/2$. Man erhält damit zwei Zustände:

$$\begin{aligned} F = 1 : E_{\text{HFS}} &= \frac{1}{2} \frac{A_{\text{HFS}}}{2} = \frac{A_{\text{HFS}}}{4} \\ F = 0 : E_{\text{HFS}} &= -\frac{3}{2} \frac{A_{\text{HFS}}}{2} = -\frac{3}{4} A_{\text{HFS}} \end{aligned}$$

Allgemein gilt folgende Intervallregel:

$$\begin{aligned} \Delta &= E_{\text{HFS}}(F) - E_{\text{HFS}}(F-1) \\ &= \frac{A_{\text{HFS}}}{2} (F(F+1) - (F-1)(F-1+1)) \\ &= A_{\text{HFS}} \cdot F. \end{aligned}$$

Deswegen wird A auch „Intervallfaktor“ genannt.



Kapitel 8

Mehrelektronenatome

Bisher haben wir hauptsächlich Wasserstoff und wasserstoffähnliche Atome betrachtet also Atome mit einem Kern und einem Elektron. Wie können wir das Bild auf Atome mit mehreren Elektronen ausdehnen? Wir werden zunächst einige allgemeine Überlegungen und qualitative Abschätzungen besprechen um dann Helium genauer zu betrachten. Am Helium kann man die neuen Aspekte, die beim Übergang zu mehreren Elektronen hinzukommen noch einigermaßen genau behandeln.

8.1 Schalenmodell

Der Hamiltonoperator eines Mehrelektronensystems kann folgendermaßen geschrieben werden:

$$\sum_{i=1}^Z \underbrace{\frac{p_i^2}{2m}}_{\text{kin. Energie}} - \underbrace{\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_i}}_{\text{Potential des Kerns}} + \sum_{i>j} \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{Wechselwirkung zw. Elektronen } H_{WW}}$$

Der Index numeriert die Elektronen und läuft von 1 bis Z. Wir vernachlässigen zunächst die Elektron-Elektron-Wechselwirkung H_{WW} . Man erhält dann für jedes Elektron ein Wasserstoffproblem, wobei in der Lösung α durch αZ ersetzt wird, denn das Coulomb-Potential des Kerns lautet jetzt

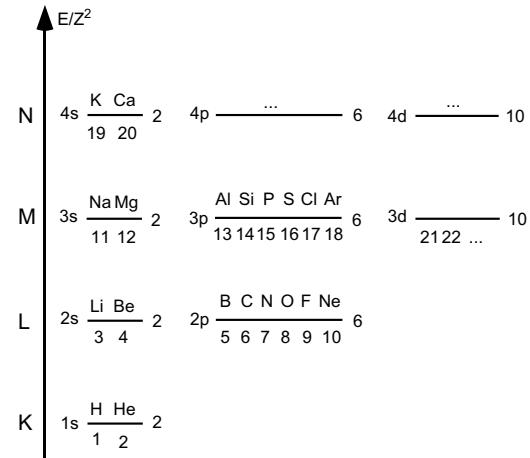
$$\frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = \frac{Z\alpha \cdot \hbar \cdot c}{r}.$$

Für die Energien gilt dann:

$$E = - \sum_{i=1}^Z \frac{1}{2} m_e c^2 \left(\frac{Z\alpha}{n_i} \right)^2$$

Jedes der Energieniveaus in dieser Summe enthält mehrere Zustände. Jeden dieser Zustände kann man gemäß dem Pauli-Prinzip mit nur einem Elektron besetzen. Auf diese Weise erhält man Elektronenkonfiguration für die Atome des Periodensystems. Dies funktioniert nur für die

Atome mit bis zu 18 Elektronen. Nach vollständiger Befüllung der 3p Schale wird nicht die 3d-Schale sondern die 4s-Schale besetzt. Um dies zu verstehen müssen wir die Elektron-Elektron-Wechselwirkung berücksichtigen.



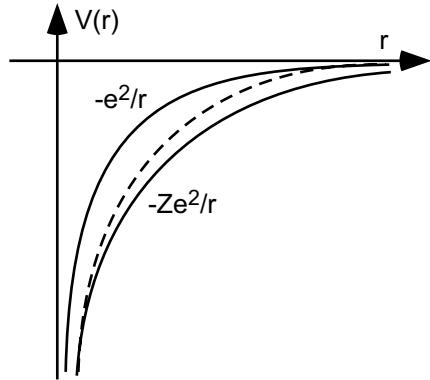
Dazu betrachten wir ein Elektron im mittleren Feld aller anderen Elektronen. Das Elektron befindet sich dann in einem effektiven Potential, das für große und kleine Abstände in ein Coulomb-Potential übergeht: Für kleine Abstände sieht das Elektron nur die positive Punktladung des Kerns und das Potential ist proportional zu αZ .

$$V(r) = - \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}.$$

Für große Abstände bilden der Kern und alle anderen Elektronen zusammen eine nahezu kugelförmige kleine Ladungsquelle den sogenannten core und man kann das Potenzial nähern durch

$$V(r) = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}.$$

Das tatsächliche Potenzial geht von einem in den andern Verlauf über:



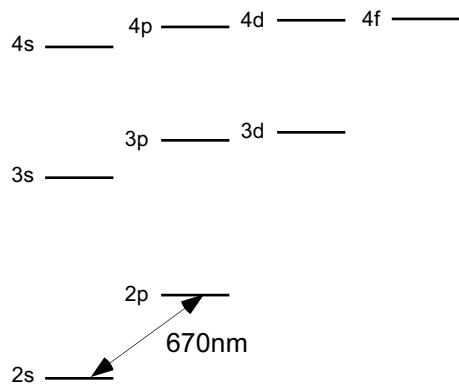
Noch stärker ist der Abschirmungseffekt bei den Seltenen Erden ausgeprägt. Hier liegt die Energie des 6s-Zustandes *unterhalb* der 4f-Energie. Die 6s-, 5s-, 5p- und 5d-Schalen schirmen also die 4f-Schale sehr gut ab. Ein Beispiel dafür ist Nd:YAG (Neodym in Ytrium Aluminium-Granat). Bei diesem Kristall können optische Übergänge im Nd innerhalb der 4f-Schale angeregt werden. Allerdings sind diese Übergänge nur durch Störungen des Kristallfeldes erlaubt. Die sehr starke Abschirmung führt zu einer langen Lebensdauer des angeregten Zustands. Dadurch eignet sich dieser Kristall hervorragend als Lasermaterial.

Innen schirmen die Elektronen den Kern schlechter ab als für große r . Damit liegen Zustände mit einer geringen Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Kernort energetisch höher. Also

$$E_{2s} < E_{2p}$$

$$E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}.$$

Die Drehimpulsentartung des Schrödingermodells wird aufgehoben, der Abschirmungseffekt ist, wie man am Beispiel der angeregten Zustände von Lithium sehen kann, ein großer Effekt im Bereich einiger eV.



Die Abschirmung führt auf ähnliche Weise zu den Konfigurationsanomalien im Periodensystem, wie z.B. bei K oder Ca. Da $E_{4s} < E_{3d}$ wird zuerst der 4s-Zustand besetzt. Ähnliche Anomalien treten auch bei Rb (5s), Cs (6s) und Fr (7s) auf.

8.2 Alkaliatome

Alkaliatome bestehen aus einer vollständigen Edelgasschale und einem zusätzlichen Valenzelektron. Ihr Spektrum ist deswegen stark wasserstoffähnlich. Zur Beschreibung macht man den empirischen Ansatz

$$E_{n,l} = -\frac{1}{2} \mu_{EG} c^2 \cdot \frac{\alpha^2}{(n - \Delta(n,l))^2}.$$

Dabei ist μ_{EG} die reduzierte Masse bezüglich des Edelgasrumpfes und $\Delta(n,l)$ der sogenannte Quantendefekt. Er ist für die meisten Alkalizustände tabelliert und ist besonders für energetisch niedrige Zustände wichtig. Für Natrium lauten die Werte z.B.:

L	n=3	n=4	n=5	n=6
s	1.37	1.36	1.35	1.34
p	0.88	0.87	0.86	0.86
d	0.10	0.11	0.13	0.11
f	-	0.00	-0.01	0.008

Für Zustände mit großem Drehimpuls verschwindet der Quantendefekt. In diesen Zuständen befindet sich das Elektron weit vom Kern entfernt und das Potenzial ist weitgehend wasserstoffähnlich.

Alkali-Atome sind die derzeit gängigen Laboratome der Quantenoptik. Sie sind vergleichsweise einfach aufgebaut, besitzen aber genügend Struktur um interessant zu sein. Die elektronischen Übergänge liegen im nahen infraroten und sichtbaren Spektralbereich und können mit vergleichsweise einfachen Laserquellen angeregt werden. Die Lebensdauern der angeregten Zu-

zstände liegen im Bereich einiger 10 ns. Damit beträgt die natürliche Linienbreite etwa 5-10 MHz und man kann in den meisten Fällen die Hyperfeinstruktur auch der angeregten Zustände prinzipiell noch auflösen. Die Sättigungsintensitäten betragen typischerweise 1-5 mWcm⁻², was gut mit Laserdioden erreicht werden kann. Die Schmelzpunkte liegen zwischen 28°C für Cäsium und 180°C für Lithium. In einer Dampfzelle wird ein Dampfdruck von 10⁻⁶ mbar bei Temperaturen von 307°C (Li) bzw. -7°C (Cs) erreicht. Dieser Druck entspricht einer

$$\text{Dichte von, } n = \frac{p}{kT} \approx 10^{10} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^3}.$$

Die Atome können mit Hilfe der Sättigungsspektroskopie gut untersucht werden. Dabei treten bei Vielniveausystemen sogenannte crossover-Resonanzen auf. Für Atome einer bestimmten Geschwindigkeitsklasse kann ein Grundzustandsniveau durch die beiden Laserstrahlen an zwei verschiedene angeregte Zustände gekoppelt werden. Der Dopplereffekt führt zu gleichzeitiger Resonanz von zwei unterschiedlichen Übergängen.

8.3 Helium

Betrachten wir jetzt Helium genauer. Wir können am Helium beispielhaft verstehen, wie man Atome mit mehreren Elektronen quantitativ beschreiben muß. Der Hamiltonoperator des Heliumatoms setzt sich aus zwei Wasserstoffähnlichen Hamiltonoperatoren und einem Wechselwirkungsoperator zusammen.

$$H = \underbrace{\frac{p_1^2}{2m} - \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1}}_{H^{(1)}} + \underbrace{\frac{p_2^2}{2m} - \frac{Z e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2}}_{H^{(2)}} + \underbrace{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}}_{:=V}$$

Magnetische Effekte wollen wir hier nicht betrachten. Wir vernachlässigen zunächst außerdem die elektrostatische Wechselwirkung zwischen den Elektronen ($V=0$). Die Operatoren $H^{(1)}$ und $H^{(2)}$ vertauschen und man kann ansetzen

$$u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_{n_1 l_1 m_1}(\vec{r}_1) \cdot \phi_{n_2 l_2 m_2}(\vec{r}_2).$$

Damit gilt dann

$$(H^{(1)} + H^{(2)}) u(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E u(\vec{r}_1, \vec{r}_2),$$

bzw. für die Energie der Zustände

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} = -\frac{1}{2} \mu c^2 (2\alpha)^2 \left(\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} \right).$$

Die Grundzustandsenergie ist also 8mal größer als beim Wasserstoff.

Elektronen sind Fermionen. Die Gesamtwellenfunktion muß antisymmetrisch sein,

$$u(q_1, q_2) = -u(q_2, q_1),$$

wobei q ein vollständiger Satz von Quantenzahlen ist, die den Zustand beschreiben (ist q nicht vollständig, so wären die Teilchen unterscheidbar). Ein vollständiger Satz von Quantenzahlen wäre z.B. $q=\{n, l, m\}$. Für den Spezialfall, daß beide Zustände gleich sind, also $q_1=q_2=q$, gilt

$$u(q, q) = -u(q, q) = 0.$$

Dieser Zustand existiert also nicht (Pauli-Prinzip).

Die Gesamtwellenfunktion setzt sich aus Ortswellenfunktion und Spinzustandsfunktion zusammen. Betrachten wir zunächst die Ortswellenfunktion. Wir fordern, daß sie unter Austausch von Teilchen entweder symmetrisch oder antisymmetrisch sein soll. Dies können wir durch folgende Ansätze garantieren. Für $q_1=q_2=q$ ist der Ausdruck

$$u_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi_q(\vec{r}_1) \cdot \phi_q(\vec{r}_2)$$

symmetrisch. Für unterschiedliche q_1 und q_2 müssen wir die Wellenfunktion symmetrisieren:

$$u_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_{q_1}(\vec{r}_1) \cdot \phi_{q_2}(\vec{r}_2) + \phi_{q_1}(\vec{r}_2) \cdot \phi_{q_2}(\vec{r}_1) \right)$$

Auf dieselbe Weise erhalten wir eine antisymmetrische Variante der Ortswellenfunktion:

$$u_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_{q_1}(\vec{r}_1) \cdot \phi_{q_2}(\vec{r}_2) - \phi_{q_1}(\vec{r}_2) \cdot \phi_{q_2}(\vec{r}_1) \right)$$

Für $q_1=q_2$ sehen wir sofort die Gültigkeit des Pauliprinzips.

$$\begin{aligned} u_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &\stackrel{q_1=q_2=q}{=} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\phi_q(\vec{r}_1) \cdot \phi_q(\vec{r}_2) - \phi_q(\vec{r}_2) \cdot \phi_q(\vec{r}_1) \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

Betrachten wir nun die Spinwellenfunktion. Die Eigendrehimpulse der beiden Elektronen addieren sich zu einem Gesamtspin. Wie sieht der Vektorraum aus in dem der Gesamtspin "lebt"? Wir wissen, daß je ein Elektronenspin in seinem zweidimensionalen Spinraum beschrieben wird. Bildet man das Tensorprodukt dieser beiden Räume erhält man den vierdimensionalen Raum des Gesamtspins. Wir führen jetzt diese Konstruktion im Detaille durch.

Das Tensorprodukt der Vektoren

$$\begin{aligned} \vec{a} &= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = a_i \\ \vec{b} &= \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = b_j \end{aligned}$$

ist folgendermaßen definiert:

$$\vec{c} := \vec{a} \otimes \vec{b} = a_i b_j = c_k$$

wobei $k \in \{1, 2, 3, 4\}$.

Die Indexbelegung von k ist Konvention, wir einigen uns hier auf:

$$\begin{array}{ccc} i & j & k \\ \hline 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 3 \\ 2 & 2 & 4 \\ \hline \widetilde{\in A} & \widetilde{\in B} & \widetilde{\in C} \end{array}$$

Der neue Vektor ist Element von Raum C. Also

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 \\ a_1 b_2 \\ a_2 b_1 \\ a_2 b_2 \end{pmatrix}$$

oder etwas kompakter geschrieben

$$\vec{a} \otimes \vec{b} = \begin{pmatrix} a_1 \vec{b} \\ a_2 \vec{b} \end{pmatrix}.$$

Das Tensorprodukt zweier Vektoren ist also distributiv und bilinear. Man muß hier unterscheiden welcher Vektor aus welchem Raum stammt. In dieser Schreibweise ist der Vektor vor dem Zeichen für das Kreuzprodukt aus Raum A und der nach dem Kreuzproduktzeichen aus Raum B.

Für die Dimension des neuen Raums C gilt

$$\dim(\vec{c}) = \dim(\vec{a}) \cdot \dim(\vec{b}),$$

und wenn \vec{a}_n und \vec{b}_m eine Basis im Raum A bzw. B ist, so ist $\vec{c}_k = \vec{a}_n \otimes \vec{b}_m$ eine Basis im Tensorraum C.

Das Tensorprodukt von Operatoren ist folgendermaßen definiert:

$$\underbrace{(\alpha \otimes \beta)}_{\text{Operator}} \underbrace{(\vec{a} \otimes \vec{b})}_{\text{Zustand}} = \underbrace{\alpha \vec{a} \otimes \beta \vec{b}}_{\text{neuer Zustand}}$$

In Matrzenschreibweise liest sich das so:

$$\begin{aligned} \alpha \otimes \beta &= \begin{pmatrix} \alpha_{11}\beta_{11} & \alpha_{11}\beta_{12} & \alpha_{12}\beta_{11} & \alpha_{12}\beta_{12} \\ \alpha_{11}\beta_{21} & \alpha_{11}\beta_{22} & \alpha_{12}\beta_{21} & \alpha_{12}\beta_{22} \\ \alpha_{21}\beta_{11} & \alpha_{21}\beta_{12} & \alpha_{22}\beta_{11} & \alpha_{22}\beta_{12} \\ \alpha_{21}\beta_{21} & \alpha_{21}\beta_{22} & \alpha_{22}\beta_{21} & \alpha_{22}\beta_{22} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \alpha_{11}\beta & \alpha_{12}\beta \\ \alpha_{21}\beta & \alpha_{22}\beta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Man kann das Tensorprodukt zweier Operatoren auch folgendermaßen schreiben:

$$\begin{aligned}
\alpha \otimes \beta &= (\alpha \otimes E) \cdot (E \otimes \beta) \quad \text{mit } E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \alpha_{11} E & \alpha_{12} E \\ \alpha_{21} E & \alpha_{22} E \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \\
&\quad \text{normale Matrizenmultiplikation} \\
&= \begin{pmatrix} \alpha_{11}\beta & \alpha_{12}\beta \\ \alpha_{21}\beta & \alpha_{22}\beta \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Der im Raum C wirkende Operator $\tilde{\alpha} = \alpha \otimes E$ ist die Erweiterung von α im Tensorraum C.

Soweit der Formalismus. Wenden wir ihn nun auf ein Elektronenpaar an. Die Zustände die zwei Elektronen einnehmen können sind:

$$\begin{aligned}
\vec{c}_1 &:= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{beide Elektronen} \\
&\quad \text{"Spin up"} \\
\vec{c}_2 &:= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{a: "Spin up"} \\
&\quad \text{b: "Spin down"} \\
\vec{c}_3 &:= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{a: "Spin down"} \\
&\quad \text{b: "Spin up"} \\
\vec{c}_4 &:= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{beide Elektronen} \\
&\quad \text{"Spin down"}
\end{aligned}$$

Weiterhin erhält man für die in den Raum C erweiterten Spinoperatoren:

$$\begin{aligned}
S_z^{(a)} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \cdot E & 0 \\ 0 & -1 \cdot E \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
S_z^{(b)} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \cdot \sigma_z & 0 \\ 0 & 1 \cdot \sigma_z \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\
S_x^{(a)} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \cdot E \\ 1 \cdot E & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
S_x^{(b)} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \cdot \sigma_x & 0 \\ 0 & 1 \cdot \sigma_x \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \\
S_y^{(a)} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \cdot E \\ 1 \cdot E & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
S_y^{(b)} &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 \cdot \sigma_y & 0 \\ 0 & 1 \cdot \sigma_y \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Mit diesen im Raum C wirkenden Operatoren können wir jetzt neue Operatoren bilden. Betrachten wir zunächst den Operator für die drei Komponenten des Gesamtdimensions.

$$\begin{aligned}
S_z &= S_z \otimes E + E \otimes S_z \\
&= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S_z & 0 \\ 0 & S_z \end{pmatrix} \\
&= \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
S_x &= S_x \otimes \mathbf{E} + \mathbf{E} \otimes S_x \\
&= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{E} \\ \mathbf{E} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S_x & 0 \\ 0 & S_x \end{pmatrix} \\
&= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

und schließlich

$$\begin{aligned}
S_y &= S_y \otimes \mathbf{E} + \mathbf{E} \otimes S_y \\
&= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i\mathbf{E} \\ i\mathbf{E} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S_y & 0 \\ 0 & S_y \end{pmatrix} \\
&= \frac{i\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Der Operator für das Betragsquadrat des Gesamtspins berechnet sich dann folgendermaßen:

$$\begin{aligned}
\vec{S}^2 &= S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 \\
&= \frac{\hbar^2}{4} \left\{ \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 2 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \right. \\
&\quad \left. + 4 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \right\} \\
\vec{S}^2 &= \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Nun suchen wir die Eigenwerte des Gesamtspins. Die Eigenwertgleichung von S_z lautet:

$$\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \cdot \vec{\phi} = \mathbf{s} \cdot \vec{\phi}$$

S_z ist also bereits diagonal in der oben eingeführten Basis c_i . Man erhält also sofort die Eigenwerte:

$$\begin{aligned}
S_z \cdot \vec{c}_1 &= \hbar \vec{c}_1 \\
S_z \cdot \vec{c}_2 &= 0 \cdot \vec{c}_2 \\
S_z \cdot \vec{c}_3 &= 0 \cdot \vec{c}_3 \\
S_z \cdot \vec{c}_4 &= -\hbar \vec{c}_4
\end{aligned}$$

Für S^2 ist die Sache interessanter. Die Linear-kombination zweier Eigenzustände mit gleichem Eigenwert ist bekanntermaßen wieder ein Eigenzustand. Die Zustände

$$\begin{aligned}
\vec{c}_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{c}_2 - \vec{c}_3) \\
\vec{c}_s &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{c}_2 + \vec{c}_3)
\end{aligned}$$

sind also nach wie vor Eigenzustände von S_z . Sie sind aber *auch* Eigenzustände zu S^2 :

$$\vec{S}^2 \vec{c}_s = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 2\hbar^2 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$\vec{S}^2 \vec{c}_a = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} = 0\hbar^2 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Für $\langle \vec{S}^2 \rangle = 2$ gibt es also die folgenden drei Zustände:

$$\left. \begin{array}{ll} \vec{c}_1 & m_s = 1 \\ \vec{c}_4 & m_s = -1 \\ \vec{c}_s & m_s = 0 \end{array} \right\} \text{Triplet, } s = 1$$

Für $\langle \vec{S}^2 \rangle = 0$ gibt es dagegen nur einen Zustand:

$$\vec{c}_a \quad m_s = 0 \quad \text{Singulett, } s = 0$$

Vertauscht man die beiden Elektronen behalten die Vektoren c_1 und c_4 ihre Form und die gemischten Vektoren vertauschen gerade ihre Form $\vec{c}_2 \rightarrow \vec{c}_3$, $\vec{c}_3 \rightarrow \vec{c}_2$. Unter Teilchenaustausch wechselt \vec{c}_a sein Vorzeichen, ist also antisymmetrisch während \vec{c}_1 , \vec{c}_4 und \vec{c}_s ihr Vorzeichen beibehalten also symmetrisch sind.

Wir können jetzt die Zustände von Helium konstruieren. Im Fall antiparalleler Spins ist der Spinzustand antisymmetrisch (Singulett). Die Ortswellenfunktion muß also symmetrisch sein:

$$\vec{\psi}_s = \underbrace{\phi_{1,0,0}(\vec{r}_1) \cdot \phi_{1,0,0}(\vec{r}_2)}_{\text{symmetrisch}} \cdot \underbrace{\vec{c}_a}_{\text{antisymmetrisch}}$$

Damit ergibt sich die Energie des Grundzustandes zu:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \mu c^2 (2\alpha)^2 \left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{1^2} \right) \\ &= -4 \mu c^2 \alpha^2 = -108.8 \text{ eV} \end{aligned}$$

Beim Grundzustand des Triplett gilt für die Gesamtwellenfunktion:

$$\vec{\psi}_t = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{\left(\phi_{1,0,0}(\vec{r}_1) \cdot \phi_{2,0,0}(\vec{r}_2) - \phi_{1,0,0}(\vec{r}_2) \cdot \phi_{2,0,0}(\vec{r}_1) \right)}_{\text{antisymmetrisch}} \cdot \underbrace{\begin{cases} \vec{c}_1 \\ \vec{c}_4 \\ \vec{c}_s \end{cases}}_{\text{symmetrisch}}$$

Für die Energie des Triplet-Grundzustandes erhält man:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \mu c^2 (2\alpha)^2 \left(\frac{1}{1^2} + \frac{1}{2^2} \right) \\ &= -\frac{5}{2} \mu c^2 \alpha^2 = -68.0 \text{ eV} \end{aligned}$$

Das Umklappen des Spins eines Elektrons kostet also 40.8 eV ohne daß der Hamilton vom Spinoperator abhängt!

Wir können versuchen den Beitrag der Elektron-Elektron Wechselwirkung mittels Störungstheorie erster Ordnung zu berücksichtigen. Man erhält dann für den Grundzustand des Singulett:

$$\Delta E =$$

$$\begin{aligned} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \vec{\psi}_s \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \vec{\psi}_s &= \\ \int d\vec{r}_1 e |\phi_{100}(\vec{r}_1)|^2 \cdot \underbrace{\int d\vec{r}_2 \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\phi_{100}(\vec{r}_2)|^2}_{:= U(\vec{r}_1)} &= \end{aligned}$$

Potential aufgrund des zweiten Elektrons

einiges Rechnen =

$$\frac{5}{2} \left(\frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 \right) = 34 \text{ eV}$$

Damit lautet die Energie des Grundzustands $E_{1s,1s} = -74.8$ eV was dem experimentellen Wert von -78.975 eV immerhin etwas näher kommt.

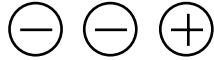
Für den ersten angeregten Zustand des Singulett bzw. Triplets erhält man analog

$$\Delta E^{s,t}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \left(\phi_{100}(\vec{r}_1) \phi_{200}(\vec{r}_2) \pm \phi_{100}(\vec{r}_2) \phi_{200}(\vec{r}_1) \right)^* \\ &\quad \cdot \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \left(\phi_{100}(\vec{r}_1) \phi_{200}(\vec{r}_2) \pm \phi_{100}(\vec{r}_2) \phi_{200}(\vec{r}_1) \right) \\ &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[\int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |\phi_{100}(\vec{r}_1)|^2 |\phi_{200}(\vec{r}_2)|^2 \cdot \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right. \\ &\quad \left. \pm \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \phi_{100}(\vec{r}_1) \phi_{200}(\vec{r}_2) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \phi_{200}^*(\vec{r}_1) \phi_{100}^*(\vec{r}_2) \right] \cdot \\ &\quad \text{Austauschenergie } \approx \pm 0.4 \text{ eV} \end{aligned}$$

Das Triplet liegt also energetisch tiefer. Im Triplet-Zustand sind die Elektronen antikorre-

liert und schirmen wechselseitig den Kern weniger stark ab, was zu einer stärkeren Bindung führt. Eine Ladungsverteilung der Form



ist weniger stark gebunden als eine Verteilung der Form:



Bisher haben wir immer ein Elektron im Grundzustand und eines im angeregten Zustand betrachtet. Natürlich können auch zwei Elektronen angeregt sein. Allerdings ist die Energie eines solchen doppelt angeregten Heliums größer als die Energie, die erforderlich ist, um von einem Grundzustandheliumatom ein Elektron zu entfernen. Energetisch steht also dem Zerfall eines doppelt angeregten Helium in ein Helium Ion und ein freies Elektron nichts im Wege. Wir machen die dazugehörige Energiebilanz auf: Wir schätzen die Energie des doppelt angeregten Heliums vor dem Zerfall unter Vernachlässigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung ab:

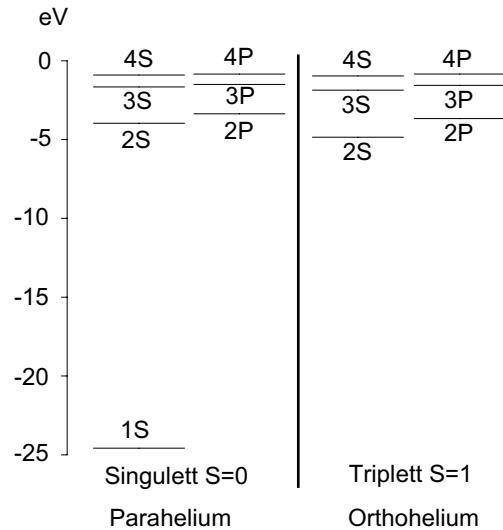
$$E_{2s2s} = -\frac{1}{2} \mu c^2 (2\alpha)^2 \left(\frac{1}{2^2} + \frac{1}{2^2} \right) = -27.2 \text{ eV}$$

Diese Energie müssen wir mit der Energie des Helium Ions im Grundzustand und des freien Elektrons vergleichen.

$$\begin{aligned} E_{He^+} + E_e &= -\frac{1}{2} \mu c^2 (2\alpha)^2 \underbrace{\frac{1}{1^2}}_{\text{He}^+ \text{ Grundzustand}} + E_e \\ &= -54.4 \text{ eV} + E_e \end{aligned}$$

Das Gleichsetzen der Energieen vor und nach dem Zerfall liefert für die Energie des freien Elektrons ein Wert von immerhin 27.2 eV. Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung lockert die Bindung, sodaß unsere Abschätzung eher konservativ ist und die tatsächliche Elektronenergie noch höher ist. Dieser Zerfall eines doppelt angeregten Heliumatoms nennt man Autoionisation.

Zum Abschluß das tatsächliche Termschema von Helium wie es experimentell bestimmt ist und durch weitaus aufwendigere Theorien berechnet werden kann:



Aufgrund der großen Austauschwechselwirkung kann das Triplet optisch nicht zum Singulett zerfallen, die Spin-Bahn-Kopplung ist klein gegenüber der Austauschwechselwirkung. Orthohelium kann mit Laserdioden bei 1083 nm anregt werden. Ortsaufgelöster Nachweis einzelner Atome ist mit einer Mikrokanalplatte möglich.

8.4 jj-Kopplung

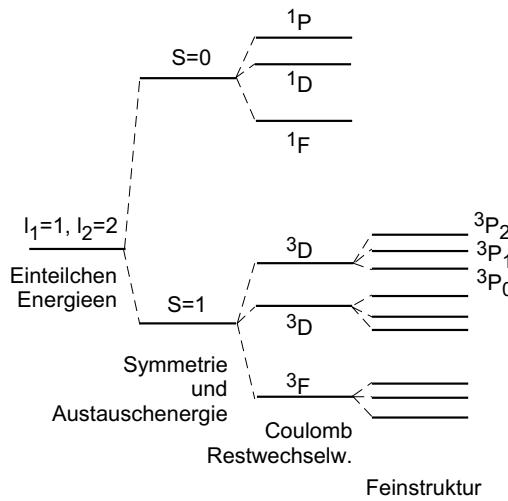
Am Helium haben wir gesehen, daß das Pauli-Prinzip zunächst die relative Ausrichtung der Elektronenspins bestimmt. Die Spins der einzelnen Elektronen addieren sich also zu einem Gesamtspin.

$$\vec{S} = \sum_i \vec{S}_i$$

Die Bahndrehimpulse nehmen ebenfalls eine bestimmte relative Orientierung ein. Sie wird durch die nichtkugelsymmetrischen Coulomb-Restwechselwirkung bestimmt. Eine bestimmte Kombination von Bahndrehimpulsen führt zu einer bestimmten räumlichen Verteilung der Elektronen und damit zu einer bestimmten elektrostatischen Energie.

$$\vec{L} = \sum_i \vec{L}_i$$

Die verschiedenen Gesamtbahndrehimpulse sind energetisch aufgespalten. Als zusätzliche Korrektur muß man dann die Spin-Bahn-Kopplung berücksichtigen also die Energie, die der Gesamtspin im Feld des Gesamtbahndrehimpulses einnimmt. Diese Beschreibung nennt man Russel Saunders Kopplung oder LS-Kopplung. Sie funktioniert solange die Spin-Bahn-Kopplung klein ist. In diesem Fall gilt auch das Interkombinationsverbot, d.h. es kann keine elektromagnetischen Übergänge zwischen Zuständen mit unterschiedlichem Spin geben.



Darüber hinaus gibt es noch folgende kleine Beiträge:

- $\vec{L}_i \cdot \vec{L}_j$ Dipolwechselwirkung der Bahnen
- $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$ Dipolwechselwirkung der Spins
- relativistische Korrekturen
- Hyperfeinstrukturaufspaltung

Für leichte Atome ist die Kopplung des Spins eines Elektrons an seinen Bahndrehimpuls eine Störung. Da aber

$$E_{LS} \sim (Z\alpha)^4 \sim Z^4$$

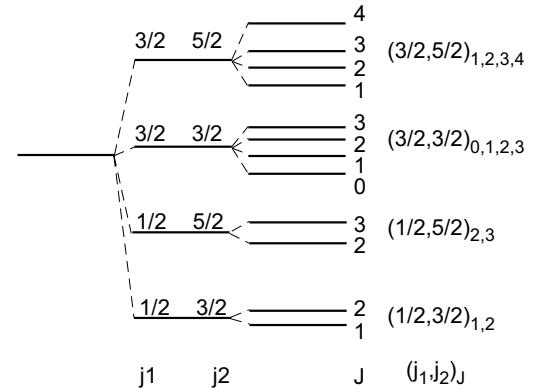
kann bei schweren Atomen die Spin-Bahn-Kopplung größer werden sowohl als die Symmetrie und Austauschenergie als auch als die Coulomb-Restwechselwirkung. Die Orientierung von \vec{L}_i relativ zu \vec{S}_i bringt mehr Energie

als die Austausch- und Restenergie kosten. Daher koppeln jetzt zunächst der Spin und der Bahndrehimpuls eines Elektrons zu einem Gesamtdrehimpuls

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

und man erhält einen Feinstrukturhamilton der Form

$$H_{FS} \sim \vec{J}_i \cdot \vec{J}_k .$$



Reine jj-Kopplung gibt es nur bei sehr schweren Kernen, normalerweise liegt die sogenannte intermediaire Kopplung, eine Mischung aus LS- und jj-Kopplung, vor. Dies führt zur Aufhebung des Interkombinationsverbots bei intermediairer Kopplung. Bei den reinen Kopplungsformen gelten folgende Dipolauswahlregeln:

LS-Kopplung $\Delta S = 0$ $\Delta L = \pm 1$ $\Delta I = \pm 1$	jj-Kopplung $\Delta j = 0, \pm 1$ für ein e^- $\Delta j = 0$ für alle anderen
---	---

Zusätzlich gilt bei beiden Kopplungen

$\Delta J = 0, \pm 1$ $\Delta m_J = 0, \pm 1$ $m_J = 0 \rightarrow m_J = 0$	kein $J = 0 \rightarrow J = 0$ falls $\Delta J = 0$ kein
---	---

8.5 Exotische Atome

Das Positronium besteht aus einem Elektron und einem Positron, die um ihren gemeinsamen Schwerpunkt kreisen. Die reduzierte Masse ist dann

$$\mu = \frac{m_e \cdot m_p}{m_e + m_p} = \frac{1}{2} m_e,$$

das Spektrum des Positroniums ist also ein „halbiertes“ Wasserstoffspektrum. Bedingt durch seinen Aufbau besitzt das Positronium einen strukturlosen „Kern“ und ist damit das einfachste rein leptonische, gebundene System. Es ist damit ein interessanter Kandidat für Präzisionsmessungen um Theorie und Experiment zu vergleichen. Positronium entsteht z.B. indem ein Positron auf ein Target geschossen wird. Coulombstöße bremsen es ab bis es schließlich unter Emission von Strahlung eingefangen wird. Das Positronium hat je nach relativer Orientierung der einzelnen Spins einen Gesamtspin $S = 0$ oder $S = 1$. Beide Zustände anihilieren unter Abgabe von Photonen:

$$S = 0 : \quad 2 \gamma\text{-Quanten gleicher Energie} \\ (0.511 \text{ MeV})$$

$$S = 1 : \quad \geq 3 \gamma\text{-Quanten, kontinuierliches Spektrum}$$

Der Triplet Zustand lebt mit $0,14 \mu\text{s}$ etwa 1000 mal länger als der Singulettzustand. Dies liegt daran, daß Prozesse an denen mehrerer Teilchen beteiligt sind unwahrscheinlicher sind als einfache Prozesse.

Warum zerfällt der Triplet-Zustand in 3 Photonen? Der Grund findet sich in einer etwas subtilen Symmetriebetrachtung. Beginnen wir mit dem Begriff der Parität P_r . Der Paritätsoperator wirkt folgendermaßen auf Zustände:

$$P_r \psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}) \\ P_r^2 \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r}) \\ \Rightarrow P_r \psi(\vec{r}) = \pm 1 \psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

Unter Raumsymmetrie kann also ein Zustand sein Vorzeichen ändern oder nicht. Ist $[H, P] = 0$, so ist P_r eine Erhaltungsgröße, d.h. es gibt Systeme, die unter Spiegelung eine Phase von π erfahren und solche, die keine Phase erfahren. Überprüfen wir also den Kommutator. Klassisch gilt die Schrödingergleichung und wir erhalten

$$P_r \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} P_r = 0.$$

Relativistische Teilchen gehorchen der Diracgleichung:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \chi(\vec{r}) = \frac{1}{c} (E - m_0 c^2) \phi(\vec{r}) \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \phi(\vec{r}) = \frac{1}{c} (E + m_0 c^2) \chi(\vec{r})$$

Wie verhält sich $\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$ unter Raumsymmetrie? Man unterscheidet verschiedene Skalare und Vektoren je nach ihrem Verhalten bei Raumsymmetrie:

$\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$	polare Vektoren: $\vec{r}, \vec{p}, \vec{F}$
$\vec{x} \rightarrow \vec{x}$	axiale Vektoren: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$
$s \rightarrow s$	Skalar: m, e
$s \rightarrow -s$	Pseudoskalar: $\vec{r} \cdot \vec{L}, \vec{p} \cdot \vec{L}$
speziell: $\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \rightarrow -\vec{\sigma} \cdot \vec{p}$	

Wendet man also den Paritätsoperator auf die Diracgleichung an, so geht diese über in:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{p} \chi(\vec{r}) = \frac{1}{c} (-E + m_0 c^2) \phi(\vec{r}) \\ \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \phi(\vec{r}) = \frac{1}{c} (-E - m_0 c^2) \chi(\vec{r})$$

Ersetzt man $\phi \rightarrow \chi$, $\chi \rightarrow \phi$ und $E \rightarrow -E$, so erhält man die ursprünglichen Gleichungen.

Der Paritätsoperator P_r setzt sich somit zusammen aus dem Spinaustauschoperator P_s und dem Teilchenaustauschoperator C :

$$P_r = P_s \cdot C$$

Jedes Teilchen (Elementarteilchen, Atome etc.) besitzt außerdem noch eine Eigenparität. Die des Elektrons ist z.B.

$$P(e^-) = -P(e^+) \Rightarrow P(e^- e^+) = -1$$

Damit gilt für den Teilchenaustauschoperator angewandt auf das Positronium:

$$C = -P_r P_s,$$

wobei die Eigenparität des Positroniums -1 ist. Wendet man den Teilchenaustauschoperator auf

den Grundzustand des Positroniums an, so erhält man:

$$C\psi = -P_s P_r \psi = c\psi$$

Die s-Ortswellenfunktion des Grundzustands ist kugelsymmetrisch, es gilt also:

$$P_r \psi_{1s} = \psi_{1s}$$

Die Spinwellenfunktion ist je nach Ausrichtung der Spins symmetrisch ($F=1$) oder antisymmetrisch ($F=0$). Man erhält also:

$$\begin{aligned} F = 1 & \quad c = -1 \} \text{ C-Parität vor dem} \\ F = 0 & \quad c = 1 \} \text{ Zerfall} \end{aligned}$$

c ist eine Erhaltungsgröße. Photonen haben die C-Parität -1 ($q \rightarrow -q \Rightarrow A \rightarrow -A$), wobei A die Wellenfunktion des Photons ist. Also zerfällt der Singulettzustand ($F=0$) in eine gerade Photonenanzahl – im einfachsten Fall in zwei Photonen – und der Tripletzustand ($F=1$) in eine ungerade Anzahl. Aufgrund der Impulserhaltung ist ein Zerfall des Triplets in ein Photon nicht möglich, es müssen mindestens drei Photonen am Zerfall beteiligt sein.

Ein weiteres exotisches Atom ist das Myonium. Es ist aus einem positiven Myon als Kern und einem Elektron aufgebaut. Seine Lebensdauer wird durch die mittlere Lebensdauer $2,2\mu\text{s}$ des Myoniums beschränkt. Im Gegensatz zum Positronium findet keine Anihilation statt, da Myon und Elektron fundamental verschieden sind. Das Myonium ist wasserstoffähnlich und hat einen schweren, strukturlosen Kern von etwa 200 Elektronenmassen.. Sein Zerfall

$$\mu^+ \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu$$

ist anisotrop, wobei die Richtung der Positronen parallel zum Spin des Myons steht. Dies ermöglicht die Messung des magnetischen Moments im äußeren Magnetfeld.

Ein weiteres interessantes exotisches Atom ist Antiwasserstoff. Die CPT-Invarianz fordert ein gleiches Spektrum für Wasserstoff und Antiwasserstoff. Da CP verletzt ist, folgt aus der CPT-Invarianz, daß auch T verletzt sein muß. Zur Zeit gibt es dazu ein Projekt am Cern. Dabei soll Antiwasserstoff durch laserinduzierte

Rekombination bei tiefen Temperaturen in einer Penningfalle hergestellt werden.

Kapitel 9

Elektron im Magnetfeld

In diesem Kapitel betrachten wir die Bewegung eines Elektrons im Magnetfeld. Es dient als Vorbereitung für Kapitel 10, in dem wir besprechen wollen, was ein Atom im Magnetfeld macht. Das Elektron im Magnetfeld ist aber auch ein Standardbeispiel für ein quantenmechanisches Zweiniveausystem. Das Zweiniveausystem ist neben dem harmonischen Oszillator eines der wichtigsten Modellsysteme in der Physik überhaupt. Es wird für die Erklärung vieler physikalischer Phänomene verwendet angefangen bei optischen Anregungen von Atomen bis hin zu Neutrinooszillationen in der Teilchenphysik.

Wir leiten zunächst die Grundgleichungen her mit denen ein Elektron im homogenen, stationären Magnetfeld beschrieben werden kann. Ausgangspunkt ist die stationäre PAULI-Gleichung:

$$E\vec{\psi}(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + \frac{e}{m} \vec{S} \cdot \vec{B}(\vec{r}) \right) \vec{\psi}(\vec{r})$$

Für ein homogenes Feld und mit dem Ansatz

$$\vec{\psi}(\vec{r}) = u(\vec{r}) \vec{\phi}$$

ergibt sich:

$$Eu(\vec{r})\vec{\phi} = \left(\frac{1}{2m} \left(\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + \frac{e}{m} \vec{B} \cdot \vec{S} \right) u(\vec{r}) \vec{\phi}$$

Nach Variablenseparation man erhält:

$$\begin{aligned} & \left(E - \underbrace{\frac{1}{u(\vec{r})} \frac{1}{2m} \left(\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 u(\vec{r})}_{:=E_p} \right) \vec{\phi} \\ &= \underbrace{\frac{e}{m} \vec{B} \cdot \vec{S}}_{:=E_s} \vec{\phi} \quad (\text{unabhängig von } r) \end{aligned}$$

Da E_s unabhängig ist von r muss E_p konstant sein. Mit $E = E_p + E_s$ folgt dann

$$E_s \vec{\phi} = \frac{e}{m} \vec{B} \cdot \vec{S} \vec{\phi}$$

$$\frac{1}{2m} \left(\vec{p} + e\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 u(\vec{r}) = E_p u(\vec{r})$$

Die erste Gleichung beschreibt die Spinbewegung und die zweite Gleichung die Bahnbewegung. Im *homogenen* Magnetfeld entkoppeln also Spin und Bahn!

9.1 Landauniveaus

Das Vektorpotential zu einem homogenen Magnetfeld in z -Richtung lautet

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ B_0 x \\ 0 \end{pmatrix}$$

denn dann lautet:

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \partial A_y / \partial x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_0 \end{pmatrix}.$$

Damit gilt:

$$\begin{aligned} E_p u(\vec{r}) &= \frac{1}{2m} \left(p_x^2 + p_z^2 + (p_y + eBx)^2 \right) u(\vec{r}) \\ &= \left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{(eB)^2}{2m} \cdot \underbrace{\left(x + \frac{1}{eB} p_y \right)^2}_{:=Q^2} \right) u(\vec{r}) \end{aligned}$$

Der erste Term kann durch Variablenseparation abgespalten werden. Mit $u(\vec{r}) = u(r) \cdot v(z)$ folgt dann:

$$v(z) = e^{ik_z z}.$$

Für die verbleibende Funktion $u(r)$ gilt:

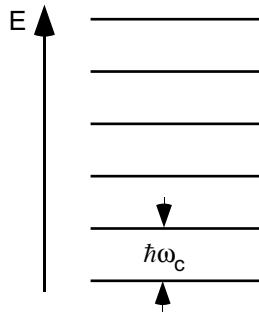
$$\underbrace{(E_p - E_z)}_{E_c} u(r) = \underbrace{\left(\frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 Q^2 \right)}_{\text{harmonischer Oszillator}} u(r)$$

Diese Gleichung scheint die Form für einen harmonischen Oszillator zu haben, wobei der Operator Q die Rolle des Ortsoperators einnimmt. Ein Hamiltonoperator der sich als Summe des Quadrats zweier Operatoren schreiben lässt hat die Lösung des harmonischen Oszillators sofern die Vertauschungsrelation für die

beiden Operatoren die richtige ist. Dies sieht man, wenn man sich den üblichen Lösungsweg mit Hilfe von Aufwärts und Abwärtsoperatoren vergegenwärtigt. Bei dieser Methode geht nur die Vertauschungsrelation zwischen Orts und Impulsoperator ein. Wir müssen also verifizieren, dass die Vertauschungsrelation zwischen p und Q dieselbe ist, wie für p und x :

$$[p_x, Q] = [p_x, x] + [p_x, p_y] \cdot \frac{1}{eB} = [p_x, x]$$

Die Lösungen des harmonischen Oszillators können damit direkt übernommen werden. Man erhält äquidistante Niveaus mit Abstand $\hbar\omega_c$, die sogenannten „Landau-Niveaus“. Die Frequenz $\omega_c = \frac{e}{m}B_0$ wird als Zyklotronfrequenz bezeichnet.



9.2 Halbklassisches Modell

Im klassischen Bild bewegt sich das Elektron auf einer Kreisbahn bei der sich die Zentrifugal- und Lorentzkraft die Waage halten:

$$\underbrace{mr\omega^2}_{\text{Zentrifugalkraft}} = \underbrace{e\vec{v} \times \vec{B}}_{\text{Lorentzkraft}} = eVB_0 = e r \omega B_0$$

Diese Gleichung liefert die klassische Umlauffrequenz.

$$\omega = \frac{e}{m}B_0 = \omega_c$$

Sie ist offensichtlich mit der Zyklotronfrequenz identisch. Quantenmechanisch ist das Elektron eine Welle. Nach einem Umlauf muss die Phase der Wellenfunktion entlang der klassischen Bahn konstruktiv mit sich selber interferieren:

$$\phi = k \cdot \underbrace{2\pi r}_{\text{Umfang}} = n \cdot 2\pi$$

oder

$$k \cdot r = n.$$

Andererseits gilt

$$v = \frac{\hbar k}{m} = \omega_c \cdot r$$

Benutzt man beide Gleichungen um r zu eliminieren so folgt:

$$k \cdot \frac{\hbar k}{m \omega_c} = n,$$

und daraus für die kinetische Energie:

$$E_{\text{kin}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2} n \cdot \hbar \omega_c$$

Es fehlt noch die potentielle Energie. Sie entsteht durch die Ausrichtung des magnetischen Moments der Bahnbewegung im homogenen Magnetfeld. Das magnetische Moment der Bahnbewegung wird analog zum magnetischen Moment einer Leiterschleife berechnet. Bei einer Leiterschleife gilt:

$$\vec{\mu} = I \cdot \vec{A},$$

wobei I den Strom und \vec{A} die vom Leiter umschlossene Fläche bezeichnet. Beim Elektron auf einer Kreisbahn gilt dann:

$$I = \frac{-e}{T} = -e \frac{\omega}{2\pi} = -\frac{e}{2\pi} \cdot \frac{v}{r}$$

Mit $A = \pi r^2$ folgt sofort:

$$\begin{aligned} |\vec{\mu}| &= -\frac{e}{2\pi} \frac{v}{r} \pi r^2 = \frac{e}{2m} m v \cdot r \\ &= \frac{e}{2m} \cdot |\vec{L}| = \frac{e\hbar}{2m} \cdot \underbrace{|\vec{L}|}_{:= \mu_{\text{Bohr}}} \\ \frac{\vec{\mu}}{\mu_{\text{Bohr}}} &= -\frac{\vec{L}}{\hbar} \end{aligned}$$

Der g-Faktor der Bahnbewegung ist also 1. Die potentielle Energie des Elektrons im Magnetfeld ist damit:

$$E_{\text{pot}} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{e}{2m} m v r B_0$$

Zusammen mit der Resonanzbedingung $kr = n$ erhält man:

$$E_{\text{pot}} = \frac{eB_0}{2m} \hbar kr = \frac{eB_0}{2m} \hbar n = \frac{1}{2} \hbar \omega_c n$$

Die Gesamtenergie lautet dann

$$E = E_{\text{pot}} + E_{\text{kin}} = \hbar \omega_c n$$

was mit der quantenmechanischen Rechnung gut übereinstimmt.

$$\det \begin{pmatrix} \hbar\omega_L - 2E & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & -\hbar\omega_L - 2E \end{pmatrix} = (\hbar\omega - 2E)(-\hbar\omega - 2E) - \hbar^2\Omega^2 = 0$$

9.3 Spin im homogenen Magnetfeld

Für den Spin im homogenen Magnetfeld gilt die Gleichung (s.o.)

$$E_s \vec{\phi} = \left(\frac{e}{m} \vec{S} \cdot \vec{B} \right) \vec{\phi} .$$

Mit einem homogenen Feld in z-Richtung

$$\vec{B} = B_0 \vec{e}_z$$

ergibt sich:

$$E_s \vec{\phi} = \left(\frac{e}{m} B_0 S_z \right) \vec{\phi} = \frac{1}{2} \hbar \frac{e}{m} B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \vec{\phi}$$

Die Frequenz

$$\omega_L := g \frac{e}{2m} B_0$$

wird als Larmorfrequenz bezeichnet wobei $g=2$ der g-Faktor des Elektrons ist. Man erhält also zwei Energieniveaus, bzw. zwei Eigenvektoren:

$$\begin{aligned} \vec{\phi}_+ &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & E_+ &= \frac{1}{2} \hbar \omega_L \\ \vec{\phi}_- &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & E_- &= -\frac{1}{2} \hbar \omega_L \end{aligned}$$

Dies ist eines der einfachsten Beispiele für ein Zweiniveau-System. Das System befindet sich entweder im Zustand "Spin up" oder "Spin down". Interessant wird es, wenn wir uns fragen, wie das System auf eine zunächst statische Störung reagiert. Legt man ein zusätzliches Feld in x-Richtung an, so erhält man:

$$E_s \vec{\phi} = \frac{\hbar}{2} \left(\frac{e}{m} B_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \omega_L \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \vec{\phi}$$

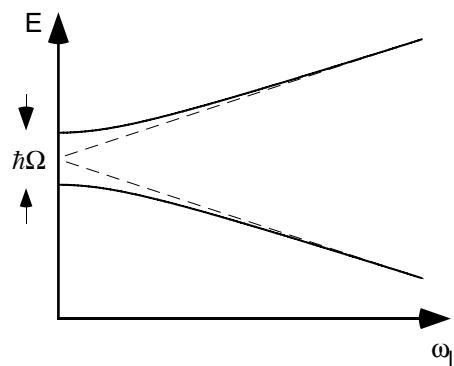
oder

$$\begin{pmatrix} \hbar\omega_L - 2E & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega & -\hbar\omega_L - 2E \end{pmatrix} \vec{\phi} = 0$$

Die charakteristische Gleichung

führt dann zur Energie

$$E_{1,2} = \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{\omega_L^2 + \Omega^2}$$



Die Störung wirkt hauptsächlich am Kreuzungspunkt und hebt dort die Entartung auf. Man spricht von einem "avoided crossing" oder "anticrossing".

Die neuen Eigenzustände des Systems sind Linearkombinationen der ungestörten Zustände:

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}$$

Eingesetzt in obiges Gleichungssystem ergibt folgende Bedingungen:

$$\frac{\alpha_2}{\alpha_1} = \frac{2E_1 - \hbar\omega_L}{\hbar\Omega} = \sqrt{\left(\frac{\omega_L}{\Omega}\right)^2 + 1} - \frac{\omega_L}{\Omega}$$

bzw.

$$\frac{\beta_2}{\beta_1} = \frac{2E_2 - \hbar\omega_L}{\hbar\Omega} = -\sqrt{\left(\frac{\omega_L}{\Omega}\right)^2 + 1} - \frac{\omega_L}{\Omega}$$

Außerdem müssen die Zustände normiert sein:

$$\alpha_1^2 + \alpha_2^2 = 1 = \beta_1^2 + \beta_2^2 .$$

Die neuen Vektoren stehen senkrecht aufeinander. Dazu müssen wir verifizieren dass das Skalarprodukt der beiden Vektoren verschwindet:

$$\alpha_1\beta_1 + \alpha_2\beta_2 = 0$$

$$\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \frac{\beta_1}{\beta_2} = -1$$

$$\theta_\alpha \in [0, 45^\circ].$$

$$\left(\sqrt{\left(\frac{\omega_L}{\Omega} \right)^2 + 1} + \frac{\omega_L}{\Omega} \right) \cdot \left(\sqrt{\left(\frac{\omega_L}{\Omega} \right)^2 + 1} - \frac{\omega_L}{\Omega} \right) = 1$$

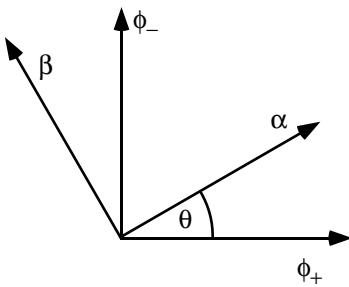
$$\left(\sqrt{\left(\frac{\omega_L}{\Omega} \right)^2 + 1} \right)^2 - \left(\frac{\omega_L}{\Omega} \right)^2 = 1$$

$$\left(\frac{\omega_L}{\Omega} \right)^2 + 1 - \left(\frac{\omega_L}{\Omega} \right)^2 = 1$$

$$1 = 1$$

Die beiden Eigenzustände des gestörten Hamiltons stehen also immer noch senkrecht aufeinander. Die gestörte Basis ist damit relativ zur ungestörten verdreht. und wir können schreiben:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \cos \theta, & \alpha_2 &= \sin \theta \\ \beta_1 &= -\sin \theta, & \beta_2 &= \cos \theta \end{aligned}$$



Der Drehwinkel heißt oft auch Mischungswinkel. Man kann ihn einfach berechnen:

$$\tan \theta = \frac{\sin \theta}{\cos \theta} = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} = \sqrt{\left(\frac{\omega_L}{\Omega} \right)^2 + 1} - \frac{\omega_L}{\Omega}.$$

Mit Hilfe des Zusammenhangs

$$\tan(2\theta) = \frac{2 \tan(\theta)}{1 - \tan^2(\theta)}$$

erhält man

$$\tan(2\theta) = \frac{\Omega}{\omega_L}.$$

Dies ist eine sehr wichtige Formel, da sie den Mischungswinkel eines Zweiniveausystems auf einfache Weise mit den beiden einzigen Parametern des Hamiltonoperators verknüpft. Der Wertebereich des Mischungswinkels ist offenbar der halbe Definitionsbereich der Tangensfunktion:

In welche Richtung zeigt der Spin im Ortsraum?
Dazu berechnen wir den Erwartungswert von $\langle \vec{S} \rangle$ für den Zustand α :

$$\frac{2}{\hbar} \langle S_z \rangle = \vec{\alpha} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \vec{\alpha} = \cos 2\theta$$

$$\frac{2}{\hbar} \langle S_x \rangle = \vec{\alpha} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \vec{\alpha} = \sin 2\theta$$

$$\frac{2}{\hbar} \langle S_y \rangle = \vec{\alpha} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \vec{\alpha} = 0$$

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \sin 2\theta \\ 0 \\ \cos 2\theta \end{pmatrix}$$

Der Spin dreht sich durch die Störung in der x-z-Ebene um den doppelten Mischungswinkel. Ist das Feld in x-Richtung viel größer als das ursprüngliche Feld in z-Richtung geht der Mischungswinkel gegen 45 Grad und der Erwartungswert des Spins ist nur für S_x von Null verschieden. Der Spin steht parallel zur x-Achse.

Für den Zustand β sieht der Spin bis auf das Vorzeichen genauso aus:

$$\langle \vec{S} \rangle = -\frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \sin 2\theta \\ 0 \\ \cos 2\theta \end{pmatrix}$$

Der Spin im Zustand β ist relativ zum Zustand α am Ursprung gespiegelt. Im Ortsraum zeigt der Spin in den Zuständen α und β also immer noch in entgegengesetzte Richtungen.

Betrachten wir jetzt noch die Situation in der wir das x-Feld plötzlich ausschalten und nur noch das z-Feld beibehalten. Wir erhalten dann wieder den ursprünglichen diagonalen Hamilton mit den Eigenzuständen

$$\phi_+(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i \frac{\omega_L}{2} t}$$

und

$$\phi_-(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+i \frac{\omega_L}{2} t}.$$

Der aktuelle Zustand zum Zeitpunkt des Abschaltens ist aber eine Linearkombination dieser beiden *nicht entarteten* Eigenzuständen. Diese

Zustände sind daher auch keine Eigenzustände zum neuen Hamilton und damit auch nicht zeitlich konstant.

$$\alpha(t) = \begin{pmatrix} \cos \theta \cdot e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} \\ \sin \theta \cdot e^{+i\frac{\omega_L}{2}t} \end{pmatrix}$$

$$\beta(t) = \begin{pmatrix} -\sin \theta \cdot e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} \\ \cos \theta \cdot e^{+i\frac{\omega_L}{2}t} \end{pmatrix}$$

Berechnen wir für diese Zustände den Erwartungswert für den Spin erhalten wir für den Zustand α :

$$\frac{2}{\hbar} \langle S_z \rangle = \vec{\alpha} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \vec{\alpha} = \cos 2\theta$$

$$\frac{2}{\hbar} \langle S_x \rangle = \vec{\alpha} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \vec{\alpha} = \sin 2\theta \cdot \cos(\omega_L t)$$

$$\frac{2}{\hbar} \langle S_y \rangle = \vec{\alpha} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \vec{\alpha} = \sin 2\theta \cdot \sin(\omega_L t)$$

oder

$$\langle \vec{S} \rangle_{\alpha} = \frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \sin 2\theta \cos(\omega_L t) \\ \sin 2\theta \sin(\omega_L t) \\ \cos 2\theta \end{pmatrix}.$$

Für den Zustand β geht die Rechnung analog mit dem Resultat

$$\langle \vec{S} \rangle_{\beta} = -\frac{\hbar}{2} \cdot \begin{pmatrix} \sin 2\theta \cos(\omega_L t) \\ \sin 2\theta \sin(\omega_L t) \\ \cos 2\theta \end{pmatrix}.$$

Der Spin rotiert also in der x-y-Ebene mit der Larmorfrequenz und ist für die beiden Zustände nach wie vor entgegengesetzt orientiert.

9.4 Zeitlich variables Störfeld

Bisher haben wir nur die Lösungen für ein statisches homogenes Feld betrachtet. Betrachten wir zunächst eine sehr langsame zeitabhängige Störung, z.B. das langsame Drehen der Magnetfeldrichtung aus der z-Achse in die x-Achse. Erfolgt diese Drehung genügend langsam, so ist die adiabatische Näherung gültig. Das System bleibt die ganze Zeit in einem Eigenzustand des momentanen Hamilton. Mit anderen Worten man erhält die Lösung zu einem Zeitpunkt, indem man den zu diesem Zeitpunkt gültigen

Hamilton als statisch annimmt und die Lösung berechnet. Dies betrachten wir jetzt etwas genauer. Ausgangspunkt ist die Schrödinger-Gleichung.

$$i\hbar \frac{d\vec{\varphi}}{dt} = H(t) \cdot \vec{\varphi}$$

In unserem Beispiel hat er die Form

$$H = \frac{e}{m} (S_x B_x + S_z B_z)$$

$$= \frac{e}{m} B_0 (S_x \sin \delta(t) + S_z \cos \delta(t))$$

$$= \omega_L (S_x \sin \delta(t) + S_z \cos \delta(t))$$

Die Zeitabhängigkeit steckt im Winkel $\delta(t)$ um den wir das Magnetfeld langsam verdrehen. Wir machen jetzt folgenden Lösungsansatz:

$$\vec{\varphi}(t) = e^{-i\omega t} \cdot \vec{u}(t)$$

und setzen ihn in die Schrödinger-Gleichung ein:

$$i\hbar \dot{\vec{\varphi}}(t) = \omega_L (S_x \sin \delta(t) + S_z \cos \delta(t)) \vec{\varphi}(t)$$

$$= i\hbar (-i\omega) e^{-i\omega t} \cdot \vec{u}(t) + i\hbar e^{-i\omega t} \cdot \dot{\vec{u}}(t)$$

$$= H(t) \cdot e^{-i\omega t} \cdot \vec{u}(t)$$

oder

$$\hbar \omega \vec{u}(t) + i\hbar \dot{\vec{u}}(t) = H(t) \cdot \vec{u}(t).$$

Die Näherung besteht jetzt darin, den zweiten Term gegenüber dem ersten zu vernachlässigen

$$\dot{\vec{u}}(t) \ll -i\omega \cdot \vec{u}(t).$$

Das kann man machen, wenn man mit der Frequenz ω im Ansatz bereits den Großteil der Zeitabhängigkeit erfasst hat und sich der Vektor \vec{u} nur noch langsam ändert. Die Gleichung reduziert sich dann auf die stationäre Schrödinger-Gleichung für den Vektor \vec{u} .

$$H(t) \cdot \vec{u}(t) = \hbar \omega \cdot \vec{u}(t)$$

oder

$$\omega_L (S_x \sin \delta(t) + S_z \cos \delta(t)) \cdot \vec{u}(t) = \hbar \omega \cdot \vec{u}(t)$$

$$\hbar \omega_L \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \delta(t) & \sin \delta(t) \\ \sin \delta(t) & -\cos \delta(t) \end{pmatrix} \cdot \vec{u}(t) = \hbar \omega \cdot \vec{u}(t)$$

$$\begin{pmatrix} \cos \delta(t) - \frac{2\omega}{\omega_L} & \sin \delta(t) \\ \sin \delta(t) & -\cos \delta(t) - \frac{2\omega}{\omega_L} \end{pmatrix} \cdot \vec{u}(t) = 0$$

Die Determinante der Matrix ist Null, wenn $\omega = \pm \frac{\omega_L}{2}$. Die verbleibende Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} \cos \delta(t) - 1 & \sin \delta(t) \\ \sin \delta(t) & -\cos \delta(t) - 1 \end{pmatrix} \cdot \vec{u}(t) = 0$$

wird wie oben durch den Vektor

$$\vec{u}(t) = \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix}$$

und

$$\vec{u}(t) = \begin{pmatrix} -\sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}$$

gelöst wobei $\delta=2\theta$. In unserem Beispiel gilt also die adiabatische Näherung, wenn die Lamorfrequenz deutlich größer als die Änderung von u ist. Die Folge der stationären Lösungen zu den Zeiten t beschreibt dann die Lösung der zeitabhängigen Entwicklung. Der Spin folgt in seiner Orientierung der Richtung des Feldes. Eine Drehung im Ortraum entspricht dabei einer Drehung im Spinraum um den halben Winkel. Eine vollständige Drehung im Ortsraum führt zu einer halben Drehung im Spinraum oder einem Vorzeichenwechsel. Der Zustand ist also erst symmetrisch unter einer Drehung von 4π ! Bei der Bildung des Betragquadrats hebt sich der Vorzeichenwechsel wieder heraus, so dass die Observable wieder symmetrisch ist unter 2π . Bei Interferenzexperimenten kann das Vorzeichen des Zustands jedoch durchaus eine Rolle spielen. Insbesondere gibt es in der Quanteninformationsverarbeitung ein Vorschlag zur Erzeugung eines Quantengatters, der gerade auf diesem Vorzeichenwechsel basiert.

Als zweites sehr wichtiges Beispiel betrachten wir eine harmonische zeitabhängige Störung. Dazu legen wir ein zusätzliches Wechselfeld in x-Richtung an.:

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} B_x \cos \omega t \\ 0 \\ B_z \end{pmatrix}.$$

Der Hamilton lautet jetzt

$$H(t) = \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \omega_L \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2} \hbar \Omega \cos(\omega t) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}}_{H_I(t)}.$$

Der Hamiltonoperator beschreibt jetzt kein abgeschlossenes System mehr. Die Energie ist keine Erhaltungsgröße sondern zeitabhängig.

Zur Lösung dieses Problems macht man den Ansatz:

$$\vec{\psi}(t) = c_1(t) \vec{\phi}_+(t) + c_2 \vec{\phi}_-(t)$$

Wir lassen also zu, dass sich die Linearkombination der ungestörten Zustände in der Zeit ändert. Die Wahrscheinlichkeit, ob Spin up oder Spin down vorkommt ergibt sich aus dem Betragsquadrat $c_i c_i^*$. Mit diesem Ansatz erhält man:

$$\begin{aligned} H\vec{\psi}(t) &= \frac{\hbar}{2} \Omega \cos \omega t \left(c_1(t) e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + c_2(t) e^{i\frac{\omega_L}{2}t} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \\ &\quad + \frac{\hbar}{2} \omega_L \left(c_1(t) e^{-i\frac{\omega_L}{2}t} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. + c_2(t) e^{i\frac{\omega_L}{2}t} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right) \\ &= i\hbar \frac{d\vec{\psi}}{dt} \end{aligned}$$

Was dann zu den folgenden Differentialgleichungen führt:

$$\begin{aligned} i\dot{c}_1 &= \frac{\hbar}{2} \Omega \cos \omega t e^{i\omega_L t} \cdot c_2 \\ i\dot{c}_2 &= \frac{\hbar}{2} \Omega \cos \omega t e^{-i\omega_L t} \cdot c_1 \end{aligned}$$

Diese Gleichungen sind nicht lösbar. Man kann aber zur Dichtematrix übergehen und eine sehr schwache Näherung machen mit der sich dann eine analytische Lösung finden lässt. Wir benutzen die Schreibweise als Dichtematrix:

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{pmatrix}$$

Die Differentialgleichung für die Elemente dieser Matrix lauten demnach:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{11} &= -\dot{\rho}_{22} = i\Omega \cos \omega t (e^{i\omega_L t} \rho_{12} - e^{-i\omega_L t} \rho_{21}) \\ \dot{\rho}_{12} &= -\dot{\rho}_{21}^* = i\Omega \cos \omega t \cdot e^{-i\omega_L t} (\rho_{11} - \rho_{22})\end{aligned}$$

Jetzt führen wir die „rotating wave approximation“ durch. Wir betrachten dazu die Terme in der Gleichung mit der Form:

$$\begin{aligned}\cos \omega t \cdot e^{\pm i\omega_L t} &= \frac{1}{2} (e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t}) e^{\pm i\omega_L t} \\ &= \frac{1}{2} [e^{i(\omega \pm \omega_L)t} + e^{-i(\omega \mp \omega_L)t}]\end{aligned}$$

und vernachlässigen die schnell oszillierenden Terme, da sie sich zeitlich herausmitteln. Dies betrifft die Terme mit $+\omega$ denn in der Nähe der Resonanz ist $\omega - \omega_L \sim 0$. Man erhält dann die sogenannten BLOCH-Gleichungen:

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{11} &= -\dot{\rho}_{22} = i\Omega (e^{-i(\omega_L - \omega)t} \rho_{12} + e^{i(\omega_L - \omega)t} \rho_{21}) \\ \dot{\rho}_{12} &= \dot{\rho}_{21}^* = i\Omega e^{+i(\omega_L - \omega)t} (\rho_{11} - \rho_{22})\end{aligned}$$

Die Lösung für den Anfangswert $\rho_{11}(t=0) = 1$ ist für die Besetzungen vergleichsweise übersichtlich:

$$\rho_{22}(t) = \left(\frac{\Omega}{\tilde{\Omega}}\right)^2 \sin^2\left(\frac{1}{2}\tilde{\Omega}t\right)$$

$$\rho_{11}(t) = 1 - \rho_{22}(t).$$

Dabei ist

$$\tilde{\Omega} := \sqrt{\delta^2 + \Omega^2}$$

mit

$$\delta := \omega_L - \omega$$

und

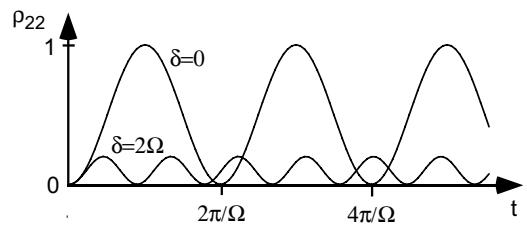
$$\Omega = \frac{e}{m} B_0$$

die RABI-Frequenz. Die Kohärenzen sehen etwas komplizierter aus.

$$\rho_{12}(t) = \rho_{21}^*(t)$$

$$\begin{aligned}\rho_{12}(t) &= \frac{\Omega}{\tilde{\Omega}} \sin\left(\frac{1}{2}\tilde{\Omega}t\right) e^{-i\delta t} \times \\ &\quad \left\{ \cos\left(\frac{1}{2}\tilde{\Omega}t\right) - \frac{\delta}{\tilde{\Omega}} \sin\left(\frac{1}{2}\tilde{\Omega}t\right) \right\}\end{aligned}$$

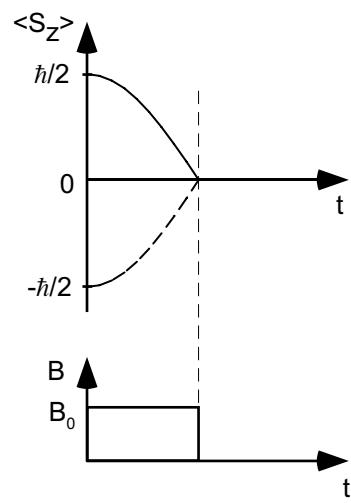
Entscheidend ist die Formel für ρ_{22} also die Besetzungswahrscheinlichkeit für den angeregten Zustand.



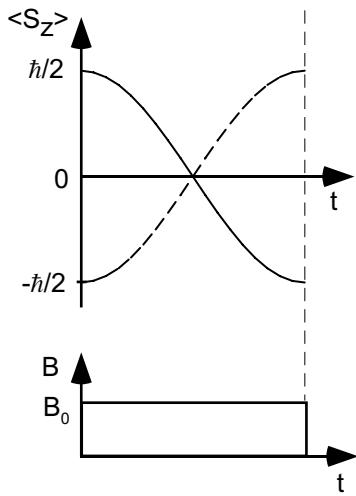
In Resonanz variiert die Besetzung zwischen null und eins mit der Rabi-Frequenz. Bei nicht-verschwindender Verstimmung erhöht sich die Schwingungsfrequenz und die Amplitude verringert sich. Man kann also den angeregten Zustand nicht mehr vollständig besetzen.

9.5 π-Pulse

Die harmonische Entwicklung der Spinorientierung lässt sich verwenden um Zweiniveausysteme gezielt zu manipulieren. Wir betrachten resonante Anregung ($\delta=0$) und variieren die Zeit in der die Störung eingeschaltet ist bei fester Rabi-Frequenz d.h. Störungssstärke. Man kann solche Störpulse nach ihrer Wirkung charakterisieren: Ein Puls, der die z-Komponente gerade zum Verschwinden bringt, den Spin also in die x-y-Ebene kippt heißt $\pi/2$ -Puls. Seine Länge beträgt gerade $\pi/2 * 1/\Omega$. Nach dieser Zeit hat sich der Mischungswinkel von 0 Grad auf 45 Grad erhöht. Die Eigenzustände sind dann gerade die symmetrische und antisymmetrische Linearkombination der Anfangszustände.

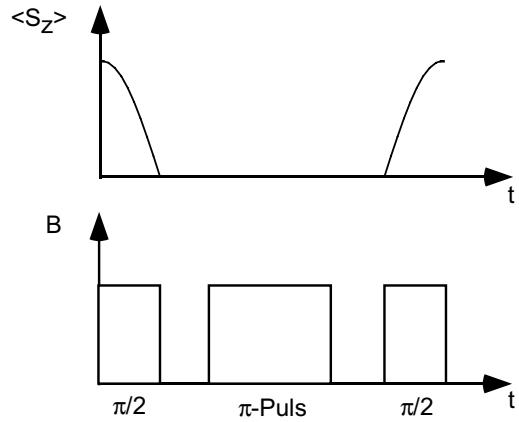


Auf ähnliche Weise transferiert ein π -Puls das System vom "spin-up"-Zustand in den "spin-down"-Zustand oder umgekehrt. Der Mischungswinkel wächst von 0 Grad auf 45 Grad und geht dann zurück auf 0 Grad.

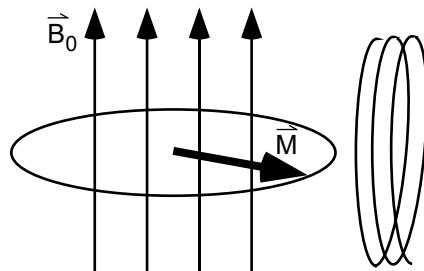


Bei Anwendung von solchen Pulsen kann man Spinecho beobachten. Diese Phänomene tritt in Ensembles mit vielen Spin-1/2-Systemen auf. Die Spins sind anfänglich alle in Richtung eines möglichst homogenen Magnetfeldes orientiert und werden dann einem $\pi/2$ Puls ausgesetzt. Dadurch kippen die Spins synchron in die x-y-Ebene, wo sie nach dem Puls um das homogene Magnetfeld präzidieren. Aufgrund von nicht vermeidbaren Restinhomogenitäten des Magnetfeldes weichen die Präzessionsfrequenzen leicht voneinander ab. Die einzelnen Spins laufen in ihrer Orientierung auseinander und verteilen sich in der x-y-Ebene. Der Gesamtspin und das damit verbundene magnetische Moment wird im Mittel verschwinden.

Wendet man jetzt einen π -Puls an, werden alle Spins am Ursprung gespiegelt. Der Vorsprung, den die Spins aufgrund ihrer höheren Frequenz erreicht haben, ändert sein Vorzeichen und wird zum "Nachsprung". Genauso wird das Nachhinken der langsamsten Spins in einen Vorsprung verwandelt. Die Spins rotieren jetzt mit unveränderter Geschwindigkeit weiter. Die schnellen holen wieder auf und die langsamsten brauchen ihren Vorsprung auf, bis alle Spins wieder in die gleiche Richtung zeigen. Wendet man in diesem Moment einen zweiten $\pi/2$ Puls an, so klappen alle Spins aus der x-y-Ebene wieder zurück in die anfängliche Richtung. Es entsteht wieder ein Dipolmoment, das man messen kann. Das Wiederaufleben des magnetischen Moments nennt man Spinecho.

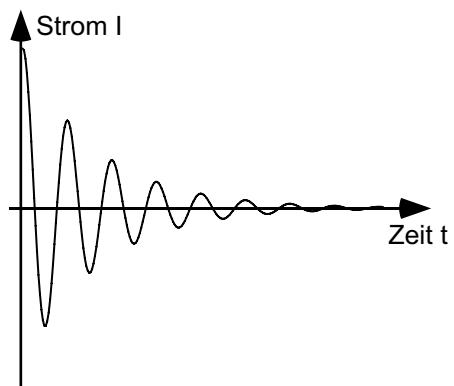


Man kann das Abklingen des magnetischen Moments auch direkt beobachten. Unmittelbar nach dem ersten $\pi/2$ -Puls dauert es eine gewisse Zeit bis die Spins sich über die x-y-Ebene verteilt haben. Solange existiert noch ein mittleres Dipolmoment, das sich allerdings mit der Larmorfrequenz in der x-y-Ebene dreht. Das drehende Dipolmoment erzeugt ein Magnetfeld, das sich ebenfalls in der x-y-Ebene dreht und in einer "pick up" Spule einen Strom induziert, den man messen kann.



pick up Spule

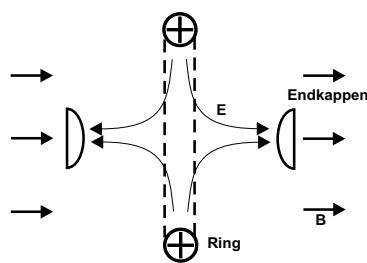
Man erhält also ein oszillierendes Signal, das allerdings in dem Maße abklingt, wie die Spins auseinanderlaufen. Diese "Dekohärenz" bestimmt die Einhüllende des Signals und kann so direkt beobachtet werden. Die Zeit mit der das Signal zerfällt heißt transversale Zerfallszeit. Der Vorgang selber wird freier Induktionszerfall genannt.



π -Pulse und freier Induktionszerfall finden intensive Anwendung in der Kernspintomographie. Es werden hierbei natürlich keine Elektronenspins sondern die Spins der Atomkerne angeregt. Aus der Resonanzfrequenz kann man auf die Larmorfrequenz und damit auf das magnetische Moment der Kerne schließen. Die Larmorfrequenz hängt dabei natürlich auch vom magnetischen Feld am Ort des Kerns ab. Das muss nicht immer mit dem von außen angelegten Feld identisch sein. Die Nachbarschaft anderer Atome und der dazugehörigen Elektronen können das äußere Magnetfeld abschirmen und die Larmorfrequenz verschieben. Dies nennt man die "chemische Verschiebung". Sie bietet die Möglichkeit etwas über das Umfeld des Kerns zu erfahren. Bei chemisch biologischen Vorgängen kann sich dieses Umfeld verändern, was man in einer veränderten Larmorfrequenz beobachten kann. Eine ganz aktuelle Anwendung der Kernspinresonanz ist die Konstruktion sogenannter Quantengatter zur Quanteninformationsverarbeitung (Quantencomputer). Mehr dazu später. Siehe auch <http://www.org.chemie.tu-muenchen.de/glaser/qcomp.html>.

9.6 Penning-Falle und g-2-Messung

Elektronen können in einer Penning-Falle fast beliebig lange gespeichert werden. Der radiale Einschluß erfolgt über das Magnetfeld, der axiale Einschluß durch die elektrostatische Abstoßung an den negativ geladenen Endkappen.



Das Elektron befindet sich in einem Feld von etwa 1T (zum Vergleich: Erdmagnetfeld 1/2 Gauß) und hat hier dann eine Zyklotronfrequenz von $\omega_c = 2\pi \cdot 27$ GHz. Mit Hilfe der Resonanzbedingung (DEBROGLIE-Wellenlänge)

$$kr = n$$

und der Tangentialgeschwindigkeit

$$\frac{\hbar k}{m} = \omega_c$$

erhält man einen Bahnradius von

$$r = \sqrt{n \cdot \frac{\hbar}{eB}} = \sqrt{n} \cdot 24 \text{ nm}.$$

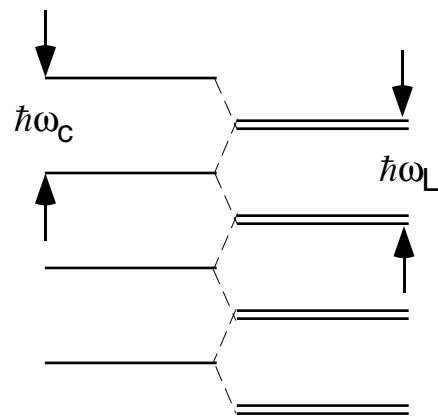
Für den Grundzustand (n=1) sind das etwa 25nm oder 500 Wasserstoffradien. Die Energie der Landau niveaus beträgt

$$E = n\hbar\omega_c,$$

die der Spinniveaus

$$E' = n'\hbar\omega_L.$$

Für einen g-Faktor von exakt $g = 2$ ist $\omega_c = \omega_L$ und die durch die Spinenergie aufgespaltenen Niveaus sind entartet.



Landau-Niveaus Spin-Niveaus

Durch Radiofrequenzmessungen kann man also eine mögliche Abweichung von $g=2$ sehr genau bestimmen. Das Experiment ergibt:

$$\frac{a}{2} := \frac{g-2}{2} = 0.0011596521884$$

mit einer Meßgenauigkeit von

$$\sigma = \frac{\Delta a}{a} \approx 10^{-9}.$$

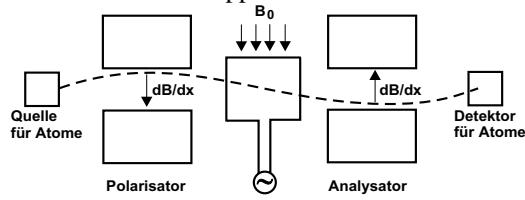
Die Differenz zwischen dem theoretischen und dem experimentellen Wert beträgt:

$$a_{\text{theoretisch}} - a_{\text{experimentell}} = -2\sigma,$$

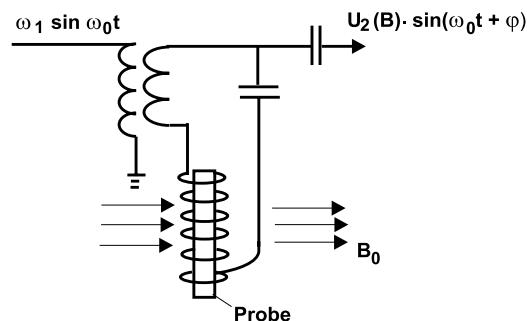
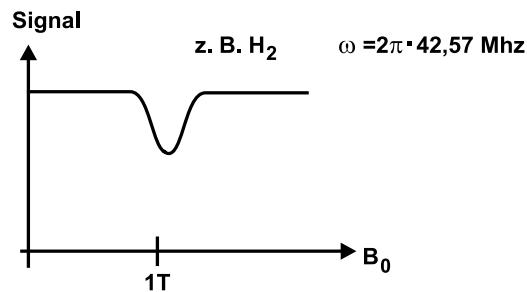
die Theorie wird also weitgehend bestätigt mit einer fast signifikanten bisher ungeklärten Abweichung.

9.7 Kernspin-Experimente

Die Rabi-Apparatur zur Messung des magnetischen Kernmoments ist eine Weiterentwicklung des Stern-Gerlach-Apparats.



Eine genauere Beschreibung wird nachgeliefert oder findet sich im Skript zur Vorlesung ExpIII. Kernspins kann man auch mit Hilfe von Kernspinresonanz nachweisen. Näheres im Skript zur ExpIII.



Kapitel 10

Atome im statischen Feld

10.1 Zeeman und Paschen-Back-Effekt

Beim sogenannten normalen ZEEMAN-Effekt wird der Spin vernachlässigt. Den Hamilton für ein gebundenes Elektron mit äußerem homogenen Magnetfeld erhält man wiederum durch Erweitern des Impulses um das Vektorpotential.

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + V$$

Bei einem homogenen B -Feld in z -Richtung lautet das Vektorpotential:

$$\vec{A} = \frac{B_z}{2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$$

und man erhält

$$H = \frac{p^2}{2m} + V + B_z \frac{e}{2m} \cdot \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B_z^2}{8m} (x^2 + y^2).$$

Der letzte Term heißt diamagnetischer Term. Er ist sehr klein und spielt erst bei höchsten Magnetfeldern im Bereich von mehreren Tesla eine Rolle. Der zweitletzte Term ist der paramagnetische Term. Er ist uns bereits im Zusammenhang mit den Landau-Niveaus des freien Elektrons begegnet und kann auf den Drehimpulsoperator reduziert werden:

$$\begin{aligned} & B_z \frac{e}{2m} \cdot \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \\ &= B_z \frac{e}{2m} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ &= B_z \frac{e}{2m} L_z \\ &= \frac{\mu_{\text{Bohr}}}{\hbar} B_z L_z \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{2} \omega_L L_z.$$

Der Hamilton für das Elektron eines wasserstoffähnlichen Atoms setzt sich damit aus zwei Teilen zusammen

$$H = H_0 + H_B = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{H_0} + V + \underbrace{\frac{1}{2} \omega_L L_z}_{H_B}$$

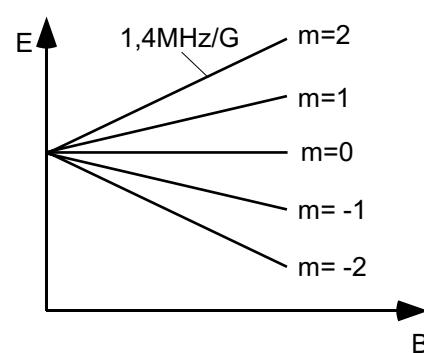
Die Lösungen von H_0 bei rotationssymmetrischen Potenzial sind die Kugelflächenfunktionen. In dieser Basis ist aber auch H_B diagonal, d.h.

$$L_z \cdot Y(\theta, \phi) = m_l \hbar \cdot Y(\theta, \phi)$$

Die Energiekorrekturen aufgrund des äußeren Magnetfeldes sind dann einfach:

$$E_m = \frac{1}{2} \hbar \omega_L m_l = m_l \cdot \mu_{\text{Bohr}} \cdot B_z$$

Die Energie steigt mit dem Magnetfeld linear an. Die Steigung ist durch die magnetische Quantenzahl m gegeben. Für einen Zustand mit $l=2$ erhält man folgendes "Zeeman-Diagramm":



Beim anomalen ZEEMAN-Effekt wird der Spin mit berücksichtigt und wir starten mit der Pauli-Gleichung.

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}_0,$$

Wir zerlegen das Magnetfeld jetzt in ein externes und eine Hüllenfeld:

$$\vec{B}_o = \vec{B}_z + \vec{B}_{\text{H\"ulle}}$$

Analog zur Argumentation bei der Diskussion der Feinstruktur erhält man:

$$H = \underbrace{\frac{e}{2m}(L_z + 2S_z) \cdot B_z}_{H_{\text{mag}}} + \underbrace{A_{\text{FS}} \vec{L} \cdot \vec{S}}_{H_{\text{FS}}}$$

Zur Lösung dieses Hamiltons ist es wieder geschickt, den Operator $\vec{L} \cdot \vec{S}$ umzuformen:

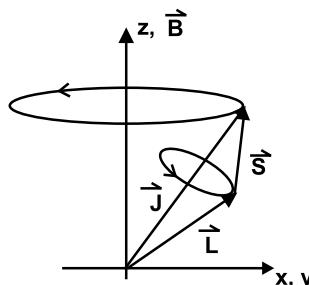
$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2} \left(\underbrace{(\vec{L} + \vec{S})^2}_{J^2} - \vec{L}^2 - \vec{S}^2 \right)$$

Die Operatoren J^2 , J , S^2 , L^2 kommutieren untereinander, jedoch nicht mit dem Operator $(L_z + 2S_z)$. Daran ist der anomale g-Faktor des Elektronenspins schuld. Bevor wir diese Problem ausführlicher besprechen, wollen wir die Physik etwas diskutieren und eine anschauliche Ableitung der zu erwartenden Energiekorrekturen geben. Zunächst betrachten wir Grenzfälle.

Im ZEEMAN-Bereich, für kleine Magnetfelder, ist die Spin-Bahn-Kopplung groß gegenüber der Energie im Magnetfeld.

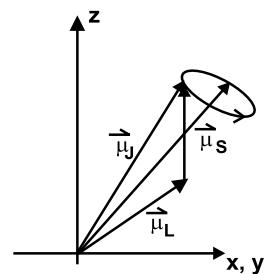
$$H_{\text{mag}} < H_{\text{FS}}$$

Es ergibt sich folgendes Bild:



\vec{S} präzidiert schnell im von \vec{L} erzeugten Magnetfeld. Der über die Präzession gemittelte \vec{J} -Vektor präzidiert langsam im äußeren Magnetfeld. Eine sinnvolle Basis ist somit J^2 , \vec{J} , S^2 und L^2 , der Operator $(L_z + 2S_z)$ ist die Störung. Für eine quantitative Beschreibung benötigt

tigen wir das mit \vec{J} verbundene magnetische Moment.



Das gesamte magnetische Moment

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{\mu_{\text{Bohr}}}{\hbar} (2\vec{S} + \vec{L}) = -\frac{\mu_{\text{Bohr}}}{\hbar} (\vec{S} + \vec{J})$$

rotiert um die Richtung von J . Das mittlere Moment ist also die Projektion des Moments auf die Richtung von J .

$$\left| \langle \vec{\mu}_J \rangle \right| = \vec{\mu}_J \cdot \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|}$$

Das gemittelte Moment ergibt sich somit zu:

$$\langle \vec{\mu}_z \rangle = \left| \langle \vec{\mu}_J \rangle \right| \frac{\vec{J}}{|\vec{J}|}.$$

Nun können wir den Hamilton für eine homogenes Magnetfeld ausrechnen.

$$H_{\text{mag}} = -\langle \vec{\mu}_J \rangle \cdot \vec{B} = \frac{\mu_{\text{Bohr}}}{\hbar} \frac{(\vec{S} + \vec{J}) \cdot \vec{J} (\vec{J} \cdot \vec{B})}{\vec{J}^2}$$

Mit

$$\vec{B} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B \end{pmatrix}$$

erhält man

$$\vec{J} \cdot \vec{B} = J_z B$$

und:

$$H_{\text{mag}} = \frac{\mu_{\text{Bohr}} B}{\hbar} J_z \frac{\vec{J}^2 + \frac{1}{2}(\vec{J}^2 + \vec{S}^2 - \vec{L}^2)}{\vec{J}^2}.$$

In der Basis J^2, J_z, S^2, L^2 ist H_{mag} diagonal und man erhält:

$$E_{\text{mag}} = \mu_{\text{Bohr}} B \cdot m_j$$

$$\left(1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - I(I+1)}{2j(j+1)} \right)$$

Landescher g-Faktor

Im PASCHEN-BACK-Bereich, also bei starkem äußerem Feld,

$$H_{\text{mag}} > H_{\text{FS}},$$

wird H_{FS} komplett vernachlässigt und man verwendet die Basis L_z, L^2, S_z, S^2 :

$$E = \frac{e\hbar}{2m} B_z (m_l + 2m_s).$$

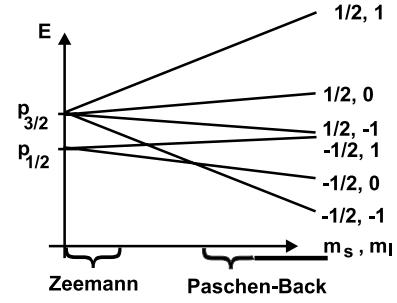
Betrachten wir als konkretes Beispiel den Fall $l=1$ und $s=1/2$. In der Zeeman Basis haben wir dann die Zustände

$$P_{\frac{1}{2}} : m_j = \pm \frac{1}{2}, \quad P_{\frac{3}{2}} : m_j = -\frac{3}{2}, \dots, \frac{3}{2}.$$

In der Paschen-Back-Basis werden die Zustände mit $|m_l, m_s\rangle$ bezeichnet. Also

$$\left| -1, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| 0, -\frac{1}{2} \right\rangle, \left| 1, -\frac{1}{2} \right\rangle,$$

$$\left| -1, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| 0, \frac{1}{2} \right\rangle, \left| 1, \frac{1}{2} \right\rangle$$



10.2 Hyperfeinstruktur des Wasserstoff-Grundzustands

Die Berechnung der exakten Lösung für beliebige Magnetfelder betrachten wir jetzt am Beispiel des Wasserstoffgrundzustands. Der Hamilton lautet:

$$H = \mu_{\text{Bohr}} \frac{2}{\hbar} \vec{S} \cdot \vec{B} + \mu_{\text{K}} g \frac{1}{\hbar} \vec{I} \cdot \vec{B} + A_{\text{HFS}} \frac{1}{\hbar^2} \vec{S} \cdot \vec{I}.$$

den zweiten Term können wir in guter Näherung vernachlässigen, da das Kernmagneteton sehr viel kleiner ist als das Bohrsche Magneteton. Es bleibt also der Hamilton

$$H = \omega_L S_z + A_{\text{HFS}} \frac{1}{\hbar^2} \vec{S} \cdot \vec{I}$$

Wir schreiben den Hamilton in Matrizenform im Produktraum von \vec{S} und \vec{I} . Zunächst berechnen wir:

$$\begin{aligned} \vec{S} \cdot \vec{I} &= S_x \otimes I_x + S_y \otimes I_y + S_z \otimes I_z \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad + \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Zusammen mit

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

lautet der Hamilton dann

$$H = \begin{pmatrix} a+b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a-b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -a-b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -a+b \end{pmatrix} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2b & 0 \\ 0 & 2b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\text{diagonal}}$$

wobei $a = \frac{1}{2}\hbar\omega_L$ und $b = \frac{1}{4}A_{\text{HFS}}$ ist. Der xy -Anteil von $\vec{S} \cdot \vec{L}$ ist nichtdiagonal und mischt die beiden mittleren Zustände \vec{e}_2 und \vec{e}_3 .

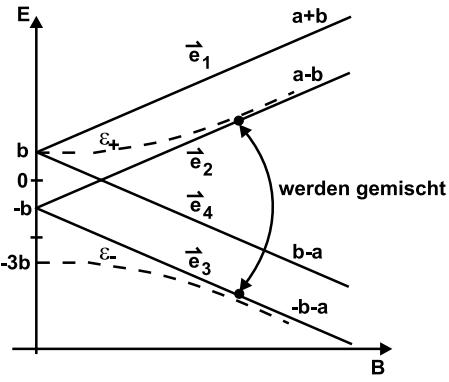
Die Energie dieser gemischten Zustände erhält man durch Diagonalisieren des mittleren Teils des Hamiltons. Mit

$$\begin{pmatrix} a-b & 2b \\ 2b & -a-b \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \phi_2 \\ \phi_3 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow (a-b-\varepsilon)(-a-b-\varepsilon) - 4b^2 = 0$$

$$\Rightarrow \varepsilon_{\pm} = -b \pm \sqrt{a^2 + 4b^2}$$

Für $a = 0 \Rightarrow \varepsilon_+ = +b \quad \varepsilon_- = -3b$ und für $a \rightarrow \infty \Rightarrow \varepsilon_+ = a-b \quad \varepsilon_- = -a-b$. Man erhält also:



Wir können zumindest die Lösungsstruktur für den allgemeineren Fall behandeln in dem ein Spin an einen Bahndrehimpuls koppelt. Das folgende ist etwas formal und mehr ein Hinweis für Interessierte. Wir betrachten den Hamilton:

$$H = \frac{e}{2m} B_z (L_z + 2S_z) + A_{\text{FS}} \vec{S} \cdot \vec{L}$$

In der Basis von $L_z \otimes S_z$ ist der erste Teil diagonal. Wie sieht es mit $\vec{S} \cdot \vec{L}$ aus?

$$\vec{S} \cdot \vec{L} = S_x \otimes L_x + S_y \otimes L_y + \underbrace{S_z \otimes L_z}_{\text{diagonal}}$$

Die Struktur des nichtdiagonalen Anteils sieht man, wenn man die Operatoren L_x und L_y als Linearkombinationen der Aufwärts und Abwärtsoperatoren schreibt:

$$L_x = \frac{1}{2}(L^+ + L^-), L_y = \frac{1}{2}(L^+ - L^-)$$

L^+ und L^- haben nur Einträge in der oberen bzw. unteren Nebendiagonalen:

$$L^+ = \begin{pmatrix} 0 & * & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad L^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & * & 0 \end{pmatrix}$$

Damit ist L_x bzw. L_y :

$$\begin{pmatrix} 0 & * & & & \\ * & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & * & \\ & & * & 0 & \end{pmatrix}$$

Bildet man $S_x \otimes L_x$, so steht an jedem Eintrag von L_x eine Matrix S_x multipliziert mit dem Eintrag

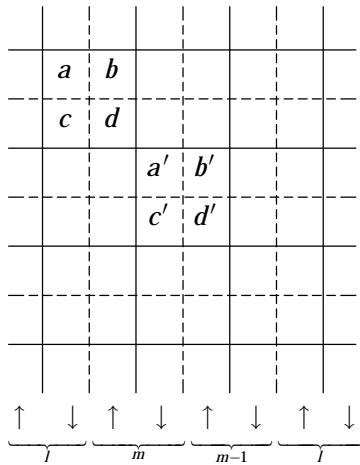
$$\begin{pmatrix} \ddots & *S_x & & \\ *S_x & \ddots & *S_x & \\ & *S_x & \ddots & \\ & & *S_x & \ddots \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} \ddots & -*S_y & & \\ *S_y & \ddots & -*S_y & \\ & *S_y & \ddots & \\ & & *S_y & \ddots \end{pmatrix}$$

Mit $S_x - iS_y = S^-$ und $S_x + iS_y = S^+$ folgt

$$\begin{pmatrix} \ddots & *S^- & & \\ *S^+ & \ddots & S^- & * \\ & *S^+ & \ddots & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \times & & & & \\ \times & \times & \times & \times & \\ \times & \times & \times & \times & \\ \times & \times & \times & \times & \\ \times & \times & \times & \times & \end{pmatrix},$$

wobei $S^- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ und $S^+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ ist.

Die Matrix zerfällt in Blockform:



Offenbar mischen je zwei Zustände $|m, \uparrow\rangle$ und $|m-1, \downarrow\rangle$. Der oberste und der unterste Zustand $|l, \downarrow\rangle$ bzw. $|l, \downarrow\rangle$ bleiben unvermischt.

10.3 Myonium und Positronium

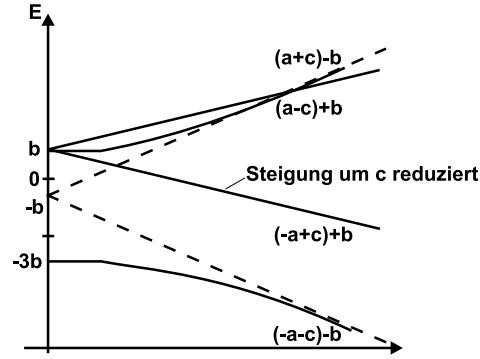
Bei Myonium und Positronium gilt $\mu_K \approx \mu_B$, der Kernspin im äußeren Magnetfeld muß also mit berücksichtigt werden:

$$-\mu_K g \frac{1}{\hbar} \vec{I} \cdot \vec{B} = -c \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

wobei $c = \frac{1}{2} \hbar \omega_K = \frac{1}{2} \mu_K g B$ ist. Der Hamilton lautet dann:

$$H = \begin{pmatrix} a+b-c & a-b+c & -a-b-c & -a+b+c \\ a-b+c & a+b-c & -a+b+c & -a+c-b \\ -a-b-c & -a+b+c & a+b-c & a-c+b \\ -a+b+c & -a+c-b & a-c+b & a+b-c \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 2b & 0 \\ 2b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Man erhält das folgende ZEEMAN-Diagramm:



Beim Myonium gilt:

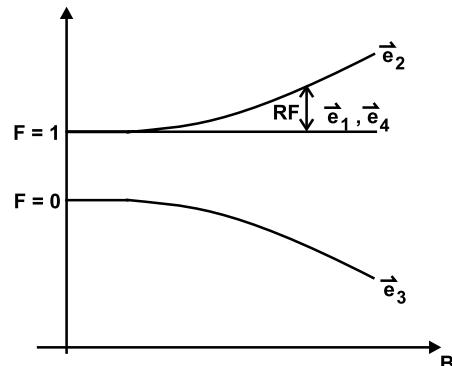
$$\frac{a}{c} = \frac{\mu_B g_e}{\mu_\mu g_\mu} = \frac{m_\mu}{m_e} \approx 207$$

$$A_{\text{HFS}} = 2\pi\hbar \cdot 4.46 \text{ GHz}$$

Die Steigung der ungemischten Zustände ist um 0.5% gegenüber dem genäherten Fall abgesenkt. Dies ist ein kleiner quantitativer Effekt, der aber zu einem Levelcrossing führt. Beim Positronium ist der Effekt viel größer:

$$\frac{a}{c} = \frac{\mu_{\text{Bohr}} g_e}{-\mu_{\text{Bohr}} g_{e^+}} = 1,$$

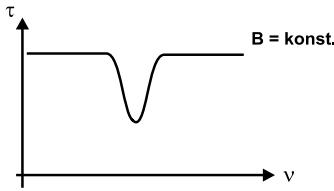
Die Steigung verschwindet der ungemischten Zustände verschwindet ganz.



Da das Magnetfeld Triplet und Singulett-Zustände mischt und die beiden Zustände drastisch unterschiedliche Lebensdauern haben hängt die Lebensdauer der gemischten Zustände über das Mischungsverhältnis vom Magnetfeld ab:

$$\begin{aligned}
\vec{e}_1, \vec{e}_4 : \quad & t = \tau_{\text{Triplet}} \\
\vec{e}_2 : \quad & t \in \left\{ \tau_{\text{Triplet}}, \dots, 2\tau_{\text{Singulett}} \right\} \\
\vec{e}_3 : \quad & t \in \left\{ \tau_{\text{Singulett}}, \dots, 2\tau_{\text{Singulett}} \right\} \\
\tau_{\text{Triplet}} &= 1.4 \cdot 10^{-7} \text{ s}, \quad \tau_{\text{Singulett}} = 1.25 \cdot 10^{-10} \text{ s}
\end{aligned}$$

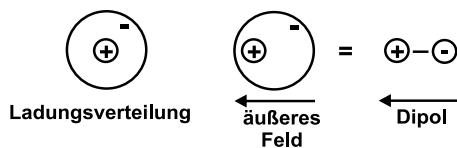
Man kann das Zeeman-Diagramm ausmessen, und die Hyperfeinstruktur-Konstante von Positronium bestimmen, indem man eine Radiofrequenz einstrahlt, die \vec{e}_1 und \vec{e}_4 mit \vec{e}_2 mischt und die Lebensdauer verkürzt.



Den Übergang bei $B = 0$ zu messen ist schwierig, da der Energieabstand mit einer Übergangsfrequenz von 203 GHz groß ist.

10.4 Elektrostatische Felder

Beim STARK-Effekt wird im Gegensatz zum vorherigen Kapitel ein äußerer, statisches *elektrisches* Feld angelegt. Klassisch erwartet man dabei die Induktion eines elektrischen Dipolmoments.



Die damit verbundene Energie beträgt

$$H = \vec{\rho} \cdot \vec{F} \quad \text{mit} \quad \vec{\rho} = \int d\vec{r} \vec{r} \rho(\vec{r})$$

Das Dipolmoment wird induziert d.h.

$$\vec{\rho} = \alpha \cdot \vec{F}$$

Dabei ist α die Polarisierbarkeit und im allgemeinen eine Matrix. Beim klassischen Modell, in dem man sich das Elektron wie an einer Fe-

der befestigt im harmonischen Potential vorstellt, ergibt sich:

$$\begin{aligned}
e\vec{F} &= k\vec{r} = k \frac{e}{r} \vec{r} = k \frac{1}{e} \vec{\rho} \\
\Rightarrow \alpha &= \frac{e^2}{k}
\end{aligned}$$

Betrachten wir nun eine quantenmechanische Beschreibung einer Ladungsverteilung mit Dipolmoment. Für die Ladungsverteilung gilt:

$$\rho(\vec{r}) = -e |\psi(\vec{r})|^2$$

Damit ergibt sich das Dipolmoment zu:

$$\vec{\rho} = -e \int d\vec{r} \vec{r} |\psi(\vec{r})|^2$$

Beim Wasserstoff im Schrödingermodell sind die Eigenfunktionen symmetrisch oder antisymmetrisch unter Ortsspiegelung:

$$\begin{aligned}
\psi(\vec{r}) &= \psi(r, \phi, \theta) = R(r) Y_{lm}(\phi, \theta) \\
&= R(r) \theta_{lm}(\theta) e^{im\phi} \\
\psi(-\vec{r}) &= \psi(r, \phi + \pi, \theta + \pi) \\
&= R(r) \theta_{lm}(\theta + \pi) e^{im\phi} \underbrace{e^{i\pi m}}_{= -1^m}
\end{aligned}$$

mit

$$\theta_{lm} \sim P_l^m(\cos \theta) \sim \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l-m} (1 - \cos^2 \theta)^l$$

ergibt sich dann:

$$\psi(-\vec{r}) = (-1)^m (-1)^{l-m} \psi(\vec{r}).$$

Das heißt, die Parität hängt von der Drehimpulsquantenzahl l ab:

$$\text{Parität} = (-1)^l.$$

Das Quadrat der Eigenfunktionen ist daher immer symmetrisch unter Ortsspiegelung! Damit ist $\vec{\rho}$ das Integral über eine antisymmetrische Wellenfunktion und verschwindet daher. Die nicht entarteten Eigenzustände des Wasserstoffs tragen also *kein* permanentes Dipolmoment.

Allgemein gilt, daß der Paritätsoperator

$$P\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r})$$

nach der Symmetrie unter Ortsspiegelung „fragt“. Eigenzustände von P sind entweder symmetrisch oder antisymmetrisch und tragen deshalb *kein* Dipolmoment. Vertauscht der Hamiltonoperator eines Systems mit dem Paritätsoperator, so tragen die Eigenzustände des Systems *kein* elektrisches Dipolmoment. Beispiele dafür sind:

- freies Teilchen:

$$H(r) = \frac{p^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 = H(-r)$$

$$PH = HP$$

- harmonischer Oszillator:

$$H(r) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 = H(-r)$$

- Coulomb-Potential

$$H(r) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\sqrt{r^2}} = H(-r)$$

- Potenzen in r :

$$H(r) = \frac{p^2}{2m} + kr^q = (-1)^q H(-r)$$

$$[H, P] = HP(1 - (-1)^q)$$

vertauscht nur für gerade q

Welche Zustände tragen also nun ein elektrisches Dipolmoment? Ein Beispiel ist

$$\psi(r) = aS(r) + bA(r),$$

wobei $S(-r) = S(r)$ und $A(-r) = -A(r)$, bzw. $P_S = 1$ und $P_A = -1$. In diesem Fall ist

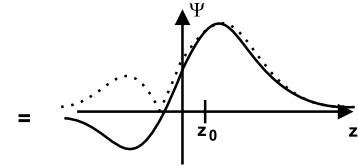
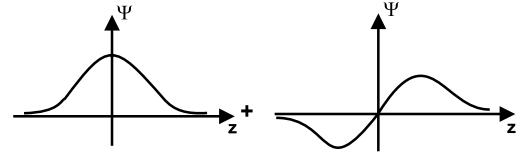
$$|\psi(r)|^2 = a^2 |S(r)|^2 + b^2 |A(r)|^2 + ab(S(r)A^*(r) + S^*(r)A(r))$$

nicht symmetrisch:

$$\begin{aligned} |\psi(-r)|^2 &= a^2 |S(r)|^2 + b^2 |A(r)|^2 \\ &- ab(S(r)A^*(r) + S^*(r)A(r)) \\ &\neq |\psi(r)|^2 \end{aligned}$$

Der Mischterm ist immer antisymmetrisch und trägt daher allein zum Dipolmoment bei. Ein Beispiel dafür ist Wasserstoff:

$$S(r) = |1s\rangle \quad A(r) = |2p, m=0\rangle$$



Der Schwerpunkt z_0 von $|\psi(r)|^2$ ist aus dem Nullpunkt verschoben. Entsprechend erhält man ein Dipolmoment von $\rho_z = e z_0$. Die Größe des Dipols hängt von dem Mischungsverhältnis $\frac{a}{b}$ bzw. mit $a = \cos \beta$ und $b = \sin \beta$ vom Mischungswinkel β ab:

$$\begin{aligned} z_0 &= \int ab(S(\vec{r})A^*(\vec{r}) + S^*(\vec{r})A(\vec{r})) z d\vec{r} \\ &= \underbrace{\sin \beta \cos \beta}_{\frac{1}{2} \sin 2\beta} \cdot \underbrace{\int (\psi_{1s} \psi_{2p,m=0}^* + \psi_{1s}^* \psi_{2p,m=0}) z d\vec{r}}_{2.074a_0} \\ &= 0.74 a_0 \sin 2\beta \end{aligned}$$

Die Deformation der Hülle durch das von außen angelegte Feld findet also auf der Skala des Hüllenradius statt. Bei maximaler Mischung ($\beta = 45^\circ$) erhält man für das Dipolmoment den Zahlenwert

$$\rho_{\max} = 0.74 \cdot e \cdot a_0 = 1.118 \cdot 10^{-29} \text{ C} \cdot \text{m}.$$

Den tatsächlich auftretenden Mischwinkel kann man durch eine Energieüberlegung gewinnen. Die Deformation der Hülle kostet Energie, die durch die teilweise Besetzung des p-Zustandes zustandekommt:

$$\begin{aligned}\Delta E_1 &= E_{2p} \sin^2 \beta + E_{1s} \cos^2 \beta - E_{1s} \\ &= \sin^2 \beta (E_{2p} - E_{1s}) \\ &\approx \beta^2 (E_{2p} - E_{1s}), \quad \beta \ll 1\end{aligned}$$

Andererseits hat man einen Energiegewinn durch die Induktion eines Dipolmoments:

$$\begin{aligned}\Delta E_2 &= \rho \cdot F_z \\ &= \frac{1}{2} \sin 2\beta \\ &\cdot \underbrace{\left(\langle \psi_{1s} | e z F_z | \psi_{2p} \rangle + \langle \psi_{2p} | e z F_z | \psi_{1s} \rangle \right)}_{:= 2M} \\ &= \beta \cdot 2M\end{aligned}$$

Die Gesamtänderung lautet also:

$$\Delta E = \Delta E_1 - \Delta E_2.$$

Die Energie hängt vom Mischungswinkel ab. Welcher Mischungswinkel wird sich einstellen? Wir nehmen sinnvollerweise an, dass sich das System den energetisch niedrigsten Zustand sucht. Der Mischungswinkel ergibt sich dann durch Bestimmung des Minimums der Funktion $E(\beta)$.

$$\frac{d(\Delta E_1 - \Delta E_2)}{d\beta} = 2\beta^2 (E_{2p} - E_{1s}) + 2\beta M = 0$$

oder

$$\beta = \frac{-\langle \psi_{1s} | \rho_z F_z | \psi_{2p,m=0} \rangle}{E_{1s} - E_{2p}} = \frac{M}{E_{1s} - E_{2p}}.$$

Die zu diesem Winkel gehörige Energie beträgt:

$$\begin{aligned}\Delta E &= \Delta E_1 - \Delta E_2 \\ &= \beta^2 (E_{2p} - E_{1s}) - 2\beta M \\ &= \beta M - 2\beta M = -\beta M \\ &= \frac{|\langle \psi_{1s} | \rho_z F_z | \psi_{2p,m=0} \rangle|^2}{E_{1s} - E_{2p}}\end{aligned}$$

Wir behandeln jetzt den Stark-Effekt etwas weniger heuristisch und betrachten dazu die Lösung des geeigneten Hamiltonoperator. Den Ausdruck für den Störhamilton erhält man aus dem Korrespondenzprinzip. Die klassische Energie $-\vec{\rho} \cdot \vec{F}$ geht über in den Operator:

$$-\vec{\rho} \cdot \vec{F} = e \vec{r} \cdot \vec{F}.$$

Der Störoperator ist also im wesentlichen der Ortsoperator. In der Energiedarstellung lautet die Hamiltonmatrix

$$H_{ij} = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle,$$

also mit $\psi_1 = \psi_{1s}$ und $\psi_2 = \psi_{2p,m=0}$:

$$H = \begin{pmatrix} E_{1s} & \langle \psi_{1s} | -\vec{\rho} \cdot \vec{F} | \psi_{2p} \rangle \\ \langle \psi_{2p} | -\vec{\rho} \cdot \vec{F} | \psi_{1s} \rangle & E_{2s} \end{pmatrix}$$

Als Abkürzung führen wir ein

$$\begin{aligned}M &:= \langle \psi_{1s} | -\vec{\rho} \cdot \vec{F} | \psi_{2p} \rangle \\ &= \langle \psi_{1s} | e \vec{r} \cdot \vec{F} | \psi_{2p} \rangle\end{aligned}$$

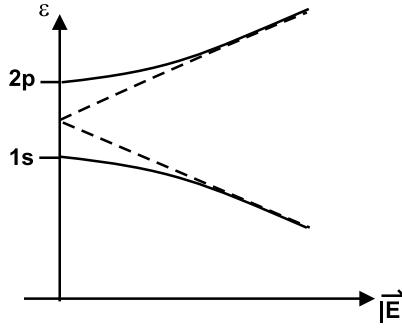
und erhalten die charakteristische Gleichung

$$(E_{1s} - \varepsilon)(E_{2p} - \varepsilon) - MM^* = 0,$$

woraus man die Energiewerte

$$\begin{aligned}\varepsilon_{1,2} &= \frac{1}{2} (E_{1s} + E_{2p}) \\ &\pm \frac{1}{2} (E_{1s} - E_{2p}) \cdot \sqrt{1 + \frac{4MM^*}{(E_{1s} - E_{2p})^2}}\end{aligned}$$

berechnet.



Der lineare Stark-Effekt tritt auf, wenn $E_{1s} = E_{2p}$. Dann erhält man für die Aufspaltungsenergie

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{2} (E_{1s} + E_{2p}) \sqrt{|M|^2} \sim F$$

Allgemein gilt bei kleinen Feldern

$$\Delta E \sim |\vec{F}^2| \quad \text{für } \frac{4MM^*}{E_{1s} - E_{2p}} < 1$$

und bei großen

$$\Delta E \sim |\vec{F}| \quad \text{für } \frac{4MM^*}{E_{1s} - E_{2p}} > 1$$

Bei kleinen Feldern kann man den Energieausdruck entwickeln. Unter Verwendung von

$$\sqrt{1+x^2} = 1 + \frac{1}{2}x^2,$$

ergibt sich für die Energie

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2} &= \frac{1}{2} (E_{1s} + E_{2p}) \\ &\pm \frac{1}{2} (E_{1s} - E_{2p}) \left(1 + \frac{2|M|^2}{(E_{1s} - E_{2p})^2} \right) \end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= E_{1s} + \frac{|M|^2}{E_{1s} - E_{2p}} \\ \varepsilon_2 &= E_{2p} - \frac{|M|^2}{E_{1s} - E_{2p}} \end{aligned}$$

Dieses Ergebnis entspricht genau der Störungsrechnung 2. Ordnung. Die erste Ordnung existiert nicht. Sie wäre proportional zu,

$$\sim F \langle \psi_1 | \rho | \psi_1 \rangle$$

was aus Symmetriegründen verschwindet.

Das Dipolmoment berechnet sich aus der Energie durch

$$\rho = -\frac{d\varepsilon}{dF}$$

wobei wir die Population des angeregten Zustandes vernachlässigen können, also $\varepsilon \approx \varepsilon_1$. Man erhält:

$$\rho = -\frac{e^2 \langle \psi_{1s} | Z | \psi_{2p} \rangle}{\underbrace{E_{1s} - E_{2p}}_{\text{Polarisierbarkeit}}} 2F_z$$

Das Matrixelement lässt sich berechnen und man erhält

$$\rho = 1.1 \cdot \underbrace{e a_0}_{\text{"natürliches" Dipolmoment}} \cdot \underbrace{\frac{e a_0 F_z}{\Delta E}}_{\text{Energieverhältnis}},$$

wobei

$$\Delta E = E_{1s} - E_{2p}.$$

Betrachten wir jetzt noch die Lösung unter Berücksichtigung aller Wasserstoffzustände. Dazu verwenden wir die Störungsrechnung 2. Ordnung:

$$\Delta E = e^2 |\vec{F}|^2 \sum_{n,l,m} \frac{|\langle \phi_{nlm} | Z | \phi_{100} \rangle|^2}{E_1^0 - E_n^0}$$

Die Matrixelemente in der Summe können für Wasserstoffwellenfunktionen berechnet werden. Mit $z = r \cos \theta$ ergibt sich:

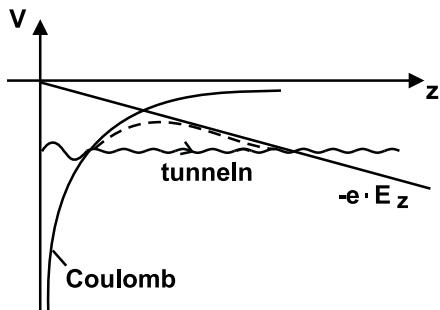
$$\begin{aligned}
& \left| \langle \phi_{nlm} | r \cos \theta | \phi_{100} \rangle \right|^2 = \\
& = \left| \int d\Omega Y_{lm}^* Y_{100} \cos \theta \right|^2 \left| \int r^2 dr R_{nl0}^* r R_{100} \right|^2 \\
& = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{l1} \delta_{m0} \right|^2 \left| \frac{2^8 n^7 (n-1)^{2n-5}}{(n+1)^{2n+5}} a_0^2 \right|^2 \\
& := f(n) a_0^2
\end{aligned}$$

m bleibt als gute Quantenzahl erhalten, da $[L_z, z] = 0$. Also erhält man:

$$\begin{aligned}
\Delta E & = -e^2 \left| \vec{F} \right|^2 a_0^2 \sum_{n=2}^{\infty} \frac{f(n)}{\frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 \left(1 - \frac{1}{n^2} \right)} \\
& = -2 a_0^3 \left| \vec{F} \right|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n^2 f(n)}{n^2 - 1} \\
& \xrightarrow{1.125} \Delta E = \underbrace{2.5 \cdot a_0^3}_{\rho} \left| \vec{F} \right| \cdot \left| \vec{F} \right|
\end{aligned}$$

Die Energie ΔE entspricht in etwa dem Energieinhalt des Feldes im Volumen a_0^3 .

Interessant ist noch ein weiterer Aspekt. Bei Anlegen eines homogenen Feldes wird das Atom prinzipiell metastabil. Das Gesamtpotential in dem sich das Elektron bewegt setzt sich aus dem Coulomb-Potential des Kerns und dem äußeren Feld zusammen:



Auch bei beliebig kleinem Feld besteht eine von Null verschiedene Wahrscheinlichkeit für das Atom aus seinem Coulombpotential herauszutunneln. Die Zustände sind prinzipiell metastabil. Mathematisch drückt sich das darin aus, daß die Störungsrechnung für Potenzen in z nicht konvergiert. Die Lebensdauerreduktion ist für sogenannte Rydberg-Atome meßbar. Das sind Atome bei denen sich eines der Elektronen in

einem Zustand mit extrem hoher Hauptquantenzahl befindet (bis zu $n=500$). Zustände mit hohem n sind bei Anwesenheit eines äußeren Feldes nur noch sehr schwach gebunden. Die Tunnelbarriere ist dann sehr klein und die Ionisationswahrscheinlichkeit ist groß.

Kapitel 11

Optische Übergänge

11.1 Optische Bloch-Gleichungen

Was macht ein Atom im Lichtfeld genau? In diesem Kapitel benutzen wir die halbklassische Beschreibung. Das Lichtfeld wird dabei durch die Maxwell-Gleichungen und das Atom durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben. Das physikalische Bild ist einfach: Das elektrische Feld des Lichts induziert im Atom ein zeitlich variables Dipolmoment, das mit dem Feld des Lichtes Energie austauschen kann.

Wie sieht die quantitative Beschreibung aus? Wir haben zunächst eine zeitabhängige Störung:

$$H_i = -\vec{p} \cdot \vec{F}(t) = -\vec{p} \cdot \vec{F} \cos(\mathbf{kx} - \omega t)$$

In Dipolnäherung, also für den Fall, daß die Wellenlänge groß gegenüber der Ausdehnung des Atoms ist, kann man die Ortsabhängigkeit vernachlässigen.

$$H_i = -\vec{p} \cdot \vec{F} \cos \omega t$$

Für ein Zweiniveausystem erhält man

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} + e \vec{F} \cos \omega t \begin{pmatrix} 0 & r_{12} \\ r_{21} & 0 \end{pmatrix},$$

wobei

$$r_{ij} = \langle \psi_i | \vec{r} | \psi_j \rangle = r_{ji}^*.$$

Der Hamilton ist formal identisch mit dem Hamilton für den Spin im Magnetfeld. Man kann die Gleichungen für die Entwicklungskoeffizienten direkt übernehmen:

$$i\dot{c}_1 = \Omega \cdot \cos \omega t \cdot \exp(i(E_1 - E_2)/\hbar \cdot t) \cdot c_2$$

$$i\dot{c}_2 = \Omega^* \cdot \cos \omega t \cdot \exp(-i(E_1 - E_2)/\hbar \cdot t) \cdot c_1$$

Die Lösungen der Bloch-Gleichungen können direkt übernommen werden wobei die Rabi-Frequenz jetzt lautet

$$\hbar \Omega = e F_0 \underbrace{\langle \psi_1 | Z | \psi_2 \rangle}_{:= \langle Z \rangle}.$$

und die Verstimmung ist die Abweichung der Lichtfrequenz von der Bohrfrequenz des atomaren Übergangs.

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{1}{\hbar} (E_2 - E_1) - \omega \\ &= \omega_0 - \omega \end{aligned}$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeit für den oberen Zustand ist:

$$\rho_{22} = \left(\frac{\Omega}{\tilde{\Omega}} \right)^2 \cdot \sin^2 \left(\frac{1}{2} \tilde{\Omega} t \right),$$

mit

$$\tilde{\Omega} = \sqrt{\delta^2 + \Omega^2}$$

Zur Berechnung der Rabi-Frequenz benötigen wir die elektrische Feldstärke F_0 . Sie lässt sich durch die Lichtintensität ausdrücken

$$\frac{1}{2} \varepsilon_0 \cdot F_0^2 = \int W(\omega) d\omega,$$

wobei $W(\omega)$ die spektrale Energiedichte ist. Sie ergibt sich aus der spektralen Intensitätsverteilung durch

$$I(\omega) = c W(\omega).$$

Damit erhält man

$$\hbar^2 \Omega^2 = e^2 F_0^2 \langle Z \rangle^2 = \frac{2 e^2}{\varepsilon_0} \langle Z \rangle^2 \int W(\omega) d\omega.$$

Wir können mit diesem Modell einen Ausdruck für die Raten des Einsteinschen Modells berechnen. Dazu betrachten wir die Zeitabhängigkeit der Besetzung des angeregten Zustands für kleine Intensitäten. Verläuft die Besetzung linear in der Zeit, könnten wir eine Rate ableiten und mit dem Einsteinkoeffizienten vergleichen. Bei kleinen Intensitäten gilt:

$$\begin{aligned}
\rho_{22} &= \frac{\Omega^2}{\delta^2 + \Omega^2} \sin^2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\delta^2 + \Omega^2} t \right) \\
&\approx \Omega^2 \frac{\sin^2 \left(\frac{1}{2} \delta t \right)}{\delta^2} \\
&= \frac{2 e^2}{\hbar^2 \varepsilon_0} \langle z \rangle^2 W_0 \frac{\sin^2 \left(\frac{1}{2} \delta t \right)}{\delta^2}
\end{aligned}$$

In Resonanz ($\delta = 0$) ergibt sich:

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\sin^2 \left(\frac{1}{2} \delta t \right)}{\delta^2} = \frac{1}{4} t^2$$

und

$$\rho_{22} \sim t^2.$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeit des angeregten Zustandes wächst nicht linear sondern quadratisch mit der Zeit. Wie paßt das mit dem Ratenbild zusammen? Dazu müssen wir die Liniendichte berücksichtigen. Der angeregte Zustand zerfällt in einer Zeit τ in den Grundzustand. Also ist wegen der Unschärferelation die Energie des angeregten Zustandes unscharf:

$$\Delta E \cdot \tau = \hbar$$

$$\Delta \omega = \frac{\Delta E}{\hbar} = \frac{1}{\tau}$$

Selbst bei exakt monochromatischem Licht, ist dann auch die Verstimmung $\delta = \omega_0 - \omega$ unscharf. Man muß die Näherung $\delta = 0$ aufgeben und die Gesamtanregung als Integral über die Anregungen der verschiedenen Frequenzkomponenten schreiben, die durch die Unschärferelation ins Spiel kommen:

$$\rho_{22} = \frac{2 e^2}{\hbar^2 \varepsilon_0} \langle z \rangle^2 \int_{\omega_0 - \frac{\Delta \omega}{2}}^{\omega_0 + \frac{\Delta \omega}{2}} W(\omega) \frac{\sin^2 \left(\frac{1}{2} \delta t \right)}{\delta^2} d\omega,$$

Da sich $W(\omega)$ im Bereich der Unschärfe $\Delta \omega$ kaum ändert, kann man $W(\omega)$ vor das Integral ziehen:

$$\begin{aligned}
\rho_{22} &= \frac{2 e^2}{\hbar^2 \varepsilon_0} \langle z \rangle^2 \cdot W(\omega_0) \cdot \underbrace{\int_{\frac{\Delta \omega}{2}}^{\frac{\Delta \omega}{2}} \frac{\sin^2 \left(\frac{1}{2} \delta t \right)}{\delta^2} d\delta}_{:= Int}
\end{aligned}$$

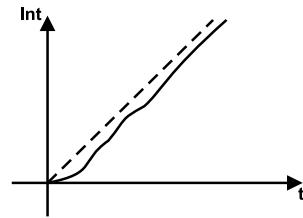
Wir betrachten Lösungen des Integrals für zwei verschiedenen Zeitskalen. Für $t < \Delta \omega$ lässt sich das Integral nähern:

$$Int = \int \frac{1}{4} \frac{\delta^2 t^2}{\delta^2} d\delta = \frac{t^2}{4} \int_{-\Delta \omega}^{\Delta \omega} d\delta = \frac{1}{4} t^2 \Delta \omega$$

Man erhält einen quadratischen Anstieg. Für $t > \Delta \omega$ wird das Integral zu

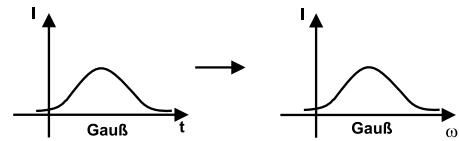
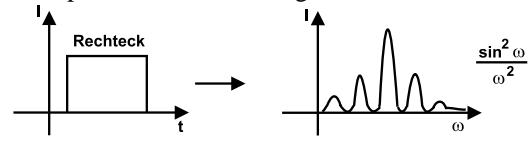
$$Int = \frac{1}{2} \pi t,$$

und der Verlauf linear. Die exakte numerische Lösung sieht ungefähr so aus:



Für Meßzeiten, die lang gegenüber der Lebensdauer des angeregten Zustandes sind, erhält man ein Ratenverhalten. Für Meßzeiten, die kurz gegen die Lebensdauer sind, erhält man dagegen den Beginn einer Rabi-Oszillation. Dies gilt allerdings nur in der Näherung kleiner Intensitäten.

Exakt monochromatisches Licht gibt es streng nur bei unendlich langer Meßzeit. Ist die Meßzeit begrenzt, so bestimmt die Form des Pulses das Spektrum der elektromagnetischen Welle.



Wir berechnen die Anregungsrate und den Einstein-Koeffizient B_{12} . Die Anregungsrate lautet

$$\underbrace{\frac{\rho_{22}}{t}}_{\text{Bloch}} = \underbrace{B_{12} W(\omega)}_{\text{Einstein}}.$$

Für Zeiten lang gegen τ , sowie monochromatisches Licht und kleine Intensitäten gilt:

$$\frac{\rho_{22}}{t} = \frac{\pi e^2}{\hbar^2 \varepsilon_0} \langle z \rangle^2 \cdot W(\omega_0)$$

Der Vergleich mit Einstein ergibt:

$$\frac{\rho_{22}}{t} = \frac{\pi e^2}{\hbar^2 \varepsilon_0} \langle z \rangle^2 \cdot W(\omega_0) = 3 \cdot B_{12} \cdot W(\omega_0)$$

oder

$$B_{12} = \frac{1}{3} \frac{\pi e^2}{\hbar^2 \varepsilon_0} \langle z \rangle^2.$$

Woher kommt der Faktor 3? Der Einstein-Koeffizient bezog sich auf Anregung mit unpolarisiertem Licht aus irgendeiner Richtung. Im mikroskopischen Bild kann für ein solches Licht das Dipolmoment von einer Feldkomponente induziert werden, die eine andere Richtung hat, als die Komponente mit der der Dipol dann Energie austauscht. Die Mittelung über diesen Effekt ergibt einen Faktor $\frac{1}{3}$.

Die natürliche Lebensdauer folgt aus dem B-Koeffizienten:

$$\frac{1}{\tau} = A_{21} = \frac{\hbar \omega_0^3}{\pi^2 c^3} \frac{g_1}{g_2} B_{12} = \frac{g_1}{g_2} \frac{e^2 \omega_0^3}{3\pi \varepsilon_0 \hbar c^3} \langle z \rangle^2$$

Für Wasserstoff $2p \rightarrow 1s$ erhält man für den Übergang in jeden der m-Zustände einen B_{21} -Koeffizienten, so daß die Gesamtübergangsrate noch $P=3B_{12}$ beträgt. Diese kürzen sich gerade mit dem Entartungsgrad $g_1/g_2=1/3$ weg. Man erhält also

$$\frac{1}{\tau} = \frac{e^2 \omega_0^3}{3\pi \varepsilon_0 \hbar c^3} \langle z \rangle^2$$

mit dem Wert $\tau=1.6$ ns. Dies entspricht einer natürlichen Linienbreite von $\Delta\omega=600$ MHz bzw. einer Linienbreite von $\Delta\nu=95$ MHz. Die natürliche Linienbreite des 1s-2p-Übergangs ist damit 16mal größer als der entsprechende Übergang bei Alkalies.

Im folgenden vergleichen wir das Ergebnis mit dem klassischen Dipol. Beim getriebenen harmonischen Oszillatoren gilt, beispielsweise für ein Elektron an einer Feder:

$$m\ddot{z} - kz = e F_0 \cos \omega t$$

Die Dämpfung des Oszillators ist gegeben durch die mittlere abgestrahlte Leistung

$$\dot{E} = \langle P \rangle = \frac{1}{12\pi} \frac{1}{c^3 \varepsilon_0} \omega^4 \rho^2,$$

wobei

$$\rho = eA$$

das maximal auftretende Dipolmoment ist. Andererseits ist die Energie eines klassischen Oszillators:

$$E = \frac{1}{2} m v_{\max}^2 = \frac{1}{2} m (\omega A)^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 \left(\frac{\rho}{e} \right)^2$$

Damit erhält man dann

$$\dot{E} = -\gamma E$$

$$\gamma = \frac{1}{6\pi} \frac{e^2 \omega^2}{c^3 \varepsilon_0 m}$$

In diesen Ausdruck geht die Masse des Schwingers ein. Um den Übergang zur Quantenmechanik zu machen stellen wir die „Federkonstante“ des Atoms

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{bzw.} \quad k = m \omega^2$$

so ein, dass die Energie des harmonischen Oszillators lautet:

$$E = \hbar \omega.$$

oder

$$\frac{1}{2} m \omega^2 \left(\frac{\rho}{e} \right)^2 = \hbar \omega.$$

Damit lässt sich m eliminieren und man erhält

$$\gamma = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{12\pi} \frac{\omega^3 \rho^2}{c^3 \epsilon_0 \hbar},$$

was dem exakten oben berechneten Wert entspricht, wenn man

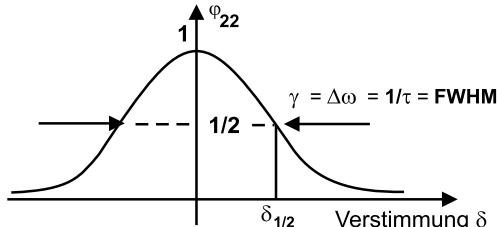
$$\rho = 2e\langle z \rangle$$

ersetzt. Die Analogie stimmt bis auf einen Faktor 2. Das ist überraschend da beide Modelle sehr verschieden sind. Das quantenmechanische Dipolmoment kommt durch Überlagerung zweier Zustände zustande und ist von seiner Größe her begrenzt. Außerdem verschwindet es für Zustände mit exakt definierter Energie. Das klassische Dipolmoment kennt keine Zustände und kann beliebig groß werden.

Die natürliche Linienbreite erhält man aus der Fouriertransformation des exponentiellen Zerfalls:

$$\begin{aligned} A(t) &= A_0 e^{-\gamma t} \\ A(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A_0 e^{-\gamma t} e^{-i\omega t} dt \\ A(\omega) &= A_0 \frac{(\frac{\gamma}{2})^2}{\delta^2 + (\frac{\gamma}{2})^2} \end{aligned}$$

Dies ist eine Lorentz-Kurve mit einer Halbwertsbreite von $\delta_{1/2} = \frac{\gamma}{2}$.



11.3 Dämpfung und Resonanzbreite

Um das Absorptionsverhalten mit Dämpfung und Verstimmung zu beschreiben, muß man die optischen Bloch-Gleichungen um entsprechende Dämpfungsterme erweitern. In die Differentialgleichung für ρ_{22} fügt man den Term

$$-\gamma_{\parallel} \rho_{22}$$

ein und in die Gleichung für ρ_{21} und ρ_{12} den Term

$$-\gamma_{\perp} \rho_{ij}.$$

Diese sogenannten longitudinalen und die transversale Zerfallsrate können verschieden sein:

- γ_{\parallel} beschreibt den Zerfall der Population im angeregten Zustand. Mit γ_{\parallel} ist immer ein Energiefluß verbunden.
- γ_{\perp} beschreibt den Zerfall des Dipolmoments:

$$\begin{aligned} \rho &= e \langle c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 | z | c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2 \rangle \\ \rho &= e \langle z \rangle (c_1 c_2^* + c_1^* c_2) = e \langle z \rangle (\rho_{12} + \rho_{21}) \end{aligned}$$

Das Dipolmoment kann zerfallen, ohne daß im Mittel Energie ausgetauscht wird.

Durch Einfügen dieser beiden Terme kann man ein interessantes aber kompliziertes Stück Physik auf einfache Weise berücksichtigen: Der spontane Zerfall entsteht durch die sogenannten Vakuumssfluktuationen. Wir haben in Kapitel 4 gesehen, daß man das elektromagnetische Feld im Modenbild beschreiben kann. Jede Mode wird dabei mit Energiequanten, den Photonen besetzt. Im Zustand geringster Energie ist keine Photon in der Mode vorhanden. Die Mode hat dann aber immer noch eine Nullpunktsenergie von $1/2\hbar\omega$. Sie läßt sich der Mode zwar nicht entziehen, ist aber verbunden mit stochastischen Schwankungen der elektrischen Feldstärke. Dieses Feld kann ein angeregtes Atom per stimulierter Emission in den Grundzustand überführen. In diesem Bild ist der spontane Zerfall ein durch die Vakuumssfluktuationen stimulierter Übergang. Darüber hinaus dämpft die Vakuumssfluktuation auch die elektrische Dipolschwingungen des Atoms. Eine ausführliche Theorie führt hier zu weit. Das Ergebnis einer solchen Theorie sind die oben erwähnten zusätzlichen Terme in den optischen Bloch-Gleichungen.

Für den Spezialfall, in dem nur die Vakuumssfluktuationen den angeregten Zustand beeinflussen, kann man auch in der Differentialgleichung für c_2 den Zerfallsterm

$$-\frac{\gamma}{2} c_2$$

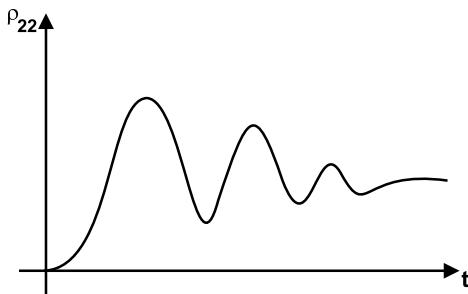
einfügen. Dies führt dann zu

$$\gamma_{\parallel} = \gamma$$

und

$$\gamma_{\perp} = \frac{\gamma}{2}.$$

Löst man die Blochgleichungen numerisch, so findet man eine gedämpfte Schwingung für die Besetzung des angeregten Zustands.



Das Dipolmoment, bzw. die Matrixelemente ρ_{12} und ρ_{21} schwingen allerdings ungedämpft auch bei langen Zeiten. Um die Matrixelemente im eingeschwungenen Zustand zu berechnen, separiert man die Schwingung des Dipolmoments und zerlegt ρ_{12} in einen schnellen und einen langsamen Teil:

$$\rho_{12} = e^{-ikt} \cdot \tilde{\rho}_{12}$$

Ebenso verfährt man mit ρ_{21} und erhält die Gleichungen:

$$\dot{\rho}_{22} = -\frac{1}{2} i\Omega^* \tilde{\rho}_{12} + \frac{1}{2} i\Omega \tilde{\rho}_{21} - \gamma \rho_{22}$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{12} = \frac{1}{2} i\Omega (\rho_{11} - \rho_{22}) - \frac{1}{2} \gamma \tilde{\rho}_{12} + i\delta \tilde{\rho}_{12}$$

$$\tilde{\rho}_{21} = \tilde{\rho}_{21}^*$$

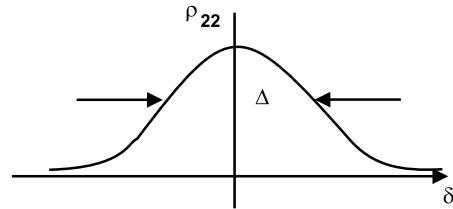
Im Gleichgewicht verschwinden die Ableitungen und für die Besetzung des angeregten Zustands ergibt sich

$$\rho_{22} = \frac{1}{4} |\Omega|^2 \frac{1}{\delta^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 + \frac{1}{2} |\Omega|^2}.$$

Die Besetzung als Funktion der Verstimmung ist eine Lorentzförmige Resonanz mit einer Breite

$$\Delta = \sqrt{\gamma^2 + 2|\Omega|^2}.$$

Die Linienbreite ist nur für kleine Lichtintensitäten durch die natürliche Linienbreite bestimmt. Für große Intensitäten ist die Resonanz "leistungsverbreitert".



Im Experiment misst man die Absorption des Laserlichts als Funktion der Verstimmung. Ein Photon wird dabei zunächst absorbiert um das Atom anzuregen. Der Zerfall erfolgt dann in den ganzen Raumwinkel d.h. ein Photon wird durch das Atom aus dem Laserstrahl gestreut. Die Absorptionsrate ist also gleich der Streureate.

$$\Gamma = \rho_{22} \gamma = \frac{1}{4} |\Omega|^2 \gamma \frac{1}{\delta^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2 + \frac{1}{2} |\Omega|^2}$$

In Resonanz ($\delta=0$) gilt:

$$\Gamma = \frac{\Omega^2}{\gamma} \cdot \frac{1}{1 + 2 \frac{|\Omega|^2}{\gamma^2}}$$

Da

$$|\Omega|^2 \sim I$$

(I=Intensität) kann man die "Sättigungsintensität" definieren:

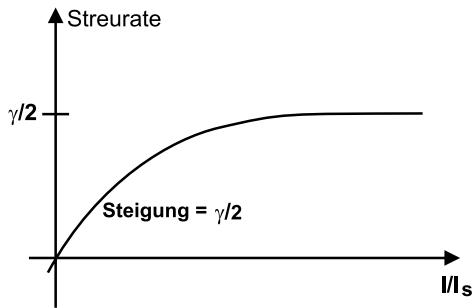
$$\frac{I}{I_{\text{Sat}}} = \frac{2\Omega^2}{\gamma^2}.$$

Unter Verwendung der Definition der Rabi-frequenz erhält man für die Sättigungsintensität den expliziten Ausdruck

$$I_{\text{Sat}} = \frac{1}{12\pi} \hbar \frac{\omega_0^3}{c^2} \gamma.$$

In der Praxis ist die Sättigungsintensität eine Kenngröße des Übergangs. Die Absorptionsrate schreibt sich jetzt sehr handlich als

$$\begin{aligned}\Gamma &= \frac{\gamma}{2} \cdot \frac{1}{1 + \frac{I_{\text{Sat}}}{I}} \\ &= \frac{\gamma}{2} \cdot \frac{\frac{I}{I_{\text{Sat}}}}{1 + \frac{I}{I_{\text{Sat}}}}.\end{aligned}$$



Für kleine Intensitäten gilt:

$$\rho_{22} = \frac{1}{2} \frac{I}{I_{\text{Sat}}}$$

Bei Sättigungsintensität ist die Anregung gerade 25%.

$$\rho_{22}(I = I_{\text{Sat}}) = \frac{1}{4}$$

Für Rubidium beträgt die Sättigungsintensität der D₂ Linie

$$I_{\text{sat}}^{(Rb)} = 1.654 \text{ mW/cm}^2.$$

Sie wird leicht mit einfachen Laserdioden erreicht.

Betrachten wir jetzt noch das Dipolmoment etwas genauer:

$$\rho = -e \langle z \rangle (\rho_{12} e^{+i\omega_0 t} + \rho_{21} e^{-i\omega_0 t}).$$

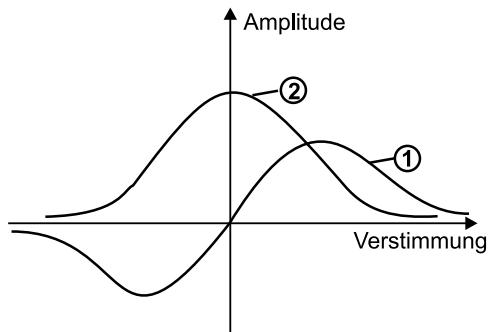
Mit

$$\rho_{12} = e^{-i\delta t} \frac{-\frac{1}{2}\Omega(\delta - i\gamma/2)}{\delta^2 + (\frac{\gamma}{2})^2 + \frac{1}{2}|\Omega|^2}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned}\rho &= e \langle z \rangle \Omega \left\{ \frac{\delta}{\delta^2 + (\frac{\gamma}{2})^2 + \frac{1}{2}|\Omega|^2} \cos \omega t \right. \\ &\quad \left. + \frac{\frac{\gamma}{2}}{\delta^2 + (\frac{\gamma}{2})^2 + \frac{1}{2}|\Omega|^2} \sin \omega t \right\}\end{aligned}$$

Bis auf den Term $\frac{1}{2}|\Omega|^2$ im Nenner entspricht das der Lösung des gedämpften, getriebenen, harmonischen Oszillators. Der Faktor vor dem Cosinus ist die dissipative Amplitude (1). Sie verschwindet in Resonanz und ist nicht mit einem Energieübertrag verbunden. Der Faktor vor dem Sinus ist die absorptive Amplitude (2). Sie beschreibt den Energieübertrag zwischen Licht und Atom.



Mit Hilfe des Zusammenhangs

$$a \cos x + b \sin x = (a^2 + b^2) \cos \left(x - \arctan \left(\frac{b}{a} \right) \right)$$

kann man die Phasenverschiebung φ zwischen antreibender Welle und Dipolschwingung berechnen:

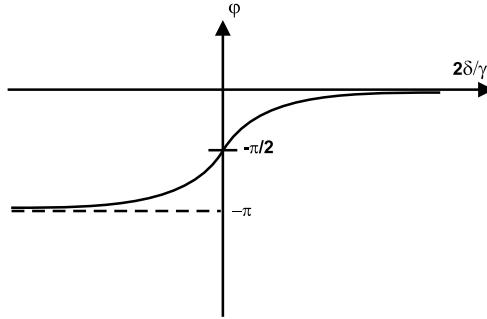
$$\tan \varphi = -\frac{1}{2} \frac{\gamma}{\delta}.$$

Daraus erhält man die Relativphase als Funktion der Verstimmung δ :

$$-\frac{2\delta}{\gamma} = \cot \varphi = \tan \left(\frac{\pi}{2} - \varphi \right)$$

oder

$$\varphi = \arctan \left(\frac{2\delta}{\gamma} \right) - \frac{\pi}{2}.$$



Für rote Verstimmung ($\delta > 0$) stehen Dipolmoment und elektrisches Feld parallel, d.h. eine Felderhöhung verringert die Energie. Atome werden zu hohen Feldern gezogen. Für blaue Verstimmung ($\delta < 0$) gilt das Umgekehrte. Die Atome werden aus dem Feld getrieben. Dieser Effekt ist die Grundlage für sogenannte optische Pinzetten (optical tweezer), mit denen Atome, Moleküle aber auch Viren und Bakterien bis hin zu kleinen Plastikkugelchen festgehalten und manipuliert werden können.

11.4 Auswahlregeln für optische Übergänge

Betrachten wir das Matrixelement etwas genauer. Der Dipolerwartungswert lautet:

$$\langle \phi_i | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{r} | \phi_f \rangle$$

wobei $\vec{\varepsilon}$ Polarisationsvektor des Lichts ist. Die Wellenfunktionen ϕ_i und ϕ_f haben einen radialen und einen Winkelanteil

$$\begin{aligned} \langle \phi_i | \vec{\varepsilon} \cdot \vec{r} | \phi_f \rangle &= \int_0^\infty r^2 dr R_i(r) r R_f(r) \\ &\cdot \underbrace{\int d\Omega Y_{l,m_i} \vec{\varepsilon} \cdot \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} Y_{l,m_f}}_{:=M} \end{aligned}$$

Auswahlregeln erhalten wir durch auswerten des letzten Terms. Wir beschreiben den Ortsvektor in Kugelkoordinaten

$$\begin{aligned} \vec{\varepsilon} \cdot \frac{\vec{r}}{|\vec{r}|} &= \varepsilon_x \cos \phi \sin \theta + \varepsilon_y \sin \phi \sin \theta \\ &+ \varepsilon_z \cos \theta \end{aligned}$$

und benutzen die Beziehungen:

$$\cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} Y_{1,0}$$

sowie

$$\mp \sin \theta e^{\pm i\phi} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} Y_{1,\pm 1}.$$

Damit lautet

$$M = \int d\Omega Y_{l,m_i}^* Y_{1,m} Y_{l,m_f}.$$

Einen Teil des Produkts im Integranden kann man als Summe schreiben (Eigenschaft der Kugelflächenfunktionen).

$$Y_{1,m} Y_{l,m_i} = a Y_{l-1,m+m_i} + b Y_{l,m+m_i} + c Y_{l+1,m+m_i}$$

Die genauen Ausdrücke für a, b und c spielen hier keine Rolle. Man erhält für M eine Summe aus drei Integralen, die man aufgrund der Orthonormalität der Kugelflächenfunktionen auswerten kann.

$$M = \begin{cases} a & \text{wenn } l_f = l_i - 1 \\ b & \text{wenn } l_f = l_i \\ c & \text{wenn } l_f = l_i + 1 \end{cases}$$

Außerdem muß für alle drei Fälle gelten $m_f = m + m_i$, mit $|m|^2 \leq 1$. Man erhält also zunächst die Auswahlregeln

$$\Delta l = -1, 0, 1$$

und

$$\Delta m = -1, 0, 1$$

Der Übergang b ist allerdings aus Paritätsgründen verboten

$$P = (-1)^l,$$

und l muß im Anfangs und Endzustand verschieden sein, $\Delta l \neq 0$.

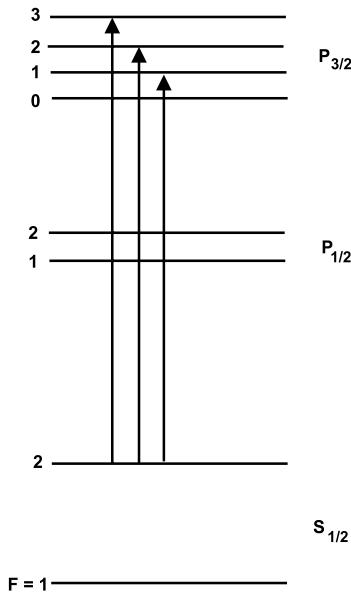
Nimmt man die Spin-Bahn-Kopplung hinzu, so kann sich auch der Spin ändern, da jetzt der Zustand eine Linearkombination aus Bahndrehimpuls und Spinzuständen ist. Die Lichtwelle greift jedoch immer nur am Bahndrehimpulsanteil an. Mit einem Spinzustand allein kann man kein Dipolmoment erzeugen. Die Stärke des Übergangs hängt also vom Anteil der Bahndrehimpulswellenfunktion an der gesamten Wellenfunktion ab. Die Zahlen, die diesen Beitrag angeben, heißen Clebsch-Gordon-Koeffizienten.

Die Herleitung allgemeiner Auswahlregeln für Zustände mit Spinanteil ist etwas komplizierter. Hier soll nur das Ergebnis genannt werden.

- $\Delta J = -1, 0, 1$
- $\Delta m_J = -1, 0, 1$
- kein Übergang von $j = 0 \rightarrow j = 0$
- falls $\Delta J = 0$, kein Übergang von $m_J = 0 \rightarrow m_J = 0$

Unter Berücksichtigung des Kernspins erhält man

- $\Delta F = -1, 0, 1$
- $\Delta m_F = -1, 0, 1$.

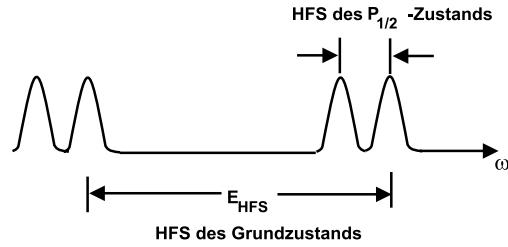


Betrachten wir als Beispiel kurz die möglichen Übergänge eines Rubidium-Atoms. Man beobachtet im sichtbaren bzw. nahen infraroten für

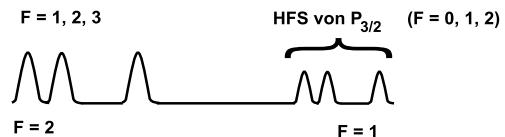
alle Alkalies zunächst zwei Gruppen von Übergängen:

- 1) $S_{1/2} \rightarrow P_{1/2}$ D_1 -Linie
- 2) $S_{1/2} \rightarrow P_{3/2}$ D_2 -Linie

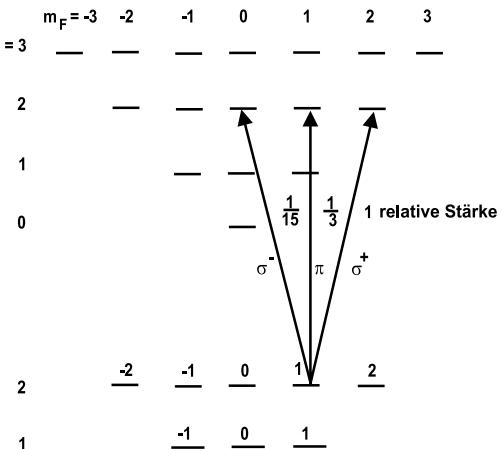
Die D_1 -Linie spaltet gemäß der Hyperfeinstruktur in zwei Paare auf.



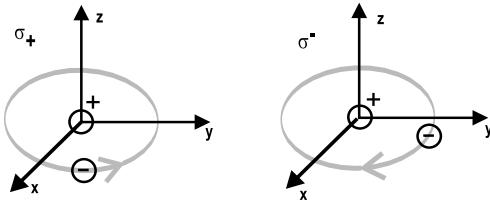
Die D_2 -Linie spaltet in zwei Gruppen mit je drei Linien auf.



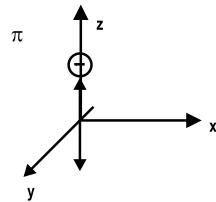
Dazu kommen die magnetischen Unterzustände. Bei einem σ^+ -Übergang erhöht sich m_F um 1. Man erhält bei der Kopplung während des Übergangs keine lineare Schwingung sondern einen Kreisstrom. Entsprechendes gilt für σ^- . Für σ^+ -Übergänge benötigt man rechtszirkular polarisiertes Licht, bezogen auf die Quantisierungssachse. Der Feldstärkevektor muß also in der xy-Ebene rechtsherum umlaufen.



σ^+ - bzw. σ^- -Übergänge kann man also durch rechts- bzw. linkszirkulare Licht eingestrahlt entlang der z-Achse anregen. Ein Atom, das gemäß eines σ^+ -bzw. σ^- -Übergangs zerfällt strahlt entlang der z-Achse ab.



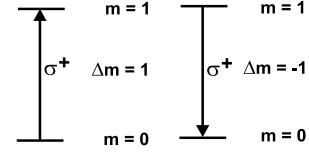
Ein π -Übergang ($\Delta m=0$) erzeugt eine lineare Schwingung entlang der Quantisierungsachse.



σ -Übergänge können auch durch Licht angeregt werden, das in der xy-Ebene linear polarisiert ist. Ein solches Feld lässt sich in eine links- bzw. rechtszirkulare Komponente zerlegen. Es wird, während des Übergangs, sowohl ein linksdrehender als auch ein rechtsdrehender Kreisstrom erzeugt. Beide Störme überlagern sich zu einer linearen Dipolschwingung, diesmal aber in der xy-Ebene. Da die Quantisierungsachse willkürlich gewählt war, können wir dieselbe physikalische Situation auch in einer um 90° gekippten Basis beschreiben, bei der die z-Achse parallel zum Feld steht. In dieser Beschreibung ist daselbe physikalische Geschehen ein π -Übergang. Genauso lässt sich ein angeregter Kreisstrom bei einem σ^- -Übergang als die Überlagerung zweier Dipole auffassen, die um 90° außer Phase schwingen und durch die beiden linearen Feldkomponenten des zirkularen Lichts angeregt werden.

Eine Bemerkung noch zur Bezeichnung. Es ist klarer statt von Übergängen von Kopplungen zu reden. Eine σ^+ -Kopplung erzeugt einen rechtsdrehenden Kreisstrom. Die Bedingung dafür ist,

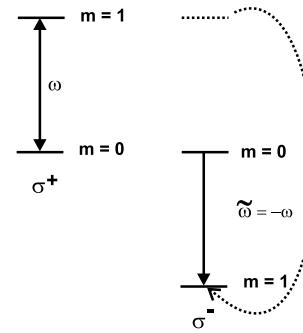
dass der energetisch höherliegende Zustand eine größere magnetische Quantenzahl hat. Eine Absorption von $m=0$ nach $m=1$ ist genauso ein σ^+ -Übergang wie eine Emission von $m=1$ zurück nach $m=0$.



Nicht auf Δm kommt es an, sondern darauf, welcher Zustand energetisch höher liegt:

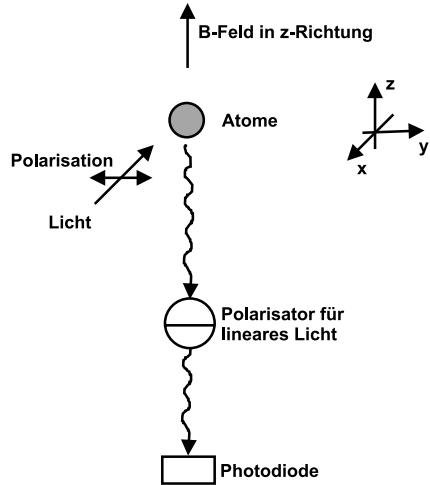
$E(m) > E(m-1) : \sigma^+$ rechter Kreisstrom
 $E(m) < E(m-1) : \sigma^-$ linker Kreisstrom

Verschiebt man den zunächst energetisch höher liegenden Zustand unter den zunächst tiefer liegenden Zustand, so wird die Verstimmung negativ und der Kreisstrom ändert seinen Drehzinn. Einen Vorzeichenwechsel in der Frequenz kann man formal in die Zeit stecken. Der Film läuft rückwärts und der Kreisstrom ebenfalls.

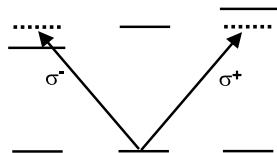


11.5 Hanle-Effekt

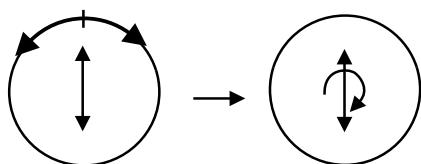
Eine interessante Situation erhält man, wenn die lineare Polarisation eines Lichtfeldes und ein von außen angelegtes homogenes Magnetfeld senkrecht zueinander stehen. Wie soll man die Quantisierungsachse legen? Entlang der Lichtpolarisation? Man hätte dann einen einfachen π -Übergang. Die Beschreibung der Energiezustände wäre aber kompliziert (siehe Zeeman-Effekt). Oder Parallel zum Magnetfeld? Dann wird die Beschreibung der angeregten Schwingung kompliziert. Hier zunächst einmal die experimentelle Situation.



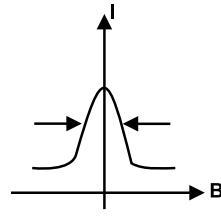
Wir legen die Quantisierungsachse in z-Richtung und interpretieren die vom Licht induzierte lineare Dipolschwingung als eine phasenrichtige Überlagerung eines links und eines rechtsdrehenden Kreisstroms gemäß einer Überlagerung aus σ^+ - und σ^- -Kopplung. Schaltet man nun das Magnetfeld hinzu, so werden die beiden oberen Zustände in ihrer Energie verschoben.



Die beiden Übergänge sind nicht mehr resonant und die induzierten Kreisströme rotieren nicht mehr mit derselben Geschwindigkeit. Die Relativphase der beiden Drehungen ändert sich mit der Zeit, und die lineare Dipolschwingung beginnt langsam wie eine Radarantenne zu rotieren.



Das emittierte Licht hat entsprechend eine lineare Polarisation mit drehender Richtung. Durch den Polarisator wird im zeitlichen Mittel nur noch ein Teil der Intensität durchgelassen.



Wie breit ist die Resonanz? Die Intensität hängt vom Winkel der "Radarantenne" relativ zum Polarisator ab:

$$I \sim \cos^2 \Delta\phi(t).$$

Der maximal erreichbare Drehwinkel wird aber von der Lebensdauer des angeregten Zustands begrenzt:

$$\Delta\phi = \Delta\omega \cdot \tau,$$

wobei $\Delta\omega$ gerade die durch den Zeeman-Effekt verursachte Verstimming ist. Zur Halbwertsintensität gehört also ein bestimmter Winkel $\Delta\phi_{1/2}$. Da die Lebensdauer eine feste Zeit ist, wird der Halbwertswinkel bei einer ganz bestimmten Frequenzverschiebung und dem dazugehörigen Magnetfeld erreicht:

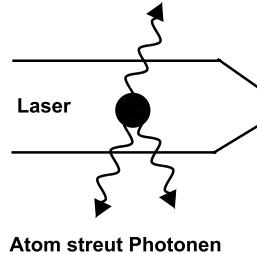
$$\Delta\omega_{1/2}(B) = \frac{1}{\tau} \Delta\phi_{1/2}.$$

Die Linienbreite hängt also direkt von der Lebensdauer des angeregten Zustandes ab, die so gemessen werden kann. Der Dopplereffekt stört hier nicht. Er verstimmt zwar auch die Übergänge relativ zum Licht, aber nicht relativ untereinander. Der Hanle-Effekt entsteht durch eine Quanteninterferenz zweier internen Zustände des Atoms.

Kapitel 12 Lichtkräfte

12.1 Strahlungsdruck

Licht kann Druck erzeugen. Im Photonenbild ist der Strahlungsdruck einfach zu verstehen.



Das Atom absorbiert Photonen aus dem Laserstrahl und erfährt dadurch einen Impulsübertrag. Die Emission erfolgt statistisch in alle Richtungen, wobei entgegengesetzte Richtungen gleich wahrscheinlich sind. Der mittlere Impulsübertrag pro Photon ist damit

$$\begin{array}{ll} \text{Emission} & \langle p \rangle = 0 \\ \text{Absorption} & \langle p \rangle = \hbar k. \end{array}$$

Die Kraft ergibt sich aus dem Übertrag pro Zeit, also aus dem pro Zeit auf das Atom übertragenen Impuls. Die Anzahl der Photonen die pro Zeit absorbiert werden ist identisch mit der Zahl die emittiert werden. Damit erhält man

$$F = \rho_{22} \gamma \hbar k$$

wobei die Besetzung des angeregten Zustands durch das Dichtematrixelement gegeben ist.

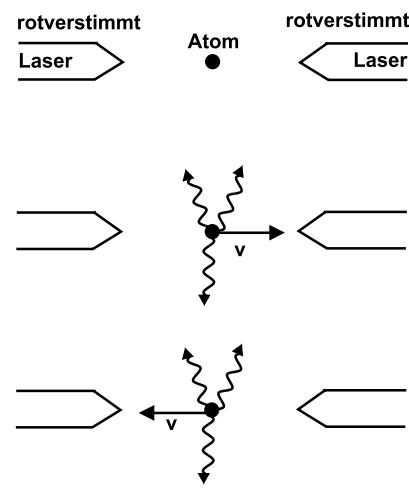
$$\rho_{22}(\delta) = \frac{\Omega^2}{4\delta^2 + \gamma^2 + 2\Omega^2}.$$

γ ist die Zerfallsrate des angeregten Zustandes. Die maximale Kraft erhält man in Resonanz ($\delta=0$) und für Sättigung ($\Omega > \gamma$):

$$F_{\max} = \frac{1}{2} \gamma \hbar k \approx 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}^2} \approx 10^5 \text{ g}$$

Man kann mit Strahlungsdruck kühlen, wenn man zwei entgegengesetzte orientierte Laserstrahlen verwendet, die gegenüber der atomaren Resonanz leicht "rot" d.h. zu niedrigen Frequen-

zen hin verstimmt sind. Es existiert dann eine Reibungskraft, also eine Kraft, die die Atome „bremst“.



Der Dopplereffekt stimmt das Atom in Resonanz mit dem Lichtstrahl auf den das Atom zufliegt. Das Atom erfährt immer "Gegenwind". Aufgrund des Doppler-Effekts wird die Besetzung des angeregten Zustands geschwindigkeitsabhängig und die Kraft lautet

$$F = \{ \rho_{22}(\delta + \mathbf{k}v) - \rho_{22}(\delta - \mathbf{k}v) \} \cdot \hbar k \cdot \gamma.$$

Entwickelt man nach v , so erhält man:

$$F = Rv + O(v^2)$$

mit dem Reibungskoeffizienten

$$R = \frac{-\Omega^2 \delta \hbar k^2 \gamma}{\left(\delta^2 + \left(\frac{\gamma}{2} \right)^2 + \frac{\Omega^2}{2} \right)^2}.$$

Die Reibungskraft kühlt die Geschwindigkeitsverteilung.

Es gibt allerdings auch Heizeffekte. Die Emission überträgt zwar im Mittel keinen Impuls, es gibt aber eine nichtverschwindende Standardabweichung von diesem Mittelwert. Das Atom wird von den Atomen zufällig herumgestoßen, ohne dass es eine gerichtete Geschwindigkeit aufbauen kann. Trotzdem steckt in dieser statistischen Bewegung Energie. Wir beginnen mit dem Ausdruck für den Impulsübertrag auf das Atom.

$$\vec{P}(t) = \sum_{i=1}^N \hbar \vec{k}_i ,$$

wobei

$$N = \rho_{22} \gamma t$$

die Anzahl der Emissionen in der Zeit t angibt. Die zu diesem Impuls gehörende kinetische Energie ist

$$E_{\text{kin}} = \frac{P^2(t)}{2m} = \frac{1}{2m} \left(\sum_{i=1}^N \hbar \vec{k}_i \right)^2$$

Der letzte Term hat die folgende Form:

$$\left(\sum_{i=1}^N \vec{k}_i \right)^2 = \sum_{i=1}^N \left(\vec{k}_i \right)^2 + \underbrace{\sum_{i,j} \alpha_{ij} \vec{k}_i \cdot \vec{k}_j}_{=0}$$

Der letzte Term verschwindet da das Skalarprodukt beliebige Werte annehmen kann und sich daher in der Summe herausmittelt. Der erste Term lässt sich vereinfachen

$$\sum_{i=1}^N \left(\vec{k}_i \right)^2 = k^2 \sum_{i=1}^N = k^2 \cdot N .$$

Damit erhält man:

$$E^{(1)}(t) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rho_{22} \cdot \gamma \cdot t .$$

Ein zweiter Heizmechanismus kommt durch das Schrotrauschen zustande. Im Laserstrahl fließen die Atome nicht im gleichen Abstand, sondern folgen einer Poissonstatistik. Die Anzahl von Photonen, die in einer Zeiteinheit durch eine Querschnittsfläche fliegen, fluktuiert um die mittlere Zahl \bar{N}

$$\Delta N = \sqrt{\bar{N}}$$

Der Strahlungsdruck fluktuiert entsprechend durch den unregelmäßigen Impulsübertrag bei der Absorption

$$\Delta P = \hbar k \Delta N = \hbar k \sqrt{\rho_{22} \gamma t}$$

Die damit verbundene Energie lautet:

$$E^{(2)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rho_{22} \gamma t$$

Die beiden Energieanteile beschreiben den Energieinhalt einer völlig ungeordneten Bewegung und stellt daher Wärme dar. Die gesamte Heizleistung beträgt daher:

$$W^+ = 2 \frac{dE^{(1)}}{dt} + 2 \frac{dE^{(2)}}{dt} = 2 \frac{\hbar^2 k^2}{m} \rho_{22} \gamma$$

Der Faktor zwei kommt durch die zwei Strahlen zustande.

Dieser Heizleistung steht eine Kühlleistung entgegen:

$$W^- = \frac{dE}{dt} = Fv = Rv^2$$

wobei v die mittlere atomare Geschwindigkeit ist. Im Gleichgewicht ist

$$\begin{aligned} W^+ &= W^- \\ Rv^2 &= 2 \frac{\hbar^2 k^2}{m} \rho_{22} \gamma \\ E_{\text{kin}} &= \frac{1}{2} mv^2 = \frac{\hbar^2 k^2 \rho_{22} \gamma}{R} \end{aligned}$$

Identifiziert man die kinetische Energie mit Wärmeenergie

$$E_{\text{kin}} = k_B T ,$$

so ergibt sich die Temperatur

$$k_B T = \frac{\hbar \gamma}{4} \frac{1 + \sqrt{I_{\text{sat}} + (2\%)^2}}{2\%} .$$

Die minimale Temperatur (Ableitung Null setzen)

$$T_{\text{min}} = \frac{\hbar \gamma}{2} \sqrt{1 + \sqrt{I_{\text{sat}}}}$$

erhält man bei der Verstimmung

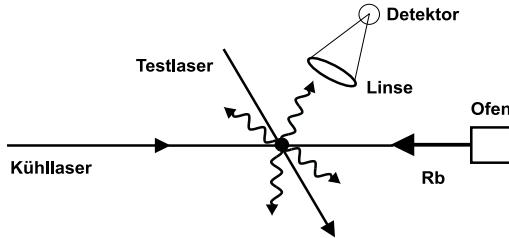
$$\delta = \frac{\gamma}{2} \sqrt{1 + \sqrt{I_{\text{sat}}}} .$$

Im Fall kleiner Intensitäten erhält man die "Doppler-Temperatur"

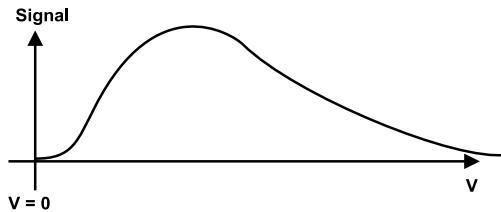
12.2 Magnetooptische Falle

$$T_d = \frac{\hbar\gamma}{2} \approx 130 \mu\text{K}$$

Experimentell wurde dies erstmals 1985 von S. Chu in Stanford realisiert. Man setzt Laser also zum Kühlen von Atomstrahlen ein.



Der Testlaser misst die Geschwindigkeitsverteilung mit Hilfe des Dopplereffekts.



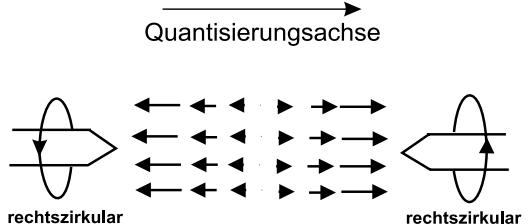
Durch Kühlen wird ein Teil der Atome abgebremst, wobei die Frequenz des Kühllasers verstimmt werden muss (chirped cooling).

Man kann mit Strahlungsdruck zwar kühlen aber nicht die Atome an einem Ort zusammenstreben. Dagegen steht das optische Earnshaw-Theorem. Im ladungs- und stromfreien Raum gilt im zeitlichen Mittel

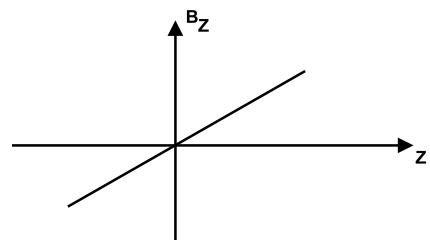
$$\vec{\nabla} \cdot \vec{S} = 0,$$

wobei \vec{S} der Poyntingvektor ist. Sofern der Strahlungsdruck, der auf ein Atom wirkt proportional zu \vec{S} ist, kann man Atome nicht fangen, da es keine Senke für den Strahlungsdruck geben kann. Der Strahlungsdruck kann nicht einfach an einem Punkt verschwinden, sondern muss irgendwo wieder aus der Falle "herausblasen". Eine Abhilfe ist eine räumlich inhomogene Kopplung von Atom und Licht.

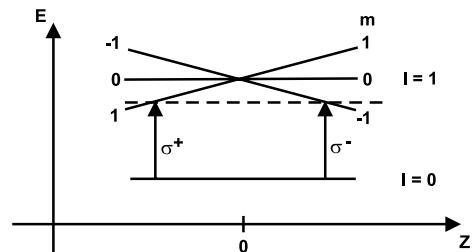
Betrachten wir ein hypothetisches Magnetfeld in z-Richtung mit wachsenden Betrag in beide vertikalen Richtungen.



oder als Plot

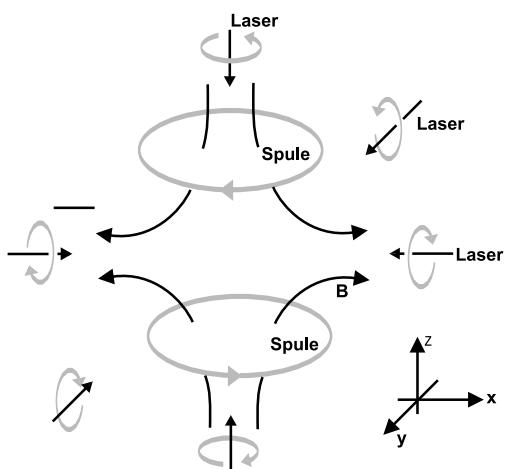


Betrachten wir ein Atom mit einem Grundzustand ($m=0$) und drei angeregten magnetischen Unterzuständen ($m=-1, 0, +1$). In einer solchen Situation werden die Atome abhängig von ihrem Ort durch den Zeeman-Effekt in die Resonanz mit dem entgegenkommenden Laserstrahl gestimmt.



Die z-Achse sei die Quantisierungsachse. Dann gibt es entlang der positiven z-Achse σ^- -Übergänge mit dem rechten Laser und entlang der negativen σ^+ -Übergänge mit dem linken Laser. Es entsteht also eine rücktreibende Kraft, die bei $B = 0$ verschwindet.

Dieses Prinzip lässt sich in drei Dimensionen realisieren durch Verwendung eines Anti-Helmholtz-Spulenpaars, also eines Helmholtz-Paars, mit invertiertem Strom in einer der beiden Spulen. Das resultierende sphärische Quadrupolfeld ist optimal geeignet.



Die Zahlen, die man mit einer solchen magnetooptischen Falle (MOT) erreicht sind beeindruckend. Typischerweise fängt man 10^7 - 10^9 Atome in der MOT bei einer Temperatur von 30-130 μK . Die atomare Dichte beträgt 10^{10} - 10^{11} cm^{-3} .

Sorgfältige Temperatur-Messungen ergaben Werte, die deutlich kleiner sind, als man es aufgrund von Dopplerkühlung erwarten würde. Es muss also noch weitere Kühlmechanismen geben. Sie basieren auf der Ausbildung konservativer Potentiale sogenannter optischer Potentiale.

12.3 Optische Potentiale

Optische Potentiale kommen durch Dipolkräfte zustande. Das Atom wird im Lichtfeld polarisiert. Je nach Verstimmung steht das Dipolmoment $\vec{\rho}$ parallel oder antiparallel zum induzierenden Feld. Mit dem Dipolmoment ist eine Energie U verbunden.

$$U = -\vec{\rho} \cdot \vec{E} > 0 \quad \text{für Blauverstimmung}$$

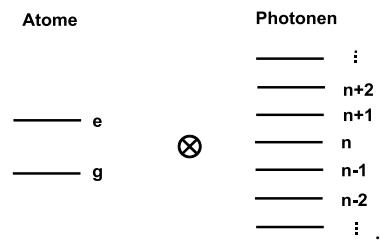
$$U = -\vec{\rho} \cdot \vec{E} < 0 \quad \text{für Rotverstimmung.}$$

Im inhomogenen Lichtfeld können Kräfte entstehen.

$$U = -\vec{\rho} \cdot \vec{E} = \pm |\rho| |E| = \pm \rho \sqrt{I(r)}$$

$$F = -\vec{\nabla} U = \pm \rho \nabla \sqrt{I(r)}.$$

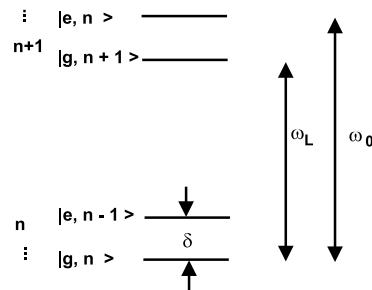
Zur quantitativen Beschreibung verwendet man das „dressed state“ Bild. Betrachten wir zunächst den Hilbertraum in dem ein Zweiniveaum Atom zusammen mit den Photonen einer Lasermode lebt. Das Atom hat zwei mögliche Energiewerte, die Mode hat abzählbar unendlich viele Energiewerte entsprechend der Anzahl der Photonen in der Mode. Ohne Kopplung zwischen Atom und Licht erhält man also den Tensorräum



Für die Gesamtenergie erhält man die Summe der Energien. Die Energieniveaus werden zunächst sinnvoll sortiert. Abhängig von der Verstimmung und der Zahl n von Photonen im Resonator erhält man vier Zustände, zwischen denen optische Übergänge möglich sind. Für rote Verstimmung sieht das folgendermaßen aus:

rote Verstimmung

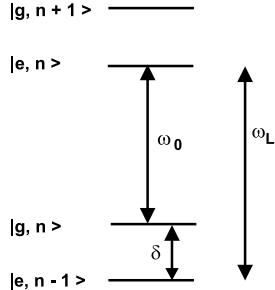
$$\delta = \omega_L - \omega_0 < 0$$



Für blaue Verstimmung sortieren sich die Zustände so:

blaue Verstimmung
 $\delta = \omega_L - \omega_0 > 0$

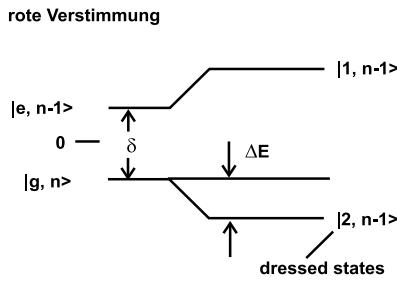
$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar}{2} - \frac{E}{\hbar} & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & -\frac{\hbar}{2} - \frac{E}{\hbar} \end{vmatrix} = 0$$



Jetzt berücksichtigen wir die Kopplung. Folgende Zustände werden dadurch gemischt:

$$\begin{array}{l} |e, n-1\rangle \text{ und } |g, n\rangle \\ |g, n+1\rangle \text{ und } |e, n\rangle \\ |g, n\rangle \text{ und } |e, n-1\rangle \\ |e, n\rangle \text{ und } |g, n+1\rangle \end{array} \left. \begin{array}{l} \text{rote Verstimmung} \\ \text{blaue Verstimmung} \end{array} \right\}$$

Betrachten wir die neuen Energien für ein Dublett bei roter Verstimmung:



Wie groß ist ΔE ? Für den Hamilton-Operator setzen wir ein Zweiniveausystem mit Kopplung an,

$$H = \hbar \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix},$$

wobei das Kopplungsmatrixelement durch die Rabi-Frequenz gegeben ist,

$$\Omega^2 = \gamma^2 \frac{1}{2} \frac{I}{I_{\text{Sat}}}.$$

Wir diagonalisieren den Hamilton.

liefert

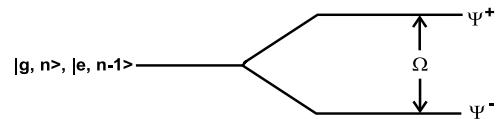
$$E_{1,2} = \pm \frac{\hbar}{2} \sqrt{\Omega^2 + \delta^2},$$

und damit die Verschiebung

$$\Delta E = \frac{1}{2} \hbar \delta \cdot \left(-1 + \sqrt{\left(\frac{\Omega}{\delta} \right)^2 + 1} \right).$$

In Resonanz ($\delta=0$) erhält man

$$\Delta E = \frac{1}{2} \hbar \Omega.$$



Die Zustände werden ähnlich wie beim Spin im Magnetfeld berechnet. Der Mischungswinkel lautet wie oben

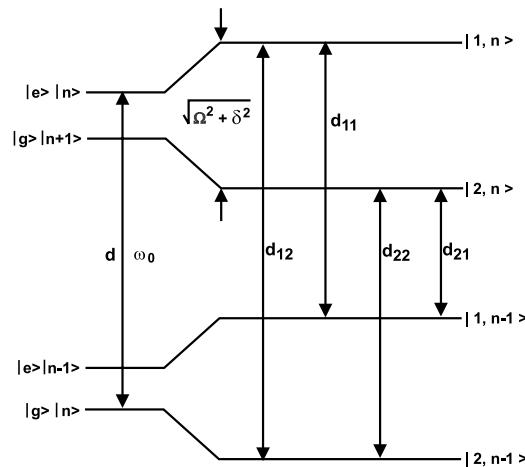
$$\tan 2\theta = \frac{\Omega}{\delta}.$$

Die Zustände sind dann

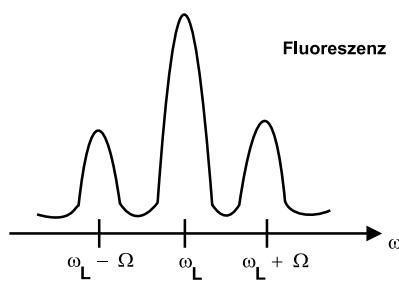
$$\begin{aligned} |1, n-1\rangle &= \cos \theta |e, n-1\rangle + \sin \theta |g, n\rangle \\ |2, n-1\rangle &= -\sin \theta |e, n-1\rangle + \cos \theta |g, n\rangle \end{aligned}$$

Das Atom streut Licht kontinuierlich aus der Lasermode. Die möglichen spontanen Zerfälle ergeben sich aus dem "dressed state" Energieschema. Wir können immer Zustandpaare zusammenstellen in denen das Atom im selben Zustand ist. Dies gilt für die Zustände $|1, n-1\rangle$ und $|1, n\rangle$, sowie für das Paar $|2, n-1\rangle$ und $|2, n\rangle$. Eine andere Möglichkeit sich die physikalische Bedeutung der Übergänge klarzumachen besteht darin zunächst nur eine schwache Mischung anzunehmen. Die "dressed states" sind dann sehr ähnlich den "ungedreßten" Zuständen. Im Zustand $|2, n\rangle$ beispielsweise befindet sich das Atom hauptsächlich im Grund-

zustand bei gleichzeitig $n+1$ Photonen in der Mode. Der Übergang d_{11} beläßt das Atoms also weitgehend im Grundzustand und benutzt es nur um ein Photon aus der Lasermode heraus zu streuen. Solche Übergänge nennt man auch spontane Raman-Übergänge. Sie sind eine spezielle Form von Zweipohtonenübergängen. Beim Übergang d_{21} geht ein Atom von einem Grundzustand in einen hauptsächlich angeregten Zustand über, unter Absorption zweier Photonen aus der Lasermode und Abgabe eines spontanen Photons an die Umwelt. Dies ist ein Dreiphotonenübergang. Ein weiterer Dreiphotonenübergang ist der d_{12} Übergang. Hier wird ein Photon der Lasermode absorbiert und zusammen mit einem spontanen Photon remittiert.



Betrachtet man das Streulicht spektral aufgelöst so sieht man die drei Frequenzen des sogenannten Mollow-Triplets.



Für eine quantitative Beschreibung benötigen wir die Besetzungen der Zustände. Sie ergeben sich durch die möglichen spontanen Zerfälle und deren Stärke also durch die Lebensdauer der „dressed states“. Die spontanen Übergänge sind proportional zum Quadrat der Matrixelemente. Die Matrixelemente für die verschiedenen möglichen optischen Übergänge müssen in der „dressed state“ Basis berechnet werden

$$d_j := \langle j, n-1 | D | i, n \rangle.$$

Man erhält für die vier möglichen Übergänge

$$\begin{aligned} d_{12} &= d \cos^2 \theta & \omega_L + \Omega \\ d_{21} &= -d \sin^2 \theta & \omega_L - \Omega \\ d_{11} &= d \sin \theta \cos \theta & \omega_L \\ d_{22} &= -d_{11} & \omega_L \end{aligned}$$

Da uns im folgenden nur die relativen Übergangsstärken interessieren benötigen wir keinen expliziten Ausdruck für das Matrixelement d des ungekoppelten Atoms. Die spontanen Zerfallsraten Γ_{ij} sind proportional zu den Matrixelementen d_{ij} .

$$\Gamma_{ij} \propto d_{ij}^2$$

Wir fassen alle Zustände mit gleichem atomaren Anteil zusammen und erhalten zwei Gruppen von Zuständen. Innerhalb einer Gruppe sind alle Zustände gleichbesetzt, also beispielsweise alle Zustände $|2, q\rangle$ mit $q \in \mathbb{N}$. Genauso sind alle Zustände $|1, q\rangle$ gleichbesetzt. Es genügt also jeweils einen Zustand als Vertreter seiner Gruppe zu betrachten. Die Besetzung π_1 und π_2 dieser beiden Zustände erhält man durch einen Ratengleichungsansatz.

$$\begin{aligned} \dot{\pi}_1 &= -\Gamma_{12}\pi_1 + \Gamma_{21}\pi_2 \\ \dot{\pi}_2 &= -\Gamma_{21}\pi_2 + \Gamma_{12}\pi_1 \end{aligned}$$

Für die Gleichgewichts-Populationen π_1 und π_2 lauten ($\dot{\pi}_1 = \dot{\pi}_2 = 0$):

$$\begin{aligned} \pi_1 &= \frac{\Gamma_{21}}{\Gamma_{12} + \Gamma_{21}} = \frac{\sin^4 \theta}{\sin^4 \theta + \cos^4 \theta} \\ \pi_2 &= \frac{\Gamma_{12}}{\Gamma_{12} + \Gamma_{21}} = \frac{\cos^4 \theta}{\sin^4 \theta + \cos^4 \theta} \end{aligned}$$

Für die Linienstärke der drei Komponenten ergibt sich daraus:

$$\begin{aligned} I(\omega_L + \Omega) &= \Gamma_{12}\pi_1 \\ I(\omega_L - \Omega) &= \Gamma_{21}\pi_2 \\ I(\omega_L) &= \Gamma_{11}\pi_1 + \Gamma_{22}\pi_2 = \Gamma \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \theta \end{aligned}$$

Das optische Potential erhält man jetzt durch

$$U = \pi_1 E_1 + \pi_2 E_2,$$

$$\frac{U}{\hbar} = \frac{1}{2} \sqrt{\Omega^2 + \delta^2} \cdot \frac{\sin^4 \theta - \cos^4 \theta}{\sin^4 \theta + \cos^4 \theta}$$

wobei

$$\tan 2\theta = \frac{\Omega}{\delta}.$$

Für die Kraft muß man etwas länger rechnen was wir hier nicht tun. Man muß dazu den Gradienten des Potentials ermitteln mit dem Ergebnis:

$$F = -\nabla U = \dots = -\nabla \frac{\hbar \delta}{2} \ln(1 + S)$$

wobei

$$S = \frac{1}{2} \frac{\Omega^2}{\delta^2 + (\frac{\Omega}{2})^2}.$$

Für hohe Intensitäten und kleine Verstimmung $\Gamma \ll \delta \ll \Omega$ ist die maximale Kraft

$$F_{\max} = \frac{1}{2} \hbar k \delta.$$

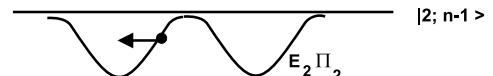
Im Vergleich zum Strahlungsdruck ist die Dipolkraft um den Faktor δ/γ stärker.

F ist proportional zu δ und wechselt beim Null-durchgang von δ sein Vorzeichen. Die Netto-kraft weist bei roter Verstimmung in den Bauch, bei blauer in den Knoten.

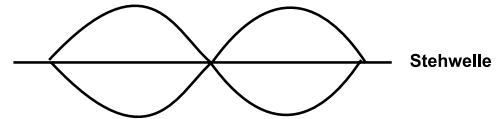
rote Verstimmung



|1; n-1 >



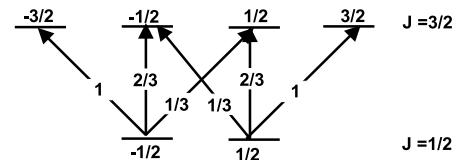
|2; n-1 >



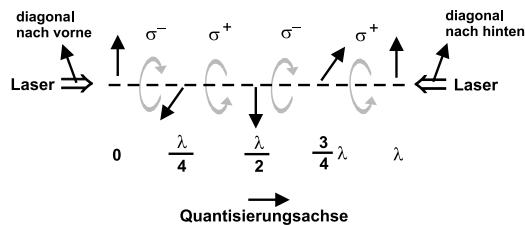
Stehwelle

12.4 Kühlen unter die Dopplergrenze

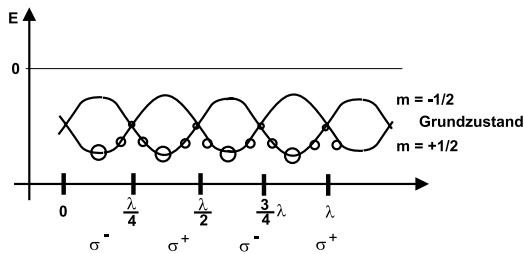
Die optischen Potentiale sind konservativ, d.h. zunächst unabhängig von der Geschwindigkeit der Atome. Eine Geschwindigkeitsabhängigkeit bekommt man, für Mehrniveautome. Betrachten ein Atom mit einem $j=1/2$ nach $j=3/2$ Übergang. Die relative Stärke der verschiedenen Übergänge sind durch das Quadrat der Clebsch-Gordon-Koeffizienten gegeben, die in der Abbildung an den Übergängen angegeben sind. Der Übergang von $m=1/2$ nach $m=3/2$ ist beispielsweise drei mal stärker als der Übergang von $m=-1/2$ nach $m=1/2$.



Wir setzen ein solches Atom in eine Stehwelle, die durch entgegengesetzte Laserstrahlen mit rechtwinklig zueinander orientierter Polarisierung erzeugt wird. Dies ist die sogenannte lin-perp-lin-Situation (Englisch: linear perpendicular linear). Die Stehwelle hat eine konstante Intensität also keine Knoten und Bäuche sondern eine variable Polarisierung. Über die Strecke einer halben Wellenlänge verändert sich die Polarisierung von linear-senkrecht nach zirkular-links zu linear-waagrecht nach zirkular-rechts.



Stellen wir uns vor wir bringen das Atom an einen bestimmten Ort in der Stehwelle. Wir nehmen zunächst an, das Atom befindet sich im $m=1/2$ -Grundzustand. Im Bereich rechtszirkularer Polarisation koppelt der Zustand an den $m=3/2$ angeregten Zustand mit relativer Stärke 1. Durch diese Kopplung wird der Grundzustand durch die oben besprochene Lichtverschiebung energetisch abgesenkt. In Bereichen linearer Polarisation finden π -Übergänge statt mit $2/3$ kleinerer Kopplung und entsprechend geringerer Energieabsenkung. Bei linkszirkularer Polarisation ist die Kopplung noch schwächer. Das optische Potential variiert also entlang der z-Achse aufgrund der unterschiedlichen Clebsch-Gordon-Koeffizienten.



Nun müssen wir noch überlegen, in welchem Zustand sich das Atom befindet. In Bereichen zirkularer Polarisation, wird das Atom optisch entweder in den $m=+1/2$ oder den $m=-1/2$ Grundzustand umgepumpt und oszilliert dann auf den Übergängen mit Clebsch-Gordon-Koeffizient 1. Bewege ich das Atom sehr langsam quasi "von Hand" durch die Stehwelle, so wird das optische Pumpen also immer dazu führen, dass sich das Atom im energetisch niedrigsten Zustand befindet. Es wird das optische Potential nicht spüren. Dazu muss die Bewegung in der Stehwelle so langsam sein, dass das Atom genügend Zeit zum Umpumpen hat. Bewegt sich das Atom zu schnell, so läuft es eine bestimmte Zeit gegen das Potential den Berg hinauf, bevor es in den energetisch niedrigeren Zustand umgepumpt wird. Wie Sisyphus wird dem Atom durch Umpumpen die angesammelte potentielle Energie schlagartig entzogen. Das Atom befindet sich wieder im Tal und beginnt

von neuem. Die Energie wird der Bewegungsenergie des Atoms entnommen solange bis es ruht. Die nahezu ruhenden Atome sammeln sich in den Tälern an und können dort gefangen werden (optische Gitter). Der Energieentzug entspricht einer geschwindigkeitsabhängigen Kraft. Sie hat für eine bestimmte Geschwindigkeit v_c ein Maximum. Bei zu hohen Geschwindigkeiten durchläuft das Atom innerhalb einer optischen Umpumpzeit eine ganze Reihe von Tälern und Bergen. Es zerfällt unkontrolliert entweder in ein Tal oder auf einen Berg und der Effekt mittelt sich heraus. Ohne Rechnung gebe ich hier nur die Lösung an:

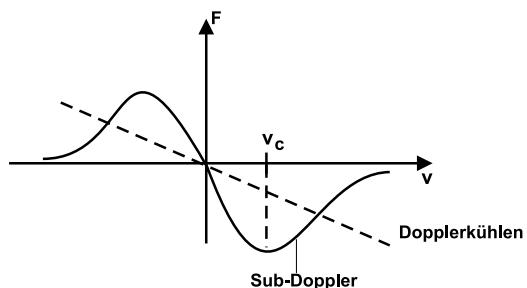
$$F = \frac{-\alpha}{1 + \left(\frac{V}{V_c}\right)^2}$$

mit dem Reibungskoeffizient

$$\alpha = 3\hbar k^2 \frac{\delta}{\gamma}$$

und der kritischen Geschwindigkeit

$$kv_c = \frac{1}{9} \cdot \gamma \cdot \frac{I_{\text{Sat}}}{4(\delta\gamma)^2 + 1} .$$



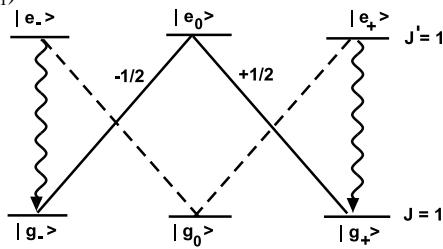
Unterhalb einer kritischen Geschwindigkeit ist die Reibungskraft wesentlich größer als die des einfachen Dopplerkühlens. Wenn die Dopplerkühlung beginnt ineffizient zu werden setzt das Polarisationsgradientenkühlen ein. Dies erklärt die niedrigen Temperaturen in einer MOT. Die Technik ist außerdem geeignet, Atome nach Abschalten der MOT innerhalb weniger Millisekunden auf Temperaturen von wenigen Mikrokelvin abzukühlen. Kurze Kühlzeiten sind wichtig, da sonst die Atome durch die Schwerkraft beschleunigt nach unten wegfallen.

12.5 Kühlen unter die Rückstoßgrenze

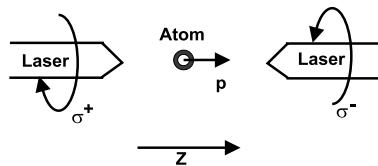
Kann man noch besser Kühlen? Zunächst erscheint es kaum möglich die Rückstoßgrenze zu unterschreiten. Sie entspricht der Energie, die ein ruhendes Atom aufnimmt, wenn es ein Photon absorbiert oder emittiert.

$$k_B T_{rec} = \frac{p_{rec}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Da bei optischen Methoden immer Photonen ausgetauscht werden scheint dies die ultimative Grenze. Sie liegt für typische Atome im Bereich weniger Mikrokelvin. Es gibt jedoch zwei Methoden, mit denen man unter die Rückstoßgrenze kühlen kann. Eine wollen wir besprechen. Der Trick besteht darin Atome solange mit dem Licht zu koppeln und herumzustoßen, bis sie zufällig zum Stillstand kommen. Für diese Atome muss die Ankopplung an das Licht verschwinden. Sie müssen in einen "Dunkelzustand" übergehen in dem sie das Licht nicht mehr streuen. Da nur Atome bei $v=0$ dunkel werden sollen geht es um geschwindigkeitsabhängiges Dunkelzustandskühlen oder englisch Velocity selective coherent population trapping (vscpt). Betrachten wir einen $j=1, j=1$ Übergang eines Atoms (z.B. Triplet-Helium 2^3S_1 nach 2^3P_1)



Bringt man das Atom in eine $\sigma-\sigma+$ -Stehwelle so werden nur σ -Übergänge getrieben.



Nach wenigen Pumpzyklen befindet sich das Atom in einem sogenannten Λ -System bestehend aus den Zuständen g_- , g_+ und e_0 . Da der Zerfall von e_0 nach g_0 verboten ist, kann das Atom nicht mehr aus dem Λ -System in das V-

System entkommen und wir haben es mit einem effektiven Dreiniveausystem zu tun. Wechselt das Atom von einem der drei Zustände in einen anderen, so ändert sich auch sein Impuls. Wir können also auch die möglichen Impulszustände in Dreierklassen einteilen und erhalten als Basis für die quantenmechanische Beschreibung folgende drei Zustände

$$|g_-, p - \hbar k\rangle = |g_-\rangle \otimes |p - \hbar k\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|e_0, p\rangle = |e_0\rangle \otimes |p\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

und

$$|g_+, p + \hbar k\rangle = |g_+\rangle \otimes |p + \hbar k\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

In dieser Basis lautet der Hamilton:

$$H = \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} (p - \hbar k)^2 & 0 & 0 \\ 0 & p^2 & 0 \\ 0 & 0 & (p + \hbar k)^2 \end{pmatrix} + \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\hbar \Omega}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Der erste Term ist die kinetische Energie des Atoms, der zweite Term beschreibt die innere Energie und der dritte die Kopplung mit der Stehwelle. Die negativen Vorzeichen entstehen durch die negativen Clebsch-Gordon-Koeffizienten für die entsprechenden Übergänge. Wir betrachten jetzt folgende Linearkombination von Zuständen. Der "non coupling state" (nicht koppelnde Zustand) lautet

$$\begin{aligned}
|NC\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_-, p - \hbar k\rangle + |g_+, p + \hbar k\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

und der "coupling state" (koppelnde Zustand)

$$\begin{aligned}
|C\rangle &:= \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_-, p - \hbar k\rangle - |g_+, p + \hbar k\rangle) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Untersuchen wir nun wie ein Atom in einem der beiden Zustände mit dem Licht wechselwirkt. Wir berechnen dazu die Matrixelemente des Kopplungsoperators. Zunächst stellen wir fest, dass

$$H_{\text{ww}} |NC\rangle = 0$$

da

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

(Die Minuszeichen kommen durch die Clebsch-Gordon-Koeffizienten zustande). Damit verschwinden alle möglichen Übergangsmatrixelemente

$$\begin{aligned}
\langle C | H_{\text{ww}} | NC \rangle &= 0 \\
\langle e_0 | H_{\text{ww}} | NC \rangle &= 0.
\end{aligned}$$

Ein Atom, das einmal im nichtkoppelnden Zustand sitzt kommt dort nicht mehr heraus. Für den Koppelnden Zustand gilt

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

und damit insbesondere

$$\begin{aligned}
\langle e_0, p | H_{\text{ww}} \cdot |C\rangle^2 &= \left| \frac{\hbar\Omega}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ 0 \end{pmatrix} \right|^2 \\
&= \frac{1}{2} (\hbar\Omega)^2
\end{aligned}$$

Der nichtkoppelnde Zustand kann also nach e_0 angeregt werden. Von dort zerfällt er in einen der beiden Grundzustände oder in beliebige Linearkombinationen. Trifft er zufällig den nichtkoppelnden Zustand, so ist das Spiel aus und das Atom kann kein Licht mehr streuen, obwohl es mitten im Lichtfeld sitzt. Die Besonderheit der Lage wird vielleicht deutlicher, wenn man sich klar macht, dass das Atom wieder leuchten würde, wenn man Licht wegnimmt, nämlich eine der beiden laufenden Wellen ausschaltet.

Wie kommt jetzt die atomare Geschwindigkeit ins Spiel? Wir müssen jetzt betrachten, was der erste Teil des Hamiltons mit dem koppelnden und dem nichtkoppelnden Zustand macht. Mit anderen Worten, bleibt der Zustand dunkel, wenn sich das Atom bewegt?

Wir berechnen also das Übergangsmatrixelement für den nichtkoppelnden Zustand unter Wirkung des Operators für die kinetische Energie

$$\begin{aligned}
\langle C | H_A | NC \rangle &= \frac{1}{2} \frac{1}{2m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (p - \hbar k)^2 & p^2 & (p + \hbar k)^2 \\ & p^2 & \\ & & (p + \hbar k)^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{4m} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (p - \hbar k)^2 \\ 0 \\ (p + \hbar k)^2 \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{4m} ((p - \hbar k)^2 - (p + \hbar k)^2) \\
&= -\frac{p\hbar k}{m}
\end{aligned}$$

Für ein Atom mit Impuls p koppelt $|NC\rangle$ und $|C\rangle$. Die Wechselwirkungsfrequenz ist

$$\hbar\omega := \frac{p\hbar k}{m} = 2\sqrt{E_{\text{rec}} E_{\text{kin}}}.$$

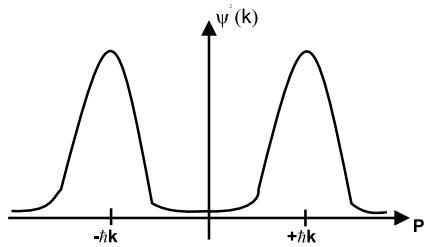
Mit dieser Frequenz oszilliert das Atom zwischen dem koppelnden und dem nichtkoppelnden Zustand.

den Zustand hin und her. Für langsame Atome nimmt die Frequenz ab und für ruhende Atome ist der Zustand $|NC, p = 0\rangle$ ist wirklich dunkel:

$$|NC, p = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|g_-, -\hbar k\rangle + |g_+, +\hbar k\rangle)$$

Das Atom wird also in einen Zustand gepumpt, der eine lineare Superposition zweier Impulseigenzustände ist. Der Impulserwartungswert ist Null, mit einer Standardabweichung von $\hbar k$.

Streng genommen hat man nach unendlichen langen Zeiten zwei δ -Funktionen an den Positionen $-\hbar k$ und $+\hbar k$ im Impulsraum.



Tatsächlich beobachtet man ausgeschmierte Verteilungen, deren Breite die Resttemperatur wiedergeben. Da es sich um ein statistisches Verfahren handelt werden nicht alle Atom gekühlt. Ein erheblicher Anteil kann auch zufällig durch eine ungünstige Folge von Photonenstreuungen beschleunigt und aus der atomaren Resonanz verstimmt werden. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein solches Atom im Impulsraum den Weg zurück zum Ursprung findet sind vernachlässigbar klein. Da kein Dunkelzustand perfekt dunkel ist und durch Störungen, wie z.B. das Erdmagnetfeld wieder in den koppelnden Zustand übergehen kann sind nach unendlich langer Zeit tatsächlich alle Atome in Richtung großer Impulse verschwunden. Zwischenzeitlich sammelt sich aber doch ein Teil der Atom bei niedrigen Impulsen an. Man erreicht für diese Fraktion Temperaturen bis zu wenigen nK.