

Doppler-freie Spektroskopie von Rb

Hannah Bleiner, Valentin Dichtl, Markus Lippitz

9. Juli 2024

Inhaltsverzeichnis

Motivation und Ziele	5
Arbeitsaufträge	5
Rubidium	5
Laserspektroskopie	7
Fabry-Pérot Interferometer	8
Doppler-Verbreiterung	9
Sättigung	9
Dampfdruckkurve und Teilchenzahldichte	11
Sättigungsspektroskopie	11
Balanced Detector	12
Justage optischer Elemente	12
Versuchsaufbau und dessen Justage	13
Programm zur Experimentsteuerung	15
Messungen	16
Doppler-verbreitertes Spektrum	17
Doppler-freies Spektrum	17
Temperaturabhängigkeit	17
Arbeitsaufträge	17
Anhang: Addition von Drehimpulsen	19
Anhang: Anpassen eines Modells	23

Die neueste Version dieser Anleitung befindet sich auf github.¹

¹ <https://github.com/Lippitz-Lab>

Doppler-freie Spektroskopie von Rb

Motivation und Ziele

- Dieses Experiment zeigt, wie die Energie der Zustände in Atomen und die Übergänge zwischen ihnen mit Hilfe der Quantenmechanik korrekt beschrieben werden können. Es ist ein Beispiel für quantenmechanische Drehimpulsaddition in Aktion.
- Im Experiment werden Energieabstände zwischen Übergängen in Rubidiumatomen gemessen, die viel kleiner sind als die Energie des Übergangs selbst. Dabei macht man sich den Umstand zunutze, dass man nur relative, nicht aber absolute Energien genau messen muss.
- Die zu messenden Energieabstände sind so klein, dass die thermische Bewegung der Atome zu einer Doppler-Verschiebung führt, die alles überdecken würde. Im Experiment verwenden wir eine nichtlineare optische Methode, um nur Atome zu beobachten, die sich relativ zum Laserstrahl nicht bewegen.

Arbeitsaufträge

- Messen Sie ein Doppler-freies Spektrum der D2-Linien von Rubidium und geben Sie die zugehörigen Übergänge an.
- Bestimmen Sie den Dipol- und den Quadrupol-Term der Hyperfeinstrukturkonstanten (inkl. Messunsicherheit).
- Messen Sie das Doppler-verbreiterte Absorptionsspektrum bei verschiedenen Temperaturen und modellieren Sie die Linienform.
- Bonus: Untersuchen Sie den Einfluss der Leistung von Abfrage- und Sättigungsstrahl.
- Bonus: Versuchen Sie, möglichst schmale Linien zu erreichen.
- Bonus: Vergleichen Sie die Amplituden der Linien mit einem passenden Modell.

Rubidium

Rubidium (Rb) ist ein Alkalimetall und steht im Periodensystem in der ersten Hauptgruppe. Die Elektronenkonfiguration ist $[\text{Kr}]5s^1$. Rubidium hat also ein 'Leuchtelektron' und ist damit sehr ähnlich zu Wasserstoff.

In diesem Experiment untersuchen Sie die Anregung dieses 5s-Elektrons in die p-Schale. Dabei ändert sich die Drehimpulsquantenzahl des Elektrons von $l = 0$ nach $l = 1$. Aufgrund der Spin-Bahn-Kopplung spaltet sich der Zustand $l = 1$ in zwei Zustände auf, die sich in der relativen Orientierung von Elektronenspin und Bahndrehimpuls unterscheiden, was zu einem unterschiedlichen Gesamtdrehimpuls j führt.

Die meisten Atome haben mehr als ein Elektron in der äußeren Schale, so dass man Spin, Bahn- und Gesamtdrehimpuls aller Elektronen addiert und mit den großen Symbolen bezeichnet. Ich benutze S , L und J als Bezeichnung der Quantenzahl und \mathbf{S} , \mathbf{L} und $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ als Operator. Diese drei Quantenzahlen und die Hauptquantenzahl $n = 5$ werden im spektroskopischen Symbol der Form $n^{2S+1}L_J$ kodiert. Der Grundzustand ist $5^2S_{1/2}$. Die zwei angeregten Zustände sind $5^2P_{1/2}$ und $5^2P_{3/2}$. Die Übergänge werden als D1- bzw. D2-Linien bei den Wellenlängen 794,98 nm (D1) und 780,24 nm (D2) bezeichnet.

Der Energieunterschied zwischen $5^2P_{1/2}$ und $5^2P_{3/2}$ ist jedoch für den Versuchsaufbau viel zu groß. Wir betrachten nur einen dieser beiden Übergänge, aus technischen Gründen² den höherenergetischen nach $5^2P_{3/2}$, also die D2-Linie. Nun kommt aber der Kernspin \mathbf{I} ins Spiel. Auch der Kernspin ist ein magnetisches Moment, und die Orientierung des Kernspins relativ zu den anderen magnetischen Momenten liefert einen Energiebeitrag, die Hyperfeinstruktur, ganz analog zur oben besprochenen Feinstruktur. Aus der Kopplung mit dem elektronischen Gesamtdrehimpuls \mathbf{J} ergibt sich somit ein Gesamtdrehimpuls $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}$.

Der Kernspin von Rubidium beträgt je nach Isotop $I = 5/2$ (^{85}Rb) oder $I = 3/2$ (^{87}Rb). Somit kann F je nach elektronischem Zustand und Isotop verschiedene Werte annehmen. Für den Grundzustand ^{85}Rb gilt $J = 1/2$ und $I = 5/2$, also $F = 2$ oder $F = 3$ (^{87}Rb : $F = 1$ oder 2). Für den angeregten Zustand der D2-Linie ($5^2P_{3/2}$) kann F jeden der Werte 1, 2, 3 oder 4 annehmen (^{87}Rb : $F = 0$ bis 3). Die Auswahlregeln sind analog zu denen des Gesamtdrehimpulses \mathbf{J} , d.h. $\Delta F = 0, \pm 1$.

Die Wechselwirkung des Kernspins mit dem Elektron kann man analog der Spin-Bahn-Kopplung berechnen. Die Dipol-Wechselwirkung liefert

$$\Delta E_{\text{dipol}} = A_{\text{HFS}} \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} = \frac{\hbar A_{\text{HFS}}}{2} K \quad (1)$$

mit A_{HFS} der magnetische Dipol-Konstante der Hyperfeinstruktur und

$$K = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1) \quad (2)$$

Falls der Kernspin $I > 1/2$ ist, und gleichzeitig die Ladungsverteilung der Elektronen einen Gradienten am Ort des Kerns liefert, was bei $J > 1/2$ der Fall ist, dann kommt noch eine Quadrupol-Wechselwirkung hinzu:

$$\Delta E_{\text{quadrupol}} = \hbar B_{\text{HFS}} \frac{\frac{3}{2}K(K+1) - 2I(I+1)J(J+1)}{4I(2I-1)J(2J-1)} \quad (3)$$

Dieser Term ist in der Amplitude kleiner, kann aber im Experiment nicht vernachlässigt werden.

Damit haben wir alles, um das quantenmechanisch vorhergesagte Hyperfeinstruktur-Spektrum der D2-Linie von Rubidium zu berechnen. Abbildung 2 zeigt das Ergebnis auf einer absoluten Frequenz- bzw. Wellenlängengachse. Das Verhältnis des kleinsten Frequenzabstandes zur absoluten

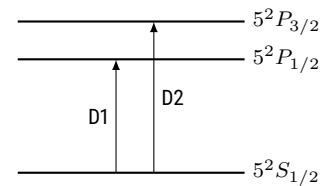


Abbildung 1: D1- und D2-Linie von Rubidium.

² siehe CD Player

	⁸⁵ Rb	⁸⁷ Rb
ν_{D2}	384 230 406.4 MHz	384 230 484.5 MHz
A_{HFS} für $5^2S_{1/2}$	1 011.9 MHz	3 417.3 MHz
A_{HFS} für $5^2P_{3/2}$	25.0 MHz	84.7 MHz
B_{HFS} für $5^2P_{3/2}$	25.8 MHz	12.5 MHz

Tabelle 1: Relevante Konstanten zur Berechnung der Übergangsenergien, aus Steck, 2013, 2015

Frequenz beträgt etwa 10^{-7} . Dies ist die erforderliche Auflösung eines Spektrometers, mit dem sowohl die absoluten Frequenzen / Wellenlängen als auch die Abstände der Übergänge bestimmt werden können. Gute Gitterspektrometer erreichen etwa 10^{-5} oder 0.02 nm. Daher gehen wir in diesem Experiment davon aus, dass die Wellenlänge des Übergangs grob bekannt ist (also ca. 780 nm) und messen nur die Abstände zwischen den Übergängen bzw. ein Spektrum mit einer willkürlichen Lage des Frequenznullpunkts.

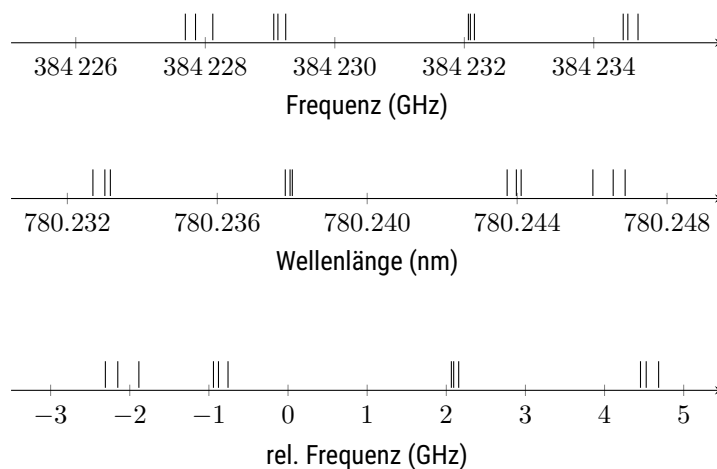


Abbildung 2: Lage der Übergänge auf einer absoluten Frequenz- bzw. Wellenlängenachse.

Abbildung 3: Lage der Übergänge auf einer relativen Frequenzachse mit willkürlichem Nullpunkt.

Zur Vorbereitung Nur sehr selten ist die erste Messung erfolgreich. Sie werden verschiedene Parameter optimieren müssen. Daher ist es notwendig, die Messung sofort soweit auszuwerten, dass der Optimierungsbedarf erkannt werden kann. In den 'Fragen zur Vorbereitung' werden Sie daher schrittweise eine Testmessung auswerten.

Zur Vorbereitung

1. Zeichnen Sie ein Diagramm, das die energetische Lage der relevanten Zustände und die erlaubten Übergänge skizziert. Geben Sie dabei sowohl die spektroskopische Bezeichnung als auch die Quantenzahlen an.
2. Berechnen Sie im Experiment erwarteten Linien-Positionen und Linien-Abstände. Zur Kontrolle: der kleinste Abstand sollte 29.4 MHz betragen (ohne die unten eingeführten cross-over-peaks).

Vorbereitung

Laserspektroskopie

Die Kernidee der Laserspektroskopie besteht darin, das Spektrum des Lichts nicht erst nach der Probe in einem Spektrometer möglichst genau zu bestimmen, sondern bereits die Probe mit einem Laser als Lichtquelle mit nur einer einzigen spektral schmalen Linie anzuregen. Die Frequenz dieser Laserlinien

wird dann schrittweise verändert und jeweils die Transmission der Probe bestimmt, hier also die Transmission durch ein Rubidiumgas.

Im Experiment verwenden wir einen Halbleiterlaser, ähnlich dem in einem CD-Player. Der Strom fließt durch einen pn-Übergang, in dem Elektronen und Löcher rekombinieren und dabei Licht aussenden, ähnlich wie bei einer Leuchtdiode. Allerdings dient hier das Halbleitersubstrat als Laserresonator, in dem zum Beispiel die Endflächen verspiegelt sind. Bei unserem Laser handelt es sich um einen 'External Cavity Diode Laser' (ECDL). Hier ist eine der Endflächen entspiegelt und der benötigte Resonatorspiegel wird durch ein 'volume Bragg grating' gebildet³, das bei 780,2 nm in einem etwa 0,2 nm breiten Spektralbereich besonders gut reflektiert.

In Lasern bilden sich Resonatormoden aus, wenn die Resonatorlänge genau ein ganzzahliges Vielfaches der halben Laserwellenlänge ist, d.h. es bilden sich Knoten auf den Spiegeln. Bei dem hier verwendeten Laser beträgt der Abstand dieser Moden im Frequenzraum etwa 7 GHz. Das spektrale Verstärkungsprofil des Lasers wird insbesondere durch die Reflektivität des Gitters so eingestellt, dass nur eine dieser Moden zu emittieren beginnt. Der Laser ist ein 'single mode' Laser.

Um die Frequenz des Lasers zu ändern, wird die Temperatur des Halbleiterkristalls verändert. Dadurch ändert sich sein Brechungsindex und damit die effektive Länge des Resonators, der Abstand zwischen den Moden wird geringfügig größer und die Lasermode schiebt sich durch das Verstärkungsprofil. Irgendwann erfährt die 7 GHz höhere oder tiefere Mode weniger Verluste. Der Laser springt auf diese Mode und ändert seine Frequenz schlagartig um den Modenabstand. Diese 'mode hops' begrenzen den Frequenzbereich, der einfach abgetastet werden kann. Der Laser ist jedoch so gewählt, dass das Rubidium-Spektrum gerade noch hineinpasst.

Die Temperatur des Halbleiterkristalls kann auf zwei Arten verändert werden: über den Strom, der durch den Kristall fließt, und über ein angebrachtes Peltier-Element. Die Steuerung über den Strom ist viel schneller und einfacher, ändert aber natürlich auch die Ausgangsleistung des Lasers und deckt nur einen relativ kleinen Spektralbereich ab. Das Peltier-Element ist langsamer, deckt aber einen größeren Bereich ab. Im Experiment muss also eine Kombination aus Peltier-Temperatur und Laserstrom gefunden werden, so dass die Laserfrequenz gerade die Peaks des Rubidium-Spektrums überdeckt. Erfahrungswerte können als Startwerte dienen, die konkreten Werte müssen jedoch täglich optimiert werden.

Fabry-Pérot Interferometer

Wir verstimmen die Frequenz des Lasers mit Hilfe des Stroms oder des Peltier-Elements und messen die Transmission durch das Rubidiumgas. Um daraus ein Spektrum zu erstellen, müssen wir zu jedem Zeitpunkt die Frequenz des Lasers kennen, die in der Nähe von $\nu_0 \approx 384230$ GHz liegt. Ein 'Wave Meter' misst optische Frequenzen mit sehr hoher Genauigkeit, ist aber zu teuer und auch nicht notwendig. Relative Frequenzen sind für das Experiment ausreichend.

Wir verwenden ein Fabry-Perot-Interferometer, um regelmäßige Marker auf der Frequenzachse zu erzeugen. Ein Fabry-Perot-Interferometer besteht aus

³ nicht wie ein optisches Gittergitter, eher wie ein 3D-Kristall

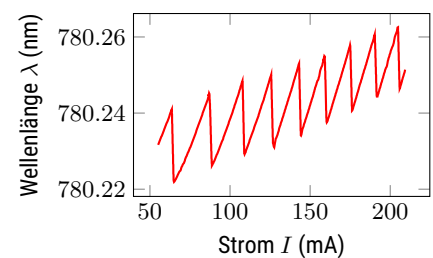


Abbildung 4: Exemplarischer Zusammenhang zwischen Laserwellenlänge und Laserstrom (aus dem Datenblatt des Herstellers).

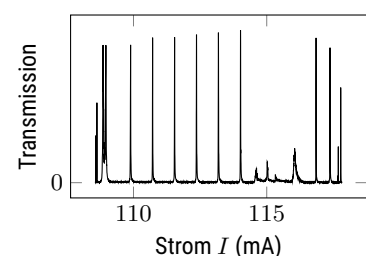


Abbildung 5: Transmission durch das Fabry-Perot-Interferometer. Bei etwa 109 mA und 115 mA sind Modensprünge zu erkennen. Der Abstand der Peaks entspricht dem FSR.

zwei (teildurchlässigen) Spiegeln und entspricht damit einem Laserresonator. Es kommt zu konstruktiver Interferenz, wenn die Länge eines geschlossenen Strahlwegs im Resonators ein ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge ist. Wird die Frequenz des Lasers variiert, kommt es periodisch zu konstruktiver und destruktiver Interferenz. Der spektrale Abstand wird hier freier Spektralbereich (engl. free spectral range, FSR) genannt und beträgt.

$$\Delta\nu_{FSR} = \frac{c_0}{L} \quad (4)$$

mit der Lichtgeschwindigkeit c_0 und L der Länge des Strahlwegs. Im Experiment verwenden wir einen konfokalen Resonator mit sphärischen Spiegel und gemeinsamen Brennpunkt. Dadurch ist die optische Weglänge im Resonator vier mal der Abstand der Spiegel, so dass sich ein freier Spektralbereich von ca. 300 MHz ergibt. Im Experiment wird parallel zum Transmissionssignal durch das Rubidium-Gas die durch das Fabry-Perot-Interferometer transmittierte Leistung gemessen. Aus der periodischen Änderung dieser Leistung wird dann die relative Frequenzachse konstruiert.

Doppler-Verbreiterung

Im Prinzip hätten wir jetzt alles, was wir brauchen. Aber es gibt noch die Doppler-Verschiebung. Bewegt sich ein Atom mit der Geschwindigkeit v in Strahlrichtung, so ändert sich seine Absorptions-Frequenz aufgrund der Doppler-Verschiebung um $\Delta\nu$.

$$\Delta\nu = \frac{v}{c_0} \nu_0 \quad (5)$$

mit der Ruhe-Frequenz ν_0 . Die Geschwindigkeit kommt aus der Maxwell-Boltzmann-Geschwindigkeitsverteilung $P(v)$

$$P(v) = \sqrt{\frac{M}{2\pi k_B T}} \exp\left(-\frac{Mv^2}{2k_B T}\right) \quad (6)$$

Insgesamt ergibt sich damit eine gaußförmige Linie der Halbwertsbreite

$$\Delta\nu_{doppler} = \nu_0 \sqrt{\frac{8k_B T \ln 2}{Mc^2}} \quad (7)$$

Für Rubidium bei Raumtemperatur beträgt die Doppler-Verbreiterung etwa 500 MHz. Wenn wir einfach die Transmission des Laserstrahls durch das Rubidiumgas bestimmen, werden wir nur vier Peaks von etwa 500 MHz Breite finden, aber die Details der Hyperfeinstruktur nicht auflösen können. Wir müssen also 'Doppler-frei' messen.

Zur Vorbereitung

Vorbereitung

3. Berechnen Sie das erwartete Doppler-verbreiterte Spektrum von Rubidium in der natürlichen Isotopenmischung.

Sättigung

Bisher haben wir nur die Frequenz des D2-Übergangs in Rubidium betrachtet. Jetzt müssen wir auch die Übergangswahrscheinlichkeit diskutieren. Damit

ein Rubidium-Atom ein Photon mit einer Wellenlänge von etwa 780 nm absorbieren kann, muss nicht nur die Wellenlänge genau passen, sondern das Atom muss sich auch im Grundzustand befinden. Dies ist zunächst bei allen Atomen der Fall. Unmittelbar nach der Absorption bleibt das Rubidium-Atom jedoch im angeregten Zustand und fällt nur mit der Rate

$$k_{decay} = \frac{1}{\tau} = \frac{1}{26.24 \text{ ns}} = 38.1 \text{ MHz} \quad (8)$$

in den Grundzustand zurück. Die Anregungsrate k_{ex} ist proportional zum Absorptionsquerschnitt σ des Atoms bei dieser Wellenlänge und zur Laser-Intensität I

$$k_{ex} = \sigma \frac{I}{h\nu} \quad (9)$$

In die Ratengleichung für den Anteil $0 \leq n \leq 1$ aller Atome im Grundzustand geht die Anregungsrate k_{ex} jedoch nur mit der Differenz $\Delta n = n - (1 - n) = 2n - 1$ der Besetzung im Grundzustand und im angeregten Zustand ein, da die stimulierte Emission der Absorption entgegenwirkt:

$$\frac{dn}{dt} = -k_{ex} \Delta n + k_{decay}(1 - n) = -k_{ex} \Delta n + k_{decay} \frac{1 - \Delta n}{2} \quad (10)$$

Im Gleichgewicht findet wir

$$\Delta n = \frac{k_{decay}}{2k_{ex} + k_{decay}} = \frac{1}{1 + 2k_{ex}\tau} = \frac{1}{1 + I/I_{sat}} \quad (11)$$

mit der Sättigungsintensität I_{sat}

$$I_{sat} = \frac{h\nu}{2\sigma\tau} \quad (12)$$

Für die D2-Linien von Rubidium beträgt $I_{sat} \approx 1 \text{ mW/cm}^2$, wenn die Wellenlänge einem Übergang entspricht. Wenn die Laserintensität I klein ist, dann ist $\Delta n \approx 1 - I/I_{sat}$. Für $I = I_{sat}$ ist $\Delta n = 0.5$, d.h. ein Viertel aller Atome befindet sich im angeregten Zustand ($n = 0.75$). Für sehr große Intensitäten geht Δn gegen Null. Es befinden sich dann gleich viele Atome im Grundzustand wie im angeregten Zustand.

Die Absorption von Rubidiumgas kann durch das Lambert-Beer'sche Gesetz mit dem Absorptionskoeffizienten α beschrieben werden. Die transmittierte Leistung P nimmt exponentiell mit der Länge L der Probe ab:

$$P = P_0 e^{-\alpha L} \quad (13)$$

Der Absorptionskoeffizienten α ist

$$\alpha = \sigma \rho \Delta n \quad (14)$$

mit der Teilchenzahldichte ρ des Gases.

Zur Vorbereitung

Vorbereitung

- Bei sehr niedriger Laserleistung werden im Peak 95% des Lichts in der Gaszelle absorbiert. Berechnen Sie via Gl. 13 die Form des Doppler-verbreiterten Absorptionsspektrums und vergleichen Sie mit Ihrem Ergebnis von Frage 3.

Dampfdruckkurve und Teilchenzahldichte

Rubidium ist ein Metall mit einem Schmelzpunkt von 39.30° C (312.45 K). In der Gaszelle befindet sich außer Rubidium kein anderes Gas. Die Rubidium-Konzentration im Gas wird durch den Dampfdruck bestimmt. Die Dampfdruckkurve hat die Form

$$P = P_0 e^{-\frac{T_0}{T}} \quad (15)$$

mit den Konstanten P_0 und T_0 aus nebenstehender Tabelle.

Die Teilchenzahldichte ρ ergibt sich aus dem Dampfdruck über das ideale Gasgesetz. Die Teilchenzahldichte steigt also mit der Temperatur steil an.

	P_0 (GPa)	T_0 (K)
fest	7.293	9705
flüssig	2.079	9302

Tabelle 2: Parameter zur Dampfdruckkurve, aus Steck, 2013.

Sättigungsspektroskopie

Die Sättigung eines atomaren Übergangs, d.h. die Verringerung des Absorptionskoeffizienten α durch die Verringerung der Besetzungsdifferenz Δn , steht im Mittelpunkt der Sättigungsspektroskopie. Ein Pumpstrahl sättigt die mit ihm wechselwirkenden Atome. Durch den Dopplereffekt sind dies genau die Atome, die eine passende Frequenzverschiebung aufweisen. Sei ω_L die Laserfrequenz und ω_0 die Frequenz des atomaren Übergangs (z.B. $\omega_0 > \omega_L$), dann sind dies genau die Atome mit der Geschwindigkeit $+v$ relativ zum Pumpstrahl, so dass

$$\omega_0 = \omega_L \left(1 - \frac{v}{c_0} \right) \quad (16)$$

Für diese Atome mit der Geschwindigkeit v ist nun der Absorptionskoeffizient α kleiner. Der entgegengesetzte, schwächere Abfragestrahl hat die gleiche Laserfrequenz. Wegen der entgegengesetzten Ausbreitungsrichtung passen hier aber nur die Doppler-verschobenen Atome mit der Geschwindigkeit $-v$ zur Laserfrequenz. Der Abfragestrahl erfährt daher zunächst keine Änderung des Absorptionskoeffizienten.

Liegt die Laserfrequenz jedoch innerhalb der natürlichen Linienbreite des Übergangs, d.h. $\omega_0 \approx \omega_L$, so wechselwirken beide Strahlen mit derselben Atompopulation, d.h. mit Atomen mit $v \approx 0$ (wobei v die Geschwindigkeit entlang des Strahls ist. Senkrecht zum Strahl kann sie immer noch von Null verschieden sein). Variiert man die Frequenz der beiden Strahlen und zeichnet die Transmission des Abfragestrahls auf, so erhält man ein Doppler-verbreitertes Absorptionsprofil, solange die Laserfrequenz noch weit von der Frequenz des Übergangs entfernt ist. Am Übergang selbst entsteht ein *Lamb-Dip* in der Absorption, d.h. eine stärkere Transmission, wenn beide Strahlen mit der gleichen Population wechselwirken. Die Breite des Lamb-Dip ist nur durch die natürliche Linienbreite begrenzt, nicht mehr durch die Doppler-Verbreiterung.

Liegen mehrere atomare Übergänge innerhalb der Doppler-Verbreiterung, so erhält man für jeden Übergang Lamb-Dips in der Absorption. Zusätzlich findet man auch 'cross over dips' genau zwischen zwei atomaren Übergängen mit gemeinsamem Grundzustand. Bei dieser Laserfrequenz ist die Geschwindigkeit $+v$ geeignet, dass der Pumpstrahl einen der Übergänge antreibt und damit den Grundzustand entvölkert. Für den Abfragestrahl haben diese Atome die Geschwindigkeit $-v$, was in diesem Fall gerade dem anderen

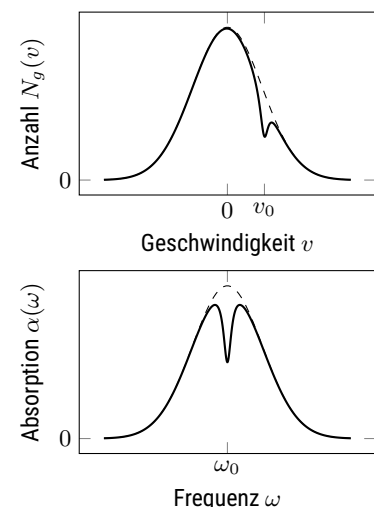


Abbildung 6: oben: Ein Laser der Frequenz $\omega = \omega_0(1 - v_0/c_0)$ brennt ein Loch in die ansonsten Maxwell-förmige Geschwindigkeitsverteilung der Atome im Grundzustand. unten: Dies führt zum Lamb-Dip im Absorptionsspektrum des gegenläufigen Abfrage-Strahls.

Übergang entspricht. Da dem Pump-Strahl zwei Übergänge zur Depopulation zur Verfügung stehen, erfährt der Abfragestrahl also auch hier eine reduzierte Absorption. Die cross-over peaks sind in erster Näherung doppelt so stark wie die direkten Übergänge.

Zur Vorbereitung

5. Ergänzen Sie Ihre vorhergesagten Peak-Positionen aus Frage 2 um die cross-over peaks.

Balanced Detector

Ein störender Aspekt des Verstimmens der Laserfrequenz durch den Strom ist die sich ändernde Intensität. Diese kann durch 'balanced detection' eliminiert werden. Ein weiterer Laserstrahl durchläuft das Rubidiumgas parallel zum Abfragestrahl, aber ohne Überlappung mit dem Pumpstrahl. Dieser Referenzstrahl erfährt somit nur die übliche Doppler-Verbreiterung. Ein Detektor mit zwei Photodioden misst die Leistung in beiden Strahlen. Es wird jedoch nur die Differenz der Photoströme durch die beiden Dioden verstärkt. Eine synchrone Änderung oder Fluktuation der Leistung an beiden Dioden wird somit unterdrückt. Das Unterdrückungsverhältnis ('common mode rejection') beträgt etwa 30 dB, also einen Faktor 1000. Damit können kleine Unterschiede zwischen ansonsten sehr ähnlichen Signalen detektiert werden.

Damit dies gut funktioniert, müssen die Leistungen im Abfrage- und Referenzstrahl möglichst gleich sein, wenn der Pumpstrahl noch keinen Unterschied bewirkt. Ein variabler Abschwächer ist hilfreich, um Unterschiede in der Justage zu kompensieren, die an den Monitorausgängen sichtbar werden.

Justage optischer Elemente

Laserstrahl Für unsere Zwecke genügt es, sich ein Bündel von Strahlen vorzustellen, die mehr oder weniger parallel zueinander verlaufen. Der Strahl wird dann durch den Durchmesser des Strahlenbündels und den Divergenzwinkel innerhalb des Strahlenbündels beschrieben. Ohne Linsen können wir vorerst davon ausgehen, dass die Strahlen parallel bleiben, so dass ein Laserstrahl durch einen Strahl der geometrischen Optik angenähert werden kann.

Freiheitsgrade Es ist nützlich, sich die Freiheitsgrade eines Lichtstrahls vor Augen zu halten. In drei Dimensionen benötigen wir zwei Raumkoordinaten x und y und zwei Winkel mit der optischen Achse, also θ_x und θ_y . Wenn wir einen Strahl ausrichten und damit definieren wollen, müssen wir diese vier Freiheitsgrade definieren.

Justierspitze Ein dreidimensionales Volumen über einem optischen Tisch ist ziemlich groß. In den meisten Fällen wird es nicht benötigt. Es genügt, den Strahl auf eine Ebene parallel zur Tischoberfläche zu begrenzen. Die Höhe

Vorbereitung

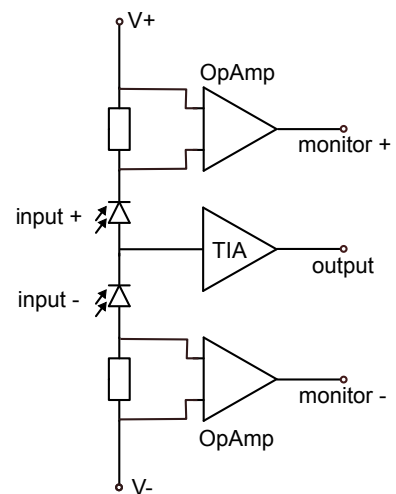


Abbildung 7: Balanced detection. OpAmp: Operationsverstärker. TIA: Transimpedanzverstärker, also Strom-Spannungs-Wandler.

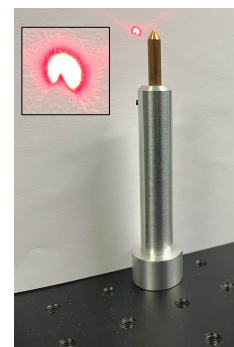


Abbildung 8: Die Justierspitze schneidet bei optimaler Justage ein Viertel des Strahlquerschnitts aus.

des Strahls über dem Tisch wird durch die Justierspitze definiert. Der Mittelpunkt der Spitze muss mit dem Mittelpunkt des Strahls übereinstimmen.

Definieren des ersten Schenkels Der Laserstrahl verlässt den Laser normalerweise in einer nicht genau definierten Richtung und Position. Wir benötigen daher zwei Spiegel, um die vier Freiheitsgrade des Strahls zu definieren, da jeder Spiegel durch zwei Winkel beschrieben wird. Wir platzieren die Spitze zunächst hinter dem zweiten Spiegel und benutzen den ersten Spiegel, um den Strahl auf die Spitze zu lenken. Danach platzieren wir die Spitze weit weg vom zweiten Spiegel und benutzen den zweiten Spiegel, um den Strahl auszurichten. Wenn wir diesen Vorgang wiederholen, konvergiert das Verfahren.

Definieren aller weiteren Schenkel Der Vorteil einer festen Strahlhöhe kommt bei allen weiteren Schenkeln des Strahlengangs zum Tragen. Bei einem dritten Spiegel hat der Strahl bereits die richtige Höhe. Wir platzieren den Spiegel so, dass seine Oberfläche auf dem Schnittpunkt der ersten beiden Schenkel liegt. Dann benutzen wir die beiden Winkel des Spiegels, um die neue Richtung des Strahls zu festzulegen.

Versuchsaufbau und dessen Justage

Machen Sie sich mit dem Versuchsaufbau und dessen Funktionsweise sowie mit den zur Verfügung stehenden Geräten vertraut. Bei allen Versuchsteilen gilt es, aufmerksam und vorsichtig zu arbeiten. Denken Sie dabei auch an die Sicherheit Ihrer Kommilitonen/-innen. Fragen Sie lieber einmal mehr nach, falls Sie sich unsicher sind. Ihr Versuchsbetreuer wird Ihnen gerne weiter helfen.

Lasersicherheit Sobald ein Bauteil in den Aufbau eingesetzt wird oder mit Schraubendrehern gearbeitet wird, muss der Laserstrahl zumindest vor diesen Bauteilen blockiert werden, um unerwünschte und möglicherweise gefährliche Reflexionen des Laserstrahls zu vermeiden. Aus dem gleichen Grund sollte auch reflektierender Schmuck an den Händen abgelegt werden.

Empfindliche Optiken Berühren Sie die Oberfläche der optischen Elemente nicht oder nur sehr weit entfernt von den Stellen, an denen der Laserstrahl das Element passiert. Die Oberflächen können sehr leicht verschmutzt oder beschädigt werden. Versuchen Sie auf keinen Fall, die Oberflächen mit einem Brillenputztuch oder ähnlichem zu reinigen. Informieren Sie den Versuchsbetreuer, wenn Sie Verschmutzungen feststellen.

Der Versuchsaufbau besteht aus einem vorjustierten Teil, der den Laser und das Fabry-Perot-Interferometer enthält. Dieser darf nicht verändert werden. Insbesondere die Überlagerung des grünen Justierlasers mit dem nahinfraroten Messlaser ist aufwendig. Das eigentliche Experiment bauen Sie ausgehend vom Spiegel S1 selbst auf. Dazu wird zunächst nur der grüne Justierlaser verwendet. Erst wenn alle Elemente damit justiert sind, schalten Sie den grünen Laser aus und den roten 780-nm-Laser ein. Vergessen Sie nicht, den grünen Laser während der eigentlichen Messung auszuschalten.

Anordnung Es empfiehlt sich, die einzelnen Komponenten zunächst grob an der geplanten Position zu platzieren, um ein Gefühl für die Abstände zu

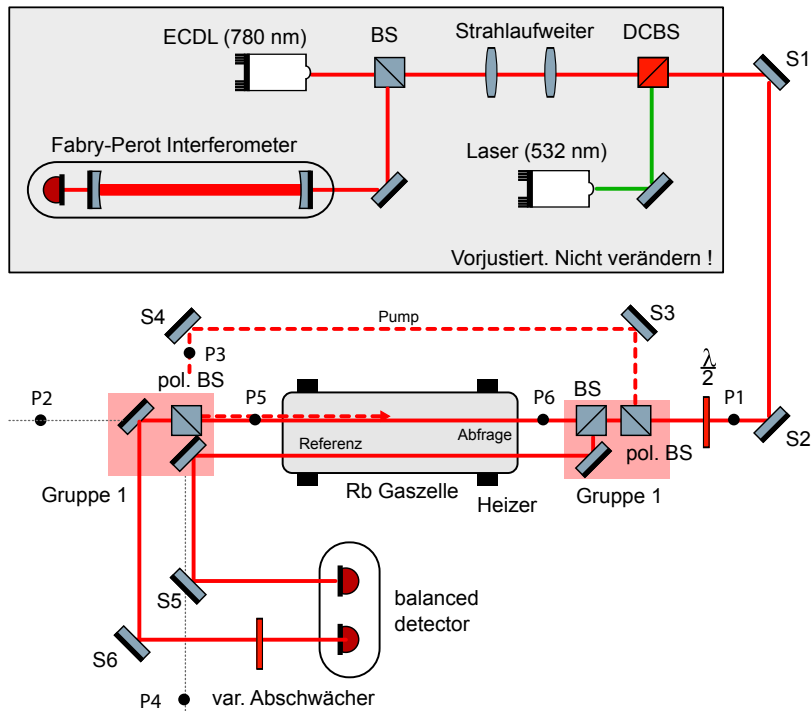


Abbildung 9: Versuchsaufbau. In den Baugruppen 1 und 2 sind die Elemente auf einer gemeinsamen Platte vorjustiert. Spiegel (S), Strahlteiler (BS), Farbteiler (DCBS), polarisierender Strahlteiler (pos. BS), Halbwellenplatte ($\lambda/2$)

bekommen. Um z.B. Leistungsmessungen durchführen zu können oder die Justierspitze platzieren zu können, ist es sinnvoll, die Optiken nicht zu dicht aneinander zu stellen. Merken Sie sich die Position und nehmen Sie dann alles wieder ab.

Strecke P1 – P2 Die beiden Punkte P1 und P2 liegen auf einer Lochreihe und sind möglichst weit voneinander entfernt. Zuerst wird die Strecke P1 - P2 mit Hilfe der beiden Spiegel S1 und S2 wie oben beschrieben justiert. Der Strahlengang zwischen S1 und S2 ist unkritisch und muss nicht über die Justierspitze geführt werden.

Wellenplatte und Baugruppe 1 Stellen Sie die Wellenplatte und die Baugruppe 1 so in den Strahl P1–P2 ein, dass die Elemente nach Augenschein mittig und senkrecht getroffen werden. Der abzweigende Pumpstrahl muss erst ab Punkt P3 wieder über einer Lochreihe laufen.

Strecke P3 – P4 Justieren Sie den Pumpstrahl auf der Strecke P3–P4 mit den Spiegeln S3 und S4. Auf diese Weise kreuzen sich Pump- und Abfrage-Strahl senkrecht in einem Punkt.

Baugruppe 2, Punkte P5 und P6 Stellen Sie die Baugruppe 2 so auf, dass die reflektierende Innenfläche des Strahlteilers im Schnittpunkt der beiden Strahlen liegt und so der Pumpstrahl möglichst genau entgegengesetzt zum Abfragestrahl läuft. Blockieren Sie den durchlaufenen Abfrage- und Referenzstrahl nach der Baugruppe 1. Justieren Sie den Punkt P5 durch Verschieben der Baugruppen (ein Anschlag als Verschiebekante hilft hier!). Justieren Sie auf den Punkt P6 durch Verdrehen und Verkippen der Baugruppe 2. Iteriert

Sie zwischen P5 und P6. Feinheiten lassen sich evtl. besser einstellen, wenn die Spiegel S3 und S4 verwendet werden. Dabei die Spiegel aber nur wenig verstellen, weil deren Position ja eigentlich schon gefunden ist.

Spiegel S5 und S6 Die Position dieser Spiegel ist unkritisch, solange sie sich nicht gegenseitig den Strahl blockieren. Lenken Sie die Strahlen wie gezeigt auf die Detektorflächen.

Gaszelle Stellen Sie die Rb Gaszelle so in den Strahlengang, dass Referenz- und Abfragestrahl ungestört transmittiert werden.

Elektronik Verbinden Sie den Detektor mit der Datenerfassung (NI-USB 6002 AD-Interface) und den Heizer der Gaszelle mit seinem Netzteil. Schalten Sie den Heizer noch nicht ein.

Roter Laser Jetzt sollte alles justiert sein. Schalten Sie den grünen Laser aus und den roten Laser ein (zuerst den Controller oben links, dann links unten 'Laser on/off'). Stellen Sie mit Hilfe der Wellenplatte die Intensität in Pump- und Abfrage-Strahl so ein, dass beide im IR-Sichtgerät zu erkennen sind. Blockieren Sie den Pump-Strahl und stellen Sie an die Positionen P5 und P6 je eine Iris auf, die auf den Abfragestrahl zentriert ist. Benutzen Sie das Infrarotsichtgerät, um den roten Laserstrahl auf der Iris zu beobachten. Wenn die Iris justiert ist blockieren Sie den Abfragestrahl und überprüfen, ob der Pumpstrahl von der anderen Seite jede Iris mittig trifft. Falls nicht, optimieren Sie die Iris an Stelle P5 mit Spiegel S3 und die an P6 mit Spiegel S4. Iterieren Sie über die beiden Spiegel bzw. Iris-Positionen. Um ein gutes Signal zu erhalten, muss diese Justage sehr genau erfolgen. Danach entfernen Sie die Iris wieder.

Signal	Eingang
Balanced Detector	AI 0
Monitor +	AI 1
50 Ohm Abschluss	AI 2
Monitor -	AI 3
Fabry-Perot-Diode	AI 4
Rückkanal Laser	AI 5

Tabelle 3: Belegung der Datenerfassung

Zur Vorbereitung

Vorbereitung

6. Wofür werden im Versuch zwei *polarisierende* Strahlteilerwürfel benötigt? Wozu wird das $\lambda/2$ -Plättchen gebraucht?

Programm zur Experimentsteuerung

Starten Sie das Programm 'Rb Spektroskopie' auf dem Messrechner. Oben links können Sie die Signale der Detektoren ein- und ausblenden. Aufgezeichnet und gespeichert wird immer alles. Unten links stellen Sie zwischen zwei Modi um: Messen und Justieren. Im Justier-Modus sehen Sie das Signal der eingeblendeten Detektoren als Funktion der Zeit durchlaufen. Im Modus 'Messen' wird der Laserwellenlänge variiert. Sie können die Anzahl der Datenpunkte ($< 20\,000$) und die Integrationszeit pro Datenpunkt ($> 15\text{ms}$) einstellen. Die aufgezeichneten Werte werden im großen Diagramm dargestellt und können mit dem Feld rechts unten gespeichert werden. Dabei sollten Sie sinnvolle Dateinamen vergeben. Die Daten werden als ASCII-Datensatz mit allen Kanälen sowie als Bildschirmfoto des angezeigten Graphen gespeichert.

Die Wellenlänge des Lasers wird, wie oben beschrieben, durch Verändern des Laserstroms variiert. Der Laser ist eigentlich dazu ausgelegt, seine

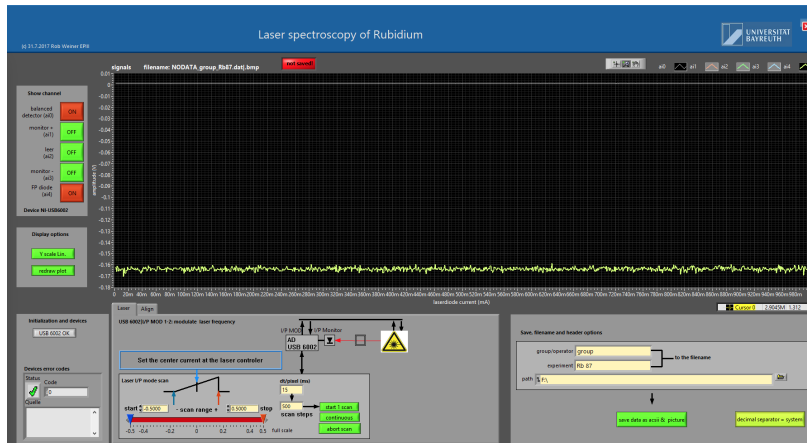


Abbildung 10: Startansicht des Messprogramms.

Frequenz mit einer externen Elektronik auf eine der Rubidium-Linien zu stabilisieren. Daher verfügt er nur über einen schnellen, aber analogen Modulations-eingang. Eine Spannung beeinflusst den am Controller eingestellten Strom. Der Zusammenhang Kontrollspannung–Strom ist dabei nicht völlig linear.

Im Messprogramm können Sie einen Verstellbereich des Stroms wählen, in Prozent eines Maximalbereichs, zentriert um die am Controller eingestellte Stromstärke. Dann wird eine passende Spannungsrampe abgefahren. Gleichzeitig wird der wirklich angelegte Strom über ein weiteres analoges Kontrollsignal des Laser ausgelesen. Das Signal dient zur Darstellung der horizontalen Strom-Achse.

Diese indirekte Arbeitsweise hat zwei Konsequenzen: Man kann das wirkliche abgefahrte Stromintervall nur ungenau einstellen. Es ist sinnvoll, sich langsam durch Variation des unteren und oberen Grenzwerts an die gewünschte Stellung heranzutasten. Weiterhin ist der zurückgelesene Stromwert rauschbehaftet, die Temperatur im Laser und damit seine Wellenlänge aber nicht. Sie sollten den angezeigten und gespeicherten Strom eines jeden Datenpunkts also nur zur Optimierung des Scanbereichs, jedoch nicht zur Bestimmung der Laserfrequenz benutzen.

Die Laserfrequenz ergibt sich aus dem Signal des Fabry-Perot-Interferometers. Sie können davon ausgehen, dass sich die Frequenz zwischen zwei Peaks des Interferometers monoton und linear verändert hat. Für die Berechnung ist lediglich die zeitliche Reihenfolge der Messwerte erforderlich, nicht jedoch der Stromwert selbst.

Messungen

Bringen Sie bitte einen USB-Stick zur Versuchsdurchführung mit, auf dem Sie Ihre Messdaten speichern und mitnehmen können. Die Erfahrung zeigt, dass es einige Iterationen braucht, bis die beste Kombination der Parameter gefunden ist. Es ist daher sehr sinnvoll, die Daten bereits während des Versuchs zumindest soweit auszuwerten, dass Sie das Spektrum als Funktion der Frequenz darstellen können. So können Sie die gefundenen Linienpositionen mit den erwarteten vergleichen.

!

Doppler-verbreitertes Spektrum

Stellen Sie mit Hilfe der Wellenplatte die Intensität des Abfragestrahls am Detektor so ein, dass der zugehörige Monitor-Ausgang ca. 1 Volt anzeigt. Der Pumpstrahl sollte nahezu die gesamte Leistung erhalten.

Für das Doppler-behaftete Spektrum reicht es auch, den Referenzstrahl zu betrachten. Lassen Sie sich Referenz-Leistung und Fabry-Perot-Diode anzeigen und scannen Sie die Laserfrequenz über den vollen Bereich. Sie müssen ein Strom-Intervall finden, in dem sich die vier Doppler-verbreiterten Peaks des Hyperfeinspektrums im Absorptionssignal finden, und kein Modensprung dazwischen aufgetreten ist. Modensprünge erkennt man an unregelmäßigen Signalen im Fabry-Perot-Interferometer und leichten Sprüngen in der Ausgangsleistung, wie sie die Monitor-Ausgänge des Detektors abbilden. Suchen Sie zunächst nach dem 4-Peak-Spektrum, beseitigen Sie dann die Modensprünge durch Variation der Stromstärke und, nach Rücksprache mit dem Betreuer, der Peltier-Temperatur.

Doppler-freies Spektrum

Sorgen Sie mit Hilfe eines variablen Abschwächers dafür, dass beide Dioden die gleiche Leistung sehen und so die Differenz Null wird. Das 'Nullen' des Balanced Detectors ist erforderlich, um eine optimale Unterdrückung des gemeinsamen Signals zu erreichen und das Differenzsignal untergrundfrei zu machen.

Nun sollten Sie ein Doppler-freies Spektrum im Differenzsignal finden. Optimieren Sie ggf. die Leistung im Pumpstrahl und auf den Photodioden. Optimieren Sie ggf. vorsichtig (!) den Überlapp von Pump- und Abfragestrahl durch Spiegel S3 oder Verkippen von Baugruppe 2.

Achten Sie darauf, dass die einzelnen Monitor-Kanäle nicht sättigen, aber auch ausreichend Leistung vorhanden ist. Wählen Sie einen geeigneten Scanbereich, eine geeignete Integrationszeit und eine geeignete Pixelzahl.

Wenn alle Parameter richtig eingestellt sind, sollte die Abweichung zwischen der erwarteten und der beobachteten Linienposition nur wenige MHz betragen. Es kann jedoch sein, dass einige Linien nicht oder nur sehr schwach sichtbar sind. Dies ist bei der Zuordnung der Linien zu den Quantenzahlen zu berücksichtigen.

Temperaturabhängigkeit

Sie können die Temperatur der Rb-Gaszelle durch den Heizer variieren. Berücksichtigen Sie dabei, dass die Teilchenzahldichte exponentiell mit der Temperatur ansteigt (siehe Anhang). Die angezeigte Temperatur ist die des Heizelements, nicht notwendigerweise die des Gases. Auch ist Aufheizen einfacher und schneller als Abkühlen.

Arbeitsaufträge

- Messen Sie ein Doppler-freies Spektrum der D2-Linien von Rubidium und geben Sie die zugehörigen Übergänge an.

- Bestimmen Sie den Dipol- und den Quadrupol-Term der Hyperfeinstrukturkonstanten (inkl. Messunsicherheit).
- Messen Sie das Doppler-verbreiterte Absorptionsspektrum bei verschiedenen Temperaturen und modellieren Sie die Linienform.
- Bonus: Untersuchen Sie den Einfluss der Leistung von Abfrage- und Sättigungsstrahl.
- Bonus: Versuchen Sie, möglichst schmale Linien zu erreichen.
- Bonus: Vergleichen Sie die Amplituden der Linien mit einem passenden Modell.

Dokumentieren Sie Ihr Vorgehen und die ggf. von Ihnen zur Auswertung verwendeten (Python-)Skripte. Begründen Sie Ihre Entscheidungen. Diskutieren Sie die Ergebnisse, insbesondere wenn sie von Ihren Erwartungen abweichen.

Anhang: Addition von Drehimpulsen

Der ausführliche Titel des Anhangs sollte wohl sein 'Eigenwerte und Eigenfunktionen eines Operators, der die Summe von quantenmechanischen Drehimpulsoperatoren ist'. Dieses Thema findet sich in quasi allen Büchern zur Quantenmechanik. Ich folge hier Nolting, 2006, Kap. 5.4. Mit diesem Formalismus kann man beispielsweise die möglichen Werte der Gesamtspin-Quantenzahl S bestimmen, wenn die Orientierung der Einzel-Spins bekannt ist. Oder man kann in der Atomphysik den Gesamt-Drehimpuls-Quantenzahl J aus der Spin-QZ S und der Bahndrehimpuls-QZ L bestimmen. Ebenso erhält man die Eigenfunktionen eines Singulett- oder Triplett-Zustands.

Der Drehimpuls-Operator

In der Quantenmechanik definiert man einen Drehimpuls-Operator \hat{L} , der den Betrag eines Drehimpulses misst, sowie einen Operator \hat{L}_z , der eine der drei Vektor-Komponenten misst. Die Eigenwerte sind

$$\hat{L}^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle \quad \text{mit} \quad l = 0, 1, \dots \quad (17)$$

$$\hat{L}_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle \quad \text{mit} \quad m = -l, -l+1, \dots, l \quad (18)$$

Die Quantenzahl m nennt man auch magnetische Quantenzahl (daher das Symbol), weil die z-Achse in Atomen oft durch die Richtung eines externen Magnetfelds vorgegeben ist.

Die Kommutator-Relationen sind so, dass \hat{L} und \hat{L}_z gleichzeitig messbar sind, aber die einzelnen Vektor-Komponenten nicht. Die Unschärfe in den verbleibenden Komponenten beträgt dann

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \hat{L}_z \rangle|. \quad (19)$$

Man kann sich einen Drehimpuls-Vektor in der Quantenmechanik also als einen Vektor der Länge $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ vorstellen, dessen z-Komponente $\hbar m$ ist. Glücklicherweise ist der Maximalwert von m , also l , immer kleiner als $\sqrt{l(l+1)}$, und $l+1$ immer größer als das. Die x- und y-Komponenten ist unbekannt, bis auf dass sie gerade die erforderliche Länge des Vektors liefern müssen. Mögliche Werte dieser beiden Komponenten liegen damit auf einem Kreis in der xy-Ebene.

Es gibt nicht nur Vektoren, die einem klassischen Drehimpuls entsprechen, sondern auch anderen Größen, die sich sehr ähnlich einem Drehimpuls verhalten, wie beispielsweise der Spin. Erstere haben immer ganzzahlige Quantenzahlen l, m , letztere können auch halbzahlige sein. Immer ist der Abstand zwischen benachbarten Quantenzahlen aber eins. Ich benutze das Wort Drehimpuls hier immer als Oberbegriff für beides.

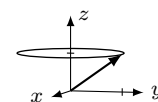


Abbildung 11: Skizze eines Drehimpulsvektors mit unbekannter xy-Komponente.

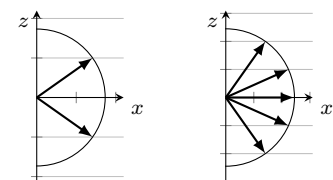


Abbildung 12: Mögliche Orientierung von Drehimpuls-artigen Vektoren mit $l = 1/2$ (links) und $l = 2$ (rechts). Der Abstand der Hilfslinien beträgt $1/2\hbar$ bzw. $1\hbar$.

Addition von Drehimpulsen

Jetzt haben wir zwei Sätze von Drehimpuls-artigen Operatoren, und kennen deren Eigenwerte und Eigenfunktionen, also

$$\hat{L}_1^2 |l_1, m_1\rangle = \hbar^2 l_1(l_1 + 1) |l_1, m_1\rangle \quad \hat{L}_{z,1} |l_1, m_1\rangle = \hbar m_1 |l_1, m_1\rangle \quad (20)$$

$$\hat{L}_2^2 |l_2, m_2\rangle = \hbar^2 l_2(l_2 + 1) |l_2, m_2\rangle \quad \hat{L}_{z,2} |l_2, m_2\rangle = \hbar m_2 |l_2, m_2\rangle \quad (21)$$

Wir können dann Summen-Operatoren bilden

$$\hat{L} = \hat{L}_1 + \hat{L}_2 \quad \text{und} \quad \hat{L}_z = \hat{L}_{z,1} + \hat{L}_{z,2} \quad (22)$$

Diese neuen Operatoren sind glücklicherweise wieder Drehimpuls-Operatoren, folgen also den üblichen Anforderungen der Quantenmechanik an solche Operatoren in Bezug auf die Kommutator-Relationen und die Form der Eigenwerte. Die Frage ist nun, wie man aus bekannten Eigenwerten l_i, m_i und dazugehörigen Eigenfunktionen auf die neuen Eigenwerten l, m der Summen-Operatoren schließen kann, und welche Werte eigentlich gleichzeitig messbar sind.

Man findet, dass die Gesamt-Länge zusammen mit den beiden Einzel-Längen, aber nur mit der Orientierung des Gesamt-Drehimpulses gleichzeitig messbar ist. Gute⁴ Quantenzahlen sind also

$$|l_1, l_2; l, m\rangle \quad (23)$$

⁴ 'Gut' ist in diesem Zusammenhang ein Fachbegriff und bedeutet 'Konstante der Bewegung', also unveränderlich.

Die neue Orientierungs-Quantenzahl m ist gerade die Summe der Einzel-Orientierungs-Quantenzahlen

$$m = m_1 + m_2 \quad (24)$$

Für die neue Gesamt-Länge gilt

$$|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2 \quad (25)$$

Mehr lässt sich dazu leider nicht sagen. Es ist etwas unbefriedigend, die Summe von zwei Vektoren nicht nennen zu können, obwohl man beide Summanden kennt. Allerdings kennt man die Ausgangs-Vektoren nicht vollständig. Die unbekannte xy-Komponenten sind gerade der Ursprung dieses Spielraums im Wert von l .

Beispiel: $\vec{J} = \vec{S} + \vec{L}$

Was bedeutet es, dass die guten Quantenzahlen $|l_1, l_2; l, m\rangle$ sind? Ich möchte das mit dem Beispiel der Addition von Bahndrehimpuls \vec{L} und Spin \vec{S} zum Gesamtdrehimpuls \vec{J} diskutieren (und passe dabei die Bezeichnungen leicht an). Gute Quantenzahlen sind also $|L, S; J, m_J\rangle$. Die großen Buchstaben sind die Quantenzahlen, die die Länge der Vektoren in der Form $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ angeben, m_J ist die magnetische Quantenzahl zu J .

Bei der Kopplung von Spin und Bahndrehimpuls gibt es einen Energiebeitrag des Spins im Magnetfeld der Bahnbewegung. Klassisch würde dieser vom Winkel zwischen den beiden abhängen. Dieser Winkel ist aber nicht die

Quantenzahl, sondern das sich aus \vec{S} , \vec{L} und \vec{J} bildende Dreieck wird vollständig durch die Längen der Seiten bestimmt. Das beinhaltet den Winkel zwischen \vec{S} und \vec{L} , aber auch deren Amplitude. Gleichzeitig ist nur m_J eine gute Quantenzahl. Bei der Wechselwirkung mit einem äußeren Feld spielt also nur die Orientierung von \vec{J} eine Rolle. Die Spitze von \vec{J} kann wieder auf einem Kreis in der xy-Ebene liegen, solange die Länge von \vec{J} erhalten bleibt. Bei \vec{S} und \vec{L} ist nun aber *nur* die Länge eine gute Quantenzahl, die z-Komponenten nicht mehr. Die Spitze von \vec{S} kann damit auf einem Kreis liegen, dessen Symmetrieachse durch \vec{J} gegeben ist. Alles andere ist unbekannt, kann nicht gleichzeitig gemessen werden. Insbesondere ist die Aufteilung zwischen m_S und m_L nicht fix, nur die Summe, also m_J .

Beispiel: Addition von zwei Vektoren mit Spin 1/2

Als Beispiel wollen wir die beiden kürzesten Drehimpulse addieren, was die Zeichnungen einfacher macht. Dies entspricht der Addition von zwei Elektronen-Spins zu einem Gesamtspin. Der allgemeine Formalismus folgt dann unten. Es sei

$$l_{1,2} = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad m_{1,2} = \pm \frac{1}{2} . \quad (26)$$

Welche Werte können nun die Quantenzahlen l und m der Summe annehmen? Die magnetische Quantenzahl $m = m_1 + m_2$ ist einfach und in nebenstehender Tabelle skizziert.

Falls $m_1 = m_2$, also $|m| = 1$, dann muss auch $l = 1$ sein, da l nie kleiner als m sein kann. Dies sind die Zustände⁵ $|l, m\rangle = |1, -1\rangle$ und $|1, +1\rangle$.

Damit verbleiben noch die beiden Fälle $m_1 = -m_2$, also die Diagonale in der Tabelle. Diese müssen die Zustände $|1, 0\rangle$ und $|0, 0\rangle$ bilden. Die Gesamtzahl der Zustände passt schon einmal. Wie oft in der Quantenmechanik, wenn die Zuordnung nicht einfach entschieden werden kann, werden hier wieder die symmetrische und antisymmetrische Superposition der Ausgangszustände, also der Einträge in der Matrix, gebildet. Welche davon wird $|1, 0\rangle$? Die schon gefundenen Zustände $|1, \pm 1\rangle$ sind symmetrisch bei Vertauschen $1 \leftrightarrow 2$, also wird auch $|1, 0\rangle$ symmetrisch sein, also

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (27)$$

wobei der Pfeil an Position i das Vorzeichen von m_i anzeigt. Damit gibt es einen anti-symmetrischen Zustand mit $l = 0$, und drei symmetrische mit $l = 1$

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (28)$$

$$|1, +1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (29)$$

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (30)$$

$$|1, -1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle . \quad (31)$$

Die Vorfaktoren, mit denen man die Zustände auf der linken Seite in der Basis der Zustände auf der rechten Seite darstellen kann, nennt man *Clebsch-Gordan-Koeffizienten*.

	$-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$
$+\frac{1}{2}$	0	1
$-\frac{1}{2}$	-1	0

Abbildung 13: Die möglichen Kombinationen von m_1 und m_2 zu $m = m_1 + m_2$.

⁵ l_1 und l_2 sind nicht angegeben, weil in diesem Abschnitt immer 1/2.

Wie kann man sich vorstellen, dass die Addition von zwei Vektoren gleicher Länge aber unterschiedlicher Orientierungs-Quantenzahl m_i einmal zu einem Vektor der Länge Null und einmal zu einem Vektor der beinahe doppelten Länge führt? Ein Teil der Wahrheit sind die nicht gleichzeitig messbaren anderen Vektor-Komponenten.⁶ Die Spitze beider Vektoren liegt auf einem Kreis. Wenn die Position 'in Phase' ist, dann addieren sie sich zu einem Vektor mit verschwindender z-Komponente und der Länge $\hbar\sqrt{2}$, was in diesem Bild dem Zustand $|1, 0\rangle$ entspricht. Wenn die beiden Ausgangs-Vektoren 'außer Phase' sind, dann addieren sie sich zu Null, ergeben also $|0, 0\rangle$. Bei bekannten, aber unterschiedlichen m_i , also beispielsweise $|\uparrow\downarrow\rangle$ ist also nicht eindeutig, welcher Summenvektor sich ergibt. Die Eigenfunktionen des Summen-Operators \hat{L} sind nur Linearkombinationen aus $|\uparrow\downarrow\rangle$ und $|\downarrow\uparrow\rangle$.

Allgemeiner Fall: Clebsch-Gordan-Koeffizienten

Im allgemeinen Fall der Addition von zwei Drehimpuls-artigen Vektoren mit den Quantenzahlen l_i und m_i bleiben nur die oben schon genannten Regeln

$$m = m_1 + m_2 \quad (32)$$

$$|l_1 - l_2| \leq l \leq l_1 + l_2 \quad . \quad (33)$$

Insgesamt sind es $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ Eigenfunktionen. Die Parität ist

$$\mathcal{P} = (-1)^{l-l_1-l_2} \quad . \quad (34)$$

Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten zur Darstellung der Eigenfunktionen des Summen-Operators in den Eigenfunktionen der beiden Einzel-Drehimpuls-Operatoren kann man sich mit einer Rekursionsregel herleiten. Einfacher ist es aber, diese nachzuschlagen, beispielsweise in Particle Data Group, 2020, bzw. online [hier](#).

Als Beispiel zeigt nebenstehende Abbildung die Koeffizienten für den Fall $l_1 = l_2 = 1$. Die QZ des Gesamt-Drehimpulses sind als J und M bezeichnet. Die Koeffizienten sind, um Platz zu sparen, ohne die Wurzel geschrieben. $-1/3$ ist also als $-\sqrt{1/3}$ zu verstehen, bzw.

$$|J=0, M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}|+1, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|0, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|-1, +1\rangle \quad . \quad (35)$$

Man muss also immer eine Linearkombination aus allen Möglichkeiten bilden, die das gewünschte $m = m_1 + m_2$ ergeben.

⁶ Ein anderer Teil ist 'so ist die QM eben'.

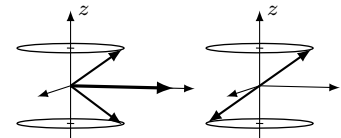


Abbildung 14: Die Addition von zwei Vektoren $|s = 1/2, m_s = 1/2\rangle$ und $|s = 1/2, m_s = -1/2\rangle$ kann sowohl einen Vektor $|S = 1, m_S = 0\rangle$ ergeben (links) als auch $|S = 0, m_S = 0\rangle$ (rechts).

Notation:		J	J	...
		M	M	...
m_1	m_2	Coefficients		
m_1	m_2			
\vdots	\vdots			
\vdots	\vdots			

Diagram illustrating the construction of the 2D DFT matrix F_N . The matrix is shown as a collection of smaller blocks, each representing a 1D DFT matrix F_2 . The blocks are arranged in a staircase pattern, with the top-left block being a 1×1 matrix $[1]$ and the bottom-right block being a 2×2 matrix. The blocks are labeled with their dimensions and the values of the elements in the first row and first column.

Abbildung 15: Clebsch-Gordan-Koeffizienten für $l_1 = l_2 = 1$. Die QZ des Gesamtdrehimpulses sind hier als J und M bezeichnet. Aus Particle Data Group, 2020.

Anhang: Anpassen eines Modells

Sie haben nun also die Position ν_i von N Linien gemessen und jeder Linie einen Satz Quantenzahlen Q_i zugeordnet. Durch welche Satz C von Hyperfeinstruktur-Konstanten wird die Messung nun beschrieben? Der Satz C von Konstanten muss die Abweichung zwischen Messung und Modell $f(Q_i, C)$ minimieren, also

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\nu_i - f(Q_i, C)}{\sigma_i} \right)^2 \quad (36)$$

sollte minimal werden. σ_i ist dabei die Messunsicherheit der Linien bei ν_i .

Man kann den 'besten' Satz C von Hyperfeinstruktur-Konstanten finden, indem man obige Gleichung nach jeder Variablen C_j in C ableitet, also zumindest nach den A und B -Konstanten der Hyperfeinstruktur. Diese Ableitungen müssen im Optimum Null sein

$$\frac{d\chi^2}{dC_j} = 0 \quad . \quad (37)$$

Man erhält ein gekoppeltes Gleichungssystem von löst nach den Variablen C_j in C . Die Unsicherheit in den C_j erhält man durch Fehlerfortpflanzung in den Bestimmungsgleichungen.

Dieses Vorgehen ist möglich und korrekt, aber aufwändig. Einfacher ist es, numerisch ein Optimum der Variablen C_j in C zu finden. Für Python ist die Function `curve_fit` aus `scipy.optimize` gut einsetzbar. Für unsere Zwecke spielt die unabhängige Variable `xdata` eine untergeordnete Rolle. Die Messwerte kommen in `ydata` und `sigma` beschreibt deren Messunsicherheit (in den gleichen Einheiten wie `ydata`). Die Modellfunktion ist $f(x, a, b, c)$ mit den Parametern `a, b, c`, etc. Gute Startwerte sind wichtig. Diese übergeben Sie in `p0`. Setzen Sie auch `absolute_sigma = True`. Wenn alles konvergiert, bekommen Sie als `popt` die optimalen Parameter zurück und `pcov` ist die Kovarianz-Matrix. Die Unsicherheit der Parameter ist `perr = np.sqrt(np.diag(pcov))`.

Die unabhängige Variable `xdata` wird von `curve_fit` unverändert an das Modell $f(x, \dots)$ weitergereicht. An keiner Stelle wird eine Ableitung, oder ähnliches entlang `xdata` gebildet. Nur das Modell muss `xdata` verstehen. Man könnte also beispielsweise alle Linien entsprechend ihrer theoretischen Reihenfolge nummerieren, und dann in `xdata` die Nummer der bei der Frequenz `ydata` gemessene Linien angeben. Das Modell müsste dann aufgrund der Nummer die zugehörigen Quantenzahlen bestimmen und die erwartete Frequenz berechnen.

Literatur

- Demtröder, Wolfgang (2007). *Laserspektroskopie 1 - Grundlagen*. 5. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag. [↗](#).
- (2010). *Experimentalphysik 3 - Atome, Moleküle und Festkörper*. 4. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag. [↗](#).
 - (2015). *Laser Spectroscopy 2 - Experimental Techniques*. 5. Berlin, Heidelberg: Springer. [↗](#).
 - (2017). *Experimentalphysik 4 - Kern-, Teilchen- und Astrophysik*. 5. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag. [↗](#).
- Hertel, Ingolf Volker und Claus-Peter Schulz (2015). *Atome, Moleküle und optische Physik 1 - Atomphysik und Grundlagen der Spektroskopie*. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag. [↗](#).
- Meschede, Dieter (2008). *Optik, Licht und Laser -*. 3. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag. [↗](#).
- (2015). *Gerthsen Physik*. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag. [↗](#).
- Nolting, Wolfgang (2006). *Grundkurs Theoretische Physik 5/2: Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. Springer-Lehrbuch. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg. [↗](#).
- Particle Data Group (Aug. 2020). "Review of Particle Physics". In: *Progress of Theoretical and Experimental Physics* 2020.8. [↗](#).
- Steck, Daniel Adam (2013). *Rubidium 85 D Line Data*. 2.1.6. University of Oregon: Oregon Center for Optics und Department of Physics. [↗](#).
- (2015). *Rubidium 87 D Line Data*. 2.1.5. University of Oregon: Oregon Center for Optics und Department of Physics. [↗](#).