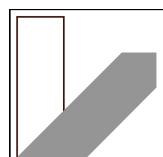


WS2021

PPBphys2

Fortgeschritten Praktikum

Manuel Lippert



PHYSIKALISCHES PRAKTIKUM FÜR FORTGESCHRITTENE

CHAOS IN EINFACHEN PHYSIKALISCHEN SYSTEMEN

Stephan Lück und Reinhard Richter

Inhaltsverzeichnis

1 Motivation	2
2 Kurze Einführung in die nichtlineare Dynamik	2
2.1 Kausalität und Determinismus	2
2.2 Eigenschaften von chaotischem Verhalten	6
2.3 Wege ins Chaos	7
2.4 Experimentelle Untersuchungsmethoden	8
3 Das invertierte Pendel	11
3.1 Prinzip	11
3.1.1 Schwache Nichtlinearität - Monostabiles Pendel	12
3.1.2 Starke Nichtlinearität - Bistabiles Pendel	12
3.2 Versuchsaufbau	12
3.3 Aufgabenstellung	13
3.3.1 Bifurkationsdiagramm:	13
3.3.2 Schwache Nichtlinearität:	13
3.3.3 Starke Nichtlinearität:	13
4 Der Shinriki-Oszillator	15
4.1 Aufbau und Funktionsweise	15
4.2 Aufgabenstellung	16
5 Kurze LabVIEW Anleitung	17
6 Fragen zur Vorbereitung	18
6.1 Allgemeines zum Thema Chaos:	18
6.2 Zum invertierten Pendel:	18
6.3 Zum Shinriki-Oszillator:	18

1 Motivation

Chaos und *nichtlineare Dynamik*, das sind zwei in der Physik häufig genannte Begriffe, unter denen ein physikalisches Teilgebiet zusammengefaßt wird, mit dem sich immer mehr Physiker und auch Wissenschaftler aus anderen Disziplinen beschäftigen.

Der hier beschriebene Praktikumsversuch soll einen ersten Einstieg in dieses noch recht junge Gebiet der Physik geben. Anhand zweier Modellsysteme, einem invertierten Pendel und einem elektrischen Schwingkreis, können einige grundlegende Phänomene der nichtlinearen Dynamik beobachtet werden.

Der für das Experiment und seine Auswertung benötigte begriffliche Hintergrund kann im Rahmen dieser Anleitung natürlich nur in groben Zügen vermittelt werden. Die zusätzliche Beschäftigung mit einschlägigen Lehrbüchern und/oder Originalveröffentlichungen (siehe z.B. Literaturverzeichnis) ist für ein ausreichendes Verständnis unerlässlich und wird daher **dringend** empfohlen.

Vorausgesetzte Kenntnisse folgender Begriffe:

- Phasenraum, Trajektorie, Dissipation, Fourieranalyse
- Erzwungene Schwingung, Resonanzkurven, elektrischer LC-Schwingkreis
- Operationsverstärker (OP), Differenzierer mit OP, Aufnahme von Diodenkennlinien, Zenerdiode

2 Kurze Einführung in die nichtlineare Dynamik

2.1 Kausalität und Determinismus

Schon immer ist es das Ziel der Naturwissenschaften und insbesondere der Physik gewesen, aus der Vergangenheit eines Naturphänomens heraus Vorhersagen über dessen zukünftiges Verhalten zu machen. Solche Voraussagen sind dadurch möglich geworden, daß für viele physikalische Sachverhalte klare Gesetzmäßigkeiten gefunden wurden. Die Physiker haben im Laufe der Zeit abstrakte mathematische Modelle der Natur geschaffen, die mit immer größerer Präzision und Zuverlässigkeit Fragen an die Zukunft beantworten können. Die wesentliche Grundlage dieser Modellbildung ist, daß sich die Natur immer an eine Grundregel zu halten scheint: die *Kausalität*, die Verknüpfung von Ursache und Wirkung (auch *Determinismus* genannt). Alles was geschieht, läßt sich auf Ursachen zurückführen. Umgekehrt bestimmen die Ursachen ihre Wirkungen (s. Abbildung 1). Kurz gesagt:

gleiche Ursachen haben gleiche Wirkungen

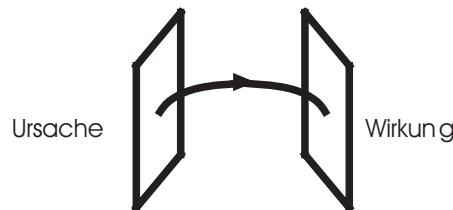


Abbildung 1: Schematische Darstellung des Kausalitätsprinzips.

Unter den Physikern galt es daher lange Zeit als unzweifelhaft, daß sich alle physikalischen Vorgänge zumindest prinzipiell mathematisch so erfassen lassen, daß langfristige Vorhersagen möglich seien. Dieser Determinismus fand seine Formulierung im 18. Jahrhundert durch LAPLACE. Gäbe es ein intelligentes Wesen (den *Laplace'schen Dämon*), das in der Lage wäre, zu einem bestimmten Zeitpunkt Ort und Impuls aller Teilchen sowie die wirkenden Kräfte zu kennen, so könnte es prinzipiell alle künftigen Konstellationen daraus berechnen. Aber dies allein reicht noch nicht aus, um die Natur zu verstehen und ihr ihre Gesetze zu entlocken. Denn es ist nicht möglich, immer exakt dieselben Voraussetzungen, z.B. für ein Experiment, zu schaffen, um eine gewünschte Wirkung zu erhalten. Die Erfolge bei der Berechenbarkeit physikalischer Systeme haben vielmehr die Überzeugung aufkommen lassen, daß ein wesentlich stärkeres Prinzip gelten muß :

ähnliche Ursachen haben ähnliche Wirkungen

Die Reproduzierbarkeit einer Messung ist die wesentliche Grundlage der physikalischen Erkenntnisgewinnung. Sie beruht auf diesem Prinzip der **starken Kausalität**, denn exakt gleiche Bedingungen sind niemals zu realisieren, da schon die Kontrolle der Anfangsbedingungen nur mit einem gewissen Fehler stattfinden kann. Die Fehler des Meßergebnisses sollten, um eine Gesetzmäßigkeit überhaupt angeben zu können, immer aus den Ungenauigkeiten der experimentellen Bedingungen abschätzbar sein, sie sollten ihnen 'ähnlich' sein.

Gegen Ende des letzten Jahrhunderts stieß der französische Mathematiker H. POINCARÉ auf die Tatsache, daß es in der klassischen Mechanik Bewegungen gibt, bei denen kleinste Änderungen in der Startbedingung den Bewegungsablauf radikal verändern, also das Prinzip der starken Kausalität verletzen. Doch diese Erkenntnis wurde von den Physikern lange Zeit als Kuriosität angesehen. Selbst als E. LORENZ in den 60'er Jahren entdeckte, daß schon bei seinem stark vereinfachten Modell von Luftströmungen in der Atmosphäre unvorhersehbares Verhalten auftreten kann, dauerte es noch einige Jahre, bis sich die Erkenntnis durchzusetzen begann, daß Systeme existieren, die nur dem Prinzip der schwachen Kausalität gehorchen. Solche Systeme, bei denen das Prinzip der starken Kausalität verletzt wird und damit die langfristige Vorhersagbarkeit verlorengeht, nennt man *chaotisch*.

Der Unterschied von regulären und chaotischen Bewegungen ist also nicht nur quantitativer Natur. Sondern zwischen ihnen besteht vielmehr ein qualitativer, grundsätzlicher Unterschied, nämlich der Unterschied zwischen dem Prinzip der **starken** bzw. der **schwachen Kausalität** (s. Abbildung 2).

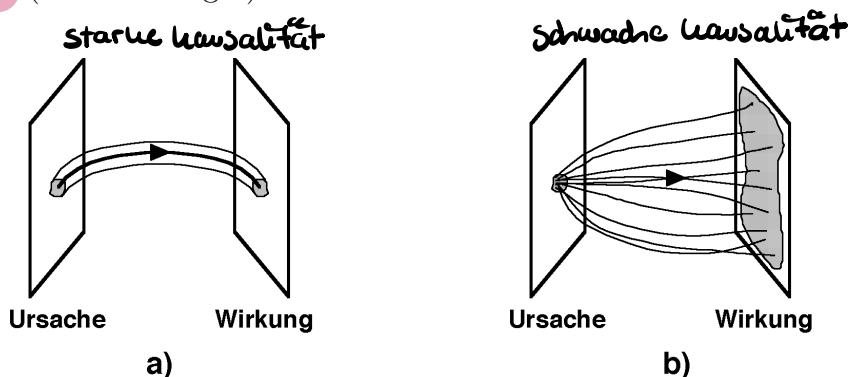


Abbildung 2: Unterschied zwischen dem Prinzip der starken a) und der schwachen Kausalität b).

Dynamisches System, Phasenraum, Phasenfluß, Trajektorie

Mathematischer Ausdruck des Determinismus ist die Formulierung eines physikalischen Sachverhaltes anhand von Differentialgleichungen

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)) \quad (1)$$

bzw. einem Satz von zeitdiskreten Differenzengleichungen.¹

$$\mathbf{x}(t_{n+1}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t_n)) \quad (2)$$

Man nennt dies in beiden Fällen ein *dynamisches System*. Der n -dimensionale Vektor $\mathbf{x}(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$ beschreibt den *Zustand* des Systems zum Zeitpunkt t . Ist nun ein Zustand $\mathbf{x}(t)$ gegeben, so folgen daraus über die zugrunde liegenden Gleichungen eindeutig alle nachfolgenden, sowie auch alle vorausgegangenen Zustände. Das System ist vollständig determiniert.

Durch eine spezielle Lösung von (1) bzw. (2) wird also einem Anfangszustand \mathbf{x}_0 und einem Zeitpunkt t eindeutig ein Zustand $\mathbf{x}(\mathbf{x}_0, t)$ zugeordnet. Die Abbildung, die jedem Anfangszustand einen neuen Zustand zur Zeit t zuordnet, wird *Phasenfluß* (oder kurz: *Fluß*) genannt. Betrachtet man nun die Entwicklung des Systems ausgehend von einem Anfangszustand \mathbf{x}_0 im Laufe der Zeit, so erhält man eine Lösungskurve, die auch *Bahnkurve*, *Orbit*, *Phasenbahn* oder *Trajektorie* des Flusses zur Anfangsbedingung \mathbf{x}_0 genannt wird.

Phasenfluß
alle
 \mathbf{x}_0 zu
jeder Zeit

↳ \mathbf{x}_0 fest \Rightarrow resultierende Bahnkurve

Obwohl es im allgemeinen unmöglich ist, den Phasenfluß explizit auszurechnen, und damit (1) bzw. (2) zu lösen, sind doch gewisse (auch globale) Aussagen über die Bewegung des Systems möglich [9]. Da die beiden Experimente des Praktikums durch 3-dimensionale Differentialgleichungen beschrieben werden können, werden im folgenden nur kontinuierliche Systeme gemäß (1) in drei Dimensionen betrachtet. Die folgenden Aussagen und Definitionen gelten jedoch analog auch für höhere Dimensionen und für den diskreten Fall (2).

Dissipation, transiente und stationäre Bewegung, Attraktor, Einzugsgebiet

Durch Gleichung (1) wird im Phasenraum ein Vektorfeld \mathbf{F} definiert, das als Geschwindigkeitsfeld des Phasenflusses interpretiert wird. Da die Divergenz von \mathbf{F} die Rate bestimmt, mit der sich ein Volumenelement (unter der Wirkung des Flusses) ändert, bleibt im Falle von $\text{div } \mathbf{F} = 0$ ein Volumen U im Phasenraum konstant (Satz von Liouville). In einem solchen dynamischen System gilt die Energieerhaltung. Man nennt es ein *konservatives System*.

Zieht sich dagegen ein Volumen U des Phasenraumes im zeitlichen Mittel zusammen, so spricht man von einem *dissipativen* dynamischen System. Dies ist der Fall, wenn z.B. für alle Punkte \mathbf{x} des Phasenraumes im Zeitmittel gilt: $\text{div } \mathbf{F}(\mathbf{x}) < 0$. Beispielsweise ist ein System dissipativ, wenn irgendeine Form von Reibung vorliegt. Da in den meisten realen Systemen, wie auch in den hier vorgestellten Experimenten, Reibung vorhanden ist, wird im weiteren nur noch auf die dissipativen dynamischen Systeme eingegangen.²

In dissipativen Systemen verlaufen die Trajektorien nach einer gewissen Einlaufphase in einem begrenzten Bereich im Phasenraum.³ Diese Teilmenge des Phasenraumes nennt

¹Solch ein Satz von Differenzengleichungen kann einerseits durch das (physikalische) System gegeben sein oder auch aus einer Diskretisierung von Differentialgleichungen gewonnen werden (z.B. Poincaré-Schnitt s.u.).

²Es gibt auch konservative Systeme, die chaotisches Verhalten zeigen, wie z.B. das berühmte Doppelpendel. Jedoch müssen diese anders behandelt werden. (siehe z.B. KAM-Theorem)

³Dabei kann es vorkommen, daß sich die Bewegung nur beliebig nahe an diesen Bereich annähert.

Bereich der Trajektorien im Phasenraum bei dissipativen Systemen

↑
man einen **Attraktor**. Die Bewegung in der Einlaufphase (z.B. Einschwingen beim Pendel) wird auch als *transiente* Bewegung bezeichnet, während die Bewegung auf dem Attraktor *permanent* oder *posttransient* genannt wird.

Da sich zwei Trajektorien niemals schneiden dürfen, was eine direkte Folge aus der Kausalität ist, existieren in zweidimensionalen Phasenräumen nur zwei verschiedene Arten von Attraktoren, der *stabile Fixpunkt* und der *Grenzzyklus* (s. Abb. 3). Im Dreidimen-

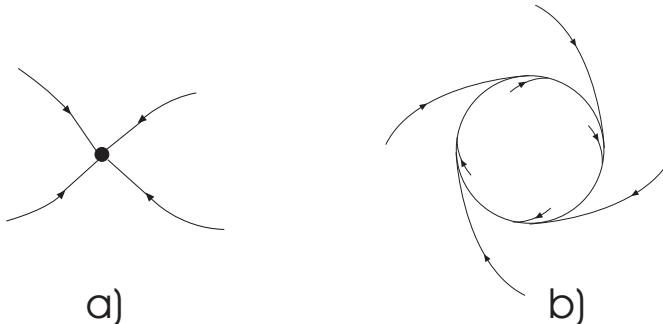


Abbildung 3: Darstellung der im zweidimensionalen Phasenraum möglichen Attraktoren:
a) der Fixpunkt und b) der Grenzzyklus.

sionalen erhält man als weiteren regulären Attraktortyp den *Ring- oder Torusattraktor* hinzu (s. Abb. 4a). Eine Bewegung auf einem Torus kann durch eine Überlagerung zweier Kreisbewegungen beschrieben werden. Dabei können die beiden Umlaufzeiten in einem rationalen bzw. in einem irrationalen Verhältnis stehen. Man spricht dann von einer *periodischen* bzw. einer *quasiperiodischen* Bewegung. Des Weiteren gibt es ab drei Phasenraumdimensionen einen weiteren Attraktortyp, den man aufgrund seiner merkwürdigen Eigenschaften *seltsamen Attraktor* nennt (s. Abb. 4b). Wie unten genauer begründet wird, besitzt ein solcher seltsamer Attraktor eine sehr komplexe, unendlich feine Struktur. Die Bewegung verläuft hier mit einer starken Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen, das Prinzip der starken Kausalität ist also verletzt.

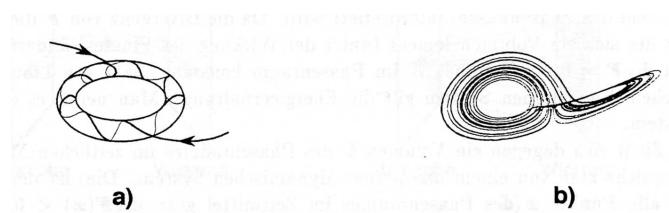


Abbildung 4: Phasenraumdarstellung weiterer Attraktoren in drei Dimensionen: a) der Torusattraktor und b) der seltsame Attraktor.

Es ist möglich, daß in einem System mehrere Attraktoren nebeneinander existieren. Zu jedem Attraktor gehört dann ein bestimmter Teil des Phasenraumes, der unter der Wirkung des Flusses auf den Attraktor abgebildet wird. Man nennt dieses (nicht immer zusammenhängende) Gebiet den *Einzugsbereich* oder auch das *Bassin* des Attraktors. Die Trennlinie oder Trennfläche (i.a. Hyperfläche) der verschiedenen Einzugsbereiche unterschiedlicher Attraktoren wird *Separatrix* genannt. Ein Beispiel für das Auftreten zweier koexistenter Attraktoren ist der Shinriki-Oszillator im zweiten Versuchsteil.

2.2 Eigenschaften von chaotischem Verhalten

Wie schon angedeutet, ist die Sensitivität von den Anfangsbedingungen durch die Verletzung der starken Kausalität die definierende Eigenschaft einer chaotisch verlaufenden Bewegung. Zwei im Phasenraum zunächst eng benachbarte Zustände entfernen sich unter der Wirkung des Flusses exponentiell voneinander. Die Stärke des exponentiellen Auseinanderlaufens der Trajektorien wird durch den *Lyapunov-Exponenten* beschrieben. Hierzu betrachtet man für zwei benachbarte Trajektorien $f^t \mathbf{x}_0, f^t \mathbf{x}'_0$ die zeitliche Entwicklung ihres Abstandes, der sogenannten *Störung* $\epsilon_t \equiv \| f^t \mathbf{x}_0 - f^t \mathbf{x}'_0 \|$, über einen längeren Zeitraum. Das exponentielle Wachstum dieser Störung wird durch die Gleichung

$$\epsilon_t \simeq \epsilon_0 e^{\lambda t} \quad (3)$$

beschrieben, wobei λ der Lyapunov-Exponent ist.

Ist $\lambda > 0$, so wächst die Störung unter der Flußwirkung, und die Bewegung verläuft chaotisch, während bei $\lambda < 0$ die Trajektorien aufeinander zu laufen. Die Bewegung verläuft dann stabil bzw. regulär. Bei $\lambda = 0$ kann man keine eindeutige Aussage machen. Zu beachten ist dabei noch, daß es sich beim Lyapunov-Exponent um eine globale Größe und damit um einen Mittelwert über den gesamten Attraktor handelt. Weiterhin läßt sich für n -dimensionale dynamische Systeme jeder Raumrichtung genau ein Lyapunov-Exponent zuordnen. Diese werden dann der Größe nach geordnet, $\lambda_i \geq \lambda_{i+1}$, zum sogenannten *Spektrum der Lyapunov-Exponenten* zusammengefaßt.

Da nun einerseits die Trajektorien bei chaotischem Verhalten exponentiell auseinanderlaufen, aber andererseits die Bewegung in einem begrenzten Bereich des Phasenraumes verläuft (s.o.), muß es einen Mechanismus geben, der diesen Widerspruch aufhebt. Dies geschieht dadurch, daß die Trajektorien immer wieder in einen begrenzten Bereich zurückgefaltet werden. Solche Streck- und Faltvorgänge können in gewöhnlichen linearen dynamischen Systemen nicht auftreten, sondern sie setzen Nichtlinearitäten voraus. Damit ein System also überhaupt chaotisches Verhalten zeigen kann, müssen Nichtlinearitäten vorhanden sein. Dies soll hier kurz am Beispiel der einfachsten nichtlinearen Funktion, einer quadratischen Funktion, der sogenannten *Verhulst-Funktion* oder *logistischen Abbildung*, verdeutlicht werden. Der Graph der Verhulst-Funktion

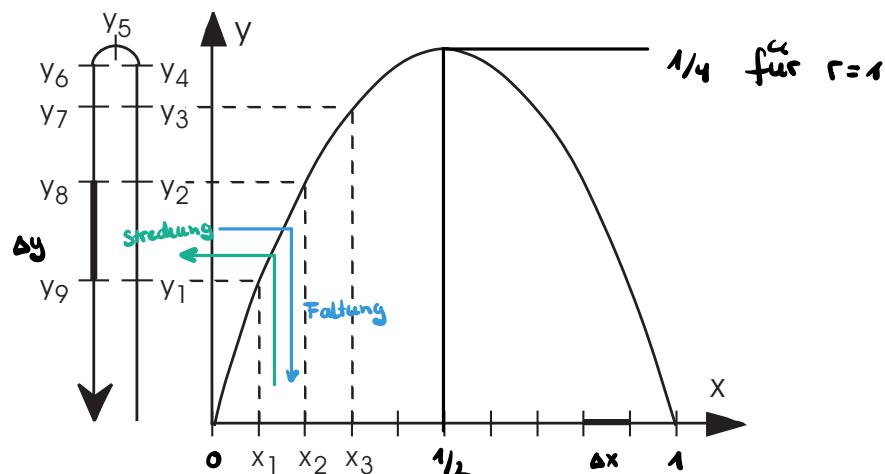


Abbildung 5: Verdeutlichung der Streck- und Faltungsvorgänge anhand der Verhulst Funktion.

$$\begin{array}{l}
 \xrightarrow{\text{JS+}} \quad x=0,1 \\
 f_r(x) = rx(1-x) \\
 f'_r(x) = 2\left(\frac{1}{2}-x\right)
 \end{array} \tag{4}$$

ist eine nach unten geöffnete Parabel. Ist nun der Betrag der Steigung größer als 1, so wird das Intervall gedehnt:

$$\Delta y = |f_r(x_2) - f_r(x_1)| > |x_2 - x_1| = \Delta x \tag{5}$$

Gleichzeitig findet eine Faltung statt, sodaß zum Beispiel die Intervalle Δx_1 und Δx_2 auf das Intervall Δy abgebildet werden (s. Abb. 5). Dadurch wird die gesamte Wertemenge trotz der (lokalen) Streckung nicht größer als die Definitionsmenge. Das Falten bewirkt außerdem, daß benachbarte Funktionswerte von weit auseinanderliegenden Argumenten stammen können. Die Nichtlinearität ist also entscheidend für die Streck- und Faltvorgänge. Sie ist deshalb auch notwendig (wenn auch nicht hinreichend) für chaotisches Verhalten. Durch das häufige Auftreten von Nichtlinearitäten in der Natur sind daher Systeme, die chaotisches Verhalten zeigen können, eher die Regel denn die Ausnahme.

Durch das ständige Zurückfalten der Trajektorien entstehen im Attraktor immer feiner ineinander liegende Strukturen. Man kann nun immerfort einen Bereich aus diesem vielschichtigen, an einen Blätterteig erinnernden Attraktor herausvergrößern und erhält jeweils wieder ähnliche Strukturen. Man sagt: ein chaotischer Attraktor ist *selbstähnlich*.

Aus der Mathematik sind solche selbstähnlichen geometrischen Objekte bekannt. Sie haben eine weitere 'seltsame' Eigenschaft. Ihre Dimension ist nicht ganzzahlig, sie ist gebrochen. Daher werden diese Objekte als *Fraktale* bezeichnet. Auch der Attraktor einer chaotischen Bewegung ist ein Fraktal. Im dreidimensionalen Phasenraum kann man sich die Notwendigkeit der Fraktalität des Attraktors mit folgender Überlegung klar machen: Wie oben gesagt, bewirkt die Dissipation das Zusammenziehen des Phasenraumes, sodaß das (verallgemeinerte) Volumen eines Attraktors Null ist. Damit gilt für seine Dimension: $d < 3$. Bei einer chaotisch verlaufenden Bewegung entfernen sich zwei Trajektorien exponentiell voneinander. Aus der Tatsache, daß die Bewegung in einem begrenzten Bereich im Phasenraum verläuft und die Trajektorien sich nicht schneiden dürfen (Eindeutigkeit), folgt für die Dimension: $d > 2$. Also ist $2 < d < 3$.

Die fraktale Dimension ist also neben einem positiven Lyapunov-Exponenten eine weitere charakterisierende Eigenschaft eines seltsamen Attraktors, und damit einer chaotischen Bewegung.

2.3 Wege ins Chaos

Die Bewegung eines nichtlinearen Systems verläuft nicht in jedem Fall chaotisch. Ob sie nun chaotisch ist oder nicht, hängt von den Werten sogenannter *Kontroll-Parameter* ab. Diese spiegeln bestimmte, von außen zugängliche Bedingungen wieder, die das System, und damit die Bewegung, beeinflussen. Ein Beispiel hierfür ist die Anregungsfrequenz bei einem getriebenen nichtlinearen Pendel. Durch das Verändern eines oder mehrerer dieser Parameter kann man nun das System vom regulären ins chaotische Verhalten überführen. Dabei gibt es mehrere Möglichkeiten, wie dieser Übergang stattfinden kann. Drei bekannte Wege ins Chaos sind:

Periodenverdopplungskaskade:

Bei bestimmten Werten des Kontrollparameters verdoppelt sich die Periodendauer des Systems. Dies geschieht durch eine spezielle (Flip-) Bifurkation. Die Periodenverdopplungskaskade umfasst jedoch nicht nur eine Bifurkation, sondern eine unendliche Folge

von Bifurkationen, die für einen endlichen Wert des Kontrollparameters einem Häufungspunkt zustrebt. Man erhält für unterschiedliche Kontrollparameter Perioden mit der Periodenlänge eins, zwei, vier, acht usw. Man sagt hierfür kurz z.B. Periode eins. Die Differenzen zwischen den Parameterwerten r_n , bei denen diese Bifurkationen auftreten, werden dabei immer kleiner. Das Verhältnis dieser aufeinanderfolgenden Differenzen

$$\delta_n = \frac{r_n - r_{n-1}}{r_{n+1} - r_n} \quad \text{Parameterwerte} \quad (6)$$

strebt für große n gegen einen festen Wert $\delta = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n = 4.6692\dots$, die *Großmann- bzw. Feigenbaum-Konstante*. So kann im Experiment über die ersten Bifurkationspunkte die Großmann-Feigenbaum-Konstante näherungsweise bestimmt werden. Dabei hilft die Tatsache, daß diese Folge recht schnell konvergiert, so daß man bereits durch Erfassen der ersten vier Bifurkationsstellen die Großmann- bzw. Feigenbaum-Konstante mit guter Genauigkeit bestimmen kann.

Erhöht man nun den Parameter über einen kritischen Parameterwert r_∞ hinaus, so tritt chaotisches Verhalten auf, das bei bestimmten Parameterwerten durch sogenannte periodische Fenster unterbrochen wird. In diesen Fenstern ist die Bewegung wieder regulär. Beide hier vorgestellte Experimente zeigen ein solches Bifurkationsszenario bei Variation der jeweiligen Parameter.

Intermittenz:

Überschreitet der Kontrollparameter einen kritischen Wert so wird die zunächst reguläre Bewegung durch chaotische Sequenzen unterbrochen. Für zunehmenden Abstand des Kontrollparameters vom kritischen Wert nimmt die Länge der regulären Phasen ab, die chaotischen Phasen werden immer häufiger, bis die Bewegung chaotisch dominiert ist. Es sind momentan mindestens 5 verschiedene Intermittenz-Typen bekannt, die mit unterschiedlichen Bifurkationen verknüpft sind.

Quasiperiodizität:

Der Übergang ins Chaos erfolgt hierbei über das Aufbrechen eines quasiperiodischen Orbits (s.o.), einer inkommensurablen Bewegung auf einem Ringattraktor (s. Abbildung 6).

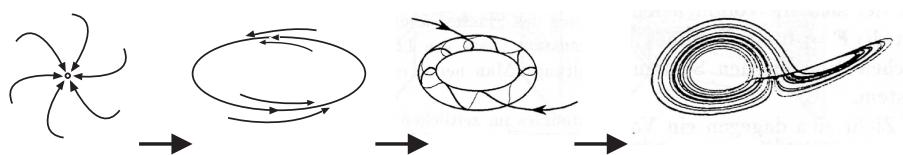


Abbildung 6: Phasenraumdarstellung des quasiperiodischen Übergangs ins Chaos.

2.4 Experimentelle Untersuchungsmethoden

Um eine chaotische Bewegung zu charakterisieren, verwendet man in der nichtlinearen Dynamik u.a. folgende Methoden:

Autokorrelationsfunktion und Fourier-Analyse:

Die Bestimmung der Autokorrelationsfunktion sowie die Fourier-Analyse sind zwei 'klassische' Untersuchungsmethoden von zeitabhängigen Meßgrößen.

Die Autokorrelationsfunktion ist durch

$$C_{xx}(\tau) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{\int_0^T (x(t) - \langle x(t) \rangle)(x(t + \tau) - \langle x(t) \rangle) dt}{\int_0^T (x(t) - \langle x(t) \rangle)^2 dt} \quad (7)$$

definiert, wobei $x(t)$ die Meßgröße zur Zeit t und τ eine Zeitverschiebung zu t ist. Die Autokorrelationsfunktion gibt also Auskunft über die Ähnlichkeit des zeitlichen Verlaufs einer Meßgröße mit sich selbst, wenn sie um die Zeit τ verschoben wird. Bei vollständiger Übereinstimmung ist die Autokorrelationsfunktion eins, was für eine Korrelationszeit $\tau = 0$ immer der Fall ist (also $C_{xx}(0) = 1$). Eine weitere Eigenschaft ist, daß die Autokorrelationsfunktion eines periodischen Signals ebenfalls wieder periodisch ist. Für ein autonomes System geht die Autokorrelationsfunktion des chaotischen Signals dagegen für wachsendes τ gegen Null. Die Korrelationszeit, bei der die Autokorrelationsfunktion Null wird, hat hier einen endlichen Wert, wogegen beim stochastischen weißen Rauschen die Autokorrelationsfunktion für $\tau \neq 0$ sofort auf Null absinkt.

Bei der Fourier-Analyse werden für die unterschiedlichen Frequenzen die Leistungsanteile im Zeitsignal bestimmt. Man erhält ein Leistungsspektrum $P(\omega)$, das folgendermaßen definiert ist:

$$P(\omega) := |\hat{x}(\omega)|^2, \text{ mit } \hat{x}(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T x(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (8)$$

Im Leistungsspektrum kann man die Periodenverdopplung sehr gut durch bei der halben Frequenz herauswachsende Maxima erkennen. Bei einer chaotischen Bewegung erhält man einen kontinuierlichen Verlauf des Leistungsspektrums, der im Unterschied zum weißen Rauschen für große Frequenzen abnimmt.

Phasenraumdarstellung und Attraktor-Rekonstruktion:

Die Phasenraumdarstellung gibt einen vollständigen Überblick über den Verlauf der Bewegung. Man erhält sie durch Auftragen je einer Phasenraumvariablen in jeder Raumachse. Eine Schwierigkeit dabei ist, daß bei den meisten Systemen, die in der Natur vorkommen, nicht alle Phasenraumvariablen bekannt bzw. meßbar sind. Es gibt jedoch ein Verfahren, den Attraktor aus den zugängigen Meßgrößen so zu rekonstruieren, daß alle Informationen über die Bewegung erhalten bleiben. Dazu interpretiert man bei einer festen Zeitspanne Δ die Meßwerte einer Phasenraum-Variablen $\Phi(t), \Phi(t + \Delta), \dots, \Phi(t + (n - 1)\Delta)$ als Koordinaten x_i eines neuen Koordinatensystems. Wenn man die Dimension n und die Verzögerungszeit Δ richtig gewählt hat, so erhält man eine dem tatsächlichen Attraktor äquivalente Darstellung.

Ein weiteres Problem bei der Phasenraumdarstellung besteht darin, daß man sich Trajektorien gerade noch in drei Dimensionen vorstellen kann, viele Systeme jedoch höherdimensional sind. Abhilfe schafft dabei der

Poincaré-Schnitt:

Beim Poincaré-Schnitt werden nur die Durchstoßpunkte der Trajektorien durch eine Hyperfläche ausgewählt und mit anschließender Projektion in einer Ebene dargestellt. Diese Hyperfläche muß die Trajektorien definitionsgemäß überall transversal schneiden. Eine weitere Bedingung ist, daß nur diejenigen Schnittpunkte berücksichtigt werden, deren zugehörige Trajektorie die Poincaré-Ebene in einer festgelegten Richtung passieren. Man erhält dadurch eine diskrete Abbildung der Bewegung. Des Weiteren ist die Dimension der Poincaré-Abbildung um eins geringer als die Dimension des Phasenraums. Diese Abbildung heißt auch Poincaré-Abbildung. Die Erfahrung zeigt, daß bei dieser Reduktion der Dimension keine wesentliche Information über das Langzeitverhalten des Systems verlorengeht.

Im Experiment nimmt man als Bedingung für die Schnittebene meist die Lage entweder der Maxima oder der Minima einer Meßgröße, und trägt die anderen (evt. durch die Rekonstruktionsmethode gewonnenen) Variablen zu diesen Zeitpunkten gegeneinander auf. Manchmal wird auch direkt eine Ebene gewählt, die den Attraktor in geeigneter Weise schneidet. Man erhält so zum Beispiel bei einem Periode-2 Orbit zwei Punkte in der Poincaré-Ebene, bei Periode-4 dementsprechend vier Punkte usw.

Wiederkehr-Abbildung (Return-Map):

Bei der Wiederkehr-Abbildung wird von einer diskreten Abbildung der aktuelle Meßwert über dem vorangegangenen Meßwert aufgetragen. Falls ein kontinuierliches System (1) vorliegt, nimmt man dessen Poincaré-Abbildung für dieses Verfahren. Ähnlich zum Poincaré-Schnitt erhält man hier für periodische Bewegungen zum Beispiel bei einem Periode-2 Orbit zwei Punkte in der Wiederkehrabbildung, bei Periode-4 vier Punkte usw.

Bifurkationsdiagramm:

Den Weg der Periodenverdopplung kann man durch ein sogenanntes Bifurkationsdiagramm darstellen. Hierbei betrachtet man die Projektion der Poincaré-Abbildung auf eine Achse unter Veränderung eines Kontrollparameters. Um ein Bifurkationsdiagramm zu erhalten, trägt man die durch eine solche Projektion erhaltenen Werte (z.B. Schwingungsmaxima) über den jeweiligen Parameterwert auf. Die folgende Abbildung 7 zeigt als Beispiel ein berechnetes Bifurkationsdiagramm für den Shinriki-Oszillatoren im zweiten Versuchsteil.

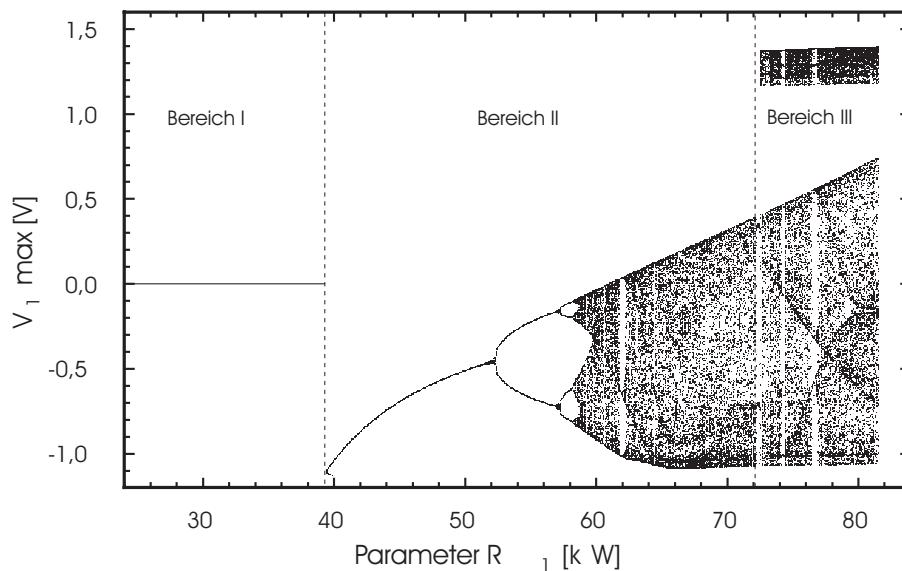


Abbildung 7: Berechnetes Bifurkationsdiagramm für den Shinriki-Oszillatoren (s.u.).

Wenn mehrere unterschiedliche Parameter existieren, erhält man Informationen über das globale Systemverhalten bei den verschiedenen Parameterkombinationen über das sogenannte

Phasendiagramm: Beim Phasendiagramm wählt man als Koordinatenachsen zwei (unabhängige) Parameter, die das Systemverhalten beeinflussen. In dieses Koordinatensystem trägt man die Bereiche qualitativ unterschiedlichen Verhaltens (z.B. Periode 1, Periode 2 oder Chaos) ein und erhält so quasi eine 'Landkarte' des Systemverhaltens für die gewählten Parameter. Man kann als Analogie z.B. gebräuchliche Phasendiagramme bei der Charakterisierung der Zusammensetzung von Substanzen betrachten.

3 Das invertierte Pendel

3.1 Prinzip

Der erste Teil des Versuchstages besteht aus der Untersuchung eines getriebenen invertierten Pendels (s. Abbildung 8). Durch das (veränderbare) Gewicht am oberen Ende

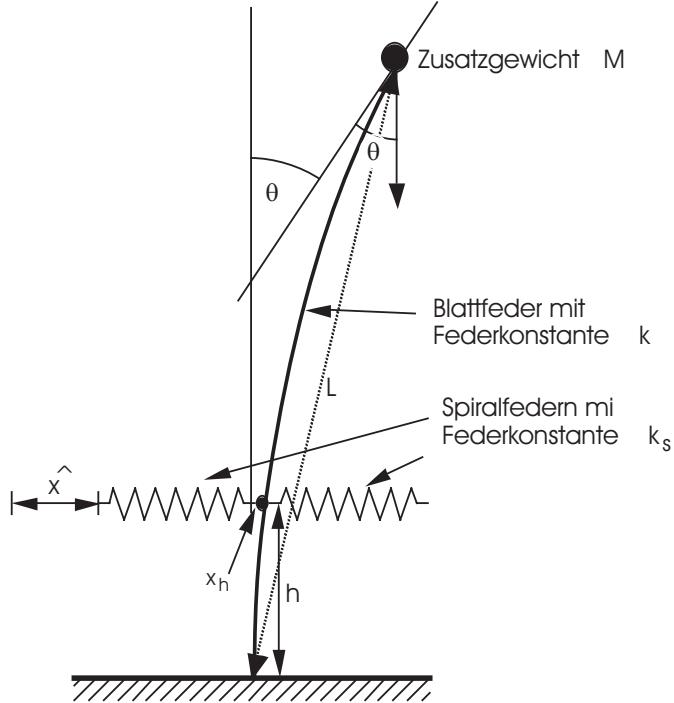


Abbildung 8: Skizze des invertierten Pendels

einer unten eingespannten elastischen Blattfeder erhält man einen nichtlinearen Schwinger, der trotz seines einfachen Aufbaus sehr komplexe Bewegungen ausführen kann. Die Bewegungsgleichung des invertierten Pendel lautet in genäherter Form

$$ML^2 \frac{d^2\theta}{dt^2} + c \frac{d\theta}{dt} + k\theta - MgL \sin(\theta) = T_0 \cos(\omega_a t). \quad (9)$$

θ ist dabei der Winkel zwischen der Tangente am Pendelende und dem Lot (s.Abb. 8), M die Masse des Gewichts, L die Entfernung zwischen der Basis der Blattfeder und dem Schwerpunkt des Gewichts, c die Dämpfungskonstante, k die Federkonstante, g die Erdbeschleunigung und $T_0 \cos(\omega_a t)$ das über die Spiralfedern periodisch angreifende Drehmoment.

Zu den beiden letzten Termen auf der linken Seite der Gleichung lässt sich ein Potential angeben,

$$V(\theta) = \frac{1}{2}k\theta^2 + MgL(\cos(\theta) - 1) \quad (10)$$

mit $V(0) = 0$. Bei einer kritische Masse $M_k = \frac{k}{gL}$, geht das zunächst monostabile Pendel in ein bistabiles System über. Dieser Übergang stellt eine sogenannte *Symmetriebrechung* dar. Die Bewegung des Pendels ist in den beiden Fällen sehr unterschiedlich und muß daher getrennt betrachtet werden.

3.1.1 Schwache Nichtlinearität - Monostabiles Pendel

Bei einem nichtlinearen Oszillatator hängt, im Gegensatz zum linearen Oszillatator, die Eigenfrequenz ω_r von der Schwingungsamplitude b ab, also $\omega_r(b)$. Auch bei Anregung des Pendels mit unterschiedlichen Frequenzen ω_a ist die sich einstellende Schwingungsamplitude $b(\omega_a)$ verschieden. Man erhält eine sich vom linearen Fall deutlich unterscheidende Resonanzkurve. Bei genügend großer Masse M des Gewichtes (aber $M < M_k!$), kann hier eine Hysterese in der Resonanzkurve beobachtet werden [5].

3.1.2 Starke Nichtlinearität - Bistabiles Pendel

Wird das Gewicht an der Spitze der Blattfeder so groß, daß sich zwei stabile Ruhelagen ergeben, so lassen sich bei Anregung dieses stark nichtlinearen Schwingers sehr unterschiedliche Bewegungen beobachten. Das Pendel kann, je nach Werten der Parameter Anregungsfrequenz ω_a und -amplitude T_a , harmonisch, subharmonisch oder chaotisch schwingen.

3.2 Versuchsaufbau

Das invertierte Pendel besteht aus einer Blattfeder, die auf einer Grundplatte befestigt ist. Am oberen Ende ist eine Halterung für verschiedene Gewichte angebracht. Die Blattfeder wird über eine Spiralfeder und einen Hebel von einem Schrittmotor mit einstellbarer Umdrehungszahl angetrieben. Die Kraft ist durch Verändern des Angriffspunktes der Spiralfeder am Übertragungshebel variierbar. Die Messung der zeitabhängigen Auslenkung erfolgt über seitlich aufgeklebte *Dehnungsmeßstreifen* (*DMS*), deren elektrischer Widerstand von ihrer Dehnung abhängt. Um eine höhere Genauigkeit zu erzielen, wird die Spannungsdifferenz von zwei, in einer Brückenschaltung verschalteten, DMS gemessen. (s. Abb. 9) Die so erhaltene Spannung ist proportional zur Pendelauslenkung. Um die Geschwindigkeit als zweite Phasenraumvariable zu ermitteln, wird das Signal über eine Operationsverstärker-Schaltung differenziert. Beide Spannungen werden dann mit einer

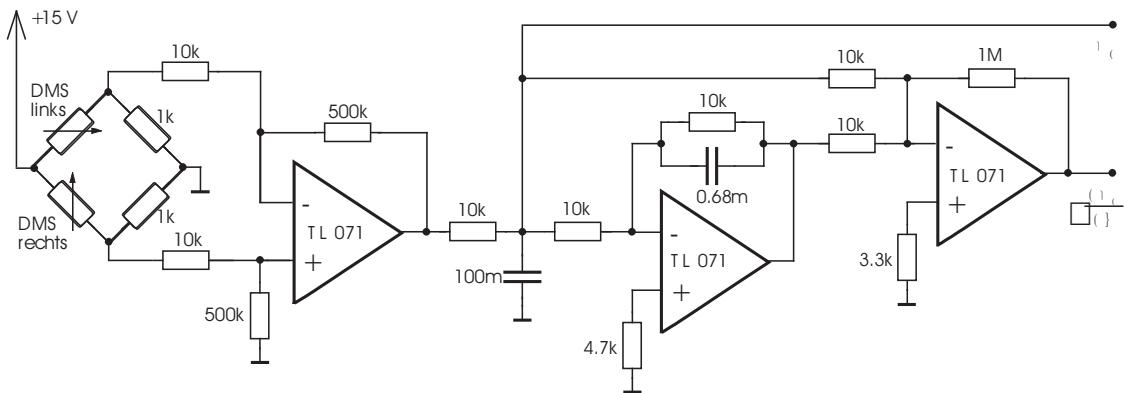


Abbildung 9: *Meßschaltung der DMS*.

in einem PC eingebauten Analog-Digital-Wandler- karte gemessen. Die Meßkarte wird über das Programm LABVIEW gesteuert. (s. Abschnitt 5)

3.3 Aufgabenstellung

3.3.1 Bifurkationsdiagramm:

Vermessen Sie die verschiedenen Gleichgewichtslagen $\theta_g(M)$ für steigende Pendelmasse.

Hinweise: Verbinden Sie den Ausgang U_a der Platine mit dem Eingang des Multimeters. Für diese statische Messung müssen Sie die Gewichte nicht festschrauben (Zeiter-sparnis). Zum Abwiegen der Gewichte steht Ihnen eine Waage zur Verfügung. Stellen Sie das zugehörige Bifurkationsdiagramm in der Form $\theta_g(M)$ noch während des Versuches auf. Ist das Bifurkationsdiagramm symmetrisch zur Laage $\theta_g = 0$? Bestimmen sie nun $\Delta\theta_g = \theta_{\text{links}} - \theta_{\text{rechts}}$ und tragen Sie es in der Form $\Delta\theta^2(M)$ auf. Bestimmen Sie durch einen Fit die kritische Masse M_k , bei der das Pendel bistabil wird. Berechnen Sie aus der kritischen Masse M_k die Federkonstante k . Wie kann man das Ergebnis überprüfen?

3.3.2 Schwache Nichtlinearität:

Ein schwach-nichtlineares Verhalten ist im Bereich $M < M_k$ zu erwarten. Die Nichtlinearität nimmt bei Annäherung an M_k zu.

- Ermitteln Sie experimentell die Amplitudenabhängigkeit der Pendelfrequenz.

Hinweis: Für alle folgenden Versuche müssen das Dämpfungssegel (Blech) sowie die Massen mit Hilfe der Rändelschraube am Pendel festgeschraubt werden. Bestimmen Sie aus der abgespeicherten Zeitserie $U_a(t)$ im .dat-file den zeitlichen Abstand der Maxima oder der Nulldurchgänge (z.B. mit Hilfe eines phyton oder C++ Programmes).

- Vermessen Sie im Experiment eine Hystereseschleife in der Resonanzkurve.

Hinweis: Verwenden Sie dazu den gesonderten Programmteil. Damit die Antriebsfrequenz innerhalb des eingestellten Bereiches erhöht und anschliessend erniedrigt wird aktivieren Sie bitte den Knopf *automatic*.

3.3.3 Starke Nichtlinearität:

Wie oben schon gesagt, kann das Pendel im bistabilen Bereich harmonisch, subharmonisch und chaotisch antworten.

- Lokalisieren Sie durch Variation der Antriebsfrequenz die verschiedenen Schwingungszustände des Pendels und stellen Sie diese mit dem Computer im Phasenraum dar. Die unterschiedlichen Schwingungen werden jeweils durch ihre Fourier-Spektren charakterisiert, die ebenfalls aufzunehmen sind.

Hinweis: Variieren Sie die Antriebsfrequenz nur in kleinen Schritten (quasiadiabatisch) und warten Sie bis das System relaxiert ist. Ansonsten riskieren Sie Sprünge auf andere Attraktoren.

- Zeigen Sie die empfindliche Abhängigkeit von den Anfangsbedingungen im chaotischen Bereich.

Hinweis: Starten Sie dazu das Pendel mehrmals mit (beliebig gewählten) gleichen Startwerten. Beachten Sie dabei, daß die Phase der Anregung beim Start immer gleich ist! Plotten Sie in ein Diagramm je zwei Zeitserien mit ähnlichen Anfangsbedingungen. Ab welchem Zeitpunkt differieren die Werte erheblich? Erstellen Sie für

diese Zeitserien eine Phasenraumdarstellung. Markieren Sie den Startpunkt und die Phasenraumposition nach einer gewissen Zeit.

Bemerkung:

Zu den einzelnen Aufgabenstellungen (auch für den Shinriki-Oszillator s.u.) existieren jeweils fertige Meßprogramme für LabVIEW (s. Abschnitt 5).

4 Der Shinriki-Oszillator

4.1 Aufbau und Funktionsweise

Im Gegensatz zum invertierten Pendel, das ein Beispiel für ein von außen periodisch getriebenes System ist, stellt der Shinriki-Oszillator ein *autonomes* System dar. Er besteht im wesentlichen aus einer Parallelschaltung von einem negativen Impedanzkonverter, engl. '*negative impedance converteter*' (kurz NIC), und einem Kondensator, die über ein gegenüber gesetztes Zenerdiodepaar an einen gewöhnlichen Parallelschwingkreis gekoppelt ist (s. Abbildung 10). Der Aufbau des NICs geht aus der Abbildung 10 hervor. In der

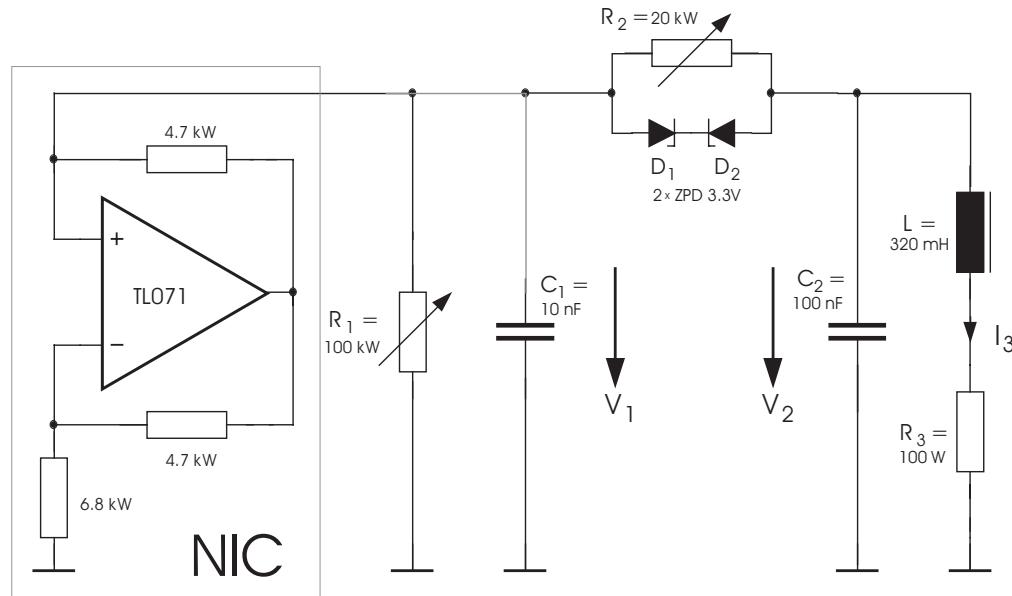


Abbildung 10: Elektrische Schaltung des Shinriki-Oszillators

Schaltung wirkt er als negativer Widerstand (fallende Gerade in der Strom-Spannungs-Kennlinie) und dient des Weiteren als Energiereservoir, um die ohmschen Verluste der Schaltung auszugleichen.

Die Kontroll-Parameter des Oszillators sind die Widerstände R_1 und R_2 . Der Widerstand R_1 kompensiert teilweise den vom NIC in die Schaltung abgegebenen Strom und bestimmt damit die im Oszillator vorhandene Energie, während R_2 in die nichtlineare Kopplung mitbestimmt, die aus einer Parallelschaltung von R_2 und den Zenerdioden besteht. Mit den Kirchhoff'schen Gesetzen (Knoten- und Maschenregel) lässt sich das Differentialgleichungssystem aufstellen, mit dem der Oszillator beschrieben werden kann.

$$\begin{aligned} C_1 \dot{V}_1 &= V_1 \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R_1} \right) - f(V_1 - V_2) \\ C_2 \dot{V}_2 &= f(V_1 - V_2) - I_3 \\ L \dot{I}_3 &= -I_3 R_3 + V_2 \end{aligned} \quad (11)$$

wobei f die Strom-Spannungs-Kennlinie des kompletten Kopplungsgliedes ist, das aus dem Zenerdiodepaar und dem Widerstand R_2 besteht. Die restlichen Bezeichnungen sind aus Abbildung 10 ersichtlich.

Für bestimmte Parameterwerte von R_1 bzw. R_2 existieren drei Fixpunkte, wovon einer der Nullpunkt ist. Die Fixpunkte erhält man durch Null setzen der zeitlichen Ableitung der Phasenraumvariablen (linke Seite der Gleichungen). Während der Fixpunkt im Nullpunkt instabil ist, sind die beiden weiteren Fixpunkte anziehend. Um diese beiden Fixpunkte kann sich, bei entsprechenden Parameterwerten, jeweils ein chaotischer Attraktor entwickeln. Es gibt noch einen weiteren Parameterbereich in dem sich die Bewegung des Systems abwechselnd um beide Fixpunkte herum 'spiralt', man nennt den dazugehörigen Attraktor deshalb *double scroll*-Attraktor.

4.2 Aufgabenstellung

- a) Phasendiagramm: Schließen Sie den Schwingkreis an den Lautsprecher mit eingebautem Verstärker an und versuchen Sie durch Verändern der beiden Parameter R_1 und R_2 die verschiedenen Oszillationstypen zu hören. Betrachten Sie dazu die Trajektorien auf dem Oszilloskop (X-Y-Einstellung). Erstellen Sie so ein Phasendiagramm, worin Periode 1,2,4, einfaches Chaos, Periode 3-Fenster und double-scroll Chaos einzutragen sind. Nehmen Sie genügend Messpunkte auf!
- b) Schnitt durch das Phasendiagramm: Suchen Sie aus dem Phasendiagramm einen geeigneten Wert für einen der beiden Parameter R_1 oder R_2 aus, und stellen diesen fest (Kriterium: möglichst gedeckter Bifurkationsbereich). Charakterisieren Sie die verschiedenen Oszillationszustände die Sie unter Variation des anderen Parameters erhalten. Charakterisieren Sie diese durch Aufnahme von Phasenraumdarstellungen und Leistungsspektren sowie evtl. Poincaré-Diagrammen und/oder Wiederkehrabbildungen. Verwenden Sie dazu das Messprogramm.
- c) Erstellen Sie ein Bifurkations-Diagramm für den oben gewählten Schnitt durch das Phasendiagramm. Verwenden Sie dazu den speziellen Programmteil. Vergleichen Sie das gemessene Bifurkationsdiagramm mit dem aus einer numerischen Simulation gewonnenen Bifurkations Diagramm aus Abbildung 7.
- d) Bestimmen Sie die Großmann-Feigenbaum-Konstante δ . Wieviele Bifurkationen sind dazu mindestens erforderlich? Wie erklären Sie sich die Abweichung vom Literaturwert?
- e) Zum Einbettungstheorem:
Variieren Sie die Delay-Zeit Δt im Programm zur Attraktor-Rekonstruktion und vergleichen Sie die durch die Rekonstruktion erhaltenen Phasenraumdarstellungen mit dem zuvor aufgenommenen 'Original-Attraktor'. Finden Sie über die 3D-Darstellung mit dem Computer eine optimale Verzögerungszeit Δt heraus. Bestimmen Sie aus dem Leistungsspektrum des Originalattraktors die „mittlere Umlaufzeit“ des Attraktors. Vergleichen Sie diese mit Δt . Warum ist dieses Verhältnis plausibel?

5 Kurze LabVIEW Anleitung

Die teilweise recht aufwendigen Messungen mit der AD-Wandlerkarte werden mit dem Programm LabVIEW durchgeführt. Dieses Programm bietet eine grafische Benutzeroberfläche, die an Frontblenden von Labor-Meßgeräten angelehnt ist. Weiterhin können unter LabVIEW in einer ebenfalls grafisch orientierten Programmierumgebung eigene Meßprogramme erstellt werden. Die für das Praktikum benötigten Programme sind bereits fertig gestellt. Hier nun eine kurze Anleitung zur Benutzung dieser Programme:

Starten von LabVIEW:

Das Hauptprogramm LabVIEW wird nach dem Bootvorgang des Rechners automatisch geladen. Sollten Sie einmal versehentlich das Programm beendet haben, können Sie es einfach unter WINDOWS per Doppelklick auf das entsprechende Piktogramm neu starten.

Laden und starten der Meßprogramme:

Ein Meßprogramm, oder *virtuelles Instrument (VI)*, wie es in LabVIEW genannt wird, können Sie durch wählen des Menüpunktes **Open** im **File** Menü über ein Dateiauswahlfenster laden. Die VIs für das Praktikum befinden sich im Verzeichnis **C:\LabVIEW\PRAKTIKUM**, das in LabVIEW bereits voreingestellt ist.

Nach dem Laden erscheint die Programmoberfläche des VIs in einem neuen WINDOWS-Fenster. Wie schon erwähnt ist die Benutzeroberfläche an die Frontplatte eines Laborgerätes angelehnt. Die Einstellungen werden über symbolisierte Knöpfe gemacht und die Ergebnisse werden in Anzeigeeinheiten graphisch dargestellt.

Gestartet wird ein VI entweder durch Wahl des Menüpunktes **Start** im Menü **Operate** oder durch Betätigen des Pfeil-Symbols, welches sich links in der Symbolleiste direkt unterhalb der Menüleiste befindet.

Bedienung der Praktikums-VIs:

Die Elemente der Frontplatten von den einzelnen VIs besitzen eine Beschriftung, woraus deren Funktion recht schnell erkennbar ist. In den meisten Fällen kann man durch Drücken der rechten Maustaste über einem Element und Anwahl des Menüpunktes **Description** in dem dann erscheinenden PopUp-Menü eine genauere Beschreibung des Elementes erhalten.

Die Darstellung der Meßwerte in den Plot-Fenstern lässt sich durch Aufrufen eines PopUp-Menüs (drücken der rechten Maustaste über dem Plot-Fenster) und Anwahl der darin erscheinenden Einstellmöglichkeiten (Bereich, Gitter, Skalierung...) verändern.

Drucken der Messergebnisse:

Sie können die gesamte Frontplatte mit den dort dargestellten Einstellungen und Meßergebnissen über den Menüpunkt **Print** im **File**-Menü auf den Drucker ausgeben. Nachdem Sie diesen Menüpunkt angewählt haben, erscheint ein Fenster, in dem Sie die zu druckenden Seiten und die Druckqualität angeben können. Stellen Sie bei den zu druckenden Seiten 'von 1 bis 1' ein und markieren Sie das Feld 'use bitmap printing' **nicht**. Mit **print** können Sie nun den Druckvorgang starten.

Beenden und Schließen eines VIs:

Ein laufendes VI beenden Sie durch Betätigen des **STOP**-Knopfes auf der Frontplatte. über den Menüpunkt **Close** im **File**-Menü können Sie das VI wieder schließen.

Achtung, wählen Sie diesen Menüpunkt erst nachdem Sie das VI mit **STOP** beendet haben, da sonst evt. der belegte Speicher nicht korrekt freigegeben wird!

Abschließende Hinweise:

- Wenn Sie ein neues VI benutzen möchten, dann schließen Sie bitte (aus Speicherplatzgründen) zunächst das gerade benutzte VI, bevor Sie das neue VI laden.
- über den Menüpunkt **Show Diagram** im Windows-Menü können Sie sich den Programmaufbau des VIs ansehen. Das Programm eines VIs wird in LabVIEW wie ein Schaltplan dargestellt. Der zeitliche Ablauf des Programms ist durch den Datenfluß über die im Diagramm gezeigten Datenleitungen gegeben.
- Beim Schließen eines VIs können Sie, wenn Sie das VI in irgendeiner Form verändert haben, gefragt werden, ob Sie die Änderungen speichern wollen. Beantworten Sie diese Frage mit NEIN!

6 Fragen zur Vorbereitung

6.1 Allgemeines zum Thema Chaos:

- Was versteht man unter einem dynamischen System und dem Zustand eines dynamischen Systems?
- Was ist ein Phasenfluß, ein Phasenraum, eine Trajektorie, ein Attraktor und welche Arten von Attraktoren gibt es?
- Was meint man mit 'Schmetterlingseffekt' und was ist deterministisches Chaos?
- Was ist eine Fouriertransformation und was ist ein Leistungsspektrum? Ein chaotisches Signal liefert ein kontinuierliches Leistungsspektrum, dies ist zwar ein Indiz, jedoch kein hinreichender Beweis für deterministisches Chaos. Warum?
- Wie hängen die verschiedenen Darstellungen eines chaotischen Attraktors (Phasenraumportrait, Poincaré-Diagramm, Bifurkationsdiagramm, Phasendiagramm und Wiederkehr-Abbildung) zusammen und wie kann man sie aus dem Experiment gewinnen. Weiche Darstellung liefert welche Aussage?

6.2 Zum invertierten Pendel:

- Wie wird die Schwingungsdauer des invertierten Pendels bei kleinen Massen von der Amplitude abhängen, wie bei großen? Überlegen Sie sich die entsprechende qualitative Resonanzkurve.
- Was versteht man unter Symmetriebrechung?
- Wie funktioniert eine Differenzier-Schaltung mit einem Operationsverstärker?

6.3 Zum Shinriki-Oszillator:

- Leiten Sie aus den Kirhoffsschen Regeln das Differentialgleichungssystem des Shinriki- oszillators her.
- Wie funktioniert ein NIC (negative impedance converter) und wieso schwingt der Shinriki-Schaltkreis?

- c) Was hört man, wenn man den Oszillator an einen Lautsprecher anschließt, bei einer Bifurkation?

Literatur

- [1] U. Deker, H. Thomas: *Die Chaostheorie*, Bild der Wissenschaft 1/1983, S. 63-75
Bem.: guter Artikel zum Einstieg.
- [2] G. Heinrichs: *Chaos*, Aulis Verlag, Köln (1992), Kapitel 1 und 2
Bem.: recht leicht verständliche Darstellung des Themas, reicht jedoch nicht aus
- [3] J. Argyris, G. Faust, M. Haase: *Die Erforschung des Chaos*, Vieweg, Braunschweig (1994), Kapitel 3.1-3.4 und 5.2-5.3
Bem.: verständlich geschrieben und mit guten Illustrationen; sehr umfangreich.
- [4] G. L. Baker, J. P. Gollub: *Chaotic dynamics - an introduction*, Cambridge University Press, Cambridge 1990
Bem.: v.a. Kapitel über Poincaré-Schnitt, Spektral-Analyse und Basins

Spezielle Literatur zu den Experimenten:

- [5] Landau-Lifschitz: *Theoretische Physik Bd. I, Mechanik*, Akademie-Verlag, Berlin (1976)
Bem.: Der §29 beschreibt die Hysterese in der Resonanzkurve bei nichtlinearen Schwingungen
- [6] D. Hirschmann: *Operationsverstärker Anwendung*, Franzis Verlag, München (1978)
Bem.: Differenzier Schaltungen und Funktionsweise eines NIC
- [7] U. Tietze, Ch. Schenk: *Halbleiter-Schaltungstechnik*, Springer, Berlin (1990)
Bem.: Allgemeines zur Halbleiter-Elektronik

Weiterführende Literatur zum Thema Chaos:

- [8] T. Kapitaniak: *Chaotic oszillations in mechanical systems*, Manchester University Press, Manchester (1991)
Bem.: längeres Kapitel über den Duffing-Oszillator
- [9] R. W. Leven, B.-P. Koch, B. Pompe: *Chaos in dissipativen Systemen*, Akademie Verlag Berlin (1994)
- [10] J. Guckenheimer, P. Holmes: *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields*, Springer, New York (1993)
Bem.: Theorie der nichtlinearen Dynamik; sehr mathematisch.
- [11] J. Peinke, J. Parisi, O.E. Rössler and R. Stoop: *Encounter with Chaos*, Springer, Berlin (1992)
Bem.: Bifurkationen, chaotische Oszillationen und nichtlinearer Stromtransport in Halbleitern



Physikalisches Institut der Universität Bayreuth

FORTGESCHRITTENEN PRAKTIKUM DER PHYSIK

RASTERELEKTRONENMIKROSKOP UND RÖNTGENMIKROANALYSE

Inhalt

1.	Einführung und Zielsetzung	2
2.	Apparatur und Messmethode	2
3.	Detektoren.....	4
4.	Kontrastarten.....	8
5.	Röntgenmikroanalysesystem	11
6.	Versuchsdurchführung	13
7.	Literatur	15
8.	Fragen zur Vorbereitung.....	16
9.	Anhang.....	17
10.	Übliche Abkürzungen.....	21

1. Einführung und Zielsetzung

Das Praktikum wird an einem Rasterelektronenmikroskop durchgeführt, das mit einer Einrichtung für Röntgenmikroanalyse (EDX – energy dispersive X-ray analysis) ausgestattet ist. Damit lassen sich sowohl hochauflösende Strukturuntersuchungen als auch element- und materialspezifische Mikroanalysen durchführen. Die wichtigsten Eigenschaften eines Rasterelektronenmikroskops (REM) sind:

- wesentlich größere Schärfentiefe gegenüber einem Lichtmikroskop oder einem Transmissionselektronenmikroskop (TEM)
- hohes Auflösungsvermögen (ca. 10 nm) ↗ *Schärfe-Tiefe?*
- Abbildung der Probenoberfläche (Eindringtiefe der Elektronen ca. 1 µm)
- einfache Probenpräparation gegenüber dem TEM
- die Möglichkeit zur Elementanalyse im Mikrobereich mittels der von der Probe nach Elektronenbeschuss emittierten charakteristischen Röntgenstrahlung.

↗ *Vakuum stand halten und notwendigerweise frei von Wasser und von Wasser ausscheiden*

Die Proben müssen vakuumstabil sein. Bei nichtleitenden Proben muss außerdem durch Bedampfen oder Kathodenerstäubung eine leitfähige Oberflächenschicht aufgebracht werden. Die Herstellung dünner Proben wie beim TEM (ca. 100 nm) ist nicht erforderlich. Im Praktikum werden Untersuchungen der Oberflächentopographie und der Materialzusammensetzung durchgeführt.

2. Apparatur und Messmethode

2.1. Rasterelektronenmikroskop Jeol JSM 6510

Die prinzipielle Funktionsweise eines REM zeigt Abbildung 1. Der scharf gebündelte Elektronenstrahl rasterst die Probe zeilenförmig ab wie bei einem Fernsehbild. Die emittierten Sekundärelektronen (SE) oder Rückstreu-Elektronen (RE bzw. BSE – back scattered electrons) werden von entsprechenden Detektoren erfasst. Das verstärkte Detektorsignal wird zur Helligkeitsmodulation verwendet.

Das Jeol JSM 6510 wird mit einer thermischen Wolframkathode betrieben. Dabei stehen folgende Detektoren zur Verfügung: ein Everhart-Thornley-Detektor (SE+RE), ein Halbleiterdetektor (RE, Topo-, Compo- und Shadow-Mode) und ein EDX-Detektor (SDD, X-Flash-Detektor). Es wird mit einer 50mm Apertur Blende gearbeitet.

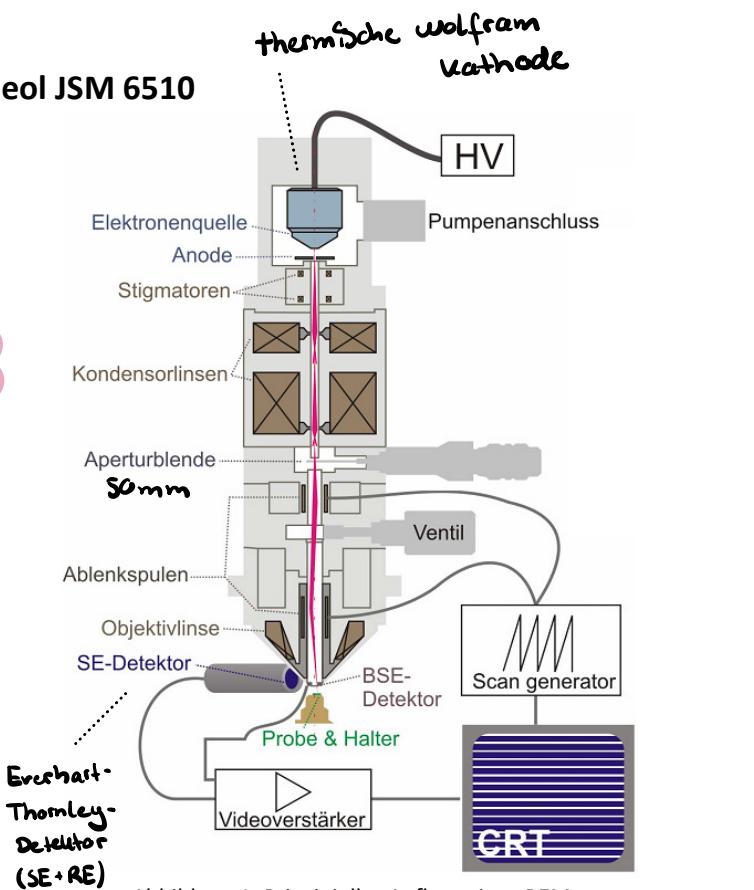


Abbildung 1: Prinzipieller Aufbau eines REM

2.2. Wechselwirkung Elektronen mit Materie

Bei der Wechselwirkung der Primärelektronen (PE) mit der Probe findet elastische und inelastische Streuung statt. Es entstehen unterschiedliche Arten von Signalen.

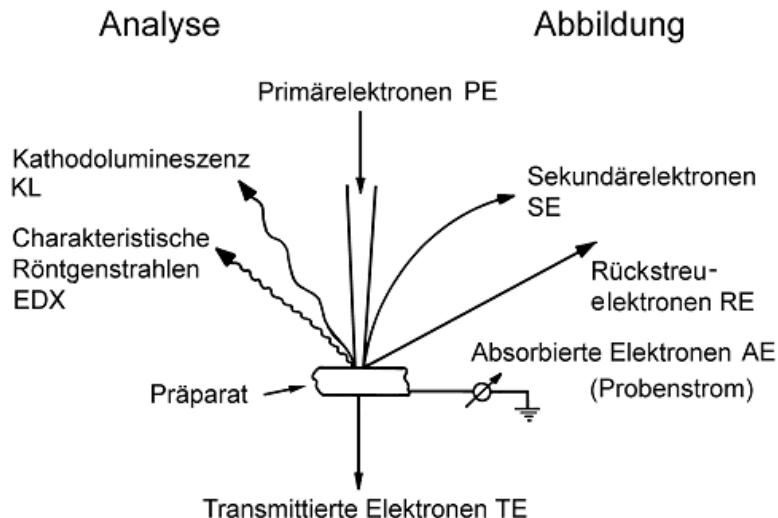


Abbildung 2: Signalentstehung im REM

Das Volumen, in dem die Wechselwirkung stattfindet, wird Streubirne oder Elektronendiffusionswolke bezeichnet. Dabei ist die Reichweite der Primärelektronen abhängig vom Probenmaterial und der gewählten Anregungsspannung.

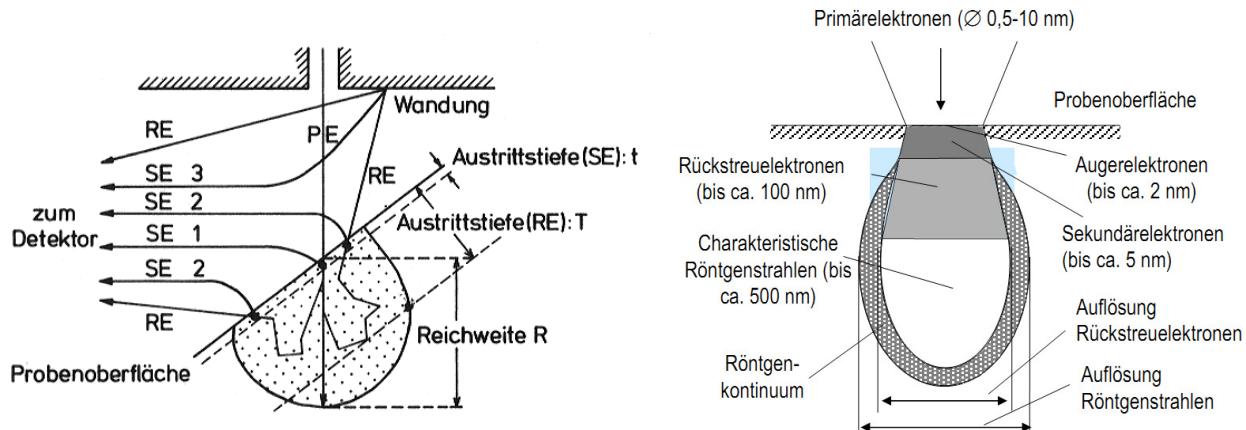


Abbildung 3: Elektronendiffusionswolke

2.3. Rückstreu-elektronen (RE)

Bei Rückstreu-elektronen handelt es sich um am Atomkern elastisch gestreute PE. Sie können aufgrund von Mehrfachstreuung unterschiedlich viel Energie verlieren. Alle Elektronen mit Energien $E > 50 \text{ eV}$ bis hin zur Energie der PE werden als Rückstreu-elektronen bezeichnet. Der Durchmesser der Austrittsstelle wie auch die Austrittstiefe T liegen in der Größenordnung von ~100 nm.

2.4. Sekundärelektronen (SE)

Sekundärelektronen entstehen durch die inelastische Wechselwirkung des PE-Strahls mit der Atomhülle der Probe (Ionisation). Als Sekundärelektronen werden alle Elektronen bezeichnet, deren Energie kleiner 50 eV ist. Ihre wahrscheinlichste Energie beträgt 2-5 eV. Sie stammen aufgrund Ihrer geringen Energie – und somit geringer Reichweite – aus einer dünnen Oberflächenschicht t der Dicke von ca. 5 nm.

Sekundärelektronen werden folgendermaßen unterteilt:

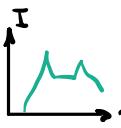
- Vom Primärstrahl erzeugte Sekundärelektronen werden als SE1 bezeichnet PE-Material
- Von RückstreuElektronen generierte Sekundärelektronen werden als SE2 bezeichnet RE-Material
- Von RückstreuElektronen außerhalb der Probe generierte Sekundärelektronen werden mit SE3 RE-Außen bezeichnet.

2.5. Röntgenstrahlung

Bei der Wechselwirkung des PE-Strahls mit der Probe kann aus der Atomhülle ein Elektron herausgeschlagen werden. Fällt beim Übergang in den Grundzustand ein Elektron aus einer höheren Schale in die entstandene Lücke, so kann Röntgenstrahlung entstehen. Die emittierte Strahlung ist charakteristisch für das jeweilige Element und kann zur Elementanalyse herangezogen werden. Neben der charakteristischen Röntgenstrahlung (Linienspektrum) entsteht durch das Abbremsen des Elektrons im Feld des Atomkerns auch ein kontinuierliches Bremsspektrum als Untergrund.

Alternativ kann anstelle von Röntgenstrahlung der Übergang in den Grundzustand auch strahlungslos erfolgen, das heißt die Energie wird an ein anderes Elektron übertragen, das die Probe als Auger-Elektron verlässt

Bei Kernen mit kleiner Ordnungszahl ($Z < 20$) dominiert die Emission von Auger-Elektronen, bei höheren Ordnungszahlen überwiegt die Emission von charakteristischer Röntgenstrahlung.



3. Detektoren

Im Jeol JSM 6510 stehen die in der Rasterelektronenmikroskopie gebräuchlichsten Detektoren zur Verfügung. Dazu gehören ein Everhart-Thornley-Detektor für SE und RE, ein RückstreuDetektor (Halbleiterdetektor) für RE und ein EDX-Detektor für die Röntgenmikroanalyse.



Abbildung 4: Innenaufnahme des Jeol JSM 6510 mit seinen Detektoren

3.1. Everhart-Thornley-Detektor / SE-Detektor

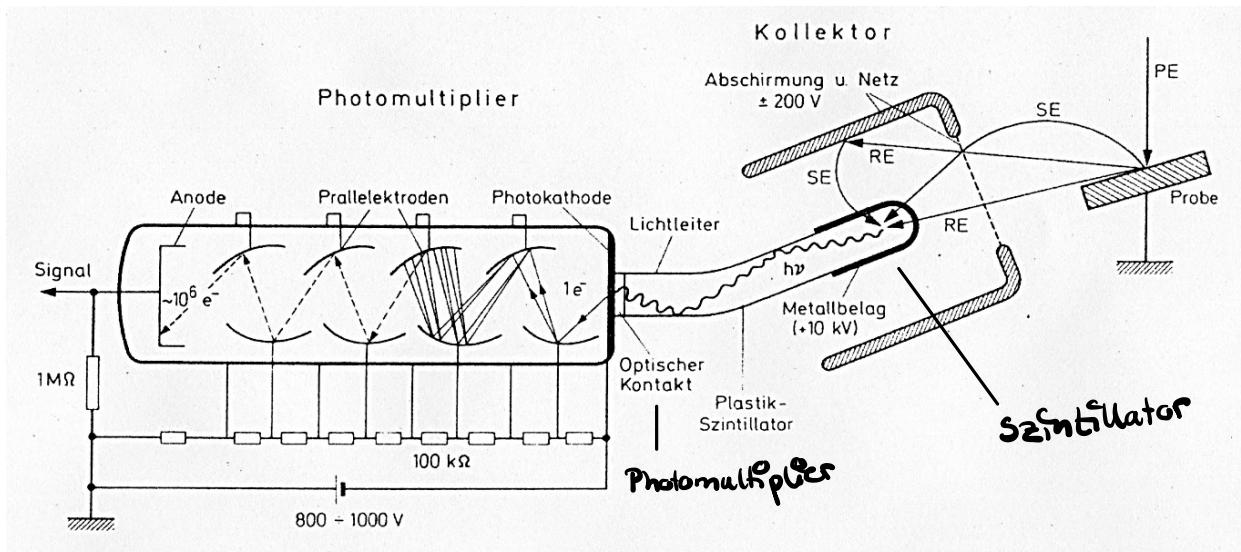


Abbildung 5: Everhart-Thornley-Detektor

Der seitlich angeordnete Everhart-Thornley-Detektor kann sowohl die Sekundär- als auch die rückgestreuten Primärelektronen (Rückstreuerelektronen) empfangen. Ein auf positiver Spannung (300 V) liegendes Kollektornetz zieht Sekundärelektronen zum Detektor. Sie werden durch Anlegen einer positiven Spannung von 10 kV an eine Szintillator-Scheibe beschleunigt. Das im Szintillator erzeugte Licht wird über einen Lichtleiter auf das Fenster eines rauscharmen Photomultipliers geleitet, der das Signal für die Steuerung der Bildschirmhelligkeit liefert. Liegt das Kollektornetz auf negativer Spannung (-100 V) empfängt der Detektor praktisch nur noch Rückstreuerelektronen.

3.2. Rückstreuendetektor / Halbleiterdetektor

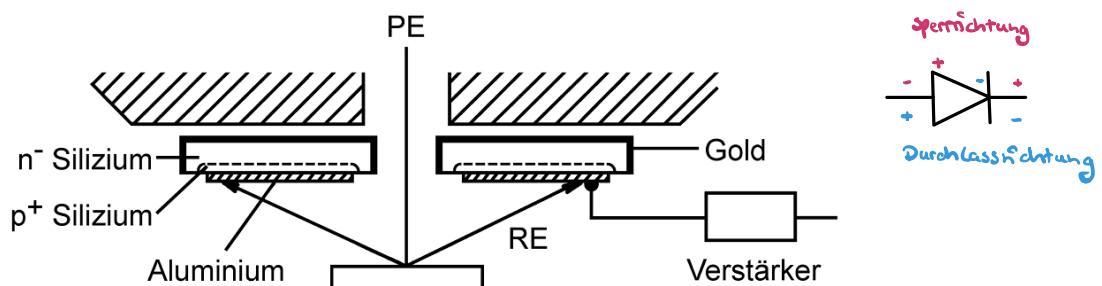


Abbildung 6: Rückstreuendetektor

Beim Rückstreuendetektor handelt es sich im Prinzip um eine in Sperrrichtung betriebene Diode. Die gestreuten hochenergetischen Elektronen erzeugen in einem p-n-Übergang Elektronen-Loch Paare, die getrennt als Strom registriert werden. Auftreffende Sekundärelektronen werden von einer Metallschicht auf dem Detektor absorbiert. Durch seine relativ große Fläche kann im Gegensatz zur Verwendung des Everhart-Thornley-Detektors (mit abstoßender Kollektorspannung) ein großer Raumwinkel erfasst werden.

Der Rückstreuendetektor kann in mehreren Modi betrieben werden. Je nach Schaltung der einzelnen Detektoren wird der Materialkontrast (Compo-Mode) oder der Topographiekontrast (Topo-Mode) sichtbar

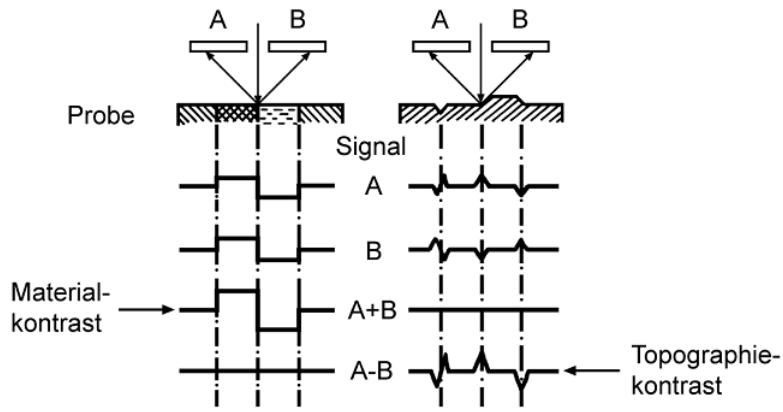


Abbildung 7: Entstehung Topo- und Compo-Mode

Im Jeol JSM 6510 befindet sich zusätzlich ein seitlicher Halbleiter-Detektor für den sogenannten Shadow-Mode. Dieser ermöglicht eine Kombination des Compo- und Topo-Modes, so dass gleichzeitig Topographie- und Materialkontrast abgebildet werden können.

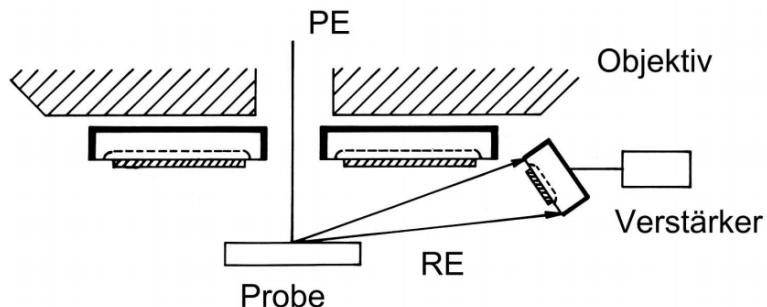


Abbildung 8: Shadow-Mode im Rückstreuendetektor

3.3. Röntgendetektor / Si(Li)-Detektor + SDD-Detektor

Ein Si(Li)-Detektor ist im Wesentlichen eine in Sperrrichtung betriebene Silizium-Diode. Er besteht aus einem Siliziumkristall mit einer p+ dotierten Randimplementierungsschicht auf der Vorderseite und einer n+ dotierten Randschicht auf der Rückseite. Bei einer in Sperrrichtung angelegten Spannung entsteht eine Zone, die frei von beweglichen Ladungsträgern ist (intrinsische Zone). Einfallende Röntgenphotonen erzeugen freie Ladungsträger (Elektron-Loch-Paare), die durch das angelegte elektrische Feld an den Elektroden gesammelt werden und einen Spannungsimpuls erzeugen. Um die Effizienz zu erhöhen, werden die Dioden mit Lithium dotiert. Diese agieren als Donatoren und kompensieren den leicht p-leitenden Charakter des Siliziums. Um das Wandern der Li-Ionen im Kristall zu verhindern, ist eine permanente Kühlung mit flüssigem Stickstoff erforderlich.

Im Gegensatz zum Si(Li)-Detektor besteht ein Silizium Drift Detektor (SDD) nur aus einem Silizium-Wafer, der an der Oberseite mit ringförmigen Elektroden belegt ist. Dabei nehmen die angelegten Spannungen von äußeren zum inneren Ring ab. Im Zentrum des Wafers befindet sich ein Feldeffekt Transistor (FET), der als Signalverstärker wirkt.

Dabei wurde die klassische Dioden Geometrie aufgegeben. Der SDD-Detektor besteht aus zwei gegenüberliegenden p+ dotierten Schichten. Nur ein kleiner Teil der Rückseite ist n+ dotiert und dient als Sammelelektrode. Bei angelegter Spannung bildet sich zwischen den Schichten eine ladungsträgerfreie Zone und ein Potentialminimum in der Mitte des Wafers. Durch die Elektroden wird ein Spannungsgradient erzeugt, der die Elektronen zur Anode leitet.

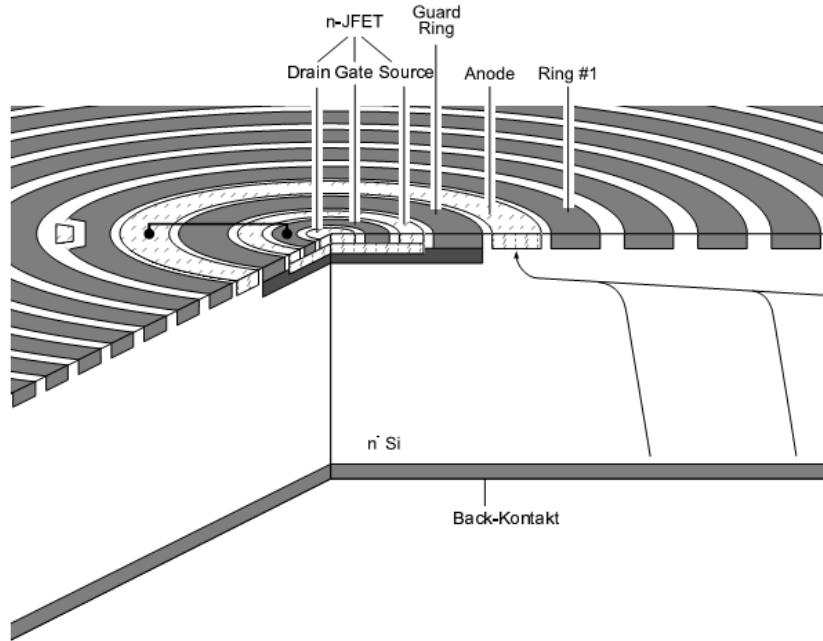


Abbildung 9: Detailansicht eines SDD-Detektors. In der Mitte befinden sich der ringförmige Feldeffekttransistor, dann folgen der abschirmende Ring-Kontakt, die Anode (n^+) und die ersten Driftringe (p^+). Unten befindet sich der Back-Kontakt/Rückseitenkontakt (p^+). D

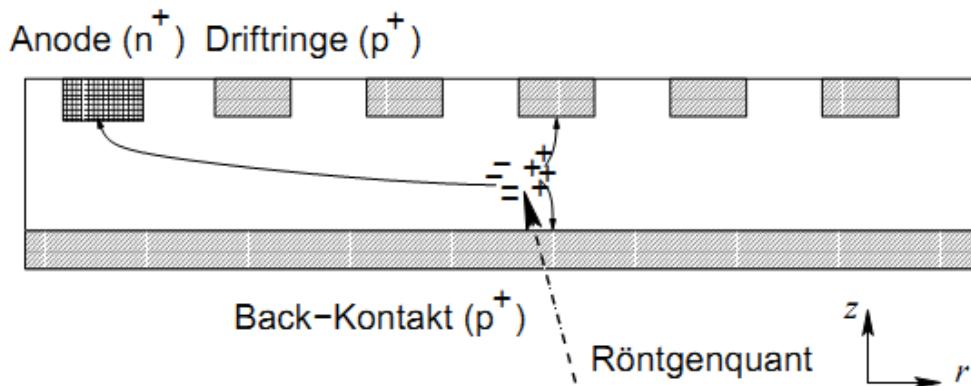


Abbildung 10: Das Driftfeld im SDD wird durch die Position der p+ Implantationen und die dort anliegenden Spannungen definiert. Die durch das Röntgenquant entstandenen Elektronen driften zur Anode, während die Löcher zu den Ringen bzw. dem Rückseitenkontakt driften.

4. Kontrastarten

Die wichtigste Kontrastart im REM ist der Topographiekontrast. Darunter versteht man alle Effekte, bei denen die Topographie bzw. die Form der Oberfläche hervortritt. Je nach Entstehung des Topographiekontrasts wird weiter unterschieden in Flächenneigungskontrast, Abschattungskontrast, Kanteneffekt und Durchstrahlungskontrast. Durch die Kontrastarten und die hohe Schärfentiefe ergibt sich der dreidimensionale Eindruck der Bilder im REM. Zusätzlich kann über Rückstreuerelektronen ein Materialkontrast sichtbar gemacht werden. Die einzelnen Kontrastarten sollen im Folgenden besprochen werden.

4.1. Flächenneigungskontrast

Beim Flächenneigungskontrast erscheinen Flächen heller, die zum Detektor hin geneigt sind. Bei geneigten Oberflächen wird die Anregungsbirne stärker angeschnitten, so dass mehr Elektronen (SE und BE) aus der Oberfläche wieder austreten. Entsprechend erscheinen durchstrahlte Objekte sehr hell.

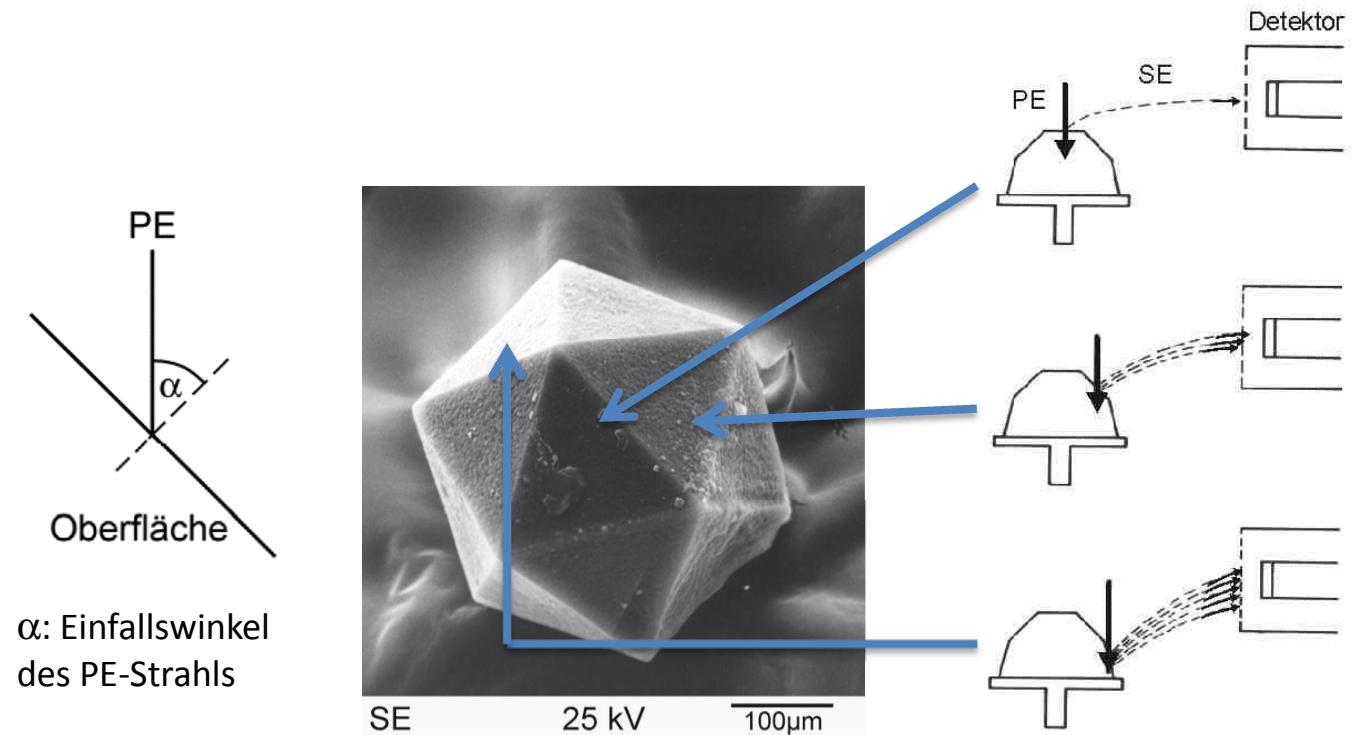


Abbildung 11: Abhängigkeit der Sekundärelektronenausbeute vom Einfallswinkel

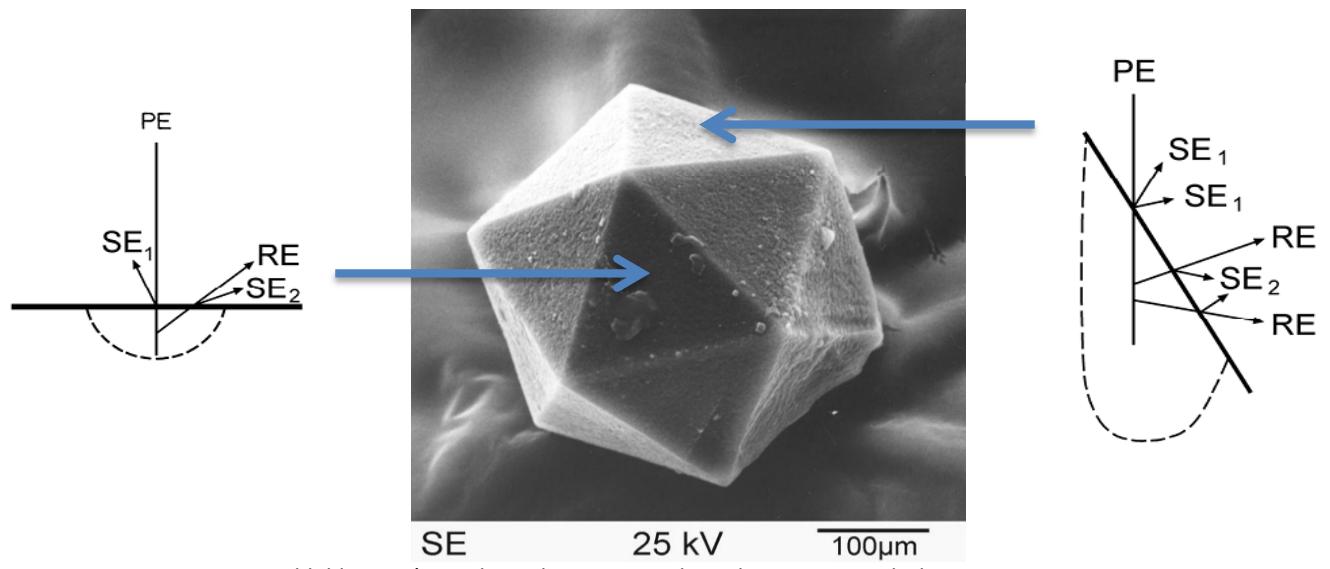


Abbildung 12': Anschnitt der Anregungsbirne bei geneigten Flächen

4.2. Kanteneffekt/Rauhigkeitskontrast

An Kanten können mehr rückgestreute und transmittierte Elektronen die Probe verlassen. Sie lösen beim Verlassen der Probe vermehrt SE aus, so dass helle Kanten entstehen. Auch bei kleinen Partikeln und Mikrorauhigkeit der Oberfläche können SE vermehrt die Probenoberfläche verlassen.

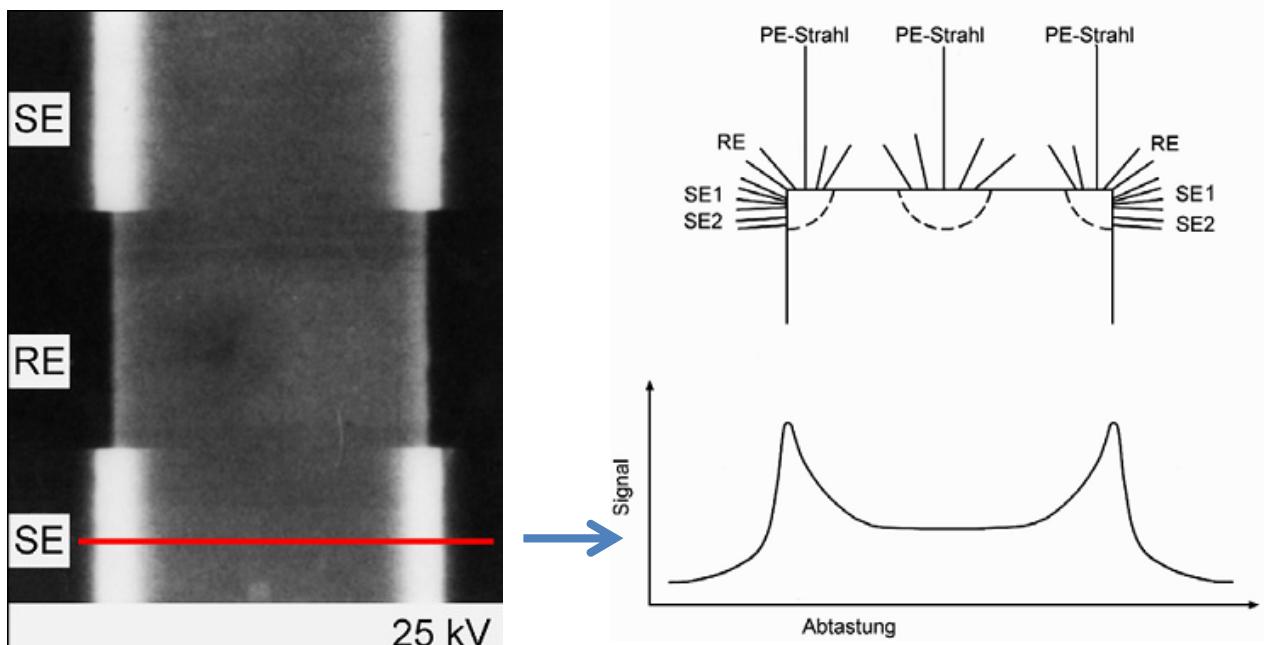


Abbildung 13: Kanteneffekt

4.3. Abschattungskontrast

Die dem Kollektor eines Everhart-Thornley-Detektors zugeneigten Flächen zeigen sowohl im SE als auch im RE-Bild eine stetig steigende Helligkeit mit zunehmendem Einfallswinkel der PE. Flächen, die im Schatten des Kollektors liegen, zeigen starke Unterschiede im SE- bzw. RE-Kontrast. SE können

den Kollektor noch zum Teil erreichen, es entsteht ein abgeschwächter diffuser Schatten. RE bewegen sich auf geradlinigen Bahnen, so dass scharfe Schatten entstehen.

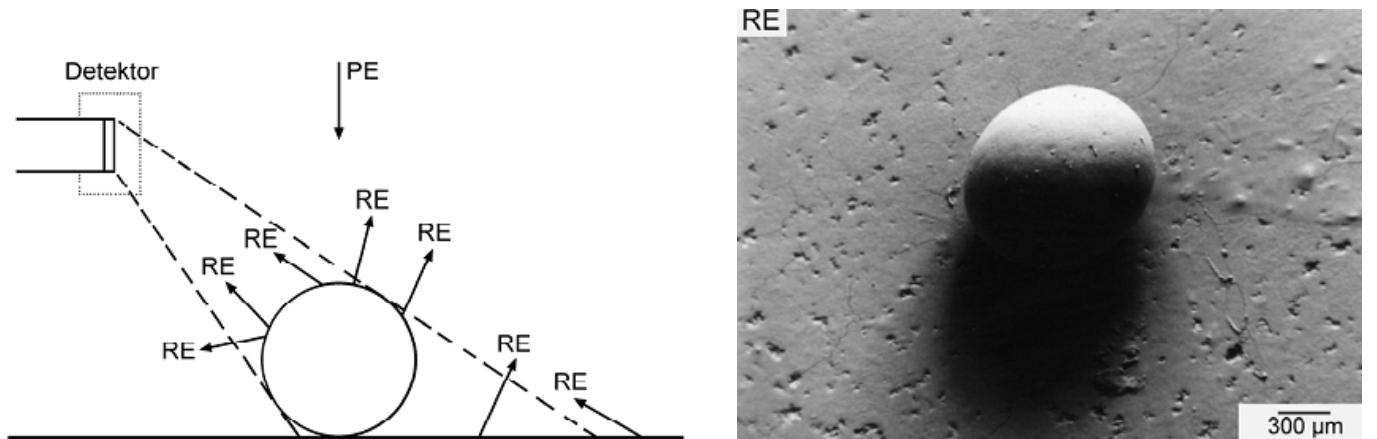


Abbildung 14: Abschattungskontrast

4.4. Materialkontrast/Z-Kontrast

Im Gegensatz zur Sekundärelektronenausbeute δ kann beim Rückstreupekoeffizienten η eine Abhängigkeit von der Ordnungszahl beobachtet werden. Dabei nimmt der Rückstreupekoeffizient mit zunehmender Ordnungszahl zu. Bei der Abbildung mit RE erscheinen dadurch Bereiche mit schweren Elementen heller.

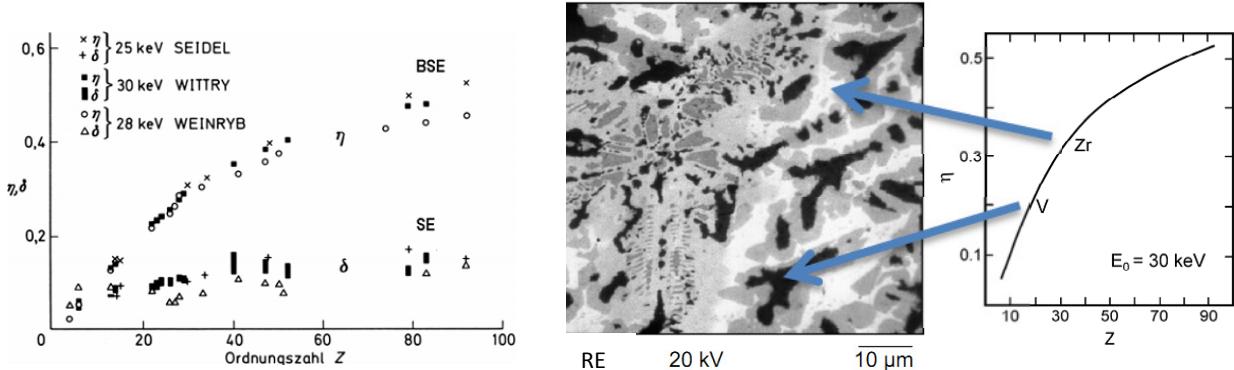


Abbildung 15: Abhangigkeit der Sekundarelektronenausbeute δ und des Ruckstreuokoeffizienten η von der Ordnungszahl

4.5. Schärfentiefe

Die Schärfentiefe D ist der Entfernungsbereich, in dem ein Objekt oberhalb und unterhalb der Schärfenebene noch scharf abgebildet wird.

Im REM kann die Schärfentiefe über die Wahl der Apertur Blende oder den Arbeitsabstand (WD – Working Distance) verändert werden.

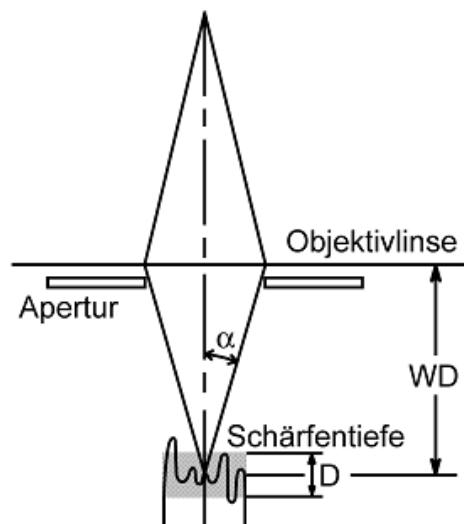
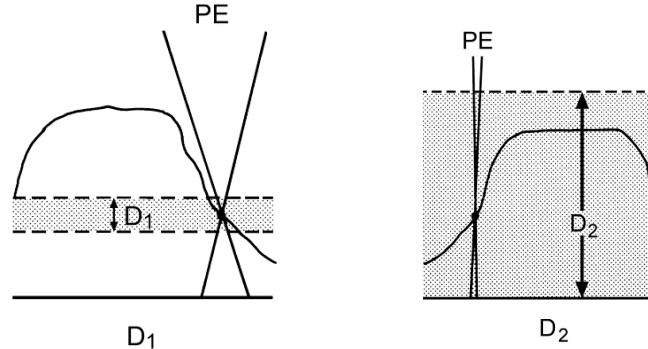


Abbildung 16: Schärfentiefe

Dabei gilt:

- Kleine Blende – große Schärfentiefe
- Große Blende - kleine Schärfentiefe
- Großer WD – große Schärfentiefe
- Kleiner WD – kleine Schärfentiefe



5. Röntgenmikroanalysesystem

Das Blockschaltbild des Röntgenmikroanalysesystems (RMA) ist in Abbildung 17 dargestellt. Zum Nachweis der Röntgenstrahlung wird ein Silizium Drift-Detektor (SDD) verwendet. Die Röntgenquanten erzeugen im Detektor freie Ladungsträger, deren Zahl zur Quantenenergie E_X proportional ist. Man erhält somit Impulse, deren Höhe proportional zu E_X ist und die nach Verstärkung und Analog/Digital-Wandlung durch einen Vielkanalanalysator verarbeitet werden, auf dessen Bildschirm das Spektrum heranwächst (horizontal: Quantenenergie E_X , vertikal: Zahl der Impulse pro Kanal, d.h. pro Energieintervall). Der Pileup-Rejector PUR verhindert, dass zwei kurz nacheinander an kommende teilweise überlappende Impulse als 1 Impuls größerer Amplitude registriert werden. Pulse mit zu kurzem Abstand werden deshalb nicht an den Vielkanalanalysator weitergeleitet.

Mit Hilfe des Rechners können die Spektren ausgewertet werden (z.B. Bestimmung der Energie einer Linie etc.).

Mit der vorhandenen Software können Aufnahmen des Röntgenspektrums auf verschiedenen Stellen der Probe gemacht werden.

Prinzipiell lassen sich auch Elementverteilungsbilder oder Element- bzw. Konzentrationsprofile erstellen. Dies ist in der vorhandenen Software allerdings nicht freigeschaltet.

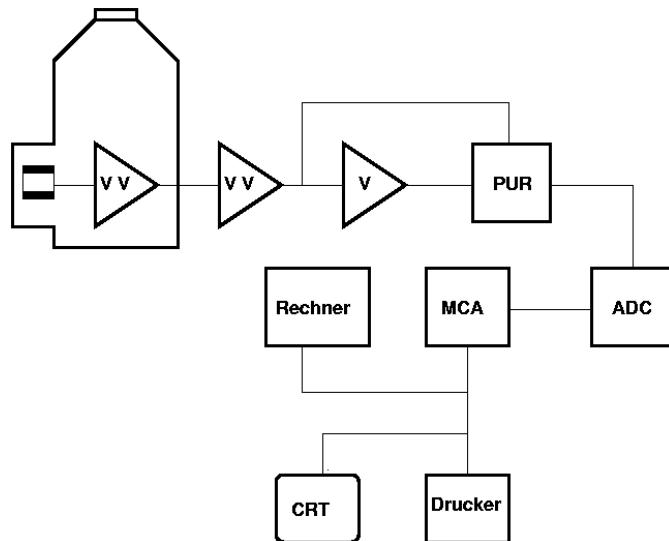


Abbildung 17: Blockdiagramm eines energiedispersiven Röntgenspektrometers mit einem gekühlten Halbleiterdetektor. (VV = Vorverstärker V = Linearverstärker PUR = Pileup-Rejektor ADC = Analog/Digital-Wandler MCA = Vielkanalimpulshöhenanalysator CRT = Bildschirm)

5.1. Quantitative Analyse

Mit Hilfe der Röntgenmikroanalyse kann die chemische Zusammensetzung eines Materials quantitativ bestimmt werden. Voraussetzung hierfür ist, dass ein Schliff des Materials, d. h. eine möglichst glatte und ebene Oberfläche vorliegt, weil bei rauen Oberflächen undefinierte Bedingungen sowohl für die Anregung als auch für die Emission der Röntgenstrahlung bestehen. Der Ablauf einer solchen Analyse sei hier in groben Zügen beschrieben (s.a. RP, S.201 ff.), obwohl im Praktikum nur eine halbquantitative Analyse erfolgen soll.

Ausgangspunkt ist zunächst die quantitative Bestimmung der Intensität der charakteristischen Röntgenlinien durch Integration der Linien und Abzug des von der Bremsstrahlung herrührenden kontinuierlichen Untergrunds. Aus den relativen Intensitäten der Röntgenlinien der verschiedenen Elemente ergeben sich zunächst nur Rohwerte für die Massenprozentsätze, weil die Zahl der registrierten charakteristischen Röntgenquanten außer von der Konzentration c_a des Elements noch von einer Reihe weiterer Materialparameter abhängt (s. RP, S. 201, Gl. (6.15)).

Eine zuverlässige quantitative Bestimmung der chemischen Zusammensetzung erfordert deshalb die Verwendung von Eichstandards bekannter Zusammensetzung oder aus den Reinelementen. Für jedes chemische Element der Probe wird das Verhältnis k_a der Röntgenintensität (i.a. der K_α -Linie) von Probe und Standard bestimmt.

Daraus ergibt sich die Konzentration c_a in der Probe gemäß

$$c_a = k_a k_z k_A k_F c_{a,St}$$

wobei $c_{a,St}$ = Konzentration des Standards, k_z , k_A und k_F die Korrekturfaktoren der sogenannten ZAF-Korrektur sind (Z = Ordnungszahl, A = Absorption, F = Fluoreszenz. Näheres s. RP). Für die Berechnung der Korrekturfaktoren ist ein Iterationsverfahren erforderlich, weil die Korrekturfaktoren von der Materialzusammensetzung abhängen. Als 0. Iteration wird $c_{a0} = k_a$ gesetzt und hieraus k_z , k_A und k_F berechnet. Das ergibt c_{a1} usw., bis das Verfahren konvergiert. Es handelt sich hierbei um ein semi-empirisches Verfahren, für das eine Reihe von Computerverfahren entwickelt und dessen Genauigkeit in zahlreichen Untersuchungen geprüft worden ist.

6. Versuchsdurchführung

6.1. Vorsichtsmaßregeln

Der Wert der Geräte beträgt über Euro 80.000--. Um Beschädigungen zu vermeiden, sind die folgenden Vorsichtsmaßregeln unbedingt zu beachten:

- Einschalten aller Geräte nur durch Betreuer.
- Bedienung des Vakuumsystems und Probenwechsel nur nach Einweisung durch den Betreuer
- Höheneinstellung der Probe nur in Absprache mit dem Betreuer verändern
ACHTUNG: unbedingt darauf achten, dass die Probe den RE-Detektor unterhalb des Polschuhs nicht berührt!!! Ansonsten ist der Detektor im Wert von 4000,- Euro kaputt und muss ersetzt werden!!!
- Bei Arbeitspause: Hochspannung für das Mikroskop an der Bildschirmkonsole bitte ausschalten.

6.2. Aufgaben

Der Betreuer weist Sie in die Bedienung des Elektronenmikroskops und das EDX-Systems ein. Ferner liegen Bedienungsanleitungen aus.

Die Aufgabenstellung ist variabel, da eine Reihe verschiedener Proben zur Verfügung stehen. Die folgenden Aufgaben sind nur als Minimalrahmen zu sehen und sollten gemeinsam mit dem Betreuer je nach Interesse erweitert werden.

Dokumentieren Sie bei allen Untersuchungen sämtliche Einstellungen wie z.B. Vergrößerung, Arbeitsabstand, Strahldurchmesser, Beschleunigungsspannung, ...

a. Einpfennig- bzw. Eincentstück mit Bohrungen:

Untersuchung der Auswirkungen der wichtigsten Einstellungsparameter des REM auf die Abbildungseigenschaften.

- Dokumentieren Sie die unterschiedliche Kontrastentstehung (Materialkontrast, Abschattungseffekte) bei der Abbildung mittels Sekundär- bzw. RückstreuElektronen. Benutzen Sie dabei alle zur Verfügung stehenden Detektoren. Wie wirkt sich hierbei die Wahl der Beschleunigungsspannung aus?
- Welchen Einfluss haben der Strahldurchmesser und die Beschleunigungsspannung auf die Darstellung? (Oberflächendarstellung, Materialkontrast)

- Führen Sie eine EDX-Analyse der Pfennig- und der Cent-Münze durch. Aus welchen Elementen bestehen die Münzen und wie sind sie im Objekt verteilt.

b. Fliege:

- Bilden Sie das gesamte Objekt ab. Wie wird eine hohe Tiefenschärfe erreicht? Was ist bei organischen Materialien besonders zu beachten?
- Inwieweit würde sich theoretisch die Schärfentiefe beim Wechsel der(nicht vorhandenen zweiten) Apertur Blende verändern?
- Wie groß ist ein Segment des Facettenauges der Fliege?

c. Zinnstandard:

- Welchen Einfluss haben der Strahldurchmesser und die Beschleunigungsspannung auf die Darstellung? (Auflösung)
- Führen Sie die Messung bei zwei Arbeitsabständen durch und diskutieren Sie das Ergebnis. Wie ist der Zusammenhang zwischen Arbeitsabstand und maximal möglicher Vergrößerung?

d. Gebrochene Schraube:

- Bestimmen Sie die Bruchursache des Metallstücks mittels SE, RE und EDX – Analyse.
- Aus welchem Material besteht die Schraube?

e. Präparation und Charakterisierung eines selbstgewählten Gegenstandes:

Anregungen: Haar, Blütenstaub, Mineral, Hühnerfeder, etc. ...

6.3. Auswertung

Formulieren Sie Ihre Ergebnisse jeweils in einem kurzen Bericht und dokumentieren Sie alle Resultate mit aussagekräftigen Bildern.

7. Literatur

Zur Vorbereitung:

(RP) L. Reimer, G. Pfefferkorn: Raster-Elektronenmikroskopie, Springer Verlag 1977

Kap. 1: ganz

Kap. 2: 2.1, 2.5.3, 2.5.5

Kap. 3: 3.1, 3.2, 3.4.3

Kap. 4: 4.1, 4.2

Kap. 6: 6.1 - 6.3

Info-Broschüre von Jeol: SEM, Scanning Electron Microscope A to Z, Basic Knowledge for Using the SEM

weitere Literatur zur Vertiefung:

Schmidt, Peter F:

Praxis der Rasterelektronenmikroskopie und Mikrobereichsanalyse

(EK) Engel, Klingele: Rasterelektronenmikroskopische Untersuchungen von Metallschäden, Gerling Institut für Schadenforschung und Schadenverhütung GmbH, Köln 1974

(H) M. von Heimdendahl: Einführung in die Elektronenmikroskopie, Vieweg 1970
(Transmissionselektronenmikroskopie)

Joseph I. Goldstein et. al: Scanning Electron Microscopy and X-Ray Microanalysis, Plenum Press, New York u. London 1981.

J. Ohnsorge, R. Holm: Rasterelektronenmikroskopie, Stuttgart, 1978

A. Helmut: Physikalische Grundlagen der Elektronenmikroskopie, Stuttgart, 1997

H. Bethge: Elektronenmikroskopie in der Festkörperphysik, Berlin, 1982

8. Fragen zur Vorbereitung

Die Fragen zur Vorbereitung dienen ausschließlich als Orientierung. Für den theoretischen Teil im Protokoll genügt es nicht ausschließlich die Fragen zur Vorbereitung schriftlich auszuarbeiten.

1. Erläutern Sie die Funktionsweise eines REM und eines TEM.
2. Welches sind die besonderen Vorteile eines REM gegenüber einem TEM und einem Lichtmikroskop? Welches sind die Nachteile?
3. Wovon hängt die Auflösung eines REM hauptsächlich ab? Was ist ein typischer Zahlenwert für die Auflösung?
Wovon hängt die Auflösung des TEM und des Lichtmikroskops ab? Zahlenwerte?
4. Welche Signale außer Sekundärelektronen kann man beim REM noch zur Bilderzeugung verwenden?
5. Wodurch unterscheiden sich die topographischen Kontraste bei Abbildung durch Sekundär- und Rückstreu elektronen? Welcher topographische Kontrast ist besonders charakteristisch für die Abbildung im REM verglichen mit lichtoptischen Abbildungen?
6. Wodurch kommt der Materialkontrast zustande?
7. Nennen Sie weitere Verfahren bzw. Effekte, die zur Kontrastentstehung beitragen können.
8. Welche Anforderungen müssen an die zu untersuchende Probe gestellt werden?
9. Wie groß ist die Schichtdicke, aus der man Informationen erhält, bei Bilderzeugung durch
 - Sekundärelektronen
 - Rückstreu elektronen
 - Röntgenstrahlen?
10. Welche Detektoren bzw. Nachweismöglichkeiten für Röntgenstrahlen kennen Sie?
11. Erläutern Sie Aufbau und Wirkungsweise eines wellenlängendispersiven und eines energiedispersiven Röntgenspektrometers. Nennen Sie Vor- und Nachteile.
12. Erläutern Sie das Zustandekommen des Bremspektrums, der charakteristischen Röntgenlinien, des Compton-Effektes und des Auger-Effektes.
13. Warum sind für die RMA die K-Linien besser geeignet als die L- und M-Linien? Welche Forderung ergibt sich daraus für die Größe der Beschleunigungsspannung der Elektronenkanone? Siehe hierzu die Abbildung der Röntgenspektren im Anhang.

9. Anhang

9.1. Wirkungsweise des Si (Li)-Detektors

Abbildung 18 zeigt schematisch die Wirkungsweise eines Halbleiterdetektors. Der Halbleiter-Einkristall sitzt zwischen zwei dünnen Goldelektroden, an denen eine Spannung von ca. 1500 V angelegt wird. Die einfallenden Röntgenquanten erzeugen Paare von freien Ladungsträgern (Elektronen und Löcher) durch Ionisation von Si-Atomen. Die Zahl der erzeugten Ladungsträgerpaare ergibt sich aus der Quantenenergie E_X dividiert durch die Paarbildungsenergie E_i ($E_i = 3,6 \text{ eV}$ für Si).

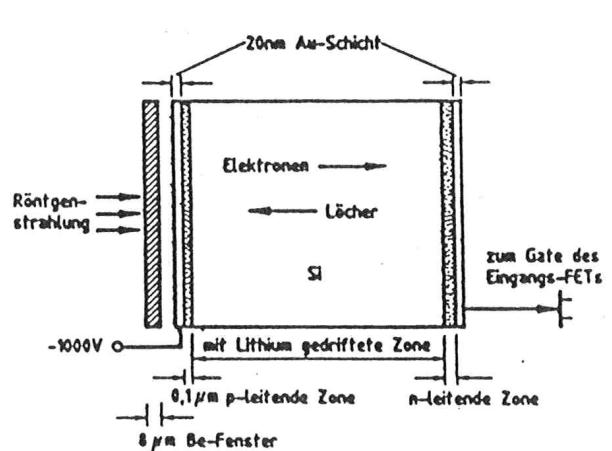


Abbildung 18: Aufbau eines Si(Li)- Halbleiterdetektors

Im Idealfall besteht der Halbleiterdetektor aus höchstreinem Si, das nur Eigenleitung hat und deshalb bei Zimmertemperatur ein Isolator ist. In praxi ist das reinste Si, das heutzutage hergestellt werden kann, ein p-leitendes Material mit einer Konzentration von ca. 10^{-10} Fremdatomen pro Si-Atom. Die sich hieraus ergebende Leitfähigkeit ist so groß, daß die durch die Röntgenquanten zusätzlich erzeugten Ladungsträger demgegenüber nicht ins Gewicht fallen würden. Man kompensiert deshalb die p-Leitfähigkeit durch Dotieren mit einem n-Leiter. Aus herstellungstechnischen Gründen (wegen der hohen Diffusionsgeschwindigkeit) wählt man hierfür Lithium. Das Li lässt man bei hohen Temperaturen unter Anlegen von Hochspannung in das Si eindiffundieren. (Abbildung 19). Eine genügend große Dicke des Si-Kristalls ist erforderlich, damit möglichst alle Röntgenquanten im Detektor absorbiert werden.

Typische Si (Li)-Detektoren haben eine Quantenausbeute von nahe 100 % zwischen 2 und 20 keV. Die starke Abnahme unterhalb von 1,0 keV ist durch das Beryllium-Fenster vor dem Detektor, die Abnahme oberhalb von 20 keV durch die Dicke der Verarmungszone bedingt (s. Abbildung 20).

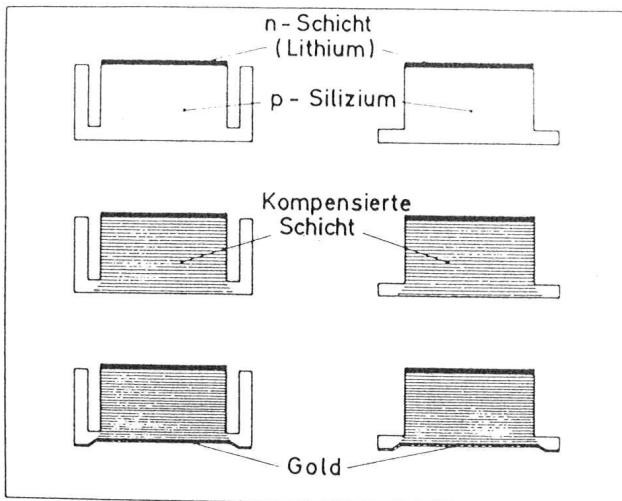


Abbildung 19: Li diffundiert bei erhöhter Temperatur und Anlegen von Hochspannung in das Si und kompensiert die vorher vorhandene p-Leitung

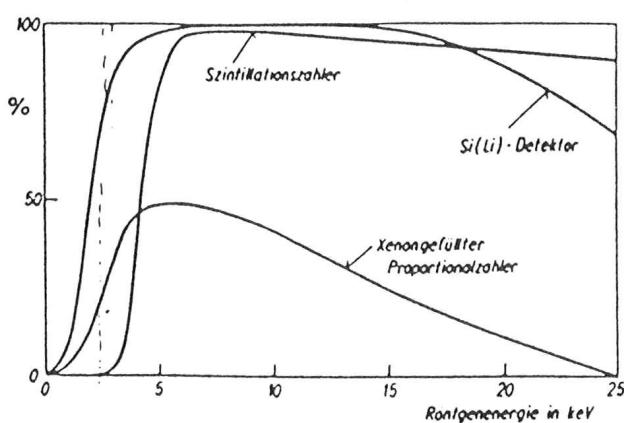


Abbildung 20: Quantenausbeute (Wirkungsgrad) eines Si(Li)-Halbleiterdetektors im Vergleich zu zwei anderen Detektoren

9.2. Störende Effekte bei der RMA

9.2.1. Escape Linien

Für den Fall, dass die bei der photoelektrischen Absorption der Photonen im Detektor entstehenden Si-K-Röntgenquanten nicht in der Verarmungszone absorbiert werden, sondern entweichen, wird der Ladungsimpuls um die Energie der Si-K-Strahlung vermindert. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein solcher Prozess eintritt, ist zwar gering, steigt jedoch mit verminderter Energie der einfallenden Photonen, da diese stärker absorbiert werden und deshalb eine geringere Eindringtiefe haben. Die Si-K-Strahlung kann in diesem Fall mit gewisser Wahrscheinlichkeit durch die Eintrittsfläche des Detektors wieder entweichen (typ. Werte: 2 % bei $E_X = 2 \text{ keV}$, 0,1 % bei $E_X = 10 \text{ keV}$). Ergebnis ist das bei intensiven Röntgenlinien gleichzeitige Auftreten von schwachen, sog. Escape-Linien, deren Energie der um die Si-K-Bindungsenergie (1740 eV) vermindernden Energie der intensiven Röntgenlinie entspricht. Die Escape-Linien können zu Fehlinterpretationen führen, wenn ihre Energie mit der von eigentlichen Röntgenlinien zusammenfällt. So kann die bei hohen Kalziumgehalten auftretende Ca-K α -Escape-Linie geringe Mengen Phosphor vortäuschen.

Eine andere Art von Escape-Linien kann sich prinzipiell dann bilden, wenn photoelektrische Absorption in der Silizium-Totschicht eintritt, die dabei entstehende Si-K-Strahlung in die aktive Zone des Detektors eindringt und dort absorbiert wird. Das Ergebnis ist die Si-K-Linie. Die Wahrscheinlichkeit für einen solchen Prozess ist jedoch äußerst gering.

9.2.2. Interne Si-Fluoreszenz

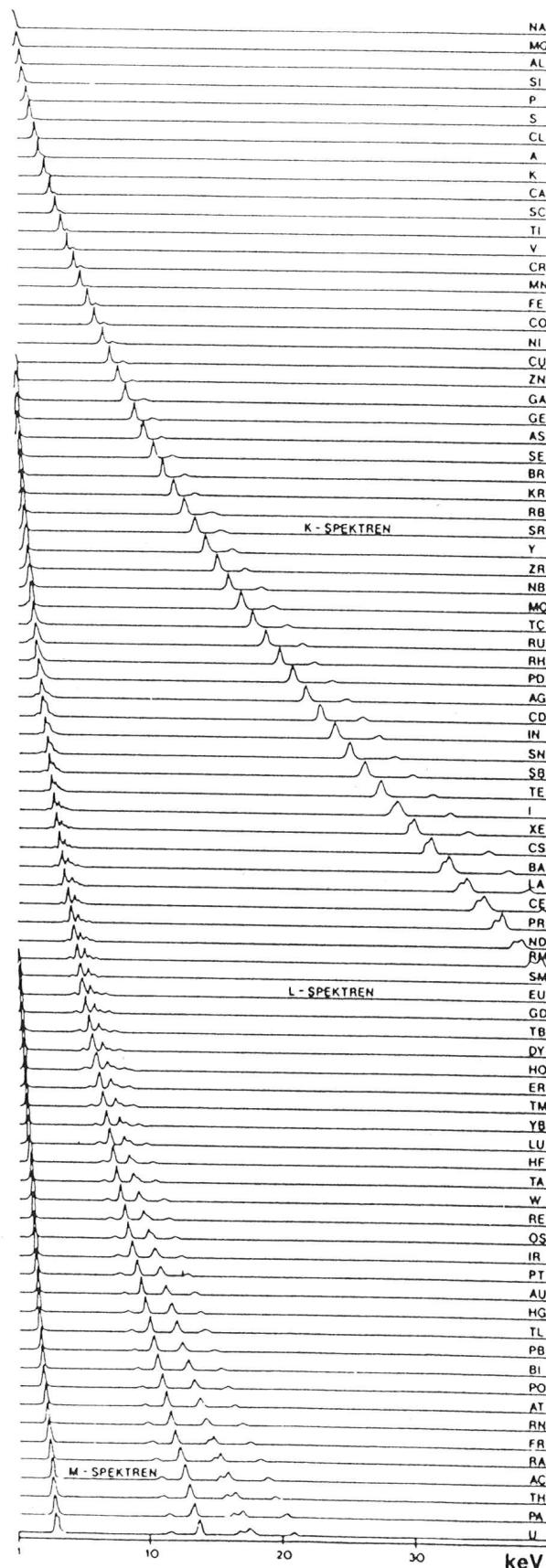
Die Absorption von Röntgenquanten in der nicht gedrifteten, inaktiven Silizium-Schicht (sog. "dead layer") führt zur Emission von Sik-Röntgenstrahlung aus dieser Schicht in das aktive Volumen des Detektors. Diese Si-Strahlung, die nicht aus der Probe stammt, kann bei quantitativen Analysen eine scheinbare Si-Konzentration von 0.2 % oder weniger vortäuschen.

9.2.3. Summen Peaks

Summen-Peaks bei der Energie $E_3 = E_1 + E_2$ können auftreten, wenn Quanten der Energie E_1 und E_2 gleichzeitig am Detektor eintreffen. Dies spielt vor allem bei großen Zählraten eine Rolle. Um das Auftreten von Summenpeaks zu vermeiden, sollte die Zählrate unter 3000 cps (counts per second) bzw. die Totzeit (Verarbeitungszeit der Elektronik) unterhalb 30 % gehalten werden.

9.3. Röntgenspektren

(nach Fitzgerald und Gantzel, ASTM STP 483, S 3-35)



10. Übliche Abkürzungen

In der Literatur findet man bei vielen Autoren die folgenden Abkürzungen:

RE	RückstreuElektronen
REM	RasterElektronenMikroskop
RMA	RöntgenMikroanalyse
SE	SekundärElektronen
PE	PrimärElektronenStrahl
EDX	Energiedispersiv Röntgenanalyse (energy dispersive x-ray analysis)
SEM	scanning electron microscope
Si(Li)	Silizium-Detektor, in den Lithium unter Anlegen eines elektrischen Feldes eingedriftet wurde. Das Li hat die Aufgabe, Störstellen im Si-Kristall zu kompensieren.
SDD	Silizium Drift Detektor
STEM	scanning transmission electron microscope = TEM mit Rasterzusatz
TEM	Transmissionselektronenmikroskop

Fragen zur Vorbereitung

- 1) REM \Rightarrow Reflexion
- Scharf gebündelter e^- -Strahl rastet eine Probe zeilenförmig ab, dabei werden SE (sekundär- e^-) $E < 50\text{eV}$, $\langle E \rangle = 2.5\text{eV}$, inelastische WW mit Kernen), RE bzw BSE (Rückstoß- e^-) $E > 50\text{eV}$, elastische WW mit Kernen) von entsprechenden Detektoren erfasst. Probe muss **vakuumstabil** und eine **leitende Oberflächenschicht** besitzen.
- Auflösung $\sim 10\text{nm}$
 - Eindringtiefe $e^- \sim 1\mu\text{m}$
 - Untersuchung: Strukturanalyse (hochauflösend)
- „Skript“

TEM \Rightarrow Transmission

Dünne Proben ($\sim 100\text{nm}$) werden von e^- durchstrahlt, wobei die Beschleunigungsspannung eine Maß für die Auflösung des TEMs ist. Die e^- ändern nach der Rutherford-Streuung ihre Bewegungsrichtung und verlieren auch Energie durch inelastische Stöße. e^- welche durch elastische Stöße das Objekt im selben Winkel verlassen werden in der hinteren Brennebene fokussiert. Mit einer Blende werden nur noch nicht gestreute e^- erfasst. Dabei wird entweder das **Zwischenbild** (vergrößertes Lichtfeld) oder die Fokusebene mit dem **Elektronenbeugungsbild** (Fouriertrafo \rightarrow Struktur Kristall) gespeichert.

- Untersuchung: Oberflächenmorphologie
- Eindringtiefe \sim einige nm bis μm

„Wikipedia“

2) (REM, TEM) vs LM

- + Licht mit viel größerer Wellenlänge (380nm) als e^- (wegen Welle-Teilchen-Dualismus) (5nm) \Rightarrow Erheblich stärkere Auflösung
- (REM, TEM) benötigen Vakuum im Gang des e^- -Strahls und elektromagnetische Linsen während ein „nur“ Glasklinsen benötigt. \Rightarrow höhere technische Grundvoraussetzungen

REM vs TEM

- + Probenpräparation einfacher da keine ultradünnen Schnitte der Probe erzeugt werden müssen \Rightarrow leichte Präp
- + 3d-Abbildung des Objekts Oberfläche zum e^- -Beugungsbild \Rightarrow leicht Verständliche Bilder
- geringere Vergrößerung
- keine Aussage über innere Struktur

„Manfred Rappel - REM
uni-frankfurt“

3) LM: Wellenlänge in $0,3\mu\text{m} \sim 0,5\mu\text{m}$

- + TEM: Beschleunigungsspannung und Materialdicke $80 \sim 400\text{eV} \sim$ einige nm bis μm
- + REM: Strahlendurchmesser und Abbsignal $1\text{nm} \sim 2\text{nm}$

„Wikipedia“

4) RE und Röntgenstrahlung (EDX) „Skript“

5) SE- Topographiekontrast \sim strukturelle Oberflächendetails

RE- Materialkontrast \sim Materialarten werden hervorgehoben

Vermutung \Rightarrow siehe (?)

„Wiki.polymerservice-mersburg.de“

- 6) ✓ e^- von PE werden elastisch an den Kernen der Probe gestreut und verlassen das Probenmaterial wieder ($E > 50\text{ eV}$)
 Dabei hängt die Ausbeute der RE von der Kernladungszahl des Materials ab.
 Höhere Kernladung \Rightarrow höherer Materialkontrast. „Skript oder“
- 7) ✓ Flächenegnungskontrast: Flächen mit Neigung zum Detektor sind heller
 Abschattungscontrast: Durch gradlinige Bewegung der RE entsteht ein scharfer Schatten, SE erreichen Detektor meist nicht. „Skript“
 Rauigkeitkontrast: An Kanten mehrere RE welche vermehrt SE auslösen \Rightarrow helle Kante
- 8) ✓ Vakuumstabil, trocken (keine Flüssigkeit), leitende Oberflächenschicht „Skript“
- 9) ✓ Schichtdicke
 SE: obersten Nanometer, nicht energiereich genug um von tiefer auszutreten.
 Volumen aus dem SE stammt ist kleiner als durch den PE angeregten Bereich.
 RE: abh von Beschleunigungsspannung, Interaktionsvolumen einige μm^3
 Röntgen: Aus einem birnenförmigen Raumvolumen mit Durchmesser 0,1 - 2 μm
 Eindringtiefe des REMs: $\sim 1\mu\text{m}$ „Wikipedia“
- 10) ✓ Si(Li)-Detektor:
 Siliziumkristall mit p+ dotierten Randimplantierungsschicht auf der Vorderseite und einer n- dotierten Randschicht auf der Rückseite.
 In Sperrrichtung geschaltet \rightarrow intrinsische Zone (keine freien Ladungsträger) \rightarrow Röntgenphotonen \rightarrow Erzeugung von e^- -Loch Paar \rightarrow gesammelt an Elektroden mittels E-Feld \rightarrow Spannungsimpuls
 Li Dotierung kompensiert p-leitenden Charakter von Silizium \Rightarrow Leitung sonst Wanderung von Li
- Silizium Drift Detektor:
 Silizium-Wafer mit ringförmigen Elektroden auf der Oberseite mit abnehmender Spannung von Außen nach Innen. Im Inneren ein Feldeffekttransistor (FET) zur Signalverstärkung. keine klassische Dioden Geometrie. Zwei gegenüberliegende p+ dotierte mit geringen n-Dotierung auf der Rückseite als Sammelelektrode.
 Spannung \rightarrow Ladungsträger freie Zone + Potenzialminimum in der Mitte \rightarrow Spannungsgradient \rightarrow Elektronen zur Anode „Skript“
- 11) ✓ Wellenlängendiffusive:
 Beugung an natürlichen oder synthetischen Kristallen \rightarrow Zerlegung in spektrale Bestandteile
 + bessere Nachweisempfindlichkeit, höhere spektrale Auflösung
 - Wellenlänge eingestellt \Rightarrow muss Bereich abfahren
- Energiediffusive:
 Misst Energie der einfallenden Röntgenquanten \rightarrow Si(Li) Detektor
 + Simultane Messung des ganzen Röntgenspektrums „Wikipedia“
- 12) ✓ Bremspektrum: Energieverteilung der Röntgenstrahlung durch Abbremsen der e^- im Material erzeugt wird (Erhitzung) „medizinphysik.wiki“
 Comptoneffekt: Streuung eines Photons an einem Teilchen (IES, EES) \rightarrow Wellenlänge vergrößert $\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\varphi)$

Char Röntgenlinien: e^- wird aus e^- -Hülle geschlagen \rightarrow nachfallen der e^- erzeugt Strahlung \rightarrow K_{α}, K_{β} Übergänge etc.
↓

Augerelektronen: Erzeugte Strahlung schlägt weiteres e^- aus der e^- -Hülle in einer weiter oben Schale

13) ✓ Röntgenmikroanalyse RMA \rightarrow Energiedispersiv Röntgenspektroskopie

K -König \rightarrow höhere Intensität?

Zu niedrige Beschleunigungsspannung verursacht, dass Peaks höherer Energie nicht angeregt werden



UNIVERSITÄT
BAYREUTH

Physikalisches Praktikum für Fortgeschrittene

Versuchsanleitung zum
Praktikumsversuch
Dopplerfreie
Sättigungsspektroskopie
von Rubidium

Hannah Bleiner

Fakultät für Mathematik, Physik, Informatik

Universität Bayreuth

Versuchsanleitung für Studierende zu Spektroskopie an Rubidiumgas

1 MOTIVATION UND VERSUCHSZIEL

Ziel des Praktikumsversuchs ist, einen Einblick in die experimentelle Atom- und Kernphysik zu bekommen. Mit Hilfe von spektroskopischen Untersuchungen können Aussagen über die Molekül- oder Atomstrukturen der zu untersuchenden Materie gemacht werden. Hierzu werden Absorptionsspektren beobachtet, welche durch die Wechselwirkung von elektromagnetischer Strahlung mit der zu untersuchenden Materie entstehen. Durch Vermessung der Spektrallinien können dann Aussagen über die Energieniveaus und somit der Molekül- oder Atomstruktur getroffen werden.[[Demo7](#), [Dem10](#), S.14ff, S.1]

Um die Übergangenergien zwischen den Energieniveaus genau bestimmen zu können, ist eine exakte Frequenzachse nötig. Dazu wird ein Fabry-Pérot-Interferometer (FPI) in den Versuchsaufbau integriert und dient dazu, relative Frequenzabstände zu messen.

In diesem Versuch sollen die Fein- und Hyperfeinstruktur der Rubidiumisotope ^{85}Rb und ^{87}Rb analysiert werden. Dazu werden dopplerverbreiterte und dopplerfreie Absorptionsspektren von Rubidium-Atomen in einer Gaszelle aufgenommen.

2 THEORETISCHER HINTERGRUND

Hinweis: Der theoretische Hintergrund bezieht sich immer auf Einelektronensysteme, da nur diese im Versuch relevant sind. Dies ist damit zu begründen, dass Rubidium nur ein Valenzelektron besitzt und deshalb ein wasserstoffähnliches Atom ist.

Rubidium

Rubidium befindet sich in der ersten Hauptgruppe des Periodensystems und gehört zu den Alkalimetallen. Es besitzt ein Valenzelektron und gehört damit zu den wasserstoffähnlichen Atomen. Im Versuch wird eine Rubidium-

Gaszelle verwendet, welche ein natürliches Isotopengemisch aus $^{85}\text{Rb}(72,2\%)$ und $^{87}\text{Rb}(27,8\%)$ enthält.

Feinstrukturaufspaltung

Die Feinstruktur eines Atoms entsteht durch die Spin-Bahn-Kopplung, oder auch LS-Kopplung genannt. Hierbei wechselwirken das magnetische Feld der Bahn \vec{L} und der Elektronenspin \vec{S} . Nur der Gesamtdrehimpuls des Atoms \vec{J} kommutiert mit dem Hamiltonoperator und ergibt sich der Gesamtdrehimpuls des Atoms zu

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

Durch gegebene Werte der Quantenzahlen L, S ergeben sich die möglichen Werte von J durch

$$|L-S| \leq J \leq L+S$$

mit $L = 0, 1, 2, \dots$ und $S = \pm \frac{1}{2}$. Aufgrund der Auswahlregeln $\Delta L = \pm 1$ und $\Delta J = 0, \pm 1$ sind die beiden D-Übergänge erlaubt. Es wird folgende Notation für die Energiezustände verwendet: $n^{2S+1}L_J$.

Somit ergibt sich der Grundzustand ($L = 0$) von Rubidium zu $5^2S_{\frac{1}{2}}$. Der erste angeregte Zustand ($L = 1$) wird aufgespaltet in die Zustände $5^2P_{\frac{1}{2}}$ und $5^2P_{\frac{3}{2}}$. Der Übergang von $L = 0$ nach $L = 1$ wird D-Linie genannt. Aufgrund der zwei angeregten Zustände für $L = 1$ wird diese nochmals unterteilt in die D₁- und D₂-Linie. In Abbildung 1 sind diese dargestellt.

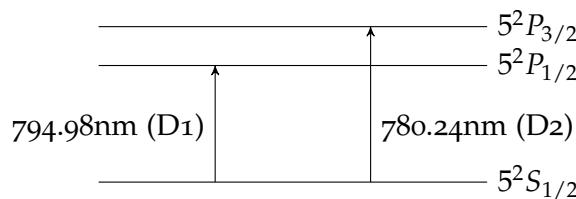


Abbildung 1: D₁- und D₂-Linie von Rubidium.

Ein ausführliches Schema der Fein- und Hyperfeinstruktur der D₁- und D₂-Linie von ^{85}Rb und ^{87}Rb ist im angehängten Dokument „Rubidium 85 D Line Data“ dargestellt. Die jeweiligen Resonanzwellenlängen sind dem Dokument zu entnehmen. [Dem10, Her15, Mes15, S. 169ff, S. 267ff, S. 729ff]

Hyperfeinstrukturaufspaltung

Aufgrund der Kopplung des Gesamtdrehimpulses \vec{J} und des Kernspins \vec{I} kommt es zu einer noch feineren Aufspaltung als der Feinstrukturaufspaltung. Sie wird Hyperfeinstruktur genannt. Da die Kernspins der beiden Rubidiumisotope unterschiedlich sind, erhält man unterschiedliche Energieaufspaltungen (vgl. hierzu auch die Schemata in „Rubidium 85 D Line Data“ und „Rubidium 87 D Line Data“). Analog zur Feinstrukturaufspaltung erhält man den Gesamtdrehimpuls des Atoms \vec{F} .

$$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \Rightarrow |i - j| \leq f \leq i + j$$

Auch die Auswahlregeln sind analog zu denen des Gesamtdrehimpulses \vec{J} . Somit ist $\Delta F = 0, \pm 1$. [Dem10, Mes15, Joh91, S. 175ff, S. 759ff, S. 172]

Fabry-Pérot Interferometer

Das Fabry-Perot Interferometer ist ein Vielstrahlinterferometer und gehört zu den einfachsten optischen Resonatoren. In diesem Versuch dient es dazu, relative Frequenzabstände zu messen. Hierzu werden zwei Spiegel im Abstand d parallel angeordnet (vgl. ??). Zwischen den Spiegeln interferieren die immer wieder hin- und herlaufenden Strahlen mit sich selbst. Als Ergebnis erhält man Transmission des eingestrahlten, periodischen Lichts, welche von der Lichtfrequenz abhängen. Der Abstand zwischen zwei Linien im Signal entspricht dabei gerade zwei Interferenzordnungen N und $N + 1$. Dieser Abstand wird als freier Spektralbereich (engl. free spectral range, FSR) bezeichnet. Als Resultat erhält man:

$$\Delta\omega_{FSR} = \frac{c}{2nd} \quad \text{mit} \quad c = \frac{c}{2d}$$

Hierbei ist c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum und n der Brechungsindex des Materials zwischen den Spiegeln. Im Versuch wird Brechungsindex für Luft $n = 1$ verwendet. [Eic10, Meso8, Demo7, S. 391ff, S. 196ff, S. 86ff]

Sättigungsspektroskopie

Die Sättigungsspektroskopie ermöglicht die Auflösung der Hyperfeinstrukturauflösung der ersten angeregten Zustände. Da man bei dieser Art von Spektroskopie den Dopplereffekt zumindest theoretisch umgehen kann, wird sie auch dopplerverbreiterte Sättigungsspektroskopie genannt. Das Auflösungsvermögen ist somit theoretisch nur noch durch die natürliche Linienbreite beschränkt. Tatsächlich beobachtet man aber, dass das Auflösungsvermögen breiter als die natürliche Linienbreite ist. Dies kann mehrere Gründe haben, z.B. dass der Laser selbst ein Rauschen verursacht.

Bei der Sättigungsspektroskopie wird eine monochromatische Welle durch die Gasprobe mit dopplerverbreiterten Absorptionsübergängen geschickt. Dadurch werden bestimmte Atome (abhängig von ihrer Geschwindigkeit) angeregt. Ein intensiver Pumpstrahl versetzt einen großen Anteil der Atome in einen angeregten Zustand, wodurch das Medium gesättigt wird. Gleichzeitig wird ein weiterer Laserstrahl, der so genannte Probestrahl, mit gleicher Frequenz genau entgegengesetzt zum Pumpstrahl durch die Probe geschickt. Um ein Photon absorbieren zu können, muss das Atom eine Geschwindigkeitskomponente v_z im Intervall

$$v_z \pm \Delta v_z = (\omega - \omega_0 \pm \Delta \omega_n)/k$$

besitzen. Hierbei ist $\Delta \omega_n$ die homogene Linienbreite und Δv_z die Breite des Lochs in der Besetzungsverteilung. Da viele Atome bereits angeregt sind, trifft der Probestrahl kaum noch auf Atome im Grundzustand, welche zur Absorption fähig sind. Als Resultat erhält man die Besetzungsverteilung $N(v_z)$ und das Absorptionsprofil $\alpha(\omega)$. In Abbildung 2 sind diese schematisch dargestellt. Die Laserfrequenz ω wird bei dem Versuch so gewählt, dass diese auf die Resonanzfrequenz ω_0 des gewünschten Übergangs abgestimmt ist.

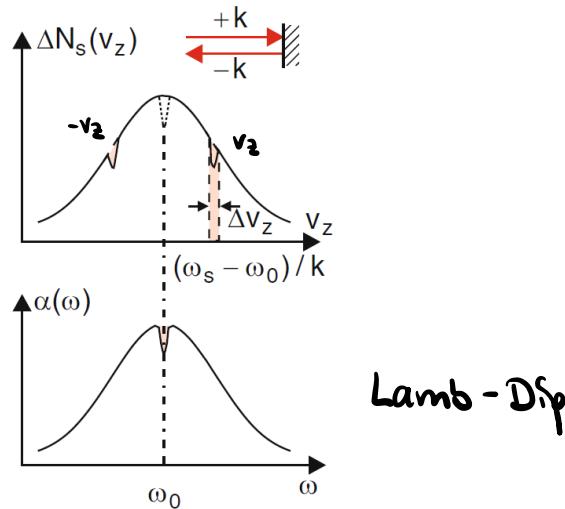


Abbildung 2: oben: Symmetrisch zur Linienmitte erscheinende Löcher bei einer stehenden Welle; unten: Lamb-Dip im Absorptionsprofil $\alpha(\omega)$ für $\omega = \omega_0$; modifiziert nach [Dem10, S. 376]

Das zweite Loch entsteht bei der Betrachtung von $-v_z$ statt v_z , da der Pumpstrahl in die entgegengesetzte Richtung läuft und deshalb die Frequenz negativ erscheint. Als Folge entsteht das zweite Loch bei einer anderen Geschwindigkeitskomponente. Falls $\omega = \omega_0$ ist (dies geschieht wenn Pump- und Probestrahl mit den gleichen Atomen wechselwirken), so fallen beide Löcher zusammen und es entsteht in der Absorption ein lokales Minimum (vgl. Abb. 2). Dieser Effekt wird Lamb-Dip genannt.

3 LITERATURHINWEISE

LITERATUR

- [Demo7] DEMTRÖDER, WOLFGANG: *Laserspektroskopie 1 - Grundlagen*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 5. Auflage, 2007.
- [Dem10] DEMTRÖDER, WOLFGANG: *Experimentalphysik 3 - Atome, Moleküle und Festkörper*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 4. Auflage, 2010.
- [Eic10] EICHLER, HANS-JOACHIM UND EICHLER, JÜRGEN: *Laser - Bauformen, Strahlführung, Anwendungen*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 7. Auflage, 2010.

- [Her15] HERTEL, INGOLF VOLKER UND SCHULZ, CLAUS-PETER: *Atome, Moleküle und optische Physik 1 - Atomphysik und Grundlagen der Spektroskopie*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2015.
- [Joh91] JOHANNES, RECHT UND WERNER, KLEIN: *Wege in der Physikdidaktik Band 2 -Anregungen für Unterricht und Lehre*. 1991.
- [Meso8] MESCHEDE, DIETER: *Optik, Licht und Laser* -. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 3. Auflage, 2008.
- [Mes15] MESCHEDE, DIETER: *Gerthsen Physik*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2015.

4 FRAGEN ZUR VORBEREITUNG

1. Warum sind die Kernspins der beiden Rubidiumisotope unterschiedlich? Welche Quantenzahlen existieren im Grundzustand und den ersten beiden angeregten Zuständen für die beiden Rubidiumisotope und welche F-Quantenzahlen resultieren daraus?
2. Informieren Sie sich zu den Begriffen „natürliche Linienbreite“, „Doppler-Verbreiterung“, „homogene/inhomogene Verbreiterung“ und „Sättigungsverbreiterung“.
3. Was sind „Cross-Over Resonanzen“ und wie entstehen diese?
4. Wofür werden im Versuch zwei Strahlteilerwürfel benötigt, die polarisierend sind? Wozu wird das $\lambda/2$ -Plättchen und das Filterrad gebraucht?
5. Wie kann man aus den gewonnenen Daten die Hyperfeinstrukturkonstanten berechnen? Welche Hyperfeinübergänge sind im Spektrum zu erwarten?

5 VERSUCHSAUFBAU UND MESSTECHNIKEN

Alle im Versuch benötigten Elemente stehen mit entsprechenden Halterungen zur Verfügung. Die Versuchselemente lassen sich mit Schrauben auf dem Experimentiertisch anordnen und befestigen, um die Justage zu sichern. Für diesen Versuch stehen folgende Elemente zur Verfügung:

- Laser
- für die Sättigungsspektroskopie
 - ein Linearpolarisator
 - $\lambda/2$ -Plättchen
 - zwei Strahlteileranordnungen
 - sechs Spiegel
 - eine Rubidium-Gaszelle mit Heizvorrichtung
 - zwei Irisblenden zur Justage
 - eine Justierspitze
 - ein Photodetektor
- für das Fabry-Pérot Interferometer
 - Strahlteiler (Cube) 30:70 (R:T)
 - Strahlteiler (Plate) 70:30 (R:T)
 - Spiegel
 - Photodetektor
- außerdem steht ein Filterrad zur Intensitätenanpassung bereit

Die zur Verfügung stehenden Spiegel können mit Hilfe von zwei Rädchen, bzw. die zwei kleinen Goldspiegel mit zwei Inbusschlüsseln justiert werden. In Abb. 3 ist der komplette Versuchsaufbau dargestellt. Im Versuch werden Sie Teile des Aufbaus selbst realisieren. Die genaue Beschreibung finden Sie der Übersicht wegen als Teilaufgaben im Abschnitt "Versuchsdurchführung". Durch eine Infrarotkamera kann der Laserstrahl sichtbar gemacht werden. [Dem10, Demo7, Her15, Meso8, S. 376ff, S. 308ff, S. 199ff, S. 417ff]

6 VERSUCHSDURCHFÜHRUNG

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.

Achtung! Sobald ein Bauteil in den Versuch gestellt wird, bzw. mit Schraubenziehern am Versuchstisch gearbeitet wird, muss der Laserstrahl mindestens vor diesen Elementen abgeblockt werden, da diese den Laserstrahl in Ihre Richtung reflektieren können. Außerdem dürfen die Oberflächen der optischen Elemente nicht berührt werden, da sie sonst verschmutzt oder sogar beschädigt werden können. Legen Sie außerdem reflektierenden Schmuck an Ihren Händen ab, um Reflexionen in Ihre Richtung zu vermeiden.

1. Realisieren Sie den Versuchsaufbau in Abb. 3.

Der Laser, der lineare Polarisator, die Spiegel S₁ und S₂ und das Strahlteilerelement St₁ sind bereits aufgebaut und justiert, verändern Sie deshalb nichts an diesen Bauteilen. Außerdem ist das $\lambda/2$ -Plättchen bereits aufgebaut.

Beginnen Sie damit, die Spiegel S₃ und S₄ aufzustellen und zu justieren. Hierzu steht eine Justierspitze zur Verfügung (Höhe= 12 cm). Vergleichen Sie hierzu auch Abb. 4. Stellen Sie die Spiegel S₃ und S₄ auf Lochreihe und in ca. 45° zum einfallenden Strahl auf. Nun wird der Strahl mit Hilfe einer Justierspitze ausgerichtet. Hierzu wählen Sie zwei Positionen P₁ und P₂ in einer Lochreihe aus, wobei P₁ ungefähr dort sein sollte, wo später auch der zweite Strahlteiler St₂ stehen soll. P₂ wird so weit weg wie möglich ausgewählt. Justieren Sie nun abwechselnd mit S₃ auf P₁ und mit S₄ auf P₂. Hierbei soll die Justierspitze genau getroffen werden. Sobald auf beiden Positionen die Spitze genau getroffen wird, ohne an dem jeweils anderen Spiegel noch justieren zu müssen, ist der Strahl ausjustiert und es kann das zweite Strahlteilerelement St₂ eingebaut und justiert werden. Falls der Laserstrahl nur schwer sichtbar ist, können Sie die Intensität des Strahls mit dem $\lambda/2$ -Plättchen etwas erhöhen, sodass das Justieren etwas einfacher fällt.

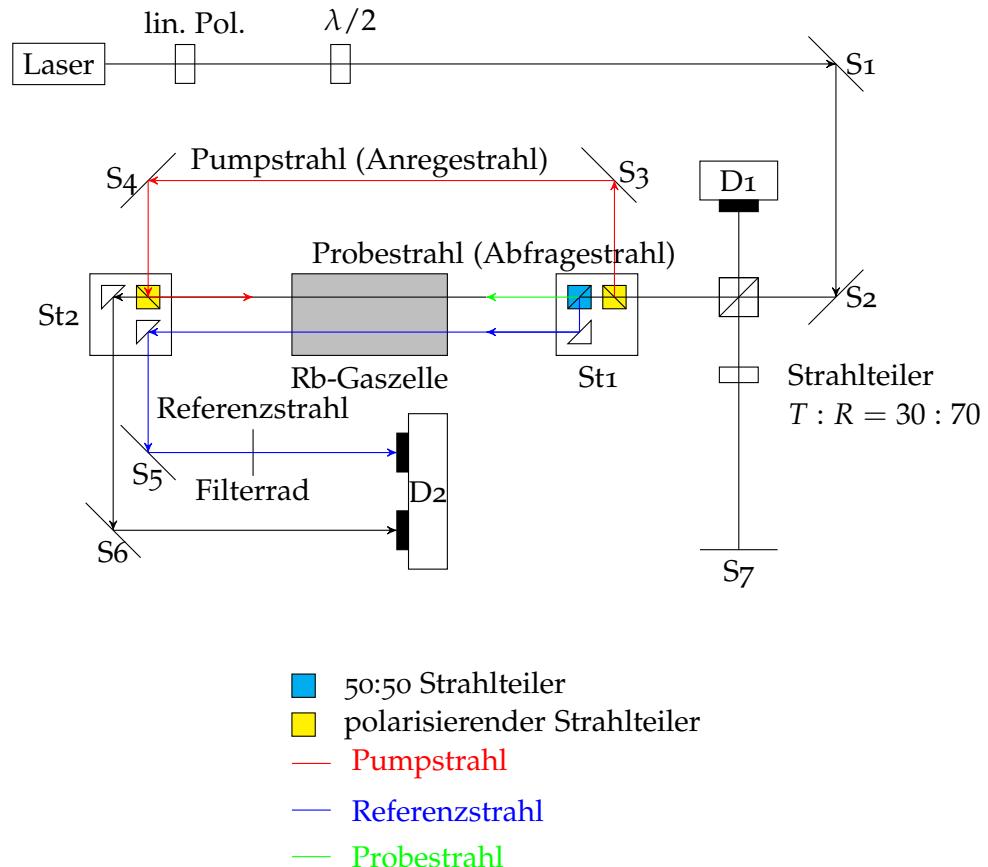
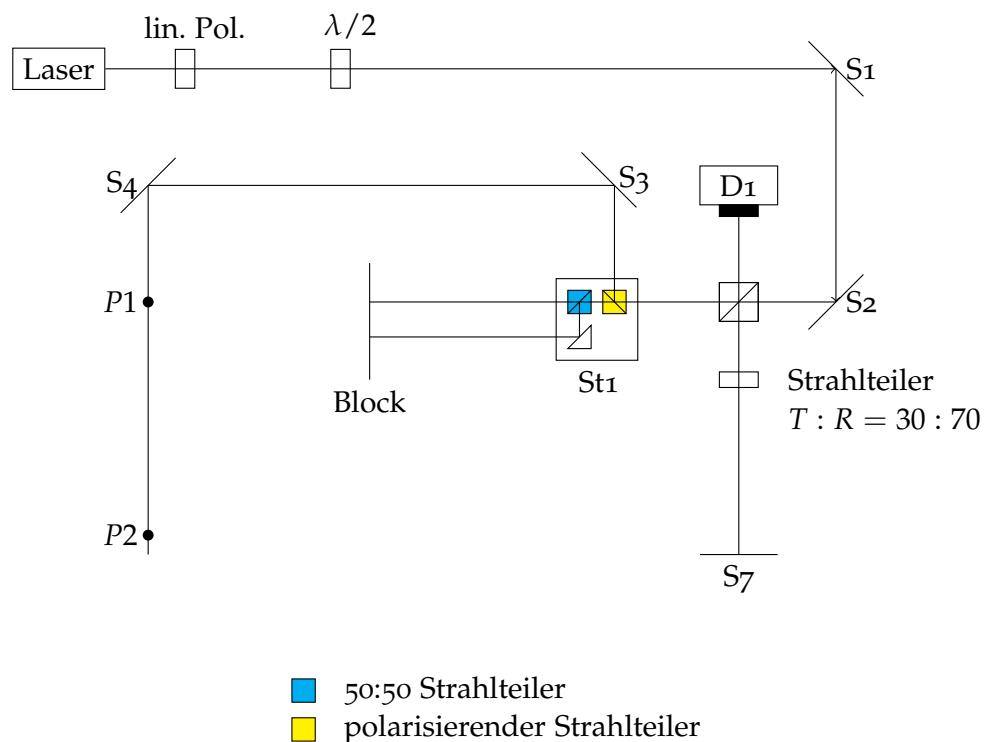


Abbildung 3: Versuchsaufbau.

Abbildung 4: Justage von S₃ und S₄.

Das Strahlteilerelement St2 wird nun, wie in Abb. 3 in den Aufbau gestellt, so dass alle optischen Elemente möglichst mittig getroffen werden. Der Strahlteiler muss jetzt justiert werden. Hierzu wird der Pumpstrahl geblockt und per Rückreflex auf S4 justiert. Nun ist gewährleistet, dass St2 nicht verkippt ist.

Im Anschluss müssen noch der Pump- und Probestrahl überlagert werden. Hierzu werden zwei Irisblenden (Höhe Mittelpunkt = 12 cm) an zwei Positionen zwischen St1 und St2 eingebaut. Es wird mit S3 auf I1 und mit S4 auf I2 justiert (vgl. Abb. 5). Um ein gutes Signal zu erhalten, muss diese Justage sehr genau erfolgen.

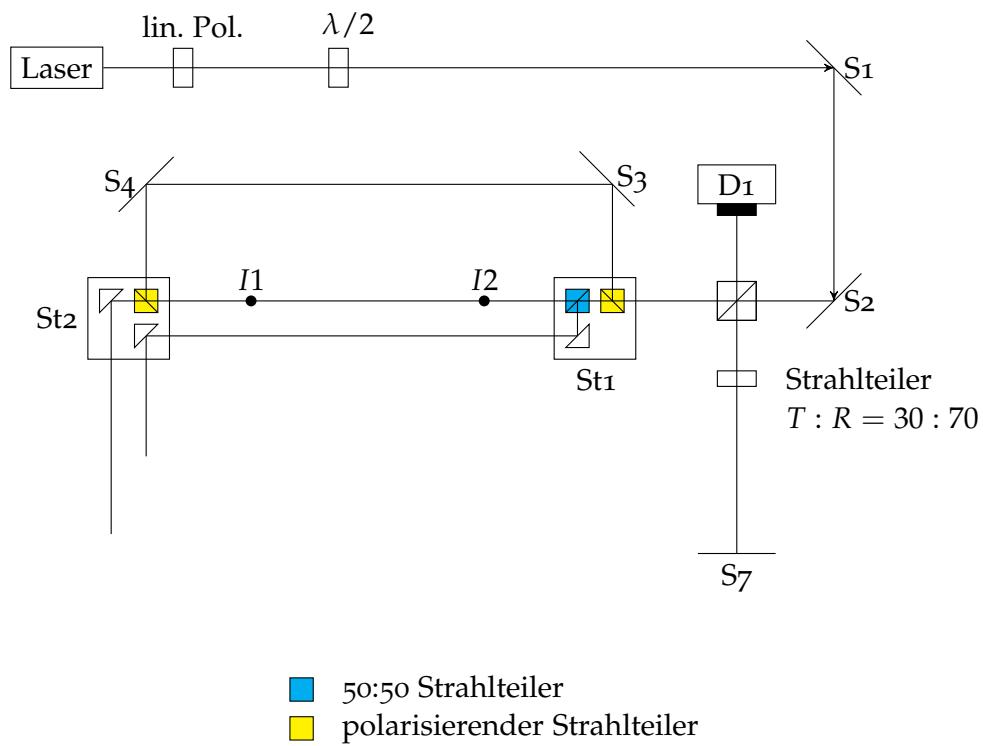


Abbildung 5: Überlagerung von Pump-und Probestrahl.

Als nächstes werden die Spiegel S5, S6 und der Detektor D2 wie in Abb. 3 aufgestellt und so justiert, dass die Strahlen den Detektor jeweils mittig treffen.

Am Ende wird die Gaszelle eingesetzt, sodass die beiden Strahlen zwischen St1 und St2 möglichst gerade und parallel durch die Gaszelle verlaufen.

2. Der Versuchsaufbau ist nun realisiert. Nun müssen die Strahlintensitäten noch aufeinander abgestimmt werden. Dies wird mit Hilfe des $\lambda/2$ -Plättchens und einem Filterrad realisiert. Der Referenzstrahl sollte die gleiche Intensität wie der parallele Probestrahl ohne Pumpstrahl haben. Außerdem soll der Pumpstrahl stärker sein als der Probestrahl (Leistungsverhältnis Pump:Probe $\approx 100:1$). Die Intensitäten können mit Hilfe des Messprogramms am PC visuell dargestellt und mit dem Filterrad (vgl. Abb. 3) angepasst werden.
3. Stellen Sie sicher, dass die Gaszelle am Heizer richtig angeschlossen ist, und die Detektoren sowohl mit Strom versorgt, als auch an den Eingängen aio-ai4 des „NI-USB 6002 AD-Interface“ angeschlossen sind.
4. Die Messdaten werden mit dem Programm „Zeeman-op“ aufgenommen, welches auf dem Desktop des Benutzers „Praktikum“ zu finden ist. Damit das Programm funktioniert, müssen folgende Elemente eingeschaltet und mit dem PC verbunden sein:
 - Laser
 - Heizelement der Gaszelle („Temperature Controller“)
 - „programmable DC power supply“ von RIGOL (DP831A)
 - „Function Arbitrary Waveform Generator“ von RIGOL (DG4062)

Mit Hilfe dieses Programms können nun die Messungen aufgenommen und die Strahlintensitäten aufeinander abgestimmt werden.

Hinweise zur Justage

Falls der Laserstrahl bei der Justage aus einem Spiegel hinausläuft, überprüfen Sie dessen Position. Meistens steht der Spiegel dann zu weit neben der gewünschten Lochreihe. Beachten Sie dabei auch, dass die Spiegeloberfläche auf Lochreihe stehen muss und nicht dessen Halterung. Falls dies noch nicht genügt, stellen Sie die Justierspitze an die Position, an welcher später der Spiegel stehen soll und justieren Sie den Laserstrahl darauf. Wenn Sie anschließend den Spiegel wieder in den Versuchsaufbau einbauen, stellen Sie sicher, dass dieser mit der Oberfläche in 45° zum einfallenden Strahl und die Mitte des Spiegels auf Lochreihe steht (der Spiegel sollte mit dem Laserstrahl nun mittig getroffen werden).

7 MESSUNGEN

Bringen Sie bitte einen USB-Stick zur Versuchsdurchführung mit, auf dem Sie ihre Messdaten speichern und mitnehmen können. Stellen Sie sicher, dass die nötigen Kanäle im Messprogramm eingeschaltet sind und mit aufgenommen werden.

7.1 *Hinweise zum Messprogramm*

In Abb. 6 ist die Startansicht bei Aufrufen des Messprogramms „Zeemanop“ zu sehen. Auf der linken Seite wählen Sie die Kanäle aus, welche für die Detektoren benutzt werden. Im unteren Bereich befinden sich mehrere Registerkarten. Im Versuch werden zwei davon gebraucht, nämlich „Laser Power“ und „Adjust“. Im Bereich „Adjust“ sehen Sie die Eingangssignale in Echtzeit. Dieser wird zur Intensitätenanpassung gebraucht.

Im Bereich „Laserpower“ können mehrere Dinge eingestellt und Ihre aufgenommen Daten im rechten Feld abgespeichert werden. Im mittleren Bereich können Sie die „Scan-range“ einstellen, das heißt den Bereich, den der Laser um den eingestellten Laserstrom durchfahren soll. Dieser muss je nach gewünschter Aufnahme zusammen mit dem Laserstrom angepasst werden. Die „Scan-Steps“ geben an, wie viele Punkte in diesem Bereich aufgenommen werden. Bei Aufnahme einer Messreihe sollte das Maximum von 2000 eingestellt werden. In dem Feld „ $dt/pixel$ “ kann angegeben werden, wie lange pro Messpunkt gemessen werden soll (vgl. Abb. 7). Bei Aufnahme einer Messreihe sollte ein Wert zwischen 100 und 200 eingestellt werden.

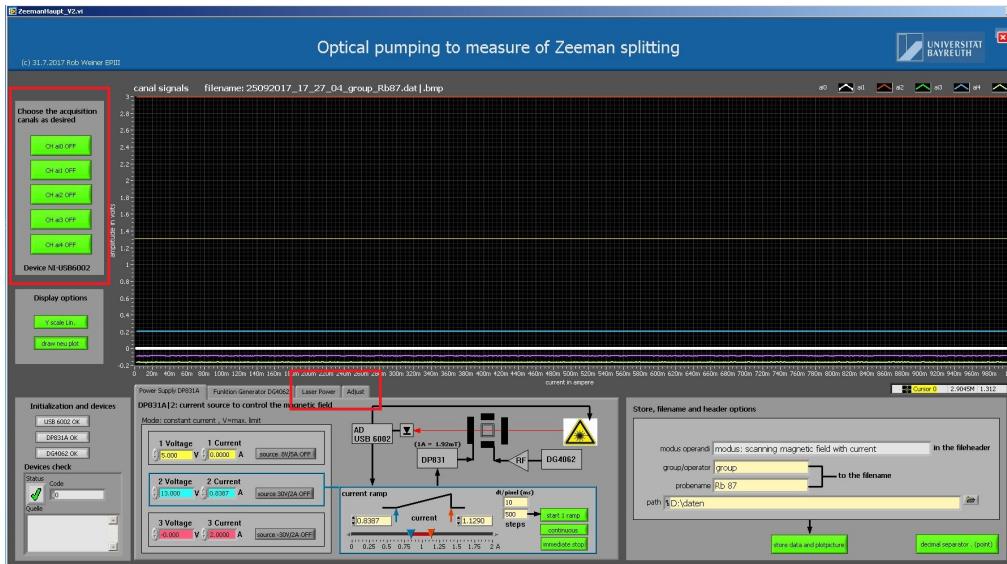


Abbildung 6: Startansicht des Messprogramms „Zeeman-op“.

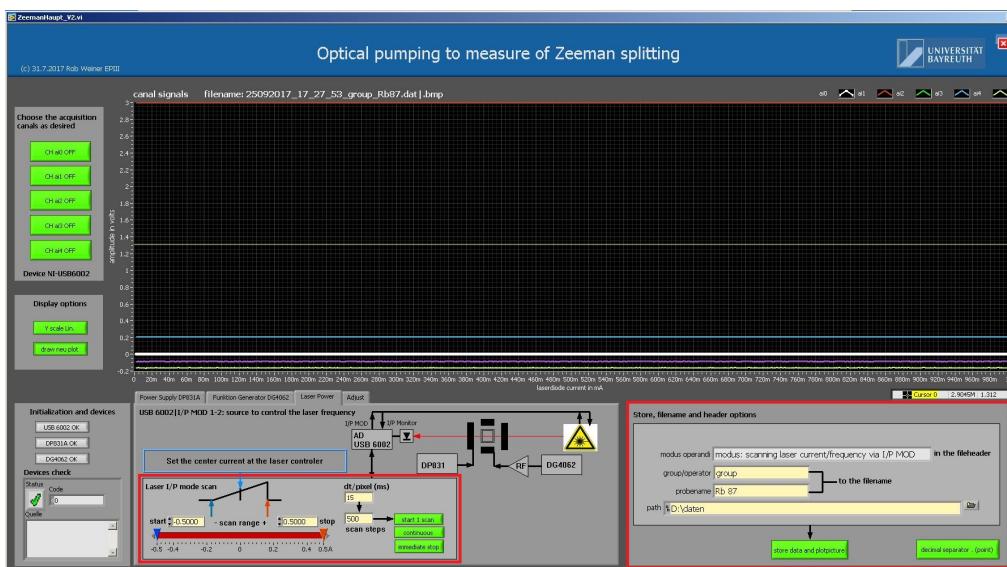


Abbildung 7: Bereich Laser-Power des Programms „Zeeman-op“.

7.2 Hinweise zur Signalverbesserung

- Die Aufnahme des dopplerverbreiterten Spektrums ist innerhalb zweier Modensprünge notwendig, d.h. vier Linien müssen innerhalb zweier Modensprünge klar von diesen unterscheidbar sein. Ein Modensprung bezeichnet dabei einen schlagartigen Sprung in der Wellenlänge. Um

die Modensprünge etwas zu verschieben, kann die Lasertemperatur zwischen 21 °C und 23 °C in 0.2 °C Schritten eingestellt werden.

- Für ein gutes Signal ist die genaue Überlagerung von Pump- und Probestrahl notwendig.
- Falls die Detektoren sättigen, verringern Sie die Intensität des einfallenden Strahls (mit einem Filterrad oder Ähnlichem). Der Strahl bzw. die Strahlen sollten unmittelbar vor dem Detektor abgeschwächt werden, um eine Veränderung des Versuchsaufbaus zu verhindern.
- Falls keine Hyperfeindips erkennbar sind, passen sie die Intensitäten der Strahlen erneut an.

7.3 Aufgaben

Im Folgenden sollen die beschriebenen Messungen aufgenommen werden. Zu jeder Messung, soll das Fabry-Pérot Signal mit aufgenommen werden. Notieren Sie sich, mit welchen Kanälen Sie was gemessen haben, um später bei der Auswertung den Überblick nicht zu verlieren. Messen Sie dies für jeweils eine Gaszellentemperatur von 23 °C und 60 °C.

1. Betrachten Sie nun einen Ausschnitt zwischen zwei Modensprüngen, in dem alle vier Linien erkennbar sind. Passen Sie hierzu den Laserstrom und die Scan-Range an. Die Messung soll die vier Linien und die zwei Modensprünge im Strombereich unter- und oberhalb davon beinhalten.
2. Nun sollen die einzelnen Linien gemessen werden. Passen Sie hierzu wieder den Laserstrom und die Scan-Range an. Tipp: Schreiben Sie auf (in Dateiname und/oder Ihrem Protokoll), um welche Linie es sich handelt, damit Sie Ihre Daten später bei der Auswertung noch auseinander halten können.
3. Zusätzlich soll für eine Lasertemperatur von 40 °C der Ausschnitt zwischen zwei Modensprüngen aufgenommen werden.

8 AUSWERTUNG

Folgender Teil der Auswertung soll nur für eine Gaszellentemperatur durchgeführt werden, überlegen und begründen Sie, welche Gastemperatur Sie für die Auswertung benutzen.

1. Befreien Sie das Absorptionsspektrum von Trends und benennen Sie die Linien im Spektrum mit Hilfe der jeweiligen Übergangsenergien.
2. Bestimmen Sie die Abstände der Energieniveaus des Absorptionsspektrums
 - (a) mit Hilfe der beigelegten Strom-Wellenlängen-Kennlinie
 - (b) mit Hilfe des Fabry-Pérot-Interferometers als relativen Frequenzmaßstab

und vergleichen Sie diese miteinander. Stellen Sie diese mit entsprechender Frequenzachse graphisch dar.

3. Berechnen Sie das tatsächliche Verhältnis der beiden Rubidiumisotope in der Gaszelle. Schätzen Sie dazu die Gaußintegrale geeignet ab.
4. Stellen Sie das dopplerfreie Signal der einzelnen Absorptionsdips dar. Fitten Sie für einen Absorptionsdip die Hyperfeindips mit Lorentzkurven. Was fällt Ihnen auf? Bestimmen Sie damit die Positionen und Abstände der einzelnen Dips und ordnen Sie die möglichen Energieübergänge zu. Gegebenfalls müssen Sie hier die Frequenzachse neu kalibrieren. Vergleichen Sie diese anschließend mit den Literaturwerten der beigefügten Literatur.
5. Bestimmen Sie die Hyperfeinstrukturkonstanten so weit wie möglich.

Folgende Aufgabe sind für alle drei Gastemperaturen zu bearbeiten.

1. Berechnen Sie die verschiedenen Gastemperaturen und damit die Geschwindigkeiten des Gases mit Hilfe der gefitteten Gaußkurven des Absorptionsspektrums.

Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse für die verschiedenen Gastemperaturen.

ANHANG A: RUBIDIUM 85 D LINE DATA

ANHANG B: RUBIDIUM 87 D LINE DATA

Fragen zur Vorbereitung

1) Kernspin: $^{85}_{37}\text{Rb} = 5/2$, $^{87}_{37}\text{Rb} = 3/2$

→ Isotop $\Rightarrow Z = \text{konstant}$

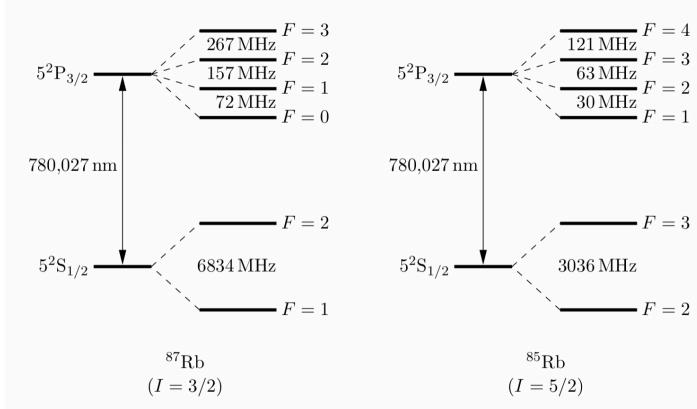
Spins Neutron = $1/2$ + zusätzlich?

Z gerade, N gerade: gg-kerne $I = 0$

Z ungerade, N gerade

Z gerade, N ungerade: ug, gu-kerne $I = \text{halbzahlig}$

Z ungerade, N ungerade: uu-kerne $I = \text{ganzzahlig}$



$$|J - 1| \leq F \leq J + 1$$

$5^2\text{P}_{3/2}$
 $\Rightarrow J = 3/2, I = 3/2 \Rightarrow F = 0, 1, 2, 3$
 $I = 5/2 \Rightarrow F = 1, 2, 3, 4$

$5^2\text{P}_{1/2}$
 $\Rightarrow J = 1/2, I = 3/2 \Rightarrow F = 1, 2$
 $I = 5/2 \Rightarrow F = 2, 3$

2) Natürliche Linienbreite:

Angeregte Atome fallen durch spontane Emission in Grundzustand. Emittierte Strahlung nicht monoenergetisch \Rightarrow Intensitätsverteilung $I(\omega)$, Lorentz-Kurve

$$I(\omega) = I_0 \frac{\gamma / 2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} \quad \Rightarrow \gamma \hat{=} \text{Halbwertsbreite} \hat{=} \text{naturliche Linienbreite}$$

Doppler-Verbreiterung:

Rubidium-Atome als Gas \Rightarrow Bewegung der Atome \Rightarrow Atome parallel zur Ausbreitrichtung des Lasers von Bedeutung $\sim v_z = v \cdot u$, wobei u Ausbreitungsrichtung Laser mit Frequenz ω nicht

$$\Rightarrow \omega' = \omega \left(1 - \frac{v_z}{c}\right), \quad v_z < 0 \text{ blauverschmiert}, \quad v_z > 0 \text{ rotverschmiert}, \quad \text{WW nur bei } \omega' = \omega_0 \text{ relativistisch}$$

Maxwell-Geschwindigkeitsverteilung \Rightarrow auff.-verteilt bei $v_z = 0$, $v_z = \frac{(\omega - \omega_0)c}{\omega} \approx \frac{(\omega - \omega_0)c}{\omega_0}$

$$I(\omega) = I(\omega_0) \exp \left[- \left(\frac{\omega - \omega_0}{\delta\omega_{D/2} \sqrt{2\ln 2}} \right)^2 \right] \Rightarrow \delta\omega_D = 2\sqrt{\ln 2} \frac{v_{\text{WW}}}{c} \hat{=} \text{Doppler-Breite}, \quad v_{\text{WW}} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$$

$$\delta\omega_D \approx 2 \cdot \gamma$$

Homogene und Inhomogene Verbreiterung:

Homogen: Absorption und Emission von Photonen mit ω bei allen Atomen gleich \Rightarrow natürlich

Inhomogen: \rightarrow nicht gleich \Rightarrow Doppler Verbreiterung

Sättigungsverbreiterung:

Bestrahlung mit Licht hoher Intensität \Rightarrow optisches Pumpen verändert Besetzungszahl der Niveaus deutlich.

3)

Etwas komplexer werden die Verhältnisse, wenn es zwei (oder mehr) vom gleichen Grundzustand ausgehende Übergänge mit der Frequenz ω_1 und der größeren Frequenz ω_2 gibt, deren Frequenzabstand $\omega_2 - \omega_1$ kleiner als die Dopplerbreite ist. Dann treten neben den Lambdips zusätzliche Resonanzen auf, sog. **cross-over-Resonanzen (=Überkreuzungssignale)**. Betrachten wir die Laserfrequenz $\omega_L = \frac{\omega_2 - \omega_1}{2} + \omega_1$, bei der der Sättigungsstrahl Atome mit einer Geschwindigkeitskomponente $+v_x$ auf das untere Niveau anregen kann und der Abfragestrahl dieselben Atome (die in seinem System die Geschwindigkeit $-v_x$ haben) auf das obere Niveau anregen kann. Es gilt dann: $\omega_L = \omega_1 + kv_x = \omega_2 - kv_x$. Der Sättigungsstrahl erzeugt eine Abnahme der Besetzungsdichte im gemeinsamen unteren Niveau. Dadurch wird das Medium für den Abfragestrahl transparent. In Abb. 4.4 ist anhand eines einfachen Beispiels das zu erwartende Sättigungsspektrum skizziert.

4)

4. Wofür werden im Versuch zwei Strahlteilerwürfel benötigt, die polarisierend sind? Wozu wird das $\lambda/2$ -Plättchen und das Filterrad gebraucht?
5. Wie kann man aus den gewonnenen Daten die Hyperfeinstrukturkonstanten berechnen? Welche Hyperfeinübergänge sind im Spektrum zu erwarten?

Rubidium 85 D Line Data

Daniel Adam Steck

Oregon Center for Optics and Department of Physics, University of Oregon

Copyright © 2008, by Daniel Adam Steck. All rights reserved.

This material may be distributed only subject to the terms and conditions set forth in the Open Publication License, v1.0 or later (the latest version is presently available at <http://www.opencontent.org/openpub/>). Distribution of substantively modified versions of this document is prohibited without the explicit permission of the copyright holder. Distribution of the work or derivative of the work in any standard (paper) book form is prohibited unless prior permission is obtained from the copyright holder.

Original revision posted 30 April 2008.

This is revision 2.1.6, 20 September 2013.

Cite this document as:

Daniel A. Steck, "Rubidium 85 D Line Data," available online at <http://steck.us/alkalidata> (revision 2.1.6, 20 September 2013).

Author contact information:

Daniel Steck

Department of Physics

1274 University of Oregon

Eugene, Oregon 97403-1274

dsteck@uoregon.edu

1 Introduction

In this reference we present many of the physical and optical properties of ^{85}Rb that are relevant to various quantum optics experiments. In particular, we give parameters that are useful in treating the mechanical effects of light on ^{85}Rb atoms. The measured numbers are given with their original references, and the calculated numbers are presented with an overview of their calculation along with references to more comprehensive discussions of their underlying theory. At present, this document is *not* a critical review of experimental data, nor is it even guaranteed to be correct; for any numbers critical to your research, you should consult the original references. We also present a detailed discussion of the calculation of fluorescence scattering rates, because this topic is often not treated clearly in the literature. More details and derivations regarding the theoretical formalism here may be found in Ref. [1].

The current version of this document is available at <http://steck.us/alkalidata>, along with “Cesium D Line Data,” “Sodium D Line Data,” and “Rubidium 87 D Line Data.” This is the *only* permanent URL for this document at present; please do not link to any others. Please send comments, corrections, and suggestions to dsteck@uoregon.edu.

2 Rubidium 85 Physical and Optical Properties

Some useful fundamental physical constants are given in Table 1. The values given are the 2006 CODATA recommended values, as listed in [2]. Some of the overall physical properties of ^{85}Rb are given in Table 2. Rubidium 85 has 37 electrons, only one of which is in the outermost shell. ^{85}Rb is the only stable isotope of rubidium (although ^{87}Rb is only very weakly unstable, and is thus effectively stable), and is the only isotope we consider in this reference. The mass is taken from the high-precision measurement of [3], and the density, melting point, boiling point, and heat capacities (for the naturally occurring form of Rb) are taken from [4]. The vapor pressure at 25°C and the vapor pressure curve in Fig. 1 are taken from the vapor-pressure model given by [5], which is

$$\begin{aligned} \log_{10} P_v &= 2.881 + 4.857 - \frac{4215}{T} && \text{(solid phase)} \\ \log_{10} P_v &= 2.881 + 4.312 - \frac{4040}{T} && \text{(liquid phase)}, \end{aligned} \quad (1)$$

where P_v is the vapor pressure in torr (for P_v in atmospheres, simply omit the 2.881 term), and T is the temperature in K. This model is specified to have an accuracy better than $\pm 5\%$ from 298–550K. Older, and probably less-accurate, sources of vapor-pressure data include Refs. [6] and [7]. The ionization limit is the minimum energy required to ionize a ^{85}Rb atom; this value is taken from Ref. [8].

The optical properties of the ^{85}Rb D line are given in Tables 3 and 4. The properties are given separately for each of the two D-line components; the D₂ line (the $5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{3/2}$ transition) properties are given in Table 3, and the optical properties of the D₁ line (the $5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{1/2}$ transition) are given in Table 4. Of these two components, the D₂ transition is of much more relevance to current quantum and atom optics experiments, because it has a cycling transition that is used for cooling and trapping ^{85}Rb . The frequency ω_0 of the D₂ is a combination of the ^{87}Rb measurement of [9] with the isotope shift quoted in [10], while the frequency of the D₁ transition is an average of values given by [10] and [11]; the vacuum wavelengths λ and the wave numbers k_L are then determined via the following relations:

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega_0} \quad k_L = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (2)$$

Due to the different nuclear masses of the two isotopes ^{85}Rb and ^{87}Rb , the transition frequencies of ^{87}Rb are shifted slightly up compared to those of ^{85}Rb . This difference is reported as the isotope shift, and the values are taken from [10]. (See [11, 12] for less accurate measurements.) The air wavelength $\lambda_{\text{air}} = \lambda/n$ assumes an index of refraction of $n = 1.000\ 266\ 501(30)$ for the D₂ line and $n = 1.000\ 266\ 408(30)$ for the D₁ line, corresponding

to typical laboratory conditions (100 kPa pressure, 20°C temperature, and 50% relative humidity). The index of refraction is calculated from the 1993 revision [13] of the Edlén formula [14]:

$$n_{\text{air}} = 1 + \left[\left(8\ 342.54 + \frac{2\ 406\ 147}{130 - \kappa^2} + \frac{15\ 998}{38.9 - \kappa^2} \right) \left(\frac{P}{96\ 095.43} \right) \left(\frac{1 + 10^{-8}(0.601 - 0.009\ 72\ T)P}{1 + 0.003\ 6610\ T} \right) - f(0.037\ 345 - 0.000\ 401\ \kappa^2) \right] \times 10^{-8}. \quad (3)$$

Here, P is the air pressure in Pa, T is the temperature in °C, κ is the vacuum wave number $k_L/2\pi$ in μm^{-1} , and f is the partial pressure of water vapor in the air, in Pa (which can be computed from the relative humidity via the Goff-Gratch equation [15]). This formula is appropriate for laboratory conditions and has an estimated (3σ) uncertainty of 3×10^{-8} from 350-650 nm.

The lifetimes are weighted averages¹ from four recent measurements; the first employed beam-gas-laser spectroscopy [18], with lifetimes of 27.70(4) ns for the $5^2\text{P}_{1/2}$ state and 26.24(4) ns for the $5^2\text{P}_{3/2}$ state, the second used time-correlated single-photon counting [19], with lifetimes of 27.64(4) ns for the $5^2\text{P}_{1/2}$ state and 26.20(9) ns for the $5^2\text{P}_{3/2}$ state, the third used photoassociation spectroscopy [20] (as quoted by [19]), with a lifetime of 26.23(6) ns for the $5^2\text{P}_{3/2}$ state only, and the fourth also used photoassociation spectroscopy [21], with lifetimes of 27.75(8) ns for the $5^2\text{P}_{1/2}$ state and 26.25(8) ns for the $5^2\text{P}_{3/2}$ state. Note that at present levels of theoretical [22] and experimental accuracy, we do not distinguish between lifetimes of the ^{85}Rb and ^{87}Rb isotopes. Inverting the lifetime gives the spontaneous decay rate Γ (Einstein A coefficient), which is also the natural (homogenous) line width (as an angular frequency) of the emitted radiation.

The spontaneous emission rate is a measure of the relative intensity of a spectral line. Commonly, the relative intensity is reported as an absorption oscillator strength f , which is related to the decay rate by [23]

$$\Gamma = \frac{e^2 \omega_0^2}{2\pi\epsilon_0 m_e c^3} \frac{2J+1}{2J'+1} f \quad (4)$$

for a $J \rightarrow J'$ fine-structure transition, where m_e is the electron mass.

The recoil velocity v_r is the change in the ^{85}Rb atomic velocity when absorbing or emitting a resonant photon, and is given by

$$v_r = \frac{\hbar k_L}{m}. \quad (5)$$

The recoil energy $\hbar\omega_r$ is defined as the kinetic energy of an atom moving with velocity $v = v_r$, which is

$$\hbar\omega_r = \frac{\hbar^2 k_L^2}{2m}. \quad (6)$$

The Doppler shift of an incident light field of frequency ω_L due to motion of the atom is

$$\Delta\omega_d = \frac{v_{\text{atom}}}{c} \omega_L \quad (7)$$

for small atomic velocities relative to c . For an atomic velocity $v_{\text{atom}} = v_r$, the Doppler shift is simply $2\omega_r$. Finally, if one wishes to create a standing wave that is moving with respect to the lab frame, the two traveling-wave components must have a frequency difference determined by the relation

$$v_{\text{sw}} = \frac{\Delta\omega_{\text{sw}}}{2\pi} \frac{\lambda}{2}, \quad (8)$$

because $\Delta\omega_{\text{sw}}/2\pi$ is the beat frequency of the two waves, and $\lambda/2$ is the spatial periodicity of the standing wave. For a standing wave velocity of v_r , Eq. (8) gives $\Delta\omega_{\text{sw}} = 4\omega_r$. Two temperatures that are useful in cooling and

¹Weighted means were computed according to $\mu = (\sum_j x_j w_j)/(\sum_j w_j)$, where the weights w_j were taken to be the inverse variances of each measurement, $w_j = 1/\sigma_j^2$. The variance of the weighted mean was estimated according to $\sigma_\mu^2 = (\sum_j w_j(x_j - \mu)^2)/[(n-1)\sum_j w_j]$, and the uncertainty in the weighted mean is the square root of this variance. See Refs. [16, 17] for more details.

trapping experiments are also given here. The recoil temperature is the temperature corresponding to an ensemble with a one-dimensional rms momentum of one photon recoil $\hbar k_L$:

$$T_r = \frac{\hbar^2 k_L^2}{mk_B}. \quad (9)$$

The Doppler temperature,

$$T_D = \frac{\hbar\Gamma}{2k_B}, \quad (10)$$

is the lowest temperature to which one expects to be able to cool two-level atoms in optical molasses, due to a balance of Doppler cooling and recoil heating [24]. Of course, in Zeeman-degenerate atoms, sub-Doppler cooling mechanisms permit temperatures substantially below this limit [25].

3 Hyperfine Structure

3.1 Energy Level Splittings

The $5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{3/2}$ and $5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{1/2}$ transitions are the components of a fine-structure doublet, and each of these transitions additionally have hyperfine structure. The fine structure is a result of the coupling between the orbital angular momentum \mathbf{L} of the outer electron and its spin angular momentum \mathbf{S} . The total electron angular momentum is then given by

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad (11)$$

and the corresponding quantum number \mathbf{J} must lie in the range

$$|L - S| \leq J \leq L + S. \quad (12)$$

(Here we use the convention that the magnitude of \mathbf{J} is $\sqrt{J(J+1)}\hbar$, and the eigenvalue of J_z is $m_J\hbar$.) For the ground state in ^{85}Rb , $L = 0$ and $S = 1/2$, so $J = 1/2$; for the first excited state, $L = 1$, so $J = 1/2$ or $J = 3/2$. The energy of any particular level is shifted according to the value of J , so the $L = 0 \rightarrow L = 1$ (D line) transition is split into two components, the D₁ line ($5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{1/2}$) and the D₂ line ($5^2S_{1/2} \rightarrow 5^2P_{3/2}$). The meaning of the energy level labels is as follows: the first number is the principal quantum number of the outer electron, the superscript is $2S + 1$, the letter refers to L (i.e., $S \leftrightarrow L = 0$, $P \leftrightarrow L = 1$, etc.), and the subscript gives the value of J .

The hyperfine structure is a result of the coupling of \mathbf{J} with the total nuclear angular momentum \mathbf{I} . The total atomic angular momentum \mathbf{F} is then given by

$$\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{I}. \quad (13)$$

As before, the magnitude of \mathbf{F} can take the values

$$|J - I| \leq F \leq J + I. \quad (14)$$

For the ^{85}Rb ground state, $J = 1/2$ and $I = 5/2$, so $F = 2$ or $F = 3$. For the excited state of the D₂ line ($5^2P_{3/2}$), F can take any of the values 1, 2, 3, or 4, and for the D₁ excited state ($5^2P_{1/2}$), F is either 2 or 3. Again, the atomic energy levels are shifted according to the value of F .

Because the fine structure splitting in ^{85}Rb is large enough to be resolved by many lasers (~ 15 nm), the two D-line components are generally treated separately. The hyperfine splittings, however, are much smaller, and it is useful to have some formalism to describe the energy shifts. The Hamiltonian that describes the hyperfine structure for each of the D-line components is [23, 26–28]

$$H_{\text{hfs}} = A_{\text{hfs}} \mathbf{I} \cdot \mathbf{J} + B_{\text{hfs}} \frac{3(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^2 + \frac{3}{2}(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J}) - I(I+1)J(J+1)}{2I(2I-1)J(2J-1)} + C_{\text{hfs}} \frac{10(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^3 + 20(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})^2 + 2(\mathbf{I} \cdot \mathbf{J})[I(I+1) + J(J+1) + 3] - 3I(I+1)J(J+1) - 5I(I+1)J(J+1)}{I(I-1)(2I-1)J(J-1)(2J-1)}, \quad (15)$$

which leads to a hyperfine energy shift of

$$\Delta E_{\text{hfs}} = \frac{1}{2} A_{\text{hfs}} K + B_{\text{hfs}} \frac{\frac{3}{2}K(K+1) - 2I(I+1)J(J+1)}{4I(2I-1)J(2J-1)} + C_{\text{hfs}} \frac{5K^2(K/4+1) + K[I(I+1) + J(J+1) + 3 - 3I(I+1)J(J+1)] - 5I(I+1)J(J+1)}{I(I-1)(2I-1)J(J-1)(2J-1)}, \quad (16)$$

where

$$K = F(F+1) - I(I+1) - J(J+1), \quad (17)$$

A_{hfs} is the magnetic dipole constant, B_{hfs} is the electric quadrupole constant, and C_{hfs} is the magnetic octupole constant (although the terms with B_{hfs} and C_{hfs} apply only to the excited manifold of the D_2 transition and not to the levels with $J = 1/2$). These constants for the ^{85}Rb D line are listed in Table 5. The value for the ground state A_{hfs} constant is from [26], while the constants listed for the $5^2\text{P}_{3/2}$ manifold are averages of the values from [26] and [10]. The A_{hfs} constant for the $5^2\text{P}_{1/2}$ manifold is the average from the recent measurements of [10] and [11]. These measurements are not yet sufficiently precise to have provided a nonzero value for C_{hfs} , and thus it is not listed. The energy shift given by (16) is relative to the unshifted value (the “center of gravity”) listed in Table 3. The hyperfine structure of ^{85}Rb , along with the energy splitting values, is diagrammed in Figs. 2 and 3.

3.2 Interaction with Static External Fields

3.2.1 Magnetic Fields

Each of the hyperfine (F) energy levels contains $2F+1$ magnetic sublevels that determine the angular distribution of the electron wave function. In the absence of external magnetic fields, these sublevels are degenerate. However, when an external magnetic field is applied, their degeneracy is broken. The Hamiltonian describing the atomic interaction with the magnetic field is

$$\begin{aligned} H_B &= \frac{\mu_{\text{B}}}{\hbar} (g_s \mathbf{S} + g_L \mathbf{L} + g_I \mathbf{I}) \cdot \mathbf{B} \\ &= \frac{\mu_{\text{B}}}{\hbar} (g_s S_z + g_L L_z + g_I I_z) B_z, \end{aligned} \quad (18)$$

if we take the magnetic field to be along the z -direction (i.e., along the atomic quantization axis). In this Hamiltonian, the quantities g_s , g_L , and g_I are respectively the electron spin, electron orbital, and nuclear “ g -factors” that account for various modifications to the corresponding magnetic dipole moments. The values for these factors are listed in Table 6, with the sign convention of [26]. The value for g_s has been measured very precisely, and the value given is the CODATA recommended value. The value for g_L is approximately 1, but to account for the finite nuclear mass, the quoted value is given by

$$g_L = 1 - \frac{m_e}{m_{\text{nuc}}}, \quad (19)$$

which is correct to lowest order in m_e/m_{nuc} , where m_e is the electron mass and m_{nuc} is the nuclear mass [29]. The nuclear factor g_I accounts for the entire complex structure of the nucleus, and so the quoted value is an experimental measurement [26].

If the energy shift due to the magnetic field is small compared to the fine-structure splitting, then J is a good quantum number and the interaction Hamiltonian can be written as

$$H_B = \frac{\mu_{\text{B}}}{\hbar} (g_J J_z + g_I I_z) B_z. \quad (20)$$

Here, the *Landé factor* g_J is given by [29]

$$\begin{aligned} g_J &= g_L \frac{J(J+1) - S(S+1) + L(L+1)}{2J(J+1)} + g_s \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \\ &\simeq 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}, \end{aligned} \quad (21)$$

where the second, approximate expression comes from taking the approximate values $g_s \simeq 2$ and $g_L \simeq 1$. The expression here does not include corrections due to the complicated multielectron structure of ^{85}Rb [29] and QED effects [30], so the values of g_J given in Table 6 are experimental measurements [26] (except for the $5^2\text{P}_{1/2}$ state value, for which there has apparently been no experimental measurement).

If the energy shift due to the magnetic field is small compared to the hyperfine splittings, then similarly F is a good quantum number, so the interaction Hamiltonian becomes [31]

$$H_B = \mu_B g_F \frac{F_z}{\hbar} B_z, \quad (22)$$

where the hyperfine Landé g -factor is given by

$$\begin{aligned} g_F &= g_J \frac{F(F+1) - I(I+1) + J(J+1)}{2F(F+1)} + g_I \frac{F(F+1) + I(I+1) - J(J+1)}{2F(F+1)} \\ &\simeq g_J \frac{F(F+1) - I(I+1) + J(J+1)}{2F(F+1)}. \end{aligned} \quad (23)$$

The second, approximate expression here neglects the nuclear term, which is a correction at the level of 0.1%, since g_I is much smaller than g_J .

For weak magnetic fields, the interaction Hamiltonian H_B perturbs the zero-field eigenstates of H_{hfs} . To lowest order, the levels split linearly according to [23]

$$\Delta E_{|F m_F\rangle} = \mu_B g_F m_F B_z. \quad (24)$$

The approximate g_F factors computed from Eq. (23) and the corresponding splittings between adjacent magnetic sublevels are given in Figs. 2 and 3. The splitting in this regime is called the *Zeeman effect*.

For strong fields where the appropriate interaction is described by Eq. (20), the interaction term dominates the hyperfine energies, so that the hyperfine Hamiltonian perturbs the strong-field eigenstates $|J m_J I m_I\rangle$. The energies are then given to lowest order by [1]

$$E_{|J m_J; I m_I\rangle} \approx A_{\text{hfs}} m_I m_J + B_{\text{hfs}} \frac{9(m_I m_J)^2 - 3J(J+1)m_I^2 - 3I(I+1)m_J^2 + I(I+1)J(J+1)}{4J(2J-1)I(2I-1)} + \mu_B(g_J m_J + g_I m_I)B. \quad (25)$$

The energy shift in this regime is called the *Paschen-Back effect*.

For intermediate fields, the energy shift is more difficult to calculate, and in general one must numerically diagonalize $H_{\text{hfs}} + H_B$. A notable exception is the *Breit-Rabi formula* [23, 31, 32], which applies to the ground-state manifold of the D transition:

$$E_{|J=1/2 m_J I m_I\rangle} = -\frac{\Delta E_{\text{hfs}}}{2(2I+1)} + g_I \mu_B m B \pm \frac{\Delta E_{\text{hfs}}}{2} \left(1 + \frac{4mx}{2I+1} + x^2\right)^{1/2}. \quad (26)$$

In this formula, $\Delta E_{\text{hfs}} = A_{\text{hfs}}(I + 1/2)$ is the hyperfine splitting, $m = m_I \pm m_J = m_I \pm 1/2$ (where the \pm sign is taken to be the same as in (26)), and

$$x = \frac{(g_J - g_I)\mu_B B}{\Delta E_{\text{hfs}}}. \quad (27)$$

In order to avoid a sign ambiguity in evaluating (26), the more direct formula

$$E_{|J=1/2 m_J I m_I\rangle} = \Delta E_{\text{hfs}} \frac{I}{2I+1} \pm \frac{1}{2}(g_J + 2Ig_I)\mu_B B \quad (28)$$

can be used for the two states $m = \pm(I + 1/2)$. The Breit-Rabi formula is useful in finding the small-field shift of the “clock transition” between the $m_F = 0$ sublevels of the two hyperfine ground states, which has no first-order Zeeman shift. Using $m = m_F$ for small magnetic fields, we obtain

$$\Delta\omega_{\text{clock}} = \frac{(g_J - g_I)^2 \mu_B^2}{2\hbar \Delta E_{\text{hfs}}} B^2 \quad (29)$$

to second order in the field strength.

If the magnetic field is sufficiently strong that the hyperfine Hamiltonian is negligible compared to the interaction Hamiltonian, then the effect is termed the *normal Zeeman effect* for hyperfine structure. For even stronger fields, there are Paschen-Back and normal Zeeman regimes for the fine structure, where states with different J can mix, and the appropriate form of the interaction energy is Eq. (18). Yet stronger fields induce other behaviors, such as the quadratic Zeeman effect [31], which are beyond the scope of the present discussion.

The level structure of ^{85}Rb in the presence of a magnetic field is shown in Figs. 4–6 in the weak-field (Zeeman) regime through the hyperfine Paschen-Back regime.

3.2.2 Electric Fields

An analogous effect, the *dc Stark effect*, occurs in the presence of a static external electric field. The interaction Hamiltonian in this case is [27, 33, 34]

$$H_E = -\frac{1}{2}\alpha_0 E_z^2 - \frac{1}{2}\alpha_2 E_z^2 \frac{3J_z^2 - J(J+1)}{J(2J-1)}, \quad (30)$$

where we have taken the electric field to be along the z -direction, α_0 and α_2 are respectively termed the *scalar* and *tensor polarizabilities*, and the second (α_2) term is nonvanishing only for the $J = 3/2$ level. The first term shifts all the sublevels with a given J together, so that the Stark shift for the $J = 1/2$ states is trivial. The only mechanism for breaking the degeneracy of the hyperfine sublevels in (30) is the J_z contribution in the tensor term. This interaction splits the sublevels such that sublevels with the same value of $|m_F|$ remain degenerate. An expression for the hyperfine Stark shift, assuming a weak enough field that the shift is small compared to the hyperfine splittings, is [27]

$$\Delta E_{|J I F m_F\rangle} = -\frac{1}{2}\alpha_0 E_z^2 - \frac{1}{2}\alpha_2 E_z^2 \frac{[3m_F^2 - F(F+1)][3X(X-1) - 4F(F+1)J(J+1)]}{(2F+3)(2F+2)F(2F-1)J(2J-1)}, \quad (31)$$

where

$$X = F(F+1) + J(J+1) - I(I+1). \quad (32)$$

For stronger fields, when the Stark interaction Hamiltonian dominates the hyperfine splittings, the levels split according to the value of $|m_J|$, leading to an electric-field analog to the Paschen-Back effect for magnetic fields.

The static polarizability is also useful in the context of optical traps that are very far off resonance (i.e., several to many nm away from resonance, where the rotating-wave approximation is invalid), since the optical potential is given in terms of the ground-state polarizability as $V = -1/2\alpha_0 E^2$, where E is the amplitude of the optical field. A slightly more accurate expression for the far-off resonant potential arises by replacing the static polarizability with the frequency-dependent polarizability [35]

$$\alpha_0(\omega) = \frac{\omega_0^2 \alpha_0}{\omega_0^2 - \omega^2}, \quad (33)$$

where ω_0 is the resonant frequency of the lowest-energy transition (i.e., the D₁ resonance); this approximate expression is valid for light tuned far to the red of the D₁ line.

The ^{85}Rb polarizabilities are tabulated in Table 6. Notice that the *differences* in the excited state and ground state scalar polarizabilities are given, rather than the excited state polarizabilities, since these are the quantities that were actually measured experimentally. The polarizabilities given here are in SI units, although they are often given in cgs units (units of cm^3) or atomic units (units of a_0^3 , where the Bohr radius a_0 is given in Table 1). The SI values can be converted to cgs units via $\alpha[\text{cm}^3] = (100 \cdot h/4\pi\epsilon_0)(\alpha/h)[\text{Hz}/(\text{V/cm})^2] = 5.955\ 213\ 79(30) \times 10^{-22} (\alpha/h)[\text{Hz}/(\text{V/cm})^2]$ (see [35] for discussion of units), and subsequently the conversion to atomic units is straightforward.

The level structure of ^{85}Rb in the presence of an external dc electric field is shown in Fig. 7 in the weak-field regime through the electric hyperfine Paschen-Back regime.

3.3 Reduction of the Dipole Operator

The strength of the interaction between ^{85}Rb and nearly-resonant optical radiation is characterized by the dipole matrix elements. Specifically, $\langle F \ m_F | e\mathbf{r} | F' \ m'_F \rangle$ denotes the matrix element that couples the two hyperfine sublevels $|F \ m_F\rangle$ and $|F' \ m'_F\rangle$ (where the primed variables refer to the excited states and the unprimed variables refer to the ground states). To calculate these matrix elements, it is useful to factor out the angular dependence and write the matrix element as a product of a Clebsch-Gordan coefficient and a reduced matrix element, using the Wigner-Eckart theorem [36]:

$$\langle F \ m_F | e\mathbf{r}_q | F' \ m'_F \rangle = \langle F \| e\mathbf{r} \| F' \rangle \langle F \ m_F | F' \ 1 \ m'_F \ q \rangle. \quad (34)$$

Here, q is an index labeling the component of \mathbf{r} in the spherical basis, and the doubled bars indicate that the matrix element is reduced. We can also write (34) in terms of a Wigner 3- j symbol as

$$\langle F \ m_F | e\mathbf{r}_q | F' \ m'_F \rangle = \langle F \| e\mathbf{r} \| F' \rangle (-1)^{F'-1+m_F} \sqrt{2F+1} \left(\begin{array}{ccc} F' & 1 & F \\ m'_F & q & -m_F \end{array} \right). \quad (35)$$

Notice that the 3- j symbol (or, equivalently, the Clebsch-Gordan coefficient) vanishes unless the sublevels satisfy $m_F = m'_F + q$. This reduced matrix element can be further simplified by factoring out the F and F' dependence into a Wigner 6- j symbol, leaving a further reduced matrix element that depends only on the L , S , and J quantum numbers [36]:

$$\begin{aligned} \langle F \| e\mathbf{r} \| F' \rangle &\equiv \langle J \ I \ F \| e\mathbf{r} \| J' \ I' \ F' \rangle \\ &= \langle J \| e\mathbf{r} \| J' \rangle (-1)^{F'+J+1+I} \sqrt{(2F'+1)(2J+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} J & J' & 1 \\ F' & F & I \end{array} \right\}. \end{aligned} \quad (36)$$

Again, this new matrix element can be further factored into another 6- j symbol and a reduced matrix element involving only the L quantum number:

$$\begin{aligned} \langle J \| e\mathbf{r} \| J' \rangle &\equiv \langle L \ S \ J \| e\mathbf{r} \| L' \ S' \ J' \rangle \\ &= \langle L \| e\mathbf{r} \| L' \rangle (-1)^{J'+L+1+S} \sqrt{(2J'+1)(2L+1)} \left\{ \begin{array}{ccc} L & L' & 1 \\ J' & J & S \end{array} \right\}. \end{aligned} \quad (37)$$

The numerical value of the $\langle J = 1/2 \| e\mathbf{r} \| J' = 3/2 \rangle$ (D_2) and the $\langle J = 1/2 \| e\mathbf{r} \| J' = 1/2 \rangle$ (D_1) matrix elements are given in Table 7. These values were calculated from the lifetime via the expression [37]

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\omega_0^3}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} \frac{2J+1}{2J'+1} |\langle J \| e\mathbf{r} \| J' \rangle|^2. \quad (38)$$

We take the values of these matrix elements to be real and positive, with the relative sign determined by Eq. (37). Note that all the equations we have presented here assume the normalization convention

$$\sum_{M'} |\langle J \ M | e\mathbf{r} | J' \ M' \rangle|^2 = \sum_{M'q} |\langle J \ M | e\mathbf{r}_q | J' \ M' \rangle|^2 = |\langle J \| e\mathbf{r} \| J' \rangle|^2. \quad (39)$$

There is, however, another common convention (used in Ref. [38]) that is related to the convention used here by $\langle J \| e\mathbf{r} \| J' \rangle = \sqrt{2J+1} \langle J \| e\mathbf{r} \| J' \rangle$. Also, we have used the standard phase convention for the Clebsch-Gordan coefficients as given in Ref. [36], where formulae for the computation of the Wigner 3- j (equivalently, Clebsch-Gordan) and 6- j (equivalently, Racah) coefficients may also be found.

The dipole matrix elements for specific $|F \ m_F\rangle \rightarrow |F' \ m'_F\rangle$ transitions are listed in Tables 9-20 as multiples of $\langle J \| e\mathbf{r} \| J' \rangle$. The tables are separated by the ground-state F number (2 or 3) and the polarization of the transition (where σ^+ -polarized light couples $m_F \rightarrow m'_F = m_F + 1$, π -polarized light couples $m_F \rightarrow m'_F = m_F$, and σ^- -polarized light couples $m_F \rightarrow m'_F = m_F - 1$).

4 Resonance Fluorescence

4.1 Symmetries of the Dipole Operator

Although the hyperfine structure of ^{85}Rb is quite complicated, it is possible to take advantage of some symmetries of the dipole operator in order to obtain relatively simple expressions for the photon scattering rates due to resonance fluorescence. In the spirit of treating the D₁ and D₂ lines separately, we will discuss the symmetries in this section implicitly assuming that the light is interacting with only one of the fine-structure components at a time. First, notice that the matrix elements that couple to any single excited state sublevel $|F' m'_F\rangle$ add up to a factor that is independent of the particular sublevel chosen,

$$\sum_{q F} |\langle F (m'_F + q) | e\mathbf{r}_q | F' m'_F \rangle|^2 = \frac{2J+1}{2J'+1} |\langle J | e\mathbf{r} | J' \rangle|^2, \quad (40)$$

as can be verified from the dipole matrix element tables. The degeneracy-ratio factor of $(2J+1)/(2J'+1)$ (which is 1 for the D₁ line or 1/2 for the D₂ line) is the same factor that appears in Eq. (38), and is a consequence of the normalization convention (39). The interpretation of this symmetry is simply that all the excited state sublevels decay at the same rate Γ , and the decaying population “branches” into various ground state sublevels.

Another symmetry arises from summing the matrix elements from a single ground-state sublevel to the levels in a particular F' energy level:

$$\begin{aligned} S_{FF'} &:= \sum_q (2F'+1)(2J+1) \left\{ \begin{array}{ccc} J & J' & 1 \\ F' & F & I \end{array} \right\}^2 |\langle F m_F | F' 1 (m_F - q) q \rangle|^2 \\ &= (2F'+1)(2J+1) \left\{ \begin{array}{ccc} J & J' & 1 \\ F' & F & I \end{array} \right\}^2. \end{aligned} \quad (41)$$

This sum $S_{FF'}$ is independent of the particular ground state sublevel chosen, and also obeys the sum rule

$$\sum_{F'} S_{FF'} = 1. \quad (42)$$

The interpretation of this symmetry is that for an *isotropic* pump field (i.e., a pumping field with equal components in all *three* possible polarizations), the coupling to the atom is independent of how the population is distributed among the sublevels. These factors $S_{FF'}$ (which are listed in Table 8) provide a measure of the relative strength of each of the $F \rightarrow F'$ transitions. In the case where the incident light is isotropic and couples two of the F levels, the atom can be treated as a two-level atom, with an effective dipole moment given by

$$|d_{\text{iso},\text{eff}}(F \rightarrow F')|^2 = \frac{1}{3} S_{FF'} |\langle J | e\mathbf{r} | J' \rangle|^2. \quad (43)$$

The factor of 1/3 in this expression comes from the fact that any given polarization of the field only interacts with one (of three) components of the dipole moment, so that it is appropriate to average over the couplings rather than sum over the couplings as in (41).

When the light is detuned far from the atomic resonance ($\Delta \gg \Gamma$), the light interacts with several hyperfine levels. If the detuning is large compared to the excited-state frequency splittings, then the appropriate dipole strength comes from choosing any ground state sublevel $|F m_F\rangle$ and summing over its couplings to the excited states. In the case of π -polarized light, the sum is independent of the particular sublevel chosen:

$$\sum_{F'} (2F'+1)(2J+1) \left\{ \begin{array}{ccc} J & J' & 1 \\ F' & F & I \end{array} \right\}^2 |\langle F m_F | F' 1 m_F 0 \rangle|^2 = \frac{1}{3}. \quad (44)$$

This sum leads to an effective dipole moment for far detuned radiation given by

$$|d_{\text{det},\text{eff}}|^2 = \frac{1}{3} |\langle J | e\mathbf{r} | J' \rangle|^2. \quad (45)$$

The interpretation of this factor is also straightforward. Because the radiation is far detuned, it interacts with the full $J \rightarrow J'$ transition; however, because the light is linearly polarized, it interacts with only one component of the dipole operator. Then, because of spherical symmetry, $|\hat{d}|^2 \equiv |e\hat{r}|^2 = e^2(|\hat{x}|^2 + |\hat{y}|^2 + |\hat{z}|^2) = 3e^2|\hat{z}|^2$. Note that this factor of 1/3 also appears for σ^\pm light, but only when the sublevels are uniformly populated (which, of course, is not the equilibrium configuration for these polarizations). The effective dipole moments for this case and the case of isotropic pumping are given in Table 7.

4.2 Resonance Fluorescence in a Two-Level Atom

In these two cases, where we have an effective dipole moment, the atoms behave like simple two-level atoms. A two-level atom interacting with a monochromatic field is described by the *optical Bloch equations* [37],

$$\begin{aligned}\dot{\rho}_{gg} &= \frac{i\Omega}{2}(\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}) + \Gamma\rho_{ee} \\ \dot{\rho}_{ee} &= -\frac{i\Omega}{2}(\tilde{\rho}_{ge} - \tilde{\rho}_{eg}) - \Gamma\rho_{ee} \\ \dot{\tilde{\rho}}_{ge} &= -(\gamma + i\Delta)\tilde{\rho}_{ge} - \frac{i\Omega}{2}(\rho_{ee} - \rho_{gg}),\end{aligned}\tag{46}$$

where the ρ_{ij} are the matrix elements of the density operator $\rho := |\psi\rangle\langle\psi|$, $\Omega := -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_0/\hbar$ is the resonant Rabi frequency, \mathbf{d} is the dipole operator, \mathbf{E}_0 is the electric field amplitude ($\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos \omega_L t$), $\Delta := \omega_L - \omega_0$ is the detuning of the laser field from the atomic resonance, $\Gamma = 1/\tau$ is the natural decay rate of the excited state, $\gamma := \Gamma/2 + \gamma_c$ is the “transverse” decay rate (where γ_c is a phenomenological decay rate that models collisions), $\tilde{\rho}_{ge} := \rho_{ge} \exp(-i\Delta t)$ is a “slowly varying coherence,” and $\tilde{\rho}_{ge} = \tilde{\rho}_{eg}^*$. In writing down these equations, we have made the rotating-wave approximation and used a master-equation approach to model spontaneous emission. Additionally, we have ignored any effects due to the motion of the atom and decays or couplings to other auxiliary states. In the case of purely radiative damping ($\gamma = \Gamma/2$), the excited state population settles to the steady state solution

$$\rho_{ee}(t \rightarrow \infty) = \frac{(\Omega/\Gamma)^2}{1 + 4(\Delta/\Gamma)^2 + 2(\Omega/\Gamma)^2}.\tag{47}$$

The (steady state) total photon scattering rate (integrated over all directions and frequencies) is then given by $\Gamma\rho_{ee}(t \rightarrow \infty)$:

$$R_{sc} = \left(\frac{\Gamma}{2}\right) \frac{(I/I_{sat})}{1 + 4(\Delta/\Gamma)^2 + (I/I_{sat})}.\tag{48}$$

In writing down this expression, we have defined the *saturation intensity* I_{sat} such that

$$\frac{I}{I_{sat}} = 2 \left(\frac{\Omega}{\Gamma}\right)^2,\tag{49}$$

which gives (with $I = (1/2)c\epsilon_0 E_0^2$)

$$I_{sat} = \frac{c\epsilon_0\Gamma^2\hbar^2}{4|\hat{\epsilon} \cdot \mathbf{d}|^2},\tag{50}$$

where $\hat{\epsilon}$ is the unit polarization vector of the light field, and \mathbf{d} is the atomic dipole moment. With I_{sat} defined in this way, the on-resonance scattering cross section σ , which is proportional to $R_{sc}(\Delta = 0)/I$, drops to 1/2 of its weakly pumped value σ_0 when $I = I_{sat}$. More precisely, we can define the scattering cross section σ as the power radiated by the atom divided by the incident energy flux (i.e., so that the scattered power is σI), which from Eq. (48) becomes

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + 4(\Delta/\Gamma)^2 + (I/I_{sat})},\tag{51}$$

where the on-resonance cross section is defined by

$$\sigma_0 = \frac{\hbar\omega\Gamma}{2I_{\text{sat}}}. \quad (52)$$

Additionally, the saturation intensity (and thus the scattering cross section) depends on the polarization of the pumping light as well as the atomic alignment, although the smallest saturation intensity ($I_{\text{sat}}(m_F=\pm 3 \rightarrow m'_F=\pm 4)$, discussed below) is often quoted as a representative value. Some saturation intensities and scattering cross sections corresponding to the discussions in Section 4.1 are given in Table 7. A more detailed discussion of the resonance fluorescence from a two-level atom, including the spectral distribution of the emitted radiation, can be found in Ref. [37].

4.3 Optical Pumping

If none of the special situations in Section 4.1 applies to the fluorescence problem of interest, then the effects of optical pumping must be accounted for. A discussion of the effects of optical pumping in an atomic vapor on the saturation intensity using a rate-equation approach can be found in Ref. [39]. Here, however, we will carry out an analysis based on the generalization of the optical Bloch equations (46) to the degenerate level structure of alkali atoms. The appropriate master equation for the density matrix of a $F_g \rightarrow F_e$ hyperfine transition is [1, 40–42]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}_{\alpha m_\alpha, \beta m_\beta} = & -\frac{i}{2} \left[\delta_{\alpha e} \sum_{m_g} \Omega(m_\alpha, m_g) \tilde{\rho}_{g m_g, \beta m_\beta} - \delta_{g \beta} \sum_{m_e} \Omega(m_e, m_\beta) \tilde{\rho}_{\alpha m_\alpha, e m_e} \right. \\ & + \delta_{\alpha g} \sum_{m_e} \Omega^*(m_e, m_\alpha) \tilde{\rho}_{e m_e, \beta m_\beta} - \delta_{e \beta} \sum_{m_g} \Omega^*(m_\beta, m_g) \tilde{\rho}_{\alpha m_\alpha, g m_g} \Big] \\ & - \delta_{\alpha e} \delta_{e \beta} \Gamma \tilde{\rho}_{\alpha m_\alpha, \beta m_\beta} \\ & - \delta_{\alpha e} \delta_{g \beta} \frac{\Gamma}{2} \tilde{\rho}_{\alpha m_\alpha, \beta m_\beta} \\ & - \delta_{\alpha g} \delta_{e \beta} \frac{\Gamma}{2} \tilde{\rho}_{\alpha m_\alpha, \beta m_\beta} \\ & + \delta_{\alpha g} \delta_{g \beta} \Gamma \sum_{q=-1}^1 \left[\tilde{\rho}_{e (m_\alpha+q), e (m_\beta+q)} \right. \\ & \quad \left. \langle F_e (m_\alpha+q) | F_g 1 m_\alpha q \rangle \langle F_e (m_\beta+q) | F_g 1 m_\beta q \rangle \right] \\ & + i(\delta_{\alpha e} \delta_{g \beta} - \delta_{\alpha g} \delta_{e \beta}) \Delta \tilde{\rho}_{\alpha m_\alpha, \beta m_\beta} \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} \text{(pump field)} \\ \text{(dissipation)} \\ \text{(free evolution)} \end{array} \right\} \quad (53)$$

where

$$\begin{aligned} \Omega(m_e, m_g) &= \langle F_g m_g | F_e 1 m_e - (m_e - m_g) \rangle \Omega_{-(m_e - m_g)} \\ &= (-1)^{F_e - F_g + m_e - m_g} \sqrt{\frac{2F_g + 1}{2F_e + 1}} \langle F_e m_e | F_g 1 m_g (m_e - m_g) \rangle \Omega_{-(m_e - m_g)} \end{aligned} \quad (54)$$

is the Rabi frequency between two magnetic sublevels,

$$\Omega_q = \frac{2\langle F_e || er || F_g \rangle E_q^{(+)}}{\hbar} \quad (55)$$

is the overall Rabi frequency with polarization q ($E_q^{(+)}$ is the field amplitude associated with the positive-rotating component, with polarization q in the spherical basis), and δ is the Kronecker delta symbol. This master equation

ignores coupling to F levels other than the ground (g) and excited (e) levels; hence, this equation is appropriate for a cycling transition such as . Additionally, this master equation assumes purely radiative damping and, as before, does not describe the motion of the atom.

To calculate the scattering rate from a Zeeman-degenerate atom, it is necessary to solve the master equation for the steady-state populations. Then, the total scattering rate is given by

$$R_{\text{sc}} = \Gamma P_e = \Gamma \sum_{m_e} \rho_{e m_e, e m_e}, \quad (56)$$

where P_e is the total population in the excited state. In addition, by including the branching ratios of the spontaneous decay, it is possible to account for the polarization of the emitted radiation. Defining the scattering rate $R_{\text{sc}, -q}$ for the polarization ($-q$), we have

$$R_{\text{sc}, -q} = \sum_{m_e m_g} |\langle F_e m_e | F_g 1 m_g q \rangle|^2 \rho_{e m_e, e m_e}, \quad (57)$$

where, as before, the only nonzero Clebsch-Gordan coefficients occur for $m_e = m_g + q$. As we have defined it here, $q = \pm 1$ corresponds to σ^\pm -polarized radiation, and $q = 0$ corresponds to π -polarized radiation. The angular distribution for the σ^\pm scattered light is simply the classical radiation pattern for a rotating dipole,

$$f_{\text{sc}}^\pm(\theta, \phi) = \frac{3}{16\pi} (1 + \cos^2 \theta), \quad (58)$$

and the angular distribution for the π -scattered light is the classical radiation pattern for an oscillating dipole,

$$f_{\text{sc}}^0(\theta, \phi) = \frac{3}{8\pi} \sin^2 \theta. \quad (59)$$

The net angular pattern will result from the interference of these three distributions.

In general, this master equation is difficult to treat analytically, and even a numerical solution of the time-dependent equations can be time-consuming if a large number of degenerate states are involved. In the following discussions, we will only consider some simple light configurations interacting with the $F = 3 \rightarrow F' = 4$ cycling transition that can be treated analytically. Discussions of Zeeman-degenerate atoms and their spectra can be found in Refs. [42–46].

4.3.1 Circularly (σ^\pm) Polarized Light

The cases where the atom is driven by either σ^+ or σ^- light (i.e. circularly polarized light with the atomic quantization axis aligned with the light propagation direction) are straightforward to analyze. In these cases, the light transfers its angular momentum to the atom, and thus the atomic population is transferred to the state with the largest corresponding angular momentum. In the case of the $F = 3 \rightarrow F' = 4$ cycling transition, a σ^+ driving field will transfer all the atomic population into the $|F = 3, m_F = 3\rangle \rightarrow |F' = 4, m'_F = 4\rangle$ cycling transition, and a σ^- driving field will transfer all the population into the $|F = 3, m_F = -3\rangle \rightarrow |F' = 4, m'_F = -4\rangle$ cycling transition. In both cases, the dipole moment, satisfying

$$|d_{(m_F=\pm 3 \rightarrow m_F=\pm 4)}|^2 = \frac{2J+1}{2J'+1} |\langle J = 1/2 | e \mathbf{r} | J' = 3/2 \rangle|^2, \quad (60)$$

is given in Table 7. Also, in this case, the saturation intensity reduces to

$$I_{\text{sat}} = \frac{\hbar \omega^3 \Gamma}{12\pi c^2}, \quad (61)$$

and the scattering cross section reduces to

$$\sigma_0 = \frac{3\lambda^2}{2\pi}. \quad (62)$$

Note that these values are only valid in steady state. If the pumping field is weak, the “settling time” of the atom to its steady state can be long, resulting in a time-dependent effective dipole moment (and saturation intensity). For example, beginning with a uniform sublevel population in the $F = 3$ ground level, the saturation intensity will begin at $3.895\ 09(81)$ mW/cm² and equilibrate at $1.669\ 32(35)$ mW/cm² for a circularly polarized pump. Also, if there are any “remixing” effects such as collisions or magnetic fields not aligned with the axis of quantization, the system may come to equilibrium in some other configuration.

4.3.2 Linearly (π) Polarized Light

If the light is π -polarized (linearly polarized along the quantization axis), the equilibrium population distribution is more complicated. In this case, the atoms tend to accumulate in the sublevels near $m = 0$. Gao [42] has derived analytic expressions for the equilibrium populations of each sublevel and showed that the equilibrium excited-state population is given by Eq. (47) if Ω^2 is replaced by

$$g_P(2F_g + 1)|\Omega_0|^2, \quad (63)$$

where Ω_0 is the only nonzero component of the Rabi-frequency vector (calculated with respect to the reduced dipole moment $|\langle F || er || F' \rangle|^2 = S_{FF'} |\langle J || er || J' \rangle|^2$), and g_P is a (constant) geometric factor that accounts for the optical pumping. For the ^{85}Rb $F = 3 \rightarrow F' = 4$ cycling transition, this factor has the value $g_P = 572/9651 \approx 0.05927$, leading to a steady-state saturation intensity of $I_{\text{sat}} = 3.129\ 50(57)$ mW/cm².

4.3.3 One-Dimensional $\sigma^+ - \sigma^-$ Optical Molasses

We now consider the important case of an optical molasses in one dimension formed by one σ^+ and one σ^- field (e.g., by two right-circularly polarized, counterpropagating laser fields). These fields interfere to form a field that is linearly polarized, where the polarization vector traces out a helix in space. Because the light is linearly polarized everywhere, and the steady-state populations are independent of the polarization direction (in the plane orthogonal to the axis of quantization), the analysis of the previous section applies. When we apply the formula (48) to calculate the scattering rate, then, we simply use the saturation intensity calculated in the previous section, and use the total intensity (twice the single-beam intensity) for I in the formula. Of course, this steady-state treatment is only strictly valid for a stationary atom, since a moving atom will see a changing polarization and will thus be slightly out of equilibrium, leading to sub-Doppler cooling mechanism [25].

4.3.4 Three-Dimensional Optical Molasses

Finally, we consider an optical molasses in three dimensions, composed of six circularly polarized beams. This optical configuration is found in the commonly used six-beam magneto-optic trap (MOT). However, as we shall see, this optical configuration is quite complicated, and we will only be able to estimate the total rate of fluorescence.

First, we will derive an expression for the electric field and intensity of the light. A typical MOT is formed with two counterpropagating, right-circularly polarized beams along the z -axis and two pairs of counterpropagating, left-circularly polarized beams along the x - and y -axes. Thus, the net electric field is given by

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \frac{E_0}{2} e^{-i\omega t} \left[e^{ikz} \left(\frac{\hat{x} - i\hat{y}}{\sqrt{2}} \right) + e^{-ikz} \left(\frac{\hat{x} + i\hat{y}}{\sqrt{2}} \right) \right. \\ &\quad \left. + e^{ikx} \left(\frac{\hat{y} + i\hat{z}}{\sqrt{2}} \right) + e^{-ikx} \left(\frac{\hat{y} - i\hat{z}}{\sqrt{2}} \right) + e^{iky} \left(\frac{\hat{z} + i\hat{x}}{\sqrt{2}} \right) + e^{-iky} \left(\frac{\hat{z} - i\hat{x}}{\sqrt{2}} \right) \right] + \text{c.c.} \quad (64) \\ &= \sqrt{2} E_0 \cos \omega t \left[(\cos kz - \sin ky)\hat{x} + (\sin kz + \cos kx)\hat{y} + (\cos ky - \sin kx)\hat{z} \right]. \end{aligned}$$

The polarization is linear everywhere for this choice of phases, but the orientation of the polarization vector is strongly position-dependent. The corresponding intensity is given by

$$I(\mathbf{r}) = I_0 \left[6 - 4(\cos kz \sin ky + \cos ky \sin kz - \sin kz \cos kx) \right], \quad (65)$$

where $I_0 := (1/2)c\epsilon_0 E_0^2$ is the intensity of a single beam. The six beams form an intensity lattice in space, with an average intensity of $6I_0$ and a discrete set of points with zero intensity. Note, however, that the form of this interference pattern is specific to the set of phases chosen here, since there are more than the minimal number of beams needed to determine the lattice pattern.

It is clear that this situation is quite complicated, because an atom moving in this molasses will experience both a changing intensity and polarization direction. The situation becomes even more complicated when the magnetic field gradient from the MOT is taken into account. However, we can estimate the scattering rate if we ignore the magnetic field and assume that the atoms do not remain localized in the lattice, so that they are, on the average, illuminated by all polarizations with intensity $6I_0$. In this case, the scattering rate is given by the two-level atom expression (48), with the saturation intensity corresponding to an isotropic pump field. Of course, this is almost certainly an overestimate of the effective saturation intensity, since sub-Doppler cooling mechanisms will lead to optical pumping and localization in the light maxima [47]. These effects can be minimized, for example, by using a very large intensity to operate in the saturated limit, where the scattering rate approaches $\Gamma/2$.

This estimate of the scattering rate is quite useful since it can be used to calculate the number of atoms in an optical molasses from a measurement of the optical scattering rate. For example, if the atoms are imaged by a CCD camera, then the number of atoms N_{atoms} is given by

$$N_{\text{atoms}} = \frac{8\pi \left[1 + 4(\Delta/\Gamma)^2 + (6I_0/I_{\text{sat}}) \right]}{\Gamma(6I_0/I_{\text{sat}})t_{\text{exp}}\eta_{\text{count}}d\Omega} N_{\text{counts}}, \quad (66)$$

where I_0 is the intensity of one of the six beams, N_{counts} is the integrated number of counts recorded on the CCD chip, t_{exp} is the CCD exposure time, η_{count} is the CCD camera efficiency (in counts/photon), and $d\Omega$ is the solid angle of the light collected by the camera. An expression for the solid angle is

$$d\Omega = \frac{\pi}{4} \left(\frac{f}{(f/\#)d_0} \right)^2, \quad (67)$$

where f is the focal length of the imaging lens, d_0 is the object distance (from the MOT to the lens aperture), and $f/\#$ is the f -number of the imaging system.

5 Data Tables

Table 1: Fundamental Physical Constants (2006 CODATA recommended values [2])

Speed of Light	c	$2.997\ 924\ 58 \times 10^8$ m/s (exact)
Permeability of Vacuum	μ_0	$4\pi \times 10^{-7}$ N/A ² (exact)
Permittivity of Vacuum	ϵ_0	$(\mu_0 c^2)^{-1}$ (exact) $= 8.854\ 187\ 817\dots \times 10^{-12}$ F/m
Planck's Constant	h	$6.626\ 068\ 96(33) \times 10^{-34}$ J·s $4.135\ 667\ 33(10) \times 10^{-15}$ eV·s
	\hbar	$1.054\ 571\ 628(53) \times 10^{-34}$ J·s $6.582\ 118\ 99(16) \times 10^{-16}$ eV·s
Elementary Charge	e	$1.602\ 176\ 487(40) \times 10^{-19}$ C
Bohr Magneton	μ_B	$9.274\ 009\ 15(23) \times 10^{-24}$ J/T $h \cdot 1.399\ 624\ 604(35)$ MHz/G
Atomic Mass Unit	u	$1.660\ 538\ 782(83) \times 10^{-27}$ kg
Electron Mass	m_e	$5.485\ 799\ 0943(23) \times 10^{-4}$ u $9.109\ 382\ 15(45) \times 10^{-31}$ kg
Bohr Radius	a_0	$0.529\ 177\ 208\ 59(36) \times 10^{-10}$ m
Boltzmann's Constant	k_B	$1.380\ 6504(24) \times 10^{-23}$ J/K

Table 2: Rubidium 85 Physical Properties.

Atomic Number	Z	37	
Total Nucleons	$Z + N$	85	
Relative Natural Abundance	$\eta(^{85}\text{Rb})$	72.17(2)%	[4]
Nuclear Lifetime	τ_n	(stable)	[4]
Atomic Mass	m	$84.911\ 789\ 732(14)$ u $1.409\ 993\ 199(70) \times 10^{-25}$ kg	[3]
Density at 25°C	ρ_m	1.53 g/cm ³	[4]
Melting Point	T_M	39.30 °C	[4]
Boiling Point	T_B	688 °C	[4]
Specific Heat Capacity	c_p	0.363 J/g·K	[4]
Molar Heat Capacity	C_p	31.060 J/mol·K	[4]
Vapor Pressure at 25°C	P_v	$3.92(20) \times 10^{-7}$ torr	[5]
Nuclear Spin	I	5/2	
Ionization Limit	E_I	$33\ 690.798\ 90(20)$ cm ⁻¹ $4.177\ 126\ 33(10)$ eV	[48]

Table 3: Rubidium 85 D₂ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{3/2}$) Transition Optical Properties.

Frequency	ω_0	$2\pi \cdot 384.230\,406\,373(14)$ THz	[9, 10]
Transition Energy	$\hbar\omega_0$	$1.589\,049\,139(38)$ eV	
Wavelength (Vacuum)	λ	$780.241\,368\,271(27)$ nm	
Wavelength (Air)	λ_{air}	$780.033\,489(23)$ nm	
Wave Number (Vacuum)	$k_{\text{L}}/2\pi$	$12\,816.546\,784\,96(45)$ cm ⁻¹	
Isotope shift	$\omega_0(^{87}\text{Rb}) - \omega_0(^{85}\text{Rb})$	$2\pi \cdot 78.095(12)$ MHz	[10]
Lifetime	τ	$26.2348(77)$ ns	[18–21]
Decay Rate/ Natural Line Width (FWHM)	Γ	$38.117(11) \times 10^6$ s ⁻¹ $2\pi \cdot 6.0666(18)$ MHz	
Absorption oscillator strength	f	0.695 77(29)	
Recoil Velocity	v_{r}	6.0230 mm/s	
Recoil Energy	ω_{r}	$2\pi \cdot 3.8597$ kHz	
Recoil Temperature	T_{r}	370.47 nK	
Doppler Shift ($v_{\text{atom}} = v_{\text{r}}$)	$\Delta\omega_{\text{d}}(v_{\text{atom}} = v_{\text{r}})$	$2\pi \cdot 7.7194$ kHz	
Doppler Temperature	T_{D}	145.57 μK	
Frequency shift for standing wave moving with $v_{\text{sw}} = v_{\text{r}}$	$\Delta\omega_{\text{sw}}(v_{\text{sw}} = v_{\text{r}})$	$2\pi \cdot 15.4387$ kHz	

Table 4: Rubidium 85 D₁ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{1/2}$) Transition Optical Properties.

Frequency	ω_0	$2\pi \cdot 377.107\,385\,690(46)$ THz	[10, 11]
Transition Energy	$\hbar\omega_0$	$1.559\,590\,695(38)$ eV	
Wavelength (Vacuum)	λ	$794.979\,014\,933(96)$ nm	
Wavelength (Air)	λ_{air}	$794.767\,282(24)$ nm	
Wave Number (Vacuum)	$k_{\text{L}}/2\pi$	$12\,578.948\,390\,0(15)$ cm ⁻¹	
Isotope shift	$\omega_0(^{87}\text{Rb}) - \omega_0(^{85}\text{Rb})$	$2\pi \cdot 77.583(12)$ MHz	[10]
Lifetime	τ	$27.679(27)$ ns	[18, 19, 21]
Decay Rate/ Natural Line Width (FWHM)	Γ	$36.129(35) \times 10^6$ s ⁻¹ $2\pi \cdot 5.7500(56)$ MHz	
Absorption oscillator strength	f	0.342 31(97)	
Recoil Velocity	v_{r}	5.9113 mm/s	
Recoil Energy	ω_{r}	$2\pi \cdot 3.7179$ kHz	
Recoil Temperature	T_{r}	356.86 nK	
Doppler Shift ($v_{\text{atom}} = v_{\text{r}}$)	$\Delta\omega_{\text{d}}(v_{\text{atom}} = v_{\text{r}})$	$2\pi \cdot 7.4358$ kHz	
Frequency shift for standing wave moving with $v_{\text{sw}} = v_{\text{r}}$	$\Delta\omega_{\text{sw}}(v_{\text{sw}} = v_{\text{r}})$	$2\pi \cdot 14.8716$ kHz	

Table 5: Rubidium 85 D Transition Hyperfine Structure Constants.

Magnetic Dipole Constant, $5^2\text{S}_{1/2}$	$A_{5^2\text{S}_{1/2}}$	$h \cdot 1.011\,910\,813\,0(20)$ GHz	[26]
Magnetic Dipole Constant, $5^2\text{P}_{1/2}$	$A_{5^2\text{P}_{1/2}}$	$h \cdot 120.527(56)$ MHz	[10, 11]
Magnetic Dipole Constant, $5^2\text{P}_{3/2}$	$A_{5^2\text{P}_{3/2}}$	$h \cdot 25.0020(99)$ MHz	[11, 26]
Electric Quadrupole Constant, $5^2\text{P}_{3/2}$	$B_{5^2\text{P}_{3/2}}$	$h \cdot 25.790(93)$ MHz	[11, 26]

Table 6: Rubidium 85 D Transition Magnetic and Electric Field Interaction Parameters.

Electron spin g -factor	g_s	$2.002\,319\,304\,3622(15)$	[2]
Electron orbital g -factor	g_L	0.999 993 54	
Fine structure Landé g -factor	$g_J(5^2\text{S}_{1/2})$	2.002 331 13(20)	[26]
	$g_J(5^2\text{P}_{1/2})$	0.666	
	$g_J(5^2\text{P}_{3/2})$	1.3362(13)	[26]
Nuclear g -factor	g_I	$-0.000\,293\,640\,00(60)$	[26]
Clock transition Zeeman shift	$\Delta\omega_{\text{clock}}/\text{B}^2$	$2\pi \cdot 1293.98$ Hz/G ²	
Ground-state polarizability	$\alpha_0(5^2\text{S}_{1/2})$	$h \cdot 0.0794(16)$ Hz/(V/cm) ²	[35]
D ₁ scalar polarizability	$\alpha_0(5^2\text{P}_{1/2}) - \alpha_0(5^2\text{S}_{1/2})$	$h \cdot 0.122\,306(16)$ Hz/(V/cm) ²	[49]
D ₂ scalar polarizability	$\alpha_0(5^2\text{P}_{3/2}) - \alpha_0(5^2\text{S}_{1/2})$	$h \cdot 0.1340(8)$ Hz/(V/cm) ²	[50]
D ₂ tensor polarizability	$\alpha_2(5^2\text{P}_{3/2})$	$h \cdot -0.0406(8)$ Hz/(V/cm) ²	[50]

Table 7: Rubidium 85 Dipole Matrix Elements, Saturation Intensities, and Resonant Scattering Cross Sections.

D ₂ (5 ² S _{1/2} → 5 ² P _{3/2}) Transition Dipole Matrix Element	$\langle J = 1/2 er J' = 3/2 \rangle$	4.227 53(87) ea_0 3.584 25(74) × 10 ⁻²⁹ C·m
Effective Dipole Moment, Saturation Intensity, and Resonant Cross Section ($F = 3 \rightarrow F' = 4$) (isotropic light polarization)	$d_{\text{iso,eff}}(F = 3 \rightarrow F' = 4)$	1.956 96(40) ea_0 1.659 18(34) × 10 ⁻²⁹ C·m
	$I_{\text{sat(iso,eff)}}(F = 3 \rightarrow F' = 4)$	3.895 09(81) mW/cm ²
	$\sigma_0(\text{iso,eff})(F = 3 \rightarrow F' = 4)$	1.245 726 051 126(62) × 10 ⁻⁹ cm ²
Effective Far-Detuned Dipole Moment, Saturation Intensity, and Resonant Cross Section (D ₂ line, π -polarized light)	$d_{\text{det,eff,D}_2}$	2.440 76(50) ea_0 2.069 37(43) × 10 ⁻²⁹ C·m
	$I_{\text{sat(det,eff,D}_2)}$	2.503 99(52) mW/cm ²
	$\sigma_0(\text{det,eff,D}_2)$	1.937 796 079 530(96) × 10 ⁻⁹ cm ²
Dipole Moment, Saturation Intensity, and Resonant Cross Section $ F = 3, m_F = \pm 3\rangle \rightarrow F' = 4, m'_F = \pm 4\rangle$ cycling transition (σ^\pm -polarized light)	$d_{(m_F = \pm 3 \rightarrow m'_F = \pm 4)}$	2.989 31(62) ea_0 2.534 44(52) × 10 ⁻²⁹ C·m
	$I_{\text{sat}(m_F = \pm 3 \rightarrow m'_F = \pm 4)}$	1.669 32(35) mW/cm ²
	$\sigma_0(m_F = \pm 3 \rightarrow m'_F = \pm 4)$	2.906 694 119 30(14) × 10 ⁻⁹ cm ²
D ₁ (5 ² S _{1/2} → 5 ² P _{1/2}) Transition Dipole Matrix Element	$\langle J = 1/2 er J' = 1/2 \rangle$	2.9931(20) ea_0 2.5377(17) × 10 ⁻²⁹ C·m
Effective Far-Detuned Dipole Moment, Saturation Intensity, and Resonant Cross Section (D ₁ line, π -polarized light)	$d_{\text{det,eff,D}_1}$	1.7281(12) ea_0 1.4651(10) × 10 ⁻²⁹ C·m
	$I_{\text{sat(det,eff,D}_1)}$	4.4876(31) mW/cm ²
	$\sigma_0(\text{det,eff,D}_1)$	1.081 257 448 975(54) × 10 ⁻⁹ cm ²

Table 8: Rubidium 85 Relative Hyperfine Transition Strength Factors $S_{FF'}$ [from Eq. (41)].

D ₂ (5 ² S _{1/2} → 5 ² P _{3/2}) transition	S_{34}	9/14	S_{23}	14/45
	S_{33}	5/18	S_{22}	7/18
	S_{32}	5/63	S_{21}	3/10
D ₁ (5 ² S _{1/2} → 5 ² P _{1/2}) transition	S_{33}	4/9	S_{23}	7/9
	S_{32}	5/9	S_{22}	2/9

Table 9: Rubidium 85 D₂ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{3/2}$) Dipole Matrix Elements for σ^+ transitions ($F = 3, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F + 1$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 3/2 \rangle$.

	$m_F = -3$	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$	$m_F = 3$
$F' = 4$	$\sqrt{\frac{1}{56}}$	$\sqrt{\frac{3}{56}}$	$\sqrt{\frac{3}{28}}$	$\sqrt{\frac{5}{28}}$	$\sqrt{\frac{15}{56}}$	$\sqrt{\frac{3}{8}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$
$F' = 3$	$\sqrt{\frac{5}{72}}$	$\sqrt{\frac{25}{216}}$	$\sqrt{\frac{5}{36}}$	$\sqrt{\frac{5}{36}}$	$\sqrt{\frac{25}{216}}$	$\sqrt{\frac{5}{72}}$	
$F' = 2$	$\sqrt{\frac{5}{63}}$	$\sqrt{\frac{10}{189}}$	$\sqrt{\frac{2}{63}}$	$\sqrt{\frac{1}{63}}$	$\sqrt{\frac{1}{189}}$		

Table 10: Rubidium 85 D₂ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{3/2}$) Dipole Matrix Elements for π transitions ($F = 3, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 3/2 \rangle$.

	$m_F = -3$	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$	$m_F = 3$
$F' = 4$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$	$-\sqrt{\frac{3}{14}}$	$-\sqrt{\frac{15}{56}}$	$-\sqrt{\frac{2}{7}}$	$-\sqrt{\frac{15}{56}}$	$-\sqrt{\frac{3}{14}}$	$-\sqrt{\frac{1}{8}}$
$F' = 3$	$-\sqrt{\frac{5}{24}}$	$-\sqrt{\frac{5}{54}}$	$-\sqrt{\frac{5}{216}}$	0	$\sqrt{\frac{5}{216}}$	$\sqrt{\frac{5}{54}}$	$\sqrt{\frac{5}{24}}$
$F' = 2$		$\sqrt{\frac{5}{189}}$	$\sqrt{\frac{8}{189}}$	$\sqrt{\frac{1}{21}}$	$\sqrt{\frac{8}{189}}$	$\sqrt{\frac{5}{189}}$	

Table 11: Rubidium 85 D₂ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{3/2}$) Dipole Matrix Elements for σ^- transitions ($F = 3, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F - 1$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 3/2 \rangle$.

	$m_F = -3$	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$	$m_F = 3$
$F' = 4$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{3}{8}}$	$\sqrt{\frac{15}{56}}$	$\sqrt{\frac{5}{28}}$	$\sqrt{\frac{3}{28}}$	$\sqrt{\frac{3}{56}}$	$\sqrt{\frac{1}{56}}$
$F' = 3$		$-\sqrt{\frac{5}{72}}$	$-\sqrt{\frac{25}{216}}$	$-\sqrt{\frac{5}{36}}$	$-\sqrt{\frac{5}{36}}$	$-\sqrt{\frac{25}{216}}$	$-\sqrt{\frac{5}{72}}$
$F' = 2$			$\sqrt{\frac{1}{189}}$	$\sqrt{\frac{1}{63}}$	$\sqrt{\frac{2}{63}}$	$\sqrt{\frac{10}{189}}$	$\sqrt{\frac{5}{63}}$

Table 12: Rubidium 85 D₂ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{3/2}$) Dipole Matrix Elements for σ^+ transitions ($F = 2, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F + 1$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 3/2 \rangle$.

	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$
$F' = 3$	$\sqrt{\frac{2}{135}}$	$\sqrt{\frac{2}{45}}$	$\sqrt{\frac{4}{45}}$	$\sqrt{\frac{4}{27}}$	$\sqrt{\frac{2}{9}}$
$F' = 2$	$\sqrt{\frac{7}{54}}$	$\sqrt{\frac{7}{36}}$	$\sqrt{\frac{7}{36}}$	$\sqrt{\frac{7}{54}}$	
$F' = 1$	$\sqrt{\frac{3}{10}}$	$\sqrt{\frac{3}{20}}$	$\sqrt{\frac{1}{20}}$		

Table 13: Rubidium 85 D₂ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{3/2}$) Dipole Matrix Elements for π transitions ($F = 2, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 3/2 \rangle$.

	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$
$F' = 3$	$-\sqrt{\frac{2}{27}}$	$-\sqrt{\frac{16}{135}}$	$-\sqrt{\frac{2}{15}}$	$-\sqrt{\frac{16}{135}}$	$-\sqrt{\frac{2}{27}}$
$F' = 2$	$-\sqrt{\frac{7}{27}}$	$-\sqrt{\frac{7}{108}}$	0	$\sqrt{\frac{7}{108}}$	$\sqrt{\frac{7}{27}}$
$F' = 1$		$\sqrt{\frac{3}{20}}$	$\sqrt{\frac{1}{5}}$	$\sqrt{\frac{3}{20}}$	

Table 14: Rubidium 85 D₂ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{3/2}$) Dipole Matrix Elements for σ^- transitions ($F = 2, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F - 1$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 3/2 \rangle$.

	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$
$F' = 3$	$\sqrt{\frac{2}{9}}$	$\sqrt{\frac{4}{27}}$	$\sqrt{\frac{4}{45}}$	$\sqrt{\frac{2}{45}}$	$\sqrt{\frac{2}{135}}$
$F' = 2$		$-\sqrt{\frac{7}{54}}$	$-\sqrt{\frac{7}{36}}$	$-\sqrt{\frac{7}{36}}$	$-\sqrt{\frac{7}{54}}$
$F' = 1$			$\sqrt{\frac{1}{20}}$	$\sqrt{\frac{3}{20}}$	$\sqrt{\frac{3}{10}}$

Table 15: Rubidium 85 D₁ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{1/2}$) Dipole Matrix Elements for σ^+ transitions ($F = 3, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F + 1$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 1/2 \rangle$.

	$m_F = -3$	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$	$m_F = 3$
$F' = 3$	$\sqrt{\frac{1}{9}}$	$\sqrt{\frac{5}{27}}$	$\sqrt{\frac{2}{9}}$	$\sqrt{\frac{2}{9}}$	$\sqrt{\frac{5}{27}}$	$\sqrt{\frac{1}{9}}$	
$F' = 2$	$\sqrt{\frac{5}{9}}$	$\sqrt{\frac{10}{27}}$	$\sqrt{\frac{2}{9}}$	$\sqrt{\frac{1}{9}}$	$\sqrt{\frac{1}{27}}$		

Table 16: Rubidium 85 D₁ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{1/2}$) Dipole Matrix Elements for π transitions ($F = 3, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 1/2 \rangle$.

	$m_F = -3$	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$	$m_F = 3$
$F' = 3$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$	$-\sqrt{\frac{4}{27}}$	$-\sqrt{\frac{1}{27}}$	0	$\sqrt{\frac{1}{27}}$	$\sqrt{\frac{4}{27}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$
$F' = 2$		$\sqrt{\frac{5}{27}}$	$\sqrt{\frac{8}{27}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{8}{27}}$	$\sqrt{\frac{5}{27}}$	

Table 17: Rubidium 85 D₁ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{1/2}$) Dipole Matrix Elements for σ^- transitions ($F = 3, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F - 1$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 1/2 \rangle$.

	$m_F = -3$	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$	$m_F = 3$
$F' = 3$		$-\sqrt{\frac{1}{9}}$	$-\sqrt{\frac{5}{27}}$	$-\sqrt{\frac{2}{9}}$	$-\sqrt{\frac{2}{9}}$	$-\sqrt{\frac{5}{27}}$	$-\sqrt{\frac{1}{9}}$
$F' = 2$			$\sqrt{\frac{1}{27}}$	$\sqrt{\frac{1}{9}}$	$\sqrt{\frac{2}{9}}$	$\sqrt{\frac{10}{27}}$	$\sqrt{\frac{5}{9}}$

Table 18: Rubidium 85 D₁ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{1/2}$) Dipole Matrix Elements for σ^+ transitions ($F = 2, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F + 1$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 1/2 \rangle$.

	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$
$F' = 3$	$-\sqrt{\frac{1}{27}}$	$-\sqrt{\frac{1}{9}}$	$-\sqrt{\frac{2}{9}}$	$-\sqrt{\frac{10}{27}}$	$-\sqrt{\frac{5}{9}}$
$F' = 2$	$-\sqrt{\frac{2}{27}}$	$-\sqrt{\frac{1}{9}}$	$-\sqrt{\frac{1}{9}}$	$-\sqrt{\frac{2}{27}}$	

Table 19: Rubidium 85 D₁ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{1/2}$) Dipole Matrix Elements for π transitions ($F = 2, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 1/2 \rangle$.

	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$
$F' = 3$	$\sqrt{\frac{5}{27}}$	$\sqrt{\frac{8}{27}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{8}{27}}$	$\sqrt{\frac{5}{27}}$
$F' = 2$	$\sqrt{\frac{4}{27}}$	$\sqrt{\frac{1}{27}}$	0	$-\sqrt{\frac{1}{27}}$	$-\sqrt{\frac{4}{27}}$

Table 20: Rubidium 85 D₁ ($5^2\text{S}_{1/2} \rightarrow 5^2\text{P}_{1/2}$) Dipole Matrix Elements for σ^- transitions ($F = 2, m_F \rightarrow F'$, $m'_F = m_F - 1$), expressed as multiples of $\langle J = 1/2 | er | J' = 1/2 \rangle$.

	$m_F = -2$	$m_F = -1$	$m_F = 0$	$m_F = 1$	$m_F = 2$
$F' = 3$	$-\sqrt{\frac{5}{9}}$	$-\sqrt{\frac{10}{27}}$	$-\sqrt{\frac{2}{9}}$	$-\sqrt{\frac{1}{9}}$	$-\sqrt{\frac{1}{27}}$
$F' = 2$		$\sqrt{\frac{2}{27}}$	$\sqrt{\frac{1}{9}}$	$\sqrt{\frac{1}{9}}$	$\sqrt{\frac{2}{27}}$

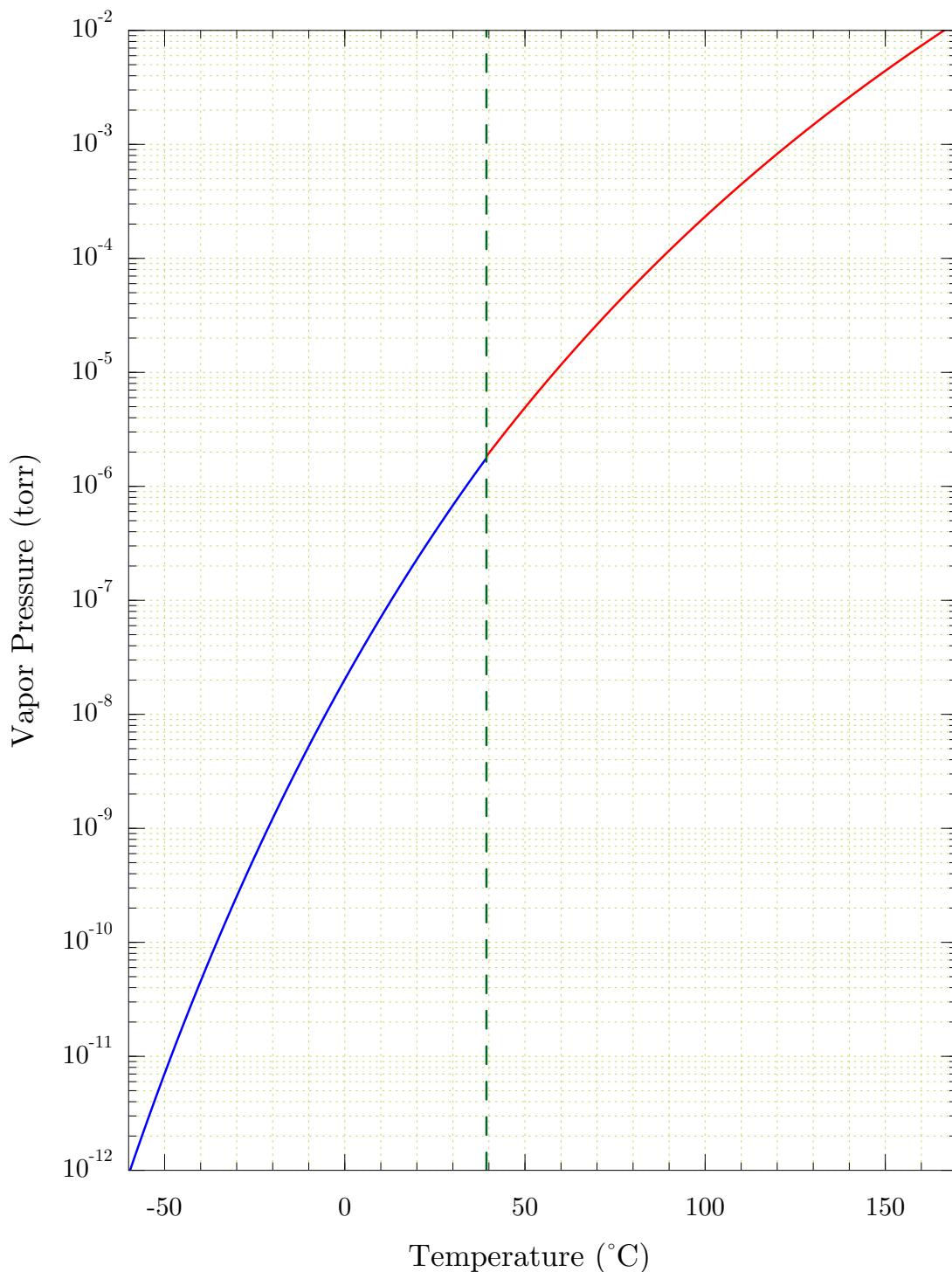


Figure 1: Vapor pressure of rubidium from the model of Eqs. (1). The vertical line indicates the melting point.

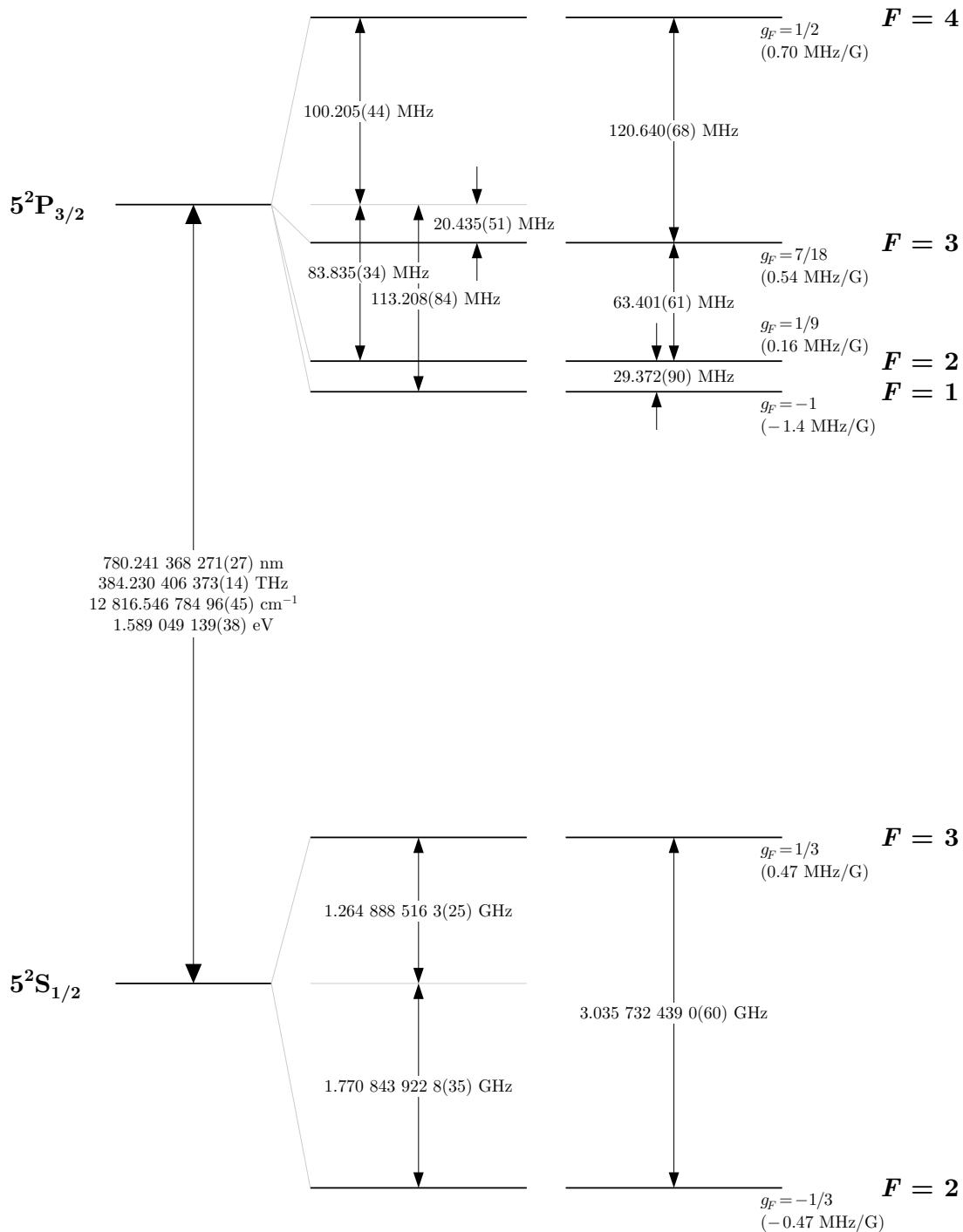


Figure 2: Rubidium 85 D₂ transition hyperfine structure, with frequency splittings between the hyperfine energy levels. The excited-state values are taken from [11, 26], and the ground-state values are from [26]. The relative hyperfine shifts are shown to scale within each hyperfine manifold (but visual spacings should not be compared between manifolds or to the optical splitting). The approximate Landé g_F -factors for each level are also given, with the corresponding Zeeman splittings between adjacent magnetic sublevels.

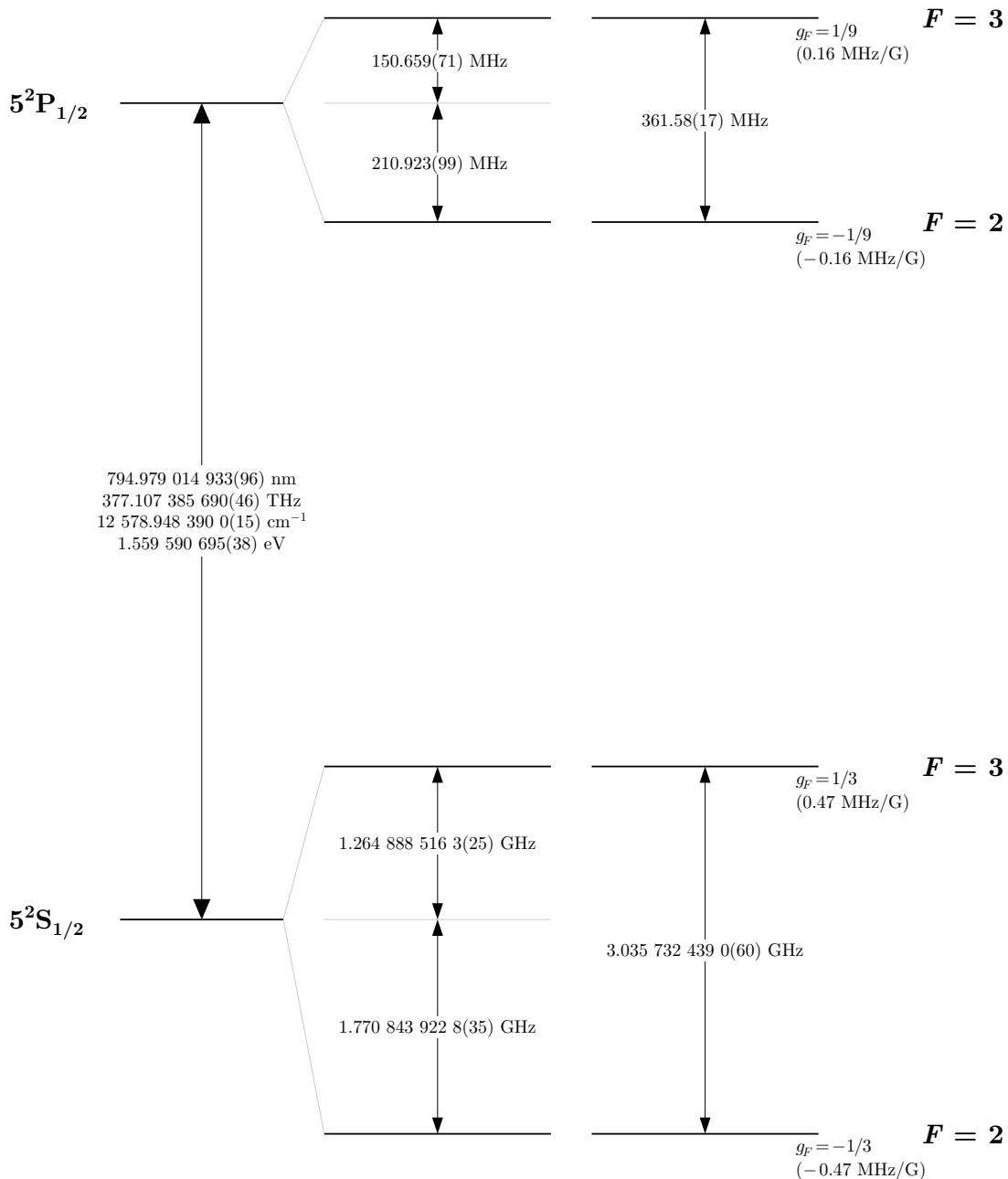


Figure 3: Rubidium 85 D₁ transition hyperfine structure, with frequency splittings between the hyperfine energy levels. The excited-state values are taken from [10, 11], and the ground-state values are from [26]. The relative hyperfine shifts are shown to scale within each hyperfine manifold (but visual spacings should not be compared between manifolds or to the optical splitting). The approximate Landé g_F -factors for each level are also given, with the corresponding Zeeman splittings between adjacent magnetic sublevels.

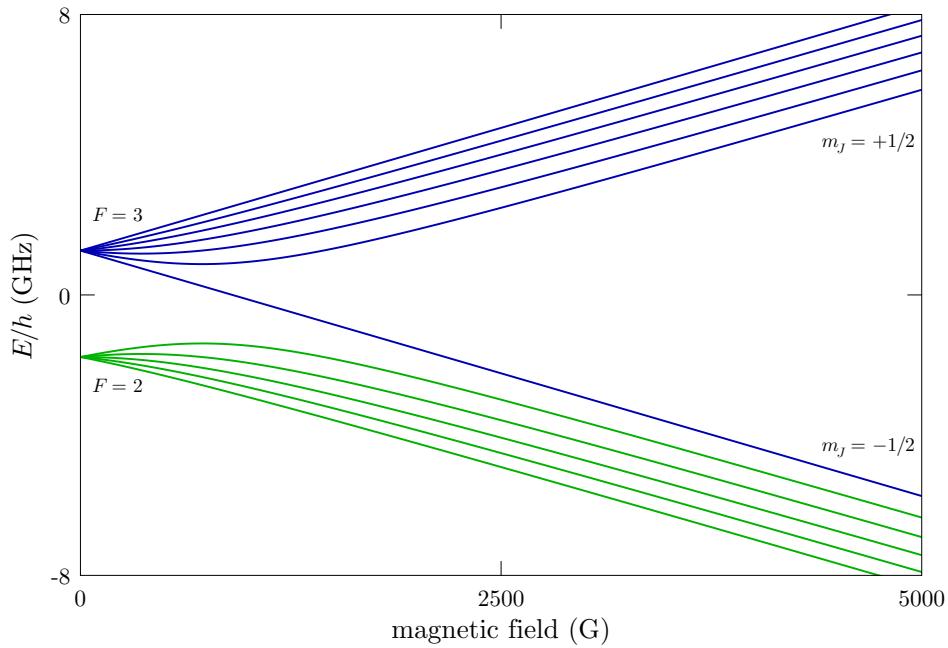


Figure 4: Rubidium 85 $5^2S_{1/2}$ (ground) level hyperfine structure in an external magnetic field. The levels are grouped according to the value of F in the low-field (Zeeman) regime and m_J in the strong-field (hyperfine Paschen-Back) regime.

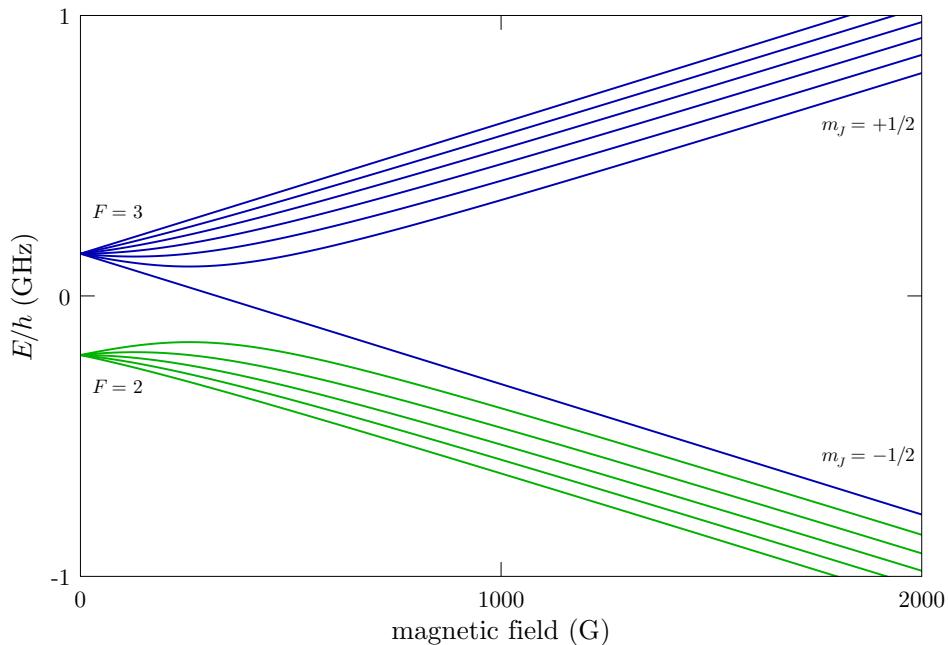


Figure 5: Rubidium 85 $5^2P_{1/2}$ (D_1 excited) level hyperfine structure in an external magnetic field. The levels are grouped according to the value of F in the low-field (Zeeman) regime and m_J in the strong-field (hyperfine Paschen-Back) regime.

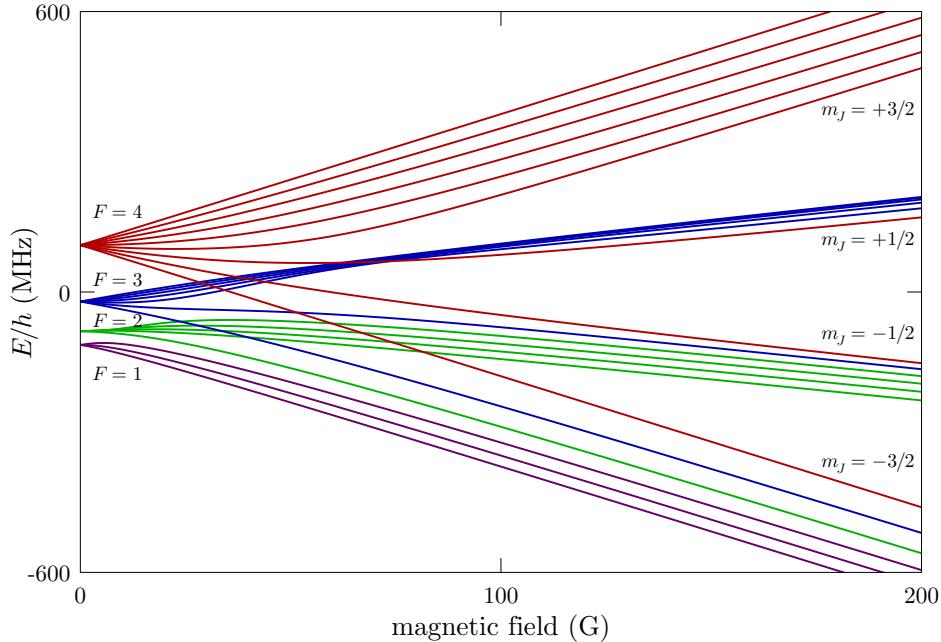


Figure 6: Rubidium 85 $5^2P_{3/2}$ (D_2 excited) level hyperfine structure in an external magnetic field. The levels are grouped according to the value of F in the low-field (Zeeman) regime and m_J in the strong-field (hyperfine Paschen-Back) regime.

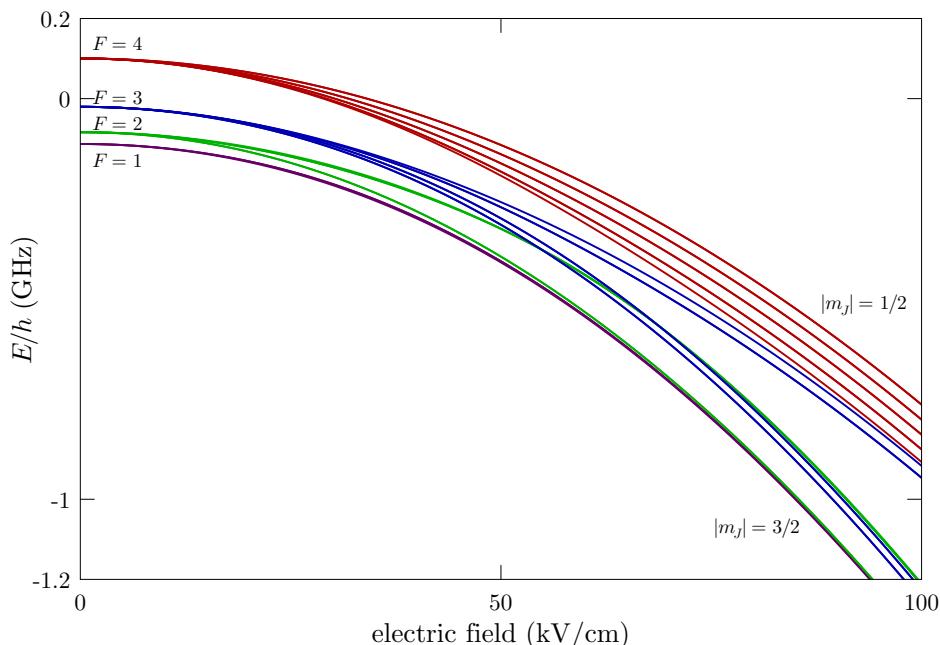


Figure 7: Rubidium 85 $5^2P_{3/2}$ (D_2 excited) level hyperfine structure in a constant, external electric field. The levels are grouped according to the value of F in the low-field (Zeeman) regime and $|m_J|$ in the strong-field (“electric” hyperfine Paschen-Back) regime. Levels with the same values of F and $|m_F|$ (for a weak field) are degenerate.

6 Acknowledgements

Thanks to Windell Oskay, Martin Fischer, Andrew Klekociuk, Mark Saffman, Sadiq Rangwala, Blair Blakie, Markus Kottke, Björn Brezger, Marlon Nakat, Erik Streed, Horst Knöckel, Keith Calkins, Michael Johanning, Greg Smith, Wenhai Ji, Andreas Günther, James Bateman, Brad Foreman, Bruce Klappauf, Ariel Sommer, Alexey Gorshkov, Andrew Jayich, and Ara Tonoyan for corrections and suggestions.

References

- [1] Daniel A. Steck, “Quantum and Atom Optics,” (2007). Available online at <http://atomoptics.uoregon.edu/~dsteck/teaching/quantum-optics/>.
- [2] P. J. Mohr, B. N. Taylor, and D. B. Newell, “The 2006 CODATA Recommended Values of the Fundamental Physical Constants, Web Version 5.1,” available at <http://physics.nist.gov/constants> (National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD 20899, 31 December 2007).
- [3] Michael P. Bradley, James V. Porto, Simon Rainville, James K. Thompson, and David E. Pritchard, “Penning Trap Measurements of the Masses of ^{133}Cs , $^{87,85}\text{Rb}$, and ^{23}Na with Uncertainties ≤ 0.2 ppb,” *Physical Review Letters* **83**, 4510 (1999).
- [4] David R. Lide (Ed.), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 82nd ed. (CRC Press, Boca Raton, 2001).
- [5] C. B. Alcock, V. P. Itkin, and M. K. Horrigan, “Vapor Pressure Equations for the Metallic Elements: 298–2500 K,” *Canadian Metallurgical Quarterly* **23**, 309 (1984).
- [6] A. N. Nesmeyanov, *Vapor Pressure of the Chemical Elements* (Elsevier, Amsterdam, 1963). English edition edited by Robert Gary.
- [7] R. E. Honig, “Vapor Pressure Data for the More Common Elements,” *RCA Review* **18**, 195 (1957).
- [8] C.-J. Lorenzen and K. Niemax, “Quantum Defects of the $n^2P_{1/2,3/2}$ Levels in ^{39}K I and ^{85}Rb I,” *Physica Scripta* **27**, 300 (1983).
- [9] Jun Ye, Steve Swartz, Peter Jungner, and John L. Hall, “Hyperfine structure and absolute frequency of the ^{87}Rb $5\text{P}_{3/2}$ state,” *Optics Letters* **21**, 1280 (1996).
- [10] G. P. Barwood, P. Gill, and W. R. C. Rowley, “Frequency Measurements on Optically Narrowed Rb-Stabilised Laser Diodes at 780 nm and 795 nm,” *Applied Physics B* **53**, 142 (1991).
- [11] A. Banerjee, D. Das, and V. Natarajan, “Absolute frequency measurements of the D_1 lines in ^{39}K , ^{85}Rb , and ^{87}Rb with ~ 0.1 ppb uncertainty,” *Europhysics Letters* **65**, 172 (2004).
- [12] Hyatt M. Gibbs and George C. Churchill, “Laser Spectroscopic Measurement of the ^{87}Rb – ^{85}Rb D_1 –Line Isotope Shift,” *Journal of the Optical Society of America* **62**, 1130 (1972).
- [13] K. P. Birch and M. J. Downs, “Letter to the Editor: Correction to the Updated Edlén Equation for the Refractive Index of Air,” *Metrologia* **31**, 315 (1994).
- [14] Bengt Edlén, “The Refractive Index of Air,” *Metrologia* **2**, 12 (1966).
- [15] Wikipedia entry for “Water Vapor,” http://en.wikipedia.org/wiki/Water_vapor.
- [16] E. Richard Cohen and Jesse W. M. DuMond, “Our Knowledge of the Fundamental Constants of Physics of Chemistry in 1965,” *Reviews of Modern Physics* **37**, 537 (1965).
- [17] L. L. Lucas and M. P. Unterweger, “Comprehensive Review and Critical Evaluation of the Half-Life of Tritium,” *Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology* **105**, 541 (2000).

- [18] U. Volz and H. Schmoranzer, "Precision Lifetime Measurements on Alkali Atoms and on Helium by Beam-Gas-Laser Spectroscopy," *Physica Scripta* **T65**, 48 (1996).
- [19] J. E. Simsarian, L. A. Orozco, G. D. Sprouse, and W. Z. Zhao, "Lifetime measurements of the $7p$ levels of atomic francium," *Physical Review A* **57**, 2448 (1998).
- [20] H. M. J. M. Boesten, C. C. Tsai, J. R. Gardner, D. J. Heinzen, and B. J. Verhaar, "Observation of a shape resonance in the collision of two cold ^{87}Rb atoms," *Physical Review A* **55**, 636 (1997).
- [21] R. F. Gutterres, C. Amiot, A. Fioretti, C. Gabbanini, M. Mazzoni, and O. Dulieu, "Determination of the ^{87}Rb $5p$ state dipole matrix element and radiative lifetime from the photoassociation spectroscopy of the Rb_2 $0_g^- (P_{3/2})$ long-range state," *Physical Review A* **66**, 024502 (2002).
- [22] M. S. Safronova, Carl J. Williams, and Charles W. Clark, "Relativistic many-body calculations of electric-dipole matrix elements, lifetimes, and polarizabilities in rubidium," *Physical Review A* **69**, 022509 (2004).
- [23] Alan Corney, *Atomic and Laser Spectroscopy* (Oxford, 1977).
- [24] Paul D. Lett, Richard N. Watts, Christoph I. Westbrook, and William D. Phillips, "Observation of Atoms Laser Cooled below the Doppler Limit," *Physical Review Letters* **61**, 169 (1988).
- [25] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, "Laser cooling below the Doppler limit by polarization gradients: simple theoretical models," *Journal of the Optical Society of America* **6**, 2023 (1989).
- [26] E. Arimondo, M. Inguscio, and P. Violino, "Experimental determinations of the hyperfine structure in the alkali atoms," *Reviews of Modern Physics* **49**, 31 (1977).
- [27] Lloyd Armstrong, Jr., *Theory of the Hyperfine Structure of Free Atoms* (Wiley-Interscience, New York, 1971).
- [28] Vladislav Gerginov, Andrei Derevianko, and Carol E. Tanner, "Observation of the Nuclear Magnetic Octupole Moment of ^{133}Cs ," *Physical Review Letters* **91**, 072501 (2003).
- [29] Hans A. Bethe and Edwin E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Springer-Verlag, Berlin, 1957).
- [30] Leonti Labzowsky, Igor Goidenko, and Pekka Pyykkö, "Estimates of the bound-state QED contributions to the g -factor of valence ns electrons in alkali metal atoms," *Physics Letters A* **258**, 31 (1999).
- [31] Hans Kleinpoppen, "Atoms," in Ludwig Bergmann and Clemens Schaefer, *Constituents of Matter: Atoms, Molecules, Nuclei, and Particles*, Wilhelm Raith, Ed. (Walter de Gruyter, Berlin, 1997).
- [32] G. Breit and I. I. Rabi, "Measurement of Nuclear Spin," *Physical Review* **38**, 2082 (1931).
- [33] Robert W. Schmieder, Allen Lurio, and W. Happer, "Quadratic Stark Effect in the $^2P_{3/2}$ States of the Alkali Atoms," *Physical Review A* **3**, 1209 (1971).
- [34] Robert W. Schmieder, "Matrix Elements of the Quadratic Stark Effect on Atoms with Hyperfine Structure," *American Journal of Physics* **40**, 297 (1972).
- [35] Thomas M. Miller, "Atomic and Molecular Polarizabilities," in *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, David R. Lide, Ed., 81st ed. (CRC Press, Boca Raton, 2000).
- [36] D. M. Brink and G. R. Satchler, *Angular Momentum* (Oxford, 1962).
- [37] R. Loudon, *The Quantum Theory of Light*, 2nd ed. (Oxford University Press, 1983).
- [38] Carol E. Tanner, "Precision Measurements of Atomic Lifetimes," in *Atomic Physics 14: The Fourteenth International Conference on Atomic Physics*, D. J. Wineland, C. E. Wieman, and S. J. Smith, Eds. (AIP Press, 1995).

- [39] J. Sagle, R. K. Namiotka, and J. Huennekens, "Measurement and modelling of intensity dependent absorption and transit relaxation on the cesium D₁ line," *Journal of Physics B* **29**, 2629 (1996).
- [40] T. A. Brian Kennedy, private communication (1994).
- [41] Claude Cohen-Tannoudji, "Atoms in strong resonant fields," in *Les Houches, Session XXVII, 1975 — Frontiers in Laser Spectroscopy*, R. Balian, S. Haroche, and S. Liberman, Eds. (North-Holland, Amsterdam, 1977).
- [42] Bo Gao, "Effects of Zeeman degeneracy on the steady-state properties of an atom interacting with a near-resonant laser field: Analytic results," *Physical Review A* **48**, 2443 (1993).
- [43] Bo Gao, "Effects of Zeeman degeneracy on the steady-state properties of an atom interacting with a near-resonant laser field: Probe spectra," *Physical Review A* **49**, 3391 (1994).
- [44] Bo Gao, "Effects of Zeeman degeneracy on the steady-state properties of an atom interacting with a near-resonant laser field: Resonance fluorescence," *Physical Review A* **50**, 4139 (1994).
- [45] D. Polder and M. F. H. Schuurmans, "Resonance fluorescence from a $j = 1/2$ to $j = 1/2$ transition," *Physical Review A* **14**, 1468 (1976).
- [46] J. Javanainen, "Quasi-Elastic Scattering in Fluorescence from Real Atoms," *Europhysics Letters* **20**, 395 (1992).
- [47] C. G. Townsend, N. H. Edwards, C. J. Cooper, K. P. Zetie, C. J. Foot, A. M. Steane, P. Sriftgiser, H. Perrin, and J. Dalibard, "Phase-space density in the magneto-optical trap," *Physical Review A* **52**, 1423 (1995).
- [48] S. A. Lee, J. Helmcke, J. L. Hall, and B. P. Stoicheff, "Doppler-free two-photon transitions to Rydberg levels: convenient, useful, and precise reference wavelengths for dye lasers," *Optics Letters* **3**, 141 (1978).
- [49] K. E. Miller, D. Krause, Jr., and L. R. Hunter, "Precise measurement of the Stark shift of the rubidium and potassium D₁ lines," *Physical Review A* **49**, 5128 (1994).
- [50] C. Krenn, W. Scherf, O. Khait, M. Musso, and L. Windholz, "Stark effect investigations of resonance lines of neutral potassium, rubidium, europium and gallium," *Zeitschrift fur Physik D* **41**, 229 (1997).

Physikalisches Praktikum für Fortgeschrittene:

FÖRSTER- RESONANZENERGIETRANSFER (FRET) AN BIOLOGISCHEN PROBEN

Physikalisches Institut der Universität Bayreuth

Lehrstuhl für Experimentalphysik I

30. August 2018

1 Einleitung und Aufgabenstellung

Gegenstand dieses Praktikumsversuchs sind die theoretischen Grundlagen, das Messprinzip, der Messaufbau und die Anwendung von **Förster-Resonanzenergi transfer** (Förster resonance energy transfer, FRET). Im Versuch soll ein Protokoll für die Aufnahme und Korrektur von Fluoreszenzbildern entwickelt und genutzt werden. Aufbauend darauf wird die Interaktion zweier farblich markierter Proteine in Zellen bestimmt. Untersucht werden zwei Pleckstrin-Homologiedomänen (kurz: PH), die spezifisch an das Lipid Phosphatidylinositol(4,5)-Bisphosphat (kurz: PIP2) in der zellulären Plasmamembran binden. Durch die hohe Dichte von PIP2 auf der Membran kommt es hier zu FRET. Als Farbstoff sind gelbe und cyan-farbene fluoreszente Proteine (yellow fluorescent protein, YFP und cyan fluorescent protein, CFP) kovalent an PH gebunden. Die Proben werden vom Betreuer gestellt.

2 Theorie

FRET

Notwendig für FRET sind zwei Farbstoffe mit unterschiedlichen Absorptions- und Emissionsspektren, wobei das Emissionsspektrum des **Donor**-Farbstoffs mit dem Absorptionsspektrum des **Akzeptor**-Farbstoffs einen deutlichen Überlapp zeigen sollte. Dies ist beim cyan-farbenen und dem gelben fluoreszenden Protein (CFP und YFP) der Fall (siehe Abb. 1).

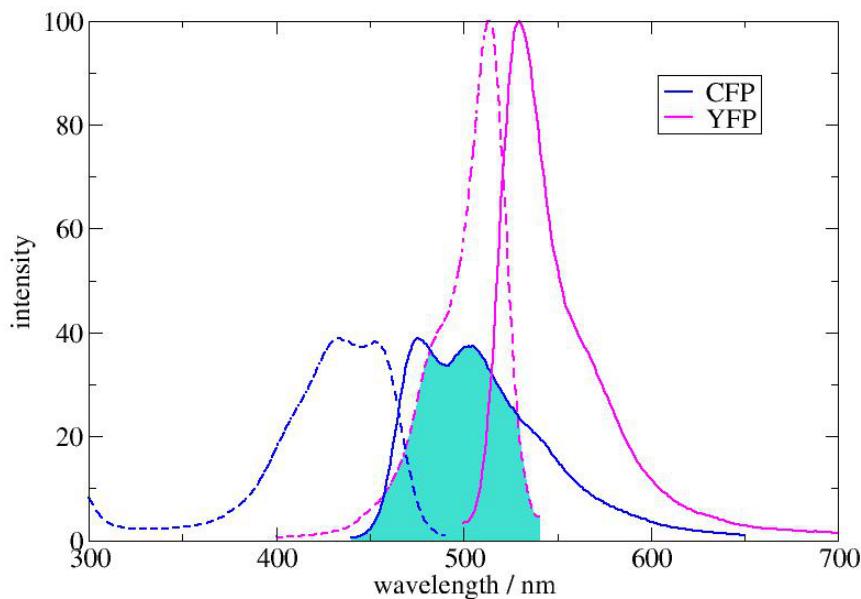


Abbildung 1: Anregungs- und Emissionsspektra von CFP und YFP (Überlapp in hellblau).

Bei Anregung des Donors (hier: CFP) mit der entsprechenden Wellenlänge wird das Molekül vom elektronischen Grundzustand S_0 in den ersten angeregten Zustand S_1 gebracht. Moleküle besitzen, anders als einzelne Atome, neben den elektronischen Übergängen auch weitere Unterniveaus, die in Schwingungen und Rotationen der Moleküle begründet sind. Elektronische Übergänge können so auch eine Änderung des Schwingungs- und Rotations-Zustands zur Folge haben. Aus $E = E_{rot} + E_{vib} + E_{el}$ ergibt sich die Gesamtenergie des Molekülzustandes. Die Aufspaltung in Unterniveaus führt so auch zu einem Bandenspektrum des Moleküls.

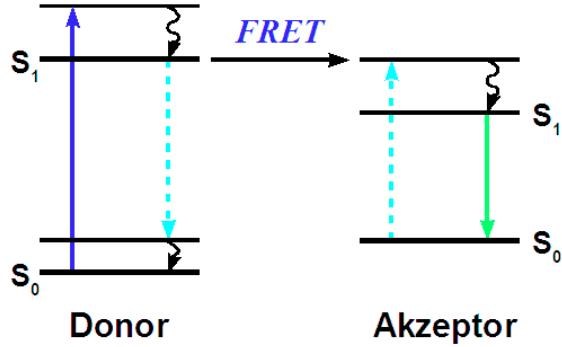


Abbildung 2: Skizze eines FRET-Übergangs

Die Wahrscheinlichkeiten einzelner Übergänge zwischen den Schwingungszuständen eines Moleküls lässt sich über das Frank-Condon-Prinzip bestimmen. Hierbei werden Übergänge favorisiert, bei denen die beiden Schwingungs-Wellenfunktionen einen größeren Überlapp haben. Nach der Anregung durch ein Photon und dem darauf folgenden Übergang in ein höheres Energieniveau wird durch Kopplung des angeregten Zustands an Vibrationen ein Teil der Energie des anregenden Photons verloren (siehe Abb. 2). Der angeregte Zustand hat eine Lebensdauer τ (typischerweise 1-5ns), nach der spontan ein Photon emittiert wird und das Molekül (wiederum über Kopplung an Vibrationen) in den Grundzustand zurückfällt. Die Wellenlänge des Fluoreszenzphotons ist aufgrund des Energieverlustes höher als die des absorbierten Photons („Stokes-Verschiebung“).

Liegt ein Akzeptor (hier: YFP) nahe am Donor und liegt die Wellenlänge des spontan emittierten Photons im Absorptionsspektrum des Akzeptors, so kann die Anregungsenergie **strahlungslos** vom Donor auf den Akzeptor übergehen. Dort kommt es wieder zu Kopplungen an Vibrationen, bevor der Akzeptor ein Fluoreszenzphoton spontan emittiert.

Ein strahlungloser Übergang erfordert die Interaktion des Emissionsdipols des Donors mit dem Absorptionsdipol des Akzeptors. Die Effizienz des Energieübertrags hängt somit vom Spektrenüberlapp, den Orientierungen der Dipole und der Distanz der Farbstoffe (wegen des Dipolfeldes) ab. Die Übergangswahrscheinlichkeit ergibt sich nach Fermis Goldener Regel zu

$$\left| \left\langle \phi_{D*} \phi_A \mid \frac{\kappa}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mu_D \mu_A}{r^3} \mid \phi_D \phi_{A*} \right\rangle \right|^2$$

mit dem winkelabhängigem Orientierungsfaktor der Dipole κ , der elektrische Feldkonstante ϵ_0 , dem Betrag des elektrischen Dipolmoments des Donors μ_D , und dem Betrag des Akzeptors μ_A . Im weiteren ergibt sich die FRET-Effizienz aus

$$E = \frac{\text{Anzahl Energietransfers}}{\text{Anzahl Anregungen}} = \frac{k_{ET}}{k_F + k_{ET} + k_0} = \frac{R_0^6}{R_0^6 + R^6}$$

Dabei sind k_{ET} , k_F und k_0 die Raten für Energietransfer, spontane Donor-Fluoreszenz und strahlungloser Abbau des angeregten Donor-Zustandes. Die Konstante R_0 ist der sogenannte Förster-Radius. Typische Werte des Förster-Radius liegen im nm-Bereich, wobei hier implizit angenommen wurde, dass die Dipole als Funktion der Zeit jeden Winkel einnehmen können, d.h. zufällige Orientierung annehmen. In Ref. [1] findet sich eine vertiefte Behandlung von FRET als Effekt, in Ref. [2] steht die Anwendung im biophysikalischen Kontext mit mehreren möglichen Messmethoden im Vordergrund.

Messmethoden

Um FRET zu detektieren existieren mehrere Verfahren, die sich im biologischen Kontext unterschiedlich gut bewährt haben. Zunächst soll in diesem Versuch die sogenannte **Sensitized Emission** (Ref. [3]) genutzt werden, d.h. die erhöhte Abstrahlung von Photonen im Spektrum des Akzeptors sobald FRET mit einem nahen Donor möglich ist. Im Wesentlichen wird Energie vom Donor auf den Akzeptor verschoben, was die erhöhte Fluoreszenz in diesem Kanal erklärt. Ohne FRET ist die Abstrahlung von Photonen im Emissionsbereich des Donors höher, die Akzeptor-Fluoreszenz sinkt.

Eine weitere Herangehensweise ist die Bestimmung der Änderung der **Lebenszeit** des angeregten Donors (siehe z.B. Ref. [1]). Durch die Kopplung an den Akzeptor sinkt bei FRET die mittlere Lebenszeit des angeregten Zustandes (quantenmechanisch hat man nun zwei mögliche Zerfallskanäle), was man mittels zeitaufgelöster Spektroskopie bzw. modulierter Beleuchtung nachweisen kann. Die Lebenszeit eines Fluorophors wird hierbei z.B. durch eine zeitkorrelierte Einzelphotonenzählung bestimmt. Nach der iterativen Anregung mittels eines gepulsten Lasers wird so jeweils die Ankunftszeit der am Detektor an kommenden Photonen nach dem Anregungsereignis als Histogramm aufgetragen und gemäß eines exponentiellen Abfalls bestimmt (siehe Abb. 3). Für einen einzelnen Fluorophor ergibt sich ein Abfall gemäß

$$N = N_0 e^{-t/\tau}$$

mit einer Lebenszeit τ die sich aus den m einzelnen Zerfallsraten k_i nach

$$1/\tau = \sum_{i=1}^m k_i$$

bestimmt. Die Anwesenheit bzw. Detektion mehrerer Fluorophore resultiert in einem Abfall der Form

$$N = \sum_{i=1}^n A_i e^{-t/\tau_i}$$

mit n Lebenszeiten τ_i und den entsprechenden Amplituden A_i .

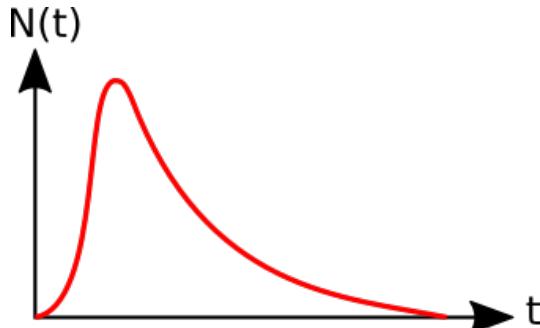


Abbildung 3: Beispiel eines Verlaufs einer zeitkorrelierte Einzelphotonenzählung

Zudem kann durch die gezielte **Bleichung von Akzeptormolekülen** in der Probe FRET unterbunden werden. Dies führt zu einer erhöhten Fluoreszenz der Donormoleküle in Ihrem Emissionskanal und zu verlängerten Lebenszeiten der Donormoleküle aufgrund der fehlenden Möglichkeit zum Energietransfer.

Zellulärer Kontext

Die äußere Hülle von tierischen und menschlichen Zellen, die sogenannte Plasmamembran, ist eine Lipid-Doppelschicht mit einer großen Menge von assoziierten und eingebetteten Proteinen (siehe Abb. 4; weitere Details kann man im entsprechenden Kapitel der leicht verständlichen Ref. [4] erhalten). Im Gegensatz zu artifiziellen Membranen ist die Plasmamembran aus sehr vielen verschiedenen

Lipiden aufgebaut, wovon ca. 30% Phospholipide sind. Eine besondere Form der Phospholipide sind die Phosphatidylinositole, die von Kinasen und Phosphatasen dynamisch bis zu dreifach phosphoryliert werden können. Anzahl und Position der Phosphatgruppen am Phosphatidylinositol determinieren die Rolle dieses Lipids als Botenstoff in wichtigen Signalkaskaden der Zelle. Ein besonderer phosphorylierter Zustand ist das Phosphatidylinositol(4,5)-Bisphosphat (kurz: PIP2), an das Proteine mit einer sog. Pleckstrin-Homologiedomäne (PH) spezifisch binden. Die PH Proteine binden an das polare Teil des Lipids, den Kopf. Mittels dieser Wechselwirkung werden intrazelluläre Signalkaskaden von der Plasmamembran aus initiiert.

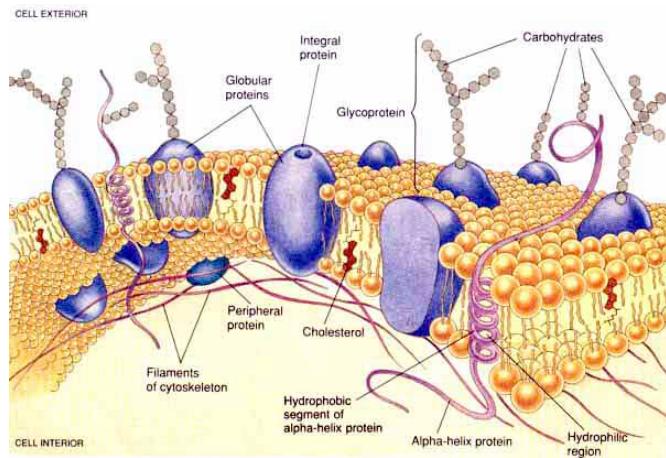


Abbildung 4: Skizze einer Plasmamembran

3 Versuchsanordnung

Vor der Versuchsdurchführung bzw. dem Betreten der Laborräume ist eine Sicherheits-einweisung für die Arbeit an genetisch veränderten Organismen der Risikostufe 1 nötig!

Für diesen Versuch wird ein konfokales Laser-Scanning-Mikroskop (Leica SP5 II) mit einer Pico Harp 300-Einheit zur Durchführung von zeitkorrelierten Einzelphotonenmessungen verwendet. Zur Anregung stehen unterschiedliche Laserlinien eines Argon-Ionen-Lasers, sowie ein gepulster 470nm-Laser zur Verfügung. Zur Anregung und Detektion wird ein Öl-Immersionsobjektiv (63x Vergrößerung, NA=1,40) genutzt. Die Detektion erfolgt durch Photomultiplier (PMT) mit variabler spektraler Selektion oder Avalanche-Photodioden (APD) mit festinstallierten Filterwürfeln. Der Strahlengang eines konfokalen Mikroskops ist schematisch in Abb. 5 dargestellt.

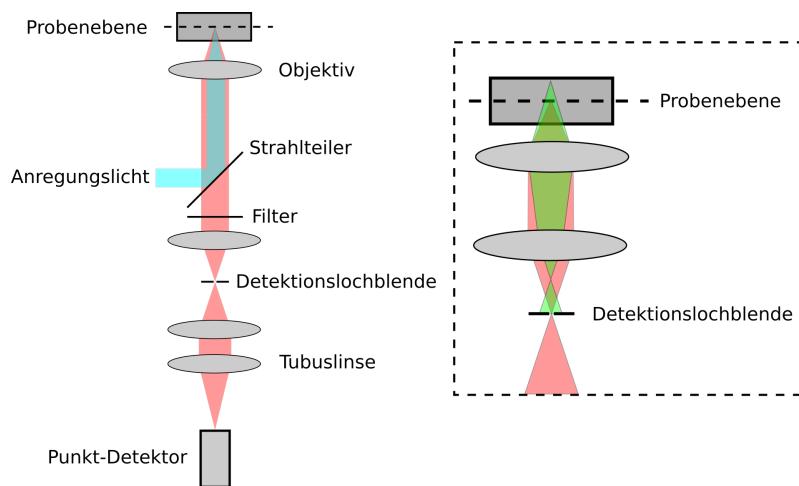


Abbildung 5: Skizze eines Konfokalmikroskops und Prinzip der selektiven Detektion

Grundlagen zur Optik finden sich z.B. in Ref. [6]. Die biologischen Proben in Form von lebenden transient transfizierten HeLa-Zellen werden vom Betreuer gestellt. Die verwendeten Anregungslaserlinien und Detektionsbereiche für den Argon-Laser und die PMTs sind in Abb. 6 dargestellt.

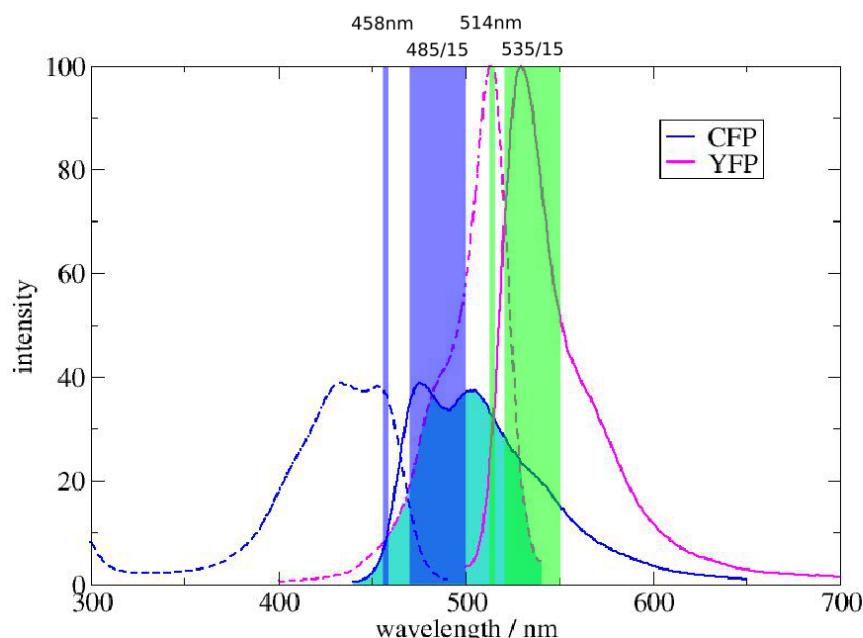


Abbildung 6: Anregungslaserlinien und Detektionsbereiche für CFP / YFP

4 Versuchsdurchführung und Auswertung

4.1 Bilddurchfhrung an einem Konfokalmikroskop

Machen Sie sich zunchst mit den Parametern zur Bilddurchfhrung an einem Konfokalmikroskop vertraut. Wovon hngt die minimale Aufnahmedauer einer konfokalen Aufnahme ab? Inwiefern ist das gemessene Detektorsignal von den Aufnahmeparametern abhngig? Finden Sie Parametereinstellungen fr eine ausreichende rumliche und zeitliche Auflsung der Aufnahme ohne ein Bleichen der Probe zu induzieren.

4.2 Aufnahmen der Sensitized Emission

Bestimmen Sie die FRET-Effizienz uber fluoreszenzmikroskopische Aufnahmen mithilfe der Argon-Laserlinien und einer Detektion uber die Photomultiplier. Die FRET-Intensitat ist die Akzeptor-Fluoreszenz hervorgerufen durch die Anregung des Donors. Die FRET-Intensitat kann wegen des sogenannten **Crosstalk** – gleichzeitige Anregung oder Detektion mehrerer Fluorophore – nicht direkt gemessen werden, da Anregungs- und Detektionsbereiche von Donor und Akzeptor teilweise uberlappen. Somit wird bei Donoranregung auch der Akzeptor angeregt, bei Donordetektion auch die mit angeregten Akzeptoren detektiert und bei Akzeptordetektion mit Donoranregung auch mitangeregte Donoren detektiert (siehe dazu ausfhrliche Diskussion in Ref. [3]). Diese Crosstalk-Beitrage mussen abgezogen werden. Dazu nimmt man zustzlich zu den eigentlichen FRET-Bildern noch Bilder von nur CFP und nur YFP exprimierenden Zellen auf. Aus diesen Aufnahmen kann man die Crosstalkterme berechnen.

Nehmen Sie zuerst die FRET Bilder auf. Benutzen Sie die Probe mit doppelt (CFP und YFP) exprimierenden Zellen und suchen Sie eine Zelle, die beide Proteine ausreichend exprimiert (berprfen Sie dies anhand der Fluoreszenz in den entsprechenden Kanalen). Nehmen Sie von dieser Zelle drei Bilder D_{CY} , A_{CY} und S_{CY} mit folgender Anregung und Detektion auf:

- D_{CY} mit Anregung und Detektion des Donors
- A_{CY} mit Anregung und Detektion des Akzeptors
- S_{CY} mit Anregung des Donors und Detektion des Akzeptors.

Die Anregungsintensitat fr D_{CY} und S_{CY} muss hierbei gleich sein! Nehmen Sie mindestens 10 Zellen auf.

Nehmen Sie jetzt die Bilder fr die Korrekturfaktoren α , β , γ und δ auf (Korrekturfaktoren wie in Ref. [3] beschrieben). Nehmen Sie fr eine Zelle mit reiner CFP-Markierung folgende Bilder auf: D_{CFP} , A_{CFP} und S_{CFP} mit folgender Anregung und Detektion: D_{CFP} mit Anregung und Detektion des Donors; A_{CFP} mit Anregung und Detektion des Akzeptors; S_{CFP} mit Anregung des Donors und Detektion des Akzeptors. Verwenden Sie hierbei soweit mglich die selben Aufnahmeparameter wie zuvor bei den CFP und YFP markierten Proben! Nehmen Sie mindestens 10 Zellen auf.

Wiederholen Sie dies nochmal fr 10 Zellen, die nur YFP exprimieren, um die Bilder D_{YFP} , A_{YFP} und S_{YFP} zu bekommen.

Bilddurchfhrung

Berechnen Sie zunchst die Korrekturfaktoren. Offnen Sie hierfr die Bilder D_{YFP} , A_{YFP} und S_{YFP} mit einer Bildbearbeitungssoftware (z.B. ImageJ bzw. Fiji - siehe Ref. [7]). Stellen Sie zunchst

sicher, dass die Zellen sich deutlich vom Hintergrund abheben und keine saturierten Pixel zu sehen sind (<Analyze|Histogram>). Zeichnen Sie eine ROI (Region of Interest) um die Membran der Zelle. Speichern Sie die ROI (<Analyze| tools| ROI manager>). Definieren und speichern Sie eine weitere ROI im zellfreien Hintergrund des Bildes in der Nähe der ersten ROI. Selektieren Sie diese 2 ROIs im ROI-Manager von ImageJ, aktivieren Sie Bild D_{YFP} und messen Sie die mittlere Intensität in jedem ROI („Measure“). Aktivieren Sie nacheinander die Bilder A_{YFP} und S_{YFP} und messen Sie wiederum die mittlere Intensität („Measure“). Die 6 gewonnenen Werte verrechnen Sie wie folgt:

$$\alpha = D/A$$

$$\gamma = S/A$$

$$\delta = D/S$$

Denken Sie daran den Hintergrund vor der Division abzuziehen. Achten Sie darauf, dass Sie 8-Bit Bilder haben und ggf. die Bilder zuvor auf 32 Bit konvertieren müssen (diskutieren Sie warum). Bearbeiten Sie auf ähnliche Weise die Bilder D_{CFP} , A_{CFP} und S_{CFP} und berechnen sie den Korrekturfaktor:

$$\beta = S/D$$

Vergleichen Sie die Korrekturfaktoren von verschiedenen Zellen und diskutieren Sie deren jeweilige Bedeutung.

Öffnen Sie nun die Bilder D_{CY} , A_{CY} und S_{CY} und berechnen Sie das Bild der Sensitized Emission (SE). Korrigieren und normalisieren Sie die Bilder. Bilden Sie zwei neue Bilder $\beta \cdot D_{CY}$ und $(\gamma - \alpha\beta) \cdot A_{CY}$ (<Image| duplicate>, <Process| math| multiply>). Subtrahieren Sie diese beiden Bilder von S_{CY} und skalieren Sie dieses mit dem Faktor $(1 - \beta\delta)$ (<Process| image calculator>). Speichern Sie das entstandene Bild der Sensitized Emission:

$$SE = \frac{S_{CY} - \beta \cdot D_{CY} - (\gamma - \alpha\beta) \cdot A_{CY}}{(1 - \beta\delta)}$$

Stellen Sie es mit einer geeigneten Farbtabelle (<Image| lookup table> z.B. „spectrum“) dar. Berechnen Sie nun das Bild der FRET-Effizienz:

$$E = SE / \sqrt{A_{CY} \cdot D_{CY}}$$

Kann man aus E den Abstand der Fluorophore berechnen? Welche zusätzliche Messungen sind nötig um das zu erreichen?

4.3 Donoremission nach Akzeptorbleichen

Bestimmen Sie die FRET-Effizienz an CFP / YFP markierten Zellen aus einer Messung der Donor-Fluoreszenz vor und nach dem Bleichen der Akzeptormoleküle. Bleichen Sie die Akzeptormoleküle hierbei soweit wie möglich (mindestens auf ca. 50% der ursprünglichen Intensität). Testen Sie hierfür zuvor die nötigen Parameter des Bleichvorgangs unter Akzeptoranregung und Akzeptordetektion und Vermeiden Sie ein Bleichen des Donors während der Aufnahmen. Wählen Sie eine geeignete ROI in den Zellen (ganze Zelle oder ein Teil der Zelle) aus und exportieren Sie die mittlere Intensitäten innerhalb der ROIs. Überprüfen Sie die Signifikanz ihrer Messungen, indem Sie das Akzeptorbleichen (gleiche Einstellungen!) an lediglich CFP- oder YFP-markierten Zellen wiederholen. Die FRET-Effizienz an doppelmarkierten Proben kann aus dem Verhältnis der Donorintensität (unter

Donoranregung) vor der Akzeptorbleichung $D_{CY,pre}$ und dem Signal $D_{CY,post}$ danach abgeschätzt werden mit:

$$E = 1 - \frac{D_{CY,pre}}{D_{CY,post}}$$

Denken Sie daran eine entsprechend ausreichende Anzahl an Bildern vor und nach dem Bleichereignis aufzunehmen. Inwieweit ist hier für die Datenauswertung die Verwendung eines Mittelwertbildes sinnvoll? Nehmen Sie mindestens 10 Zellen auf und vergleichen Sie Ihre Ergebnisse der FRET-Effizienz mit denen aus der Berechnung der Sensitized Emission. Was sind mögliche Nachteile und Störgrößen dieser Methode?

4.4 Lebenszeitmessungen

Messen Sie nun zunächst die Lebenszeiten von CFP / YFP an Zellen, die nur eine CFP- oder YFP-Markierung aufweisen. Verwenden Sie hierfür den gepulsten 470nm Laser bei 40 MHz und die beiden Avalanche-Photodioden mit einem passendem Filterwürfel (siehe Abb. 7). Betrachten Sie das Histogramm der Einzelphotonenereignisse und verwenden sie einen passenden Fit, um die Lebenszeiten zu berechnen. Messen Sie nun die Lebenszeit der Donor-Moleküle in einer doppelmarkierten Zelle vor und nach einer Bleichung der Akzeptormoleküle. Vergleichen Sie die Ergebnisse der Donor-Lebenszeiten für reine CFP-Proben und für doppelmarkierte Proben vor und nach Akzeptorbleichung. Eine Abschätzung der FRET-Effizienz ergibt sich aus den Lebenszeiten der Donor-Moleküle ohne FRET ($\tau_{D,\text{no FRET}}$) und mit FRET ($\tau_{D,\text{FRET}}$) gemäß:

$$E = 1 - \frac{\tau_{D,\text{FRET}}}{\tau_{D,\text{no FRET}}}$$

Vergleichen Sie Ihre Ergebnisse mit Messungen der Sensitized Emission und Messungen der Donoremission unter Akzeptorbleichung. Inwieweit liefern Ihre gemessenen Lebenszeiten physikalisch sinnvolle Ergebnisse? Wodurch können eventuelle Abweichungen von der theoretischen Erwartung begründet werden? Welche generellen Vor- und Nachteile besitzt diese Methode?

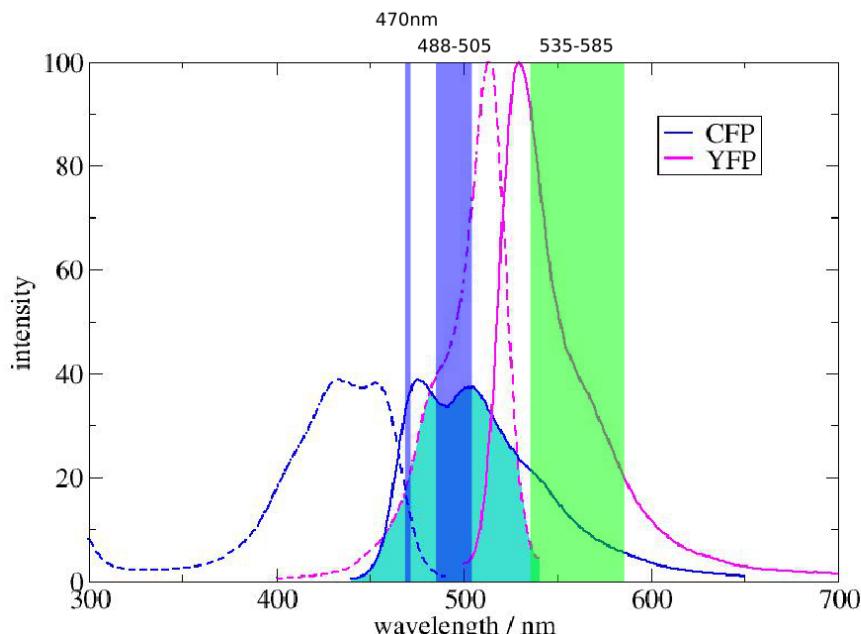


Abbildung 7: Anregungslaserlinie und Detektionsbereiche zur Lebenszeitmessung an CFP / YFP

5 Erforderliche Kenntnisse

- Grundlagen der Optik & Atomphysik
- Funktionsweise Konfokalmikroskopie
- Fluoreszenz / Anregung von Farbstoffen

6 Fragen zur Vorbereitung

1. Wie kommt man bei einer Dipol-Dipol-Wechselwirkung zum FRET-Effekt? Was bedeutet der Försterradius? Woher stammt die Abhängigkeit $\sim 1/r^6$?
2. Was passiert, wenn Donor und Akzeptor feste Orientierungen haben? Welche Grenzfälle gibt es? Kann es auch FRET vom Akzeptor auf den Donor geben?
3. Welchen Abstand sollten PH-CFP und PH-YFP haben um FRET zu sehen?
4. Warum kann man nicht einfach den Donor anregen und schauen ob im Spektralbereich des Akzeptors Licht detektierbar ist? Worauf basieren eventuell nötige Korrekturen?
5. Welche Beiträge messen Sie in einer zeitkorrelierten Einzelphotonenzählung noch neben dem eigentlichen Fluorophorsignal. Wie können Sie diese Beiträge messen bzw. korrigieren?
6. Warum zeigen die im Praktikum verwendeten Proben Fluoreszenz? Warum findet sich diese an den PH-Proteinen?
7. Erklären Sie den Prozess des Bleichens in Fluorophoren.
8. Erklären Sie die Funktionsweise eines Konfokalmikroskops und eventuelle Vorteile und Nachteile dieser Technik. Geht das Experiment nur mit einem konfokalem Laser-Scanning-Mikroskop? Was wären potentielle Alternativen?

7 Literatur

1. Lakowicz. (2007). Principles of Fluorescence Spectroscopy (3rd ed.). Berlin: Springer.
2. Jares-Erijman & Jovin. (2006). Imaging molecular interactions in living cells by FRET microscopy. Current Opinion in Chemical Biology, 10(5)
3. Jalink & van Rheenen.(2009). Chapter 7 FilterFRET. Fret and Flim Techniques (1st ed., Vol. 33). Elesvier B.V.
4. Alberts et al. . (2014). Molecular Biology of the Cell 6e. Garland Science (Vol. 6).
5. van der Wal et al. . (2001). Monitoring agonist-induced phospholipase C activation in live cells by fluorescence resonance energy transfer. The Journal of Biological Chemistry, 276(18)
6. Bergmann-Schaefer, Lehrbuch der Experimentalphysik, Band 3, Optik
7. Download unter <https://fiji.sc/>
(Paper: Schindelin et al. . (2012), Fiji: an open-source platform for biological-image analysis, Nature methods 9(7))

PYHISCHES PRAKTIKUM FÜR FORTGESCHRITTENE

SIGNAL/RAUSCH-VERBESSERUNG

W. Richter

Inhalt	Seite
1. Versuchsziel	2
2. Einführung	2
2.1 Rauschen	2
2.2 Verminderung von Einstreuungen	4
2.3 Signal/Rausch-Verbesserung	8
2.3.1 Filter	8
2.3.2 Signalmittelung	10
2.3.3 Lock-In Verstärker	12
3. Fragen zur Vorbereitung	14
4. Aufgaben	15
4.1 Mittelung und Fouriertransformation	15
4.2 Theorem von Nyquist	15
4.3 Signalfilterung	16
4.4 Lock-In Technik	16
5. Literatur	17
6. Beschreibung des Messprogramms	18

1. Versuchsziel

Bei dem Versuch Signal/Rausch-Verbesserung werden verschiedenste Rausch- und Störquellen beschrieben, die einem Messsignal überlagert sein können. Im Versuch wird diskutiert, welche grundsätzlichen Methoden es zur Unterdrückung bzw. zur Beseitigung dieser Einflüsse gibt. Dabei werden unterschiedliche zeitliche Signalformen mit überlagertem Rauschen mittels der „Fast Fourier Transformationsmethode“ (FFT) analysiert und zusammen mit den Ein- und Ausgangssignalen diskutiert. Neben dem ‘Signal Averaging’ (Mittelung) werden grundlegende Filtertechniken wie Hoch-, Tief-, und Bandpass angewendet.

Das Lock-In Verfahren, eine weitere äußerst wichtige Methode zur Signal/Rausch-Verbesserung, kommt in einem zweiten Versuchsteil zur Anwendung. Dabei wird die Funktionsweise eines Lock-In Verstärkers dargestellt und es werden mögliche Einsatzbereiche aufgezeigt.

2. Einführung

2.1 Rauschen

Die meisten physikalischen Messungen benutzen mittlerweile elektronische Datenerfassung. Dabei stößt man oft bis an die Grenze der Messgenauigkeit vor. Die natürlichen Grenzen der Messgenauigkeit sind physikalisch durch die Unschärferelation und technisch durch das Rauschen der Elektronik gegeben. Neben den fundamentalen Rauschquellen, auf die im Folgenden noch näher eingegangen wird, gibt es Störungen, die von Einstreuungen aus der Umgebung der Messapparatur herrühren und die durch geeignete Verdrahtung und Abschirmung ausgeschaltet werden können. Hierbei handelt es sich meist nicht um stochastische Rauschsignale wie z.B. Störfelder von Elektromotoren oder das sogenannte „50 Hz-Netzbrummen“.

Im weitesten Sinn bezeichnet man als Rauschen jede Art von unerwünschter stochastischer Beimischung zum Messsignal. Im Folgenden sollen aber die von Umwelteinflüssen herrührende Störungen nicht weiter betrachtet werden, sondern nur das Rauschen, das eine fundamentale Eigenschaft jeder elektronischen Apparatur ist. Hierbei unterscheidet man 3 Typen von Rauschen: das **thermische Rauschen**, das **Schrotrauschen** und das **Funkelrauschen** (letzteres wird auch als 1/f-Rauschen bezeichnet).

Thermisches Rauschen

Das thermische Rauschen röhrt von der statistischen Bewegung der Elektronen und anderer freier Ladungsträger her, die erst am absoluten Nullpunkt verschwindet. Eine Mittelung des thermischen Rauschens über einen genügend langen Zeitraum ergibt Null, weil es sich um statistische Fluktuationen handelt. In jedem Augenblick erhält man aber einen resultierenden Strom in einer Richtung. Für die zugehörige Rauschspannung u_R (Effektivwert) an einem Widerstand R gilt:

$$\text{Effektiv} \Rightarrow u = \sqrt{2} u_{\text{eff}} \rightarrow u_R^2 = 4kTRB \quad \begin{matrix} \text{Bandbreite} \\ f_{\text{max}} - f_{\text{min}} \end{matrix} \quad (1)$$

Mit k = Boltzmannkonstante, T = absolute Temperatur und B ist die Bandbreite des Messinstrument (f_{max} - f_{min}, die Differenz aus maximaler und minimaler verarbeiteter Frequenz). Das thermische Rauschen nimmt mit der Temperatur, dem Widerstand und der Bandbreite zu, es ist aber unabhängig von der Frequenz, oder anders ausgedrückt: es tritt bei allen Frequenzen auf. Deshalb wird es oft als "weißes Rauschen" bezeichnet.

Die Größe des thermischen Rauschens ist nicht unerheblich. Sie beträgt z.B. für einen 100 k Ω -Widerstand bei Zimmertemperatur 4 μ V, wenn das Rauschen mit einem Instrument mit 10 kHz Bandbreite gemessen wird. Diese Größe ist für sich genommen noch nicht erheblich.⁵ Wenn jedoch der Widerstand den Eingang eines Verstärkers mit einer Verstärkung von 10 bildet, so ergibt sich an Ausgang des Verstärkers fast ein halbes Volt.

Aus dem obigen Ausdruck erhält man die Rauschleistung durch Division mit R.

$$P_R = 4 kTB \quad P = u \cdot I = \frac{u^2}{R} \quad (2)$$

Die Rauschleistung hängt nur von der Temperatur und der Bandbreite des Messinstruments ab.

Schrotrauchen

Das Schrotrauschen (shot noise) ist das Ergebnis der Quantelung der elektrischen Ladung. Der Ausdruck, der von Schottky für die Vakuumdiode abgeleitet wurde, lässt sich auf alle Übergänge anwenden:

$$\text{Effektivwert } i = \sqrt{2} i_R \quad i_R^2 = 2 e I B \quad (3)$$

mit i_R = Effektivwert des Rauschstroms, e = Elektronenladung, I = Gleichstrom, B = Bandbreite.

Da das Schrotrauschen mit der statistischen Bewegung von Ladungsträgern zu tun hat, zeigen Röhren (einschließlich Sekundärelektronenvervielfacher), Dioden, Transistoren und alle derartigen Bauelementen diesen Effekt. In Transistoren sind die Ströme durch die Emitter-Basis- und die Kollektor-Basis - Dioden die Ursachen für das Schrotrauschen. Die Rauschleistung für das Schrotrauschen kann wie folgt ausgedrückt werden:

$$P_R = i_R^2 R = 2 e I R B \quad (4)$$

wobei R der Widerstand des betreffenden Übergangs ist.

Wie das thermische Rauschen, so ist auch das Schrotrauschen unabhängig von der Frequenz. Es ist also ebenfalls ein "weißes Rauschen". Der Unterschied zwischen thermischem Rauschen und Schrotrauschen ist, dass Letzteres mit dem Gleichstrom durch den Übergang verknüpft ist. Eine Reduzierung des Schrotrauschens kann also durch eine Erniedrigung des Stroms durch das Bauteil bewirkt werden.

Funkelrauschen

Da das Funkelrauschen mit abnehmender Frequenz zunimmt, wird es oft auch als 1/f-Rauschen bezeichnet. Für das 1/f-Rauschen sind vermutlich die Störstellen im Material und punktförmige Kontaktbereiche verantwortlich.

Mehrere Beobachtungen sind charakteristisch für dieses Rauschen, z.B. dass das 1/f-Rauschen in Halbleiterbauelementen größer ist als in Röhren und dass es oberhalb von 1 kHz i.a. nicht von Bedeutung ist. Eine wichtige Schlussfolgerung kann aus dem 1/f-Verhalten gezogen werden: Empfindliche Messungen sollten deshalb nicht statisch mit Gleichstrom, sondern mit Wechselstrom gemacht werden.

Umwelteinflüsse

Häufig sind nicht die fundamentalen Rauschquellen die Ursachen für Messprobleme. Vielmehr liegen die Schwierigkeiten in Einflüssen aus der Umgebung. Die häufigste Störquelle ist die 50 Hz-Stromversorgung, die als Netzbrummen bezeichnet wird. Oft spielen auch die höheren Harmonischen bei 100, 150 und sogar 200 Hz eine Rolle. Eine weitere Störquelle

ist das Radiofrequenzband von Mittelwellensendern. Da ein Leiter als Antenne für dieses Band wirkt, ist dies oft ein Problem. Auch die Störungen von nahe gelegenen Elektromotoren und die Strahlung von Monitoren werden oft von empfindlichen Apparaturen wahrgenommen. Ebenso können Röntgenapparaturen erheblich zum Umgebungsrauschen beitragen. Abb. 1 fasst diese verschiedenen Rauschquellen zusammen und zeigt die Frequenzbereiche, die relativ frei von Rauschen sind.

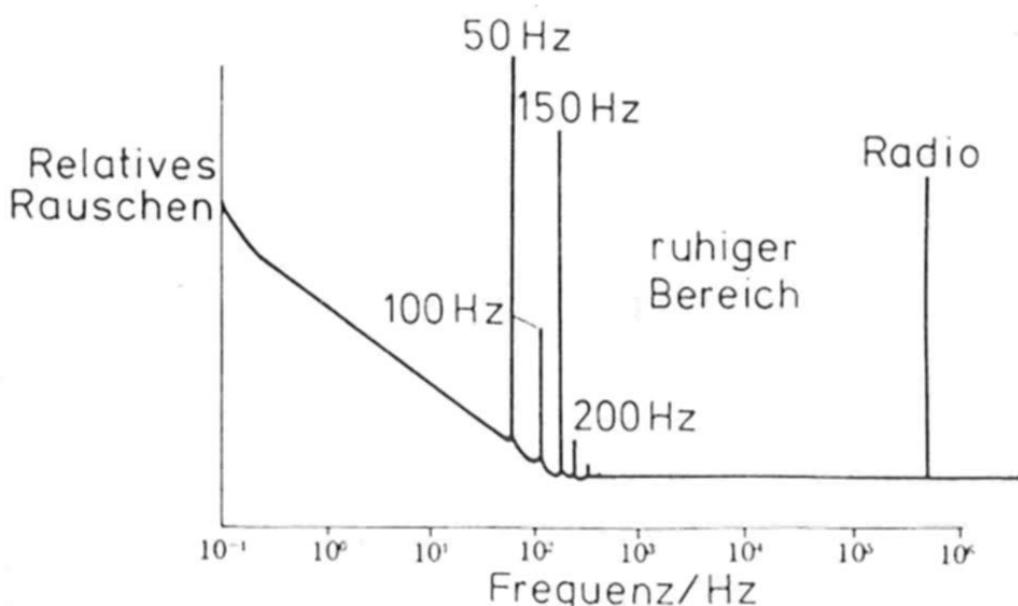


Abb.1 Rauschspektrum mit ruhigen "Bereichen" und Störzonen

2.2 Verminderung von Einstreuungen

Aus den vorangegangenen Betrachtungen ergibt sich, dass man sich bemühen sollte, unerwünschte Signale vom Messsystem fernzuhalten. Es ist ebenso wichtig, unbeabsichtigte Einstreuungen zu vermeiden. Der Schaltkreis in Abb.:2 enthält eine Spannungsquelle und eine Last Z, die durch eine Streukapazität C an die Spannungsquelle gekoppelt ist. Die Streukapazität ist unerwünscht. Die Größe der Streuspannung an Z hängt von den relativen Größen von C und Z und von der Frequenz der Spannungsquelle ab. Wenn Z zunimmt, nimmt auch die eingestreute Störung zu, die möglicherweise weitere Stufen der Schaltung beeinflusst. Wenn die Last in ein leitendes Gehäuse eingebaut wird, wie in Abb. 2, kann das Problem verringert werden. Die Abschirmung wird geerdet und die Streukapazität wird an Masse gekoppelt. Diese Form von Abschirmung ist nicht unvernünftig, da Strahlungsenergie fast überall um uns herum in Form der 50 Hz-Stromversorgung existiert.

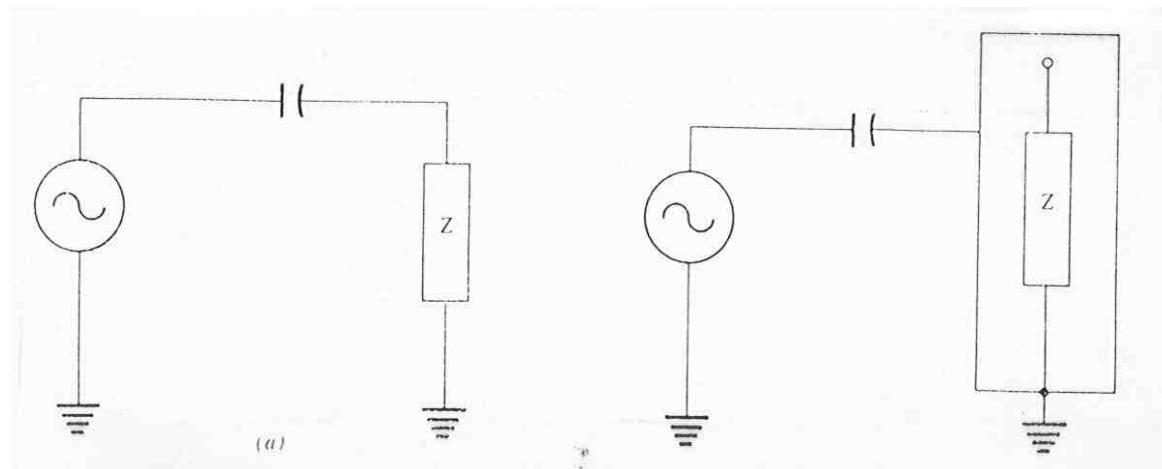


Abb. 2 Kapazitive Kopplung einer Quelle an eine Last: a) unabgeschirmt
b) abgeschirmt, um Kopplung zu vermeiden:

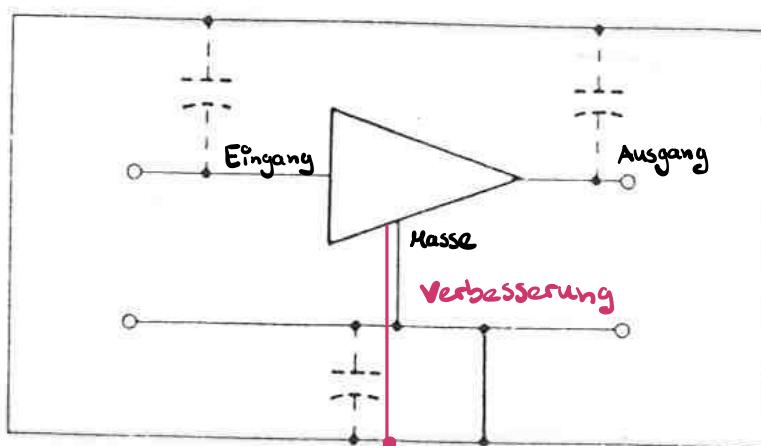


Abb. 3 Streukapazitäten zwischen Abschirmung und Verstärker. Die dicke Leitung ist eine Verbindung zwischen der Abschirmung und dem Masseanschluss des Verstärkers. Sie dient zur Eliminierung der kapazitiven Kopplung.

Die Abschirmung eines empfindlichen Teils der Apparatur, wie eines Verstärkers, behebt das Problem aber nur, wenn die Abschirmung richtig ausgeführt wird. Betrachten Sie den Verstärker im Gehäuse in Abb.3. Streukapazitäten existieren zwischen Eingang und Abschirmung, zwischen Ausgang und Abschirmung und zwischen Masse und Abschirmung. Die letztere ist am kritischsten, weil die Kapazität zwischen Masse und Gehäuse ein kapazitives Rückkopplungssystem bildet. Diese kapazitive Rückkopplung kann beseitigt werden, indem die Masse mit dem Gehäuse verbunden wird (dadurch wird die Streukapazität vollständig beseitigt).

Häufig sind mehrere Teile einer Apparatur miteinander verbunden. Das Problem liegt dann darin, wie das ganze System geerdet werden soll. Eine Methode ist in Abb. 4 gezeigt, in der eine Signalquelle, ein Verstärker und ein Detektor miteinander verbunden sind. Beachten

Sie, dass jedes Teil separat abgeschirmt ist, dass aber die Abschirmungen gemeinsam verbunden sind. Das ist der richtige Weg.

Weniger gute Wege zeigen die Abb. 5a und 5b. In Abb. 5a ist die Masseleitung des Verstärkers mit der Abschirmung verbunden. Da die Abschirmung nicht geerdet ist, besteht eine elektrostatische Kopplung zwischen Abschirmung und Erde. Dadurch können Störungen eingestreut werden. Ein komplizierteres Problem ist in Abb. 5b dargestellt. Hier sind die verschiedenen Abschirmungen nicht miteinander verbunden. Vielmehr wird jede zu einem anderen Erdpunkt geführt. Jegliche Potentialdifferenzen (die es immer gibt) werden elektrostatisch in das System eingeführt. Man nennt dies Erdschleifen. Sie ergeben sich immer, wenn sich mehr als ein gemeinsamer Erdungspunkt im System befindet. Oft bemerkt der Benutzer einer Apparatur nicht, dass das Chassis über die Stromversorgung an Erde liegt. Um diese Möglichkeit zu vermeiden, ist es ratsam, eine gemeinsame Verbindung zwischen allen Chassis herzustellen und von dieser gemeinsamen Verbindung eine einzige Leitung zur Netzerde zu ziehen.

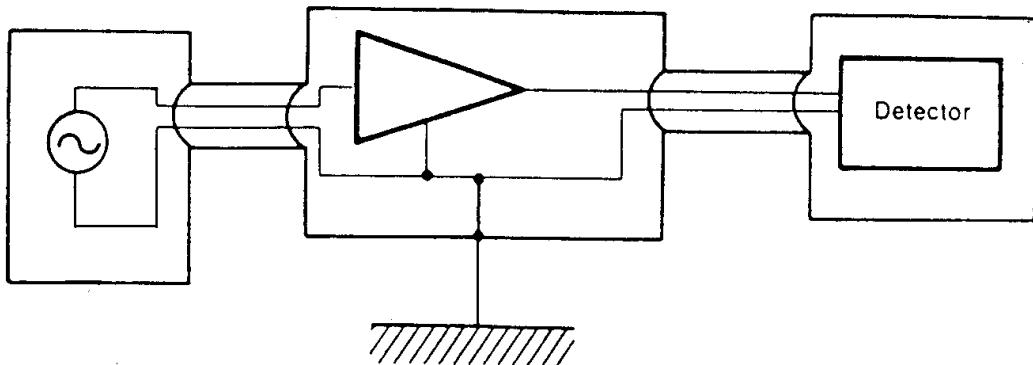


Abb. 4 Richtig Methode zur Abschirmung mehrerer Bauteile über einen gemeinsamen Erdpunkt.

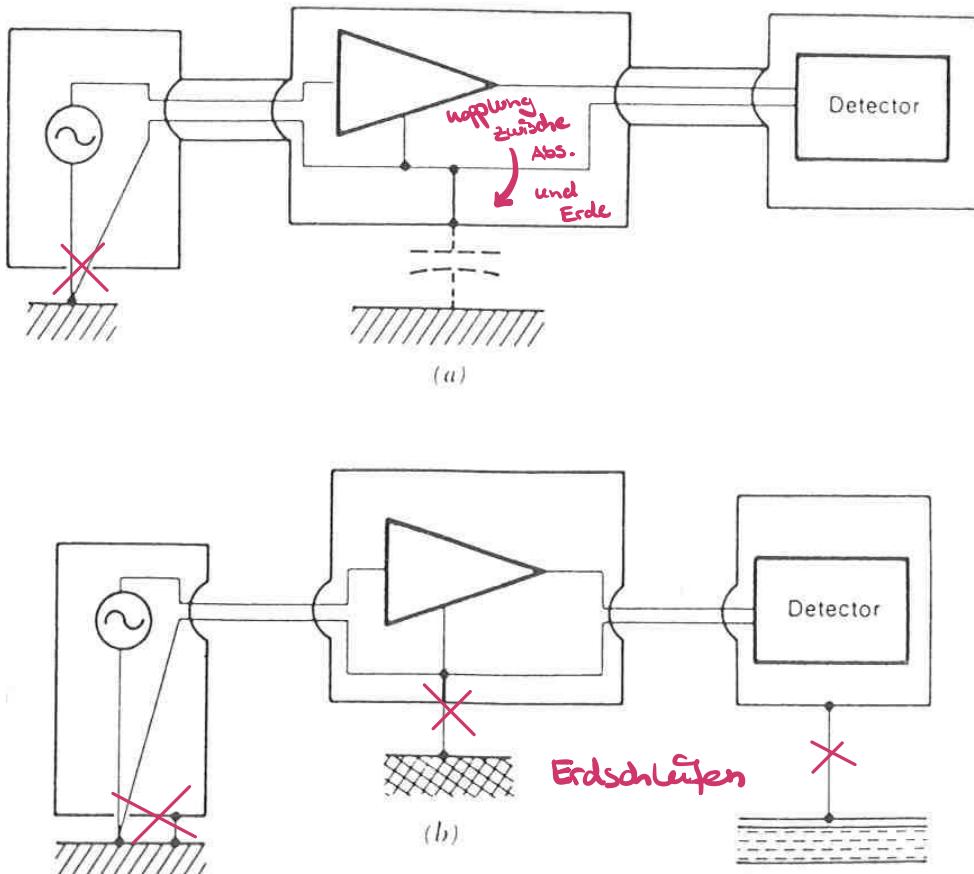


Abb. 5 Falsche Methoden zur Abschirmung:

- Erdung über die Sensorleitungen und zusätzlich ist die Masseleitung des Verstärkers mit der Abschirmung verbunden und bewirkt an dieser Stelle eine kapazitive Kopplung zur Erde.
- jedes Bauteil ist separat geerdet, wodurch Erdschleifen verursacht werden.

Koaxialkabel

Koaxialkabel (Abb. 6) werden häufig als abgeschirmte Kabel verwendet. Das konzentrische Drahtgeflecht umgibt den zentralen Draht vollständig. Oft wird übersehen, dass alle Abschirmungen gemeinsam geerdet werden müssen. Wenn dies nicht getan wird, kann in kritischen Situationen die elektrostatische Kopplung nur vergrößert werden. Wenn die verschiedenen Abschirmungen an verschiedenen Referenzpunkten geerdet werden, erhält man dieselbe Situation wie sie oben bei Abb. 5b beschrieben wurde. Manchmal werden Koaxialkabel an kritischen Stellen innerhalb eines Geräts benötigt, um eine bestimmte Leitung vor lokalen Störstrahlungen abzuschirmen. Eine besondere Rolle nehmen Transformatoren ein. Die von ihnen erzeugten magnetischen Felder haben i.a. eine kurze Reichweite. In jedem Leiter, der nicht abgeschirmt ist, kann durch das magnetische Wechselfeld ein Wechselspannungssignal induziert werden. Ein Weg, dies zu vermeiden, ist es, Transformatoren zu verwenden, die mit einem Material hoher magnetischer Permeabilität, wie z.B. Weicheisen, abgeschirmt sind. Alle Drähte, die mehr als ca. 10 mA Wechselstrom führen, sollten generell miteinander verflochten werden. Dadurch heben sich die magnetischen Felder gegenseitig auf. Noch

besser ist es, kritische Leitungen und Komponenten in genügendem Abstand von den Leitungen anzuordnen, die den Wechselstrom führen. Zum Teil kann es bei Platzproblemen eine Lösung sein, wenn die den Wechselstrom führenden Drähte senkrecht zu den kritischen Drähten angeordnet werden.

In diesem Abschnitt wurden eine Reihe von Tipps gegeben, wie Rauschen und Brummen minimalisiert werden kann. Dennoch gibt es Situationen, wo man sich unausweichlich mit dem Rauschen auseinandersetzen muss. Diesen Problemen ist der folgende Abschnitt gewidmet.

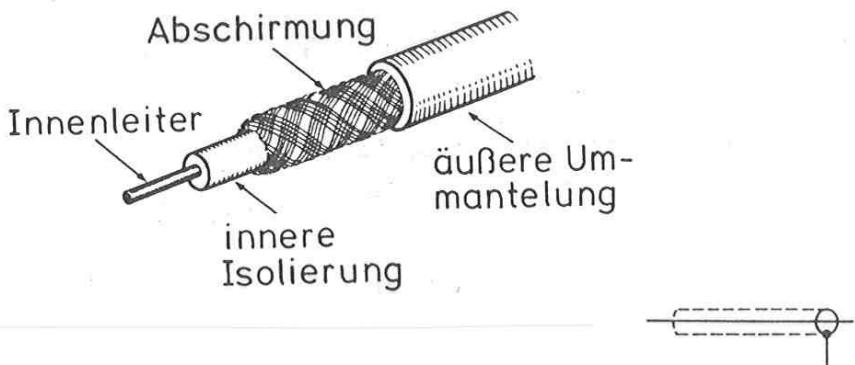


Abb. 6 Koaxialkabel. (Unten rechts: zugehöriges elektrisches Symbol)

2.3 Signal/Rausch-Verbesserung

$$u_R^2 = 4kT\alpha B$$

$$\sigma_R^2 = 2eB$$

2.3.1 Filter

Ein Weg zur Signal/Rausch-Verbesserung ist die Aufbereitung des Signals durch ein Filter. Voraussetzung ist, dass das Signal bei einer anderen Frequenz auftritt als das Rauschen. Das Prinzip der Filterung beruht auf einer starken Reduzierung der Bandbreite B. Aus Gl. (1) und (3) ergibt sich, dass das Rauschen damit linear mit der Bandbreite reduziert wird. Ferner wird der Einfluss von starken Störstrahlen aus der Umgebung durch geeignetes Filtern reduziert.

Die Aufgabe von Filtern besteht darin, bestimmte Frequenzen zu unterdrücken und andere durchzulassen. Es gibt 4 Haupttypen von Filtern: Tiefpass-, Hochpass-, Bandpass- und Bandsperfilter. Die typischen Übertragungscharakteristiken dieser 4 Typen sind in Abb. 7 dargestellt.

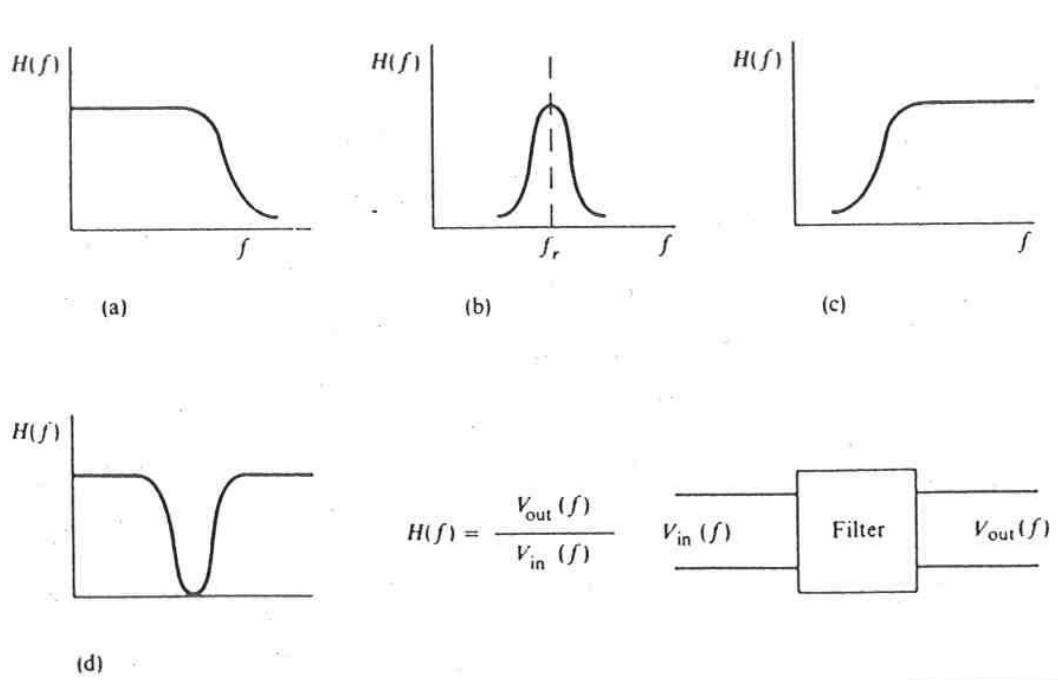
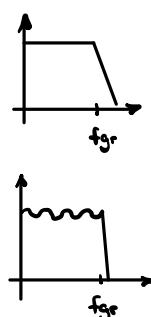


Abb. 7 Haupttypen von Filterübertragungsfunktionen und Schaltsymbol:
a) Tiefpass, b) Bandpass, c) Hochpass ,d) Bandsperre

Weitere Filtertypen

Filter höherer Ordnung lassen sich meist nur mit aktiven Bauelementen realisieren. Man unterscheidet dabei verschiedene Schaltungsrealisierungen mit leicht unterschiedlichem Frequenzübertragungsverhalten.

Butterworth-Tiefpassfilter besitzen einen Amplituden-Frequenzgang, der möglichst lang horizontal verläuft und erst kurz vor der Grenzfrequenz scharf abknickt. Ihre Sprungantwort zeigen ein beträchtliches Überschwingen, das mit zunehmender Ordnung größer wird.



Tschebyscheff-Tiefpassfilter besitzen oberhalb der Grenzfrequenz einen noch steileren Abfall der Verstärkung. Im Durchlassbereich verläuft die Verstärkung jedoch nicht monoton, sondern besitzt eine Welligkeit konstanter Amplitude. Bei gegebener Ordnung ist der Abfall oberhalb der Grenzfrequenz umso steiler, je größer die zugelassene Welligkeit ist. Das Überschwingen der Sprungantwort ist noch stärker als bei den Butterworth-Filtern.

Bessel-Tiefpassfilter besitzen ein optimales Rechteck-Übertragungsverhalten. Die Voraussetzung hierfür ist, dass die Gruppenlaufzeit über einen möglichst großen Frequenzbereich konstant ist, d.h., dass die Phasenverschiebung in diesem Frequenzbereich proportional zur Frequenz ist. Allerdings knickt der Amplituden-Frequenzgang der Bessel-Filter nicht so scharf ab wie bei den Butterworth- und Tschebyscheff-Filtern.

Der Tschebyscheff-Tiefpass geht am steilsten vom Durchlass- in den Sperrbereich über. Dies erkauft man sich durch die Welligkeit des Frequenzgangs im Durchlassbereich. Macht man die Welligkeit immer kleiner, geht das Tschebyscheff-Filter kontinuierlich in das Butterworth-Filter über. Beide Filter zeigen ein beachtliches Überschwingen der Sprungantwort. Bessel-Filter hingegen besitzen ein äußerst geringes Überschwingen. Trotz ihres ungünstigen Amplituden-Frequenzgangs wird man sie immer dann einsetzen, wenn es auf gutes Rechteckübertragungsverhalten ankommt.

Ein passiver RC-Tiefpass zeigt kein Überschwingen. Man erkauft jedoch die geringe Verbesserung gegenüber dem Besselfilter mit einer beachtlichen Verschlechterung des Ampli-

tuden-Frequenzgangs. Außerdem ist die Verrundung der Ecken der Sprungantwort stärker als beim Besselfilter.

Anwendungsbeispiele für Filter

a) 50 Hz „Brummspannung“

In Abb.8 ist ein Signal bei 500 Hz von 50 Hz Brummen überlagert. Von einem Hochpass wird das 500 Hz-Signal durchgelassen, während das 50 Hz Brummen stark abgeschwächt wird. Einen ähnlichen Effekt kann man durch ein 50 Hz-Sperrfilter erzielen, bei dem selektiv die 50 Hz unterdrückt werden.

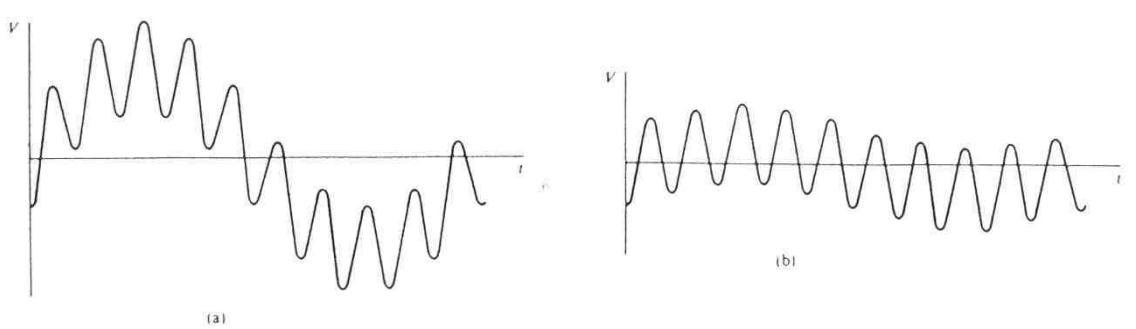


Abb. 8 a) Eingangssignal mit Brumm b) gefiltertes Ausgangssignal

b) Breitbandiges Rauschen

Ein Signal einer bestimmten Frequenz sei von statistischem Rauschen großer Bandbreite überlagert. In diesem Fall lässt sich durch einen Bandpass, der selektiv das Signal durchlässt, eine erhebliche Signal/ Rausch-Verbesserung erzielen.

2.3.2. Signalmittelung

Die Signalmittelung (signal averaging) ist eine Methode, die besonders bei stark verrauschten Signalen sehr nützlich ist. Diese Methode kann angewendet werden, wenn die Bandbreiten des Signals und des Rauschens in der gleichen Größenordnung liegen. Dies würde die Anwendung von Filtern ausschließen. Die einzige Voraussetzung für die Signalmittelung ist, dass das Signal wiederholbar und seine Phase bekannt ist. Das Signal (und das Rauschen) wird in n Segmente zerlegt und in n Kanälen gespeichert. Dieser Prozess wird oft wiederholt und jeder neue Durchgang zum vorhandenen Speicherinhalt addiert. Dabei wächst das Signal proportional zur Zahl der Wiederholungen, während man beim Rauschen aufgrund dessen statistischer Natur dessen quadratischen Mittelwert addiert. Zum Beispiel ist nach 100 Wiederholungen das Signal 100-mal größer, während das Rauschen nur $\sqrt{100} = 10$ -mal größer geworden ist. Man hat also eine Signal/Rausch-Verbesserung um den Faktor 10 erreicht. Allgemein erhält man bei N Wiederholungen eine Signal/Rausch-Verbesserung von \sqrt{N} .

Abb. 9 zeigt, welche deutlichen Signal/Rausch-Verbesserungen auf diese Weise erzielt werden können.

Im Versuch übernimmt ein PC, in dem eine AD-Wandlerkarte eingebaut ist zusammen mit der Datenerfassungssoftware „LabView“ die Signalmittelung. Die charakteristischen Größen der Messanordnung sind: max. Eingangsspannung $\pm 5V$, 16 Bit Auflösung, max. Samplerate

250kHz. Dabei ist zu beachten, dass die maximale Frequenz, die mit dieser Anordnung tatsächlich detektiert werden kann, durch Aliasing und die entsprechende Nyquist-Frequenz begrenzt ist.

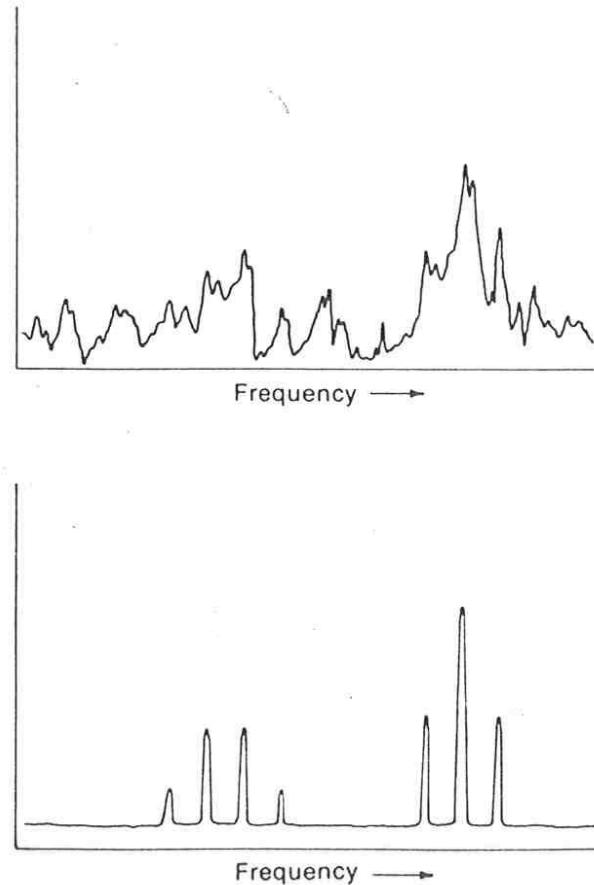


Abb. 9 Signal/Rausch-Verbesserung durch Mittelung.
Oben: einzelner Durchgang. Unten: 100 Durchgänge

Digitales Filtern

Wenn man keinen analogen Filter zur Verfügung hat, besteht auch die Möglichkeit das Signal digital zu filtern. Dabei geht man folgendermaßen vor. Nach Aufnahme des Spektrums wird das Signal fouriertransformiert und mit einer Filterfunktion multipliziert. Danach erfolgt eine Rücktransformation, und man erhält das gefilterte Signal in der Zeitdomäne. Damit lassen sich sehr einfach die verschiedenen Filterfunktionen (z.B. Tiefpass-, Hochpass-, Bandpass-, Notch-Filter, ...) einstellen.

2.3.3 Lock-In Verstärker

(ausführliche Beschreibung in der Zusatzliteratur)

Eine sehr häufig angewandte Technik zur Signal/Rausch-Verbesserung ist die Verwendung eines Lock-In Verstärkers. Das zugrunde liegende Prinzip wird auch als phasenempfindliche Gleichrichtung bezeichnet. Voraussetzung für seine Anwendung ist, dass das Signal periodisch moduliert vorliegt (Effektmodulation). Die meisten Gleichstrommessungen können durch Choppieren (Zerhacken) periodisch gemacht werden, z.B. bei optischen Messungen durch eine rotierende Zerhackerscheibe, die den Lichtstrahl periodisch unterbricht.

Das Prinzipschaltbild des Lock-In Verstärkers ist in Abb. 10 dargestellt:

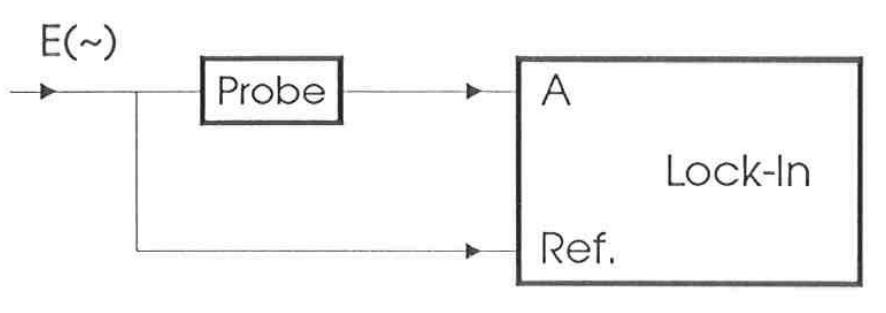


Abb. 10 Prinzipielle Schaltzeichnung und Anwendung des Lock-In Verstärkers.

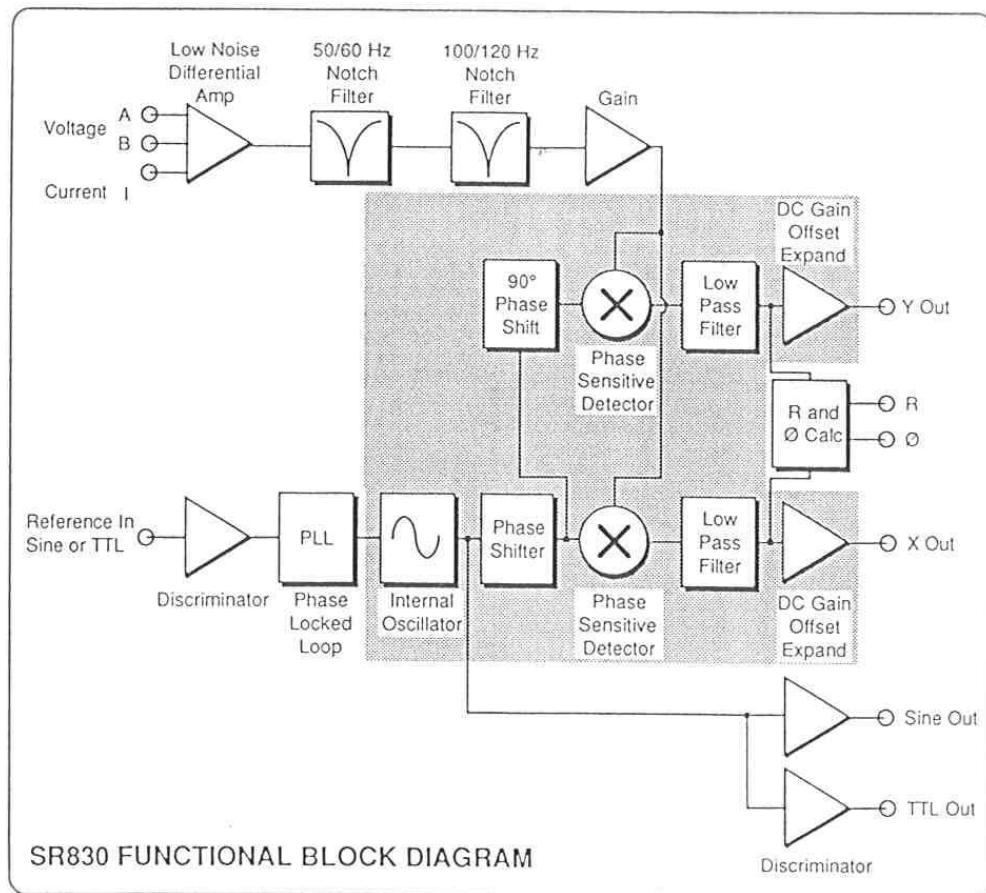


Abb. 11 Prinzipschaltbild des Lock-In Verstärkers.

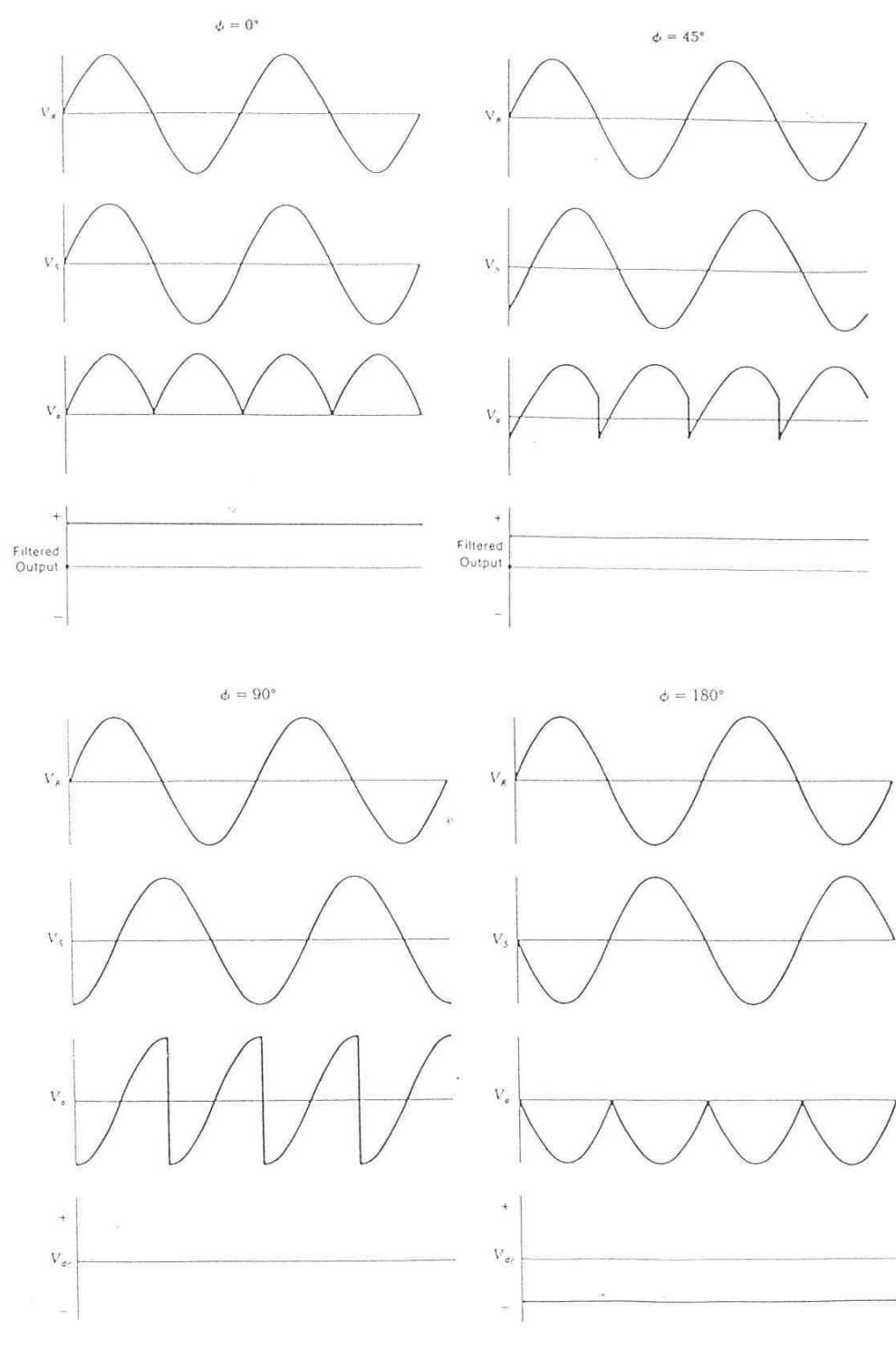


Abb. 12 Referenzspannung V_R . Signal V_S , Ausgangsspannung V_0 und tiefpassgefilterte Ausgangsspannung beim Lock-In Verstärker für verschiedene Phasenverschiebungen ϕ zwischen V_R und V_S (hier ist das Ausgangssignal $V_0 = V_S \operatorname{sign}(V_R)$), wie es früher bei vielen analogen Lock-In Verstärkern realisiert wurde. Digitale Lock-In Verstärker arbeiten mit einer oberwellenfreien reinen Sinusreferenz, die intern erzeugt wird).

Die Probe wird mittels einer Eingangsgröße $E(\sim)$ periodisch angeregt, von der ein Teil für den Referenzeingang des Lock-In Verstärkers ausgekoppelt wird. Die Detektion des Signals erfolgt über den Eingang A des Lock-In Verstärkers.

Das Herzstück des Lock-In Verstärkers ist der sogenannte phasenempfindliche Gleichrichter (PSD). Der phasenempfindliche Gleichrichter bewirkt ein mit der Referenzspannung V_R synchrones Umpolen der Ausgangsspannung. Je nach Phasenverschiebung zwischen V_R und dem Signal V_S erhält man die in Abb. 12 dargestellten Ausgangsspannungen V_O . Durch den RC-Tiefpass am Ausgang des Lock-In Verstärkers wird schließlich die Ausgangsspannung geglättet.

Das Prinzip des Lock-In Verstärkers besteht darin, dass ein Gleichspannungssignal bei der Frequenz $f = 0$, wo es von sehr großem $1/f$ -Rauschen überlagert ist, auf die Modulationsfrequenz f_m transponiert wird. Hier ist das Rauschen aus den vorher diskutierten Gründen wesentlich geringer. Das modulierte Signal wird schmalbandig verstärkt und gleichgerichtet. Die Verstärkerbandbreite Δf kann so klein gewählt werden, wie es die Messzeit erlaubt (typische Werte $\Delta f = 1/(\pi\tau) = 10 \dots 0,01$ Hz).

3. Fragen zur Vorbereitung

- 1) Welche Arten von Rauschen gibt es und wodurch werden sie charakterisiert?
- 2) Welches sind die Hauptstöreinflüsse aus der Umgebung? Wie können sie eliminiert werden?
- 3) Was ist ein Koaxialkabel und wozu dient es?
- 4) Was versteht man unter Erdschleifen?
- 5) Welche Methoden zur Signal/Rausch-Verbesserung gibt es? Diskutieren Sie ihre Anwendbarkeit.
- 6) Erläutern Sie ausführlich das Lock-In Verfahren.
- 7) Wie ist die Größe dB definiert? Was bedeutet 0dB, 10dB, 20dB und 60dB und wo tritt die charakteristische Größe 3dB auf?
- 8) Welches sind die Haupttypen von elektronischen Filtern? Nennen Sie Verwendungsmöglichkeiten zur Signal/Rausch-Verbesserung. Was gibt die Ordnung eines Filters an?
- 9) Was besagt das Abtasttheorem?
- 10) Erklären Sie kurz die Fourier- und die Fast-Fourier-Transformation und deren Unterschiede hinsichtlich Rechenaufwand.

4. Aufgaben

Zur Vorbereitung vor Versuchsbeginn(schriftlich):

Wie lautet die Fourierentwicklung einer Dreiecksschwingung

$$y(t) = at \text{ für } -T/4 \leq t \leq T/4$$

$$y(t) = a(T/2-t) \text{ für } T/4 \leq t \leq 3T/4$$

und einer Rechteckschwingung

$$y(t) = a \text{ für } 0 \leq t \leq T/2$$

$$y(t) = -a \text{ für } T/2 \leq t \leq T.$$

Für die folgenden Messungen wird das Programm ‘Signal/Rausch Versuch’ (Beschreibung siehe Punkt 6) benötigt. Die Eingänge der AD-Wandlerkarte sind mit den Ausgängen ‘50Ω-Output’ und ‘Trigger’ des Signalgenerators zu verbinden.

Vor Beginn der Messungen ist für jede Praktikumsgruppe ein neues Daten-Directory unter D:\daten\... anzulegen.

4.1 Mittelung und Fouriertransformation

- a) Bestimmen Sie experimentell die Fourierentwicklungscoeffizienten für die Signalfunktionen „Rechteck“ und „Dreieck“ und vergleichen Sie die experimentellen Daten mit der Theorie.
- b) Interpretieren Sie das Fourierspektrum der Sinus-Signalfunktion (ohne Rauschen).
- c) Zeigen Sie quantitativ am Beispiel einer verrauschten Signalfunktion (Rechteck oder Dreieck) wie die Abnahme des Rauschens von der Zahl der Mittelungen abhängt.
- d) Welchen Einfluss hat der Signal-Rausch Abstand der Oberwellen auf die zeitliche Signalform?
- e) Variieren Sie für eine feste Signalform die Bandbreite des Rauschens und stellen Sie die Resultate für einige typische Frequenzverläufe dar (Hinweis: Für kleine Bandbreiten ist zur Darstellung des zeitlichen Generatorsignals das Speicheroszilloskop zu verwenden).

Die Einstellungen auf der virtuellen Messoberfläche sind so zu wählen, dass für die jeweiligen Messaufgaben aussagefähige Resultate erzielt werden können. Versuchen Sie für jede Messaufgabe mit einer möglichst kleinen repräsentativen Zahl an Datenfiles bzw. Ausdrucken auszukommen. Nach Möglichkeit sind die erstellten Datenfiles sofort unter dem Menüpunkt „Filelisting“ mit Hilfe der Cursorfunktionen auszuwerten.

4.2 Theorem von Nyquist

- a) Variieren Sie für ein unverrauscht Sinussignal (Frequenz ~ 1kHz) die Abtastrate. Wie verändert sich die gemessene Frequenz in Abhängigkeit der Abtastrate? Variieren Sie in einer zweiten Messreihe bei konstanter Abtastrate die Frequenz des Funktionsgenerators. Stellen Sie die Ergebnis jeweils in einem Diagramm dar.

- b) Interpretieren Sie das Fourierspektrum für die Dreiecksfunktion, das man mit einer Abtastrate erhält, die zwischen der doppelten und der dreifachen Einstellfrequenz für die Dreiecksfunktion liegt.
- c) Erklären Sie die Problematik des „Aliasing“.

4.3 Signalfilterung

Zur Messung von Frequenzgängen: Verwende ein reines Rauschsignal mit maximaler Amplitude und Bandbreite

Zur Messung von Sprungantworten: Verwende ein reines Rechtecksignal (d.h. ohne Rauschanteil).

- (a)** Vergleichen Sie den Amplitudenfrequenzgang von Tiefpassfiltern verschiedener Ordnung und Charakteristik. Diskutieren Sie den Einfluß von Ordnung und Charakteristik auf den Frequenzgang.
- (b)** Vergleichen Sie die Sprungantwort von Tief- und Hochpassfiltern verschiedener Ordnung und Charakteristik. Diskutieren Sie den Einfluß von Ordnung und Charakteristik auf das Ausgangssignal.
- (c)** Konfigurieren Sie die analoge Filterbank Modell *Ithaco 4302* als Bandpassfilter mit Durchlassband von ca. 1 kHz – 4 kHz und messen Sie den Frequengang. Welche Charakteristik besitzt der Filter? Vergleichen Sie das Verhalten mit dem eines digitalen Filter mit gleichen Parametern.
- (d)** Verwenden Sie für den folgenden Versuch ein rauschbehaftetes Rechtecksignal mit einer Frequenz von ca. 1 kHz und einem Signal-Rausch-Verhältnis von 10 dB. Das Signal-Rausch-Verhältnis soll mit Hilfe eines Bandpassfilters 4. Ordnung verbessert werden. Finden Sie einen vernünftigen Kompromiss zwischen Rauschunterdrückung und Signalverzerrung. Die Wahl zwischen analoger oder digitaler Realisierung bleibt Ihnen überlassen.
- (e)** Welche generellen Unterschiede bestehen zwischen *Filtern* und *Mittelung*?

4.4 Lock-In Technik

Machen Sie sich mit den wichtigsten Einstellungen des Lock-In Verstärkers vertraut. Erklären Sie (schriftlich) den Zusammenhang zwischen dem eingebauten Tiefpassfilter und der einstellbaren Zeitkonstante des Lock-In Verstärkers. Was bedeuten die Einstellungen 6 24 dB/Oct. am Gerät?

a) Lock-In Verstärker als Filter

Geben Sie jeweils ein Sinussignal und ein Dreieckssignal von 1 Volt Spitze-Spitze auf den Eingang des Lock-In Verstärkers (Referenz vom Generator).

Interpretieren und erklären Sie bei jeweils abgeglichener Phase den Ausgangsmesswert.

Bestimmen Sie die Fourieramplituden für eine Rechteck- und eine Dreiecksschwingung und vergleichen Sie die Messwerte mit Ihren berechneten Amplituden.

b) Bandbreite des Lock-In Verstärkers

Geben Sie auf den Eingang des Lock-In Verstärkers ein Sinussignal (ca. 100 mV, $f = 1\text{kHz}$) und nehmen Sie das Ausgangssignal $|R|$ in Abhängigkeit von der Detektionsfrequenz für 2 Eingangsfiltern auf. Mit der Referenzeinstellung „Intern“ können Sie die Referenzfrequenz am Lock-In Verstärker verändern.

1. Messung: Zeitkonstante = 30ms und 6dB/Oktave
2. Messung: - Parameter selbst wählen (möglichst nur eine der beiden Größen verändern) –

Bestimmen Sie aus der Bandbreitenkurve die Zeitkonstante des Filters und vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit den eingestellten Werten am Lock-In Verstärker.

Welcher Zusammenhang existiert zwischen Ihren Messkurven und der Steilheit des Tiefpassfilters?

Bei den meisten Lock-In Verstärkern sind Grenzfrequenz (-3dB Punkt) und Steilheit nicht unabhängig einstellbar. Filter höherer Ordnung werden meist durch Hintereinanderschaltung von Filtern 1. Ordnung realisiert.

c) Lock-In Technik in der Praxis

Für eine Messung mit Lock-In Technik steht eine Leuchtdiode und eine Photodiode zur Verfügung. Schließen Sie den Funktionsgenerator an die Leuchtdiode an und verbinden Sie die Referenz ("Sync out" des Funktionsgenerators) mit dem Referenzeingang des Lock-In Verstärkers. Stellen Sie die Eingangsspannung der Leuchtdiode, das Messsignal von der Photodiode und das Ausgangssignal des Lock-In Verstärkers auf dem Oszilloskop dar.

Erklären Sie den Einfluss von Empfindlichkeit und Zeitkonstante auf das Ausgangssignal.

Welchen Einfluss hat das Raumlicht auf das Mess- und das Ausgangssignal?

Verändern Sie die Intensität der Leuchtdiode und schätzen Sie den Messbereichsumfang (in dB) für diese Messung ab. Vergleichen Sie diesen Wert mit dem spezifizierten Dynamikumfang des Lock-In Verstärkers.

5. Literatur

- (1) A. James Diefenderfer, Principles of Electronic Instrumentation, Saunders Philadelphia, 1972.
- (2) Klaus D. Kramer, Elektronikpraktikum, Düsseldorf, Bertelsmann 1973.
- (3) U. Tietze, Ch. Schenk, Halbleiter-Schaltungstechnik, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, (aktuelle Auflage).

(4) Lock-In Basics, Firmenliteratur der Firma Stanford Research Systems (SRS), Seiten 3.1 bis 3.18 (siehe Zusatzliteratur)

6. Beschreibung des Messprogramms

Die Fast-Fourier Transformations-Routine (FFT) ist Teil der LabView Programmstruktur von National Instruments. Sie ist als sogenanntes *Virtuelles Messinstrument* (VI) mit Bedienmöglichkeiten auf der Bildschirmebene realisiert.

Im Hauptmenü stehen folgende Messoptionen zur Verfügung:

- **Filtering**
- **Averaging**
- **Sampling**
- **File listing**

In allen Menüpunkten werden im oberen Bildschirmbereich jeweils das zeitliche Eingangssignal vom Generator und daneben das verarbeitete Signal nach der Routine ausgegeben. Im unteren Bildschirmbereich wird das Leistungsspektrum wie folgt dargestellt:

- Menüpunkt ‚Sampling‘: Spektrum des Eingangssignals
- Menüpunkte ‚Filterung‘ und ‚Averaging‘: Spektrum nach der Verarbeitung

Mit den Cursorfunktionen können Sie einzelne Punkte des Spektrums bzw. der Filterkurven (rot) direkt auslesen. Das Symbol „Schloss“ im Cursorbedienfeld ermöglicht das feste Einloggen des jeweiligen Cursors in die Messkurven. Falls bei der Auswertung mit dem Cursor die Spitze der Signale nicht richtig erfasst werden, muss die Frequenzachse stärker gespreizt werden.

Die Achsenwerte im Leistungsspektrum können je nach Messaufgabe frei gewählt werden

Die Datenspeicherung erfolgt spaltenweise im ASCII-Format und ist im jeweiligen Datenkopf des Filters beschrieben. Die erste Spalte enthält die Zeitwerte in ms. Die vierte Spalte enthält die Frequenzwerte für das Leistungsspektrum. Die Zahl der Datenpunkte in allen Spalten ist durch die eingestellte Zahl der Messpunkte (siehe unten: #s) gegeben. Mehrfaches Abspeichern des gleichen Files erhöht die Versionsnummer des gewählten Filenames.

Beschreibung der Bedienelemente in den Menüpunkten

Averaging und Sampling

- **FS:** Abtastfrequenz (max. 250 kHz)
- **#s:** Zahl der dargestellten Messpunkt im Leistungsspektrum
- **Path to store:** D:\daten\<Name des eigenen Directory>
- **Type of datafile:** [<freier Text>]

Filtering

- **Topology:** Art des verwendeten Filters
(wird mit roter Filterkurve dargestellt)
- **Typ:** Tief-, Hoch-, Bandpass, Bandsperre

- **Lower F_c:** - Grenzfrequenz bei Tief- oder Hochpass
- untere Grenzfrequenz bei Bandpass oder Bandsperre
- **Upper F_c:** - ohne Wirkung bei Tief- oder Hochpass
- obere Grenzfrequenz bei Bandpass oder Bandsperre
- **PB Ripple:** Interner Parameter für Restwelligkeit der Filter im Durchlassbereich (Default: 1). Nur bei Tschebyscheff- und Elliptic-Filter wirksam
- **SB Attenuation:** Interner Parameter für Filter-VI (Default: 60)

Die von National Instruments vorgegebenen Routinen für Tschebyscheff- und Elliptic-Filter erzeugen eine von der Restwelligkeit abhängige Grenzfrequenz (-3 dB Punkt), die nicht mit dem eingestellten Wert der Grenzfrequenz übereinstimmt.

Fragen zur Vorbereitung

1) Arten von Rauschen

Thermisches:

- statische Bewegung der Ladungsträger (verschwindet bei Nullpunkt)
- $\rightarrow 0$ bei genügend langen Zeitraum (Fluktuationen)
- tritt bei allen Frequenzen auf \Rightarrow „weißes Rauschen“

$$u = \sqrt{2} u_R$$

$$u_R^2 = 4kT_B$$

$$P_R = \frac{u_R^2}{R} = 4kT_B$$

Schrottauschen:

- Quantelung gibt Ladung, statische Bewegung von Ladungsträgern
- Röhren, Dioden, Transistor und derartige Bauelemente
- Mit Gleichstrom verknüpft
- Reduzieren: Strom im Bauteil verringern

$$f_R^2 = 2eIB$$

$$P_R = f_R^2 \cdot R = 2eIBR$$

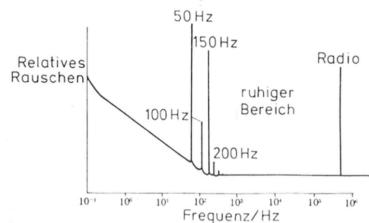
Funkelrauschen:

- Störstellen im Material und punktförmiger Kontaktbereich
- Empfindliche Messungen mit \approx statt -

1/f - Rauschen

2) Umwelt einflüsse

- 50Hz - Stromversorgung \Rightarrow „Netzbrummen“
auch n. 50Hz spielen eine Rolle
- Leiter als Antenne für Radiofrequenzband
- E-Motoren, Strahlung von Monitoren bei empfindlichen Apparaturen.
- Röntgenapparaturen



\Rightarrow Abschirmung der entsprechenden Bauteile

3) Koaxialkabel

Leiter welcher durch ein Drahtgeflecht abgeschirmt wird. Abschirmung muss richtig geerdet werden

4) Erdschleifen

Meiste Potenzialdifferenzen aufgrund von mehreren Erdungen in einem System

5) Methoden der Verbesserung \Rightarrow siehe oben

6)

3. Fragen zur Vorbereitung

- 1) Welche Arten von Rauschen gibt es und wodurch werden sie charakterisiert?
- 2) Welches sind die Hauptstörinflüsse aus der Umgebung? Wie können sie eliminiert werden?
- 3) Was ist ein Koaxialkabel und wozu dient es?
- 4) Was versteht man unter Erdschleifen?
- 5) Welche Methoden zur Signal/Rausch-Verbesserung gibt es? Diskutieren Sie ihre Anwendbarkeit.
- 6) Erläutern Sie ausführlich das Lock-In Verfahren.
- 7) Wie ist die Größe dB definiert? Was bedeutet 0dB, 10dB, 20dB und 60dB und wo tritt die charakteristische Größe 3dB auf?
- 8) Welches sind die Haupttypen von elektronischen Filtern? Nennen Sie Verwendungsmöglichkeiten zur Signal/Rausch-Verbesserung. Was gibt die Ordnung eines Filters an?
- 9) Was besagt das Abtasttheorem?
- 10) Erklären Sie kurz die Fourier- und die Fast-Fourier-Transformation und deren Unterschiede hinsichtlich Rechenaufwand.

6)

Die beiden Eingangssignale werden im Mischungsmischer miteinander multipliziert und anschließend in einem Tiefpass integriert. Der Lock-in-Verstärker berechnet also die Kreuzkorrelation zwischen dem Mess- und dem Referenzsignal für eine feste Phasenverschiebung $\Delta\phi$. Die Kreuzkorrelation für Signale unterschiedlicher Frequenz ist Null. Ist daher die Frequenz des Messsignals von der des Referenzsignals verschieden, liefert der Lock-in kein Ausgangssignal. Nur für gleiche Frequenzen liefert die Kreuzkorrelation einen Wert ungleich Null und damit einen Beitrag im Ausgangssignal des Lock-in-Verstärkers. Durch Wahl der passenden Frequenz der Referenz lässt sich also die entsprechende Komponente im Messsignal herausfiltern. Das Referenzsignal wird auf das Messsignal gelockt.

7) dB ≈ dezibel Leistungspegel L_p , Verhältnis zu Leistung P zu einer Bezugsleistung P_0 .

$$\Rightarrow L_p = 10 \log_{10} \left(\frac{P}{P_0} \right) \text{ dB} \quad \begin{aligned} 0 \text{ dB} &\Rightarrow P = P_0 \\ 10 \text{ dB} &\Rightarrow P = 10 P_0 \\ 20 \text{ dB} &\Rightarrow P = 100 P_0 \end{aligned} \quad \left. \begin{array}{l} 10^n P_0 \Rightarrow \\ \dots \end{array} \right\}$$

3dB ⇒ Verdopplungsschallquelle 1 Quelle + 1 Quelle ⇒ Anstieg von 3dB

8) Fürker ⇒ siehe oben

9) Abtasttheorem

Das Abtasttheorem besagt, dass ein auf f_{max} bandbegrenztes Signal aus einer Folge von äquidistanten Abtastwerten exakt rekonstruiert werden kann, wenn es mit einer Frequenz von größer als $2 \cdot f_{\text{max}}$ abgetastet wurde.

10) FT und DFT

FT ⇒ Funktionen

FFT ⇒ Algorithmus von DFT

The Fast Fourier Transform is a particularly efficient way of computing a DFT and its inverse by factorization into sparse matrices. The [wiki page](#) does a good job of covering it.

To answer your last question, let's talk about time and frequency. You are right in saying that the Fourier transform separates certain functions (the question of which functions is actually interesting) into their frequency components. For example, the function $f(t) = \cos(6\pi t)e^{-2\pi t}$ taken from Wiki has a Fourier transform with maxima corresponding to frequencies at 3 Hz (supposing we're in seconds).

But, imagine you had a more complex signal and you were interested not just in the frequency components, but *when* those components occurred in time. To localize in time, you'd need something like a [short-time Fourier transform](#) or "windowed" transform. Performing this transform produces a two-variable function in time and frequency. It looks like this

$$X(\omega, \tau) = \int_{\mathbb{R}} w(t - \tau) f(t) e^{-2\pi i \omega t} dt$$

The resolution that one can know the frequency depends on the width of the windowing function w . You might be interested to know how good the resolution can get. Unfortunately, because of the Uncertainty Principle, if we define the variance about zero of the function and its STFT as $D_0(f(t))$ and $D_0(\hat{f}(\omega))$. Then

$$D_0(f) D_0(\hat{f}) \geq \frac{1}{16\pi}.$$

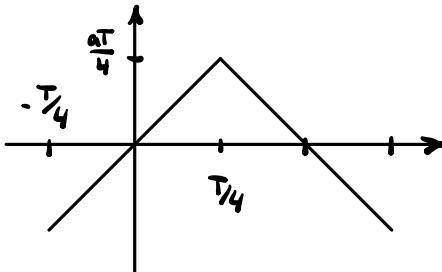
Hence, the resolution has some type minimum granularity.

However, there is a whole field of study devoted to improved time and frequency localization. If you are interested in transforms besides the FT and FFT, then you may want to investigate [wavelet](#) analysis. Wavelets in general have better time-frequency resolution than the FT since the "windows" they use are of variable width. In wavelet analysis, L^2 is broken up into a nested sequence of subspaces called a multiresolution analysis (MRA) each with a basis consisting of a special scaling function. From this construction, we can build a so-called mother wavelet whose various dilations and translations form a basis for all of L^2 . The ability to slide and stretch these functions and the diversity of possible mother wavelets yields many different ways of examining a signal in time and scale, beyond those offered by the traditional Fourier transform.

Fourier-Reihe

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(n\omega t) + b_n \sin(n\omega t)) \quad \left\{ \begin{array}{l} a_n = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \cos(n\omega t) dt \\ b_n = \frac{2}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(t) \sin(n\omega t) dt \end{array} \right. \Rightarrow \omega = \frac{2\pi}{T}$$

a) Dreiecksschwingung



$$y(t) = \begin{cases} at & ; -T/4 \leq t \leq T/4 \\ a(T/2 - t) & ; T/4 \leq t \leq 3T/4 \end{cases} \Rightarrow \text{Punktsym} \Rightarrow a_k = 0, L = T$$

$$b_n = \frac{2}{T} \int_{-T/4}^{3T/4} y(t) \sin(n\omega t) dt = \frac{2}{T} \int_{-T/4}^{T/4} at \sin(n\omega t) dt + \frac{2}{T} \int_{T/4}^{3T/4} a(T/2 - t) \sin(n\omega t) dt$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{T} \int_{-T/4}^{T/4} at \sin(n\omega t) dt + \frac{2}{T} \int_{T/4}^{3T/4} a(T/2 - t) \sin(n\omega t) dt - \frac{2}{T} \int_{T/4}^{3T/4} at \sin(n\omega t) dt \\ &= \frac{2}{T} \left(\underbrace{\int_{-T/4}^{T/4} at \sin(n\omega t) dt}_{(I)} - \underbrace{\int_{T/4}^{3T/4} at \sin(n\omega t) dt}_{(II)} \right) + \underbrace{\int_{T/4}^{3T/4} a \sin(n\omega t) dt}_{(III)} \end{aligned}$$

$$(I) : \left(-at \cos(n\omega t) \Big|_{-T/4}^{T/4} + at \cos(n\omega t) \Big|_{T/4}^{3T/4} \right) + \frac{a}{n\omega} \left(\int_{-T/4}^{T/4} \cos(n\omega t) dt - \int_{T/4}^{3T/4} \cos(n\omega t) dt \right)$$

$$= a \frac{T}{4} \frac{1}{n\omega} \left(-\cos(n \frac{\pi}{2}) - \cos(-n \frac{\pi}{2}) + 3 \cos(n \frac{3\pi}{2}) - \cos(n \frac{\pi}{2}) \right)$$

u ungerade = 0
u gerade = 0

$$\frac{a}{n\omega} \left(\int_{-T/4}^{T/4} \cos(n\omega t) dt - \int_{T/4}^{3T/4} \cos(n\omega t) dt \right)$$

nur ungerade u
 \downarrow
 $\Rightarrow u \rightarrow 2u-1$

$$= \frac{a}{n^2 \omega^2} \left(\sin(n\omega t) \Big|_{-T/4}^{T/4} - \sin(n\omega t) \Big|_{T/4}^{3T/4} \right) = \frac{a}{n^2 \omega^2} \left(\sin(n \frac{\pi}{2}) - \sin(-n \frac{\pi}{2}) - \sin(n \frac{3\pi}{2}) + \sin(n \frac{\pi}{2}) \right)$$

$$= \frac{a}{\omega^2} \frac{1}{(2u-1)^2} (-1)^{u-1} \cdot 4 = \boxed{\frac{aT^2}{4\pi^2} \frac{4(-1)^{u-1}}{(2u-1)^2}} \Rightarrow \boxed{b_u = \frac{8aT}{4\pi^2} \frac{(-1)^{u-1}}{(2u-1)^2}}$$

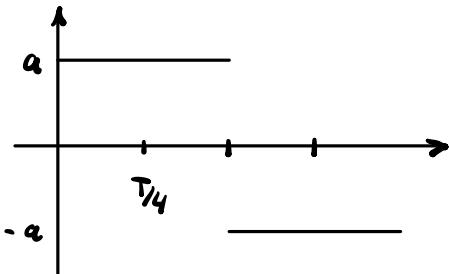
$$(II) - \frac{a}{n\omega} \cos(n\omega t) \Big|_{T/4}^{3T/4} = -\frac{a}{n\omega} (\cos(n \frac{3\pi}{2}) - \cos(n \frac{\pi}{2}))$$

u gerade = 0
u ungerade = 0

$$\Rightarrow f(x) = \boxed{\frac{8aT}{4\pi^2} \sum_{u=1}^{\infty} \frac{(-1)^{u-1}}{(2u-1)^2} \sin((2u-1) \frac{2\pi}{T} x)}$$

b) Rechteck-Schwingung

$$y(t) = \begin{cases} a & ; 0 \leq t \leq T/2 \\ -a & ; T/2 \leq t \leq T \end{cases}$$



⇒ Punkt-sym $a_u = 0$

$$\Rightarrow b_u = \frac{2}{T} \int_0^T y(t) \sin(uk\omega t) dt = \frac{2}{T} \left[\int_0^{T/2} a \sin(uk\omega t) dt - \int_{T/2}^T a \sin(uk\omega t) dt \right]$$

$$= \frac{2a}{T} \frac{1}{uk\omega} \left[-\cos(uk\omega t) \Big|_0^{T/2} + \cos(uk\omega t) \Big|_{T/2}^T \right]$$

$$= \frac{a}{\pi k} \left[-\cos(k\pi) + 1 + 1 - \cos(k\pi) \right] = \frac{2a}{\pi k} [1 - \cos(k\pi)] \Rightarrow u \text{ ungerade} \\ u \text{ gerade} = 0$$

$$\Rightarrow b_u = \frac{4a}{\pi} \frac{1}{(2u-1)}$$

$$\Rightarrow f(x) = \frac{4a}{\pi} \sum_{u=1}^{\infty} \frac{1}{2u-1} \sin((2u-1) \frac{2\pi}{T} t)$$

Effektiv-Spannungen

$$U_{eff} = \left[\frac{1}{T} \int_0^T f(t)^2 dt \right]^{1/2} \quad (\text{Root-Mean-Square, Quadratisches Mittel})$$

$$\Rightarrow U_{eff, sin} = \left[\frac{1}{T} \int_0^T u_0^2 \sin^2\left(\frac{2\pi}{T}t\right) dt \right]^{1/2} = \left[\frac{u_0^2}{T} \frac{\pi}{2\pi} \frac{\cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right) \sin\left(\frac{2\pi}{T}t\right) + \frac{2\pi}{T}t}{2} \Big|_0^T \right]^{1/2} \\ = \left[\frac{u_0^2}{2\pi} \frac{2\pi}{2} \right]^{1/2} = \frac{u_0}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow U_{eff, trapez} = \left[\frac{1}{T} \left(\int_{-T/4}^{T/4} (at)^2 dt + \int_{T/4}^{3T/4} a(\frac{T}{2}-t)^2 dt \right) \right]^{1/2} = \left[\frac{a^2}{T} \left(\int_{-T/4}^{T/4} t^2 dt + \int_{T/4}^{3T/4} (\frac{T}{2}-t)^2 dt \right) \right]^{1/2} \\ = \left[\frac{a^2}{3T} \left(\frac{T^3}{4} + \frac{T^3}{4} - \left[\left(\frac{T}{2} - \frac{3T}{4}\right)^3 - \left(\frac{T}{2} - \frac{T}{4}\right)^3 \right] \right) \right]^{1/2} \\ = \left[\frac{a^2}{3T} \left(\frac{T^3}{16} \right) \right]^{1/2} = \left[\frac{(aT)^2}{4} \frac{1}{3} \right]^{1/2} = \frac{u_0}{\sqrt{3}}$$

$$\Rightarrow U_{eff, sq} = \left[\frac{a^2}{T} \left(\int_0^{T/2} dt + \int_{T/2}^T dt \right) \right]^{1/2} = \left[\frac{a^2}{T} \left(\frac{T}{2} + \frac{T}{2} \right) \right]^{1/2} = \left[\frac{a^2}{T} \cdot T \right]^{1/2} = u_0$$

$$b_u = \frac{2}{T} \int_0^T \sin(m \frac{2\pi}{T} t) \sin(u \frac{2\pi}{T} t) dt =$$

$$= \frac{2}{T} \left[\frac{1}{m u} \cdot \cos\left(\frac{2\pi}{T} t\right) \sin\left(u \frac{2\pi}{T} t\right) \Big|_0^T + \frac{u}{m} \int_0^T \cos\left(\frac{2\pi}{T} t\right) \cos\left(u \frac{2\pi}{T} t\right) dt \right]$$

$$= \frac{2u}{Tm} \left[\int_0^T \cos\left(\frac{2\pi}{T} t\right) \cos\left(u \frac{2\pi}{T} t\right) dt \right]$$

$$= \frac{2u}{Tm} \left[\frac{1}{mu} \sin\left(\frac{2\pi}{T} t\right) \cos\left(u \frac{2\pi}{T} t\right) \Big|_0^T + \frac{u}{m} \int_0^T \sin\left(\frac{2\pi}{T} t\right) \sin\left(u \frac{2\pi}{T} t\right) dt \right]$$

$$\Leftrightarrow b_u = \sqrt{\frac{2u^2}{Tm^2}} = \sqrt{\frac{2}{T}} \frac{u}{m}$$