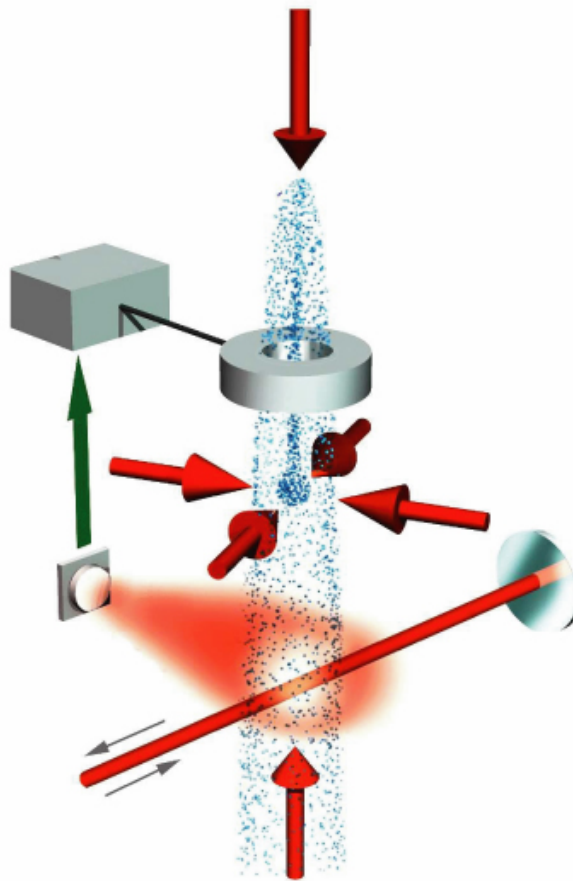


Licht-Atom Wechselwirkung im Zwei-Niveau System

*Prof. Immanuel Bloch,
Johannes-Gutenberg-Universität,
Atomphysik WS2003/04*

Datum: 4. Februar 2004



Besten Dank an Michael Wolf und Tatjana Gericke für das Korrekturlesen !

**Sie haben einen Fehler gefunden oder weitere Fragen ?
Schauen Sie einfach vorbei oder schreiben Sie mir: bloch@uni-mainz.de**

Inhaltsverzeichnis

1	Licht-Atom Wechselwirkungsoperator	3
1.1	<i>Dipolnäherung</i>	3
2	Grundgleichungen	5
3	Exakte Lösung ohne Dämpfung in der „Rotating-Wave-Approximation“	6
3.1	<i>Rabioszillationen</i>	7
3.1.1	<i>Pulsfläche</i>	7
3.1.2	<i>Rabioszillationen mit Verstimmung</i>	8
4	Dichtematrix Formalismus	10
4.1	<i>Optische-Bloch-Gleichungen</i>	12
4.2	<i>Gleichgewichtslösungen der OBE's</i>	15
5	Blochvektor	19
5.1	<i>Erwartungswert des Dipoloperators mit Blochvektoren</i>	19
5.2	<i>Optische-Bloch-Gleichungen mit Blochvektoren</i>	21
5.3	<i>Dynamik des Blochvektors bei resonanter Licht-Atom Wechselwirkung</i>	22
5.4	<i>Dynamik des Blochvektors bei nicht-resonanter Licht-Atom Wechselwirkung</i>	23
6	Atomuhren	24
6.1	<i>Wie können wir den Takt der Atome aufnehmen?</i>	24
6.2	<i>Die Ramsey Methode</i>	25
6.3	<i>Moderne Atomuhren (Atomare Springbrunnen “Atomic Fountain Clocks”)</i>	28
7	Auswahlregeln für optische Dipolübergänge	31
7.1	<i>Auswahlregeln aufgrund der Parität der Quantenzustände</i>	32

Grundlage zur Beschreibung der Licht-Atom Wechselwirkung ist der Hamiltonoperator $\hat{H}$ des Systems. Er setzt sich aus dem Hamiltonoperator des freien Atoms $\hat{H}_{at}$ und dem Licht-Atom Wechselwirkungsanteil $\hat{V}$ zusammen:

$$\hat{H} = \hat{H}_{at} + \hat{V} \quad (0.1)$$

Das Atom stellen wir uns dabei vereinfacht als ein „Zwei-Niveau-System“ vor, d.h. es gibt einen Grundzustand $|1\rangle$ sowie einen angeregten Zustand $|2\rangle$, die durch eine Energiedifferenz $\Delta E_{21} = \hbar(\omega_2 - \omega_1) = \hbar\omega_{21}$ voneinander getrennt sind. Mit diesem Zwei-Niveau Atom soll ein monochromatisches Lichtfeld der Kreisfrequenz $\omega_L = 2\pi \times \nu_L$ wechselwirken.

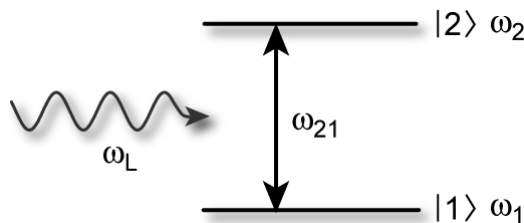


Abbildung 1 Für die Licht-Atom Wechselwirkung reduzieren wir das Atom auf zwei Zustände, mit denen das Lichtfeld der Frequenz $\omega_L/2\pi$ wechselwirkt. Dies ist meistens eine gute Näherung wenn eine nahresonante Wechselwirkung vorliegt, d.h. $\omega_{21} \approx \omega_L$, da die Kopplung zwischen anderen Energiezuständen aufgrund deren großer Verstimmung vernachlässigt werden kann.

1 Licht-Atom Wechselwirkungsoperator

Für ein Teilchen mit einem Dipolmoment in einem externen elektrischen Feld ergibt sich eine Wechselwirkungsenergie von $V = -\vec{d} \cdot \vec{E}$. In unserem Fall ist das externe elektrische Feld nicht statisch, sondern wird durch das oszillierende elektrische Feld $\vec{E}(\vec{r}, t)$ eines Lichtfeldes beschrieben.

1.1 Dipolnäherung

In dem hier betrachteten Fall ist die Wellenlänge des Lichts im sichtbaren Bereich wesentlich größer als die Ausdehnung eines einzelnen Atoms. Die räumliche Veränderung des elektrischen Feldes über das Atom hinweg können wir daher in erster Ordnung vernachlässigen und das elektrische Feld am Ort $\vec{R}$ des Atoms auswerten:

$$E(\vec{r}, t) \sim E(\vec{R}, t) = \vec{E}(t) \quad (1.1)$$

Diese Näherung bezeichnet man als **elektrische Dipolnäherung** (siehe Abbildung 2).

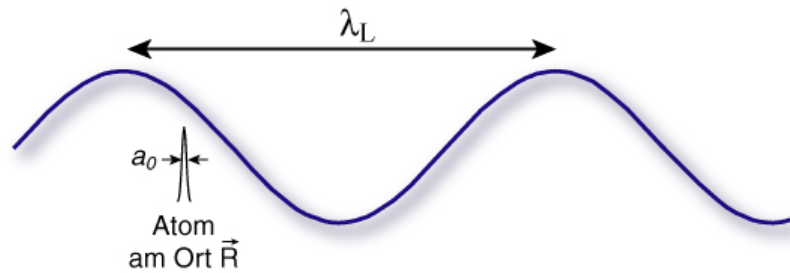


Abbildung 2 Elektrische-Dipolnäherung. Ein Atom am Ort $\vec{R}$ besitzt eine Ausdehnung der Elektronenwolke, die in der Größenordnung des Bohr'schen Radius a_0 liegt. Dies ist jedoch nahezu einen Faktor 10000 kleiner als die Wellenlänge des Lichtfeldes mit dem das Atom wechselwirkt (siehe Abbildung, nicht maßstäblich). Daher ist das elektrische Feld am Ort des Elektrons in sehr guter Näherung gegeben durch $\vec{E}(\vec{r}, t) \approx \vec{E}(\vec{R}, t)$.

In unseren weiteren Betrachtungen soll das Atom seinen Ort während der Licht-Atom Wechselwirkung nicht ändern. Wir können dann die Abhängigkeit des elektrischen Feldes von der Ortskoordinate des Atoms unterdrücken. Das oszillierende elektrische Feld eines Lichtstrahls am Ort des Atoms können wir dann beschreiben als:

$$\vec{E}(t) = \vec{\varepsilon} E_0 \cos(\omega_L t) \quad (1.2)$$

Hierbei ist $\vec{\varepsilon}$ der auf 1 normierte Polarisationsvektor, E_0 die Amplitude und ω_L die Kreisfrequenz des Lichtfeldes.

Damit lässt sich der Licht-Atom Wechselwirkungsoperator schreiben als:

$$V = -\vec{d} \cdot \vec{E}(t) \quad (1.3)$$

mit dem elektrischen Dipoloperator $\vec{d} = -e \vec{r}$.

2 Grundgleichungen

Ziel ist die zeitliche Entwicklung eines beliebigen Zustandsvektors im Zwei-Niveau Atom unter einer Lichteinwirkung voraussagen zu können. Dazu erinnern wir uns, dass in der Schrödinger-Theorie die zeitliche Entwicklung eines Zustandsvektors durch die zeitabhängige Schrödingergleichung beschrieben wird:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = H \psi(r, t) = (H_{at} + V) \psi(r, t)} \quad (2.1)$$

Dazu setzen wir die Wellenfunktion allgemein an mit:

$$\psi(\vec{r}, t) = c_1(t) e^{-i\omega_1 t} u_1(\vec{r}) + c_2(t) e^{-i\omega_2 t} u_2(\vec{r}). \quad (2.2)$$

Hierbei beschreiben $c_1(t)$ und $c_2(t)$ die zeitabhängigen Amplituden der beiden stationären Eigenfunktionen $u_1(\vec{r})$ und $u_2(\vec{r})$. Einsetzen von (2.2) in (2.1) und Bildung des Skalarprodukts von links mit $e^{-i\omega_j t} u_j(\vec{r})$ liefert die beiden Gleichungen für die zeitabhängigen Koeffizienten $c_1(t)$ und $c_2(t)$.

$$\begin{aligned} \dot{c}_1(t) &= i \frac{d_{12}^\varepsilon E_0}{\hbar} e^{-i\omega_{21} t} \cos(\omega_L t) c_2(t) \\ \dot{c}_2(t) &= i \frac{d_{21}^\varepsilon E_0}{\hbar} e^{i\omega_{21} t} \cos(\omega_L t) c_1(t) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Hierbei ist $d_{21}^\varepsilon = \langle 2 | \vec{d} | 1 \rangle \cdot \vec{\varepsilon} = \int u_2^*(\vec{r}) \vec{d} u_1(\vec{r}) d^3r \cdot \vec{\varepsilon}$ die Projektion des Dipolmatrixelements auf den Polarisationsvektor.

Das Dipolmatrixelement

$$\boxed{\vec{d}_{21} = \langle 2 | \vec{d} | 1 \rangle}$$

gibt dabei die Kopplungsstärke des Übergangs an. Verschwindet das Dipolmatrixelement, so ist dieser Übergang verboten!

3 Exakte Lösung ohne Dämpfung in der „Rotating-Wave-Approximation“

Im Folgenden wollen wir das Dipolmatrixelement $d_{21}^e = d$ abkürzen. Wir führen außerdem die wichtige Größe der **resonanten Rabi-Frequenz** ein:

$$\boxed{\Omega_0 = \frac{dE_0}{\hbar}}. \quad (3.1)$$

Damit lassen sich die Grundgleichungen (2.3) als:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1(t) &= i\Omega_0 e^{-i\omega_{21}t} \cos(\omega_L t) c_2(t) \\ \dot{c}_2(t) &= i\Omega_0 e^{i\omega_{21}t} \cos(\omega_L t) c_1(t) \end{aligned} \quad (3.2)$$

schreiben. Für den zeitlich oszillierenden Term des Lichtfeldes benutzen wir die Eulerformel $\cos(\omega_L t) = 1/2(e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t})$ und setzen diese in Gleichung (3.2) ein. Damit erhalten wir:

$$\begin{aligned} \dot{c}_1(t) &= i\frac{\Omega_0}{2} e^{-i\omega_{21}t} (e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t}) c_2(t) \\ \dot{c}_2(t) &= i\frac{\Omega_0}{2} e^{i\omega_{21}t} (e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t}) c_1(t) \end{aligned} \quad (3.3)$$

was nach Zusammenfassung

$$\begin{aligned} \dot{c}_1(t) &= i\frac{\Omega_0}{2} (e^{i(\omega_L - \omega_{21})t} + e^{-i(\omega_L + \omega_{21})t}) c_2(t) \\ \dot{c}_2(t) &= i\frac{\Omega_0}{2} (e^{-i(\omega_L - \omega_{21})t} + e^{i(\omega_L + \omega_{21})t}) c_1(t) \end{aligned} \quad (3.4)$$

ergibt.

Da wir eine nahresonante Licht-Atom Kopplung annehmen, ist $\omega_L \approx \omega_{21}$. Die Terme mit $\omega_{21} + \omega_L$ sind daher schnell oszillierend und tragen kaum zu einer Kopplung im Zwei-Niveau System bei. Wir vernachlässigen sie dabei in der weiteren Betrachtung. Diese Näherung bezeichnet man im Englischen auch als „**Rotating-Wave-Approximation**“.

Definieren wir noch zusätzlich die Verstimmung der Lichtfrequenz gegenüber der atomaren Resonanzfrequenz durch $\delta = \omega_L - \omega_{21}$, so ergibt sich aus Gleichung (3.4):

$$\boxed{\begin{aligned} \dot{c}_1(t) &= i\frac{\Omega_0}{2} e^{i\delta t} c_2(t) \\ \dot{c}_2(t) &= i\frac{\Omega_0}{2} e^{-i\delta t} c_1(t) \end{aligned}} \quad (3.5)$$

Wir wollen nun auch den zeitabhängigen Verstimmungsterm in der obigen Gleichung eliminieren und führen dazu neue Koeffizienten ein:

$$\begin{aligned}\tilde{c}_1(t) &= c_1(t) e^{-i\delta/2t} \\ \tilde{c}_2(t) &= c_2(t) e^{i\delta/2t}\end{aligned}\tag{3.6}$$

Nachdem wir uns in Gleichung (0.1) in ein rotierendes „Bezugssystem“ mit den Eigenfrequenzen des atomaren Systems transformiert hatten, bewirkt die zusätzliche Transformation aus Gleichung (3.6) einen Übergang in ein rotierendes „Bezugssystem“ mit der Laserfrequenz ω_L ! Damit erhalten wir folgendes Differenzial-Gleichungssystem für die neuen Koeffizienten:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \end{pmatrix} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} -\delta & \Omega_0 \\ \Omega_0 & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{c}_1(t) \\ \tilde{c}_2(t) \end{pmatrix}\tag{3.7}$$

3.1 Rabioszillationen

Betrachten wir zunächst die einfachste Lösung dieser DGL für den Fall einer resonanten Licht-Atom Kopplung, d.h. $\delta=0$. Durch nochmaliges Differenzieren von (3.7) und Ersetzen der einfachen Ableitungen, erhalten wir z.B. für $\tilde{c}_1(t)$:

$$\ddot{\tilde{c}}_1(t) = -\frac{\Omega_0^2}{4} \tilde{c}_1(t).\tag{3.8}$$

Für die Anfangsbedingung, dass sich zum Zeitpunkt $t=0$ die ganze atomare Besetzung im Zustand $|1\rangle$ befindet, also $\tilde{c}_1(0)=1$ und $\tilde{c}_2(0)=0$, ergeben sich folgende Lösungen:

$$\begin{aligned}\tilde{c}_1(t) &= \cos(\Omega_0/2t) \\ \tilde{c}_2(t) &= i \sin(\Omega_0/2t)\end{aligned}\tag{3.9}$$

Für die Besetzungen des Grund- und angeregten Zustands erhalten wir damit:

$$\boxed{\begin{aligned}|\tilde{c}_1(t)|^2 &= \cos^2(\Omega_0 t/2) = \frac{1}{2} \{1 + \cos(\Omega_0 t)\} \\ |\tilde{c}_2(t)|^2 &= \sin^2(\Omega_0 t/2) = \frac{1}{2} \{1 - \cos(\Omega_0 t)\}\end{aligned}}\tag{3.10}$$

- Das System oszilliert zwischen dem Grund- und dem angeregten Zustand mit der resonanten Rabifrequenz hin und her.
- Dies ist eine stark **nichtlineare Dynamik**! Damit meinen wir, dass bei einer linearen Erhöhung der Intensität eines Lichtfeldes die Besetzung des angeregten Zustandes nicht linear ansteigt sondern das System hier starke Oszillationen ausführt.

3.1.1 Pulsfläche

Schaltet man das Lichtfeld mit einer Rabikopplung Ω_0 für eine Zeit τ ein, so ist es oft sinnvoll die Wirkung des Lichtfeldes durch die Pulsfläche A zu charakterisieren:

$$\boxed{A = \Omega_0 \cdot \tau} \quad (3.11)$$

Zwei wichtige Lichtpulse werden sehr oft eingesetzt:

- **Pi-Halbe-Puls $A=\pi/2$**
Startet man mit einem Atom im Grundzustand, so erzeugt ein Pi-Halbe-Puls eine kohärente Überlagerung zwischen dem Grund- und angeregten Zustand. Dieser Zustand besitzt ein oszillierendes maximales Dipolmoment. Man setzt ihn sehr oft bei Atomuhren ein, um z.B. eine Oszillation des Atoms anzuregen.
- **Pi-Puls $A=\pi$**
Ein Atom im Grundzustand kann durch einen Pi-Puls komplett in den angeregten Zustand gebracht werden. Umgekehrt kann ein Atom im angeregten Zustand komplett in den Grundzustand überführt werden. Allgemein werden unter der Einwirkung eines Pi-Pulses die Amplituden zwischen den Zuständen $|1\rangle$ und $|2\rangle$ getauscht.

3.1.2 Rabioszillationen mit Verstimmung

Für den allgemeinen Fall mit Verstimmung lässt sich Gleichung (3.7) auch exakt lösen. Hier sei der Vollständigkeit halber nur die Lösung angeben:

$$\begin{aligned} \tilde{c}_1(t) &= i \frac{\Omega_0}{\Omega} \sin(\Omega/2 t) \tilde{c}_2(0) + \left\{ \cos(\Omega/2 t) - i \frac{\delta}{\Omega} \sin(\Omega/2 t) \right\} \tilde{c}_1(0) \\ \tilde{c}_2(t) &= i \frac{\Omega_0}{\Omega} \sin(\Omega/2 t) \tilde{c}_1(0) + \left\{ \cos(\Omega/2 t) + i \frac{\delta}{\Omega} \sin(\Omega/2 t) \right\} \tilde{c}_2(0) \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dabei haben wir die **verallgemeinerte Rabifrequenz** eingeführt:

$$\boxed{\Omega = \sqrt{\delta^2 + \Omega_0^2}} \quad (3.13)$$

Für den Spezialfall einer anfänglichen Grundzustandsbesetzung $\tilde{c}_1(0)=1$ und $\tilde{c}_2(0)=0$ ergibt sich folgende Zeitentwicklung der Besetzung des angeregten Zustands:

$$\boxed{|\tilde{c}_2(t)|^2 = \frac{\Omega_0^2}{\Omega^2} \sin^2\left(\frac{1}{2}\Omega t\right) = \frac{\Omega_0^2}{2\Omega^2} \{1 - \cos(\Omega t)\}} \quad (3.14)$$

Achtung: Gegenüber den resonanten Rabi-Oszillationen ergeben sich hierbei folgende wichtige Veränderungen:

- Die Frequenz der Rabi-Oszillationen wird nun durch die verallgemeinerte Rabifrequenz bestimmt. Diese ist immer größer als die resonante Rabifrequenz!
- Die Amplitude der Rabi-Oszillationen ist nicht mehr vollständig von 0 bis 1 durchmoduliert sondern wird durch das Verhältnis von resonanter zu verallgemeinerter Rabifrequenz bestimmt!

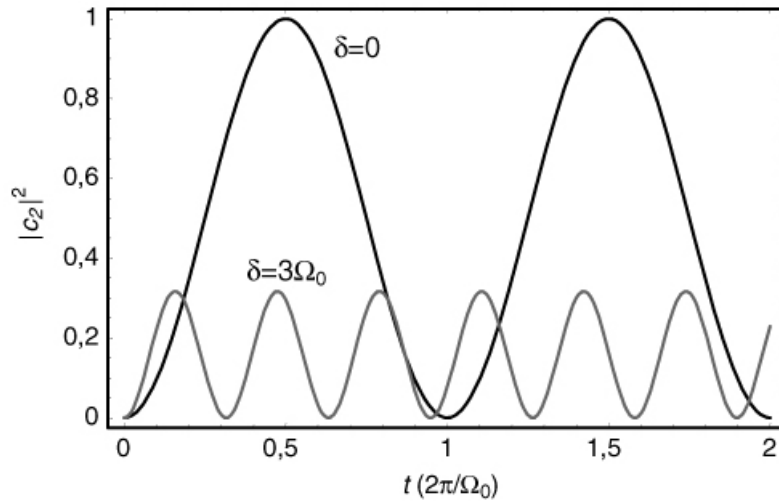


Abbildung 3 Rabi-Oszillationen. Im Fall ohne spontane Emission führt das Zwei-Niveau-System unter Lichteinwirkung Oszillationen zwischen dem Grund- und angeregten Zustand durch. Im Falle einer resonanten Licht-Atom Wechselwirkung ($\delta = 0$) sind diese Oszillationen voll durchmoduliert und finden mit der resonanten Rabifrequenz Ω_0 statt. Im Falle einer Verstimmung ($\delta \neq 0$) sinkt die Modulation der Rabioszillationen und gleichzeitig steigt die Frequenz der Rabioszillationen auf $\Omega = \sqrt{\delta^2 + \Omega_0^2}$.

4 Dichtematrix Formalismus

Bisher haben wir die Auswirkungen der endlichen Lebensdauer des angeregten Zustands auf die Dynamik des Zwei-Niveau-Systems vollkommen vernachlässigt. Der Zerfall des angeregten Zustands in den Grundzustand unter Aussendung eines Photons bezeichnet man als spontane Emission. Solche spontanen Emissionsprozesse können jedoch nicht konsistent mithilfe der Schrödingergleichung behandelt werden, da diese nur die Beschreibung **reiner Zustände** erlaubt! Es kann jedoch vorkommen, dass wir experimentell nicht in der Lage sind solche reinen Quantenzustände zu präparieren oder dass spontane Emissionsprozesse zu einer statistischen Überlagerung zweier Quantenzustände führen.

Was meinen wir damit?

- a) Betrachten wir dazu den reinen Quantenzustand $\Psi(\vec{r}, t) = c_1 e^{-i\omega_1 t} u_1(\vec{r}) + c_2 e^{-i\omega_2 t} u_2(\vec{r})$. Das System befindet sich dann in einer **kohärenten Überlagerung** der beiden Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$. Hierbei handelt es sich um einen perfekt präparierten Quantenzustand. In einem Experiment zur Messung der Besetzung der Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ würden wir finden, dass sich das System mit der Wahrscheinlichkeit $|c_1|^2$ im Zustand $|1\rangle$ und $|c_2|^2$ im Zustand $|2\rangle$ befindet.
- b) Jetzt kann es jedoch sein, dass wir experimentell nicht in der Lage sind einen reinen Quantenzustand zu präparieren. Es könnte z.B. der Fall auftreten, dass wir das atomare System mit 50% Wahrscheinlichkeit im Zustand $|1\rangle$ und 50% im Zustand $|2\rangle$ erzeugen. Dies bezeichnet man als eine **inkohärente Überlagerung** oder ein **statistisches Gemisch/Überlagerung** der beiden Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$.

Wichtig: Eine solche inkohärente Überlagerung unterscheidet sich fundamental von der kohärenten Überlagerung und kann nicht mehr mithilfe der Schrödinger-Theorie beschrieben werden!

Hier schafft die Dichtematrix Abhilfe! Sie ist in der Lage sowohl kohärente als auch inkohärente Überlagerungszustände oder Gemische aus beiden zu beschreiben. Dies benötigen wir, um den spontanen Zerfall, der inkohärente Überlagerungen erzeugt, mit beschreiben zu können.

Betrachten wir die Dichtematrix in den beiden Grenzfällen

1. **Reiner Quantenzustand** - In diesem Fall ist die Dichtematrix gegeben durch:

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

Die Nicht-Diagonalelemente bezeichnet man als „Kohärenzen“ des Systems. Sie ergeben sich nur für kohärente Überlagerungszustände!

Wie lässt sich dies intuitiv verstehen? Unser kohärenter Überlagerungszustand lässt

sich auch schreiben als: $\Psi(\vec{r}, t) = |c_1| e^{-i\omega_1 t} u_1(\vec{r}) + |c_2| e^{i\varphi} e^{-i\omega_2 t} u_2(\vec{r})$. Die Phase φ zwischen den beiden Quantenzuständen $|1\rangle$ und $|2\rangle$ ist also konstant und im Experiment kontrolliert. Würde die Phase in jeder Einzelrealisierung eines Experiments jedoch zwischen $(0, 2\pi)$ fluktuieren und nicht mehr kontrollierbar sein, so würde der Mittelwert der Nebendiagonalelemente verschwinden $\rho_{12} = \langle |c_1| |c_2| e^{-i\varphi} \rangle_{0, 2\pi} = 0$.

Für den Spezialfall eines reinen Quantenzustands mit $c_{1,2} = 1/\sqrt{2}$ ergibt sich die Dichtematrix des Systems zu:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$$

2. **Vollständig inkohärente Überlagerung** - In diesem Fall ist die Dichtematrix gegeben durch:

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 \\ 0 & \rho_{22} \end{pmatrix}$$

und ρ_{11} , ρ_{22} geben die Wahrscheinlichkeiten an, den Zustand $|1\rangle$ oder $|2\rangle$ präpariert zu haben. Im Spezialfall einer 50% Wahrscheinlichkeit zur Erzeugung von Zustand $|1\rangle$ und 50% Wahrscheinlichkeit für Zustand 2 erhalten wir:

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix}$$

Beachten Sie, dass im Falle der inkohärenten Überlagerung die Phasen zwischen den Zuständen $|1\rangle$ und $|2\rangle$ nicht kontrolliert sind und dadurch die Nebendiagonalelemente verschwinden!

Wie können wir im Experiment zwischen einer vollständig kohärenten und vollständig inkohärenten Überlagerung unterscheiden?

Betrachten wir dazu wieder unser Beispielsystem $\Psi(\vec{r}, t) = 1/\sqrt{2} (|1\rangle + i|2\rangle)$ als kohärenten Überlagerungszustand und den entsprechenden inkohärenten Überlagerungszustand, der durch den Dichteoperator $\hat{\rho} = \frac{1}{2} |1\rangle\langle 1| + \frac{1}{2} |2\rangle\langle 2|$ beschrieben wird. Im ersten Fall es ist möglich, durch einen geeigneten $\pi/2$ -Puls das System vollständig in die Eigenzustände $|1\rangle$ oder $|2\rangle$ zu überführen. Dies ist jedoch für einen inkohärenten Überlagerungszustand nicht möglich! Generell können wir sagen, dass ein kohärenter Überlagerungszustand immer durch einen geeigneten unitären Zeitentwicklungsoperator in einen Eigenzustand überführt werden kann. Für eine inkohärente Überlagerung ist dies nicht möglich.

Fassen wir zum Schluss noch einmal die Bedeutung der einzelnen Matrixelemente der Dichtematrix zusammen:

Matrixelement	Bezeichnung	Bedeutung
ρ_{11}, ρ_{22}	Populationen	Gibt die Wahrscheinlichkeit an das System im Zustand $ 1\rangle$ bzw. $ 2\rangle$ zu finden
ρ_{12}, ρ_{21}	Kohärenzen	Verschwanden sie, so sind die Phasen zwischen den Zuständen $ 1\rangle$ und $ 2\rangle$ vollständig undefiniert!

Befindet sich das System mit einer statistischen Wahrscheinlichkeit p_k im Quantenzustand $|\psi_k\rangle$, so ergibt sich der Dichteoperator zu:

$$\hat{\rho} = \sum p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad (4.2)$$

Die entsprechenden Dichtematrixelemente ρ_{ij} ergeben sich dann zu:

$$\rho_{ij} = \langle i | \hat{\rho} | j \rangle \quad (4.3)$$

4.1 Optische-Bloch-Gleichungen

Wie kann die Zeitentwicklung der Dichtematrixelemente berechnet werden? Allgemein gilt für den Dichteoperator im Fall ohne Dämpfung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho} = [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (4.4)$$

Aus dieser Grundgleichung für den Dichteoperator können dann die entsprechenden DGLs für die einzelnen Dichtematrixelemente abgeleitet werden.

Wir können aber auch die Zeitentwicklung der Dichtematrixelemente ohne spontane Emission aus der Schrödingergleichung ableiten. Es gilt z.B. für ρ_{11} :

$$\frac{d}{dt} \rho_{11} = \frac{d}{dt} (c_1 c_1^*) = \dot{c}_1 c_1^* + c_1 \dot{c}_1^* \quad (4.5)$$

Verwenden wir das Ergebnis aus (3.5), so erhalten wir:

$$\frac{d}{dt} \rho_{11} = i \frac{\Omega_0}{2} (e^{i\delta t} \rho_{21} - e^{-i\delta t} \rho_{12}) \quad (4.6)$$

Wir definieren uns nun die neuen Dichtematrixkoeffizienten:

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{12} &= e^{-i\delta t} \rho_{12} \\ \tilde{\rho}_{21} &= e^{i\delta t} \rho_{21}\end{aligned}\tag{4.7}$$

und erhalten:

$$\frac{d}{dt} \rho_{11} = i \frac{\Omega_0}{2} (\tilde{\rho}_{21} - \tilde{\rho}_{12})\tag{4.8}$$

Achtung: Mit dieser Transformation befinden wir uns nun in einem Koordinatensystem, das mit der Lichtfrequenz ω_L oszilliert. Genauer gesagt meinen wir damit, dass wir die Zeitentwicklung auf Frequenzen der Lichtfrequenz bereits absepariert haben und uns nur die langsame Entwicklung der Dichtematrixkoeffizienten interessiert.

Analog erhalten wir auch die Differenzialgleichungen für die weiteren Dichtematrixelemente:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \rho_{11} &= i \frac{\Omega_0}{2} (\tilde{\rho}_{21} - \tilde{\rho}_{12}) \\ \frac{d}{dt} \rho_{22} &= i \frac{\Omega_0}{2} (\tilde{\rho}_{12} - \tilde{\rho}_{21}) \\ \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{12} &= -i\delta \tilde{\rho}_{12} + i \frac{\Omega_0}{2} (\rho_{22} - \rho_{11}) \\ \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{21} &= +i\delta \tilde{\rho}_{21} + i \frac{\Omega_0}{2} (\rho_{11} - \rho_{22})\end{aligned}\tag{4.9}$$

Nun können wir diesen Gleichungen die Wirkung der spontanen Emission hinzufügen. Da dabei Population aus dem angeregten Zustand verloren geht, ergibt sich eine Dämpfung der Nebendiagonalelemente mit der Rate $\gamma/2$ und der Population im angeregten Zustand mit γ :

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \rho_{11} &= +\gamma \rho_{22} + i \frac{\Omega_0}{2} (\tilde{\rho}_{21} - \tilde{\rho}_{12}) \\ \frac{d}{dt} \rho_{22} &= -\gamma \rho_{22} + i \frac{\Omega_0}{2} (\tilde{\rho}_{12} - \tilde{\rho}_{21}) \\ \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{12} &= -(\gamma/2 + i\delta) \tilde{\rho}_{12} + i \frac{\Omega_0}{2} (\rho_{22} - \rho_{11}) \\ \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{21} &= -(\gamma/2 - i\delta) \tilde{\rho}_{21} + i \frac{\Omega_0}{2} (\rho_{11} - \rho_{22})\end{aligned}\tag{4.10}$$

Diese Gleichungen bezeichnet man auch als **Optische-Bloch-Gleichungen (im englischen Optical-Bloch-Equations, kurz OBE's)**, die der Physik Nobelpreisträger Felix Bloch zuerst in der Kernspinresonanz entwickelt hat.

Wie sich aus Gleichung (4.10) leicht zeigen lässt, gilt:

$$\frac{d}{dt} \rho_{11} = -\frac{d}{dt} \rho_{22} \Rightarrow \rho_{11} + \rho_{22} = \text{const.} = 1$$

Außerdem gilt für die Dichtematrixelemente $\rho_{12} = \rho_{21}^*$! Damit sind die vier Gleichungen in (4.10) nicht mehr unabhängig voneinander und man kann die OBE's reduzieren auf:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{21} &= -(\gamma/2 - i\delta) \tilde{\rho}_{21} - \frac{i w \Omega_0}{2} \\ \frac{d}{dt} w &= -\gamma(w+1) - i\Omega_0(\tilde{\rho}_{21} - \tilde{\rho}_{12}) \end{aligned} \quad (4.11)$$

Hierbei haben wir die so genannte **Inversion** w eingeführt, die die Besetzungsdifferenz zwischen angeregtem Zustand und dem Grundzustand beschreibt.

$$w = \rho_{22} - \rho_{11} \quad (4.12)$$

Die Optischen-Bloch-Gleichungen beschreiben im Rahmen der Rotating-Wave-Approximation vollständig die Licht-Atom Wechselwirkung inklusive des Effekts der spontanen Emission! Ihre Lösung ist nicht ganz einfach und die Dynamik des Systems teilt sich im Wesentlichen in zwei Zeitbereiche auf (siehe auch Abbildung 4).

1. $t \ll 1/\gamma$

Für diese Zeiten hat die durch die spontane Emission eingeführte Dämpfung nahezu keinen Effekt und man beobachtet Rabioszillationen, wenn $\Omega > 1/\gamma$.

2. $t \gg 1/\gamma$

Für lange Zeiten stellt sich aufgrund der Dämpfung des Systems (verursacht durch die spontane Emission) eine Gleichgewichtslösung ein, bei der sich die Dichtematrixkoeffizienten nicht mehr verändern!

Aber Achtung: für Zwei-Niveau Systeme mit sehr schwacher Dämpfung (γ sehr klein), kann es sehr lange dauern, bis diese Gleichgewichtslösung erreicht wird!

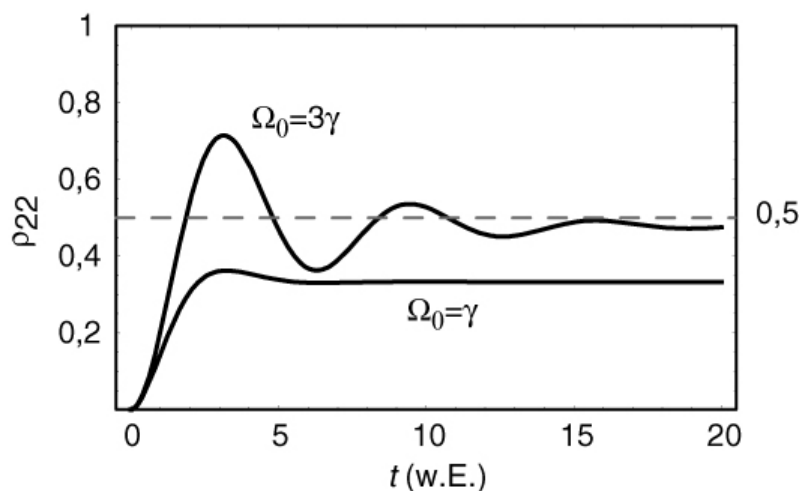


Abbildung 4 Numerische Lösung der Optischen-Bloch-Gleichungen mit Dämpfung. Für kurze Zeit kann das atomare System Rabioszillationen zeigen, für längere Zeiten stellt sich

jedoch eine Gleichgewichtslösung ein. Die obigen Rechnungen wurden für den Fall auf Resonanz ($\delta = 0$) durchgeführt.

4.2 Gleichgewichtslösungen der OBE's

Die Gleichgewichtslösungen für die Dichtematrixelemente erhalten wir einfach, in dem wir fordern, dass:

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}_{21} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{d}{dt} w = 0 \quad (4.13)$$

Aus den Optischen-Bloch-Gleichungen erhalten wir in diesem Fall

$$\boxed{\begin{aligned} w &= -\frac{1}{1+S} \\ \tilde{\rho}_{21} &= \frac{i\Omega_0}{2(\gamma/2 - i\delta)(1+S)} \end{aligned}} \quad (4.14)$$

Hierbei haben wir den **Sättigungsparameter S** eingeführt:

$$\boxed{S = \frac{\Omega_0^2/2}{\delta^2 + \gamma^2/4} = \frac{S_0}{1 + 4\delta^2/\gamma^2} \quad \text{und} \quad S_0 = \frac{2\Omega_0^2}{\gamma^2}} \quad (4.15)$$

S_0 bezeichnet man hierbei auch als **resonanten Sättigungsparameter**, da für $\delta=0$ gilt $S_0 = S$.

Der Sättigungsparameter ist einer der wichtigsten Parameter der Licht-Atom Wechselwirkung und beschreibt das Verhältnis aus Rabifrequenz zur Dämpfungsrate des atomaren Systems.

Wir möchten diesen Sättigungsparameter nun direkter in experimentell relevanten Größen, wie Laserintensität I , Lebensdauer des angeregten Zustands $\tau=1/\gamma$ und Wellenlänge des optischen Übergangs λ ausdrücken.

Wir erinnern uns dazu, dass wir die Zerfallsrate des angeregten Zustands mit dem Dipolmatrixelement d des atomaren Übergangs in Verbindung setzen konnten:

$$\boxed{\gamma = A = \frac{d^2 \omega_{21}^3}{3\pi \epsilon_0 \hbar c^3}} \quad (4.16)$$

Außerdem gilt für die Rabifrequenz und die Intensität des eingestrahnten Lichts:

$$\Omega_0 = \frac{d E_0}{\hbar} \quad \text{und} \quad I = \frac{1}{2} c \epsilon_0 E_0^2 \quad (4.17)$$

Mit (4.17) und (4.16) in Gleichung (4.15) erhalten wir für den resonanten Sättigungsparameter

$$S_0 = \frac{I}{I_{sat}} \quad \text{mit} \quad I_{sat} = \frac{\pi \hbar c}{3\lambda^3 \tau} \quad (4.18)$$

I_{sat} bezeichnet man hierbei als Sättigungsintensität des Übergangs. Er ist charakteristisch für jeden atomaren Übergang. Für typische optische Übergänge in Alkaliatomen erhält man:

$$I_{sat} \sim 1-10 \text{ mW/cm}^2.$$

Betrachten wir zwei interessante Grenzfälle des Sättigungsparameters:

- Für $S \ll 1 \Rightarrow w \sim -1$
Die Besetzung des Atoms befindet sich hauptsächlich im Grundzustand.
- Für $S \gg 1 \Rightarrow w \sim 0$
Das Atom nähert sich immer mehr einer 50/50 Besetzung des Grund- und angeregten Zustands an.

Wichtig: Für die Gleichgewichtslösungen kann im Fall des Zwei-Niveau Systems nie eine Besetzungsinversion erreicht werden! Für hohe Laserintensitäten nähert sich die Gleichgewichtslösung einer Gleichbesetzung der beiden Zustände an.

Besetzung des angeregten Zustands

Aus der Formel für die Inversion erhalten wir:

$$w = \rho_{22} - \rho_{11} \Rightarrow \rho_{22} = w + \rho_{11} = w + (1 - \rho_{22}) \quad (4.19)$$

und damit für ρ_{22} :

$$\rho_{22} = \frac{1}{2}(1+w) = \frac{S}{2(1+S)} = \frac{S_0/2}{1+S_0+4\delta^2/\gamma^2} \quad (4.20)$$

Photonenstreureate

Wie groß ist die Rate, mit der Photonen an einem Atom gestreut werden können? Dies ergibt sich einfach aus der Rate γ mit der ein einzelnes Atom aus dem angeregten Zustand in den Grundzustand zerfällt (erst dann kann es ja wieder angeregt werden) multipliziert mit der Wahrscheinlichkeit ρ_{22} ein Atom im angeregten Zustand vorzufinden.

$$\Gamma_{ph} = \gamma \rho_{22} = \frac{\gamma}{2} \frac{S_0}{1+S_0+4\delta^2/\gamma^2} \quad (4.21)$$

Für $S_0 \rightarrow \infty$ sehen wir, dass die Photonenstreureate nach oben begrenzt ist:

$$\Gamma_{ph}^{\max} = \frac{\gamma}{2} \quad (4.22)$$

Die Lebensdauer $\tau = 1/\gamma$ des angeregten Niveaus stellt also eine fundamentale Begrenzung der Streureate von Licht an einem Atom dar!

Die Photonenstreurate aus Gleichung (4.21) können wir umformen und erhalten:

$$\Gamma_{ph} = \left(\frac{S_0}{1 + S_0} \right) \left(\frac{\gamma/2}{1 + 4\delta^2 / \gamma'^2} \right) \quad \text{mit} \quad \gamma' = \gamma \sqrt{1 + S_0} \quad (4.23)$$

In Abhängigkeit der Frequenz ergibt sich also wiederum ein Lorentz-Profil, welches diesmal jedoch verbreitert gegenüber der natürlichen Linienbreite ist!

Die Verbreiterung gegenüber der natürlichen Linienbreite bezeichnet man als **Sättigungsverbreiterung**. Sie ist eine Folge davon, dass die Photonenstreurate nach oben begrenzt ist und eine weitere Erhöhung der Laserintensität auf Resonanz keine nennenswerte Erhöhung der Streurate bewirkt. Für große Verstimmungen kann eine Erhöhung der Laserleistung jedoch eine weitere Erhöhung der Streurate bewirken. Dadurch wirkt die beobachtete Resonanzlinie verbreitert (siehe Abbildung 5).

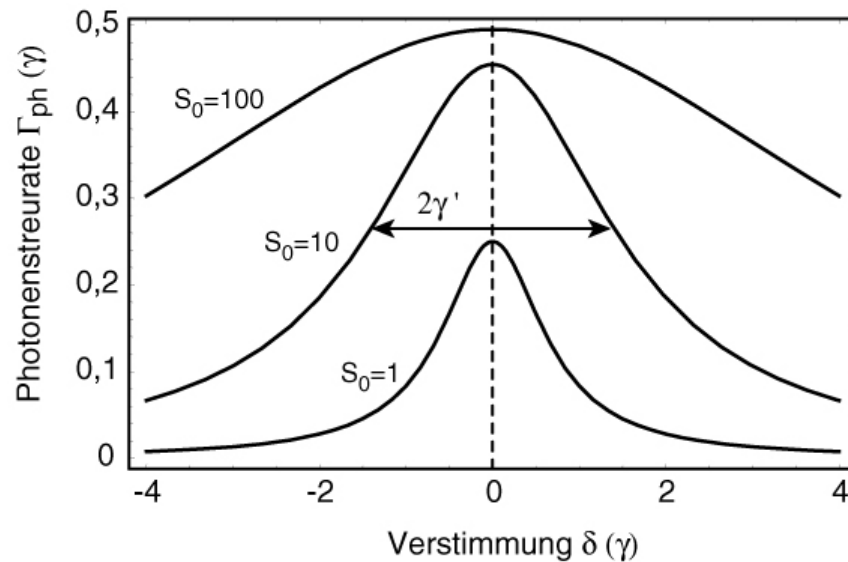


Abbildung 5 Sättigungsverbreiterung einer atomaren Resonanzlinie für verschiedene Sättigungsparameter S_0 .

Lambert-Beer'sches Absorptionsgesetz

Die Streuung von Licht an einem Atom führt zu einer Abschwächung des Lichtstrahls, da gestreute Photonen vom Atom in beliebige Richtungen ausgesandt werden. Wie groß ist die Abschwächung, die ein Lichtstrahl erfährt, wenn er ein atomares Gas der Dichte n durchquert?

Die differenzielle Intensitätsänderung des Lichtstrahls dI/dz entspricht dabei genau der gestreuten Lichtleistung/Volumen, d.h.

$$\frac{dI}{dz} = -\hbar\omega_L \cdot \Gamma_{ph} \cdot n \quad (4.24)$$

Für kleine Sättigungsparameter $S_0 \ll 1$ und auf Resonanz $\delta = 0$ erhalten wir $\Gamma_{ph} \sim S_0 \gamma / 2$.
Damit ergibt sich aus Gleichung (4.24):

$$\frac{dI}{dz} = -\hbar\omega_L \frac{I}{I_{sat}} \frac{\gamma}{2} n = -\sigma_{21} \cdot n \cdot I \quad (4.25)$$

Hierbei haben wir den Wirkungsquerschnitt σ_{21} eingeführt, für den wir einfach durch Koeffizientenvergleich aus (4.25) direkt erhalten:

$$\sigma_{21} = \frac{\hbar\omega_L \gamma}{2I_{sat}} = \frac{3}{2\pi} \lambda^2 \quad (4.26)$$

Außerdem können wir die DGL aus (4.25) direkt lösen und erhalten

$$I(z) = I(0) e^{-\sigma_{21} n z} = I(0) e^{-\mu z} \quad (4.27)$$

mit dem Absorptionskoeffizienten $\mu = \sigma_{21} n$. Ein Lichtstrahl wird also beim Durchtritt durch ein atomares Gas exponentiell geschwächt. Man bezeichnet dies auch als das **Lambert-Beer'sche Absorptionsgesetz!**

Dem Wirkungsquerschnitt kommt dabei eine anschauliche Bedeutung zu. Fokussiert man einen Laserstrahl auf eine Fläche des Wirkungsquerschnitts und lässt diesen mit einem einzigen Atom wechselwirken, so wird dieser nahezu vollständig abgeschwächt (auf 1/e der anfänglichen Intensität).

5 Blochvektor

Die zum Teil komplexwertigen Matrixelemente der Dichtematrix können anschaulich mithilfe des so genannten **Blochvektors** (u, v, w) beschrieben werden.

Die drei Komponenten dieses Vektors sind definiert als:

$$\begin{aligned} u &= \tilde{\rho}_{12} + \tilde{\rho}_{21} = 2 \operatorname{Re}(\tilde{\rho}_{12}) \\ v &= i(\tilde{\rho}_{21} - \tilde{\rho}_{12}) = 2 \operatorname{Im}(\tilde{\rho}_{12}) \\ w &= \rho_{22} - \rho_{11} \end{aligned} \quad (5.1)$$

Man nennt diese drei Komponenten auch:

Variable	Bezeichnung
u	Dispersive Komponente des Blochvektors
v	Absorptive Komponente des Blochvektors
w	Inversion

Die **Inversion** w ist dabei einfach die Besetzungsdifferenz zwischen angeregtem Zustand $|2\rangle$ und dem Grundzustand $|1\rangle$. Es ergibt sich z.B. also:

- $w = -1$ Atom ist im Grundzustand
- $w = +1$ Atom ist im angeregten Zustand

5.1 Erwartungswert des Dipoloperators mit Blochvektoren

Auch für die u - und v - Komponenten des Blochvektors lassen sich anschauliche Beschreibungen finden. Rechnen wir dazu zunächst den Erwartungswert des Dipoloperators aus!

$$\begin{aligned} \langle \vec{d} \rangle &= \operatorname{tr}(\rho \vec{d}) = \operatorname{tr} \left(\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \vec{d}_{12} \\ \vec{d}_{21} & 0 \end{pmatrix} \right) = \vec{d}_{12} (\rho_{12} + \rho_{21}) \\ &= \vec{d}_{12} (\tilde{\rho}_{12} e^{i\omega_L t} + \tilde{\rho}_{21} e^{-i\omega_L t}) \\ &= \vec{d}_{12} (u \cos(\omega_L t) - v \sin(\omega_L t)) \end{aligned} \quad (5.2)$$

Hierbei haben wir benutzt, dass das Dipolmatrixelement reell ist und damit gilt $\vec{d}_{12} = \vec{d}_{21}$.

$$\boxed{\langle \vec{d} \rangle = \vec{d}_{12} (u \cos(\omega_L t) - v \sin(\omega_L t))} \quad (5.3)$$

Damit erhalten wir also:

- u proportional zum Dipolmoment, das **in Phase** mit dem E-Feld oszilliert
- v proportional zum Dipolmoment, das **90° außer Phase** mit dem E-Feld oszilliert, denn $\cos(\omega_L t + \pi/2) = -\sin(\omega_L t)$. Man nennt dies auch die Quadratur Komponente!

Durch welche Komponente des oszillierenden Dipols kommt es zur Absorption und stimulierten Emission von Licht?

Betrachten wir hierzu ein klassisches Bild: Wird ein Elektron in einem elektrischen Feld um eine Strecke $d\vec{r}$ bewegt, so wird Arbeit dW an ihm verrichtet!

$$dW = e \vec{\epsilon} E_0 \cos(\omega_L t) d\vec{r} \quad (5.4)$$

Für die mittlere absorbierte Leistung erhalten wir dann:

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = \vec{\epsilon} E_0 \cos(\omega_L t) \left\langle e \frac{d\vec{r}}{dt} \right\rangle = \vec{\epsilon} E_0 \cos(\omega_L t) \left\langle \dot{\vec{d}} \right\rangle \quad (5.5)$$

Bilden wir nun die zeitliche Ableitung des atomaren Dipolmoments aus Gleichung (5.3), so erhalten wir:

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = -\vec{d}_{12} \cdot \vec{\epsilon} E_0 \omega_L \left\{ v \cos^2(\omega_L t) + u \cos(\omega_L t) \sin(\omega_L t) \right\} \quad (5.6)$$

Nun interessiert uns mehr die über eine optische Periode gemittelte ausgetauschte Leistung zwischen Atom und Lichtfeld, so dass wir Gleichung (5.6) noch über einen optischen Schwingungszyklus der Dauer $T=2\pi/\omega_L$ mitteln. Diese zeitliche Mittelung kennzeichnen wir durch einen Querbalken:

$$\overline{\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle} = -\vec{d}_{12} \cdot \vec{\epsilon} E_0 \omega_L \left\{ \overline{v \cos^2(\omega_L t)} + u \overline{\cos(\omega_L t) \sin(\omega_L t)} \right\} \quad (5.7)$$

Für die beiden zeitlichen Mittelungen erhalten wir:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T \cos^2(\omega_L t) dt &= \frac{1}{2} \\ \frac{1}{T} \int_0^T \sin(\omega_L t) \cos(\omega_L t) dt &= 0 \end{aligned} \quad (5.8)$$

Woraus sich das Endergebnis ergibt:

$$\boxed{\overline{\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle} = -\frac{\hbar \Omega_0}{2} \omega_L v} \quad (5.9)$$

Die mittlere absorbierte Leistung hängt also nur von der Quadratur-Komponente v des atomaren Dipols ab. Jetzt wird auch die Bezeichnung von v als absorptive Komponente verständlich.

Achtung: Je nach Vorzeichen von ν wird entweder Strahlungsleistung vom Atom aufgenommen (Absorption) oder an das Lichtfeld abgegeben (stimulierte Emission)!

5.2 Optische-Bloch-Gleichungen mit Blochvektoren

Auch die Optischen-Bloch-Gleichungen aus Gleichung (4.11) können mithilfe des Blochvektors in eine einfachere Form gebracht werden:

$$\begin{aligned}\dot{u} &= \delta v - \gamma/2 u \\ \dot{v} &= -\delta u + \Omega_0 w - \gamma/2 v \\ \dot{w} &= -\Omega_0 v - \gamma(w+1)\end{aligned}\tag{5.10}$$

Was wir kompakt schreiben können als:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \Omega_0 \\ 0 \\ \delta \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} - \gamma \begin{pmatrix} u/2 \\ v/2 \\ w+1 \end{pmatrix}\tag{5.11}$$

Im Falle **ohne Dämpfung** kann die Dynamik des Blochvektors einfach beschrieben werden. Wir erhalten in diesem Fall aus (5.11):

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \Omega_0 \\ 0 \\ \delta \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u \\ v \\ w \end{pmatrix}\tag{5.12}$$

Analog zu den Kreiselgleichungen der klassischen Mechanik beschreibt Gleichung (5.12) einfach eine Präzessionsbewegung des Blochvektors um die Achse $(-\Omega_0, 0, -\delta)$ mit einer Kreisfrequenz $\Omega = \sqrt{\Omega_0^2 + \delta^2}$.

Im Fall **ohne Dämpfung** lässt sich außerdem leicht zeigen, dass der Blochvektor sich immer auf der Oberfläche einer Kugel mit Einheitsradius bewegt, d.h.

$$u^2 + v^2 + w^2 = 1\tag{5.13}$$

Im Fall **mit Dämpfung** findet die Bewegung des Blochvektors **innerhalb einer Kugel mit Einheitsradius** statt.

Wichtig: Jeder reine Zustand des Zwei-Niveau-Atoms entspricht eindeutig einem Blochvektor, der auf der Einheitssphäre liegt.

Betrachten wir zunächst drei atomare Zustände im Zwei-Niveau-System und deren Darstellung als Blochvektoren, um uns mit diesen besser vertraut zu machen.

- a) Starten wir zunächst mit einem Atom im Grundzustand. In diesem Fall ist der zugehörige Blochvektor gegeben durch $(0, 0, -1)$.

- b) Für ein Atom im angeregten Zustand ergibt sich entsprechend $(0,0,+1)$
- c) Starten wir mit einem Atom im Grundzustand und wenden einen resonanten ($\delta = 0$) $\pi/2$ -Puls auf das Atom an, so befindet sich dies in einer kohärenten Überlagerung aus dem Grund- und angeregten Zustand $|\Psi\rangle = 1/\sqrt{2}(|1\rangle + i|2\rangle)$. Der entsprechende Blochvektor lautet $(0,-1,0)$

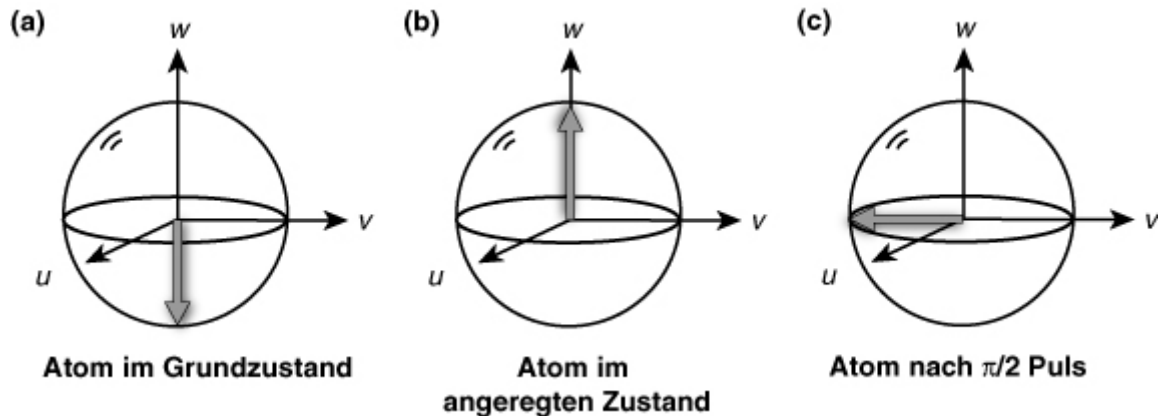


Abbildung 6 Verschiedene reine Zustände des Zwei-Niveau-Atoms und deren Darstellung auf der Blochsphäre!

5.3 Dynamik des Blochvektors bei resonanter Licht-Atom Wechselwirkung

Starten wir mit einem Atom im Grundzustand, also Blochvektor $(0,0,-1)$. Dann schalten wir ein resonantes Lichtfeld ein ($\delta=0$), das mit dem Atom nun wechselwirkt. In diesem Fall rotiert der Blochvektor um die u -Achse mit einer Kreisfrequenz, die der resonanten Rabi-Frequenz entspricht (siehe Gleichung (5.12)). Dies sind genau die Rabioszillationen, die wir schon im vorigen Kapitel kennen gelernt haben. Der Drehwinkel des Blochvektors ist dabei genau durch die in (3.11) eingeführte Pulsfläche gegeben (siehe Abbildung 7).

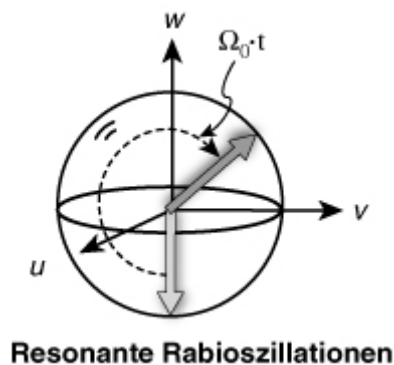


Abbildung 7 Resonante Rabioszillationen. Wird für ein Atom im Grundzustand Licht eingestrahlt, das resonant mit dem atomaren Übergang ist, so rotiert der Blochvektor mit der Rabi-Frequenz Ω_0 um die u -Achse. Der Drehwinkel des Blochvektors zu einem beliebigen Zeitpunkt t ist dabei gegeben durch $\Omega_0 t$.

Wichtig: Der Blochvektor rotiert in diesem Fall durch den oberen und unteren Pol der Blochkugel. Dies entspricht voll durchmodulierten Rabioszillationen, die Besetzung des

Atoms geht vollständig vom Grundzustand in den angeregten Zustand und wieder zurück über.

5.4 Dynamik des Blochvektors bei nicht-resonanter Licht-Atom Wechselwirkung

Beginnen wir wieder mit einem Atom im Grundzustand. Nun soll wiederum ein Lichtfeld eingeschaltet werden, was diesmal jedoch nicht-resonant ($\delta \neq 0$) ist. In diesem Fall ist die Drehachse gegenüber der u -Achse verkippt und durch $(-\Omega_0, 0, -\delta)$ gegeben!

Welche Änderungen ergeben sich zu den resonanten Rabioszillationen?

1. Der Blochvektor rotiert nun nicht mehr durch den oberen Pol, d.h. es wird nie eine komplette Inversion des Zwei-Niveau Atoms erreicht. Je größer die Verstimmung ist, desto mehr entfernt sich der obere Umkehrpunkt der Rotation vom Pol der Blochkugel. Dies bedeutet, dass die Modulationen der Rabioszillationen immer weiter abnehmen, wie auch schon in Abbildung 3 gesehen.
2. Die Kreisfrequenz, mit der der Blochvektor um die Drehachse rotiert, ist nun durch die verallgemeinerte Rabifrequenz gegeben $\Omega = \sqrt{\delta^2 + \Omega_0^2}$.

Wichtig: Auch für ein abgeschaltetes Lichtfeld ($\Omega_0=0$) kann der Blochvektor sich verändern. Dies passiert für den Fall einer endlichen Verstimmung ($\delta \neq 0$), bei dem der Blochvektor um die w -Achse mit einer Kreisfrequenz δ rotiert (siehe Gleichung (5.12) für den Fall $\Omega_0=0$)! Woher kommt diese Dynamik? Beachten Sie, dass wir bei dem Blochvektor in ein System transformiert haben, das mit der Lichtfrequenz ω_L rotiert. Ein Atom oszilliert nach einem $\pi/2$ Puls jedoch mit seiner natürlichen Eigenfrequenz ω_{21} , und es kommt so zu einer Phasenverschiebung des oszillierenden atomaren Dipols gegenüber dem oszillierenden E-Feld des Lichtfeldes. Dies macht sich in einer Rotation des Blochvektors um die w -Achse bemerkbar.

6 Atomuhren

Atome bieten eine gute Möglichkeit als natürliche Taktgeber, d.h. eine Uhr, zu funigieren. Zum einen sind Atome überall auf der Welt von Natur aus gleich gebaut und zum anderen können Sie in einer Vakuumkammer gut von der Umgebung isoliert werden. Eine Uhr basierend auf einem atomaren Übergang sollte also sowohl in Braunschweig bei der PTB (Physikalisch Technischen Bundesanstalt) als auch in Boulder (USA) am NIST (National Institute for Standards and Technology) gleich gehen!

Um die Dauer einer Sekunde zu definieren, muss dann nur noch angegeben werden, welchen Übergang zwischen zwei atomaren Zuständen man als Taktgeber verwenden will und wieviele Schwingungen resonanten Lichts auf diesem Übergang eine Sekunde ausmachen sollen.

Heutzutage verwendet man einen Übergang zwischen zwei Hyperfeinzuständen im Mikrowellenbereich des ^{133}Cs -Atoms als Grundlage unserer Sekunde.

Definition aus SI Brochüre, Sektion 2.1.1.3: The second is the duration of 9 192 631 770 periods of the radiation corresponding to the transition between the two hyperfine levels of the ground state of the cesium 133 atom.

Man arbeitet jedoch bereits daran, atomare Übergänge bei optischen Frequenzen als neue Zeitstandards zu verwenden, und es ist wahrscheinlich nur noch ein Frage von wenigen Jahren bis die Definition der Sekunde erneuert wird.

6.1 Wie können wir den Takt der Atome aufnehmen?

Die entscheidende Frage ist jedoch, wie wir eine solche Definition in die Praxis umsetzen können, also z.B. einen Mikrowellengenerator oder ein Lichtfeld im optischen Bereich auf den Takt der Atome abstimmen können, um diesen zugänglich zu machen.

Eine der einfachsten Möglichkeiten wäre es, z.B. Atome im Grundzustand in einer Wechselwirkungszone (WW) für eine Zeit τ mit dem Lichtfeld wechselwirken zu lassen. Nach dieser Wechselwirkungszone wird dann an einem zustandsselektiven Detektor gemessen, wieviele Atome sich im angeregten Zustand befinden. Stimmt die Lichtfrequenz ω_L mit der atomaren Übergangsfrequenz ω_{21} überein, so erhalten wir eine maximale Anregungswahrscheinlichkeit. Ergibt sich jedoch eine Verstimmung zwischen der Lichtfrequenz und der atomaren Resonanzfrequenz, so fällt die Anregungswahrscheinlichkeit ab (für eine rechteckförmige zeitliches Anregungsprofil wäre dies entsprechend $\sin^2(x)/x^2$).

Im Falle einer vernachlässigbaren Zerfallsrate des angeregten Niveaus ist die Breite der Anregungswahrscheinlichkeit durch die Wechselwirkungszeit τ bestimmt:

$$\Delta\omega \sim \frac{1}{\tau} \quad (6.1)$$

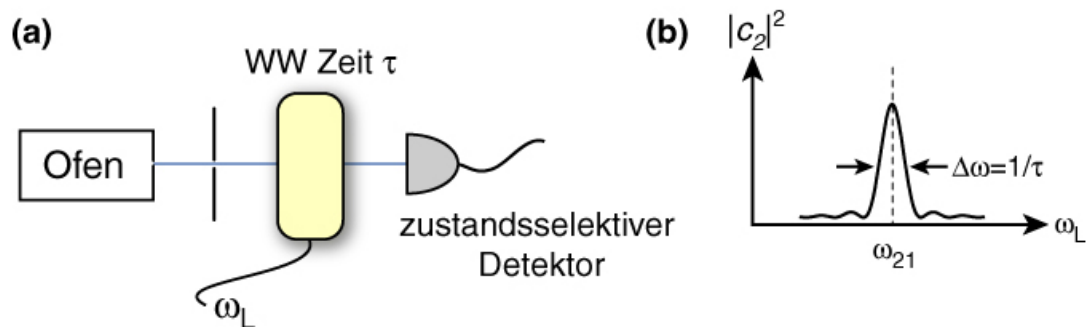


Abbildung 8 (a) Schematische Darstellung einer einfachen Atomstrahlapparatur zur Messung der atomaren Übergangsfrequenz. Atome wechselwirken für eine Zeit τ mit einem Lichtfeld und die Anregungswahrscheinlichkeit der Atome wird über einen zustandsselektiven Detektor nachgewiesen. **(b)** Die Anregungswahrscheinlichkeit fällt mit höherer Verstimmung immer weiter ab und ist maximal auf Resonanz ($\delta=0$).

Soll nun die Lichtquelle auf die atomare Resonanzfrequenz abgestimmt werden, so muss die atomare Anregungswahrscheinlichkeit nur maximal gehalten werden. Sollte die Anregungswahrscheinlichkeit einmal abfallen, da $\omega_L \neq \omega_{21}$, so muss die Lichtfrequenz erhöht oder erniedrigt werden, um wieder eine maximale Anregung wiederherzustellen.

Wichtig: Die Messgenauigkeit ist in diesem Fall durch die Wechselwirkungszeit τ festgelegt!

Um die Frequenz genauer auf die atomare Übergangsfrequenz abzustimmen müssen wir die Wechselwirkungszeit τ erhöhen. Dies ist jedoch z.B. durch technische Gründe nicht einfach möglich.

6.2 Die Ramsey-Methode

Einen Ausweg hierfür hat der Physik Nobelpreisträger Norman Ramsey gefunden. Die Kernidee besteht darin, zwei getrennte Wechselwirkungszone zu verwenden, zwischen denen die Atome eine Flugzeit T benötigen. Danach wird wieder in einem zustandsselektiven Detektor die Anregungswahrscheinlichkeit gemessen (siehe Abbildung 9).

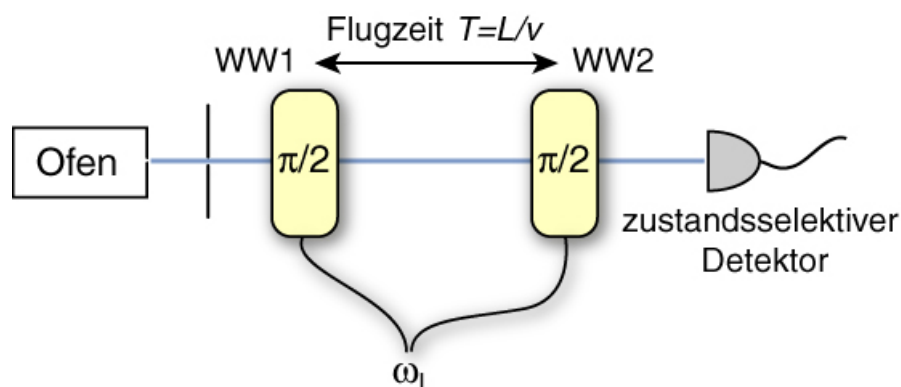


Abbildung 9 Ramsey Anordnung in einer Atomstrahlapparatur. Zunächst werden die Atome in einer Wechselwirkungszone WW1 einem $\pi/2$ -Puls ausgesetzt, der eine Oszillation des atomaren Dipols anregt. Der atomare Dipol oszilliert mit der Frequenz ω_{21} . Das Atom fliegt nun im freien Raum zur Wechselwirkungszone WW2, wo ein weiterer $\pi/2$ -Puls auf das Atom wirkt. Nun hängt es jedoch von der Phasenlage des oszillierenden atomaren Dipols

relativ zur Phasenlage des Lichtfeldes ab, ob weiter Licht absorbiert wird (das Atom stärker angeregt wird) oder ob das Atom unter stimulierter Emission abgeregt wird (erinnern Sie sich an Gleichung (5.9), wo wir gesehen haben das je nach Vorzeichen von v , Licht absorbiert oder stimuliert abgegeben werden kann)!

Versuchen wir nun die Wirkung der Ramsey-Anordnung mit Hilfe der Blochvektoren zu verstehen. Dazu betrachten wir jeden Schritt einzeln (siehe Abbildung 10):

1. Ein Atom verlässt den Ofen im Grundzustand, d.h. es befindet sich im Zustand $(0,0,-1)$
2. Das Atom durchquert die erste Wechselwirkungszone. Die Rabi-Frequenz Ω_0 in der Wechselwirkungszone und die Wechselwirkungszeit τ sind gerade so eingestellt, dass sich ein $\pi/2$ -Puls ergibt, d.h. $\Omega_0 \cdot \tau = \pi/2$. Außerdem gehen wir davon aus, dass $\Omega_0 \gg \delta$, d.h. wir haben es hier im wesentlichen mit einer resonanten Licht-Atom-Wechselwirkung zu tun.

Durch den $\pi/2$ -Puls wird das Atom in eine kohärente Überlagerung aus Grund- und angeregtem Zustand gebracht, d.h. $\Psi = 1/\sqrt{2}(|1\rangle + i|2\rangle)$. Der Blochvektor rotiert hierbei um 90° um die u -Achse, so dass danach der kohärente Überlagerungszustand im Blochvektor beschrieben wird durch $(0,-1,0)$.

Wichtig: Durch den $\pi/2$ -Puls wird eine Oszillation des atomaren Dipolmoments mit der Frequenz ω_{21} angeregt.

3. Nun verlässt das Atom die erste Wechselwirkungszone und durchquert den freien Raum für eine Flugzeit T . Diese Flugzeit ergibt sich aus der Wegstrecke zwischen den beiden Wechselwirkungszone L und der Geschwindigkeit der Atome v . Während dieser Zeit oszilliert der atomare Dipol mit seiner natürlichen Resonanzfrequenz ω_{21} .
 - i. Im Falle der resonanten Licht-Atom Wechselwirkung $\delta=0$ ergibt sich nach Gleichung (5.12) keine weitere Dynamik des Blochvektors während der Flugzeit T , da sowohl $\Omega_0=0$, also auch $\delta=0$ sind.
 - ii. Im Fall einer Verstimmung $\delta \neq 0$ rotiert der Blochvektor um einen Winkel $\delta \cdot T$ um die w -Achse. Betrachten wir hier den Spezialfall $\delta \cdot T = \pi$.

Nochmal zur Erinnerung: Diese Rotation entsteht aufgrund der Phasenverschiebung, die sich zwischen dem oszillierenden atomaren Dipol und dem oszillierenden Lichtfeld während einer Zeit T aufbaut.

4. Das Atom tritt in die zweite Wechselwirkungszone ein und erfährt erneut einen $\pi/2$ -Puls. Die Dynamik des Atoms aufgrund dieses zweiten $\pi/2$ -Pulses hängt jedoch ganz entscheidend von der Phasenlage des oszillierenden atomaren Dipols relativ zum oszillierenden E-Feld ab. Betrachten wir wieder unsere beiden Spezialfälle:
 - i. Der Blochvektor rotiert durch den zweiten $\pi/2$ -Puls weiter um 90° um die u -Achse nach $(0,0,1)$. Das Atom wird also vollständig in den angeregten Zustand

überführt.

- ii. Auch hier rotiert der Blochvektor durch den zweiten $\pi/2$ -Puls weiter um 90° um die u -Achse. Der Blochvektor geht in diesem Fall über in $(0,0,-1)$. Das Atom wird hier also vollständig in den Grundzustand überführt!

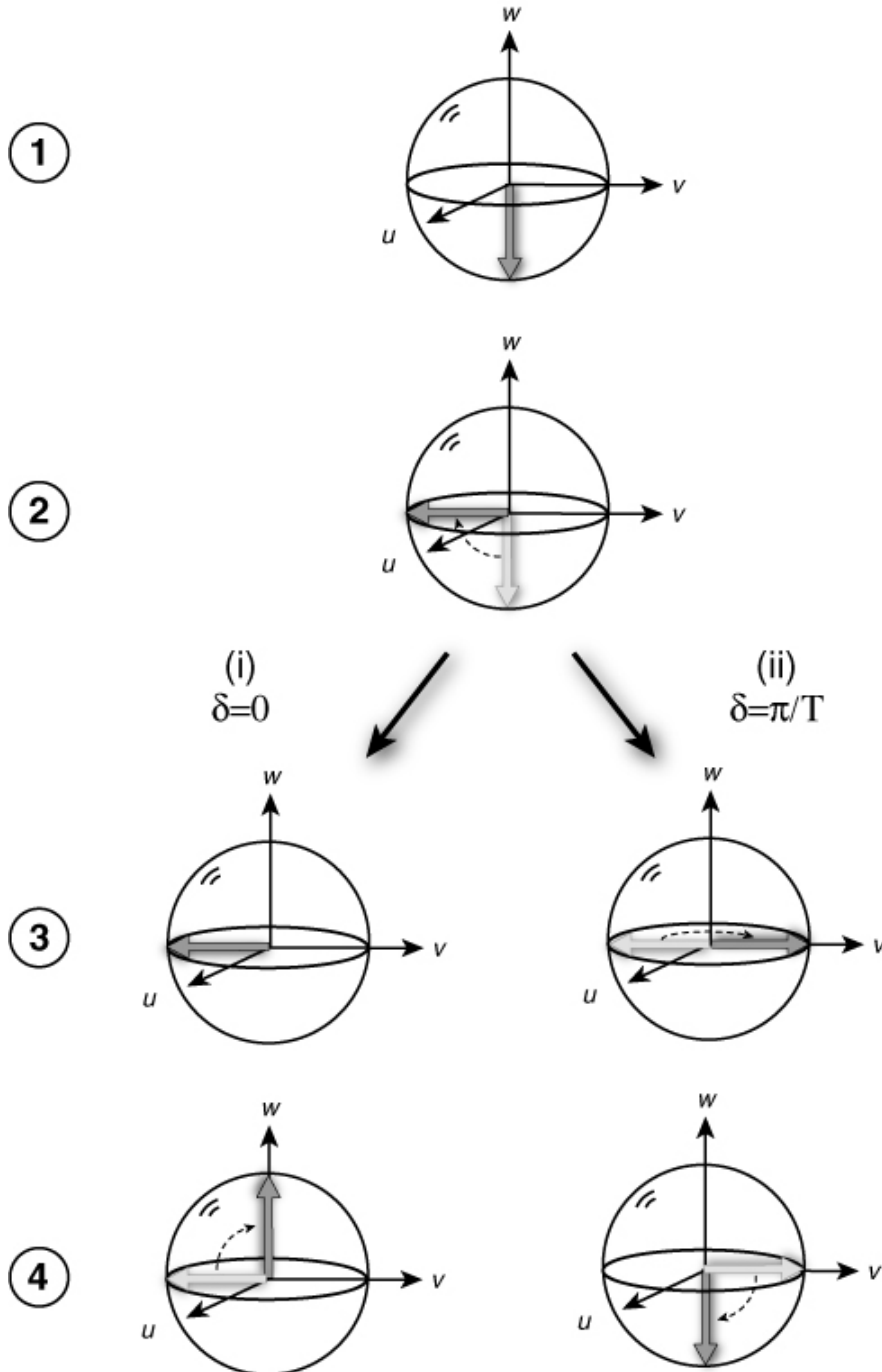


Abbildung 10 Erklärung der Ramsey-Methode mit Hilfe des Blochvektors. Beschreibung der Sequenz siehe Text.

Allgemein ergibt sich also folgendes Anregungsprofil in Abhängigkeit von der Verstimmung des Lichtfeldes des Atoms gegenüber der atomaren Resonanzfrequenz:

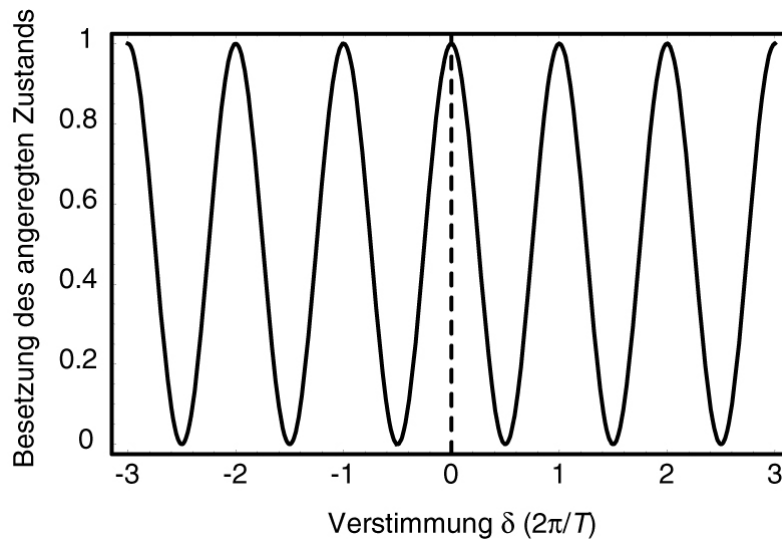


Abbildung 11 Ramsey-Interferenzen (engl. Ramsey-Fringes) für den Idealfall eines Atomstrahls, bei dem die Atome mit einer festen Geschwindigkeit die Wechselwirkungszone durchqueren.

Im Idealfall führt dies bei Atomen mit einer festen Geschwindigkeit v zu einer periodischen Modulation der Anregungswahrscheinlichkeit mit der Verstimmung. Immer wenn $\delta \cdot T = n \cdot 2\pi$ ist, verlassen die Atome die Ramsey Anordnung im angeregten Zustand; aber wenn $\delta \cdot T = (2n + 1) \cdot \pi$, so befinden sich alle Atome im Grundzustand!

In der Realität haben wir es meistens mit einer endlichen Geschwindigkeitsbreite der Atome im Atomstrahl zu tun, was dazu führt, dass die Modulation der Ramsey-Interferenzen mit wachsender Verstimmung immer kleiner wird (siehe auch Abbildung 13).

Wichtig: Die Frequenzauflösung in der Ramsey-Methode hängt nicht mehr von der Wechselwirkungszeit τ ab, sonder allein von der Flugzeit T zwischen den beiden Wechselwirkungszone!

6.3 Moderne Atomuhren (Atomare Springbrunnen “Atomic Fountain Clocks”)

Um eine möglichst hohe Frequenzauflösung in der Ramsey-Methode zu erhalten, ist es wichtig die Zeit zwischen den beiden $\pi/2$ -Pulsen T so lang wie möglich zu machen. In frühen Experimenten wurden Atomstrahlapparaturen eingesetzt, bei denen die Atome eine hohe longitudinale Geschwindigkeit v aufweisen. Selbst für lange Wegstrecken zwischen den beiden Wechselwirkungszone bleibt diese Zeit jedoch relativ klein (für $L=1\text{m}$ und $v=300\text{ m/s}$ ergibt sich $T=3\text{ ms}$).

Mit Hilfe der Laserkühlung ist es während der letzten zehn Jahre jedoch möglich geworden, ruhende Atomwolken von nur wenigen $10\text{ }\mu\text{K}$ Temperatur zu erzeugen. Diese dienen heute in sogenannten **atomaren Springbrunnen** (engl. **Atomic-Fountains**) als Ausgangspunkt zur Realisierung der genauesten heutigen Atomuhren.

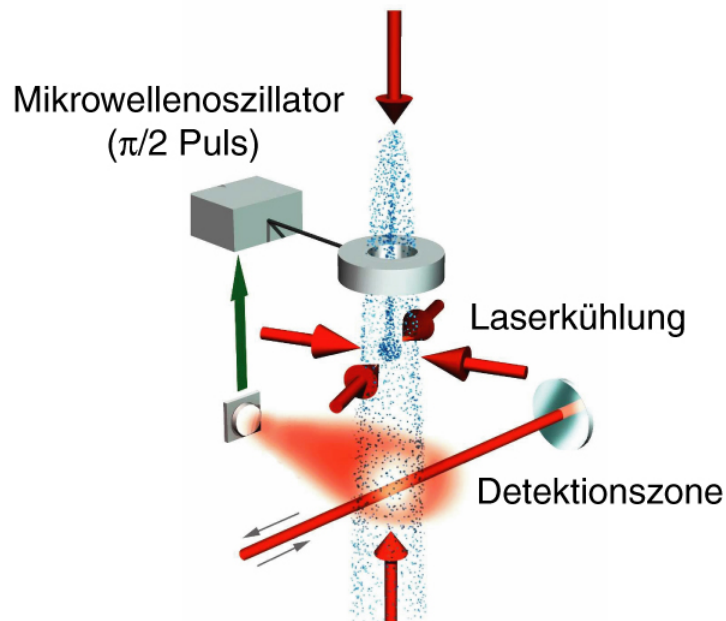


Abbildung 12 Schematischer Aufbau einer „Atomic-Fountain“ Atomuhr. Eine lasergekühlte Atomwolke wird mit Hilfe von Laserlicht vertikal beschleunigt und dadurch nach „oben“ geworfen. Auf der Flugbahn nach oben durchquert diese Atomwolke einen Mikrowellenresonator, bei dem die Atome dem ersten $\pi/2$ -Puls ausgesetzt werden. Nach verlassen des Resonators bewegen sich die Atome weiter aufwärts, bis ihr Umkehrpunkt erreicht ist und sie ihre Bewegungsrichtung umkehren und nach unten fallen. Dabei durchqueren sie erneut den Mikrowellenresonator und erfahren den zweiten $\pi/2$ -Puls der Ramsey Sequenz. In einer Detektionszone unterhalb des Resonators können die Atome zustandsselektiv nachgewiesen werden und so ihr Anregungsgrad bestimmt werden. (Abbildung mit freundlicher Erlaubnis von Christoph Salomon, ENS Paris)

Betrachten wir den generellen Aufbau einer solchen Atomuhr (siehe Abbildung 12):

- i. Die Atome werden in einer Vakuumkammer zunächst lasergekühlt, so dass Atomwolken von ca. 10^7 Atomen mit Temperaturen von nur wenigen μK entstehen.
- ii. Diese ultrakalten Atomwolken werden anschließend mit Hilfe von Laserlicht vertikal beschleunigt und die Atomwolke so nach „oben“ geworfen“.
- iii. Auf ihrer Bewegung nach oben durchquert die Atomwolke einen Mikrowellenresonator, die erste Ramsey WW-Zone, bei dem die Atome einem $\pi/2$ -Puls ausgesetzt werden.
- iv. Nach Verlassen des Resonators bewegen sich die Atome weiter aufwärts bis aufgrund der Erdanziehung der Umkehrpunkt der Bewegung erreicht ist.
- v. Die Atome fallen nun abwärts und durchqueren erneut den Mikrowellenresonator, wo sie erneut einen $\pi/2$ -Puls (2. WW-Zone) erfahren.
- vi. Unterhalb des Resonators und der Region zur Laserkühlung ist dann die Detektionszone angebracht, wo die Atome zustandsselektiv nachgewiesen werden

können.

- vii. Weicht die Mikrowellenfrequenz von der atomaren Resonanzfrequenz ab, so kann dies sofort in einer Verringerung der Anregungswahrscheinlichkeit nachgewiesen werden und die Frequenz des Mikrowellenoszillators nachgestellt werden.

Einige Zahlen: Die Atomwolken werden dabei bis zu 1 m nach oben geworfen, so dass sich Flugzeiten T von Sekunden ergeben können!

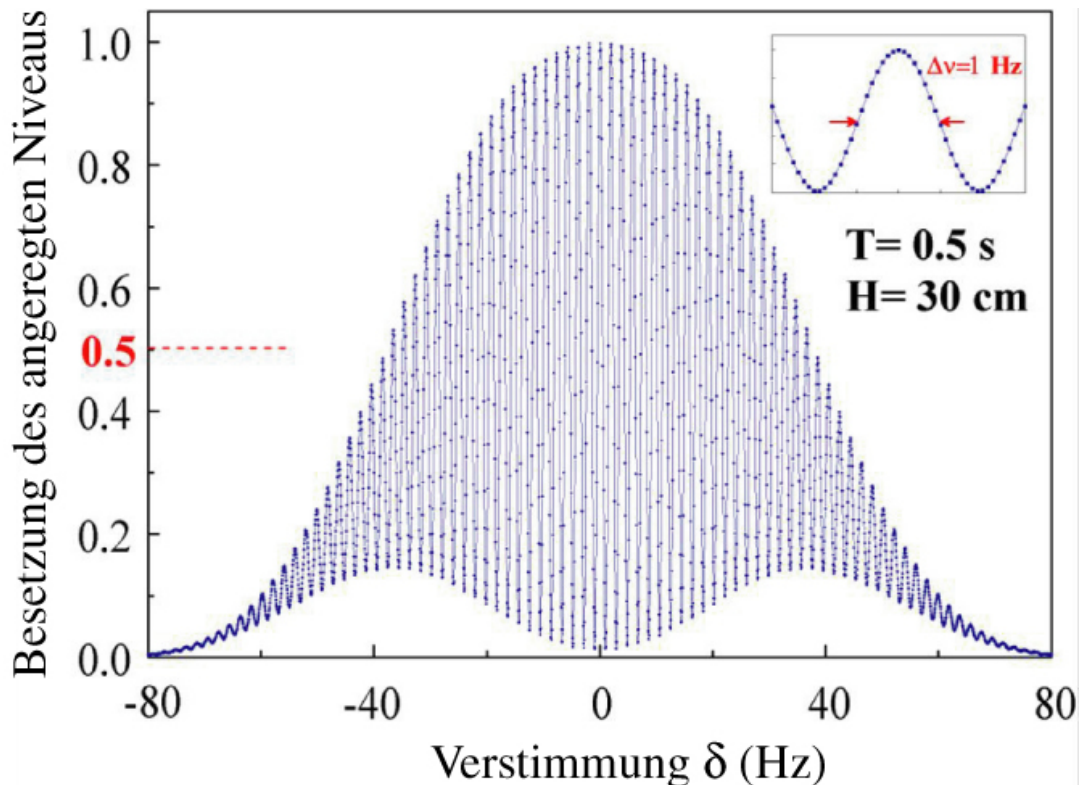


Abbildung 13 Ramsey-Fringes einer der besten heutigen Atomuhren in Paris. Diese moderne Atomuhr basiert auf der oben diskutierten „Atomic-Fountain“ Geometrie mit Flugzeiten von 0,5 s und einer Flughöhe von 30 cm. (Abbildung mit freundlicher Erlaubnis von Christoph Salomon, ENS Paris)

7 Auswahlregeln für optische Dipolübergänge

Damit es überhaupt zu einer Licht-Atom Kopplung im Rahmen der elektrischen Dipolstrahlung kommen kann, muss gelten:

$$\vec{d}_{21} \cdot \vec{\epsilon} \neq 0 \Leftrightarrow \langle 2 | \vec{d} | 1 \rangle \cdot \vec{\epsilon} \neq 0 \Leftrightarrow e \langle 2 | \vec{r} \cdot \vec{\epsilon} | 1 \rangle \quad (7.1)$$

Zunächst darf dafür natürlich das Dipolmatrizelement selber nicht verschwinden, d.h. $\vec{d}_{21} \neq 0$. Außerdem besagt (7.1) aber noch, dass auch die Projektion des Dipolmatrizelements auf den Polarisationsvektor $\vec{\epsilon}$ des Lichtfeldes nicht verschwinden darf, damit es zu einer Licht-Atom Wechselwirkung kommen kann.

Generell können wir einen beliebigen Polarisationszustand eines Lichtfeldes in Basisvektoren entwickeln. Für unsere Zwecke bietet es sich dabei an, folgende Basisvektoren zu verwenden:

Basisvektor	Bezeichnung	Bemerkung
$\hat{\epsilon}_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{y})$	σ^+ -Polarisation	Zirkular, rechtsdrehend
$\hat{\epsilon}_0 = \hat{z}$	π -Polarisation	Linear
$\hat{\epsilon}_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} - i\hat{y})$	σ^- -Polarisation	Zirkular, linksdrehend

Zur genaueren Analyse von Gleichung (7.1) betrachten wir den Term $\vec{r} \cdot \vec{\epsilon}$:

$$\begin{aligned} r_1 = \vec{r} \cdot \vec{\epsilon}_1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(x + iy) = -\frac{1}{\sqrt{2}}r \sin \theta e^{i\varphi} = r \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} Y_{1,1}(\varphi, \theta) \\ r_0 = z = r \cos \theta &= r \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} Y_{1,0}(\varphi, \theta) \\ r_{-1} = \vec{r} \cdot \vec{\epsilon}_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x - iy) = \frac{1}{\sqrt{2}}r \sin \theta e^{-i\varphi} = r \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} Y_{1,-1}(\varphi, \theta) \end{aligned} \quad (7.2)$$

Für die Projektion des Dipolmatrizelements aus Gleichung (7.1) erhalten wir damit:

$$\vec{\epsilon} \cdot \vec{d}_{21} = e \sum_{q=0,\pm 1} \vec{\epsilon}_q^* (\vec{r}_{21})_q \quad \text{mit} \quad (\vec{r}_{21})_q = \hat{\epsilon}_q \cdot \vec{r}_{21} \quad \text{und} \quad \vec{\epsilon}_q = \hat{\epsilon}_q \cdot \vec{\epsilon} \quad (7.3)$$

Betrachten wir nun als Quantenzustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ zwei Zustände $|n, l, m\rangle$ und $|n', l', m'\rangle$ eines wasserstoffähnlichen Atoms. Für $(\vec{r}_{21})_q$ ergibt sich mit Gleichung (7.2):

$$\begin{aligned} (\vec{r}_{n'l'm', nlm})_q &= \left(\frac{4\pi}{3} \right)^{1/2} \int_0^\infty dr r^3 R_{n'l'}(r) R_{nl}(r) \\ &\quad \times \int d\Omega Y_{l'm'}^*(\varphi, \theta) Y_{1,q}(\varphi, \theta) Y_{lm}(\varphi, \theta) \end{aligned} \quad (7.4)$$

Der Radialanteil in Gleichung (7.4) ist immer von Null verschieden und von der Größenordnung des Bohrschen Radius a_0 ! Es gilt z.B. für den Anfangszustand 1s und Endzustand 2p des Wasserstoffatoms:

$$\int_0^{\infty} r^3 R_{2p}(r) R_{1s}(r) \sim 1,290 a_0 \quad (7.5)$$

Den winkelabhängigen Anteil des Integrals können wir mit Hilfe der Clebsch-Gordan-Koeffizienten schreiben als:

$$\int d\Omega Y_{l'm'}^*(\varphi, \theta) Y_{l,q}(\varphi, \theta) Y_{lm}(\varphi, \theta) = \left(\frac{3}{4\pi} \frac{2l+1}{2l'+1} \right)^{1/2} \langle l100 | l'0 \rangle \langle l1mq | l'm' \rangle \quad (7.6)$$

Der letzte Clebsch-Gordan Koeffizient $\langle l1mq | l'm' \rangle$ ist jedoch nur von Null verschieden, wenn:

$m + q = m'$	$\Delta m = 0, \pm 1$
$l' = l \pm 1$	$\Delta l = \pm 1$

(7.7)

Diesen Auswahlregeln kommt auch eine anschauliche Bedeutung zu. So gilt z.B. dass für einen Übergang von m nach $m'=m+1$ zirkular polarisiertes σ^+ -Licht (mit $q=+1$) eingestrahlt werden muss. Dies ist jedoch auch verständlich, denn ein Überlagerungszustand aus einem Zustand mit m und $m+1$ besitzt eine um die z-Achse rotierende Ladungsverteilung mit positivem Drehsinn. Eine solche rotierende Ladungsverteilung kann nur von einem positiv zirkular polarisiertem Lichtfeld angeregt werden.

7.1 Auswahlregeln aufgrund der Parität der Quantenzustände

Aufgrund der Parität der beteiligten Wellenfunktionen und Operatoren am Dipolmatrixelement lässt sich u.a. auch schon ablesen, ob das Dipolmatrixelement verschwindet oder nicht.

Der Paritätsoperator $\hat{P}$ führt eine Punktspiegelung am Ursprung aus. Da der atomare Hamiltonoperator mit dem Paritätsoperator kommutiert, sind die Eigenzustände des Wasserstoffatoms gleichzeitig auch Eigenzustände des Paritätsoperators mit Eigenwerten ± 1 .

Der Ortsoperator des Elektrons $\vec{r}$ transformiert sich unter dem Paritätsoperator wie:

$$\hat{P}^{-1} \vec{r} \hat{P} = -\vec{r} \quad (7.8)$$

Für die Wellenfunktionen des Wasserstoffatoms gilt:

$$\hat{P} R_{nl}(r) Y_{lm}(\varphi, \theta) = (-1)^l R_{nl}(r) Y_{lm}(\varphi, \theta) \quad (7.9)$$

Die Parität der Wasserstoffwellenfunktionen ist also gerade (+1) oder ungerade (-1), je nachdem ob l gerade oder ungerade ist.

Das Dipolmatrixelement zwischen zwei wasserstoffähnlichen Zuständen können wir dann allgemein schreiben als:

$$\begin{aligned}\langle n'l'm'|\vec{r}|nlm\rangle &= \langle n'l'm'|\hat{P}\hat{P}^{-1}\vec{r}\hat{P}\hat{P}^{-1}|nlm\rangle \\ &= (-1)^{l+l'+1} \langle n'l'm'|\vec{r}|nlm\rangle\end{aligned}\tag{7.10}$$

Wenn $l+l'+1$ ungerade ist, so kann obige Gleichung (7.10) nur erfüllt werden, wenn das Dipolmatrixelement verschwindet!

Daraus erhalten wir folgendes wichtiges Endergebnis:

Der Dipoloperator verbindet nur Quantenzustände unterschiedlicher Parität !