

Hohlräume, Moleküle und Turbulenzen

Highlights aus dem Programm des Arbeitskreises Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen

Rainer Scharf

Zur diesjährigen Frühjahrs-tagung hatte der Arbeitskreis Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (AMOP, inzwischen Sektion Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen, SAMOP) nach Darmstadt eingeladen, und über 2300 Teilnehmer kamen. 1162 Vorträge und 589 Poster zeugen von der großen Themenvielfalt, von der die nachfolgende Auswahl nur einen kleinen Eindruck geben kann.

Kontrolle mit Röntgenpulsen

Mit maßgeschneiderten Femtosekunden-Lichtpulsen lassen sich die Bewegungen der Atome in einem Molekül verfolgen und gezielt beeinflussen. Ultrakurze Röntgenpulse machen die viel schnelleren Bewegungen der Elektronen zugänglich, wobei man inzwischen Pulsdauern bis hinab zu 100 as erreicht. Um die Elektronenbewegungen kohärent zu kontrollieren, müssen die Röntgenpulse die dazu jeweils nötige Form haben. Doch anders als im optischen Spektralbereich stieß die Pulsformung im Bereich der weichen Röntgenstrahlung zunächst auf große Schwierigkeiten. Wie Thomas Pfeifer von der University of California in Berkeley berichtete, ist es ihm und seinen Kollegen gelungen, Attosekunden-Röntgenpulse herzustellen und so zu formen, wie es für eine kohärente Kontrolle elektronischer Quantenprozesse nötig ist.

Ultrakurze Röntgenpulse entstehen als höhere Harmonische bei der nichtlinearen Wechselwirkung von sehr intensiven ultrakurzen Laserpulsen mit Atomen. Die Laserpulse ionisieren die äußeren Elektronen der Atome und beschleunigen sie periodisch vom ionisierten Atom weg und wieder zurück. Wenn das Elektron schließlich mit „seinem“

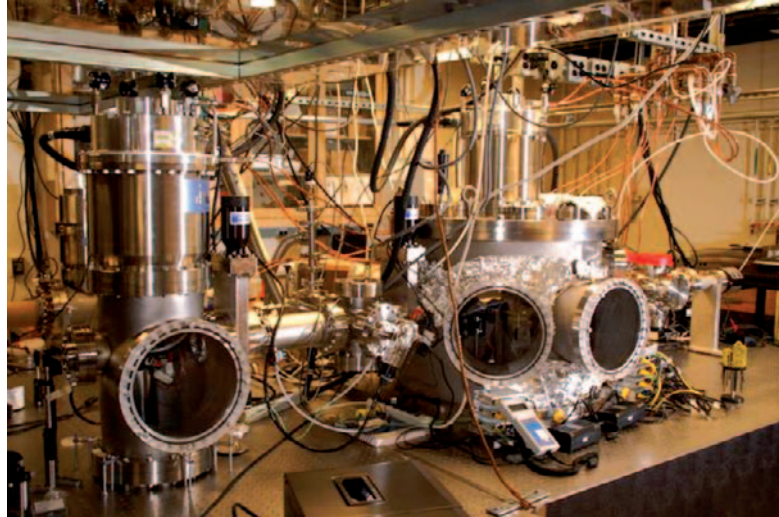
Ion rekombiniert, wird neben der potenziellen Energie des Elektrons auch die von ihm gesammelte kinetische Energie in Form eines Röntgenphotons frei. Mischt man dem intensiven Laserfeld z. B. ein schwaches Kontrollfeld einer anderen Frequenz hinzu, so kann man durch Überlagerung oder Heterodyning deutlich kurzwelligere höhere Harmonische erzeugen und sie mit dem Kontrollfeld nach Wunsch an- und abschalten. Auf diese Weise lassen sich einzelne Attosekunden-Röntgenpulse mithilfe ionisierender Laserpulse erzeugen, die viermal länger als bisher benutzte Laserpulse sind und damit wesentlich leichter herzustellen sind.

Durch Formung der Laserpulse können auch Röntgenpulse die gewünschte Form erhalten. Mithilfe eines evolutionären Algorithmus wird die Form der Laserpulse schrittweise verändert und korrigiert, bis die Röntgenpulse eine vorgegebene Pulsform erreicht haben oder die gewünschte Wirkung auf ein Molekül erzielen. Mit diesem Verfahren haben Pfeifer und seine Kollegen in Würzburg Röntgenpulse so optimiert, dass sie bei der dissoziativen Photoionisation von Schwefelhexafluorid

(SF₆) unterschiedliche Reaktionsprodukte in der gewünschten relativen Häufigkeit lieferten. So traten die Fragmente SF₅⁺ und SF₃⁺ normalerweise im Verhältnis 1,8:1 auf. Doch mit optimierten Pulsen ließ sich die relative Häufigkeit auf 1,4:1 verringern oder auf 2,3:1 erhöhen. Dieses Beispiel zeigt, dass die kohärente Kontrolle elektronischer Quantenprozesse mithilfe ultrakurzer Röntgenpulse vielversprechende Möglichkeiten eröffnet.

Informationsaustausch im Hohlraum

Die Fortschritte in der Atomphysik und Quantenoptik haben in den letzten Jahren zu einer rasanten Entwicklung der Quanteninformationswissenschaft geführt. In seinem Vortrag gab Jeff Kimble vom Caltech eine Einführung in dieses Gebiet und beschrieb, welche Rolle die Hohlraum-Quantenelektrodynamik mit einzelnen Atomen und Photonen spielen kann. Ganz gleich, ob man einen Quantencomputer, -simulator oder ein Quantenkommunikationssystem entwickeln will, immer geht es darum, ein Netz aus Knoten und Kanälen herzu-



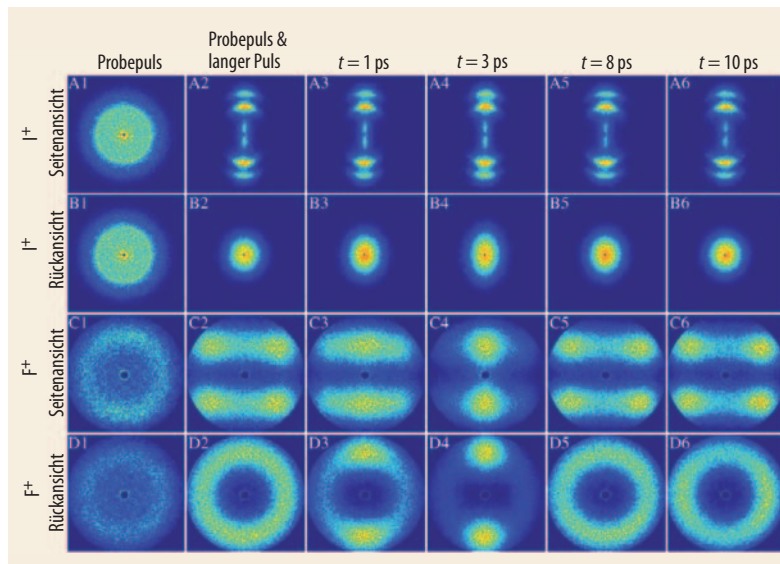
T. Pfeifer / UC Berkeley

Dieses Attosekunden-spektrometer besteht aus einer Quell- (links im Bild) und einer Anwendungskammer (rechts).

stellen, das Quantenbits speichern, verarbeiten und übertragen kann. Während Photonen als „fliegende Quantenbits“ die Information übertragen, eignen sich einzelne Atome in langlebigen Anregungszuständen als Speicher für die Quantenbits. Um zwischen ihnen Information auszutauschen, müssen die Atome stark an einzelne Moden eines optischen Resonators gekoppelt sein.

Eine solch starke Kopplung war zuerst mit Hohlraumresonatoren hoher Güte ($Q \approx 10^7$ bis 10^{11}) möglich. Sie bestehen aus zwei Spiegeln mit Mikrometerabstand, zwischen denen sich das Atom befindet. Schon ein einzelnes Photon im Hohlraum erzeugt ein intensives elektromagnetisches Feld, welches das Atom sättigt. Umgekehrt wirkt ein einzelnes Atom im Hohlraum merklich auf das Feld ein. Die starke Kopplung ermöglicht es, dass ein Atom auf Knopfdruck einzelne Photonen emittiert. Dazu regt ein seitlich in den Hohlraum eingestrahlt Lichtpuls das Atom an. Dieses emittiert umgehend ein Photon, das den Hohlraum durch einen teildurchlässigen Spiegel verlässt. Ein zweiter Lichtpuls bringt das Atom in den Ausgangszustand zurück. Kürzlich ist es Kimble und seinen Mitarbeitern gelungen, einen kohärenten Zustand vom Licht auf ein Atom im Hohlraum und wieder zurück auf das Licht zu übertragen. Damit sind die Voraussetzungen geschaffen, um Quantenbits von Atomen auf Photonen zu übertragen und zu anderen Atomen zu transportieren sowie Quantenbits auf unterschiedlichen Atomen miteinander zu verschränken.

Für ein Quantennetz aus vielen Knoten eignen sich Hohlraumresonatoren kaum. Doch Kimble und seine Mitarbeiter haben einen optischen Mikroresonator aus Hartglas lithographisch hergestellt, der sich in großer Zahl auf einem Chip integrieren lässt. Durch Glasfasern gelangt das Licht in den pilzförmigen Resonator, wobei es eine Flüstergaleriemode anregt, die im Rand der Pilzkappe lokalisiert ist. Lässt man ein Atom nahe dem Kappenrand herabfallen, so spürt es das evaneszente Feld der Mode und



Die Bilder in der ersten und zweiten Spalte dienen als Referenz, die anderen Spalten zeigen, wie Fluor- und Jodionen rotieren, wenn zusätzlich ein kurzer Puls

kann mit ihr stark koppeln. Dieser Mikroresonator kann als „Drehkreuz“ für Photonen dienen. Kommen mehrere Photonen innerhalb kurzer Zeit beim Resonator an, so reguliert das Atom dort den Photontransport. Nur das erste Photon kann den Resonator passieren und seinen Weg durch die Glasfaser fortsetzen, während die folgenden Photonen umkehren müssen. Die Anwesenheit des Atoms verändert somit die Zählstatistik der den Resonator passierenden Photonen, und es tritt für kurze Zeitabstände bis etwa 20 ns deutliches Anti-Bunching auf. Damit sind die Mikroresonatoren erfolversprechende Komponenten für ein zukünftiges Quanten-Netz auf einem Chip.

Ausgerichtete Moleküle

Da Moleküle nicht kugelsymmetrisch sind, hängt der Verlauf einer chemischen Reaktion davon ab, wie die beteiligten Moleküle zueinander orientiert sind. Auch die nichtlinearen optischen Eigenschaften einer Substanz lassen sich durch Ausrichtung ihrer Moleküle verstärken. Wie man Moleküle mit Laserlicht ausrichtet und welche Experimente dann möglich sind, erläuterte Henrik Stapelfeldt von der Universität Aarhus. Die Anregung mit intensiven und geeignet

auf sie einwirkt. Bei der „Seitenansicht“ liegt die Polarisation des langen Pulses in der Detektorebene, bei der „Rückansicht“ steht sie senkrecht dazu.

geformten Laserpulsen bewirkt, dass die Moleküle in eine bestimmte Überlagerung von Rotationszuständen gelangen, sodass bestimmte Molekülausrichtungen relativ zu raumfesten Achsen deutlich wahrscheinlicher sind als andere. Mit linear, zirkular oder elliptisch polarisiertem Laserlicht lässt sich erreichen, dass die Moleküle nur um eine Achse, in einer Ebene oder gar nicht mehr rotieren.

Laserpulse können Moleküle auch in Drehung versetzen. Stapelfeldt und seine Kollegen haben Difluorjodbenzol-Moleküle mit zwei linear polarisierten Laserpulsen von 10 ns und 150 fs Dauer bestrahlt. Der lange Puls richtete die Molekülachse mit der größten Polarisierbarkeit entlang seines Polarisationsvektors aus. Der kurze, dazu senkrecht polarisierte Laserpuls legte die Achse zweitgrößter Polarisierbarkeit fest. Dadurch war die Ausrichtung der Moleküle vollständig determiniert. Nach Abklingen des kurzen Pulses waren die Moleküle nur noch längs einer Achse ausgerichtet, was die Forscher in vielen Schnappschüssen sichtbar machten. Dazu lösten sie durch einen weiteren Laserpuls mit variabler Zeitverzögerung eine Coulomb-Explosion der Moleküle aus. Über die Geschwindigkeiten der Fluor- und Jodionen ließ sich die zeitabhängige Ausrichtung der Moleküle

ermittelten. Dabei zeigte sich, dass diese nach dem Ende des zweiten Pulses alle 143 ps einmal um ihre Ausrichtungsachse rotierten.

Werden Moleküle mit Laserlicht ionisiert, so tragen normalerweise unterschiedlich orientierte Moleküle zu diesem Prozess bei. Um die Winkelverteilung der Photoelektronen im molekularen Koordinatensystem zu messen, müssen die Moleküle einheitlich ausgerichtet sein. Das haben Stapelfeld und seine Kollegen jetzt erstmals gemacht. Dazu orientierten sie CS_2 -Moleküle mit einem 0,5 ps langen, linear polarisierten Laserpuls entlang seiner Polarisationsrichtung. Anschließend wurden die Moleküle mit einem 25 fs langen, ebenfalls linear polarisierten Puls durch Absorption von 10 bis 14 Photonen ionisiert. Für einen Winkel von 0° , 45° und 90° zwischen den beiden Polarisationsrichtungen haben die Forscher die Verteilung der Photoelektronen gemessen. Die drei Verteilungen unterschieden sich deutlich voneinander und auch von der Photoelektronenverteilung für nicht ausgerichtete Moleküle. In allen Fällen verließen die Elektronen bevorzugt in die Polarisationsrichtung des ionisierenden Laserstrahls das Molekül. Für einen Winkel von 45° war das Signal am stärksten, für 90° am schwächsten, unabhängig von der Zahl der absorbierten Photonen. Die Theorie kann diese erstaunlichen experimentellen Details noch nicht zufriedenstellend erklären.

Quantenmechanik in der Natur

Die von Bakterien, Algen und Pflanzen betriebene Photosynthese ist die Grundlage des Lebens auf der Erde. Dass die Natur dabei auch quantenmechanische Zustände nutzt, wie man sie aus der Festkörperphysik kennt, erläuterte Jürgen Köhler von der Universität Bayreuth am Beispiel der Purpurbakterien. Diese leben in sauerstoffarmen Gewässern und führen anaerobe Photosynthese durch. Sie absorbieren das Sonnenlicht mithilfe antennenartiger Lichtsammelkomplexe. Die dabei gewonnene

Energie wird zu einem Reaktionszentrum weitergeleitet und dort zur Ladungstrennung genutzt, die letztlich den Stoffwechsel antreibt.

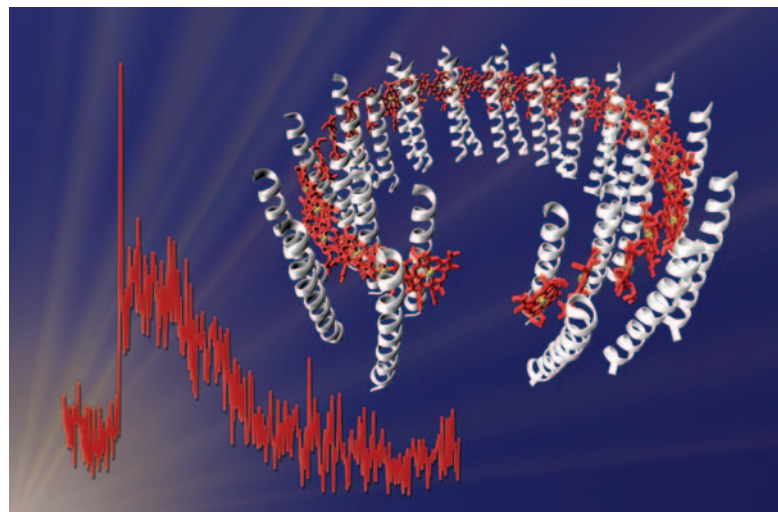
Das Reaktionszentrum ist von zwei Lichtsammelkomplexen umgeben. Der periphere LH2-Komplex absorbiert Licht bei 800 nm und 850 nm, während der zentrale LH1-Komplex bei höheren Wellenlängen absorbiert und die Photoenergie zum Reaktionszentrum transportiert. Wie die Röntgenstrukturanalyse ergab, besteht der LH2-Komplex aus zwei Ringen mit 9 bzw. 18 Molekülen des Farbstoffs Bakteriochlorophyll. Im 9er-Ring haben die Moleküle einen Abstand von 2,1 nm und sind nur schwach gekoppelt. Die optischen Anregungen sind im Wesentlichen auf einzelnen Molekülen lokalisiert, sodass sich im Anregungsspektrum des Rings mehrere scharfe Linien bei 800 nm finden. Beim 18er-Ring liegen die Farbstoffmoleküle weniger als 0,9 nm auseinander und sind stärker gekoppelt. Die optischen Anregungen sind daher delokalisiert, und das Spektrum besteht aus kollektiven Anregungen. Diese Anregungen lassen sich mit dem Frenkelschen Exzitonmodell beschreiben. Aus den Einzelmolekülspektren lassen sich Rückschlüsse auf die Anordnung der Farbstoffmoleküle und damit auf die Struktur des Proteins ziehen.

Während man die Struktur des LH2-Komplexes auf 0,2 nm genau bestimmt hat, ist die Situation für die LH1-Antennenkomplexer. Je nach Spezies variiert deren Struktur

erheblich, und es können Dimere oder Monomere, in denen jeweils rund 30 Farbstoffe angeordnet sind, vorliegen. Nur für eine Bakterienpezies liegt eine mit 0,5 nm Auflösung bestimmte Röntgenstruktur eines LH1-Komplexes vor. Daher weiß man, dass in diesem Komplex 30 Farbstoffmoleküle in einem elliptischen Ring verbunden sind, der an einer Stelle eine Lücke hat. Durch diese Lücke können die im Reaktionszentrum entstehenden Produkte den LH1-Komplex passieren. Die optischen Anregungen des Komplexes sind über mehrere Moleküle delokalisiert und lassen sich wiederum als Frenkel-Exziton auffassen. Da die Lücke im LH1-Komplex seine Symmetrie bricht, sollte im langwelligen Teil des Anregungsspektrums eine einzelne scharfe Linie auftreten. Diese konnten Köhler und Mitarbeiter in Einzelmolekülspektren sichtbar machen, während sie in den Spektren von Molekülembles ausgegittelt wurde und deshalb unsichtbar blieb.

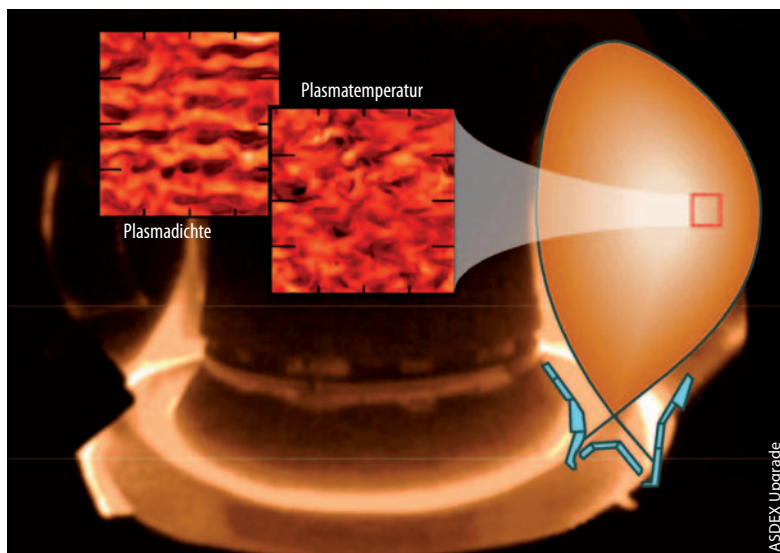
Turbulenzen

Schon Leonardo da Vinci war von turbulent strömendem Wasser fasziniert. Der britische Physiker Osborne Reynolds hat die Turbulenz erstmals gegen Ende des 19. Jahrhunderts experimentell untersucht. Sie tritt in Flüssigkeiten, Gasen und Plasmen in der Natur ebenso auf wie in der Technik. Sowohl interstellare Plasmen zeigen Turbulenz als auch die Gase in Turbinen. In



Die Lücke im LH1-Komplex (rechts) führt zu einer scharfen Linie im langwelligen Teil des Anregungsspektrums (links).

Turbulente Fluktuationen der Plasmadichte und -temperatur aus Simulationen für den Tokamak ASDEX Upgrade (im Hintergrund). Rechts ist ein Teil der poloidalen Querschnittsfläche gezeigt sowie einige Prallplatten am Plasmarand.



der Fusionsforschung hat man es mit Plasmaturbulenz zu tun, die den magnetischen Einschluss des Fusionsplasmas erschwert. Frank Jenko vom MPI für Plasmaphysik in Garching gab einen Einblick in die aktuelle Erforschung der Turbulenz, insbesondere der Mikroturbulenz von Plasmen.

Ein nichtlineares System mit vielen Freiheitsgraden, das turbulent wird, zeigt irreguläres Verhalten, erreicht aber meist einen quasistationären Nichtgleichgewichtszustand. Dabei tritt eine Kaskade von Wirbeln aller Größen auf, die mit einem Energiefluss von makroskopischen zu mikroskopischen Skalen verbunden ist. Kolmogorov hatte angenommen, dass das Energiespektrum $E(k)$ einer turbulenten Flüssigkeit für hinreichend große Wellenzahlen k skaleninvariant sei. Daraus leitete er das berühmte Gesetz $E(k) \sim k^{-5/3}$ her. Doch Kolmogorovs Annahme ist letztlich falsch, meinte Jenko. Experimente und direkte numerische Simulationen der Navier-Stokes-Gleichung hätten ergeben, dass Wirbelfäden die Flüssigkeitspartikel intermittierend einfangen, was die Skaleninvarianz verletzt.

In einem turbulenten Plasma führen die Ionen und Elektronen schnelle Gyrationbewegungen um die Magnetfeldlinien aus. Auf Längenskalen, die groß gegen den Gyrationradius sind, lässt sich die Turbulenz durch die magneto-hydrodynamischen Gleichungen beschreiben, auf kleineren Längenskalen durch gyrokinetische

Gleichungen. Dabei hat sich gezeigt, dass in inhomogenen magnetisierten Plasmen zahlreiche „mikroskopische“ Instabilitäten mit Wellenlängen im Bereich des Gyrationradius entstehen können. Sie führen zur Mikroturbulenz, die verantwortlich dafür ist, dass im Plasma starke Teilchen-, Impuls- und Wärmeströme senkrecht zu den Magnetfeldlinien auftreten. Dieser turbulente Transport führt u. a. dazu, dass Fusionsplasmen ihren magnetischen Käfig durchbrechen und die Wand des Experiments erreichen können. Mit aufwändigen gyrokinetischen Simulationen gelang es Jenko und seinen Mitarbeitern zu zeigen, dass extrem kleinskalige Instabilitäten, die man bisher für unwesentlich gehalten hatte, signifikant zum Gesamttransport beitragen. Mithilfe solcher Rechnungen lassen sich Instabilitäten besser verstehen und leichter vermeiden – zum Nutzen der kontrollierten Kernfusion.

Angeregte Kerne

Die Sektion AMOP veranstaltete gemeinsam mit dem Fachverband Hadronen und Kerne Symposien und Fachsitzungen zu Themen aus dem Spannungsbereich zwischen Kern- und Atomphysik. Adriana Pálffy vom MPI für Kernphysik in Heidelberg berichtete, dass beim Einfang eines Elektrons durch ein stark geladenes Ion dessen Kern in einen angeregten Zustand überge-

hen kann. Dieser als Nuclear Excitation by Electron Capture (NEEC) bezeichnete Prozess könnte dazu dienen, den Zerfall langlebiger metastabiler Atomkerne oder Isomere auszulösen.

Während die meisten angeregten Kerne schon nach etwa 10^{-15} s in den Grundzustand zurückkehren oder zerfallen, ist den Isomeren dieser schnelle Weg aufgrund von Auswahlregeln oder wegen der Kernstruktur versperrt. So hat das Isomer $^{180}\text{Ta}^m$ eine Halbwertszeit von über $1,2 \times 10^{15}$ Jahren, während diejenige von $^{178}\text{Hf}^m$ nur 31 Jahre beträgt. Der Zerfall des Tantal-Isomers kann Gammastrahlung auslösen. Sehr umstritten ist indes das angeblich beobachtete „Triggering“ des Hafnium-Isomers mit Röntgenstrahlung, wobei eine Energie von 2,4 MeV frei werden würde. Doch darauf beruhen bisher die Hoffnungen, dieses Isomer als leicht anzapfbare Energiespeicher oder als Sprengstoff zu nutzen. Der NEEC-Prozess könnte eine alternative Anregungsmöglichkeit bieten.

NEEC ist der zeitumgekehrte Prozess zur internen Konversion, bei der ein angeregter Kern seine Energie strahlungslos an die Elektronenhülle abgibt. Allerdings ließ sich NEEC bisher noch nicht experimentell beobachten. Falls ein Isomer durch NEEC angeregt wird, könnte es anschließend durch Strahlung oder interne Konversion in einen Zustand mit niedrigerer Energie zerfallen. In die Berechnung des Wirkungsquerschnitts für den NEEC-Prozess geht die natürliche Breite des angeregten Kernzustands ein, die für die von Pálffy und ihre Kollegen betrachteten Isomere zwischen 10^{-6} eV und 10^{-10} eV lag. Wurde dies mit der gaußschen Verteilung der am Prozess beteiligten Elektronen gefaltet, ergab sich für den Wirkungsquerschnitt eine sehr breite Resonanz, die sich noch nicht beobachten ließ. Doch Pálffy und ihre Kollegen haben berechnet, dass der NEEC-Prozess Isomere wirkungsvoller triggern kann als andere Anregungsprozesse. Experimente mit dem neuen Beschleuniger FAIR an der GSI in Darmstadt könnten dies überprüfen.