

2. Physikalische Grundlagen

2.1. Atomphysikalische Grundlagen

2.1.1. Atome im externen Magnetfeld

Für das Verständnis des optischen Pumpens sowie der Kernspintomographie sind die grundlegenden atomaren Drehimpuls-Kopplungen und die Wechselwirkung der hieraus resultierenden magnetischen Momente mit äußeren magnetischen Feldern wichtig.

Alkalimetall-Atome besitzen ein einzelnes Valenzelektron, welches im Grundzustand den Bahndrehimpuls¹ $\vec{L} = 0$ und den Eigendrehimpuls (Spin) \vec{s} mit $s = \frac{1}{2}$ besitzt². Die restlichen Elektronen bilden abgeschlossene Schalen und tragen somit nicht zu einem elektronischen Drehimpuls bei. Der Kern des Atoms besitzt einen resultierenden Gesamtdrehimpuls \vec{I} , dessen Größe vom jeweiligen Isotop abhängt (vgl. Tabelle A.4). Zu jedem dieser Drehimpulse gehört ein magnetisches Moment

$$\begin{aligned}\vec{\mu}_L &= -g_L \frac{e\hbar}{2m_e} \frac{\vec{L}}{\hbar} = -g_L \mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} \\ \vec{\mu}_s &= -g_s \frac{e\hbar}{2m_e} \frac{\vec{s}}{\hbar} = -g_s \mu_B \frac{\vec{s}}{\hbar} \\ \vec{\mu}_I &= g_I \frac{e\hbar}{2m_p} \frac{\vec{I}}{\hbar} = g_I \mu_K \frac{\vec{I}}{\hbar},\end{aligned}\quad (2.1)$$

wobei $g_L = 1$, $g_s \approx 2,0023$ [Deh91] und g_I die so genannten g-Faktoren sind, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9 \cdot 10^{-24} \text{ J/T}$ das Bohrsche Magneton mit der Elementarladung $e > 0$ und der Elektronen-Ruhemasse m_e und das Kernmagneton $\mu_K = \frac{e\hbar}{2m_p} \approx 5 \cdot 10^{-27} \text{ Am}^2$ mit der Protonen-Ruhemasse m_p sind. Durch den Quotienten aus magnetischem Moment und Drehimpuls wird das gyromagnetische Verhältnis γ definiert. Besonders für die magnetischen Momente der Kerne wird sehr häufig γ (in Einheiten von MHz/T) angegeben³:

$$\gamma = \frac{(\vec{\mu}_I)_z}{(\vec{I})_z} = g_I \frac{e}{2m_p} = g_I \frac{\mu_K}{\hbar} . \quad (2.2)$$

Diese magnetischen Momente wechselwirken miteinander und führen zu der bekannten Fein- und Hyperfeinstruktur der Elektronenzustände. Die Spin-Bahn-Kopplung ($L-S$ -Kopplung) führt zu einem gesamten Hüll-Drehmoment $\vec{J} = \vec{L} + \vec{s}$. Demnach spalten alle Zustände mit $L \geq 1$ in $2s + 1$ Zustände

¹Zur Charakterisierung eines Systems mit mehreren Elektronen, oder Nukleonen, die einen resultierenden Drehimpuls erzeugen, werden Großbuchstaben zur Kennzeichnung der jeweiligen Gesamtdrehimpulse verwendet.

²Drehimpulsvektoren besitzen die Einheit \hbar , Drehimpulszahlen hingegen sind einheitenlos.

³Hier wird im Allgemeinen auf den Index I verzichtet, da das gyromagnetische Verhältnis am häufigsten im Zusammenhang mit dem magnetischen Kernmoment verwendet wird.

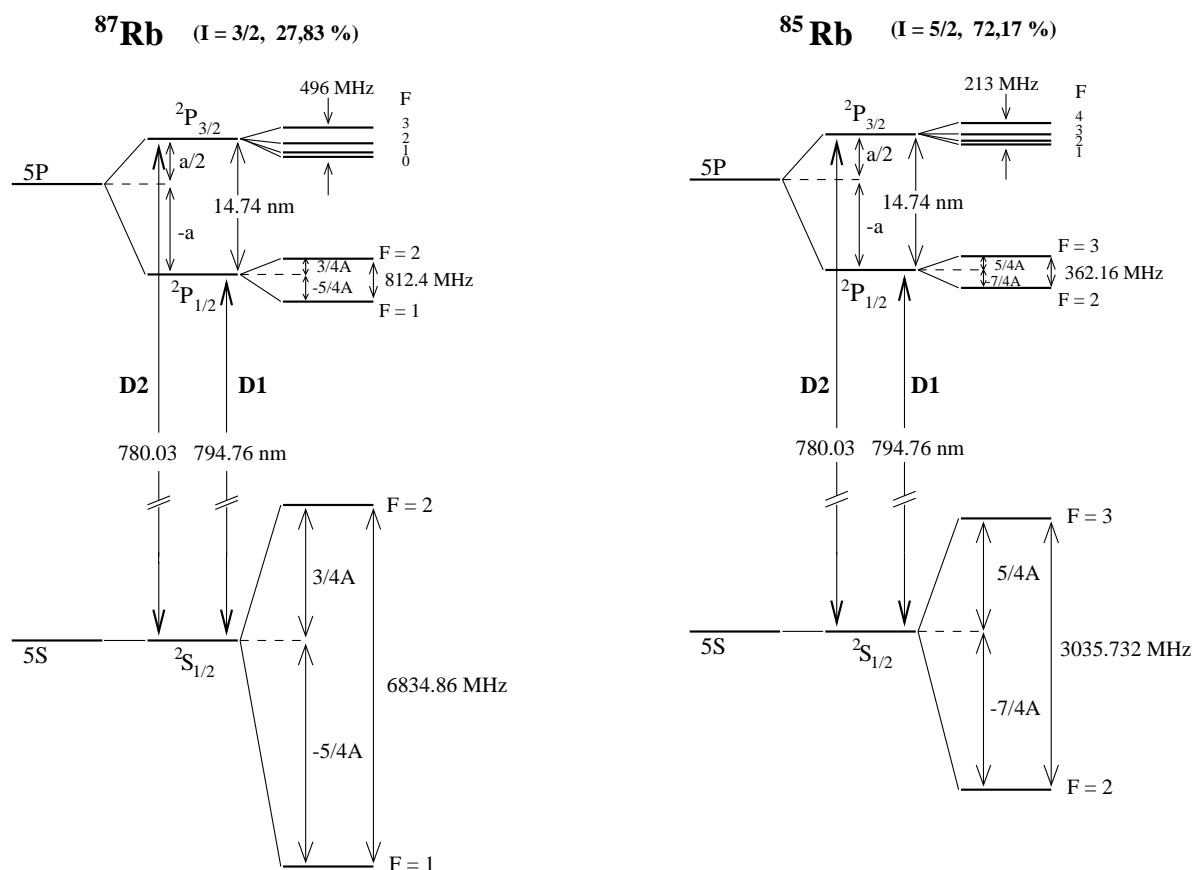


Abbildung 2.1.:

Energieniveau-Diagramme der beiden im natürlichen Rubidium vorkommenden Isotope ^{85}Rb und ^{87}Rb für die Aufspaltung der S- und P-Niveaus nach der $L - S$ -Kopplung (Feinstruktur, je in der Mitte) und der Hyperfeinwechselwirkung (jeweils ganz rechts).

auf und werden mit der Symbolik $n^{2s+1}L_J$ charakterisiert, wobei n die Hauptquantenzahl des Valenzelektrons ist und für die Bahndrehimpuls-Quantenzahl L die Buchstaben S, P, D, ... anstatt der Zahlen 1, 2, 3, ... verwendet werden. Für Alkalimetall-Atome ergibt sich der Grundzustand zu $^2S_{1/2}$ und die ersten angeregten Niveaus zu $^2P_{1/2}$ und $^2P_{3/2}$ (vgl. Anh. A.1.1 und Abb. 2.1). Die Wechselwirkung zwischen dem Hüllmoment und dem Kernmoment führt zu der wesentlich schwächeren Kopplung von \vec{J} und \vec{I} zum Gesamtdrehimpuls $\vec{F} = \vec{J} + \vec{I}$. Die sich durch die magnetische Dipolwechselwirkung des Hüllmomentes $\vec{\mu}_J$ mit dem Kernmoment $\vec{\mu}_I$ und der elektrostatischen Wechselwirkung zwischen Kernen mit einem Kernquadrupolmoment, d.h. einer nicht kugelsymmetrischen Ladungsverteilung und der Hülle ergebende Zusatzenergie ist in Gl. A.3 gegeben. Beispielhaft sind in Abb. 2.1 die an den D-Linien beteiligten Energie-Niveaus für die beiden im natürlichen Rubidium vorkommenden Isotope ^{85}Rb und ^{87}Rb gezeigt.

Die magnetischen Momente der Elektronenhülle und des Kerns wechselwirken auch mit einem externen Magnetfeld B_0 . Je nach Stärke des äußeren Feldes B_0 sind F, m_F bzw. m_I, m_S gute Quantenzahlen. Für niedrige Feldstärke B_0 , für die die Kopplung der Hyperfeinstruktur noch erhalten bleibt, ergibt sich der ZEEMAN-Effekt der Hyperfeinstruktur. Die Energieaufspaltung der Hyperfeinniveaus in je $2F + 1$ äquidistante ZEEMAN-Niveaus mit den magnetischen Quantenzahlen m_F , ist nach Gl. A.4 gegeben (vgl. Abb. 2.2). Bei einer Stärke des externen Magnetfeldes, für die die ZEEMAN-Energie

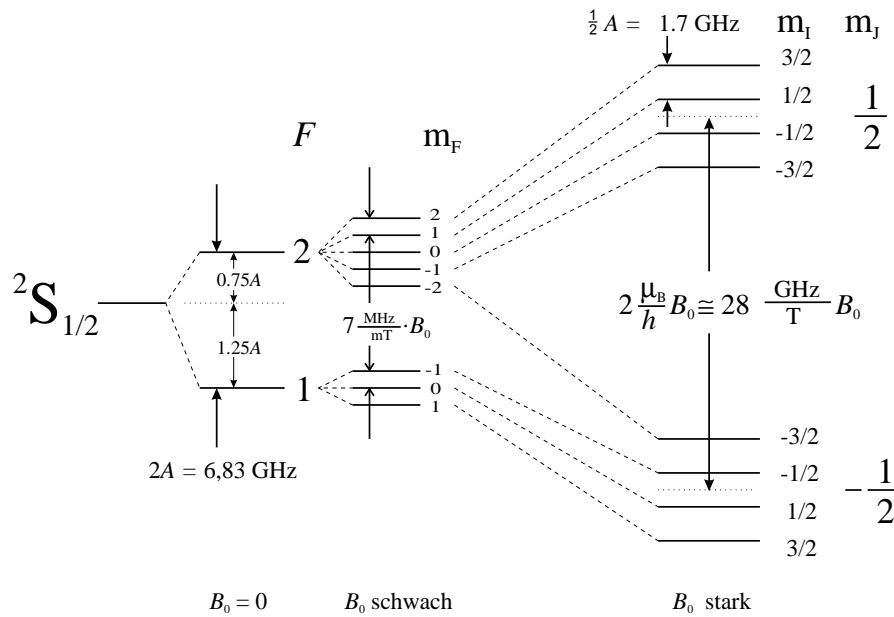


Abbildung 2.2.: Aufspaltung der Hyperfeinstruktur-Niveaus des $^2S_{1/2}$ -Grundniveaus von ^{87}Rb ($I = \frac{3}{2}$).

der Feinstruktur-Komponente groß gegen die Hyperfein-Aufspaltung ist, wird die Kopplung der magnetischen Momente der Elektronenhülle und des Kernspins aufgehoben (PASCHEN-BACK-Bereich). Die Zusatzenergie der einzelnen Niveaus ergibt sich, unter Vernachlässigung einer eventuellen Kern-Quadrupolwechselwirkung, mit Hilfe der guten Quantenzahlen m_J und m_I zu [Kop56]:

$$\Delta E_{P-B}^{HFS} = g_J m_J \mu_B B_0 + hA m_I m_J - g_I m_I \mu_K B_0 . \quad (2.3)$$

Der erste Term ist nun der ZEEMAN-Effekt der Elektronenhülle (vgl. Gl. A.2) und sorgt für eine, um das Feinstruktur-Niveau symmetrisch gelegene Aufspaltung der Zustände mit gleichem m_J . Der mittlere Term beschreibt die feldunabhängige Hyperfein-Aufspaltung dieser ZEEMAN-Niveaus mit der Dipolkonstante A aus Gl. A.3. Der letzte Term beschreibt die Zeeman-Energie des Kerns, welche aber erst bei sehr hohen B_0 -Feldern⁴ berücksichtigt werden muss. In Abb. 2.2 ist dieser Paschen-Back-Bereich beispielhaft anhand des ^{87}Rb Atoms gezeigt. Der Übergangsbereich zwischen „schwachem“ und „starkem“ äußeren Magnetfeld kann nur für Atome mit $J = \frac{1}{2}$, also $F = I \pm \frac{1}{2}$ in geschlossener Form mittels der BREIT-RABI-Formel angegeben werden [Bre31], auf welche hier nicht weiter eingegangen wird.

2.1.2. Optische Übergänge

Bei der Absorption oder Emission eines Photons finden in Atomen Übergänge zwischen den oben beschriebenen Niveaus statt. Hierbei müssen die Erhaltungssätze der Energie, des Drehimpulses sowie der Parität erfüllt werden, die Auswahlregeln zur Folge haben. Diese Auswahlregeln für die erlaubten Übergänge, die Polarisierungen des dabei emittierten Lichts und die Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen Übergänge sollen hier anhand der ZEEMAN-D1-Linien in einem Alkalimetall-Atom (ohne

⁴typischer Weise erst ab $B_0 \geq 10\text{T}$

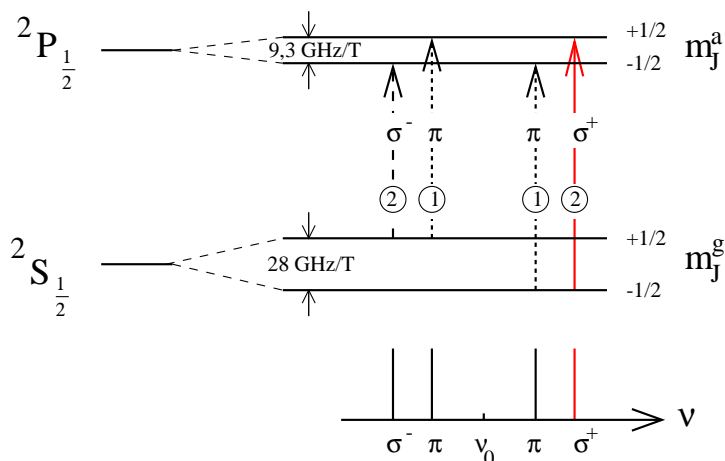


Abbildung 2.3.:
ZEEMAN-Linien des D1 Überganges in Alkalimetall-Atomen. Es sind die Zeeman-Energieen nach Gl. A.2 angegeben und in den Kreisen die Verzweigungsverhältnisse bei Emission und Absorption von unpolarisiertem Licht. Darunter sind schematisch die Emissionslinien bei senkrechter Beobachtung zu einem B_0 gezeigt.

Betrachtung der Hyperfein-Unterniveaus) besprochen werden (siehe Abb. 2.3).

Auswahlregeln

Bei atomaren Dipolübergängen muss das Elektron an das optische elektrische Feld koppeln. Diese Kopplung kann jedoch nur statt finden (wenigstens in erster Ordnung), wenn das zugehörige Dipolmatrixelement $M_{ag} = \langle \Psi_a(\vec{r}) | e\vec{r} | \Psi_g(\vec{r}) \rangle$ nicht verschwindet. Aus Symmetrieüberlegungen können bereits ohne Kenntnis der exakten Wellenfunktionen Ψ der beteiligten Niveaus die Auswahlregeln für optische Dipolübergänge abgeleitet werden. Ganz allgemein müssen die Wellenfunktionen der beiden am Dipolübergang beteiligten Niveaus unterschiedliche Parität besitzen. Weiterhin muss gelten:

$$\begin{aligned} \Delta m_J &= \pm 1, 0 & \left[\text{ohne } (m'_J = 0) \rightarrow (m_J = 0) \text{ bei } \Delta J = 0 \right] \\ \Delta J &= \pm 1, 0 & \left[\text{ohne } (J' = 0) \rightarrow (J = 0) \right]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

ZEEMAN-Linien und Lichtpolarisation

Betrachtet man spektral aufgelöst die D1-Linie eines Alkalimetalles in einem externen Magnetfeld senkrecht zu den B_0 -Feldlinien, so erkennt man vier Emissionslinien (vgl. Abb. 2.3 unten). Mit geeigneten Methoden kann gezeigt werden, dass das Licht der geringer verschobenen Linien linear und parallel zu B_0 polarisiert ist (π -Linien für parallel), das der äußeren beiden Linien linear aber senkrecht zu B_0 (σ -Linien für senkrecht). Wird jedoch in Richtung der B_0 -Feldlinien beobachtet, so sieht man nur die äußeren beiden σ -Linien, welche nun zirkular polarisiert sind. Da der E-Feldvektor der π -Linien parallel zum B_0 -Feld schwingt, kann deren Dipolstrahlung nicht entlang dieser Schwingungsachse emittiert werden⁵.

Die beiden σ -Linien werden anhand der mit ihnen verbundenen Änderung der magnetischen Quantenzahl unterschieden, wobei für σ^+ (σ^-) Licht gilt $\Delta m_J = +1$ ($\Delta m_J = -1$) mit $\Delta m_J = m_J^a - m_J^g$. Um nun den Zusammenhang zwischen den beiden σ -Linien und der rechts- und links-zirkularen Lichtpolarisation zu verstehen, sei daran erinnert, dass ein Photon, bei dem der Spin-Vektor \vec{S} (mit $|\vec{S}| = 1\hbar$) entgegengesetzt (in Richtung) zum Ausbreitungsvektor \vec{k} steht, als rechts- (links-) zirkular polarisiert

⁵Keulencharakteristik der Dipolstrahlung: Intensität $I \propto \cos^2 \alpha$, wobei α der Winkel zwischen der Lotrechten zur E-Feld-Schwingungsachse und der Beobachtungsrichtung ist.

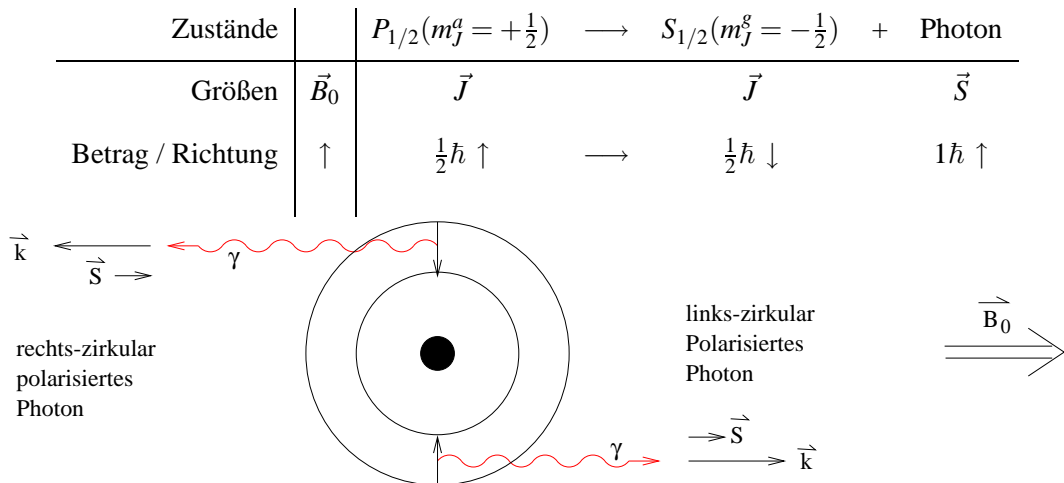


Abbildung 2.4.:

Drehimpuls-Betrachtung für die Emission eines Photons beim σ^+ -Übergang der D1-Linie. Hier muss der Photonen spin \vec{S} in Richtung der B_0 -Feldlinien zeigen.

definiert ist ([Hec87] Seite 276) und bei einem Zustand mit $m_J = +\frac{1}{2}$ ($m_J = -\frac{1}{2}$) der Drehimpulsvektor der Hülle in Richtung (entgegengesetzt) zum äußeren B_0 -Feld steht. Demnach ergibt sich aus einfachen Überlegungen zur Drehimpulserhaltung (siehe Abb. 2.4), dass σ^+ -Licht sowohl rechtszirkular polarisiert sein kann, wenn es entgegengesetzt zum B_0 -Feld emittiert wird, als auch linkszirkular polarisiert, wenn es in Richtung der B_0 -Feldlinien emittiert wird (vgl. [CT66] Seite 7)⁶.

EINSTEIN-Koeffizienten und Oszillatorstärke

Bisher wurde nur betrachtet, welche Übergänge mit welcher Lichtpolarisation angeregt werden können, nicht aber, welche Lichtintensitäten absorbiert oder auch emittiert werden. Betrachtet man ein einzelnes, ruhendes Atom so sind drei optische Übergangsmechanismen mit den jeweiligen EINSTEIN-Koeffizienten zu unterscheiden:

- spontane Relaxation aus dem angeregten (Index a) in das Grundniveau (Index g): A_{ag}
- Absorption vom Grundzustand in das angeregte Niveau: B_{ga}
- induzierte Emission vom angeregten in das Grundniveau: B_{ag}

Diese Übergangswahrscheinlichkeiten sind zwischen den einzelnen Feinstruktur-niveaus (z.B. D1- und D2-Linie) unterschiedlich. Die relative Stärke der Absorption eines Feinstruktur-niveau-Überganges könnte quantenmechanisch aus den Übergangsmatrix-Elementen M_{ag} errechnet werden. Experimentell wird als Korrekturgröße gegenüber dem klassischen Oszillatormodell die Oszillatorstärke f_{ga} verwen-

⁶Leider ist dies in der Literatur nicht immer klar und einheitlich dargestellt. So zeigt [Wal97] in seiner Fig. 3 die „Wechselwirkung von Alkalimetall-Atomen mit links-zirkular (σ^+) polarisiertem Licht“, ohne dessen Ausbreitungsrichtung anzugeben. Oder gar in [Hak90] wird auf Seite 214 festgelegt, „ σ^+ -Licht ist rechts-zirkular polarisiert, σ^- -Licht links-zirkular. Die Richtung wird dabei relativ zu den Kraftlinien des Magnetfeldes B_0 definiert, nicht relativ zur Ausbreitungsrichtung des Lichts.“

det, deren Zusammenhang zu den EINSTEIN-Koeffizienten gegeben ist durch

$$f_{ga} = \frac{4m_e \epsilon_0 h \nu}{e^2} B_{ga} = \frac{m_e \epsilon_0 c^3}{2\pi \nu^2 e^2} \frac{g_a}{g_g} A_{ag}. \quad (2.5)$$

Hier sind m_e die Elektronenmasse, $e > 0$ die Elementarladung, $\epsilon_0 = \mu_0 c^2$ die Dielektrizitätskonstante und $g_a = 2J_a + 1$ bzw. $g_g = 2J_g + 1$ die statistischen Gewichte (=Entartungsgrade) der beiden Niveaus.

Die relativen Lichtabsorptions-, oder -emissionsstärken der einzelnen ZEEMAN-Übergänge (σ^\pm , π) untereinander erhält man aus der quantenmechanischen Drehimpulskopplung der beteiligten Zustände $|J_g, m_g\rangle$ für das Grundniveau, $|J_a, m_a\rangle$ für das angeregte Niveau und $|J_P, m_P\rangle$ für das Photon [Mit94]

$$|J_a, m_a\rangle = \sum_{m_g} \sum_{m_P} C_{m_P m_g} |J_g, m_g\rangle |J_P, m_P\rangle. \quad (2.6)$$

Die Quadrate der als Koeffizienten auftretenden Amplituden $C_{m_P m_g}$, die als CLEBSCH-GORDAN-Koeffizienten bekannt sind, geben die relativen Übergangswahrscheinlichkeiten an. In Abb. 2.3 sind sie auf ganze Zahlen normiert in den Kreisen angegeben.

Die Absorptionsprofile der D1- und D2-Linien können bei schmalen Linienbreiten durch die dann auflösbare Hyperfein-Aufspaltung sehr kompliziert werden. So ändern sich nicht nur die Auswahlregeln beim Übergang vom „schwachen“ zum „starken“ Magnetfeld, sondern zudem die relativen Absorptionskoeffizienten⁷ (vgl. [Nag99, Tre90]). Bei den relativ hohen Drücken von etwa einem bar, welche beim optischen Pumpen von Edelgasen durch Spinaustauschstöße Verwendung finden, verbreitern sich jedoch die einzelnen Absorptionslinien derart (siehe Kap. 2.1.3), dass diese Hyperfeinstruktur-Aufspaltung hier nicht berücksichtigt werden muss.

2.1.3. Absorptionslinienbreiten

Die Lebensdauern von Atomzuständen können sich bei unterschiedlichen experimentellen Bedingungen stark verändern. Die daraus resultierenden Absorptions-Linienbreiten müssen vom Pumplicht möglichst gut abgedeckt werden (siehe Kap. 3.1.1), weshalb die Kenntnis der zur Linienverbreiterung beitragende Prozesse sehr wichtig ist.

Natürliche Linienbreite

Bei einem einzelnen ruhenden Atom ist die Linienbreite durch die Lebensdauer der beiden am Übergang beteiligten Niveaus bestimmt. Ist das untere Niveau das Grundniveau und somit stabil, ergibt sich die natürliche Linienbreite aus der Lebensdauer τ_a des angeregten Zustandes

$$\Delta\omega_{ag} = A_{ag} = \gamma = \frac{1}{\tau_a} = 2\pi\Delta\nu_{ag}. \quad (2.7)$$

Für die D-Linien von Natrium, Rubidium und Caesium sind die Werte für τ_a und $\Delta\nu_{ag}$ in Tab. A.4 gegeben. Aus dem einfachen Modell eines gedämpften harmonischen Oszillators des angeregten Zustandes

⁷Diese sind Magnetfeld abhängige Übergangswahrscheinlichkeiten zwischen einzelnen Hyperfein-Niveaus.

ergibt sich die Linienform der natürlichen Absorptions- und Emissionslinie zu einer LORENTZ-Linie

$$g_{Lorentz}(\nu - \nu_0) = \frac{\Delta\nu/2\pi}{(\nu - \nu_0)^2 + (\Delta\nu/2)^2} \quad (2.8)$$

mit der Mittenfrequenz $\nu_0 = c/\lambda_D$.

Dopplerverbreiterung

Bei Gasen tritt durch die Atombewegung immer der Effekt der DOPPLER-Verbreiterung auf. Hierbei absorbiert oder emittiert zwar jedes Atom selbst mit der natürlichen Linienbreite, deren Mittenfrequenz jedoch aufgrund seiner relativen Geschwindigkeit bezüglich der Lichtquelle DOPPLER-verschoben ist. Aus der MAXWELLSchen Geschwindigkeitsverteilung von Atomen (Masse m) im thermischen Gleichgewicht in Gasen ergibt sich hieraus eine gaußförmige Absorptionslinie

$$g_{Doppler}(\nu - \nu_0) = \sqrt{\frac{4 \ln 2}{\pi}} \frac{1}{\Delta\nu_{Doppler}} \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{\nu - \nu_0}{\Delta\nu_{Doppler}} \right)^2 \right] \quad (2.9)$$

mit einer Linienbreite (FWHM) von

$$\Delta\nu_{Doppler} = \frac{\nu_0}{c} \sqrt{\frac{8kT \ln 2}{m}}. \quad (2.10)$$

Für die Alkalimetall-Atome bei Temperaturen von ca. 200 °C ergeben sich DOPPLER-Linienbreiten von ca. 1 GHz.

Druckverbreiterung

Bei Drücken oberhalb mehrerer hundert mbar führen Stöße zwischen den einzelnen Atomen zu verkürzten Lebensdauern des angeregten Zustandes und demnach (vgl. Gl. 2.7) zu verbreiterten Linien. Die sich ergebende Linienform ist ebenso wie bei der natürlichen Linienbreite eine LORENTZ-Linie nach Gl. 2.8, wobei jedoch neben der Linienverbreiterung zusätzlich noch eine geringe Verschiebung der Zentralwellenlänge eintritt. Da die Stoßrate S_k linear mit der Teilchendichte N anwächst

$$S_k = N\bar{v}\sigma_k \quad (2.11)$$

und die Teilchendichte proportional zum Druck ist, nennt man diesen Mechanismus auch Druckverbreiterung. Aus der Proportionalität der mittlereren Stoßgeschwindigkeit \bar{v} zu \sqrt{T} , ergibt sich aus dieser einfachen gaskinetischen Betrachtung für die Linienbreite aufgrund von Stößen

$$\Delta\nu_{Druck} \propto N\sqrt{T}. \quad (2.12)$$

Aus einer klassischen FOURIER-Integral Theorie ergibt sich mit einer VAN DER WAALS abhängigen Stoß-Wechselwirkung von R^{-6} [Lin45]

$$\Delta\nu_{Druck} \propto NT^{0,3}. \quad (2.13)$$

Tabelle 2.1.:

Druckverbreiterung der D1-Linien von Rubidium und Caesium durch die Puffergase Helium, Xenon und Stickstoff. Die angegebenen Werte sind auf eine Atmosphäre bei der angegebenen Temperatur bezogen. Die Temperaturabhängigkeit T^x ist lediglich für den Stoß von Rb mit ^4He gemessen.

[Rom97] ($T = 353\text{ K}$)	a_{Lit} (GHz)	x	[Ber79] ($T = 295\text{ K}$)	a_{Lit} (GHz)	x
Rb- ^4He	$18,0 \pm 0,2$	$0,05 \pm 0,05$	Cs- ^4He	14 ± 1	0,3
Rb-Xe	$18,9 \pm 0,5$	0,3	Cs-Xe	16 ± 2	0,3
Rb-N ₂	$17,8 \pm 0,3$	0,3	Cs-N ₂	23 ± 5	0,3

Diese Temperatur-Abhängigkeiten der Linienverbreiterung sind jedoch experimentell nicht bestätigt ([Che57], Seite 53). Für Linienverbreiterung von Rubidium durch Stöße mit Helium ergab sich sogar eine nahezu vernachlässigbare Temperatur-Abhängigkeit von $T^{0,05}$ (vgl. Tab. 2.1). Für nicht experimentell gemessene Abhängigkeiten wird hier ebenso wie bei [Rom97] $T^{0,3}$ angenommen.

Die Wirkungsquerschnitte σ_k für den Stoß von Puffergasen mit Rubidium sind rein empirische Größen. Es werden in der Literatur direkt Linienverbreiterungen in GHz pro Teilchendichte, oder GHz pro Druck bei einer bestimmten Temperatur T_{Lit} angegeben. Diese Werte a_{Lit} für die Linienverbreiterung sind aus den oben genannten Abhängigkeiten für die jeweilige Temperatur umzurechnen

$$a(T) = \left(\frac{T}{T_{Lit}} \right)^{0,3} \cdot a_{Lit} . \quad (2.14)$$

Bei der Umrechnung der jeweiligen Teilchendichte im Experiment ist zudem zu beachten, auf welche Bedingungen sich die Angaben in der Literatur beziehen. So gibt [Ott75] die Druckverbreiterung pro *r.d.* (engl.: relative density) an, welches einer Teilchendichte bei $p_0 = 1013\text{ mbar}$ und $T = 273\text{ K}$ entspricht⁸. Die im Experiment vorhandene Teilchendichte bezogen auf eine *r.d.* ergibt sich somit aus dem idealen Gasgesetz zu

$$\frac{N(T)}{r.d.} = \frac{p}{p_0} \frac{T_0}{T} . \quad (2.15)$$

Für die Linienbreite verursacht durch einen Stoßpartner ergibt sich somit

$$\Delta\nu_{Druck}(N, T) = \frac{a(T)}{r.d.} N(T) = \left(\frac{T_0}{T_{Lit}} \right)^{0,3} \frac{T_0}{T} \frac{p}{p_0} a_{Lit} . \quad (2.16)$$

Für eine Absorptionszelle gefüllt mit Puffergasen unterschiedlicher Partialdrücke p (Puffergas) ergibt sich die Linienbreite als Summe der Einzelverbreiterungen. In Tab. 2.1 sind einige Daten für die Stoßverbreiterung von Rubidium und Caesium durch Helium, Xenon und Stickstoff aufgeführt.

Sättigungsverbreiterung

Bei der Verwendung hoher Lichtleistungen in schmalen Spektralbereichen, wie es bei der Verwendung von leistungsstarken Lasern der Fall ist, wird eine Abnahme des Besetzungsunterschiedes der durch den gepumpten Übergang verbundenen Atomzustände bewirkt. Eine damit verbundene Sättigung des

⁸Heutzutage wird diese Teilchendichte auch als ein *amagat* bezeichnet.

optischen Überganges führt bei einer homogen verbreiterten Absorptionslinie unabhängig von der Linienbreite des verwendeten Laserlichts zu einem allgemeinen Absenken des Absorptionskoeffizienten $\alpha(\omega)$, welches wiederum zu einer Verbreiterung der Absorptionslinie führt.

Betrachtet man die Besetzungsdifferenz $\Delta N = N_g - N_a$ zwischen der Teilchenzahl des am Übergang beteiligten Grundniveaus N_g und angeregten Niveaus N_a in Abhängigkeit der nicht gesättigten Besetzungsdifferenz ΔN_0 so ergibt sich

$$\Delta N = \frac{\Delta N_0}{1 + S}, \quad (2.17)$$

wobei S der charakteristische Sättigungsparameter ist. In gleicher Weise wie sich die Besetzungsdifferenz reduziert, reduziert sich auch der Absorptionskoeffizient α . Für eine homogen verbreiterte Absorptionslinie ergibt sich durch eine monochromatische Pumpwelle wiederum eine LORENTZ-Linie, jedoch mit einer größeren Linienbreite [Dem93a]

$$\Delta \nu_s = \Delta \nu_{\text{homogen}} \cdot \sqrt{1 + S_0}, \quad (2.18)$$

wobei S_0 der Sättigungsparameter bei der Zentralwellenlänge ist.

2.2. Kern-Magnetische-Resonanz (NMR)

In diesem Kapitel soll auf die Grundlagen der NMR insoweit eingegangen werden, wie sie für das Verständnis der in dieser Arbeit verwendeten Messmethoden (*on-line* NMR und Kernspin-Tomographie) nötig sind. Wie in Gl. 2.1 schon gezeigt besitzt jedes Atom mit Kernspin $\vec{I} \neq 0$ ein magnetisches Kernmoment $\vec{\mu}_I$. In einem Magnetfeld \vec{B}_0 spalten Kernzustände in $2I + 1$ ZEEMAN-Niveaus mit den Zusatzenergien

$$E_{m_I} = -\gamma \hbar B_0 m_I \quad (2.19)$$

auf. Für Kerne mit Spin $I = \frac{1}{2}$ (z.B. ^1H , ^3He , ^{129}Xe), wie sie im Weiteren betrachtet werden sollen, ergibt sich demnach für die beiden Zustände mit $m_I = +\frac{1}{2}$ und $m_I = -\frac{1}{2}$ eine Energiedifferenz von

$$\Delta E = E_{m_I=-1/2} - E_{m_I=+1/2} = \hbar \gamma B_0, \quad (2.20)$$

wobei $\omega_L = |\gamma B_0|$ die LARMORfrequenz ist.

Für die in einer Spule in einem Kernresonanz-Experimente induzierte Spannung ist die Netto-Kernmagnetisierung \vec{M} eines zu messenden Volumenelementes V entscheidend, welche sich aus der Summe aller kernmagnetischen Momente ergibt

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \vec{\mu}_i. \quad (2.21)$$

Da sich Kernspins mit $I = \frac{1}{2}$ in einem äußeren Magnetfeld nur parallel ($m_I = +\frac{1}{2}$) oder antiparallel ($m_I = -\frac{1}{2}$) ausrichten können, ist die Polarisation der Kernspins, wie sie in Gl. 1.1 gegeben ist, ein direktes Maß für diese Nettomagnetisierung. Im thermischen Gleichgewicht ist das Verhältnis der Be-

setzungszahlen N_- ($m_I = -\frac{1}{2}$) und N_+ ($m_I = +\frac{1}{2}$) der beiden entsprechenden ZEEMAN-Niveaus durch die BOLTZMANN-Verteilung

$$\frac{N_-}{N_+} = e^{-\frac{\Delta E}{kT}} \quad (2.22)$$

gegeben. Demnach ergibt sich die thermische Polarisation zu

$$P_{therm} = \left| \frac{1 - e^{-\frac{\Delta E}{kT}}}{1 + e^{-\frac{\Delta E}{kT}}} \right| \approx \left| \frac{\Delta E}{2kT} \right| = \left| \frac{\hbar\gamma B_0}{2kT} \right|, \quad (2.23)$$

wobei die Näherung bei Raumtemperatur sehr gut ist, da dann selbst bei Magnetfeldstärken von mehreren Tesla $\left| \frac{\Delta E}{kT} \right| \ll 1$ ist. In Tab. A.5 sind die Werte für P_{therm} bei 300 K bei einem Magnetfeld von 3 T angegeben.

2.2.1. BLOCHSche Gleichungen - Kernresonanz

Die makroskopische Größe der Kernmagnetisierung aus Gl. 2.21 erlaubt es, die Kernresonanz mit Hilfe der klassischen Mechanik zu beschreiben. Wird jene Magnetisierung $\vec{M} \parallel \vec{B}_0$ aus ihrer Gleichgewichtslage ausgelenkt, so wirkt auf sie in einem äußeren Magnetfeld \vec{B} ein Drehmoment, sodass sich die Bewegungsgleichung zu

$$\frac{d\vec{M}(t)}{dt} = \vec{M}(t) \times \gamma \vec{B} \quad (2.24)$$

ergibt. In einem statischen Magnetfeld $\vec{B} = \vec{B}_0$ (mit $\vec{M}(t) \nparallel \vec{B}_0$) präzediert die Magnetisierung mit der LARMORfrequenz

$$\vec{\omega}_L = -\gamma \vec{B}_0 \quad (2.25)$$

um die Richtung des äußeren Magnetfeldes.

Da die Spins aber mit ihrer Umgebung wechselwirken, muss Gl. 2.24 um phänomenologische Relaxationsterme ergänzt werden, wodurch man zu den BLOCHSchen-Gleichungen gelangt

$$\frac{d\vec{M}(t)}{dt} = \vec{M}(t) \times \gamma \vec{B}_0 + \begin{pmatrix} -\frac{M_x(t)}{T_2} \\ -\frac{M_y(t)}{T_2} \\ \frac{M_0 - M_z(t)}{T_1} \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

M_0 ist der Betrag der thermischen Magnetisierung, gegen die das System aufgrund der Spin-Gitter-Wechselwirkung mit der Zeitkonstante T_1 relaxiert. Eine transversale Magnetisierung relaxiert mit T_2 aufgrund einer Dephasierung der Einzelspins durch die Spin-Spin-Wechselwirkung. Im realen Experiment führen Inhomogenitäten (ΔB_0) des statischen Feldes innerhalb des Messvolumens zu einer zusätzlichen Dephasierung der Quermagnetisierung, deren Zeitkonstante T_2^* näherungsweise gegeben

ist durch

$$\frac{1}{T_2^*} = \frac{1}{T_2} + |\gamma \Delta B_0|. \quad (2.27)$$

In gepulsten Kernresonanz-Experimenten wird die Auslenkung der Gesamtmagnetisierung \vec{M} durch ein magnetisches Wechsel-Feld realisiert, welches senkrecht zum \vec{B}_0 -Feld steht und dessen Frequenz $\vec{\omega} \approx \vec{\omega}_L$ ist. Zur Lösung der Bewegungsgleichung wird üblicherweise in ein sich mit der Winkelgeschwindigkeit $\vec{\omega}$ drehendes Koordinatensystem übergegangen, so dass in den BLOCHschen-Gleichungen \vec{B}_0 zu ersetzen ist durch

$$\vec{B}_{\text{eff,rot}} = \vec{B}_0 + \vec{B}_1 + \frac{\vec{\omega}}{\gamma}. \quad (2.28)$$

Das magnetische Wechsel-Feld \vec{B}_1 kann im Falle einer linearen Polarisierung in zwei gegenläufig zirkular polarisierte Felder zerlegt werden. Im Resonanzfall $\vec{\omega} = \vec{\omega}_L$ ergibt sich $\vec{B}_{\text{eff,rot}} = \vec{B}_1$ und die zirkulare Polarisationskomponente mit dem gleichen Umlaufsinn wie $\vec{\omega}_L$ erzeugt eine Präzession der Kernmagnetisierung um das \vec{B}_1 -Feld mit der RABI-Frequenz $\omega_1 = |\gamma B_1|$. Die gegenläufige Komponente kann in erster Näherung vernachlässigt werden⁹.

Für kurze Hochfrequenz-Pulse, deren Dauer $\tau \ll T_1, T_2^*$ ist, kann die Relaxation während der Anregung des Spinensembles vernachlässigt werden. Hierfür ergibt sich der als Flipwinkel bezeichnete Winkel α zwischen dem \vec{B}_0 -Feld und der Gesamtmagnetisierung \vec{M} direkt nach der Anregung zu

$$\alpha = |\gamma \tau B_1|. \quad (2.29)$$

Der zeitliche Verlauf der resultierenden Quermagnetisierung ergibt sich aus Gl. 2.26 zu

$$M_{\perp}(t) = M_0 \sin \alpha e^{-i\omega_L t} e^{-t/T_2^*}. \quad (2.30)$$

Die Längsmagnetisierung beträgt $M_0 \cos \alpha$ direkt nach dem Puls und relaxiert mit der Zeitkonstante T_1 gegen den Wert des thermischen Gleichgewichts. Die präzedierende Quermagnetisierung induziert in einer mit ihrer Achse senkrecht zum B_0 -Feld angeordneten Empfangsspule einen Spannungsverlauf proportional zu Gl. 2.30. Aus diesem Signal des so genannten freien Induktionszerfalles (*engl.*: **Free Induction Decay**, FID) kann nach einer komplexen Fourier-Transformation und Multiplikation mit einem geeigneten Phasenfaktor $e^{i\varphi_0}$ als Realteil die Absorptionslinie und als Imaginärteil die Dispersionslinie gewonnen werden. Der Betrag der Fourier-Transformation ist phasenunabhängig, das Signal besitzt aber eine größere Linienbreite als das Absorptionssignal.

2.2.2. Ortskodierung (MRI) und k -Raum-Formalismus

Im Weiteren soll das Grundprinzip der Bildgebung mittels Kernspintomographie (*engl.* **Magnetic Resonance Imaging**, MRI) erklärt werden. Aus Gl. 2.25 ist ersichtlich, dass ein ortsabhängiges \vec{B}_0 -Feld zu ortsabhängigen LARMOR-Frequenzen führt. Die einfachste Methode, um die detektierten NMR-Signale bestimmten Orten im Messobjekt zuzuordnen, besteht darin, dem \vec{B}_0 -Feld z.B. ein ortsab-

⁹In zweiter Näherung führt sie zu der als BLOCH-SIEGERT-Shift bekannten Resonanzverschiebung.

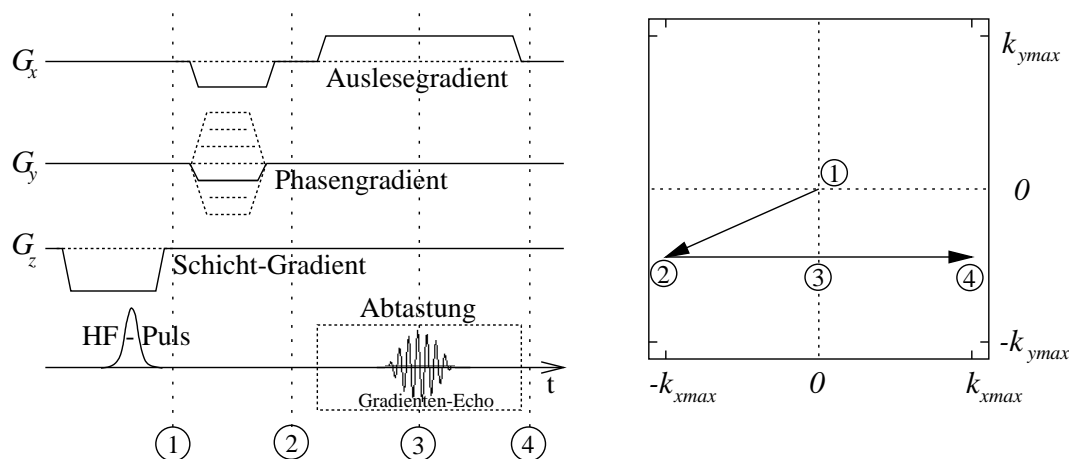


Abbildung 2.5.:

Vereinfachtes Pulsschema einer Gradienten-Echo-Sequenz. Links ist der Zeitverlauf der gepulsten Gradienten gezeigt und rechts eine Ebene im k -Raum und die entsprechende Trajektorie für die gezeichnete Pulsfolge. Zur Abtastung einer $N_x \times N_y$ -Matrix im Ortsraum muss diese Sequenz N_y -fach durchlaufen werden, mit mindestens $2N$ komplexen Datenpunkte während der Abtastung.

hängiges Zusatzfeld zG_z mit dem linearen Magnetfeld-Gradienten $G_z = \frac{\partial B_z}{\partial z}$ zu überlagern. Mit einem Anregungspuls einer Frequenz-Bandbreite Δf wird dadurch lediglich eine Schicht von Spins angeregt, deren Dicke Δz gegeben ist durch

$$\Delta z = \left| \frac{\Delta f}{G_z \gamma / 2\pi} \right|. \quad (2.31)$$

Die Schichtposition z_m (Mitte des Schichtprofils) ist gegeben durch

$$z_m = \frac{\omega - \omega_L}{\gamma G_z} \quad (2.32)$$

und ist wegen Gl. 2.37 (s. Kap. 2.2.3) auch von der chemischen Verschiebung δ abhängig, welches zu dem so genannten chemical shift artefact führen kann.

Um auch in den beiden übrigen Raumrichtungen eine Ortsauflösung zu erzielen, kann man entweder mit zwei weiteren Schicht-selektiven Pulsen jeweils zueinander orthogonalen Schichten anregen (z.B. PRESS-Methode - **P**oint **R**ESolved **S**pektroscopy, wie sie bei der Einzelvoxel-Spektroskopie verwendet wird), oder aber mit Phasenkodier- und Auslesegradienten das empfangene Signal im Ortsfrequenzraum (k -Raum) kodieren. Nach einer zweidimensionalen Fourier-Transformation erhält man dann aus den Signalen des k -Raumes die gesuchte (relative) Spindichte-Verteilung $\rho(x,y)$ im Ortsraum.

Anhand einer in dieser Arbeit häufig verwendeten Gradienten-Echo-Sequenz sollen die Besonderheiten des k -Raum-Formalismus verdeutlicht werden (siehe Abb. 2.5), wobei $\gamma > 0$ angenommen wird. O.B.d.A. wird die Schichtselektion entlang der \vec{B}_0 -Feldrichtung (die i.A. entlang der z -Achse gelegt wird) mit einem Gradienten $G_z = \frac{\partial B_z}{\partial z}$ während des Anregungspulses durchgeführt und damit das Problem auf die $k_x - k_y$ -Ebene reduziert. Der so genannte Phasengradient $G_y = \frac{\partial B_z}{\partial y}$ (hier o.B.d.A. in y -Richtung) zwischen Anregungspuls und Signaldetektion (Zeitdauer τ_p) führt im rotierenden Koordinatensystem zu einer von der y -Position und Gradienten-Amplitude abhängigen Zusatzphase der

Kernspins

$$\phi_y(y) = -\gamma y G_y \tau_p = -2\pi y k_y \quad \text{mit} \quad k_y = \frac{\gamma}{2\pi} G_y \tau_p. \quad (2.33)$$

Nach dem Schalten des Phasengradienten G_y befindet sich das Spinsystem im k -Raum bezüglich der k_y -Richtung an der Position $k_y = \frac{\gamma}{2\pi} G_y \tau_p$. Während des Schaltens des Phasengradienten wird zusätzlich der so genannte Auslesegradient $G_x = \frac{\partial B_x}{\partial x}$ zunächst in negativer Richtung $G_x < 0$ geschaltet, der eine ortsabhängige Zusatzphase

$$\phi_x(x) = 2\pi x k_{x_{max}} \quad \text{mit} \quad -k_{x_{max}} = \frac{\gamma}{2\pi} G_x \tau_p \quad (2.34)$$

der Kernspins erzeugt. Dies bringt das Spinsystem im k -Raum bezüglich der k_x -Richtung zu $-k_{x_{max}}$ und bewirkt eine definierte und reversible Dephasierung der Spins (siehe Abb. 2.5 ②). Während der anschließenden Datenaufnahme im Zeitintervall $t = 0 - 2\tau_p$ erzeugt der Auslesegradient eine von der x -Position und vom Zeitpunkt der Datenaufnahme abhängige Zusatzphase

$$\phi_{read}(x, t) = -\gamma \int_0^t x G_x(\tau) d\tau = -2\pi x k_{read}(t) \quad \text{mit} \quad k_{read}(t) = \frac{\gamma}{2\pi} \int_0^t G_x(\tau) d\tau. \quad (2.35)$$

Die Abtastung der k -Raumzeile entlang der k_x -Achse (von $-k_{x_{max}}$ nach $k_{x_{max}}$) beim aktuellen k_y -Wert führt zu einer teilweisen Refokussierung der Spins und zu einem Gradientenecho bei $k_x = 0$ (siehe Abb. 2.5 ③). Das in einer Empfangsspule während der Datenaufnahme induzierte Signal ergibt sich zu

$$s(t) \propto \Delta z \iint M_{\perp}(x, y) e^{-2\pi i[yk_y - xk_{x_{max}} + xk_{read}(t)]} dx dy, \quad (2.36)$$

woraus ersichtlich wird, dass nach einer 2D-FOURIER-Transformation des im k -Raumes kodierten Signals die Spindichteverteilung $\rho(x, y) \propto M_{\perp}(x, y)$ erhalten werden kann, wenn alle Positionen im k -Raum abgetastet werden. Dazu erfolgt die so beschriebene zeilenweise Abtastung des k -Raumes für n verschiedene Werte von G_y . Die Bildgröße im Ortsraum (*engl.*: Field Of View, FOV) ergibt sich als Inverses des Abtastintervalles Δk im k -Raum (Näheres hierzu in [Noe00]). Die Berechnungen und Einstellungen der Gradientenstärken und -längen werden in kommerziellen Kernspintomographen üblicherweise durch die bereitgestellten Programme bewerkstelligt.

Die aus der Optik bekannten Eigenschaften des Impulsraumes bei der räumlichen Filterung von Licht gelten ebenso für den k -Raum in der Kernspintomographie. Demnach liegt der Großteil der Bildinformation (Kontrastinformation) in dem Bereich um $k_x = k_y = 0$ und die hohen Ortsfrequenzen enthalten hauptsächlich die Detailschärfe des Bildes. Für die Bildgebung mittels hyperpolarisierter Edelgase ergeben sich Besonderheiten bei der Abtastung des k -Raumes, da die fernab vom thermischen Gleichgewicht befindliche Kernspin-Polarisation zum einen durch jeden HF-Impuls nach $M_0 \cos \alpha$ und zum anderen im Körper durch ein verhältnismäßig kurzes $T_1 \approx 20 \text{ sec}$ abgebaut wird. Um bei der Aufnahme eines Bildes die starken Signale der ersten k -Raumzeilen in ein Ortsbild hoher Intensität überführen zu können, ist es günstig, durch ein alternierendes Abtasten der k -Raumzeilen, beginnend mit $k_y = 0$, zuerst die Signale im Zentrum des k -Raumes aufzunehmen.

2.2.3. Chemische Verschiebung und Magnet-Resonanz-Spektroskopie (MRS)

Nach Gl. 2.25 ist die LARMOR-Frequenz direkt proportional zum \vec{B}_0 -Feld am Ort des Kerns. Ist das Atom, dessen Kernspin-Dichteverteilung gemessen wird, chemisch gebunden, so wird das Magnetfeld am Kernort durch die Elektronen der restlichen Molekülatome beeinflusst, i.A. abgeschirmt. Daraus ergibt sich die neue LARMOR-Frequenz zu

$$\omega = |\gamma (1 - \sigma) B_0|, \quad (2.37)$$

wobei die Abschirmkonstante σ von der Größenordnung 10^{-4} bis 10^{-6} ist. Die sich daraus ergebende Verschiebung δ der Resonanzfrequenz gegenüber der einer Referenzsubstanz mit σ_{ref} ist definiert als

$$\delta = \frac{\omega - \omega_{ref}}{\omega_{ref}} = \sigma_{ref} - \sigma, \quad (2.38)$$

wird in ppm (**p**arts **p**er **m**illion) angegeben und ist eine vom \vec{B}_0 -Feld unabhängige Größe. Für Xenon wird als Referenz das Signal aus der Gasphase genommen.

Wird nun aus einem Volumenbereich ein FID aufgenommen, in dem das zu untersuchende Atom in unterschiedlichen chemischen Umgebungen vorkommt, so ergeben sich nach der FOURIER-Transformation Resonanz-Linien bei unterschiedlichen Frequenzen. Für die Frequenzachse ist zu beachten, dass Signale bei niedrigeren Frequenzen bezüglich der Referenz nach links aufgetragen werden, wobei sich für die ppm-Skala (siehe Gl. 2.38) nach links steigende Werte ergeben (vgl. Abb. 5.12).

Ortsaufgelöste Messungen solcher Spektren können zum einen mittels Anregung dreier zueinander senkrechter Schichten geschehen, wobei hier pro Volumenelement (Voxel) drei Anregungspulse notwendig sind (z.B. PRESS-Sequenz). Dieses führt zu langen Aquisitionszeiten für ein aus mehreren Voxeln aufgebautes Volumen. Bei der Verwendung von hyperpolarisierten Gasen ist zudem der Effekt der Spinerstörung innerhalb der gesamten drei Schichten bei der selektiven Anregung ein zu großer Verlustmechanismus.

Mittels des Verfahrens des CSI (Chemical Shift Imaging) kann dieser Effekt der Anregung von Teilbereichen, die nicht zur Signalrekonstruktion beitragen, vermieden werden. Für eine komplette dreidimensionale Abtastung des Ortsraumes mit N^3 Voxeln sind aber N^3 Einzelmessungen (mit der Zeitdauer T_R) notwendig. Allerdings kann durch Reduktion der Ortsdimensionen die Zahl der Einzelmessungen

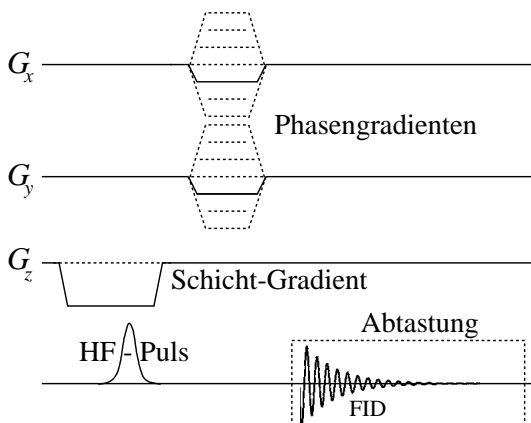


Abbildung 2.6.: Vereinfachtes Pulsschema einer 2D-CSI-Sequenz. Nach dem schichtselektiven Anregungspuls wird mittels der beiden Phasengradienten im k -Raum ein Punkt „angefahren“, an dem der FID aufgenommen wird. Für eine $N_y \times N_x$ -Matrix im Ortsraum muss diese Sequenz $N_x \times N_y$ -fach durchlaufen werden.

verringert werden. Für eine 2D-CSI-Aufnahme, die zusätzlich durch einen Gradienten während der Anregungspulse Schicht selektiv durchgeführt werden kann, benötigt man demnach N^2 Einzelmessungen. In Abb. 2.6 ist hierfür ein vereinfachtes Pulsschema gezeigt. Nach der Datenaufnahme ist eine dreidimensionale FOURIER-Transformation nötig um die Spektren der einzelnen Pixel zu erhalten. Für eine 1D-CSI-Aufnahme reduziert sich das Pulsschema aus Abb. 2.6 um einen Phasengradienten, wobei die Ortsauflösung in Richtung des verwendeten Phasengradienten ist.

Um kürzere Aquisitionszeiten zu erzielen und die Zahl der Anregungspulse zu minimieren, gibt es schnelle spektroskopische Bildgebungsmethoden wie z.B. EPSI (Echo Planar Spectroscopic Imaging), bei denen jedoch T_2^* lange genug sein muss, um pro Anregungspuls eine genügende Anzahl von Echos abtasten zu können. Des Weiteren werden hohe Oszillationsfrequenzen der Gradienten zur Abtastung eines breiten Frequenzspektrums benötigt, so dass sehr schnell die technischen Grenzen des Gradientensystems erreicht werden.

2.3. SQUIDs zur Messung des magnetischen Flusses

Supraleitende Quanten-Interferometer (*engl.* Superconducting QUantum Interference Devices, SQUIDs) können als Fluss-Spannungs-Wandler eingesetzt werden, um extrem kleine Änderungen der magnetischen Flussdichte \vec{B} zu messen. Das Einsatzgebiet von SQUIDs hat sich von der Grundlagenphysik über die Metrologie unter anderem hin zur Geophysik und biomagnetischen Untersuchungen entwickelt.

An der PTB Berlin (Fachlaboratorium „Kryosensorik“) werden selbst entwickelte SQUIDs gefertigt und im Fachlaboratorium „Bioelektrizität und Biomagnetismus“ für biomagnetische Untersuchungen eingesetzt. Mit Hilfe dieser SQUID-Sensoren wurde im Rahmen dieser Arbeit die freie Spinpräzession von hyperpolarisiertem ^{129}Xe in sehr niedrigen Magnetfeldern nachgewiesen. Hier soll kurz auf die Grundlagen der verwendeten dc-SQUIDs eingegangen werden, welche sich aus den drei quantenmechanischen Phänomenen der Supraleitung, der Flussquantisierung und des JOSEPHSON-Effektes ergeben.

2.3.1. JOSEPHSON-Kontakt

Nach Vorhersagen von B. JOSEPHSON sollten COOPER-Paare durch eine dünne Trennschicht zwischen zwei Supraleitern ohne Spannungsabfall tunneln können, solange der Strom I_J durch die Barriere den kritischen Strom I_0 nicht überschreitet [Jos62]. Ein Bauelement, in dem zwei Supraleiter mittels Aus-

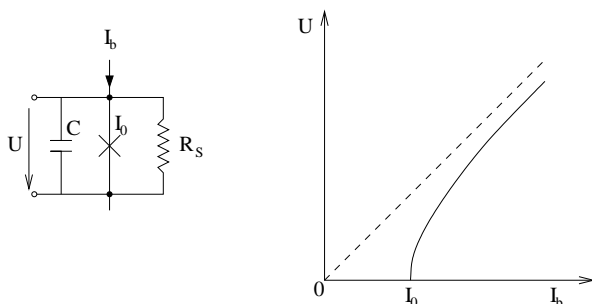


Abbildung 2.7.:

Schaltungsmodell des RCSJ-Modells eines JOSEPHSON-Kontakts (links). Parallel zum Suprastrom durch den JOSEPHSON-Kontakt mit dem kritischen Strom I_0 fließt ein Strom durch den normalleitenden Widerstand R_S und ein dielektrischer Verschiebungsstrom verursacht durch die Kapazität C . Die ideale Kennlinie eines stark bedämpften JOSEPHSON-Kontakts ist rechts daneben gezeigt.

tausch von Cooper-Paaren wechselwirken, heißt JOSEPHSON-Kontakt und wird im Schaltbild als Kreuz symbolisiert. Um der stark hysteretischen Spannungs-Strom-Kennlinie eine eindeutige Beziehung von Strom und Spannung aufzuprägen, wird in realen Schaltungen zur Bedämpfung ein Parallelwiderstand R_S aufgebracht. Die sich ergebende Kennlinie nähert sich stark an die ideale Widerstands-Kennlinie $U = IR$ an (siehe Abb. 2.7). Nach der DC-JOSEPHSON-Besziehung sind der Strom I_J und Spannung U über dem JOSEPHSON-Kontakt mittels der Phasendifferenz δ verknüpft

$$I_J = I_0 \sin \delta, \quad (2.39)$$

wobei die zeitliche Änderung der Phasendifferenz nach der AC-JOSEPHSON-Besziehung gegeben ist

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} = \frac{2e}{\hbar} U. \quad (2.40)$$

Demnach wächst die Phasendifferenz bei konstanter Spannung linear mit der Zeit an, wodurch sich mit Gl. 2.40 ein Wechselstrom mit der Frequenz

$$\omega_J = \frac{2e}{\hbar} U \quad (2.41)$$

ergibt, welche im Mikrowellenbereich liegt.

2.3.2. dc-SQUIDS

Es gibt zwei Grundtypen von SQUID-Systemen, deren Bezeichnung von der Art des Auslesesignals abgeleitet wird: rf-SQUIDS und dc-SQUIDS. Beiden gemein ist der supraleitende Ring. Der rf-SQUID besitzt nur einen JOSEPHSON-Kontakt und wird über einen induktiv gekoppelten Schwingkreis ausgelesen. Der dc-SQUID jedoch, welcher an der PTB Berlin verwendet wird, besitzt zwei JOSEPHSON-Kontakte und das von ihm generierte, feldabhängige Signal wird über den an ihm abfallenden Spannungsmittelwert $\langle U \rangle$ ausgelesen. In Abb. 2.8 ist neben dem Ersatzschaltbild gezeigt, wie sich die Spannungs-Strom-Kennlinie in Abhängigkeit des durch die SQUID-Fläche A tretenden Flusses $\Phi_a = \vec{B}_a \cdot \vec{A}$ verändert, wobei

$$\Phi_0 = \frac{h}{2e} \approx 1,257 \cdot 10^{-15} \text{ Vs} \quad (2.42)$$

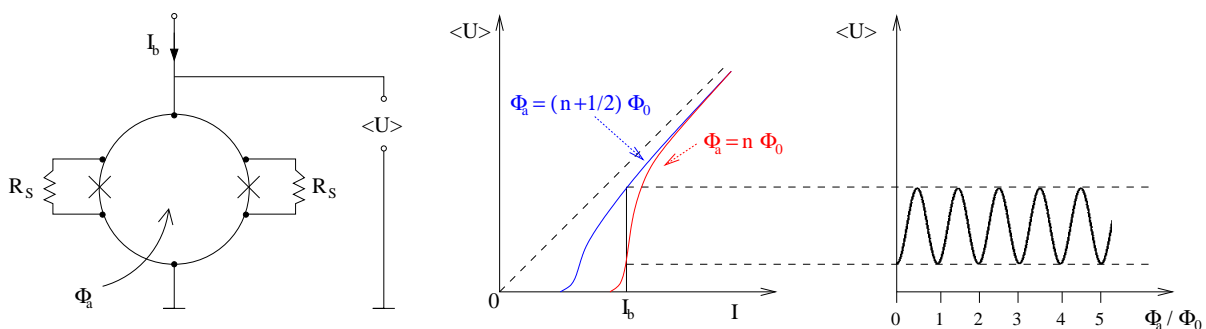


Abbildung 2.8.: Ersatzschaltbild, $\langle U \rangle - I$ -Kennlinie und $\langle U \rangle - \Phi_a$ -Kennlinie eines dc-SQUIDS.

das elementare Flussquant ist. Aus der Interferenz der beiden hochfrequenten SQUID-Ströme stellt sich der im SQUID fließende Ringstrom I_{cir} derart ein, dass der effektive Fluss im SQUID Φ_{eff} ein Vielfaches von Φ_0 ist ($\Phi_{eff} = n\Phi_0 = \Phi_a - LI_{cir}$, mit L = SQUID-Induktivität). Bei Änderung des Flusses Φ_a um $\pm \frac{1}{2}\Phi_0$ ist es energetisch günstiger, mehr/weniger Fluss im SQUID aufzunehmen und einen neuen Flussquanten-Zustand zu besetzen, anstatt den Ringstrom weiter zu erhöhen/erniedrigen. Ein sich stetig ändernder Fluss erzeugt also eine Modulation des Ringstromes, welches als Modulation in $\langle U \rangle$ zu sehen ist (siehe Abb. 2.8 rechts). Um nun ein derart nichtlineares und periodisches Verhalten über einen weiten Flussbereich zu linearisieren, werden die hier verwendeten dc-SQUIDs mit einer Gegenkopplungselektronik (engl. **Flux Locked Loop**, FFL) betrieben. Zudem ist es zur Unterdrückung von Spannungs- und Stromrauschen nötig, weitere Rückkopplungselemente anzubringen (Reduktion des Sensorrauschen durch APF, engl. **Additional Positive Feedback**; Kompensation der Biasstromfluktuation BCF, engl. **Bias Current Feedback**). Als zusammenfassender Überblick mit weiteren Referenzen über SQUIDs und deren Auslese-Elektronik sei hier [Wei96] genannt.

