

# Von ultrakalten Quantengasen zu heißen Plasmen

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

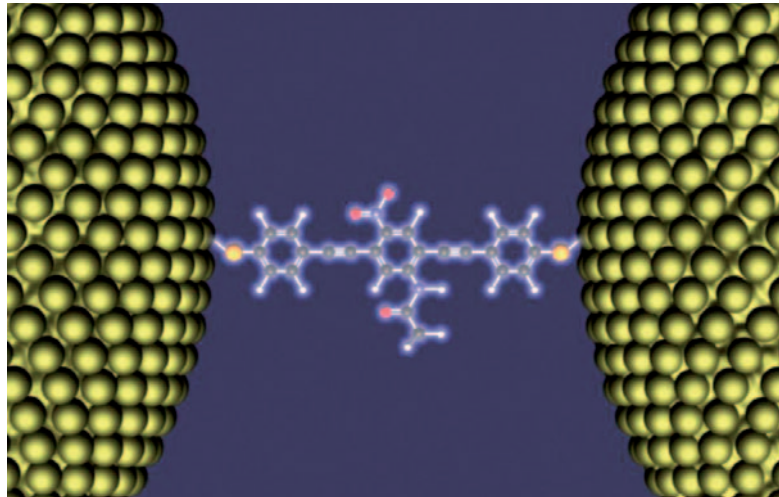
Rainer Scharf

Eine große Themenvielfalt kennzeichnete die beiden Frühjahrs-tagungen des Arbeitskreises Atome, Moleküle, Quantenoptik und Plasmen (AMOP) in Frankfurt und Augsburg. Einen kleinen Eindruck davon soll die folgende Auswahl vermitteln. Die AMOP-Tagung in Frankfurt war mit rund 1300 Teilnehmern die bisher größte ihrer Art.

## Molekulare Elektronik

Das Potenzial der herkömmlichen Halbleiterelektronik ist zwar noch längst nicht ausgeschöpft, doch nach Alternativen wird bereits intensiv gesucht. Dazu gehört die molekulare Elektronik, die die elektrischen Eigenschaften einzelner Moleküle nutzen will, um die Miniaturisierung der elektronischen Bauelemente weiter voranzutreiben. Zunächst muss man jedoch den Ladungstransport durch einzelne Moleküle besser verstehen und das Problem der elektrischen Kontaktierung zufriedenstellend lösen. Gianuario Cuniberti von der Universität Regensburg beschrieb die Bemühungen, die molekulare Elektronik auf ein solideres theoretisches Fundament zu stellen.

Moleküle sind sehr flexible Objekte, deren mechanische Schwingungen den Ladungstransport beeinflussen können. Der Strom wiederum regt diese „Vibronen“ an. Um den Ladungstransport durch Moleküle, die zwischen zwei elektrischen Kontakten sitzen, möglichst realistisch zu beschreiben, haben Cuniberti und seine Mitarbeiter ein aufwändiges Verfahren entwickelt und zunächst auf vereinfachte Molekülmodelle angewandt. War die Kopplung zwischen den Elektronen und den Vibronen schwach, so blieben die



FZ Karlsruhe

Bei einem Einzelmolekülkontakt stellt ein einzelnes organisches Molekül die elektrische Verbindungen zwischen zwei Goldkontakten her.

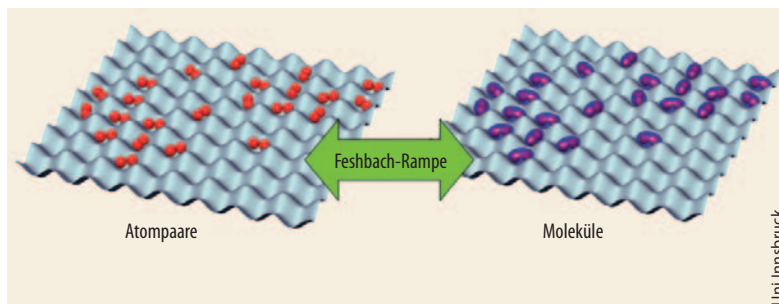
Schwingungen sehr nahe am thermischen Gleichgewicht, und ihre Rückwirkung auf den Elektronentransport war vernachlässigbar. Bei stärkerer Kopplung wurden die Vibronen von den Elektronen aus dem thermischen Gleichgewicht getrieben, wodurch sie die Nichtgleichgewichtsverteilung der Elektronen änderten, was wiederum zu einer Änderung der Strom-Spannungs-Kurve führte. Für Moleküle, die mehrere Benzolringe enthalten, sollte sich der elektrische Widerstand erheblich ändern, wenn die Benzolringe gegeneinander verdreht werden können. Diesen Effekt kann man vielleicht für einen molekularen Schalter nutzen.

Kohlenstoff-Nanoröhren könnten eine wichtige Rolle in der molekularen Elektronik spielen, z. B. als Verbindungsdrähte. Bei Experimenten hat man die überraschende Beobachtung gemacht, dass Elektroden aus gut leitendem Metall, wie Gold oder Aluminium, mit der Nanoröhre einen hohen Kontaktwiderstand haben, während dieser Widerstand für weniger gut leitende Metalle, wie Palladium oder Titan, deutlich geringer war. Cuniberti und seine Mitarbeiter haben den elektrischen

Transport berechnet, der durch die Kontaktfläche zwischen einem Nanoröhrenabschnitt und einer ihn umgebenden Metallschicht stattfindet. Dabei stellte sich heraus, dass Kontakte mit einer hinreichend großen Länge von einigen hundert Nanometern die Elektronen umso besser durchließen, je schwächer die Kopplung zwischen Metall und Nanoröhre war. Für gut leitende Metalle war die Kopplungsstärke groß und die Elektronen wurden am Ende des Kontaktes sehr stark reflektiert – was die Durchlässigkeit des Kontaktes erheblich reduzierte. Bei der Kontaktierung von Kohlenstoff-Nanoröhren ist also Gold nicht die erste Wahl.

## Ultrakalte Quantengase

Seit der ersten Erzeugung von Bose-Einstein-Kondensaten 1995 konnte die Physik der ultrakalten Quantengase mit immer neuen, Aufsehen erregenden Resultaten aufwarten, wie Rudi Grimm von der Universität Innsbruck ausführte. Beispiele sind der Atomlaser oder der Übergang eines ultrakalten bosonischen Atomgases in einem optischen Gitter von einer Supra-



Rubidiumatome lassen sich durch Änderung eines äußeren Magnetfeldes paarweise zu Dimeren verbinden, wenn man eine sog. Feshbach-Resonanz durch-

führt. Auf diese Weise kann man mit einer Effizienz von über 95 % Moleküle in einem wohldefinierten Quantenzustand herstellen.

flüssigkeit zu einem Mott-Isolator. Ebenso kann man an ihnen den Zusammenschluss von Fermionen zu Cooper-Paaren und die Entstehung des BCS-Zustands studieren, wie man ihn von der Supraleitung her kennt. Dies ist möglich, seit man mithilfe von Feshbach-Resonanzen in einem Magnetfeld die atomare Wechselwirkung in ultrakalten Atomgasen präzise regulieren und zwischen abstoßend und anziehend variieren kann.<sup>1)</sup>

Führt man ein Atomgas durch eine Feshbach-Resonanz, so verbinden sich die anfangs isolierten Atome paarweise zu Molekülen. In diesen Dimeren sind die Atome allerdings sehr locker gebunden, so dass sie z. B. bei Kollisionen schnell wieder zerbrechen würden. Bei Dimeren aus fermionischen Atomen sind diese Kollisionen aber wegen des Pauli-Verbots stark unterdrückt. Die Dimere, die Bosonen sind, existieren deshalb ausreichend lange, um ein molekulares Bose-Einstein-Kondensat bilden zu können. Dimere aus bosonischen Atomen, die nicht durch das Pauli-Verbot vor Kollisionen geschützt sind, muss man auf andere Weise daran hindern, einander zu nahe zu kommen. Grimm und seine Kollegen haben dies mithilfe eines periodischen dreidimensionalen optischen Potentials geschafft.

Sie brachten ein Bose-Einstein-Kondensat von Rubidium-87-Atomen in das optische Potential und führten die Atome durch eine Feshbach-Resonanz. In den Potentialmulden, die zufällig mit zwei Atomen besetzt waren, bildeten sich daraufhin Dimere. Dort wo nur ein Atom saß, passierte nichts. Enthielt

eine Mulde drei oder mehr Atome, so entstand mindestens ein Dimer, das allerdings sogleich mit anderen Atomen oder Dimeren in der Mulde kollidierte und nach einigen Millisekunden zerbrach. Daraufhin konnten diese Atome das optische Potential verlassen. Mit einer Kombination von Licht- und Mikrowellenpulsen ließ sich das optische Potential auch von den Einzelatomen säubern, so dass es schließlich nur noch isolierte Dimere enthielt.

Die verbliebenen Moleküle hatten eine Lebensdauer von 700 ms. Wie Grimm berichtete, hat seine Gruppe auch deutliche Hinweise auf die Bildung von Trimeren aus bosonischen Atomen.<sup>2)</sup>

## Quantenchaos

Für den Ladungstransport in ungeordneten mesoskopischen Leitern hat man universelles Verhalten beobachtet: So schwankt die Leitfähigkeit, die von der statistischen Verteilung der Störstellen abhängt, von einer Probe zur anderen – doch die typische Größe der Schwankungen hat einen einheitlichen Wert. Die universellen Transporteigenschaften von ungeordneten Leitern lassen sich mit der Zufallsmatrixtheorie erfassen, die Eugene Wigner zur statistischen Beschreibung der Spektren komplexer Atomkerne entwickelt hatte. Doch auch hoch angeregte Energieniveaus von Quantendynamiken, die im klassischen Limes völlig chaotisch sind, zeigen ein statistisches Verhalten, das sich empirisch mit der Zufallsmatrixtheorie beschreiben lässt. Andererseits kann man für diese Dyna-

miken die spektralen Eigenschaften durch semiklassische Quantisierung über periodische Bahnen berechnen. Dadurch wird es möglich, die Gültigkeit der Vorhersagen der Zufallsmatrixtheorie für chaotische Dynamiken zu beweisen. Über die Fortschritte auf diesem Gebiet berichtete Fritz Haake von der Universität Duisburg-Essen.

Im Zentrum der Überlegungen steht der spektrale Formfaktor  $K(\tau)$ : die Fourier-Transformierte der Zweipunktkorrelation der energieabhängigen Energieniveaudichte. Für  $K(\tau)$  macht die Zufallsmatrixtheorie drei verschiedene universelle Vorhersagen, je nachdem, ob die betrachtete Dynamik zeitumkehrinvariant ist oder nicht, und falls ja, ob das Quadrat der Zeitumkehr den Wert +1 oder -1 hat. Zahlreiche experimentelle und numerische Untersuchungen haben ergeben, dass der Formfaktor von chaotischen Quantendynamiken für kleines  $\tau$  mit der entsprechenden universellen Vorhersage der Zufallsmatrixtheorie übereinstimmt. Für großes  $\tau$  zeigen sich hingegen nichtuniverselle Eigenheiten der jeweiligen Dynamik. Der Formfaktor lässt sich als Summe über Paare von periodischen Bahnen der chaotischen Dynamik ausdrücken. Dabei zeigt sich ein enger Zusammenhang zwischen den Fluktuationen im Quantenspektrum einerseits und den klassischen Korrelationen der Wirkungen der periodischen Bahnen andererseits. Fritz Haake und seine Mitarbeiter haben jetzt für chaotische Dynamiken – durch Summation über bestimmte Familien von Paaren periodischer Bahnen – eine Potenzreihenentwicklung von  $K(\tau)$  um  $\tau = 0$  hergeleitet, die in *allen* Ordnungen mit den Vorhersagen der Zufallsmatrixtheorie übereinstimmt.

Entscheidend sind dabei solche Bahnpaare, von denen sich eine Bahn selbst ein- oder mehrfach schneidet, während die andere Bahn diese Selbstkreuzungen knapp vermeidet, aber ansonsten der ersten Bahn eng folgt.<sup>3)</sup>

Vor zehn Jahren hatten Aleiner und Larking bemerkt, dass solche Bahnpaare mit (vermeidenden)

1) s. Physik Journal, März 2004, S. 33

2) Jeweils drei Cäsium-133-Atome, die sich paarweise kaum anziehen, werden dabei durch eine sog. Efimov-Resonanz zusammengehalten, s. Physik Journal, Mai 2006, S. 17,

3) Zwei solche Bahnen haben eine beliebige kleine Wirkungsdifferenz, wenn der Kreuzungswinkel nach null geht, und geben semiklassisch einen Beitrag zu  $K(\tau)$ .

Selbstkreuzungen den Elektronentransport z. B. durch einen Hohlraum beeinflussen, da sie zur schwachen Lokalisierung beitragen. Sieber und Richter hatten dann mithilfe solcher Bahnpaare den linearen Term in der Potenzentwicklung von  $K(\tau)$  berechnet. Die Gruppe von Fritz Haake hat ihre Methode nun auch auf den chaotischen Elektronentransport durch Hohlräume angewandt. In semiklassischer Näherung konnten sie u. a. das Schrotrauschen berechnen, zu dem auch Quadrupel von Bahnen mit (vermeidenden) Selbstkreuzungen beitragen. Diese semiklassischen Ergebnisse gehen weit über bisherige Resultate der Zufallmatrixtheorie hinaus.

### Plasma-modifizierte Oberflächen

Wie man Materialoberflächen mithilfe von kalten Plasmen interessante Eigenschaften geben kann, beschrieb Heinz Hilgers von der IBM Deutschland in seinem Vortrag in Augsburg. Im Rahmen eines vom BMBF geförderten Projektes zur Nanofunktionalisierung von Oberflächen (NANOFUNK) wurde am Fraunhofer-Institut für Grenzflächen- und Bioverfahrenstechnik (FhG-IGB) in Stuttgart in Zusammenarbeit mit IBM ein neuartiges Beschichtungsverfahren entwickelt. Dabei wachsen in einer Niederdruck-Plasmaentladung nanometerdicke Polymerschichten auf einer Materialoberfläche und verändern dadurch deren Eigenschaften wie z. B. das Adsorptions- und Benetzungsverhalten.

Der Plasmaprozess findet bei Drucken unterhalb von 1 mbar in Argon als Trägergas, Stickstoff oder Sauerstoff statt. Dem Gas wird Trifluoromethan ( $\text{CHF}_3$ ) oder Hexafluoropropylen ( $\text{C}_3\text{F}_6$ ) als Ausgangssubstanz für die Polymerisation zugegeben. Eine gepulste Wechselspannung von 13,56 MHz zwischen zwei Elektroden zündet das Plasma. Es entstehen Ionen und Radikale, die auf die zu beschichtende Oberfläche prallen und sie chemisch aktivieren. Daraufhin binden die Fluorkohlenwasserstoffe

kovalent an die Materialoberfläche und bilden einzelne funktionale Gruppen oder vernetzte Polymere. Wie dicht die Oberfläche schließlich mit Polymeren bedeckt ist, hängt von der Länge der Wechselspannungspulse ab. Michael Haupt und seine Kollegen vom FhG-IGB haben beobachtet, dass für relativ kurze Pulse eine Plasmaätzung stattfindet, die die Oberfläche glättet und hydrophiler macht. Für längere Pulse entsteht eine hydrophobe Polymerschicht von einigen Nanometern Dicke. Die Temperaturen, die sich dabei an der Oberfläche entwickeln, liegen zumeist unterhalb von 50 °C, sodass auch Kunststoffe bearbeitet werden können, ohne dass sie dabei schmelzen.

Das Plasmaverfahren hat zahlreiche Anwendungen. So kann man die Haftreibung von Aluminiumoberflächen durch eine Beschichtung mit Fluorkohlenstoffen deutlich verringern. Das erspart eine Schmierung von Scharnieren, die z. B. bei der Entfaltung der Sonnenkollektoren eines Satelliten auf Antrieb funktionieren müssen. Textilien für Wasser abweisende oder leicht zu reinigende Kleidungsstücke erhalten durch eine Fluorkohlenstoffbeschichtung die gewünschten Benetzungseigenschaften. Auch optischen Eigenschaften von Oberflächen lassen sich mithilfe der Polymerbeschichtung verändern, um z. B. Sicherheitslabel auf Geldscheinen herstellen.

### Quantenprozessor mit Ionen

Mit quantenmechanisch verschränkten und in Fallen festgehaltenen Ionen lassen sich Quantenprozessoren aufbauen, die Qubits verarbeiten können. Ferdinand Schmidt-Kaler, der von der Universität Innsbruck an die Universität Ulm gekommen ist, hat in seinem Vortrag prototypische Verschränkungsexperimente beschrieben. Normalerweise erwartet man, dass die nichtlokale Verschränkung zusammengesetzter Quantensysteme äußerst fragil ist und sehr schnell durch Umwelteinflüsse zerstört

4) Die Bewegungen der Moleküle im Hydrationswasser finden auf einer Zeitskala unterhalb von 1 ps statt.

wird. Doch das ist nicht immer der Fall, wie Schmidt-Kaler und seine Kollegen an zwei Kalziumionen gezeigt haben, die im Abstand von 5  $\mu\text{m}$  in einer Paul-Falle festgehalten wurden. Die Ionen befanden in einem verschränkten Zustand zweier Zeeman-Unterniveaus („0“ und „1“) des  $S_{1/2}$ -Grundzustandes mit  $m_j = \pm 1$ , der die Form des Bell-Zustandes  $|01\rangle + |10\rangle$  hatte. Dieser verschränkte Zustand ist sehr robust, da seine beiden Bestandteile dieselbe Energie haben und da die beiden Unterniveaus nicht spontan zerfallen können. Die Verschränkung blieb über 20 Sekunden erhalten.

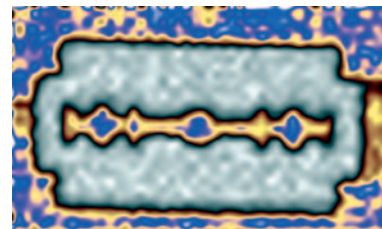
Dass die beiden Ionen tatsächlich im gewünschten verschränkten Zustand präpariert waren, haben die Forscher durch Zustandsstomographie nachgeprüft. Dazu wird die Dichtematrix des gewünschten Zustands zunächst in orthogonale hermitesche Operatoren zerlegt. Um die Dichtematrix der beiden Zwei-Niveau-Ionen zu entwickeln, benötigt man 16 Operatoren. Welche Erwartungswerte diese Operatoren für den tatsächlich vorliegenden Anfangszustand der Ionen haben, bestimmt man durch zahlreiche Fluoreszenzmessungen. Dazu bringt man nach jeder Messung die Ionen erneut in den Anfangszustand, verändert ihn in bestimmter Weise und wiederholt die Messung. Um die Erwartungswerte der 16 Operatoren zu erhalten, wurde das Experiment 1800 Mal wiederholt, was weniger

als 40 Sekunden dauerte. Schließlich stand fest, dass der Anfangszustand der Ionen zu 89 % mit dem gewünschten Bell-Zustand übereinstimmte. Nach einer Sekunde betrug die Übereinstimmung noch 86 %, und selbst nach 20 s war sie noch größer als 50 %. Die langlebigen verschränkten Zustände könnte man dazu nutzen, um in einem Quantencomputer Informationen zu speichern und zu verarbeiten.

## THz-Spektroskopie

Der Frequenzbereich der Terahertz-Strahlung oder des fernen Infrarot ist für viele Forschungsgebiete von Interesse. Die Energie der THz-Strahlung entspricht der Energie schwacher intramolekularer Wechselwirkungen. Auf der entsprechenden Picosekunden-Zeitskala führen z. B. im Wasser gelöste Proteinmoleküle ihre „Gerüstschwingungen“ aus und finden die kollektiven Bewegungen der Wassermoleküle statt, die ein Protein umgeben. Die THz-Spektroskopie, die einzigartige Einblicke in das molekulare Geschehen geben kann, wurde lange dadurch behindert, dass es keine leistungsstarken Strahlungsquellen für diesen Frequenzbereich gab. Doch mit der Entwicklung von Germaniumlasern und Quantenkaskadenlasern sowie von empfindlichen Detektoren hat sich das in den letzten Jahren geändert. Martina Havenith von der Ruhr-Universität Bochum berichtete über die Möglichkeiten, die die THz-Spektroskopie seither eröffnet.

Ihre Arbeitsgruppe hat durch durch Absorptionsmessungen im THz-Bereich herausgefunden, wie weit ein in Wasser gelöstes Zuckermolekül die umgebenden Wassermoleküle beeinflusst. Die Wassermoleküle lagern sich über Wasserstoffbrücken an das Zuckermolekül an und bilden eine Hydrationssschicht. In dieser Schicht sind die Wassermoleküle starrer miteinander vernetzt als in reinem Wasser.<sup>4)</sup> Das starre Hydrationswasser absorbiert die THz-Strahlung für bestimmte Frequenzen stärker als das reine Wasser. Durch präzise

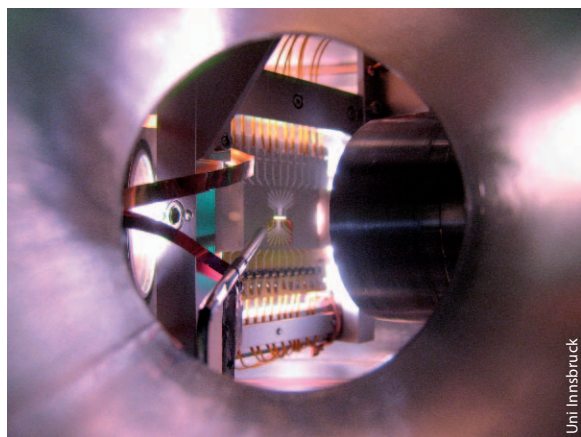


Uni Bochum

Strahlung mit einer Frequenz von 2,4 THz enthüllt eine von Papier verdeckte Rasierklinge.

Messung der Absorptionskoeffizienten von reinem Wasser und von schwachen Zuckerlösungen ließ sich der Volumenanteil des Hydrationswassers bestimmen und damit die Dicke der Hydrationssschicht, die jedes Zuckermolekül umgibt. Demnach ist die Hydrationssschicht 5  $\text{\AA}$  dick und enthält ca. 123 Wassermoleküle, zusätzlich zu den direkt am Zucker angelagerten Wassermolekülen. Dieses Ergebnis stimmt sehr gut mit Molekularmodellrechnungen überein.

Mithilfe der THz-Spektroskopie kann man sehr geringe Mengen von Biomolekülen in der flüssigen oder festen Phase nachweisen. In Bochum wurde dazu ein Verfahren entwickelt, bei dem absorbierte Biomoleküle die Totalreflexion von THz-Strahlung abschwächen. Die mit einem Germaniumlaser erzeugte Strahlung wurde in einen Siliziumresonator eingekoppelt, wo sie zwischen zwei Spiegeln für fernes Infrarot hin und her lief. Ein Teil der Strahlung verließ den Resonator und wurde mit einem Germaniumdetektor registriert. Wenn die Seitenfläche, an der die Totalreflexion auftrat, mit einer dünnen Aminosäureschicht überzogen war, drang abklingende Strahlung in die Schicht ein, regte die Aminosäuren zu Schwingungen an und wurde dadurch abgeschwächt. Die vielfache Reflexion an den Spiegeln verstärkte diese Abschwächung. Es zeigte sich, dass mit diesem Verfahren Schichtdicken von 50 nm nachgewiesen werden konnten, was etwa 33 Lagen von Aminosäuren entsprach. In Zukunft werden wohl noch viele weitere spektroskopische Verfahren für die THz-Strahlung eingeführt werden, die bisher nur für den optischen oder infraroten Spektralbereich zur Verfügung stehen.



Uni Innsbruck

In einer linearen Paul-Falle werden vier Schneiden aus Edelstahl und zwei Metallspitzen im Abstand von 6 mm mit elektrischen Wechsel- und Gleichfeldern versorgt. Damit lassen sich zwei Ionen im Abstand von 5  $\mu\text{m}$  speichern. Aus dem Fluoreszenzlicht der Ionen lässt sich die in ihnen gespeicherte Quanteninformation ermitteln.