

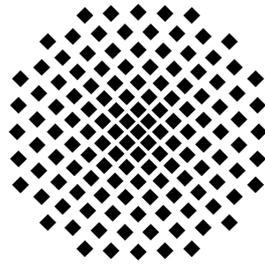
Zeitaufgelöste Spektroskopie von Desorptions- und
Absorptionsprozessen in Dampfzellen

Bachelorthesis

vorgelegt von:

Maxim Leyzner

am 27. November 2017



Universität Stuttgart

Prüfer: Prof. Dr. Tilman Pfau

Betreuer: M. Sc. Fabian Ripka

5. Physikalisches Institut
Universität Stuttgart

Hiermit erkläre ich,

- dass ich meine Arbeit selbstständig verfasst habe
- dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe
- dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist
- dass sie die Arbeit weder vollständig noch in Teilen bereits veröffentlicht wurde
- dass der Inhalt des elektronischen Exemplars mit dem des Druckexemplars übereinstimmt

Zusammenfassung

Es wurde ein Versuch unternommen, die mittels zeitaufgelöster Spektroskopie in einer Dampfzelle aus Siprasil (SiO_2) mit 14nm Saphirbeschichtung (Al_2O_3) gemessene Transmission des Übergangs $|5S_{1/2}, F = 3 \rangle \rightarrow |5P_{3/2}, F = 4 \rangle$ in Rubidium zu erklären und mittels Simulation zu reproduzieren. Dazu wurde ein Desorptionsmodell der in der Dampfzelle ablaufenden Vorgänge vorgestellt. Die anschließende Simulation sollte sowohl Aussagen über das Oberflächenpotential, die Verteilungsfunktion der desorbierenden Atome und die Abstrahlcharakteristik, als auch über die Atomanzahl und die Atomdichten in der Zelle ermöglichen.

Die Transmissionsfunktion konnte nur unter der Annahme einer unrealistisch hohen Potentialbarriere auf der Oberfläche reproduziert werden (Abbildung 27, Gleichung 43). Dabei konnten keine eindeutigen Aussagen über die Abstrahlcharakteristik getroffen werden. Zuletzt konnte die Größenordnung der Atomanzahl und der Atomdichten abgeschätzt werden (Tabelle 1).

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Motivation	3
3	Inhalt und Ziel der Arbeit	4
4	Theoretische Grundlagen der Simulation	4
4.1	Verteilungsfunktion der desorbierenden Teilchen	4
4.2	Dynamik der desorbierten Atome	6
4.3	Der Gaußstrahl	7
4.4	Der Absorptionsübergang	8
4.5	Die Transmissionsfunktion	8
5	Die Simulation	10
5.1	Eindimensionales Modell der Zelle	10
5.2	Zweidimensionales Modell der Zelle	12
5.2.1	Geometrische Aspekte des Modells	12
5.2.2	Modell diskreter Desorptionsdefekte	15
5.2.3	Modell homogen verteilter Desorptionsdefekte	21
5.3	Dreidimensionales Modell der Zelle	23
5.3.1	Das Modell Poissonverteilter Desorptionsdefekte	23
5.4	Der Faltungsvorgang	27
5.5	Vergleich der gefalteten und ungefalteten Signale	28
5.5.1	3D-Modell homogenverteilter Desorptionsdefekte	29
6	Das Experiment	31
6.1	Der Aufbau	31
6.2	Vergleich mit experimentellen Daten und Ergebnisse	31
7	Fazit und Ausblick	36
8	Quellen	37

1 Einleitung

Die Erforschung der Grenzflächenphänomene ist ein altes [1],[2],[3],[4], aber auch zugleich ein aktuelles [6],[12],[13],[14] Forschungsgebiet der modernen Physik. Von besonderem Interesse ist dabei die Wechselwirkung von Molekülen und Atomen mit Grenzflächen von Festkörpern. Dabei spielen Phänomene wie Adsorption und Desorption eine wichtige Rolle. Gefragt wurde vor allem sowohl nach der Winkelverteilung der sich im Raum ausbreitenden desorbierten Atome, der sog. „Abstrahlcharakteristik“, als auch z.B. nach der Geschwindigkeitsverteilung, oder der Adsorptions- bzw. Desorptionswahrscheinlichkeit.

J.C.Maxwell war z.B. der Meinung, dass auf eine Oberfläche auftreffenden Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeit f adsorbiert werden, während die restlichen Teilchen mit einer Wahrscheinlichkeit $1-f$ reflektiert werden [1]. Die adsorbierten Teilchen können wiederum mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit desorbieren, welche dann den Gesetzen von Maxwell, Boltzman und Knudsen folgen. Dabei ist unter dem Gesetz von Knudsen die räumliche Verteilung der desorbierten Atome zu verstehen, die $\cos \theta$ folgen soll, wobei θ der Winkel bezüglich des Normalenvektors der Desorptionsfläche ist [2]. Laut Maxwell würden sich die desorbierten Teilchen als ruhendes Gas mit der Temperatur des Desorbers verhalten: „...I have preferred to treat the surface as something intermediate between a perfectly reflecting and a perfectly absorbing surface, and, in particular, to suppose that of every unit of area a portion f absorbs all the incident molecules, and afterwards allows them to evaporate with velocities corresponding to those in still gas at the temperature of the solid, while a portion $1-f$ perfectly reflects all the molecules incident upon it“ [1]. Dabei war die Vorstellung, dass die Teilchen durch die komplexe Mikrostruktur der Grenzfläche so lange eingefangen werden, bis ihre Anfangsparameter verloren gehen. Dazu könnte man sagen, die Teilchen würden sich mit der Grenzfläche im thermischen Gleichgewicht befinden. Dieser Ansicht war z.B. auch P. Clausing, indem er auf Arbeiten von Langmuir und Wertenstein verwies: „...Nach den Untersuchungen von Langmuir, von Wertenstein und vom Verf. [4] dauert die Adsorptionszeit,..., so lange,..., dass der Einfluss von Richtung und Geschwindigkeit beim Einfall des betreffenden Moleküls im Augenblicke der Emission ganz verschwunden ist [3]. “

In derselben Arbeit folgerte der Autor außerdem aus der Annahme, dass dieselbe Anzahl an Molekülen adsorbiert wie desorbiert wird, dass das Verhalten der desorbierten Teilchen einem beliebigen Gesetz, und nicht unbedingt dem Kosinus-Gesetz folgen können. Diese Aussage fasste er im Satz 2 zusammen und benannte es als „Prinzip des detaillierten Gleichgewichts“ [3]: „Das Prinzip des detaillierten Gleichgewichtes fordert, dass für jede Richtung und jede Geschwindigkeit die Anzahl der emittierten (desorbierten) Moleküle der Anzahl der adsorbierten gleich ist. Dieser zweite Satz,..., eröffnet die Möglichkeit, dass die emittierten Moleküle einem beliebig anderen Gesetz als dem Kosinusgesetze folgen [3].“ In seinem ersten Satz folgerte P. Clausing aufgrund des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik jedoch die Notwendigkeit des Kosinusgesetzes: „Der zweite Hauptsatz fordert die Gültigkeit des Kosinusgesetzes für die Richtungsverteilung der Moleküle, die eine Wand verlassen “ [3]. Anscheinend standen die beiden Sätze in Widerspruch zueinander, dies deutete er jedoch damit, dass die Gesamtheit aller die Fläche verlassenden Moleküle, nämlich die der desorbierten, und die der reflektierten, einer Kosinusverteilung folgen: „Der erste Satz gibt aber in diesen Fällen die Kompensa-

tion in der Art, dass emittierte und reflektierte Moleküle zusammen dem Kosinusgesetz gehorchen [3]“.

Tatsächlich haben spätere Messungen gezeigt, dass das Verhalten der desorbierten Moleküle sowohl von der Maxwell-Boltzmann Verteilung, als auch von Knudsens Gesetz deutlich abweicht [5], [6]. So unterschied sich z.B. die Form der Geschwindigkeitsverteilung der von einer polykristallinen Nickeloberfläche desorbierten Deuteriummoleküle deutlich von der Maxwell'schen Form. Dies wurde gezeigt, indem die Geschwindigkeitsverteilung mit der eines Maxwell'schen Molekularstrahls verglichen wurde. Dazu wurden sog. Time Of Flight (TOF)- Messungen, wo die Anzahl der Moleküle über der Flugstrecke [5] oder der Flugzeit [6] aufgetragen ist, durchgeführt. Dabei ist zu sehen, dass die Desorptionskurve im Vergleich zur maxwell'schen Kurve zu kleineren Strecken verschoben ist, was wiederum heißen könnte, dass es sich um schnellere, und deswegen auch um „heißere“ Moleküle handeln könnte. Tatsächlich handelte es sich beim TOF-Spektrum der desorbierten Moleküle um eine maxwell'sche oder eine der maxwell'schen Form sehr ähnliche Verteilung, die jedoch 45 Prozent höheren Temperaturen als die der Nickeloberfläche ($T_{surface} = 1073\text{K}$) entsprach [5], [7]. Das winkelaufgelöste Desorptionsverhalten von D_2 und H_2 zeigten beinahe identische Ergebnisse. Eine Reihe von Messungen [5] mit Membranen bei Oberflächentemperaturen zwischen 863 und 1183 K identifizierte das Verhalten der desorbierten Moleküle als $\cos^n \theta$ mit $n = 4.5 \pm 0.5$. C. Eibl und A. Winkler untersuchten ebenfalls das Desorptionsverhalten von Deuteriummolekülen, welche jedoch von Sauerstoff- und Schwefelmodifizierten Vanadiumoberflächen desorbiert sind [6]. TOF- Messungen zeigten, dass die Flussverteilung der desorbierten Moleküle als Superposition zweier maxwellähnlicher Flussdistributions modelliert werden konnte. Dabei handelte es sich um die Summe von einer sog. thermischen und hyperthermischen Distribution, wobei der thermische Anteil Teilchen bei Temperaturen ungefähr nahe der Oberflächentemperatur, wo hingegen der hyperthermische Anteil viel heißere Teilchen mit Temperaturen drei bis vier mal größer als die Oberfläche darstellten. Die Winkelabhängigkeit der thermischen Moleküle konnte dabei durch $\cos \theta$ beschrieben werden, während das Verhalten der hyperthermischen Moleküle eher auf $\cos^{3.3} \theta$ für die schwefelmodifizierte, und $\cos^{4.4} \theta$ für die sauerstoffmodifizierte Flächen zutraf.

Ein weiterer wichtiger Effekt für die Oberflächenphysik ist Light Induced Atomic Desorption (LIAD), welcher vor Kurzem Gegenstand intensiver Forschung war [12],[13],[14]. Dieser wurde zum ersten mal von Gozzini et al. beobachtet [10]. Dabei werden unter Einstrahlung von Licht Atome von Glasoberflächen desorbiert. Der Effekt erzeugt dadurch einen rapiden Anstieg der atomaren Dichte, und zwar um mehr als nur um eine Größenordnung [11], wie M. Meucci et al. durch das Bestrahlen von silanbeschichteten Zellen mit schwachem und nicht resonantem Licht zeigte. Außerdem wurde LIAD sowohl bei mit Polydimethylsiloxan- (PDMS) und Octamethylcyclotetrasiloxan- (OCT) beschichtetem Glas [12], als auch bei porösen Gläsern beobachtet [13]. In diesen Fällen waren die Lichtquellen, im Fall der PDMS-beschichteten Zelle, eine blaue LED, und beim porösen Glas, sowohl eine Abfolge aus Nahinfrarot-Pulsen (NIR-Pulse, Diodenlaser) und blauem Licht (Argonionenlaser), als auch kurz gepulstes Infrarotlaser.

2 Motivation

Die Zukunft der Informationstechnik liegt in den Quantentechnologien. Die Quanteninformationsforschung beschäftigt sich u.a. damit, einzelne Photonen zu erzeugen, zu kontrollieren und mit ihnen arithmetisch-logische Einheiten zu entwerfen. Eine Möglichkeit zur Erzeugung einzelner Photonen basiert auf der Erzeugung einer Rydbergblockade in mikrometergroßen Dampfzellen. Die Untersuchung von solchen Dampfzellen und der sich im Inneren ablaufenden Vorgänge ist daher von großer Wichtigkeit.

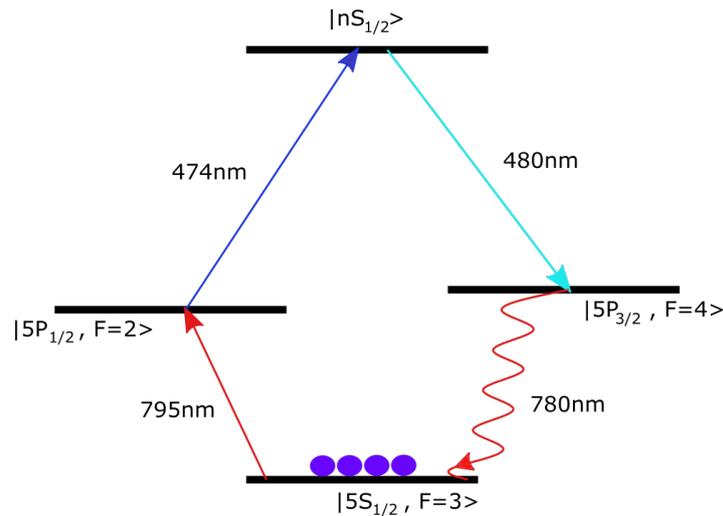


Abbildung 1: Skizziert ist das Four-Wave-Mixing Schema vom Rubidium 85. Der Untersuchungsgegenstand dieser Arbeit ist der Übergang $5P_{3/2} \rightarrow 5S_{1/2}$.

Eine Möglichkeit den gewünschten Blockadeeffekt zu erzielen ist die Realisierung des sog. Four-Wave-Mixing Schemas, welches in Abbildung 1 für Rb^{85} dargestellt ist. Dabei durchlaufen die Rubidium-Atome vier verschiedene Energieniveaus, wobei die beiden blauen Laser (474nm, 480nm) gepulst sind. Der Linke pumpt dabei die Populationen in den Rydbergzustand, während der rechte Laser den Rydberglevel durch induzierte Emission entpopularisiert. Die von dem $5P_{3/2}$ -Niveau zurück in den Grundzustand zerfallenden Atome werden dann mit dem roten Teststrahl (780nm) registriert.

3 Inhalt und Ziel der Arbeit

Die Bachelorarbeit sollte im Rahmen des Four-Wave-Mixing-Experiments in mikrometergroßen Rubidiumdampfzellen zur Erzeugung einzelner Photonen absolviert werden. Dabei soll ein dreidimensionales Desorptionsmodell der Zelle entwickelt werden, welches eine Erklärung für die Transmissionsfunktion des Auslesestrahls liefern würde. Hierbei soll sowohl auf die Dynamik der Teilchen, als auch auf ihre Wechselwirkung mit dem Teststrahl eingegangen werden. Zu diesem Zweck wurde eine Simulation mittels MATLAB implementiert, die die Dynamik der Atome in der Zelle anschaulich machen sollte. Durch die Simulation sollten zum einen grobe Aussagen über die Zelle an sich, wie z.B. die Zellenlänge und das Oberflächenpotential, zum anderen über die Atome, nämlich sowohl ihre Anzahl, Volumen- und Oberflächendichte, Winkelabhängigkeit der räumlichen Ausbreitung, möglich gemacht werden. Darüber hinaus sollte das Modell eine Vorstellung über die räumliche Verteilung der Desorptionsdefekte auf der Zellenwand liefern.

4 Theoretische Grundlagen der Simulation

4.1 Verteilungsfunktion der desorbierenden Teilchen

Ausgangspunkt der Simulation ist die Geometrie der Zelle. Im Experiment handelt es sich um eine Keilzelle, deren Ausdehnung orthogonal zur Strahlrichtung vernachlässigbar ist. Der Desorptionsvorgang wird durch einen gepulsten blauen Laser ($\lambda = 480\text{nm}$, $\emptyset = 10\mu\text{m}$) vollzogen. Der Teststrahl ($\lambda = 780\text{nm}$) und der Desorptionsstrahl sind überlagert (copropagating). Beim Teststrahl handelt es sich um einen Gaußstrahl mit einer viel kleineren Rayleighlänge als die des Desorptionsstrahls und mit einem Fokusradius von $0.75\mu\text{m}$. Der Fokus des Probestrahls liegt dabei in der Zellenmitte. Die Rayleighlänge des blauen Strahls ist viel größer als die Länge der Zelle.

In der Simulation wird die Zelle aus zwei unendlich ausgedehnten planparallelen Ebenen im Abstand L aufgebaut. Aufgrund seiner Rayleighlänge wird der Desorptionsstrahl als zylindrisch angenommen, während der Probestrahls als ein Gaußstrahl modelliert wird. Dabei liegt sein Fokus immer in der Zellenmitte. Das Modell ist in Abbildung 2 anschaulich dargestellt. Dabei werden Teilchen vom Desorptionsstrahl von der Grundfläche losgelöst, welche dann unter dem Winkel θ und sich mit Geschwindigkeiten entsprechend der Maxwell-Boltzmann-Verteilung zur gegenüberliegenden Wand fortbewegen. Die Fragestellung ist zunächst nach der zeitlichen und räumlichen Verteilungsfunktion der Atome. Mit der Annahme der Maxwell-Boltzmann Verteilung befinden sich unter einer gegebenen Temperatur T im Einheitsvolumen

$$d^3n(v_x, v_y, v_z) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T}} dv_x dv_y dv_z \quad (1)$$

Teilchen mit Geschwindigkeiten zwischen $v_x, v_x + dv_x$; $v_y, v_y + dv_y$ und $v_z, v_z + dv_z$. Dabei ist n die Anzahldichte, m die Masse der Teilchen und k_B die Boltzmannkonstante. In Gleichung 1 lässt sich die Verteilungsfunktion

$$f_{vol}(v_x, v_y, v_z) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k_B T}} \quad (2)$$

definieren, die im Weiteren als die Volumenverteilungsfunktion bezeichnet wird, welche die Dichteverteilung der Atome im Geschwindigkeitsraum beschreibt. Die Teilchen, die von der Zellenwand desorbieren, sollen jedoch eine ausgezeichnete Bewegungsrichtung besitzen, da der Desorptionsprozess als ballistisch angenommen wird. Die Verteilungsfunktion soll nicht mehr in alle Richtungen isotrop aussehen, sondern die Flugrichtung der Atome vorgeben, die Verteilungsfunktion also einer Art Fluss entsprechen.

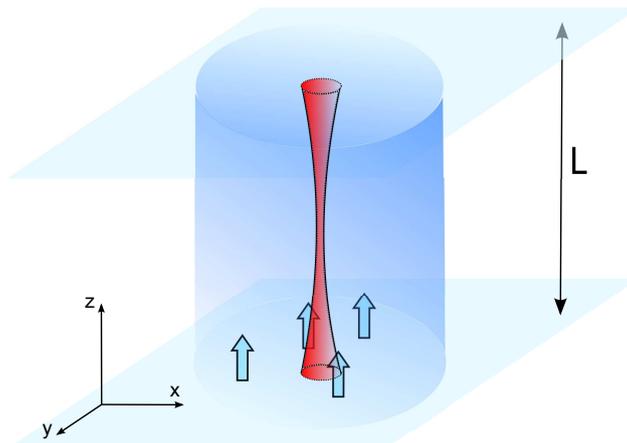


Abbildung 2: Modellhafte Innenansicht der Zelle. Der Teststrahl (roter Strahl) und der Desorptionsstrahl (blauer Strahl) sind überlagert, wobei der Fokus des Probestrahls in der Zellenmitte liegt. Die Rayleighlänge des blauen Strahls ist viel größer als die des roten. Die kleinen Pfeile auf der unteren Zellenwand repräsentieren dabei desorbierte Atome, die zur gegenüberliegenden Wand fliegen.

Angenommen die Teilchen verlassen unter dem Winkel θ eine infinitesimal kleine Fläche dA und fliegen in den Raumwinkel $d\Omega = d\theta \sin\theta d\phi$ (s. Abbildung 3). Der Raumwinkel und die Fläche dA sind so klein, dass die Flugvektoren der benachbarten Teilchen als parallel angenommen werden können. Dabei müssen Teilchen, die in der Zeit Δt gleichzeitig den Raumwinkel $d\Omega$ erreichen von einer fiktiven Fläche $dA \cos\theta$ kommen. Es erreichen deswegen

$$Z = n f_{vol} dv \cdot v \Delta t \cdot dA \cos\theta \cdot \frac{d\Omega}{4\pi} \quad (3)$$

Teilchen bei gleicher Geschwindigkeit v den Raumwinkel $d\Omega$ gleichzeitig [8]. Dabei gibt das Produkt $n f_{vol} dv$ die Teilchenzahldichte im Geschwindigkeitsintervall dv an. Die Anzahl der Atome, die in der Zeit Δt von der Fläche dA in einen beliebigen Raumeinheitswinkel desorbieren, ist also

$$\frac{Z}{\Delta t dA} \frac{4\pi}{\sin\theta d\theta d\phi} = n f_{vol} dv \cdot v \cos\theta \quad (4)$$

Das ist der Fluss der von der Fläche dA desorbierten Teilchen in einen beliebigen Raumeinheitswinkel, welcher die dynamischen Eigenschaften der Teilchen beschreiben soll. Die neue Flussverteilungsfunktion ist gemäß Gleichung 4 also $f_{flux} \sim f_{vol} \cdot v \cos\theta$ und $\cos\theta$ ist offensichtlich die räumliche Verteilung der Geschwindigkeitsvektoren aus dem Gesetz

von Knudsen. Durch die Normierungsbedingung, nämlich dass f_{flux} integriert über alle positiven Geschwindigkeiten Eins ergeben soll und unter Anwendung der Kugelkoordinaten, gilt

$$f_{flux}(v_x, v_y, v_z) = \frac{2}{v_w^4 \pi} e^{-\frac{v^2}{v_w^2}} v \cos \theta = \frac{2}{v_w^4 \pi} e^{-\frac{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}{v_w^2}} v_z \quad (5)$$

wobei $v_w = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}$ die wahrscheinlichste Geschwindigkeit der Maxwell-Boltzmann-Verteilung darstellt. Die Geschwindigkeitskomponenten senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Teilchen zeigen immer noch Isotropie, während die Ausbreitungsrichtung selbst jetzt durch v_z ausgezeichnet ist.

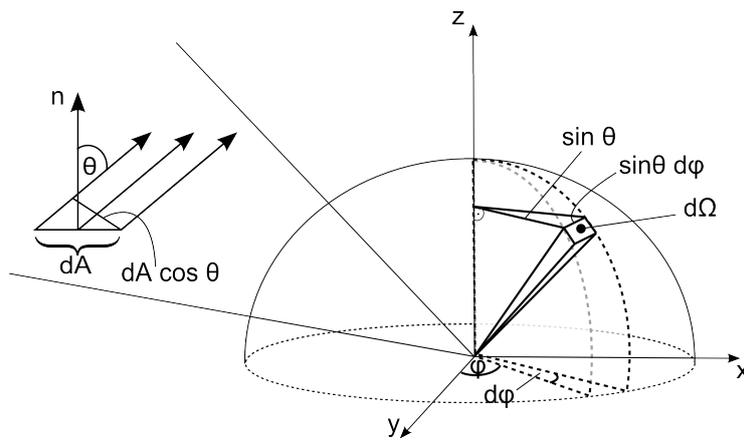


Abbildung 3: Anschauliche Darstellung der Gleichung 3. Desorbierte Atome, die von einer fiktiven Fläche $dA \cos \theta$ kommen, erreichen das Raumwinkelement $d\Omega$ gleichzeitig, wobei sie eine gemeinsame Strecke $v\Delta t$ zurücklegen. Dabei ist $n f_{vol} dv$ die Teilchendichte im Intervall dv . Reproduziert nach [8].

4.2 Dynamik der desorbierten Atome

An dieser Stelle wird angenommen, dass es sich beim Desorptionsprozess um einen ballistischen Prozess handelt. Man könnte es sich so vorstellen, dass der Desorptionsstrahl genug Energie liefert um ein Teilchen aus der Potentialbarriere der Zellenwand loszulösen, welches dann aufgrund der Zunahme seiner kinetischen Energie, unter einem bestimmten Winkel θ , in das Zellenvolumen katapultiert wird. Die Bewegung des Teilchens kann dabei im einfachsten Fall als geradlinig gleichförmig angesehen werden. Für die Ortsvektoren der Atome gilt deswegen

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{pmatrix} \cdot t \quad (6)$$

Einsetzen in Gleichung 5 und anwenden der Normierungsbedingung, nämlich dass das Integral über den gesamten Raum Eins ergeben soll, liefert

$$f_{flux}(x, y, z, t - t_0) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \frac{1}{(v_w(t-t_0))^4} e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{v_w^2(t-t_0)^2}} z & \text{für } t > t_0 \\ 0 & \text{für } t \leq t_0 \end{cases} \quad (7)$$

Gleichung 7 beschreibt den Desorptionsprozess eines einzelnen Teilchens, wobei t_0 dem Zeitpunkt der Desorption entspricht. Für $t \leq t_0$ soll die Verteilungsfunktion den Wert 0 erhalten. Bei getriggerten Desorptionsprozessen (z.B. durch LIAD) kann es sich auch um ein Ensemble aus Teilchen handeln.

Bis jetzt wurde der Fall $v_z = v \cos \theta$ betrachtet. Es ist jedoch bekannt, dass desorbierte Teilchen sich auch mit $\cos^n \theta$ verhalten können. Für diesen Fall gilt

$$v \cos^n \theta = \frac{v_z^n}{v^{n-1}} = \frac{z^n}{t(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{n-1}{2}}} \quad (8)$$

wie man durch einsetzen der Gleichung 6 leicht sehen kann. Damit gilt für die neue Flussverteilungsfunktion, welche zeitlich asymptotisch das gleiche Verhalten aufweisen sollte wie die Verteilungsfunktion für $n = 1$

$$f_{flux}(x, y, z, t - t_0, n) = \begin{cases} e^{-\frac{m(x^2+y^2+z^2)}{2k_B T(t-t_0)^2}} \frac{z^n}{(t-t_0)^4 (x^2+y^2+z^2)^{\frac{n-1}{2}}} & \text{für } t > t_0 \\ 0 & \text{für } t \leq t_0 \end{cases} \quad (9)$$

Gleichung 9 ist zunächst nicht normiert. Die Normierung erfolgt durch die Bedingung

$$\eta \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} f_{flux}(x, y, z, t - t_0, n) dx dy dz = 1 \quad (10)$$

wobei η die Normierungskonstante ist.

4.3 Der Gaußstrahl

Die Geometrie des Auslesestrahls ist in Abbildung 4 dargestellt. Es handelt sich dabei um einen Gaußstrahl. Die Einhüllende hat dabei die Breite

$$\omega(z) = \pm \omega_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R}\right)^2} \quad (11)$$

wobei ω_0 der Fokusradius und $z_R = \frac{\pi \omega_0^2}{\lambda}$ die Rayleighlänge mit der Wellenlänge λ ist. Die Intensitätsverteilung ist durch

$$I(r, z) = I_0 \left(\frac{\omega_0}{\omega(z)}\right)^2 e^{-\frac{2r^2}{\omega(z)^2}} \quad (12)$$

gegeben. Für das Volumen eines Gaußstrahls der Länge L , begrenzt durch die Einhüllende, gilt

$$V_{probe} = \pi \omega_0^2 \left(L + \frac{L^3}{12z_R^2}\right) \quad (13)$$

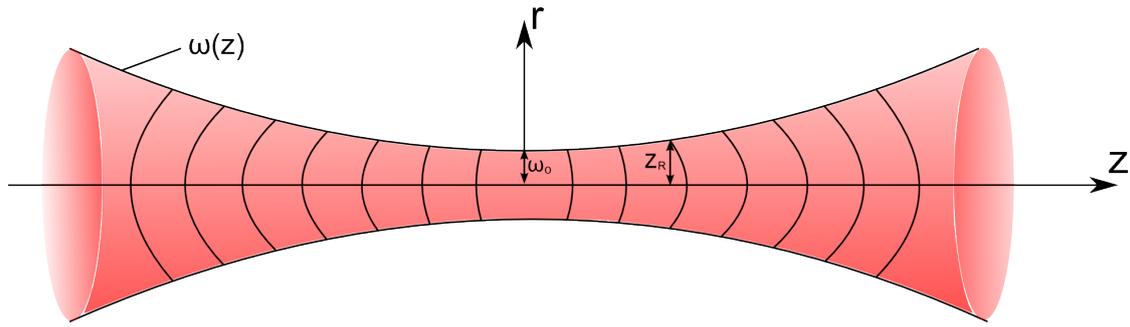


Abbildung 4: Ein Gaußstrahl mit der Breite $\omega(z)$, dem Fokusradius ω_0 und der Rayleighlänge z_R .

4.4 Der Absorptionsübergang

Der Probestrahl koppelt die in Abbildung 5 dargestellten atomaren Übergänge in Rubidium 85 zu einem zwei Niveau System.

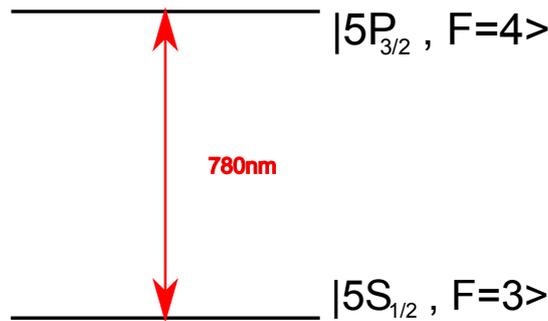


Abbildung 5: Dargestellt ist der bei der OD- Messung getriebener Übergang.

4.5 Die Transmissionsfunktion

Eines der Ziele dieser Arbeit ist es die zeitabhängige Transmission des Probestrahls zu simulieren. Die zeitabhängige Ausgangsintensität des Teststrahls ist nach dem Lambert-Beerschen Gesetz gegeben durch

$$I_{out}(t) = I_{in} \cdot e^{-n(t)\sigma L} \quad (14)$$

wobei $n(t)$ die zeitabhängige Dichte der Rubidium Atome in der Zelle, σ der Atom-Photon Streuquerschnitt und L die Länge der Zelle ist. Die Dichte $n(t)$ wird zu jedem Zeitpunkt als homogen angenommen. Dabei wird die von der Zeit und von den drei Raumkoordinanten abhängige Verteilungsfunktion über alle Raumdimensionen aufintegriert und durch das Volumen der vorliegenden Geometrie geteilt. Das Aufintegrieren der Verteilungsfunktion an sich liefert die Anzahl der sich in der Zelle zu jedem Zeitpunkt t befindenden Atome. Dies ist durch die Überlegung begründet, dass die Anzahl der sich zu einer gegebenen Zeit t im Volumen $dx dy dz$ im Intervall $x + dx, y + dy, z + dz$ befindenden Teilchen durch

$$N(x, y, z, t) dx dy dz = N \cdot f_{flux}(x, y, z, t) dx dy dz \quad (15)$$

gegeben ist. Dabei ist N die Gesamtanzahl der Teilchen und f_{flux} die Verteilungsfunktion aus Gleichung 7 oder Gleichung 9. Durch Integration der Gleichung 15 auf beiden Seiten über eine beliebige dreidimensionale Geometrie \mathcal{G} erhält man

$$N(t) = \iiint_{\mathcal{G}} N \cdot f_{flux}(x, y, z, t) dx dy dz \quad (16)$$

Die Zeitabhängige Dichte $n(t)$ ist dann gegeben durch den Quotienten aus der Atomanzahl und dem von der Geometrie \mathcal{G} eingeschlossenem Volumen $V(\mathcal{G})$ (Gleichung 17). In unserem Fall entspricht die Geometrie einem Gaußstrahl, welches der Auslesestrahl innerhalb der Zelle bildet. Das Volumen des Gaußstrahls ist dann durch Gleichung 13 gegeben.

$$n(t) = \frac{N(t)}{V(\mathcal{G})} \quad (17)$$

Um dann später die tatsächliche Anzahl an Atomen $N(t)$ abschätzen zu können soll der Streuquerschnitt σ berechnet werden. Dieser ist durch die Wechselwirkung zwischen den Rubidiumatomen und dem Teststrahl gegeben. Die Absorptionsmessung findet im Regime geringer Intensität statt, sodass $I < I_{sat}$ gilt, also die Teststrahlintensität kleiner als die Sättigungsintensität ist, wobei $I_{sat} = \frac{c_0 \epsilon_0 \hbar^2 \Gamma^2}{d_{ge}^2}$ die Sättigungsintensität eines zwei-Niveau-Systems, bestehend aus Grundzustand $|g\rangle$ und angeregtem Zustand $|e\rangle$ ist. Dabei sind c_0 die Vakuumlichtgeschwindigkeit, ϵ_0 die Dielektrizitätskonstante des Vakuums, \hbar das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum, Γ die Zerfallsrate des zwei-level-Systems und $d_{ge} = |\langle g | \vec{d} | e \rangle|$ das Übergangsdipolmoment mit dem elektrischen Dipolmoment \vec{d} und dem Polarisationsvektor des elektrischen Feldes $\vec{\epsilon}$. In diesem Fall ist der Streuquerschnitt Intensitätsunabhängig. Der Absorptionskoeffizient ist i.A. durch

$$\alpha = \int_{-\infty}^{\infty} n(\delta - \Delta) \sigma(\Delta) d\Delta \quad (18)$$

gegeben [9], wobei $\delta = \omega_L - \omega_0$ die Differenz zwischen der Eigen- und Laserfrequenz ist und Δ die Integrationsvariable. Nimmt man im eindimensionalen Fall eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung der Geschwindigkeiten an, so ist die Anzahl der Atome, die bei einer Verstimmung δ resonant absorbieren eine Gaußkurve mit der Doppler-Halbwertsbreite

$$\omega_D = \frac{\omega_L}{c_0} \sqrt{\frac{2 \ln 2 k_B T}{m}} \quad (19)$$

Das Produkt im Integral aus der Gleichung 18 ist dann gegeben durch

$$n(\delta) \sigma(\Delta) = n_0 \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{2}{\omega_D} e^{-4 \ln 2 \left(\frac{\delta}{\omega_D}\right)^2} \frac{\sigma_0}{1 + \frac{I}{I_{sat}} + 4 \left(\frac{\Delta}{\Gamma}\right)^2} \quad (20)$$

mit $\sigma_0 = \frac{\hbar \omega_L \Gamma}{2 I_{sat}}$. Im Regime $I < I_{sat}$ gilt für den zweiten Faktor aus Gleichung 20

$$\sigma \approx \frac{\sigma_0}{1 + 4 \left(\frac{\Delta}{\Gamma}\right)^2} \quad (21)$$

Damit ist Gleichung 18 eine Faltung aus Gaußkurve und Lorentzverteilung, wobei die Wirkung der Lorentzverteilung auf den Absorptionskoeffizienten vernachlässigt werden kann, da $w_D \gg \Gamma$ mit $w_D \approx 2\pi \cdot 100\text{MHz}$ und $\Gamma \left(5P_{\frac{3}{2},F=4} \rightarrow 5S_{\frac{1}{2},F=3}\right) \approx 2\pi \cdot 6\text{MHz}$. Damit ist für sehr kleine Verstimmungen $\delta \rightarrow 0$ der Absorptionskoeffizient gegeben durch

$$\alpha \approx n_0\sigma = n_0\sigma_0 \frac{\pi\Gamma}{2} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{2}{\omega_D} \quad (22)$$

5 Die Simulation

Es wurden mittels MATLAB Programme geschrieben, welche die Zeitabhängige Anzahl der Atome $N(t)$ in der Zelle simulieren sollen. Dabei stellt man sich vor, dass ein einziger Desorptionspuls Atome in das Zellenvolumen katapultiert, wobei die Atome dann einer bestimmten Geschwindigkeits- bzw. Winkelverteilung folgen. Dabei wird angenommen, dass der Desorptionspuls zum Zeitpunkt $t = 0$ auf die Oberfläche trifft und dabei eine Dichte im Zellenvolumen erzeugt. Es soll sich zunächst um einen Delta-Puls handeln. Dieser hat den Vorteil, dass das durch ihn erzeugte Signal später mit einer realistischeren Pulsform, wie z.B. dem Blackman-Puls, gefaltet werden kann. Es werden nun Modelle der ein-, zwei- und der dreidimensionalen Zelle vorgestellt.

5.1 Eindimensionales Modell der Zelle

Es soll zunächst das einfache eindimensionale Desorptionsmodell betrachtet werden. Die Geometrie des Teststrahls kann hier nicht miteinbezogen werden, vielmehr befinden sich alle Teilchen zu jedem Zeitpunkt im Teststrahl. Die Verteilungsfunktion lässt sich aus Gleichung 7 ableiten zu

$$f_{flux}(v_z) = \frac{2}{v_w^2} v_z e^{-\frac{v_z^2}{v_w^2}} \Theta(v_z) \quad (23)$$

Dabei bewegen sich alle Atome in die z-Richtung. Gleichung 23 soll eine Art Fluss in z-Richtung repräsentieren, daher sollen die negativen Geschwindigkeiten nicht betrachtet werden. Die Atome legen in der Zeit t eine Strecke $z = tv_z$ zurück, so dass gilt

$$f_{flux}(z, t) = \frac{2}{v_w^2} \frac{z}{t^2} e^{-\frac{z^2}{(tv_w)^2}} \Theta(t) \quad (24)$$

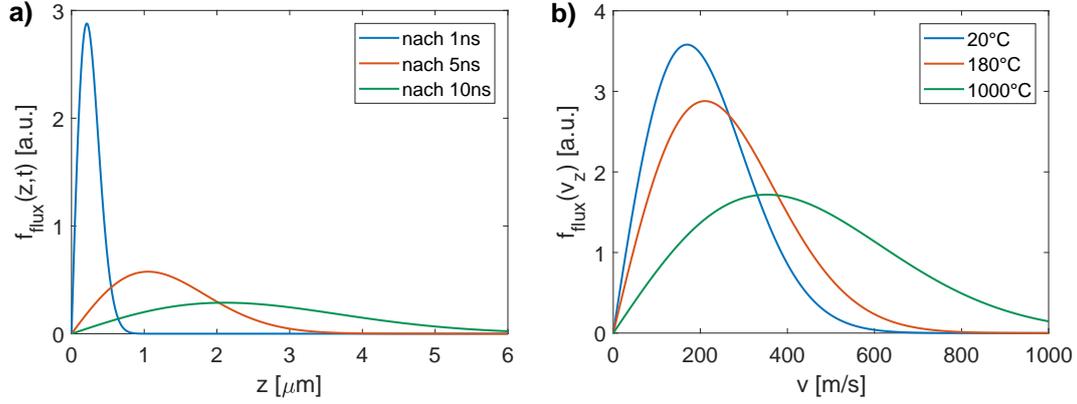


Abbildung 6: a) Geplottet ist die Verteilung der Atome in einer 1D-Zelle zu verschiedenen Zeitpunkten. b) Geschwindigkeitsverteilungen eines Idealen Gases gemäß Gleichung 24 bei drei verschiedenen Temperaturen.

In Abbildung 6 sind die Verteilungsfunktionen Gleichung 23 und Gleichung 24 geplottet. Rechts ist die Verteilung der Geschwindigkeiten der sich in z -Richtung bewegenden Atome in Abhängigkeit der Temperatur dargestellt. Mit größeren Temperaturen erhalten die Teilchen höhere kinetische Energien und können daher zu größeren Geschwindigkeiten angeregt werden. Links ist die Verteilung der Atome für verschiedene Zeitpunkte über ihrer momentan zurückgelegten Distanz geplottet. Die Länge der Zelle legt dabei die maximale Distanz fest, die die Atome zurücklegen würden. Einmal an der hinteren Wand der Zelle angekommen, würden die Teilchen an ihr adsorbiert werden und daher nicht mehr zur Gesamtdichte beitragen.

Die Anzahl der Atome $N(t)$ ist zu jedem Zeitpunkt t durch Gleichung 16 gegeben. Im Fall des eindimensionalen Modells gilt

$$N(t) = \int_0^L f_{\text{flux}}(z, t) dz \quad (25)$$

In Abbildung 7 links ist für verschiedene Zellenlängen die relative Atomzahl $\frac{N(t)}{N_0}$ über der Zeit aufgetragen. Die Atomzahl schießt beim Einschalten des deltaförmigen Desorptionspulses nach oben, wobei sie über der Zeit, je nach Zellenlänge, verschieden schnell abnimmt. Für längere Zellen bleiben die Atome natürlich insgesamt länger in der Zelle, bis zu dem Zeitpunkt, wo sie an der hinteren Wand adsorbieren. Charakteristisch für das eindimensionale Desorptionsmodell ist die Breite der Kurve, die die relative Atomanzahl repräsentiert, die direkt proportional zu der Länge der Zelle ist. Dieses Verhalten ist im rechten Bild 7 zu sehen. Die auf der Ordinate aufgetragene Flugzeit ist der Zeitpunkt, bei dem die relative Atomzahl auf die Hälfte abgefallen ist. Die Steigung wurde durch den linearen Fit ermittelt und beträgt $4 \frac{s}{m}$. Dieses Ergebnis war mit der Annahme einer ballistischen Dynamik zu erwarten.

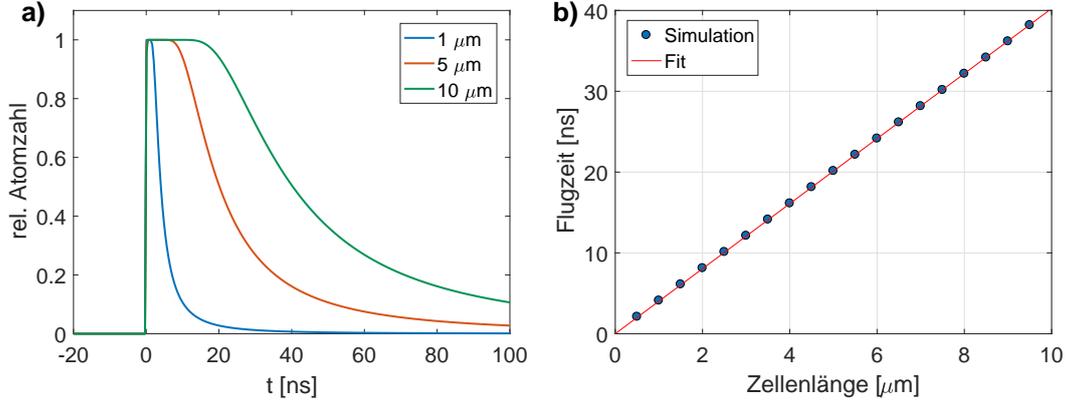


Abbildung 7: a) Darstellung der relativen Atomzahl für verschiedene Zellenlängen im Rahmen des 1D-Modells. b) Mittlere Flugzeit der Atome in Abhängigkeit der Zellenlänge. Der Fit ist eine Gerade mit Steigung $4 \frac{s}{m}$.

5.2 Zweidimensionales Modell der Zelle

5.2.1 Geometrische Aspekte des Modells

Nun wird das eindimensionale Modell um die Dimension der Breite erweitert. Die Geschwindigkeitsvektoren \vec{v} sind nun Vektoren mit zwei Komponenten $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix}$. Die Winkelabhängigkeit der Geschwindigkeitsverteilung ist nun über den Winkel Θ gegeben. Gemäß Abbildung 8 gilt $v_x = v_{\parallel} = v \sin \Theta$ und $v_z = v_{\perp} = v \cos \Theta$.

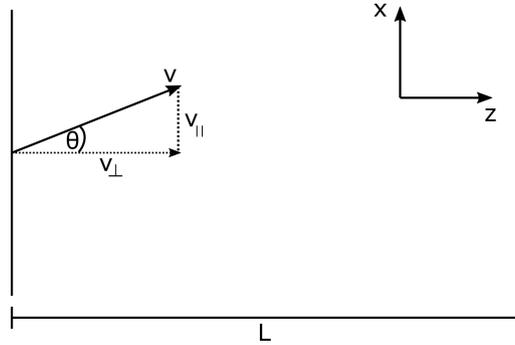


Abbildung 8: Schematische Darstellung einer zweidimensionalen Zelle. Die Atome können nun unter einem Winkel zur Zellenwandnormale desorbieren. Ihr Geschwindigkeitsvektor \vec{v} wird zur Herleitung von Gleichungen 26 und 27 in Komponenten parallel und orthogonal zur Desorptionsfläche zerlegt.

Für die Verteilungsfunktion gilt mit $v_x = \frac{x}{t}$ und $v_z = \frac{z}{t}$ gemäß Gleichung 7 in kartesischen Koordinaten

$$f_{flux}(x, z, t) = \frac{1}{(\sqrt{\pi}v_w)^2} \frac{1}{t^3} e^{-\frac{x^2+z^2}{(tv_w)^2}} z \cdot \Theta(t) \quad (26)$$

mit der Stufenfunktion $\Theta(t)$. Für die $\cos^n\Theta$ - Verteilung gilt gemäß Gleichung 9 in kartesischen Koordinaten

$$f_{flux}(x, z, t, n) \sim e^{\frac{-m(x^2+z^2)}{2k_B T t^2}} \frac{z^n}{(x^2 + z^2)^{\frac{n-1}{2}}} \frac{1}{t^3} \cdot \Theta(t) \quad (27)$$

Die Erweiterung des Desorptionsmodells um eine zusätzliche Dimension erlaubt nun Betrachtungen geometrischer Natur in der Zelle. Der Desorptionsstrahl ist im Experiment viel größer (Radius $\sim 8\mu m$) als der Probestrahl ($\omega_0 \sim 0.75\mu m$). Daher tragen nicht alle desorbierten Atome zur Transmissionsfunktion bei. Die Atome können jetzt den Teststrahl verlassen, wobei sie aus der Resonanz rausfallen. Genauso können aber Atome auch von einer von der Zellenwandmitte weiter weg entfernten Desorptionswolke in den Teststrahl hineinfliegen und so einen zusätzlichen Beitrag zur Transmissionsfunktion liefern. Die Geometrie des Teststrahls ist in Abbildung 4 anschaulich dargestellt. Es handelt sich somit um einen Gaußstrahl mit der Rayleighlänge $z_R = 2.27\mu m$. In der Simulation befindet sich der Fokus des Probestrahls immer in der Mitte der Zelle. Ist also die Zellenlänge L kleiner als die Rayleighlänge z_R , erscheinen die Strahlen als beinahe parallel. Ist $z_R > L$, so sind sie als Gaußstrahlen gut zu erkennen. Dieses Verhalten ist in Abbildung 9 dargestellt. Für die Simulation heißt das natürlich auch, dass schon der Ausleuchtungsradius auf der Desorptionsfläche für verschiedene Zellenlängen unterschiedlich groß ist.

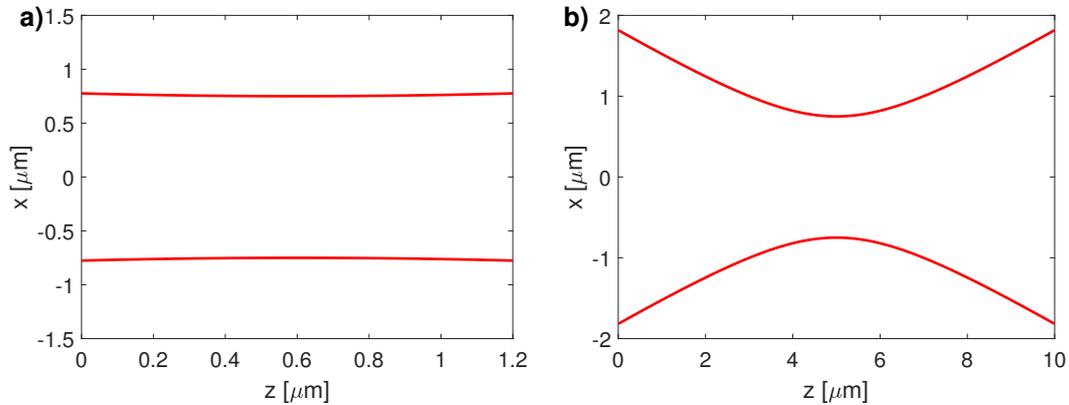


Abbildung 9: Skizziert ist die Geometrie des Teststrahls in einer $1.2\mu m$ - (a) und einer $10\mu m$ -langen Zelle (b).

Gleichung 27 beschreibt die von Θ räumliche Verteilung der Atome zu einer bestimmten Zeit t . In Abbildung 10 ist der Vergleich zwischen zwei Desorptionswolken mit $n = 1$ und $n = 6$ zum Zeitpunkt $t = 1.5 ns$ dargestellt. Die Verteilung mit höherem n ist entlang der x-Koordinate schmaler und ist stärker in die z-Richtung gerichtet.

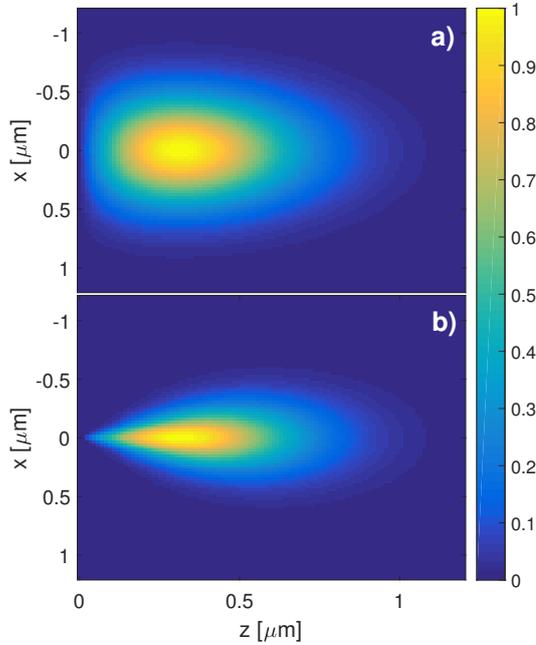


Abbildung 10

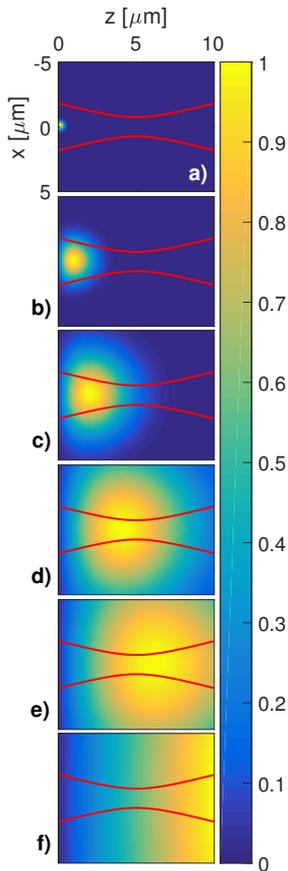


Abbildung 11

Abbildung 10: Dargestellt ist die nach Gleichung 26 zweidimensionale „Flussverteilung“ der desorbierten Atome für $\cos \Theta$ (a) und $\cos^6 \Theta$ (b). Die Farbskala gibt die relative Atomdichte an.

Die zeitliche Entwicklung einer Desorptionsquelle mit $n = 1$ im Ursprung ist für eine $10 \mu\text{m}$ lange Zelle in Abbildung 11 gezeigt. Die Verteilung „zerfließt“ in alle Richtungen. Im Moment, in dem die Atome die hintere Zellenwand erreichen, werden sie an ihr adsorbiert. Durch die Darstellung des Gaußstrahls wurde das Verlassen des Strahlbereichs veranschaulicht.

Abbildung 11: Flussverteilung nach Gleichung 26 zu verschiedenen Zeitpunkten in einer $10 \mu\text{m}$ Zelle. Zusätzlich ist das Gaußprofil des Teststrahls abgebildet um den Prozess des Verlassens des Teststrahls zu veranschaulichen. a)-d): 1, 5, 10, 20, 30, 100 ns.

Eine solche Desorptionswolke, wie in Abbildung 10 dargestellt, kann beliebig viele Atome enthalten. Wenn sie N_0 Atome enthalten soll, muss die normierte Verteilungsfunktion (z.B. Gleichung 26) mit N_0 multipliziert werden. Durch die anschließende Integration dieser Verteilungsfunktion über den gesamten Raum erhält man gerade die maximale Anzahl der Atome N_0 . Integriert man aber nur eine begrenzte Geometrie, wie z.B. über einen Gaußstrahl, so erhält man eine Funktion $N(t)$, deren Maximum gerade N_0 ist, falls sich zu einem bestimmten Zeitpunkt alle Atome in der Geometrie befanden. Es ist nun so, dass ein zweidimensionales Modell eine Betrachtung mehrerer Desorptionsdefekte erlaubt, welche nun entlang der x -Koordinate beliebig verteilt werden können.

In diesem Fall liegt ein Modell diskreter Dichten vor. Jedoch ist weder etwas über die Positionen der Desorptionsdefekte, noch über ihre relativen Abstände zueinander bekannt. In diesem Fall würde es Sinn machen eine homogene Verteilung der Desorptionsquellen anzunehmen. Außerdem soll eine Desorptionsrate aufgrund der radialen Intensitätsverteilung des blauen Lasers auf der Desorptionsfläche angenommen werden. Diese wird durch eine Gaußverteilung modelliert. Im weiteren wird das Modell der diskreten und der homogenen Verteilung der Desorptionsdefekte vorgestellt.

5.2.2 Modell diskreter Desorptionsdefekte

Der Desorptionsradius auf der Zellenwand beträgt $8\mu\text{m}$. Daher ist es unwahrscheinlich, dass nur eine Atomwolke desorbiert. Es ist also sinnvoll die Desorption mehrerer Atomensembles in Betracht zu ziehen, was uns zum Modell diskreter Desorptionsdefekte führt.

Zuallererst wird die Desorptionsrate vernachlässigt und nur die Anzahl der Atome angeschaut, die man mit dem Probestrahl für verschiedene Abstände x_0 registrieren würde. Die Verteilungsfunktion einer um x_0 verschobenen Desorptionsquelle lautet für insgesamt N_0 Atome, die durch einen Delta-Puls desorbiert werden, gemäß Gleichung 26

$$f_{flux}(x, x_0, z, t, N_0) = N_0 \cdot \frac{1}{(\sqrt{\pi}v_w)^2} \frac{1}{t^3} e^{-\frac{(x-x_0)^2+z^2}{(tv_w)^2}} z \cdot \Theta(t) \quad (28)$$

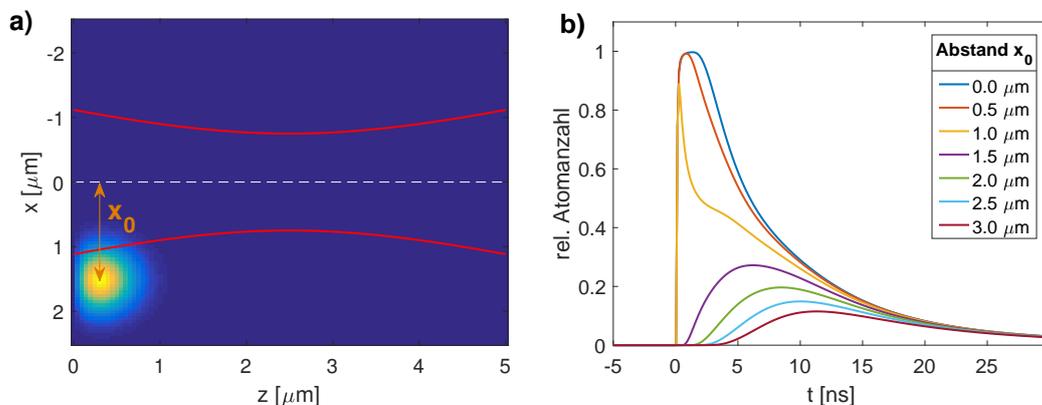


Abbildung 12: a) Eine Desorptionswolke im Abstand x_0 zum Ursprung, zum Zeitpunkt 1.5 ns. b) Relative Anzahl der Atome im Teststrahl für verschiedene Abstände x_0 vom Ursprung für eine $5\mu\text{m}$ lange Zelle, desorbiert mittels eines Delta-Pulses.

Die Anzahl der Atome in Abhängigkeit von der Zeit ist durch Gleichung 16 bestimmbar. Es ist also notwendig die gegebene Verteilungsfunktion über die Geometrie des Gaußstrahls zu integrieren. Die relative Atomanzahl ist somit gegeben durch

$$\frac{N(t)}{N_0} = \int_0^L \int_{-\omega(z)}^{\omega(z)} \frac{1}{(\sqrt{\pi}v_w)^2} \frac{1}{t^3} e^{-\frac{(x-x_0)^2+z^2}{(tv_w)^2}} z \cdot \Theta(t) dx dz \quad (29)$$

wobei $\omega(z)$ die Einhüllende des Gaußstrahls, gegeben durch Gleichung 11, und L die Zellenlänge ist. Die Integration erfolgte numerisch. Das Ergebnis ist in Abbildung 12 für einige Abstände x_0 dargestellt.

Es ist deutlich zu sehen, dass die Desorption aus dem Ursprung stets den größten Beitrag zur Atomzahl liefert. Für den Abstand von einem Mikrometer fällt die relative Atomzahl für die ersten 2-3ns rapide ab, in diesem Moment verlassen viele Atome schnell den Strahl. Der Abfall verlangsamt sich jedoch ab dem Zeitpunkt von ca. 3ns. Hier leisten die Atome ihren Beitrag, die aus der Atomwolkenmitte schräg oder von der Seite in den Strahl hineinfliegen. Für größere Abstände ($x_0 \geq 1.5\mu\text{m}$) erreicht nur ein Bruchteil aller Atome den Strahl, daher die relativ kleine Amplitude. Der größte Teil dieser Teilchen fliegt also am Teststrahl vorbei. Für große Zeiten $t > 20\text{ns}$ konvergieren die Integrale 29 für verschiedene x_0 gegen den selben Wert. Das bedeutet, dass nach einer bestimmten Zeitspanne die Atome in der Zelle gleichverteilt werden und zwar unabhängig von ihrer ursprünglichen Position.

Es soll nun eine Desorptionsrate angenommen werden, die die radiale Intensitätsverteilung des Desorptionsstrahls auf der Desorptionsfläche wiedergibt. Die Intensität eines Gaußstrahls ist durch Gleichung 12 gegeben und entspricht in radialer Richtung einer Gaußkurve, wie in Abbildung 13 dargestellt. Die Desorptionsrate muss aber keiner Gaußkurve entsprechen, da die maximale Anzahl der desorbierten Atome endlich ist. In diesem Fall flacht die Gaußkurve im Bereich ihres Maximums ab.

Es ist wahrscheinlich, dass in einem Desorptionsradius von ca. $8\mu\text{m}$ nicht nur eine Desorptionswolke entsteht. Daher werden nun mehrere Desorptionsquellen entlang der Zellenwand platziert. Sie werden in verschiedenen Abständen δx_0 zueinander regelmäßig angeordnet (s. Abbildung 14), was jedoch in keiner Weise der Realität entspricht. Viel wahrscheinlicher ist eine Poissonverteilung der Desorptionsdefekte oder sogar eine absolut homogene Verteilung. Diese werden im Rahmen des 3D-Modells in 5.3 behandelt. Das Modell der regelmäßigen Abstände soll vielmehr ein Gefühl über die Dynamik und das kollektive Verhalten der Teilchen, das auf dem Superpositionsprinzip basiert, geben. Je nach Geometrie der Zelle, Anzahl der Desorptionsquellen und den Abständen zwischen Ihnen, entstehen verschiedene Verläufe der relativen Atomzahlen über der Zeit. Diese lassen eine Interpretation der vorhandenen Dynamik zu.

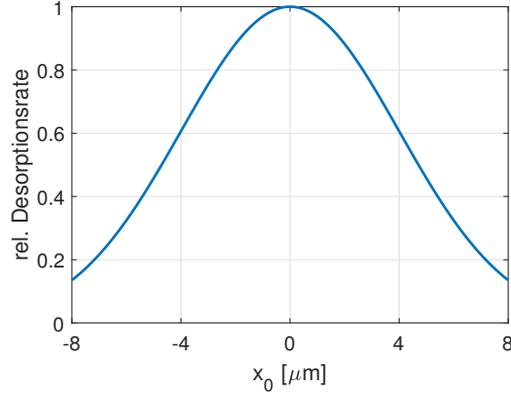


Abbildung 13: Relative Desorptionsrate für einen Desorptionsradius von $8\mu\text{m}$, die wegen der radialen Intensitätsverteilung eines Gaußstrahls (Gleichung 12) einer Gaußkurve folgt.

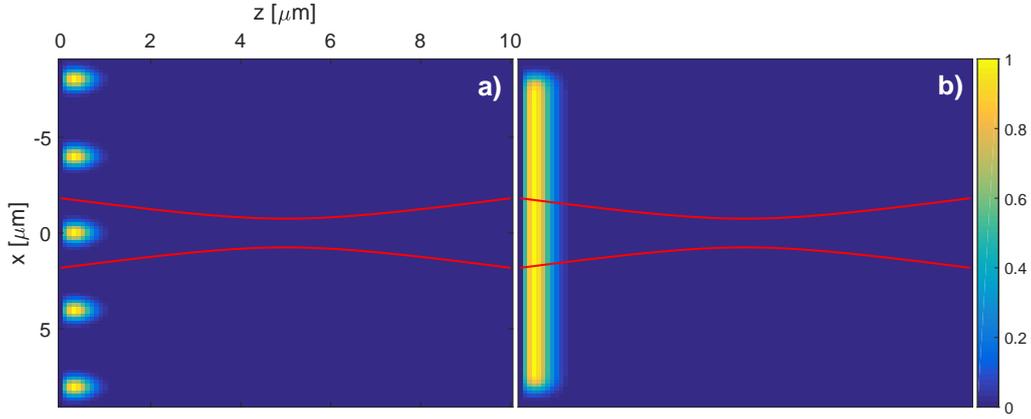


Abbildung 14: Dargestellt sind die zweidimensionalen Verteilungsfunktionen 26 zum Zeitpunkt $t = 1.5\text{ns}$, aufsummiert über die Verschiebungen x_0 . In **a)** ist $\delta x_0 = 4\mu\text{m}$ und in **b)** $\delta x_0 = 0.1\mu\text{m}$. In der Mitte der Zelle ist der Teststrahl dimensionsgetreu dargestellt.

Bei mehreren Desorptionsquellen ist die Gesamtverteilungsfunktion eine Summe aus den Einzelverteilungsfunktionen. Es wird lediglich über die Verschiebungsordinate x_0 summiert. Die relative Anzahl der Atome über die Zeit für k Atomwolken ist dann gemäß Gleichung 29 gegeben durch

$$N(t) = \int_0^L \int_{-\omega(z)}^{\omega(z)} \left[\sum_{i=1}^k N_0 \cdot e^{\frac{-2x_{0i}^2}{R_d^2}} \frac{1}{(\sqrt{\pi}v_w)^2} \frac{1}{t^3} e^{-\frac{(x-x_{0i})^2+z^2}{(tv_w)^2}} z \cdot \Theta(t) \right] dx dz \quad (30)$$

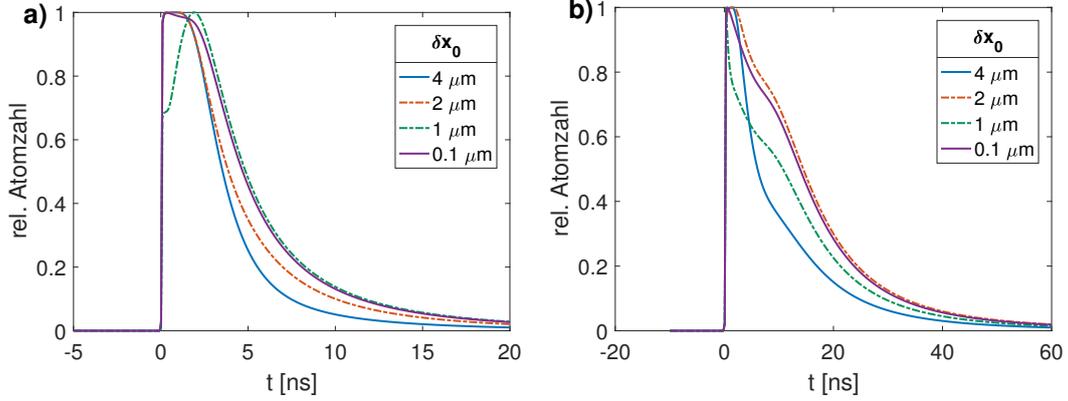


Abbildung 15: 2D-Modell diskreter Desorptionsdefekte: Relative Atomzahlen über der Zeit für verschiedene Abstände δx_0 zwischen den Desorptionsdefekten. In **a)** erfolgte die Simulation für eine Zellenlänge von $1.2\mu\text{m}$, in **b)** für $5\mu\text{m}$.

Dabei gibt der Term $N_0 \cdot e^{-\frac{2x_0^2}{R_d^2}}$ die Desorptionsrate wieder, da wegen der radialen Intensitätsabhängigkeit die Anzahl der desorbierten Atome mit dem Abstand x_0 abnimmt. R_d ist dabei der Desorptionsradius. In Abbildung 15 ist die relative Atomzahl für einen Delta-Desorptionspuls für Zellenlängen $1.2\mu\text{m}$ und $5\mu\text{m}$ für verschiedene Abstände δx_0 zwischen den Desorptionsquellen zu sehen. Der Desorptionsradius ist fest und beträgt $8\mu\text{m}$, daher steigt in der Simulation die Anzahl der Desorptionsdefekte mit kleiner werdenden Abständen zwischen den Desorptionswolken. Für einen Abstand $\delta x_0 = 4\mu\text{m}$ sind es fünf Desorptionsquellen bei $x_0 = [-8, -4, 0, 4, 8] \mu\text{m}$. Bei einem Abstand $\delta x_0 = 1\mu\text{m}$ sind es dagegen 17 Desorptionsquellen bei $x_0 = [-8, -7, \dots, 0, \dots, 7, 8] \mu\text{m}$.

Betrachten wir zunächst die Zelle mit der Länge $1.2\mu\text{m}$. Die Verläufe der Kurven für Abstände von $4\mu\text{m}$ (blau) und $2\mu\text{m}$ (rot) sind für kleine Zeiten $t < 4\text{ns}$ gleich, wobei für lange Zeiten die rote Kurve langsamer abfällt. Der gesamte Verlauf der Kurve hat eine große Ähnlichkeit mit dem Fall von einer Desorptionsquelle im Ursprung (s. Abbildung 12). In unserem Fall sind es ebenso die Atome im Ursprung, die den größten Beitrag zur relativen Atomanzahl beitragen. Für größere Zeiten fliegen die Atome unter dem Winkel Θ von benachbarten Desorptionspositionen in den Teststrahl, wobei diese für größer werdende Θ kleinere Beträge zum Integral leisten. Man könnte auch sagen, dass sich schon von Anfang im Probestrahl befindenden Atome den Verlauf der relativen Atomzahl für kleine Zeiten bestimmen, wohingegen der Beitrag für größere Zeiten von den Teilchen, die erst in den Strahl reinfliegen müssen, zustandekommt. Im Fall der roten Kurve ($\delta x_0 = 2\mu\text{m}$) sind es insgesamt mehr Nebendesorptionsquellen, was insgesamt bedeutet, dass die von den Seiten kommenden Teilchen öfter einen Beitrag zum Integral leisten als im Fall der blauen Kurve ($\delta x_0 = 4\mu\text{m}$). Dies ist der Grund wieso für lange Zeiten die rote Kurve insgesamt eine höhere relative Atomzahl aufweist, was äquivalent zu einem langsameren Abfall ist.

Betrachten wir nun die Kurven für Abstände von $1\mu\text{m}$ (grün) und von $0.1\mu\text{m}$ (lila). Im Fall der grünen Kurve sind zwar schon viele Atome zum Zeitpunkt $t = 0$ im Teststrahl,

jedoch wird ihr Maximum erst zu einer Zeit von ca. 2.5ns erreicht. Die Nebendesorptionsquellen sorgen also dafür, dass über eine Zeitspanne von 2.5ns die Atomzahl im Teststrahl stetig ansteigt. Für dieses Verhalten ist außerdem ein gut ausgebildetes Maximum, der zu größeren Zeiten verschoben ist, charakteristisch, welches dagegen für die anderen Fälle fehlt, da hier die Teilchendichte gleich zu Beginn sehr hoch ist. Dies ist auch bei der lila Kurve der Fall. Der Verlauf für lange Zeiten ist dagegen für beide (grün und lila) Kurven beinahe identisch.

Widmen wir uns nun dem rechten Bild in der Abbildung 15. Hier wird nun eine etwas längere Zelle ($L = 5\mu\text{m}$) betrachtet. Die Konstellation der Desorptionsdefekte bleibt gleich. Überraschend ist, dass ausgerechnet Kurven mit größtem und kleinstem δx_0 sich am ähnlichsten sind. Die relative Atomzahl ist in beiden Fällen schon zu Beginn sehr hoch und ihr Maximum gleich erreicht, im weiteren Zeitverlauf verlassen Teilchen überwiegend den Teststrahl. Die Abnahme der relativen Atomzahl ist für Zeiten ca. $t < 10\text{ns}$ langsamer, als für die Zeitpunkte danach. Das bedeutet, dass die den Strahl verlassenden Teilchen durch die von den Seiten hineinfliegenden Atome kompensiert werden. Für Zeiten ca. $t > 10\text{ns}$ sind es nun bei weitem weniger Partikel, die von den Nebenpositionen kommen und zum Integral beitragen. Die sich unmittelbar um den Ursprung desorbierenden Teilchen sind nun „aufgebraucht“ (d.h. es wurde über sie bereits integriert) und die Atome, die von weiter außen kommen sind nicht so viele und nicht so schnell, als dass die Kompensation erfolgen kann.

Bei der grünen Kurve ($\delta x_0 = 1\mu\text{m}$) ist das Verhalten ähnlich. Die Kurve weist genauso zwei verschiedene „Zerfallsraten“ auf. Jedoch sind es nicht ausreichend Teilchen an Nebenpositionen um den Ursprung, um für kleine Zeiten $t < 2\text{ns}$ einen Beitrag zu leisten. Daher fällt die Kurve rapide ab, sodass sie insgesamt schmaler erscheint. Bei der Anordnung der Desorptionsdefekte mit relativ großen Abständen zueinander, wie im Fall der blauen Kurve ($\delta x_0 = 4\mu\text{m}$) verhalten sich die Zerfallsraten den zuvor diskutierten Fällen genau entgegengesetzt. Für kurze (0-5 ns) und mittlere (5-10 ns) Zeitspannen dominieren die Atome im Ursprung. Der Zerfall der relativen Atomzahl ist für $t < 10\text{ns}$ durch das Verlassen des Strahls der schon von Anfang an im Strahl vorhandenen Teilchen bedingt. Die Zerfallsrate sinkt erst für Zeiten $t > 10\text{ns}$, da hier nun schließlich die Atome der Nebenpositionen zum Integral beitragen. Der Unterschied zur kürzeren Zelle ist also der, dass die Zelle ausreichend lang für ein Verhaltenswechsel der relativen Atomzahl ist. Während die kürzere Zelle nur das Regime der kurzen und langen Zeiten besitzt, weist die längere Zelle dazwischen einen zusätzlichen Bereich auf, wo die Zerfallsrate der Kurve sich von der Zerfallsrate für große t unterscheidet.

Jetzt sollen die verschiedenen Konstellationen auf der Desorptionsfläche für verschiedene Zellenlängen miteinander verglichen werden. Dafür wird für einige Zellenlängen L das Integral 30 numerisch gelöst. Aus den Integralen wird die relative Atomanzahl $\frac{N(t)}{N_0}$ ermittelt. Anschließend wird der Zeitpunkt bestimmt, bei dem die relative Atomzahl auf die Hälfte abgefallen ist. Es wird praktisch die Breite der Kurve beim Wert der relativen Atomzahl von 0.5 bestimmt. Dieser Wert wird weiterhin analog zum 1D-Modell als mittlere Flugzeit bezeichnet. Diese wird dann über die verschiedenen Zellenlängen aufgetragen. Das Ergebnis ist in Abbildung 16 zu sehen.

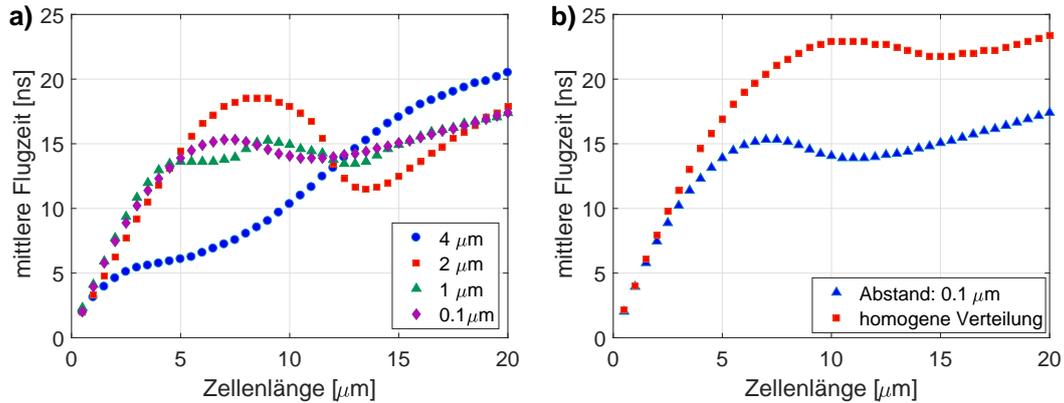


Abbildung 16: a) Mittlere Flugzeit der Atome in Abhängigkeit von verschiedenen Zellenlängen im 2D-Modell diskreter Desorptionsquellen. Die Abstände δx_0 zwischen den Desorptionsstellen sind 4, 2, 1, $0.1 \mu\text{m}$. b) Simulierten Breiten der relativen Atomzahl-Kurven über der Zellenlänge. Die roten Rechtecke repräsentieren dabei das Modell der homogenen Verteilung der Desorptionsdefekte und die blauen Dreiecke das Modell der diskreten Desorptionsdefekte mit einem Abstand von $0.1 \mu\text{m}$.

Diese Art von Betrachtung liefert zwar keine exakten Verläufe der Dichten, zeigt jedoch einen wichtigen Aspekt der in der Simulation konstruierten Geometrie auf. Während für relativ große Abstände zwischen den Desorptionsquellen von $4 \mu\text{m}$ die Flugzeiten, ähnlich wie beim 1D-Modell, mit der Zellenlänge zunehmen, zeigt der Verlauf der mittleren Flugzeit für Abstände von $2 \mu\text{m}$ zwei Extrema und dazwischen einen Wendepunkt auf. Dieses Verhalten ist auf die in der Simulation gewählten Fokuslage des Probestrahls zurückzuführen. Der Fokus des Teststrahls liegt immer in der Zellenmitte, was bedeutet, dass die von dem Probestrahl auf der Zellenwand ausgeleuchtete Fläche (Beleuchtungsradius) größer wird. Während diese Fläche klein ist, was für kleine Zellenlängen zutrifft, wird der Verlauf der relativen Atomzahl über der Zeit von den Atomen, die von den Seiten in den Strahl hineinfliegen, bestimmt. Wird die Beleuchtungsfläche des Probestrahls auf der Zellenwand jedoch größer, so werden gleich von Beginn an mehr Atome registriert, was die relative Atomzahl schon für sehr kleine Zeiten relativ hoch setzt. Die von den Nebendesorptionsquellen kommenden Atome können diese hohe Atomzahl nicht mehr aufwiegen, was den Abfall der Kurve insgesamt schneller gestaltet. Diese erscheint also ab einem bestimmten Beleuchtungsradius für größere Zellenlängen schmaler. Wird der Beleuchtungsradius noch größer, ähnelt das Modell dem zweidimensionalen Modell mit einer Desorptionswolke im Ursprung. Dadurch dominiert das „Herausfliegen“ der Atome aus dem Teststrahl, was einen langsameren Abfall der relativen Atomzahl bewirkt. Die mittlere Flugzeit steigt wieder an. Dagegen ähnelt das Modell der diskreten Desorptionsquellen mit relativ großen Abständen ($4 \mu\text{m}$) schon von Anfang an dem eindimensionalen Modell. Die mittlere Flugzeit steigt dabei über die gesamte Zellenlänge an, während die bei dem 1D-Modell vorhandene Linearität durch die Beiträge der Nebendesorptionsquellen aufgehoben wird.

5.2.3 Modell homogener verteilter Desorptionsdefekte

Im Grunde ist die Anordnung der Desorptionsdefekte auf der Zellenwandoberfläche unbekannt. Genauso wenig ist etwas über die Abstände zwischen diesen Stellen bekannt. Eine Poissonverteilung der Desorptionsdefekte wird sich im zweidimensionalen Modell allerdings nicht all zu sehr von dem schon betrachteten Fall der diskret verteilten Teilchenquellen unterscheiden. Eine weitere Herangehensweise wäre eine homogene Verteilung der Desorptionsdefekte anzunehmen. Ein großes Vorteil dieses Modells ist, dass es nicht mehr von den Positionen der Desorptionsdefekte abhängt.

In diesem Fall soll die Verteilungsfunktion 26 über alle Verschiebungen x_0 aufsummiert, d.h. integriert werden. Sei R der Radius des Desorptionskreises des blauen Strahls, dann ist die neue homogene Verteilungsfunktion für Zeiten $t > 0$ gegeben durch

$$\int_{-R}^R \frac{1}{(\sqrt{\pi}v_w)^2} \frac{1}{t^3} e^{-\frac{(x-x_0)^2+z^2}{(tv_w)^2}} z \cdot \Theta(t) dx_0 \quad (31)$$

Die Lösung des Integrals 31 lässt sich analytisch darstellen als

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi}v_w t^2} e^{-\left(\frac{z}{tv_w}\right)^2} z \Theta(t) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{R-x}{tv_w}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{R+x}{tv_w}\right) \right] \quad (32)$$

mit der Fehlerfunktion $\operatorname{erf}(x)$, die als

$$\operatorname{erf} z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt \quad (33)$$

definiert ist. Die neue Verteilungsfunktion 31 wird nun gemäß Gleichung 16 über die Geometrie des Gaußstrahls für jede Zeit t numerisch integriert um den Verlauf $\frac{N(t)}{N_0}$ für einen Deltadesorptionspuls zu erhalten. Die Kurven für die mittleren Flugzeiten über die Zellenlänge im Falle der homogenen und der diskreten Verteilung für einen Abstand von $0.1\mu\text{m}$ zwischen den Desorptionsquellen ist in Abbildung 16 b) dargestellt. Die Kurve für die homogene Verteilung zeigt ab ca. $4\mu\text{m}$ Zellenlänge deutlich höhere Flugzeiten als die der diskreten Verteilung. Die Atome sind hier viel dichter beieinander, was das schnelle Verlassen des Teststrahls unterbindet, da nach einer bestimmten Zeitspanne, aufgrund der großen Dichte, immer noch genug Teilchen im Teststrahl verweilen, um einen Beitrag zu leisten. Insgesamt erscheinen also die Atome in einer homogenen Verteilung langsamer als die in einer diskreten. Bemerkenswert ist, dass beide Kurven eine Art Wendepunkt besitzen, wobei dieser für homogene Verteilung weiter rechts liegt. Wie oben bereits beschrieben, tritt dieser im Bereich von Zellenlängen auf, wo schon für kleine Zeiten eine große Dichte an Atomen vom Teststrahl registriert wird. Dabei hängt natürlich die Position des Wendepunktes stark von der Fokusslage des Teststrahls in der Zelle ab, da dieser die Detektionsoberfläche auf der Zellenwand festlegt. Es ist außerdem offensichtlich, dass die Detektionsfläche bei einem in der Zellenmitte liegendem Fokus mit der Zellenlänge anwächst. Im Fall homogener Verteilung der Desorptionsquellen muss die Detektionsfläche größer sein, als im Fall einer diskreten Verteilung, weil der Teststrahl für kleine Zeiten bereits mehr Atome registrieren muss, als im weiteren Zeitverlauf von den Seiten in den Probestrahl reinfliegen können. Dies muss für homogene und größere Dichten durch eine größere Detektionsfläche gewährleistet werden. Eine größere Detektionsfläche bei der in der Simulation gewählten Konstruktion heißt aber auch eine größere

Zellenlänge.

Bis jetzt wurde nur der Fall betrachtet, bei dem der Desorptionswinkel durch $\cos \Theta$ beschrieben wird. In den meisten Fällen jedoch folgen desorbierende Partikel einem Winkel, der mit $\cos^n \Theta$, $n \geq 1$, einhergeht. Die Absicht ist dabei Desorptionswolken für verschiedene n und L miteinander zu vergleichen. Dies gelingt im Rahmen des Modells homogener Verteilung der Desorptionsdefekte am besten, da es nicht mehr von Positionen x_0 abhängt. Die verallgemeinerte Verteilungsfunktion ist in zwei Dimensionen durch Gleichung 27 gegeben und geht für $n = 1$ in die schon bekannte Funktion 26 über. Diese soll nun, analog dem $n = 1$ Fall, über die Verschiebungsvariable x_0 integriert werden. Es lässt sich jedoch nur sehr schwer ein analytischer Ausdruck, analog der Gleichung 32, aufstellen. Daher soll die Integration numerisch erfolgen. Es soll also insgesamt das Integral

$$\frac{N(t)}{N_0} = \int_0^L \int_{-\omega(z)}^{\omega(z)} \left[\int_{-R}^R e^{\frac{-m((x-x_0)^2+z^2)}{2k_B T t^2}} \frac{z^n}{((x-x_0)^2+z^2)^{\frac{n-1}{2}} t^3} \cdot \Theta(t) dx_0 \right] dx dz \quad (34)$$

gelöst werden. Die Implementierung des Integrals 34 fällt viel leichter, falls man die Integrationsreihenfolge vertauschen dürfte. Man bestimmt also

$$\frac{N(t, n)}{N_0} = \int_{-R}^R \frac{N(t, n, x_0)}{N_0} dx_0 \quad (35)$$

für eine bestimmte Zellenlänge L . Dass man es so machen darf, bestätigt Abbildung 17 a), wobei die durchgezogene Linie die mit der für den $n = 1$ Fall analytischen Lösung 32, während die roten Punkte mittels der numerischen Methode 35 berechnet wurden.

Im weiteren Verlauf werden nun numerisch Integrale 34 für drei verschiedene Zellenlängen und unterschiedliche n berechnet und miteinander verglichen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 17 b), c) und d) dargestellt.

Die Ergebnisse lassen darauf schließen, dass die Dynamik der Atome für betrachtete Zellenlängen durch das von den Seiten „Hineinfliegen“ der Atome in den Probestrahl dominiert. Dies erkennt man anhand größerer n , für die die Kurven schmaler werden. Die Desorptionswolken sind bei größeren n schmaler, d.h. es sind zwar über die Zeit mehr Atome im Strahl, jedoch kommen auch weniger Atome von außerhalb des Strahls an. Würden die Kurven für größere n breiter werden, so würde es heißen, dass die sich schon im Teststrahl befindenden Atome länger zur Dichte beitragen. Dies ist hier jedoch nicht der Fall. Mit größerem n wird über die Zeit die Dichte insgesamt kleiner, da die von den Seiten kommenden Teilchen insgesamt länger brauchen um den Strahl zu erreichen. Im Fall der $10\mu\text{m}$ - Zelle wird diese Vermutung bestätigt, da für lange Zeiten der Verlauf der relativen Atomanzahl über der Zeit für alle n beinahe identisch ist. Hier erreichen nämlich die von den Seiten kommenden Atome erst nach einer größeren Zeit den Probestrahl, als es für $n = 1$ der Fall ist.

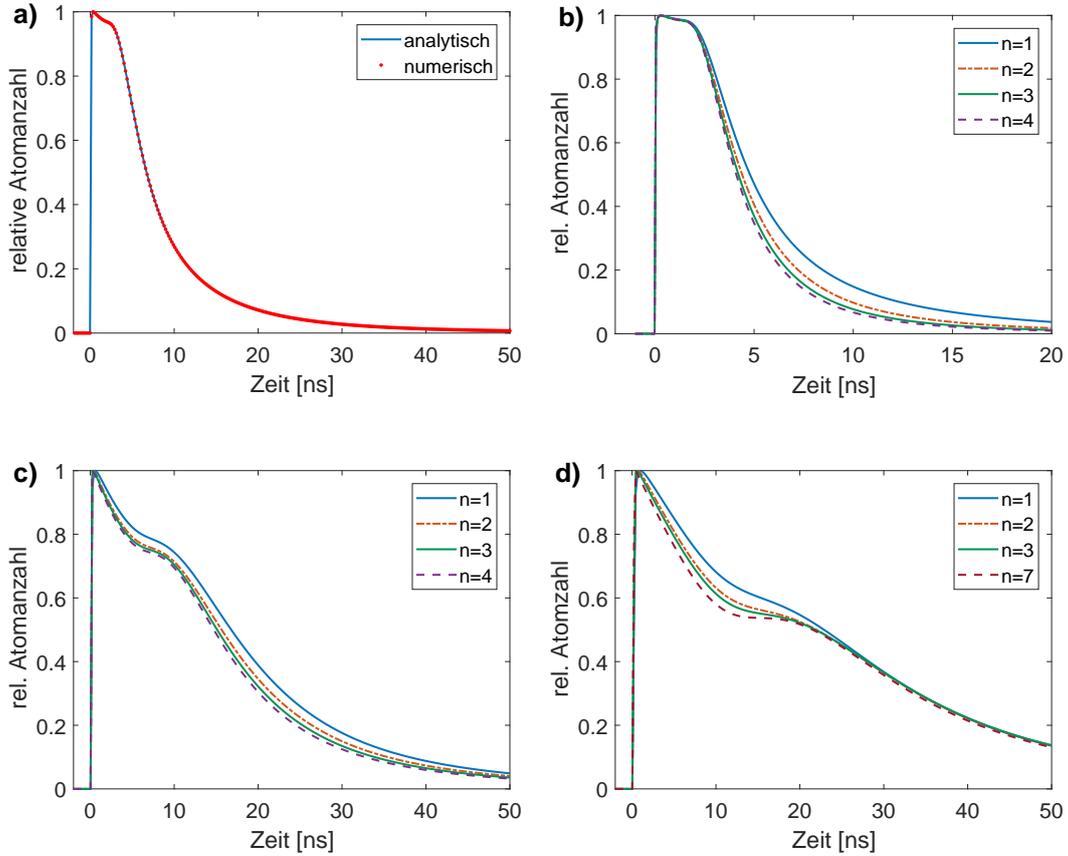


Abbildung 17: a) Simulierte relative Atomzahl über der Zeit mittels eines einzigen Delta-Desorptionspulses bei einer Zellenlänge von $1.7\mu\text{m}$ und $n = 1$ im 2D-Modell homogen verteilter Desorptionsdefekte. Die blaue durchgezogene Linie ist dabei durch die analytisch gewonnene Verteilungsfunktion 32 und die roten Punkte durch die numerische Methode 35 berechnet. Die Samplerate dx_0 beträgt $0.1\mu\text{m}$. b), c), d) Dargestellt ist die über die Zeit aufgetragene relative Atomzahl für unterschiedliche n . In b) erfolgte die Simulation für die Zellenlänge $L = 1.2\mu\text{m}$, in c) für $L = 5\mu\text{m}$, und in d) für $10\mu\text{m}$.

5.3 Dreidimensionales Modell der Zelle

5.3.1 Das Modell Poissonverteilter Desorptionsdefekte

Das zweidimensionale Desorptionsmodell soll in diesem Kapitel zu einem 3D-Modell erweitert werden. Die Absicht dabei ist damit später (Abbildung 27) die OD aus einer gemessenen Transmissionsfunktion zu reproduzieren. Dazu braucht man jedoch eine Volumendichte und einen Streuquerschnitt, welche nur in drei Dimensionen definiert sind. Dabei werden sowohl die Zelle, als auch der Gaußstrahl zu dreidimensionalen Volumenkörpern, die Desorptionsfläche liegt nun in der xy -Ebene bei $z=0$, die Flugrichtung der Atome ist die z -Achse. Der Desorptionswinkel Θ ist durch den Winkel zwischen der z -Achse und der Desorptionsebene gegeben, wobei $\Theta \in [-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$.

Die dreidimensionale Verteilungsfunktion ist für den Fall $n = 1$ durch Gleichung 7 und

für $n \geq 1$ durch Gleichung 9 bestimmt. Diese ist in der xy -Ebene kugelsymmetrisch und sowohl in yz -, als auch in der xz -Ebene zylindersymmetrisch (Abbildung 18).

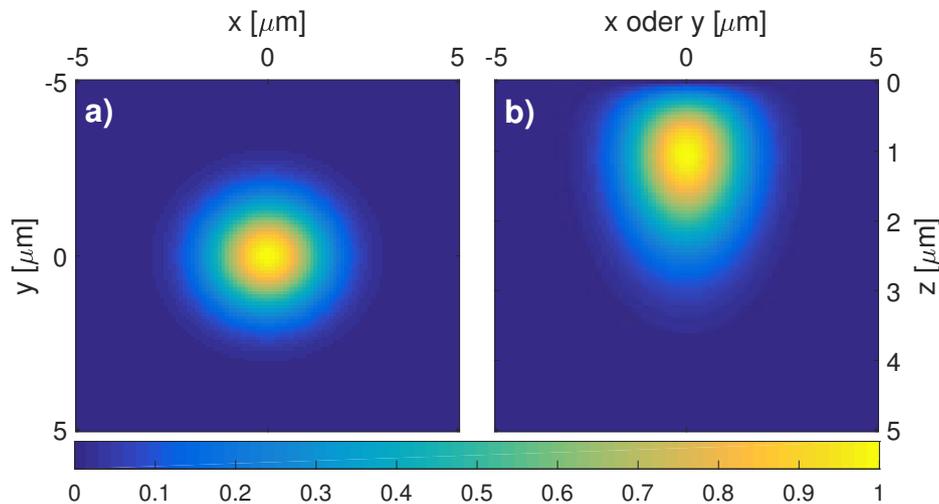


Abbildung 18: Dreidimensionale „Flussverteilung“ nach Gleichung 7. Links ist die Perspektive auf die Desorptionsebene gezeigt, rechts auf die xz - und yz -Ebene.

Um die Anzahl der Atome $N(t)$ zu bestimmen, sollen die Verteilungsfunktionen 7 und 9 über den Gaußstrahl gemäß Gleichung 16 integriert werden. Es ist also

$$\frac{N(t)}{N_0} = \int_0^L \iint_{x^2+y^2 \leq (\omega(z))^2} \left[\sum_{i=1}^k f_{flux}(x, x_{0_i}, y, y_{0_i}, z, t, n) \right] dx dy dz \quad (36)$$

für k Desorptionsquellen. Die Integration erfolgt numerisch. Das Programm ist so geschrieben, dass eine beliebige Funktion f_{flux} eingesetzt werden kann. Die Idee hinter der Implementation ist die Verteilungsfunktion f_{flux} als ein dreidimensionales array darzustellen. Dabei werden der Funktion f_{flux} Werte einzelner Punkte auf der Diskretisierung des Gaußstrahls zugewiesen. Anschließend wird über die einzelnen Dimensionen des erhaltenen arrays integriert. Die Diskretisierung erfolgt über die Querschnittsflächen des Gaußstrahls durch die xy -Ebene (s. Abbildung 20 c)). Dabei folgt der Radius dieser Kreise der Gleichung 11. Der gesamte Strahl besteht dann aus einer beliebigen Anzahl an Querschnitten zwischen $z = 0$ und $z = L$. In der Simulation wurde die Anzahl der Diskretisierungsflächen auf 100 gesetzt, was einen Abstand von $\frac{L}{100}$ zwischen zwei solchen Flächen bedeutet.

Zuerst soll untersucht werden, wie groß die Beiträge der einzelnen Desorptionswolken in Abständen x_0 und y_0 zum Ursprung zur relativen gesamten Atomanzahl sind. Dazu wird ein festes y_0 gewählt und die relative Atomzahl für einige Abstände x_0 berechnet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 19 a), b) und c) dargestellt. Dabei ist in a) $y_0 = 0\mu\text{m}$, in b) $y_0 = 1\mu\text{m}$ und in c) $y_0 = 2\mu\text{m}$. x_0 durchläuft dabei Positionen von $0 - 3\mu\text{m}$ in $0.5\mu\text{m}$ -Schritten. Abbildung 19 a) liefert dabei ähnliche Ergebnisse wie im 2D-Modell (Abbildung 12 b)). Hier soll darauf hingewiesen werden, dass die relative Atomzahl bei 30ns für alle x_0 praktisch auf Null abgefallen ist, während sie im 2D-Modell zu diesem

Zeitpunkt minimal größer als Null ist. Dies ist dadurch begründet, dass im 3D-Modell Atome mehr Richtungen zum Verlassen des Teststrahls haben. Für Abstände $y_0 \geq 1\mu\text{m}$ fällt der Beitrag der Atome drastisch ab. Während für $y_0 = 1\mu\text{m}$ der Beitrag der Atome in der Größenordnung von der relativen Atomzahl bei $y_0 = 0\mu\text{m}$ bleibt, tragen die Atome bei $y_0 = 2\mu\text{m}$ nur wenige Hundertstel zur gesamten Atomzahl bei. Um den Betrag für größere Abstände zum Ursprung als $2\mu\text{m}$ aufzuzeigen, wird für jeweils ein festes y_0 auf der Desorptionsfläche der Abstand x_0 in $1\mu\text{m}$ -Schritten durchgeführt und die Maxima der zeitabhängigen relativen Atomanzahl über x_0 aufgetragen. Dadurch wird ersichtlich, dass der Abfall des Beitrags der relativen Atomzahl mit dem Abstand exponentieller Natur ist, da Abbildung 19 d) ein logarithmischer Plot ist.

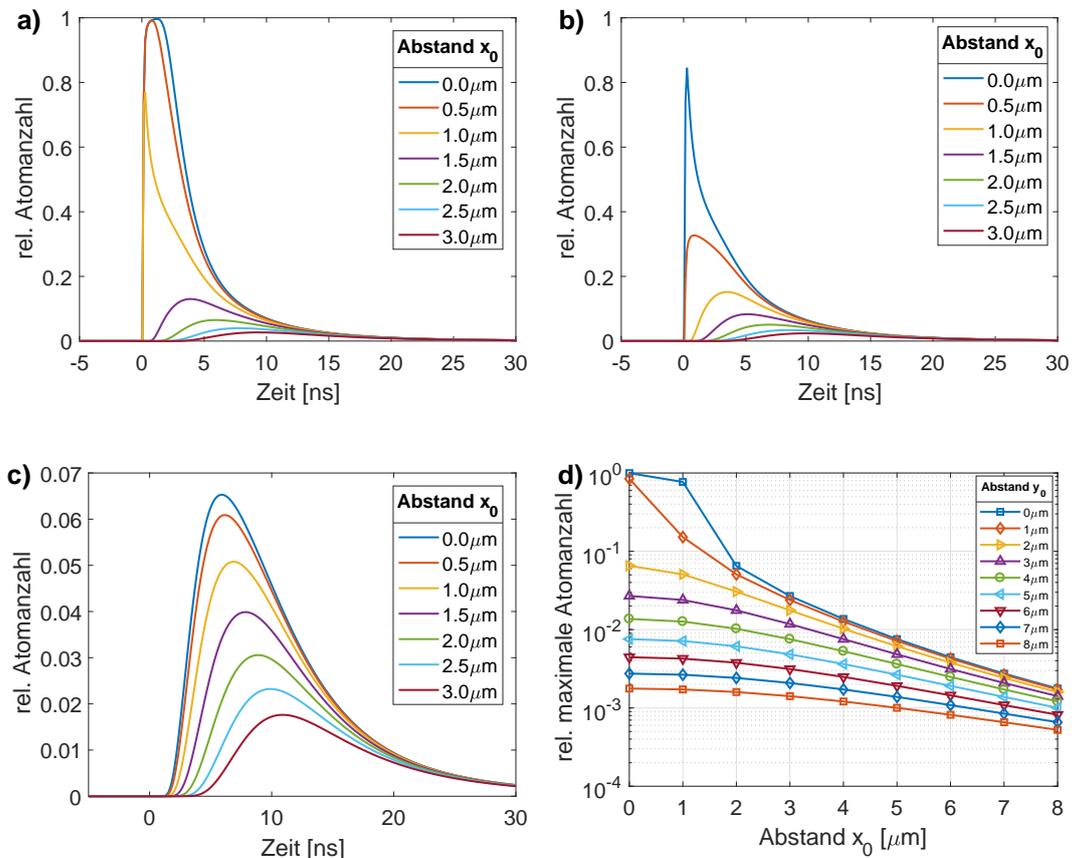


Abbildung 19: Relative Atomanzahl für $L = 5\mu\text{m}$ berechnet mittels Gleichung 36 für $n=1$ für verschiedene Abstände x_0 bei **a)** $y_0 = 0\mu\text{m}$, **b)** $y_0 = 1\mu\text{m}$ und **c)** $y_0 = 2\mu\text{m}$. **d)** Maxima der relativen Atomanzahl für verschiedene Positionen y_0 , aufgetragen über verschiedene Abstände zum Ursprung x_0 .

Es sollen nun 200 zufällig verteilte Desorptionsdefekte auf der Zellenwand (xy -Ebene, $z = 0$) in einem Desorptionsradius von $8\mu\text{m}$ platziert werden (Abbildung 20 a)) und mithilfe von Gleichung 36 die daraus resultierende relative Atomanzahl berechnet werden. Die Desorptionsrate ist nun eine zweidimensionale „Gaußglocke“ und ist eine Funktion von den Defektpositionen x_0 und y_0 .

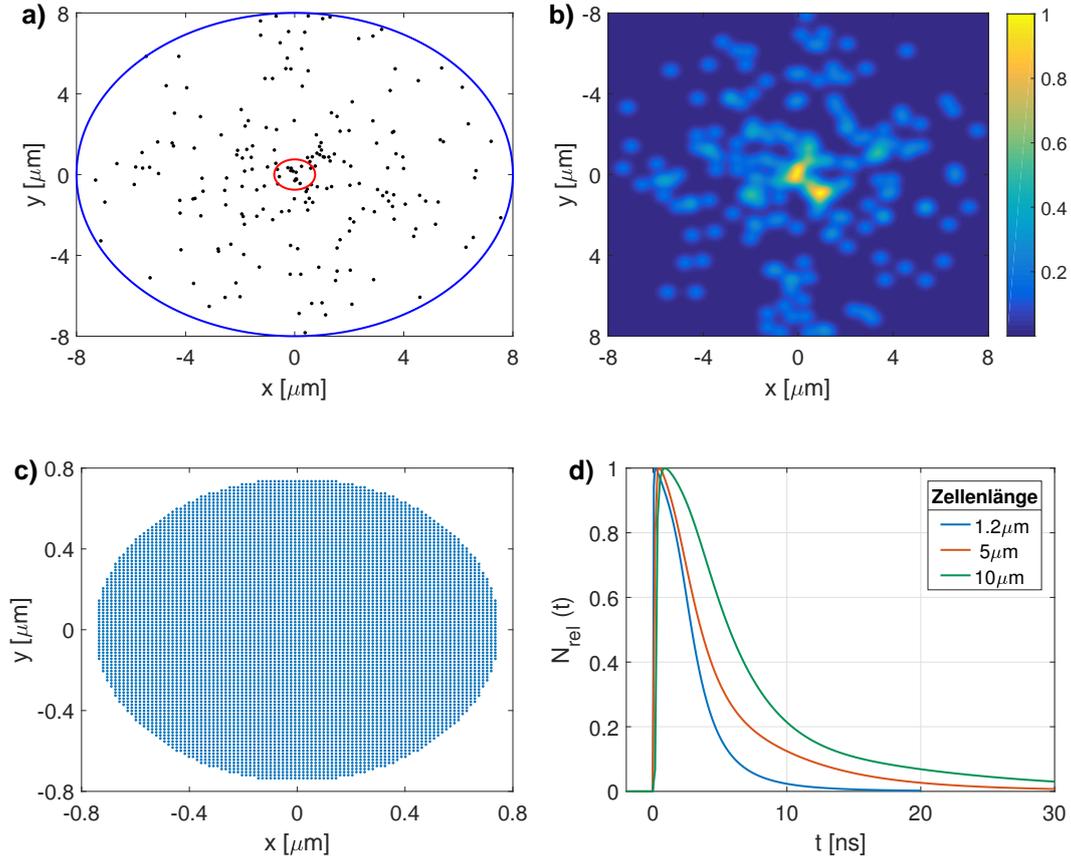


Abbildung 20: **a)** Anfangsposition der 200 Poissonverteilter Desorptionsdefekte auf der Zellenwand. Der blaue Kreis repräsentiert dabei den Desorptionsstrahl mit einem Radius von $8\mu\text{m}$, der rote Kreis den Teststrahl bei $z = \frac{L}{2}$ mit dem Radius $\omega_0 = 0.75\mu\text{m}$. **b)** Dargestellt sind die aufsummierten Verteilungsfunktionen der einzelnen Desorptionsdefekte bei $t = 1.2\text{ns}$ in der xy -Ebene bei $z = 0.01\mu\text{m}$. **c)** Diskretisierungsquerschnittsfläche des Gaußstrahls bei $z = z_0 = \frac{L}{2}$. Der Radius dieser Fläche beträgt $w_0 = 0.75\mu\text{m}$. Jede einzelne Fläche wird dabei durch 7668 Punkte gebildet. **d)** Relativen Atomzahlen für drei verschiedene Zelllängen simuliert mittels des dreidimensionalen Desorptionsmodells diskreter poissonverteilter Desorptionsdefekte.

5.4 Der Faltungsvorgang

Der Desorptionspuls wurde bis jetzt als ein Deltapuls angesehen, besitzt jedoch in der Realität eine endliche Breite. Die Form ist in guter Näherung durch den Blackman-Puls gegeben und hat eine FWHM von 2 ns (Abbildung 21). Dieser ist, falls symmetrisch um den Ursprung, durch Gleichung 37 modellierbar.

$$\text{BMP}(t) = \left[\frac{21}{50} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi t}{2.5 \cdot 10^{-9}}\right) + \frac{2}{25} \cos\left(\frac{\pi t}{2.5 \cdot 10^{-9}}\right) \right] \cdot \Theta\left(t + 2.5 \cdot 10^{-9}\right) \Theta\left(-t + 2.5 \cdot 10^{-9}\right) \quad (37)$$

Um das richtige Ausgangssignal S_{out} zu erhalten soll das mittels eines Deltapulses simulierte Signal S_{in} mit dem Blackman-Puls BMP gefaltet werden. Das Ausgangssignal hat dann die Form 38.

$$S_{out}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} S_{in}(\tau) \text{BMP}(t - \tau) d\tau \quad (38)$$

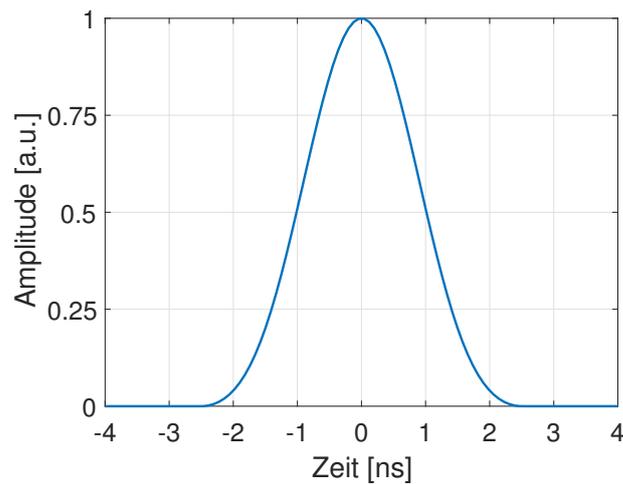


Abbildung 21: Blackman-Puls nach Gleichung 38 mit einer FWHM von 2ns.

5.5 Vergleich der gefalteten und ungefalteten Signale

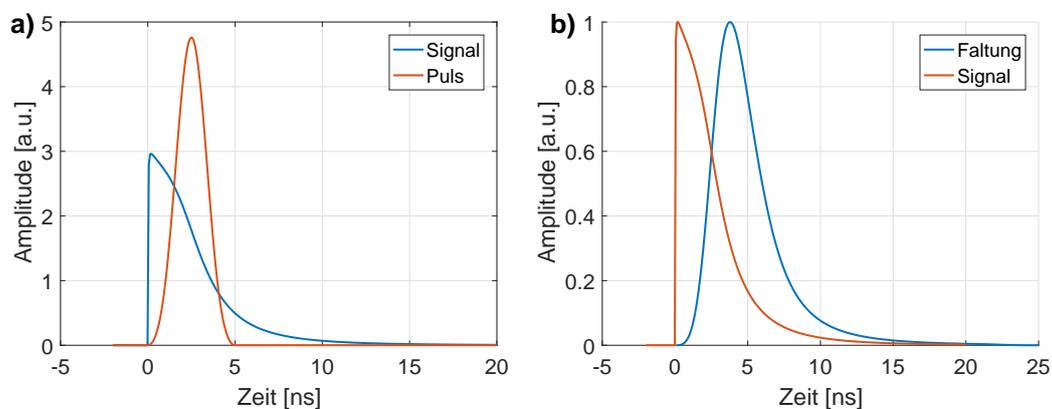


Abbildung 22: a) Dargestellt sind das Eingangssignal und der Desorptionspuls mit $\text{FWHM} = 2\text{ns}$ und jeweils normierten Flächen. Das Eingangssignal ist dabei das durch einen Deltadesorptionspuls simulierte Dichte in einer Zelle mit Länge $1.2\mu\text{m}$. b) Geplottet sind das Eingangssignal und das mit dem Blackman-Puls gefaltete Ausgangssignal. Das Ausgangssignal zeigt einen deutlich langsameren Anstieg und ein ausgeprägtes Maximum.

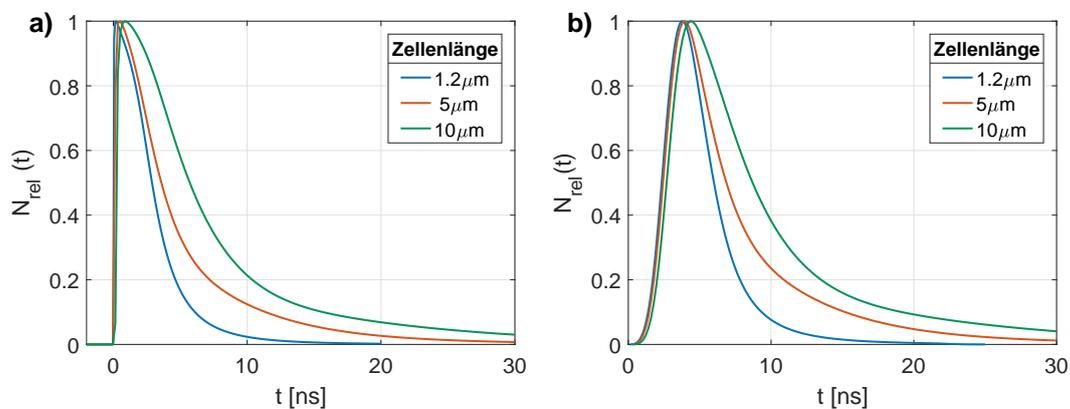


Abbildung 23: a) Relative Atomzahlen für drei verschiedene Zellenlängen simuliert mittels des dreidimensionalen Desorptionsmodells diskreter poissonverteilter Desorptionsdefekte. b) Die in a) dargestellten Signale wurden hier mit dem Blackman-Puls gefaltet. Die gefalteten Kurven sind breiter als die Eingangssignale, da hier zusätzlich die Breite des Blackman-Pulses zur relativen Atomzahl beiträgt.

5.5.1 3D-Modell homogenverteilter Desorptionsdefekte

Analog zum 2D-Modell homogen verteilter Desorptionsdefekte lässt sich für den Fall $n=1$ mithilfe der Aufintegration über die Verschiebungspositionen x_0 und y_0 ein analytischer Ausdruck für eine dreidimensionale Verteilungsfunktion finden. Dies ist jedoch nur möglich, falls die kreisförmige Desorptionsfläche als ein Quadrat mit einer Seitenlänge von $16\mu\text{m}$ genähert wird. Wie in Abbildung 12 bereits gezeigt ist der Beitrag der sich weiter außen befindenden Atome nicht sehr groß, was an dieser Stelle die Näherung rechtfertigt. Die neue dreidimensionale homogene Verteilungsfunktion ist dann, bis auf die Normierung, gegeben durch Gleichung 39, wobei $a(t) = \frac{m}{2k_B T t^2}$.

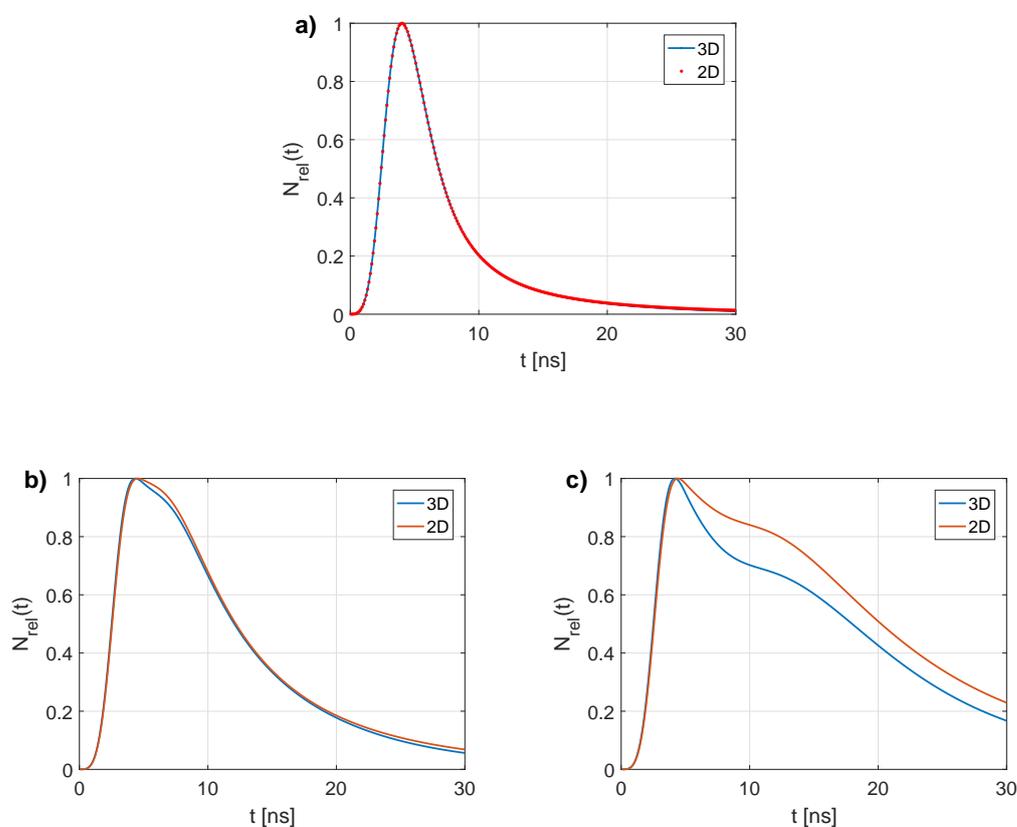


Abbildung 24: a) Vergleich der 2- und 3D Modelle homogen verteilter Desorptionsdefekte für eine $1\mu\text{m}$ Zelle. Hier stimmen die beiden Kurven vollständig überein. Das dreidimensionale Modell scheint für kleine Zellenlängen gegen das 2D-Modell zu konvergieren. b) Vergleich der 2- und 3D Modelle homogen verteilter Desorptionsdefekte für eine Zellenlänge von $2.4\mu\text{m}$. Die beiden Kurven liegen, bis auf kleine Abweichungen, übereinander. c) Vergleich der 2D- und 3D Modelle homogen verteilter Desorptionsdefekte für $L = 5\mu\text{m}$. Im zweidimensionalen Modell werden mehr Atome registriert als im dreidimensionalen Fall. Dies ist darauf zurückzuführen, dass im 3D-Modell die Atome den Teststrahl im 360° -Winkel verlassen können, während im zweidimensionalen Fall dies nur in der Ebene geschehen kann.

$$\begin{aligned}
f_{flux}(x, y, z, t) \sim & -N_0 e^{-\frac{2(x^2+y^2)}{8 \cdot 10^{-6}}} \frac{1}{4a(t)} e^{-a(t)z^2} \frac{\pi z}{t^4} \cdot \\
& \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{a(t)}(x - R) \right) - \operatorname{erf} \left(\sqrt{a(t)}(x + R) \right) \right] \cdot \\
& \left[\operatorname{erf} \left(\sqrt{a(t)}(R - y) \right) + \operatorname{erf} \left(\sqrt{a(t)}(R + y) \right) \right] \cdot \Theta(t)
\end{aligned} \quad (39)$$

Für den Fall $n > 1$ wurde versucht numerisch vorzugehen. Die Vorgehensweise ist dabei analog zur Methode 35, wobei jedoch noch eine zusätzliche Dimension dazukommt:

$$\frac{N(t, n)}{N_0} = \iint_{x_0^2 + y_0^2 \leq R^2} \frac{N(t, n, x_0, y_0)}{N_0} dx_0 dy_0 \approx \int_{-R}^R \int_{-R}^R \frac{N(t, n, x_0, y_0)}{N_0} dx_0 dy_0 \quad (40)$$

Durch die zusätzliche Dimension steigt die Rechenzeit quadratisch an. Wie bereits in der Abbildung 17 a) gezeigt, konvergiert die numerische Lösung gegen die analytische für eine Samplerate von $dx_0 = 0.1\mu\text{m}$. Sei nun $N(t, n, x_0, y_0)$ ein zweidimensionales array, wobei jeder Wert des arrays der Vektor $N(t)|_{x_0, y_0}$ bei festem x_0 und y_0 ist. (Im Grunde genommen ist $N(t, n, x_0, y_0)$ ein dreidimensionales array). Für die numerische Integration über das zweidimensionale array muss jeder Wert $N(t)|_{x_0, y_0}$ bekannt sein. Mit der vorgegebenen Samplerate von $0.1\mu\text{m}$ und der Desorptionsrechteckseitenlänge $2R = 16\mu\text{m}$ sind es 161^2 Werte, die sich auf dem array befinden, und die es zu bestimmen gilt. Die mittlere Rechenzeit zur Bestimmung eines einzelnen Vektors $N(t)|_{x_0, y_0}$ beträgt ca. 40 Sekunden (i3 sechster Generation, SSD). Die Gesamtrechenzeit für ein einziges Integral 40 ergibt sich zu

$$40\text{s} \cdot 161^2 \approx 288\text{h} = 12\text{d}$$

Diese Rechenzeit ist nur schwer aufzubringen. Jedoch wurde in der Abbildung 24 gezeigt, dass für genügend kleine Zellenlängen das dreidimensionale Modell gegen das 2D-Modell konvergiert, wo die Rechenzeit viel kleiner ist. Im Experiment beträgt die Länge der größten ausgemessenen Zelle $2.4\mu\text{m}$. In Abbildung 24 a) stimmen die beiden Kurven, bis auf vernachlässigbar kleine Abweichungen, überein. Für kleinere Zellenlängen werden die Abweichungen noch geringer, wie Abbildung 24 b) zeigt. Es ist also gerechtfertigt bei der Auswertung der Messdaten das zweidimensionale Modell dem dreidimensionalen vorzuziehen.

6 Das Experiment

6.1 Der Aufbau

Der experimentelle Aufbau für die Messung der Transmissionsfunktion ist in Abbildung 25 dargestellt. Der Teststrahl (780 nm) und der blaue Desorptionsstrahl (480 nm) sind überlagert (copropagating). Dabei ist der blaue Strahl gepulst und der rote gelockt. Die Dampfzelle ist eine Keilzelle und besteht aus zwei räumlich getrennten Bereichen, die jeweils als Messbereich und als Reservoir dienen. Dabei kann die Zunahme der Zellenlänge über dem Desorptionsstrahldurchmesser vernachlässigt werden. Die Zelle besteht aus Suprasil (SiO_2) und ist mit 14nm Al_2O_3 (Saphir) beschichtet. Die Temperatur im Messbereich der Zelle beträgt ca. 180°C . Die obere Linse dient zur Fokussierung, die zweite kollimiert die beiden aus der Zelle rauskommenden Strahlen. Der Teststrahl wird durch einen Spiegel (R:780, T:480) in den Faserkoppler gelenkt. Das erhaltene Signal wird mit einem Single Photon Counter Multiplier (SPCM) analysiert, dessen Kernbauteil eine APD (Avalanche-Photodiode) ist. Die im Nanosekundenbereich zeitaufgelöste Transmissionsfunktion wird schließlich auf dem Oszilloskop ausgelesen.

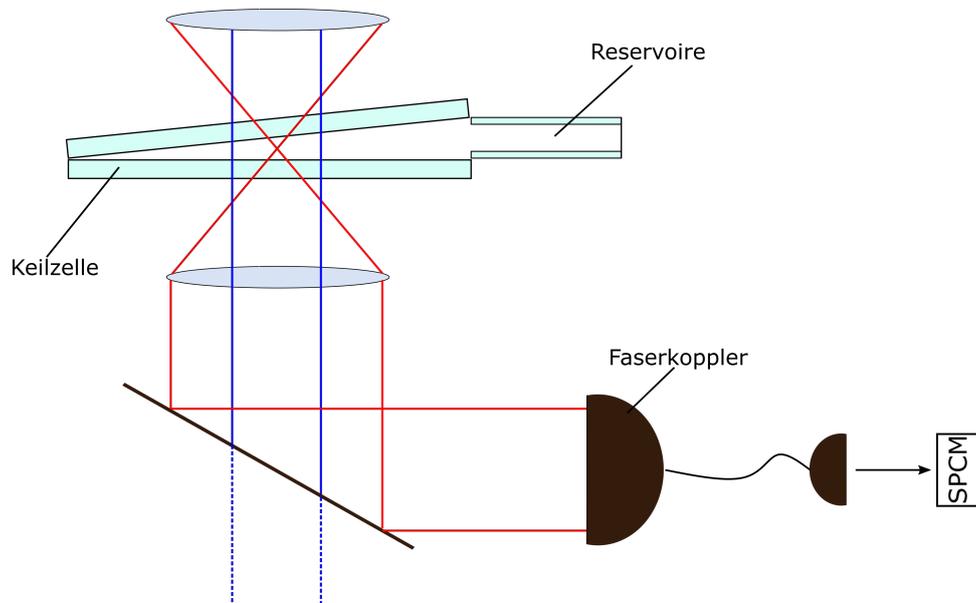


Abbildung 25: Abgebildet ist der vereinfachte, schematische Aufbau zur Messung der Transmission in einer Rubidium-Mikrodampfzelle. Die Dampfzelle ist eine Keilzelle mit zwei räumlich getrennten Bereichen, die jeweils als Messbereich und als Reservoir dienen. Das Signal wird durch einen Faserkoppler in den Single Photon Counter Multiplier (SPCM) geleitet.

6.2 Vergleich mit experimentellen Daten und Ergebnisse

Im Verlauf der Messung wurden insgesamt fünf Transmissionsspektren bei fünf verschiedenen Zellenlängen aufgenommen (Abbildung 26). Außerdem wurde eine Messung ohne Desorptionsstrahl durchgeführt, welche eine Kurve lieferte, die sich durch eine Gerade mit negativer Steigung fitten lässt, und welche in Abbildung 26 als „lightlevel“ bezeichnet wird. Die Zelle an sich kann als eine Art Resonator mit geringer Reflektivität angesehen

werden, wodurch die Linienbreite sehr stark vergrößert wird. Die Finesse wird dadurch ungefähr gleich groß wie die freie Spektrale Breite, was der Grund für breite und abgeflachte Resonanzen ist, welche aber immer noch gut zu erkennen sind. Die Messungen wurden dabei genau auf den Resonanzen durchgeführt. Die Transmissionsmaxima entstehen dann, wenn die Zellenlänge einem Vielfachen der halben Wellenlänge des Lichts entspricht. Es kann also ein Modell entwickelt werden, womit die Zellenlänge auf den Transmissionsmaxima bestimmt werden kann.

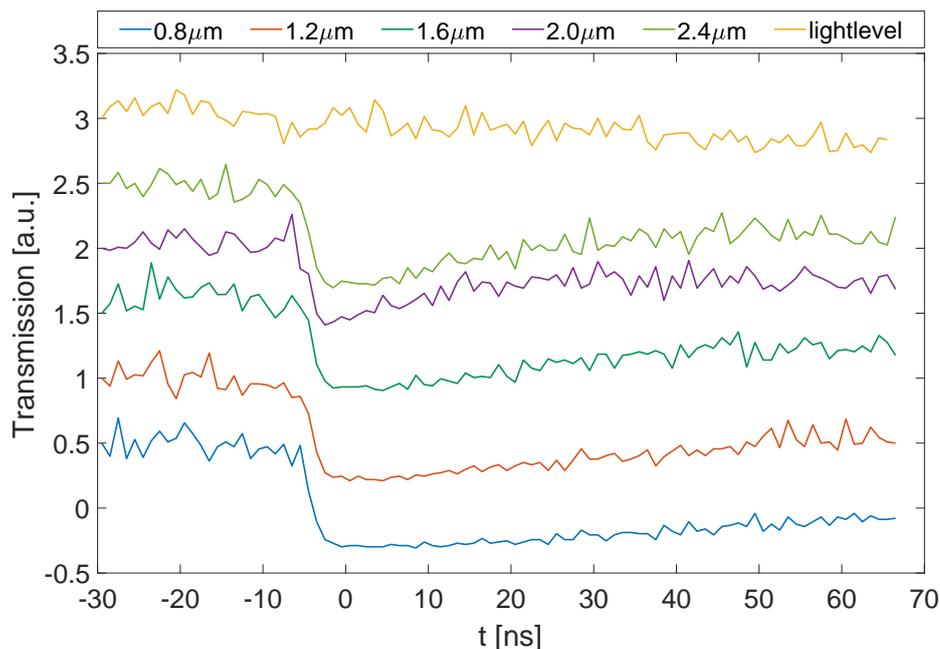


Abbildung 26: Durch Methode 25 gemessene Transmissionsfunktionen für verschiedene Zellenlängen. Die erste Kurve von oben stellt eine Messung ohne Desorptionspuls dar und wird als „lightlevel“ bezeichnet. Im Idealfall sollte sich die Transmission nicht ändern, da kein Licht absorbiert wird.

Im Folgenden werden alle Transmissionspektren um das „lightlevel“ kompensiert und aus ihnen die zeitabhängige optische Dichte $OD(t)$ gebildet. Diese ist der negative Logarithmus aus dem Quotienten von den Transmissionwerten $T(t)$ und dem Mittelwert der Eingangstransmission $\overline{T_{ein}}$ vor dem Einschalten des Desorptionspulses.

$$OD(t) = -\ln\left(\frac{T(t)}{\overline{T_{ein}}}\right) \quad (41)$$

Weiterhin werden die erhaltenen ODs mit den Simulationsergebnissen verglichen (Abbildung 27). Da die Zellenlänge vorgegeben ist, sind die einzigen Fitparameter die Amplitude, die durch die Anzahl N_0 der Atome gegeben ist, und die Zeit des Einschaltens des Desorptionspulses t_0 . Die schwarze durchgezogene Linie wurde mittels des dreidimensionalen Modells homogen verteilter Desorptionsdefekte (Gleichung 39) berechnet. Wie in der Abbildung 27 zu sehen ist, fällt die berechnete Kurve viel schneller als die gemessenen ODs ab. Die Simulation ist hier nur in der Lage das Verhalten der OD bis zum Maximum zu reproduzieren. Dieses entsteht jedoch weniger durch das Modell selbst, sondern eher

durch den Faltungsvorgang der simulierten Signale mit dem Blackman-Puls. Das Modell diskreter Desorptionsdefekte lieferte ähnliche Ergebnisse, wobei die Kurven tendenziell schmaler sind, als im homogenen Modell, da wegen der niedrigeren Atomdichte weniger Atome registriert werden können.

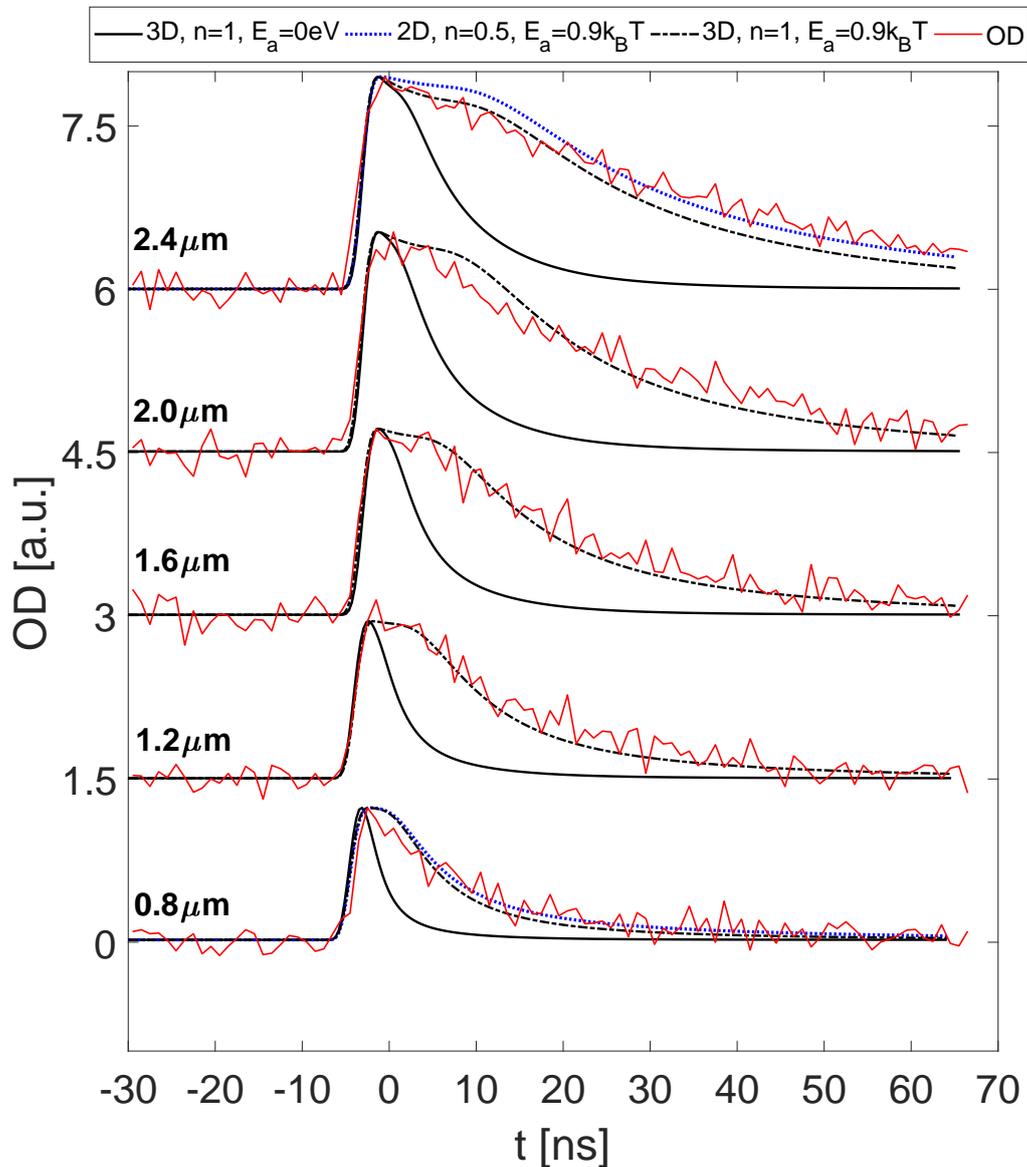


Abbildung 27: Dargestellt sind die gemessenen und simulierten zeitabhängigen optischen Dichten für verschiedene Zellenlängen. Die roten Kurven sind die um das „lightlevel“ kompensierten gemessenen ODs. Die schwarzen durchgezogenen Linien wurden mittels des 3D-Modells homogener verteilter Desorptionsdefekte berechnet. Die Verteilungsfunktion ist dabei durch Gleichung 39 gegeben. Für die schwarzen gestrichelten Linien wurde zusätzlich eine Adsorptionsenergie $E_a = 0.9k_B T$ angenommen. Die blauen gepunkteten Kurven wurden mittels des zweidimensionalen Modells homogener verteilter Desorptionsdefekte (Methode 34) für die gleiche Adsorptionsenergie und einer Abstrahlcharakteristik $\sim \cos^{0.5} \Theta$ berechnet.

Die Atome erscheinen in der Simulation viel schneller als in der Realität. Bekannt ist jedoch, dass desorbierende Atome ein Oberflächenpotential (surface potential) überwinden müssen, welches für verschiedene Desorptionsflächen verschieden groß ist, und dadurch einen Teil ihrer kinetischen Energie einbüßen. Zur Berücksichtigung des Oberflächenpotentials wird im Boltzmanfaktor ein zusätzlicher Term E_a eingeführt, welcher die Adsorptionsenergie bzw. die Tiefe des Potentials kennzeichnen soll.

$$e^{-\frac{E_{kin}}{k_B T}} \rightarrow e^{-\frac{E_{kin}}{k_B T - E_a}} \quad (42)$$

Die schwarzen gestrichelten Kurven in Abbildung 27 repräsentieren die mittels der Simulation berechneten ODs für eine Adsorptionsenergie

$$E_a = 0.9k_B T \approx 35.1\text{meV} \quad (43)$$

mit $T = 180^\circ\text{C}$. Das würde bedeuten, dass die desorbierten Atome 90% ihrer kinetischen Energie an das Oberflächenpotential abgeben.

Die blauen gepunkteten Kurven wurden mittels des zweidimensionalen Modells homogen verteilter Desorptionsdefekte (Methode 34) für eine Abstrahlcharakteristik $\sim \cos^{0.5} \Theta$ berechnet. Diese scheint für die kleinste gemessene Zellenlänge die Messwerte für Zeiten $\text{ca.} \geq 0.5\text{ns}$ minimal besser zu treffen als die Kurve für $n=1$ (schwarz-gestrichelte Kurve). Für die größte gemessene Zellenlänge trifft die blau-punktierte Kurve ($n=0.5$) die Messwerte für große Zeiten besser als die Kurve für $n=1$, weicht jedoch für kurze Zeiten von den Messwerten stark ab. Die schwarze punktierte Kurve beschreibt dagegen das Verhalten der OD für kurze Zeiten gut, fällt aber für lange Zeiten viel zu schnell ab.

Es soll nun eine Aussage über die Anzahl, Volumen- und Oberflächendichten der Atome in der Zelle zum Zeitpunkt der Messung getroffen werden. Dazu soll die homogene Verteilungsfunktion 39 betrachtet werden. Damit die Integration die richtige Atomanzahl liefert, soll die Funktion richtig normiert werden. Dazu soll eine Zelle der Länge L mit einer Breite und Höhe von $16\mu\text{m}$, entsprechend dem Desorptionsradius, konstruiert werden. An dieser Stelle wird der Desorptionskreis mit Radius von $8\mu\text{m}$ durch eine quadratische Fläche mit der Seitenlänge $16\mu\text{m}$ approximiert. In der Verteilungsfunktion 39 wird nun die Gesamtatomzahl N_0 gleich eins gesetzt und die Desorptionsrate vernachlässigt. Anschließend wird über das Gesamtvolumen der konstruierten Zelle integriert. Da N_0 gleich eins ist, kann höchstens ein Atom desorbieren. Die zeitabhängige Atomzahl $N(t)$ soll also ein Maximum bei 1 aufweisen, da zu einem bestimmten Zeitpunkt sich insgesamt ein Atom in der Zelle befinden muss. Die Normierungskonstante η wird so gewählt, dass dies erfüllt ist. Es muss also gelten

$$1 = \eta \cdot \text{MAX} \int_{-8\mu\text{m}}^{8\mu\text{m}} \int_{-8\mu\text{m}}^{8\mu\text{m}} \int_0^L dx dy dz \frac{1}{4a(t)} e^{-a(t)z^2} \frac{\pi z}{t^4} \cdot \left[\text{erf} \left(\sqrt{a(t)}(x - R) \right) - \text{erf} \left(\sqrt{a(t)}(x + R) \right) \right] \cdot \left[\text{erf} \left(\sqrt{a(t)}(R - y) \right) + \text{erf} \left(\sqrt{a(t)}(R + y) \right) \right] \cdot \Theta(t) \quad (44)$$

Numerische Integration lieferte

$$\eta \approx 0.3219 \frac{\text{s}^4}{\text{m}^3} \quad (45)$$

Die mittels der Simulation berechneten Werte und die gemessenen optischen Dichten sind in Tabelle 1 zusammengetragen.

L [μm]	OD	N_{total}	$n_{probe} [\frac{1}{\text{m}^3}]$	$\rho [\frac{1}{\text{m}^2}]$
0.8	1.234	$1.15 \cdot 10^5$	$5.60 \cdot 10^{20}$	$1.80 \cdot 10^{15}$
1.2	1.449	$1.35 \cdot 10^5$	$4.46 \cdot 10^{20}$	$2.11 \cdot 10^{15}$
1.6	1.718	$1.55 \cdot 10^5$	$3.93 \cdot 10^{20}$	$2.42 \cdot 10^{15}$
2.0	2.026	$1.80 \cdot 10^5$	$3.76 \cdot 10^{20}$	$2.81 \cdot 10^{15}$
2.4	1.952	$1.65 \cdot 10^5$	$2.97 \cdot 10^{20}$	$2.58 \cdot 10^{15}$

Tabelle 1: Aufgelistet sind die gemessenen optischen Dichten und die dazugehörigen, mittels Simulation berechnete gesamte Anzahl der desorbierten Atome N_{total} , die atomare Volumendichte im Teststrahl n_{probe} und die Oberflächendichte auf der Desorptionsfläche ρ .

L sind dabei die Zellenlängen, OD sind die gemessenen optischen Dichten, N_{total} ist die in der Simulation gewählte Konstante N_0 , um den Wert der nötigen OD mittels

$$OD = \frac{N_{probe}}{V_{probe}} \cdot \sigma \cdot L \quad (46)$$

zu erhalten. N_{total} stellt somit die gesamte Anzahl desorbierter Atome dar. N_{probe} ist dabei die maximale Anzahl der Atome im Teststrahl und V_{probe} das Strahlvolumen nach Gleichung 13. $n_{probe} = \frac{N_{probe}}{V_{probe}}$ ist die Volumendichte im Teststrahl. $\rho = \frac{N_{total}}{(8\mu\text{m})^2}$ ist die Oberflächendichte auf der Desorptionsfläche. Der Photon-Atom Streuquerschnitt σ des zwei Niveau Systems 5 wurde zu

$$\sigma = 2.7080 \cdot 10^{-15} \text{m}^2 \quad (47)$$

berechnet.

7 Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit sollte die Transmissionsfunktion des atomaren Übergangs $|5P_{3/2}, F = 4 \rangle \rightarrow |5S_{1/2}, F = 3 \rangle$ in Rubidium, gemessen mittels zeitaufgelöster Spektroskopie, erklärt und reproduziert werden. Zu diesem Zweck wurde eine Simulation in MATLAB implementiert und Desorptionsmodelle einer ein,- zwei,- und dreidimensionalen Dampfzelle entwickelt.

Die aus zeitaufgelösten Transmissionsmessungen gewonnene zeitabhängige ODs konnten erst unter der Annahme einer unrealistisch hohen Adsorptionsenergie durch Simulation angenähert werden (Abbildung 27), andernfalls fielen die Kurven viel zu schnell ab. Die Adsorptionsenergie betrug 35.1 meV, was 90% der gesamten kinetischen Energie der desorbierenden Atome entspricht. Die den Atomen verbliebene Energie würde gerade mal der Energie eines idealen Gases bei einer Temperatur von ca. 45 Grad Kelvin entsprechen. Im Vergleich dazu wurden von T. Kawalec et al. kinetische Energien der vom einfachen Glas desorbierenden Cäsiumatomen zu ca. 40 ± 2 meV gemessen [13]. Das entspricht der thermischen Energie eines Idealen Gases bei ungefähr $200^\circ C$. Für die größte gemessene Zellenlänge fiel außerdem die durch die Simulation reproduzierte OD für große Zeiten viel zu schnell ab. Es kann also insgesamt weder eine Aussage über die Verteilungsfunktion, noch über das Oberflächenpotential gemacht werden.

Das Verändern der Abstrahlcharakteristik brachte ebenso keine eindeutigen Ergebnisse. In Abbildung 27 sind ODs mit räumlichem Desorptionsverhalten $\sim \cos \Theta$ ($n=1$) und $\sim \sqrt{\cos \Theta}$ ($n=0.5$) dargestellt. Während für die kleinste Zellenlänge die Messwerte für $n=0.5$ minimal besser getroffen wurden, zeigte die Simulation für die größte Zellenlänge eine Verschlechterung der simulierten OD für kleine Zeiten.

Zuletzt erlaubte die Simulation Aussagen über Atomzahlen, Volumendichten und Oberflächendichten für verschiedene Zellenlängen (Tabelle 1). Die berechneten Werte sollen eher als Größenordnungen, und nicht als exakte Zahlen betrachtet werden. Dabei konnte die Gesamtzahl der Atome auf $\sim 10^5$, die Volumendichte im Teststrahl auf $\sim 10^{20} \frac{1}{\text{m}^3}$ und die Oberflächendichte auf der Desorptionsoberfläche auf $\sim 10^{15} \frac{1}{\text{m}^2}$ geschätzt werden.

Zusammenfassend konnten weder Aussagen über die Verteilungsfunktion, noch über die Abstrahlcharakteristik, oder über die Größenordnung des Oberflächenpotentials gemacht werden. Offen bleibt außerdem die Frage nach der Verteilung der Desorptionsdefekte auf der Zellenwand. Die Abschätzung der Anzahl sich in der Zelle befindenden Atome scheint zumindest realistisch zu sein. Die wichtigsten Fragen dieser Arbeit bleiben jedoch immer noch offen. In Zukunft ist zu klären, was der Grund für das Versagen dieses Modells ist. Ein Grund könnte die falsch gewählte Verteilungsfunktion sein, ein anderer ist womöglich eine viel zu stark vereinfachte Betrachtungsweise des Problems. Womöglich braucht die Erklärung der Transmissionsfunktion sogar eine von Grund auf neue Theorie.

8 Quellen

- [1] J.C. Maxwell, Phil. Trans. 170 (1879) 231.
- [2] M. Knudsen, Ann. d. Physik, Das Cosinusgesetz in der kin. Gastheorie, 1915
- [3] P. Clausius, Ann. d. Physik, Über das Kosinusgesetz der Zurückwerfung als Folge des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik, 1930
- [4] P. Clausius, Handelingen von het XXI Nederlandsch Natuuren Geneeskundig Congress S. 113. 1927; Over den verblijftijd van moleculen en de strooming van zeer verdunde gassen. Diss. Leiden, Hoofdstuk II. 1928 (vgl. Phys. Ber. 9. S. 1676. 1928).
- [5] A. E. Dabiri, T. J. Lee, R. E. Stickney, Spatial and speed distributions of H_2 and D_2 desorbed from a polycrystalline Nickel Surface, Surface Science 26 (1971) 522-544
- [6] C. Eibl, A. Winkler, Angular and energy distributions of D_2 molecules desorbing from sulfur and oxygen modified V(111) surfaces, Journal of chemical Physics, Volume 117, Number 2, 8 July 2002
- [7] G. Comsa, R. David, Dynamical Parameters of Desorbing Molecules, Surface Science Reports 5 (1985) 145-198
- [8] Wolfgang Demtröder, Experimentalphysik 1; Mechanik und Wärme (6. Aufl. 2013), Kap. 7, S.192
- [9] Thomas Baluktsian, Herstellung und Untersuchung mikrostrukturierter Rubidium-Spektroskopiezellen, Diplomarbeit
- [10] A. Gozzini, F. Mango, J.H. Xu, G. Alzetta, F. Maccarone and R.A. Bernheim, Nuovo Cimento 15D (1993) 709
- [11] M. Meucci, E. Mariotti, P. Bicchi, C. Marinelle und L. Moi, Europhys. Lett., (25) (9), pp. 639-643 (1994)
- [12] A. Burchianti et al., Phys. Scr. T135 (2009) 014012 (5pp)
- [13] T. Kawalec et al., Chemical Physics Letters 420 (2006) 291-295
- [14] Light-induced atomic desorption for loading a sodium magneto-optical trap, Gustavo Telles, Tetsuya Ishikawa, Matthew Gibbs, and Chandra Raman, Phys. Rev. A 81, 032710 – Published 31 March 2010