

**Fakultät für Physik und Astronomie
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg**

Bachelorarbeit in Physik
vorgelegt von

Christoph Bogda

14. Februar 2012

Simulation zweier ultrakalter wechselwirkender
Lithiumatome in einer eindimensionalen optischen
Dipolfalle

Die Bachelorarbeit wurde ausgeführt am
MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR KERNPHYSIK
IN
HEIDELBERG
unter der Betreuung von
Herrn Dr. Thomas Pfeifer

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden numerische Methoden zur Lösung des Problems von zwei ultrakalten korrelierten fermionischen ${}^6\text{Li}$ Atomen in einer eindimensionalen optischen Dipolfalle vorgestellt. Das zugrundeliegende quantenmechanische Modell beinhaltet die, für ultrakalte Gase typische Näherung der Wechselwirkung als eine Punktwechselwirkung und die exakte, aus dem Experiment bekannte, Form des Fallenpotentials. Mittels dieser Methoden, bei denen das Lösen der zeitabhängigen Schrödingergleichung eine zentrale Rolle spielt, konnte das charakteristische Energiespektrum in Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke und die signifikanten Eigenzustände bestimmt werden. Anhand dieser Ergebnisse konnten typische Eigenschaften eines Übergangs, den man Fermionisation nennt beobachtet und Vergleichswerte bestimmt werden. Außerdem wurden aktuelle Tunnelexperimente simuliert, womit die Fermionisation nachgewiesen werden kann. Dazu wurde die Zerfallscharakteristik der zuvor präparierten Zweiteilchen-Zustände im Fallenpotential mit Potentialbarriere untersucht.

Abstract

In this work numerical methods for solving the problem of two ultracold correlated fermionic ${}^6\text{Li}$ atoms in a one-dimensional optical dipole trap are described. The underlying quantum mechanical model contains the typical approximation of a pointlike interaction for ultracold gases and the exact shape of the trap potential, which is known from the experiment. Using these methods, in which solving the time-dependent Schrödinger equation plays a central role, it was possible to obtain the characteristic energy spectrum dependent on the interaction strength and the significant eigenstates. On the basis of these results typical features of a transition called “Fermionization“ have been observed and reference values could be determined. In addition latest tunneling experiments were simulated, which are used to prove the Fermionization. For this purpose the decay characteristics of the prepared two-particle states in the trap potential with a potential barrier were observed.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Theoretische Grundlagen und experimentelle Methoden	3
1.1 Eindimensionales Fallenpotential und Präparation des Mehrteilchen- Grundzustands	3
1.2 Wechselwirkung zweier ultrakalter Atome im Fallenpotential . . .	5
1.3 Analytische Behandlung zweier ultrakalter Atome in einem Fallen- potential	7
1.4 Tunneln zweier ultrakalter Atome aus der asymmetrischen Falle .	11
2 Grundlagen und Methoden für die numerischen Rechnungen	13
2.1 Modell für die numerische Rechnung	13
2.2 Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit der Split- Step Methode	15
2.3 Methoden zur Berechnung der Eigenzustände	17
2.4 Simulation der Tunnelexperimente	24
3 Ergebnisse der Computereperimente	27
3.1 Zustände und Energien	27
3.1.1 Symmetrisches Fallenpotential	27
3.1.2 Asymmetrisches Fallenpotential	29
3.2 Tunnelexperimente	32
Schlussfolgerung und Ausblick	37
Literaturverzeichnis	39

Einleitung

Stark korrelierte Mehrteilchen-Quantensysteme lassen sich bis heute mit analytischen Methoden nicht berechnen. Die Behandlung von Systemen mit mehr als zwei korrelierten Konstituenten wird schnell sehr kompliziert. Das Verständnis solcher Systeme ist aber von großer Bedeutung, da sie die fundamentalen Bausteine der Materie, wie Atome oder Kerne beschreiben. Die Eigenschaften solcher natürlichen Systeme lassen sich aber nur bedingt manipulieren. Deshalb werden sogenannte Quantensimulatoren gebaut, um die Möglichkeit zu haben, bestimmte Systemeigenschaften, wie die Teilchenzahl oder die Wechselwirkungsstärke gezielt zu kontrollieren. Ein typisches Beispiel für solche Quantensimulatoren sind die sogenannten Quantenpunkte; kontrollierbare Nanostrukturen in Festkörpern, in denen Teilchen bzw. Quasiteilchen wie Elektronen oder Löcher räumlich stark gebunden sind und deshalb kontrollierbare diskrete Energieniveaus besetzen. Solche Systeme sind aber immer noch stark von ihrer Umgebung abhängig, weshalb die Energieniveaus nicht sehr gut definiert sind. Deshalb kommen beispielsweise ultrakalte Gase zum Einsatz, da diese sich sehr gut isolieren und kontrollieren lassen.

In dem Experiment, welches in dieser Arbeit simuliert wurde (siehe [Ser11] und [Zür11]), wird ein ultrakaltes fermionisches ${}^6\text{Li}$ Gas verwendet, dessen zwei sogenannte Pseudospinzustände gezielt kontrolliert werden können. Dieses Gas wird mit einem eindimensionalen Dipolfallenpotential überlagert, welches durch einen stark fokussierten Laserstrahl erzeugt wird, womit die Atome diskrete Energieniveaus besetzen können. Durch die fermionische Natur der Atome lässt sich bei hinreichend tiefen Temperaturen von weniger als 250 nK die Teilchenzahl äußerst genau kontrollieren. Außerdem hat man die Kontrolle über die Wechselwirkungsstärke und die Vibrationsenergielevel der Falle. Um die Eigenschaften solcher Quantensimulatoren zu testen und bestimmte Systemparameter zu quantifizieren wird im Experiment das einfachste korrelierte Mehrteilchen-System untersucht, das es gibt, das Zweiteilchen-System. Dieses System hat den Vorteil, dass sich noch exakte analytische Lösungen finden lassen, mit denen verglichen werden kann (siehe dazu beispielsweise [Tho98]).

In dieser Arbeit wird das Problem des korrelierten Zweiteilchen-Systems in jeweils einer Raumdimension, mittels des aus den Experimenten gut bekannten Poten-

tials, genau nachgestellt. Es werden numerische Methoden vorgestellt, mit denen dann die Lösungen für die relevanten Zustände des realen Experiments bestimmt werden. Die Charakteristik dieser Zustände wird mit den bekannten analytischen Lösungen verglichen. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf dem Phänomen der Fermionisation. Außerdem wird ein spezielles Tunnelexperiment nachgestellt, bei dem über Tunnelraten von Atomen, die aus der Falle tunneln, Rückschlüsse auf die jeweiligen Quantenzustände in der Falle gezogen werden (siehe [Zür11]).

In der Arbeit werden fast ausschließlich atomare Einheiten (a.u.) verwendet. Es ist also $e = \hbar = m_e = a_0 = 1$. An manchen Stellen werden diese in SI-Einheiten umgerechnet zum Vergleich mit den experimentellen Werten. Dabei handelt es sich um bestimmte Zeit- bzw. Frequenzwerte. Einer atomaren Zeiteinheit entsprechen 24,188 as (atto: 10^{-18}). An einer Stelle ist ein Wert für die magnetische Flussdichte in der Einheit G (Gauß) angegeben. Einem G entsprechen $10^{-4} T$.

Kapitel 1

Theoretische Grundlagen und experimentelle Methoden

1.1 Eindimensionales Fallenpotential und Präparation des Mehrteilchen-Grundzustands

Im Experiment wird ein ultrakaltes ${}^6\text{Li}$ Gas verwendet, das in den Hyperfeinstrukturzuständen $|F = 1/2, m_F = +1/2\rangle$ und $|F = 1/2, m_F = -1/2\rangle$ vorkommt. Aufgrund des halbzahligen Gesamtdrehimpuls (Quantenzahl F) der einzelnen Atome, handelt es sich um Fermionen. Da maximal zwei Fermionen (zwei unterschiedliche F_z Zustände) einen Energieeigenzustand des Einteilchen-Problems besetzen können, ist der Mehrteilchen-Grundzustand am absoluten Nullpunkt gerade der, bei dem die untersten Energieniveaus bis zur maximalen Teilchenenergie E_F (Fermienergie) zweifach besetzt sind. Es gibt also einen eindeutigen Zusammenhang zwischen E_F und der Teilchenzahl N . Um so mit größtmöglicher Sicherheit die Teilchenzahl N kontrollieren zu können, arbeitet man mit einem ultrakalten Gas. Je kälter das Gas, desto wahrscheinlicher ist die Besetzung des Mehrteilchen-Grundzustands. Genaueres zur experimentellen Methode wird in [Ser11] erklärt. Dieses ultrakalte Gas wird mit einer optischen Dipolfalle überlagert, deren Form sehr gut als Einteilchen-Potential beschrieben werden kann, welches für jedes Atom unabhängig vom Anderen gültig ist.

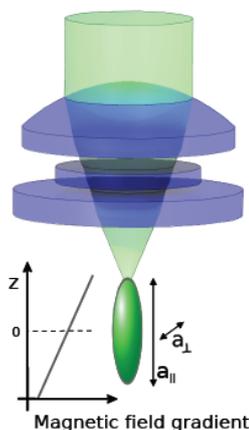


Abbildung 1.1: Um die z -Achse radialsymmetrisches zigarrenförmiges Einteilchen-Fallenpotential. Die Parameter a_{\parallel} und a_{\perp} bezeichnen die räumliche Ausdehnung der Falle parallel und transversal zur z -Achse. Die Abbildung ist entnommen aus [Zür11].

Aufgrund der stark in z -Richtung gestreckten Form des Potentials, befindet sich das System in Transversalrichtung in einem stark gebundenen Grundzustand, weshalb sich die Dynamik in der Falle vollkommen auf **eine Dimension in z -Richtung** beschränken lässt. Das zugehörige Potential hat die Form

$$V(z) = pV_0 \left(1 - \frac{1}{1 + (z/z_r)^2}\right) \quad (1.1)$$

Das Produkt pV_0 beschreibt die optische Falltiefe, welche durch den dimensionslosen Parameter p , der Werte zwischen 0 und 1 annimmt, geändert werden kann. Der Parameter z_r gibt effektiv die räumliche Ausdehnung der Falle in z -Richtung wieder (z_r ist nicht identisch mit a_{\parallel} aus Abbildung 1.1).

Nun kann dieses Fallenpotential modifiziert werden, indem man einen Magnetfeldgradienten in z -Richtung B' erzeugt. Das magnetische Moment des Atoms μ_m wechselwirkt mit diesem und es gibt einen Zeeman-Effekt, der linear von z abhängt.

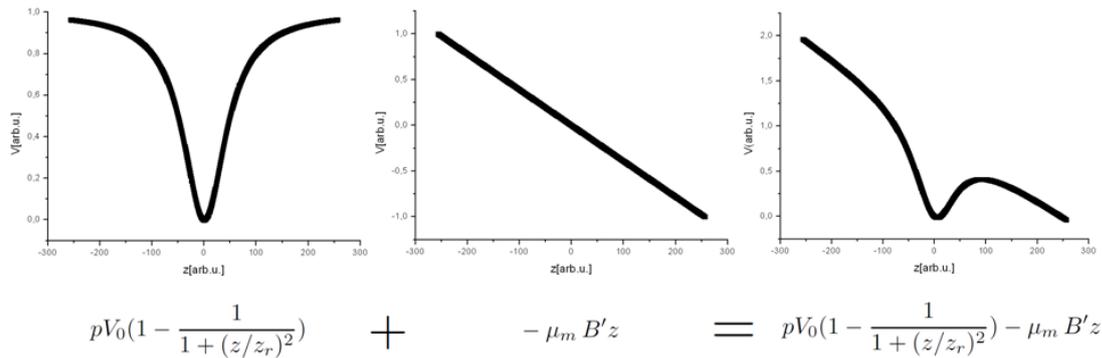


Abbildung 1.2: Darstellung der Überlagerung des symmetrischen Fallenpotentials mit einem linearen Potential, welches aus der magnetischen Wechselwirkung des Atoms mit einem externen Magnetfeldgradienten B' resultiert.

Es entsteht also eine Potentialbarriere, deren Höhe vom Parameter p abhängig ist. Die Höhe dieser Barriere bestimmt auch, wie viele Einteilchen-Quantenzustände und damit, wie viele Atome in der Falle gebunden sind. Bildlich gesprochen werden durch Einschalten des Gradienten B' bei einer bestimmten Barrierehöhe, alle Atome, deren Energie über dem Maximum der Barriere liegen, ‐ausgeleert‐. Durch diese Methode lässt sich die Teilchenzahl N in der Falle sehr gut kontrollieren (in unserem Fall $N=2$). Dieser Vorgang wird auch in [Ser11] genauer beschrieben.

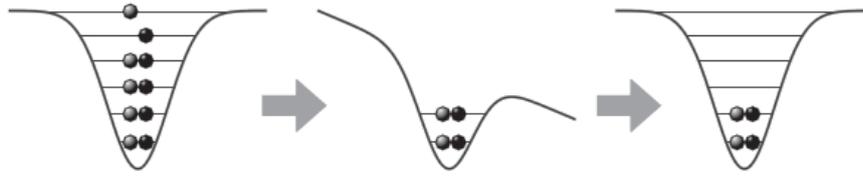


Abbildung 1.3: Schematische Darstellung des ‘‘Ausleervorgangs‘‘ der Falle, bei dem ein beliebiger Mehrteilchen-Zustand präpariert wird. Die Abbildung ist entnommen aus [Ser11].

1.2 Wechselwirkung zweier ultrakalter Atome im Fallenpotential

Die Wechselwirkung neutraler ultrakalter Atome untereinander lässt sich durch eine punkthafte Wechselwirkung beschreiben, da deren De-Broglie-Wellenlänge viel größer ist als der räumliche Bereich der Wechselwirkung. Die genaue Form des Wechselwirkungspotentials spielt dann keine Rolle mehr ([Tho98]). Sie kann deshalb wie folgt durch ein sogenanntes Pseudopotential genähert werden

$$V_{int}(z_1, z_2) = g\delta(z_1 - z_2) \quad (1.2)$$

$\delta(z_1 - z_2)$ ist die Deltafunktion in einer Dimension, die von der Relativkoordinate $r = z_1 - z_2$ der Atome abhängt. g bezeichnet die Kopplungskonstante, deren Betrag die Stärke der Wechselwirkung und das Vorzeichen die Art der Wechselwirkung beschreibt. Hat sie ein negatives Vorzeichen, ist die Wechselwirkung attraktiv. Hat sie ein positives Vorzeichen, ist sie repulsiv.

Auch wenn das Problem mit dem Ansatz 1.2 eindimensional behandelt werden kann, hängt g selbst jedoch stark von dreidimensionalen Größen ab. Denn tatsächlich wird die Atom-Atom Wechselwirkung im Experiment durch ein äußeres homogenes Magnetfeld B verändert. Die Wechselwirkung in diesem Magnetfeld sorgt für das Auftreten einer sogenannten Feshbach Resonanz, welche das dreidimensionale Streupotential der Atome, abhängig von B , stark beeinflusst (siehe [Mor06]). Der Zusammenhang zwischen dem Magnetfeld B und der dreidimensionalen Streulänge a_{3D} , welche die Wechselwirkung im herkömmlichen Sinne beschreibt, ist bekannt ([Mor06]).

In der Streutheorie kann man den Streuprozess aber auch durch die Streuphase θ beschreiben. Diese Streuphase beschreibt die Phasenverschiebung der am Streupotential gestreuten Partialwelle¹ zur ungestreuten.

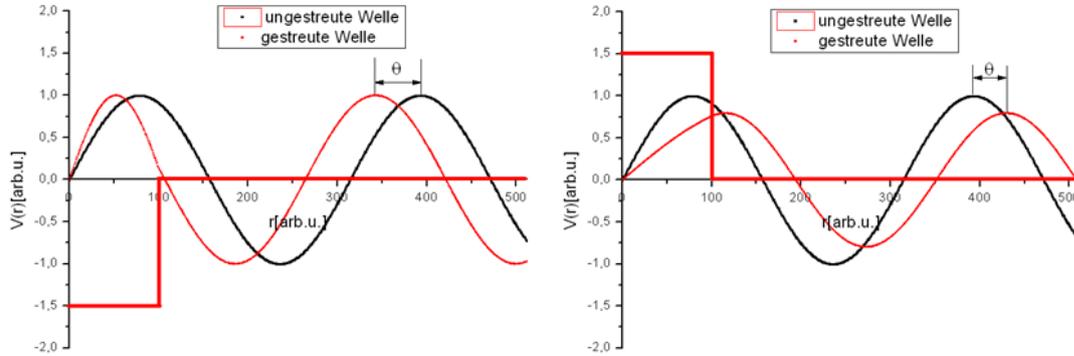


Abbildung 1.4: Bildliche Darstellung der Phasenverschiebung einer Partialwelle durch Streuung an einem kastenförmigen Streupotential (zur besseren Anschauung in einer Dimension). Man erkennt, dass θ für ein repulsives Potential positiv ist (Bild rechts) und für ein attraktives Potential negativ (Bild links).

Durch diese Betrachtungsweise lässt sich im Dreidimensionalen für ein bestimmtes Streupotential ein Zusammenhang zwischen der Streuphase θ und der Streulänge a_{3D} finden. In einer oder zwei Dimensionen macht der herkömmliche Begriff der Streulänge keinen Sinn mehr, der Begriff der Streuphase jedoch immer noch. Vergleicht man die Relation zwischen θ und der eindimensionalen Kopplungskonstante g mit der von θ und a_{3D} erhält man die Beziehung zwischen g und a_{3D} . Die Streulänge a_{3D} ist vom Magnetfeld B abhängig und der Zusammenhang ist bekannt. Somit erhält man schließlich die wichtige Abhängigkeit von g und dem Magnetfeld B .

¹Partialwellen sind Eigenfunktionen des quadrierten Drehimpulsoperators mit der Quantenzahl $l(l+1)$. Die allgemeine Lösung für die Wellenfunktion im Streupotential wird zerlegt in Partialwellen, da beispielsweise für ultrakalte Gase (wie es hier der Fall ist) nur geringe Drehimpulse beitragen. Man berücksichtigt nur s-Wellenstreuung ($l=0$). Zur grundlegenden Streutheorie siehe auch [Sch05].

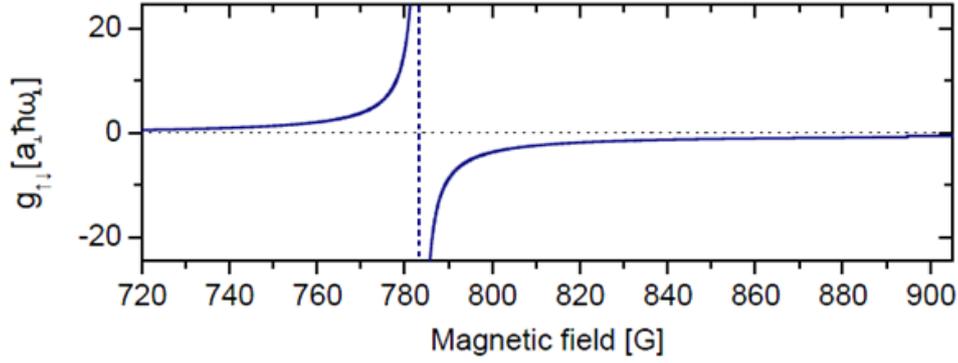


Abbildung 1.5: Zusammenhang der eindimensionalen Kopplungskonstante g und dem äußeren Magnetfeld B für das zigarrenförmige Fallenpotential (siehe Abbildung 1.1). Man erkennt die Resonanz bei $B \approx 783 \text{ G}$. g ist in Einheiten der Fallenparameter in Transversalrichtung angegeben². Im Experiment wird B durch den gesamten Bereich gefahren, womit g fast beliebige Werte zwischen $-\infty$ und ∞ annimmt. Die Abbildung ist entnommen aus [Zür11].

1.3 Analytische Behandlung zweier ultrakalter Atome in einem Fallenpotential

Ausgangspunkt für die theoretische Behandlung ist die stationäre Zweiteilchen-Schrödingergleichung in einer Raumdimension mit dem Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{1}{2m_{Atom}} \hat{p}_i^2 + V(\hat{z}_i) \right] + V_{int}(\hat{z}_1 - \hat{z}_2) \quad (1.3)$$

\hat{p}_i bezeichnet den Impulsoperator und \hat{z}_i den Ortsoperator für die jeweilige Teilchenkoordinate z_i in einer Dimension. Für $V(\hat{z}_i)$ benutzt man die **harmonische Näherung** des Fallenpotentials (in unserem Fall wäre das die harmonische Näherung von 1.1). $V_{int}(\hat{z}_1 - \hat{z}_2)$ beschreibt den wechselwirkenden Teil des Potentials und ist hier gerade der Term aus 1.2. Damit lässt sich der Hamiltonoperator folgendermaßen schreiben

$$\mathcal{H}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{1}{2m_{Atom}} \hat{p}_i^2 + \frac{1}{2} m_{Atom} \omega^2 \hat{z}_i^2 \right] + g \delta(\hat{z}_1 - \hat{z}_2) \quad (1.4)$$

ω ist die Oszillatorfrequenz der harmonischen Näherung des Fallenpotentials. Nun führt man eine Koordinatentransformation durch, indem man die Relativkoordi-

²Da das Fallenpotential in Transversalrichtung stark bindend ist, beeinflusst die Form der Falle in dieser Richtung die Kopplungskonstante g ausschlaggebend ([Zür11]). g hat die Dimension *Energie · Länge*. $\hbar \omega_{\perp}$ ist der konstante Abstand der Energielevels des Transversalpotentials in der harmonischen Näherung (siehe nächstes Unterkapitel). a_{\perp} ist die Ausdehnung der Falle in Transversalrichtung, welche selbst von ω_{\perp} abhängt.

nate $r = z_1 - z_2$ und die Schwerpunktskoordinate $R = \frac{1}{2}(z_1 + z_2)$ einführt. Aufgrund der Harmonizität des Potentials lässt sich durch diese Transformation der Hamiltonoperator separieren.

$$\mathcal{H}(\hat{R}, \hat{r}) = \left(\frac{1}{2M} \hat{p}_R^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 \hat{R}^2 \right) + \left(\frac{1}{2\mu} \hat{p}_r^2 + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \hat{r}^2 + g \delta(\hat{r}) \right) \quad (1.5)$$

$$\Rightarrow \mathcal{H}(\hat{R}, \hat{r}) = \mathcal{H}_R(\hat{R}) + \mathcal{H}_r(\hat{r}) \quad (1.6)$$

M ist die Gesamtmasse $M = 2m_{Atom}$ und μ die reduzierte Masse $\mu = \frac{m_{Atom}}{2}$. Wegen der Separation lassen sich die Eigenzustände der Schrödingergleichung mit $\mathcal{H}(\hat{R}, \hat{r})$ als ein Produkt von Eigenzuständen des Problems mit Hamiltonoperator der Schwerpunktskoordinate $\mathcal{H}_R(\hat{R})$ und denen des Problems mit Hamiltonian der Relativkoordinate $\mathcal{H}_r(\hat{r})$ schreiben.

$$\Psi(R, r) = \Psi_R(R) \Psi_r(r) \quad (1.7)$$

Man erkennt an Gleichung 1.5, dass $\mathcal{H}_R(\hat{R})$ exakt dem Problem des harmonischen Oszillators entspricht, was für $\mathcal{H}_r(\hat{r})$ nur bei verschwindender Wechselwirkung ($g = 0$) gilt. Das heißt im Allgemeinen entsprechen die Eigenzustände von $\mathcal{H}_R(\hat{R})$ den Lösungen des eindimensionalen harmonischen Oszillators $\Phi_n(R)$ mit der Quantenzahl n und sind von der Wechselwirkung g unabhängig. Damit folgt für die gesamte Lösung $\Psi(R, r)$

$$\Psi(R, r) = \Phi_n(R) \Psi_r(r) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.8)$$

$\Phi_n(R)$ bewirkt im Gesamtspektrum deshalb nur eine konstante Verschiebung, die von der Schwerpunktsanregung n abhängt und von der Wechselwirkung g unabhängig ist.

$$E_{ges} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \omega + E_r(g) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.9)$$

Im Experiment gibt es keine Schwerpunktsanregungen, weshalb n identisch 0 ist. Interessant sind also die Lösungen für die Relativbewegung $\mathcal{H}_r(\hat{r})$ (1.5).

Experimentell kann der Spinzustand jedes Atoms, welches sich in der Falle befindet, genau festgelegt werden. Damit ergeben sich folgende Möglichkeiten für die Spinwellenfunktion $\chi(s_1, s_2)$ ³.

³ s_1 und s_2 bezeichnen jeweils die Spins der Atome. Diese entsprechen hier natürlich der Quantenzahl m_F der z-Komponente des Gesamtdrehimpuls. In diesem Experiment ist deshalb $s_1 = +/ - \frac{1}{2}$ und $s_2 = +/ - \frac{1}{2}$ (siehe Anfang Abschnitt 1.1)

$$\chi(s_1, s_2) = |\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle \quad (1.10)$$

Nun unterscheidet man zwei Fälle. Der eine Fall ist der, dass die zwei Atome ununterscheidbar sind. Dies ist der Fall, wenn die Spinwellenfunktion $\chi(s_1, s_2)$ entweder $|\uparrow\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\downarrow\rangle$ ist. Für ununterscheidbare Fermionen muss die Gesamtwellenfunktion $\Psi_{ges} = \Psi(z_1, z_2)\chi(s_1, s_2)$ ungerade Austauschsymmetrie haben. Es muss gelten

$$\Psi(z_1, z_2)\chi(s_1, s_2) = -\Psi(z_2, z_1)\chi(s_2, s_1) \quad (1.11)$$

Da $|\uparrow\uparrow\rangle$ oder $|\downarrow\downarrow\rangle$ beide gerade Austauschsymmetrie haben, muss $\Psi(z_1, z_2)$ antisymmetrisch bezüglich Teilchenaustausch sein. Für identische Teilchen ist die Austauschsymmetrie bezüglich der Koordinaten z_1 und z_2 gleichbedeutend mit der Raumspiegelungssymmetrie (Parität) bezüglich der Relativkoordinate r . Bei ungerader Austauschsymmetrie muss $\Psi_r(r)$ demnach negative Parität haben.

$$\Psi_r(r) = -\Psi_r(-r) \quad (1.12)$$

Daraus resultiert eine verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit, dass sich beide Atome am gleichen Ort befinden, denn $\Psi_r(r = 0) = 0$. Somit spielt die Wechselwirkung g , die ja nur für kurze Distanzen $r \rightarrow 0$ relevant ist, keine Rolle. Deshalb kann $g = 0$ angenommen werden.

Mit dieser Einschränkung sind die Lösungen trivial. Denn sowohl $\mathcal{H}_R(\hat{R})$, als auch $\mathcal{H}_r(\hat{r})$ entsprechen dem Hamiltonian des harmonischen Oszillators (siehe 1.5), womit $\Psi(R, r)$ einfach eine Produktfunktion zweier Lösungen des eindimensionalen Oszillators ist.

$$\Psi(R, r) = \Phi_n(R)\Phi_{n'}(r) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (n' = 1, 3, 5, \dots) \quad (1.13)$$

n' ist ungerade, wegen der Forderung der Asymmetrie von $\Psi_r(r)$. Damit entsprechen die Energieeigenwerte der Relativbewegung, unabhängig von g , denen des harmonischen Oszillators, genau wie bei der Schwerpunktsbewegung (1.9).

$$E_r = (n' + \frac{1}{2})\omega \quad (n' = 1, 3, 5, \dots) \quad (1.14)$$

Bei diesem speziellen nichtwechselwirkenden Fall sind beide Atome wegen ihren identischen z -Komponenten des Spins ununterscheidbar und können als Fermionen deshalb nur unterschiedliche Einteilchen-Zustände besetzen. Ein solches System von zwei fermionischen Atomen mit antisymmetrischer Relativwellenfunktion

$\Psi_r(r)$ wird als **fermionartig** bezeichnet.

Im Gegensatz dazu steht der eigentlich interessante Fall, dass $\chi(s_1, s_2)$ entweder $|\uparrow\downarrow\rangle$ oder $|\downarrow\uparrow\rangle$ ist. Die zwei Atome sind jetzt unterscheidbar. Deshalb muss die Gesamtwellenfunktion Ψ keine bestimmte Austauschsymmetrie haben. Die Lösungen für $\Psi_r(r)$ mit positiver Parität sind nun relevant. $\Psi_r(r=0)$ und damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeit, dass beide Atome am gleichen Ort sind kann nun einen von 0 verschiedenen Wert haben und die Wechselwirkung g muss deshalb berücksichtigt werden. Die zwei unterscheidbaren Atome können im nichtwechselwirkenden Fall ($g = 0$) beide das gleiche Einteilchen-Energielevel besetzen, was der Eigenschaft von zwei Bosonen entspricht. Deshalb wird das System von zwei fermionischen Atomen mit symmetrischer Relativwellenfunktion $\Psi_r(r)$ als **bosonartig** bezeichnet. Dies sind auch die Zustände, die in dieser Arbeit von Interesse sind.

Die Lösungen für diesen Fall können analytisch gefunden werden. Die Herleitung wird beispielsweise in [Tho98] beschrieben. Das Spektrum der Relativenergie E_r hängt nun von der Wechselwirkung g ab.

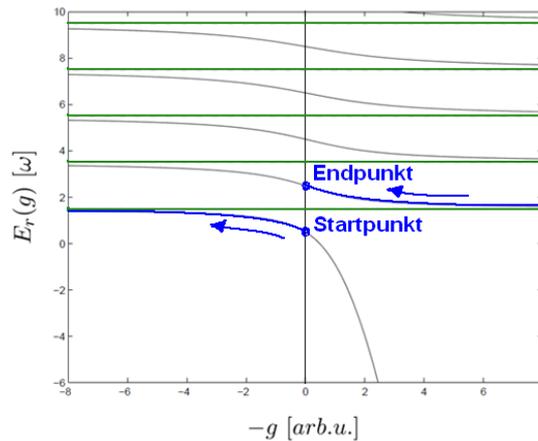


Abbildung 1.6: Abbildung des Multispektrums der Relativenergie $E_r(g)$, sowohl für ein fermionartiges Gas (dunkelgrün), als auch für ein bosonartiges Gas (grau). Bei $g = 0$ erkennt man das Spektrum des harmonischen Oszillators mit den konstanten Energieabständen ω , wobei das fermionartige Gas nur Zustände mit ungeradem n' besetzen kann. In Blau ist der Bereich dargestellt, der indirekt durch die Änderung des Magnetfeldes (siehe Abbildung 1.5) durchgeföhrt wird. Es wurde die Abbildung aus [Tho98] verwendet und bearbeitet.

Im Plot ist gut zu erkennen, dass im asymptotischen Grenzfall $g \rightarrow \infty$ oder bei den angeregten Zuständen auch $g \rightarrow -\infty$ die Eigenenergien für den bosonartigen

Fall mit repulsiver und attraktiver Wechselwirkung und die des fermionartigen Falls ineinander übergehen. Im Experiment startet man vom nichtwechselwirkenden bosonartigen Grundzustand und nähert sich diesem Grenzfall nicht nur an, sondern überschreitet ihn (siehe blauer Bereich in Abbildung 1.6). Es findet also tatsächlich ein Übergang statt. Dies kann theoretisch nachvollzogen werden, denn an diesem Übergangspunkt sind die Energien für die bosonartigen Fälle und den fermionartigen Fall identisch. Aufgrund dessen muss in einer Dimension auch die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(R, r)|^2$ identisch sein ([Gir60]). Diesen Übergang bezeichnet man deshalb als **Fermionisation**.

1.4 Tunneln zweier ultrakalter Atome aus der asymmetrischen Falle

Tunneln kann ein Atom dann, wenn es eine Potentialbarriere endlicher Höhe und Breite gibt, deren Maximum größer ist als die Atomenergie. Diese Voraussetzungen sind für die gebundenen Zustände im asymmetrischen Fallenpotential (siehe Abschnitt 1.1 Abbildung 1.2) gegeben. Je höher die Potentialbarriere, desto geringer ist bekanntlich die Tunnelwahrscheinlichkeit der Atome. Das Tunneln der Atome lässt sich mit dem Zerfallsgesetz beschreiben.

$$\overline{N(t')} = N_{\text{tunnel}} e^{-\frac{t'}{\tau}} + N_{\text{übrig}} \quad (1.15)$$

$\overline{N(t')}$ beschreibt die mittlere Anzahl an Atomen, die nach einer bestimmten Tunnelndauer t' noch in der Falle sind. N_{tunnel} ist die Anzahl an Atomen, welche gleichzeitig bei einem einzigen Prozess tunneln und ist deshalb entweder 1 oder 2 (dazu später genaueres). $N_{\text{übrig}}$ ist demnach die Anzahl an Atomen, die nach einem Tunnelprozess noch in der Falle sind. Da in unserem Fall am Anfang genau zwei Atome in der Falle sind folgt

$$N_{\text{übrig}} = 2 - N_{\text{tunnel}} \quad (1.16)$$

Zur Bestimmung der mittleren Zerfallsdauer τ wird somit die Teilchenzahl $N(0, 1$ oder $2)$ in Abhängigkeit von der Tunnelzeit t' gemessen und über eine Vielzahl an Messungen gemittelt (Mittelwert $\overline{N(t')}$). Wie in Abschnitt 1.1 erwähnt, kann man die Barrierehöhe kontrollieren. Damit wird das Fallenpotential so eingestellt, dass die Zerfallsdauer τ für die präparierten Fallenzustände in einem adäquaten Bereich liegt.

Im theoretischen Modell für den Tunnelprozess wird das asymmetrische Fallen-

potential in drei Bereiche aufgeteilt.

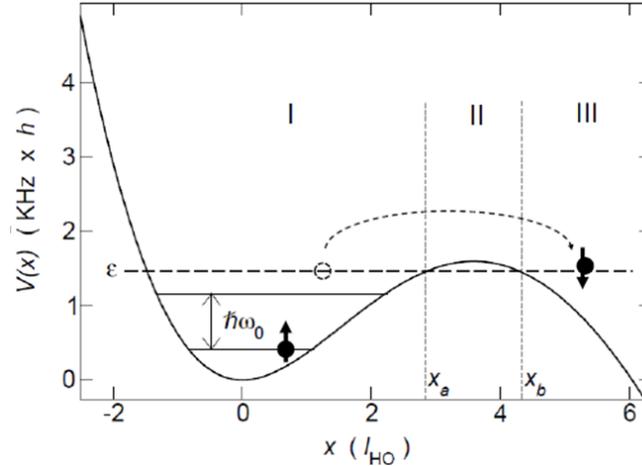


Abbildung 1.7: Abbildung des Prozesses, bei dem eins der zwei Atome aus der asymmetrischen Falle tunnelt. $\hbar\omega_0$ bezeichnet den Energieabstand der Energielevel in der harmonischen Näherung des Potentials in Bereich I (Die Einheiten sind hier nicht in *a.u.* angegeben. Deshalb entspricht $\hbar\omega_0$ hier dem ω im übrigen Text). $l_{HO} = \hbar/(m_{Atom}\omega_0)$ beschreibt die Fallenausdehnung. Die Abbildung wurde entnommen aus [Ron11]

Es wird angenommen, dass sich das System zum Zeitpunkt $t' = 0$ in einem Zweiteilchen-Eigenzustand des Fallpotentials im Bereich I befindet. Es handelt sich um einen Zustand, wie in Abschnitt 1.3 beschrieben. Beim Tunneln eines Atoms geht dieser Zustand über in einen unkorrelierten Zustand (Atome sind zu weit voneinander entfernt, um miteinander wechselwirken zu können). Dieser Endzustand ist dadurch charakterisiert, dass sich das, in der Falle zurückgebliebene Atom in einem Einteilchen-Fallenzustand im Bereich I und das getunnelte Atom in einem freien Kontinuumszustand im Bereich III befindet. Es wird also von einem Einfachtunnelvorgang ausgegangen. Die Tunneldynamik wird im Bereich II untersucht. Eine Methode für die theoretische Behandlung wird in [Ron11] vorgestellt.

Die mittlere Zerfallsdauer τ hängt in einer Dimension nur von der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(R, r)|^2$ des Zweiteilchen-Anfangszustand ab. Wie in Abschnitt 1.3 angedeutet, gibt es auch einen eindeutigen Zusammenhang zwischen der Fallenergie E_{ges} und $|\Psi(R, r)|^2$. Den Fallenzuständen mit identischer Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(R, r)|^2$ kann also eine eindeutige mittlere Zerfallszeit τ zugeordnet werden. Das bedeutet τ muss für die, am Fermionisationspunkt ineinander übergehenden Zustände identisch sein.

Kapitel 2

Grundlagen und Methoden für die numerischen Rechnungen

2.1 Modell für die numerische Rechnung

Ausgangspunkt für die numerische Rechnung ist der Zweiteilchen-Hamiltonoperator für das symmetrische (“ungekippte“) bzw. asymmetrische (“gekippte“) Fallenpotential, wie es in Kapitel 1 beschrieben ist inklusive Wechselwirkung.

$$\mathcal{H}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{1}{2m_{Atom}} \hat{p}_i^2 + V(\hat{z}_i) \right] + g\delta(\hat{z}_1 - \hat{z}_2) \quad \text{bzw.} \quad (2.1)$$

$$\mathcal{H}(\hat{z}_1, \hat{z}_2) = \sum_{i=1}^2 \left[\frac{1}{2m_{Atom}} \hat{p}_i^2 + V(\hat{z}_i) - \mu_m B' \hat{z}_i \right] + g\delta(\hat{z}_1 - \hat{z}_2) \quad (2.2)$$

Die Rechnung findet auf einem quadratischen Rechengitter statt, wobei die horizontale Achse die Teilchenkoordinate z_1 und die vertikale Achse die Teilchenkoordinate z_2 beschreibt. Während dieser Arbeit wurde für die meisten Rechnungen ein Rechengitter von 256×256 Pixeln benutzt und später für die Tunnelexperimente eines mit 512×512 Pixeln. Als Schrittweite Δz für die Ortskoordinate wurde für alle Rechnungen ein Wert von 1000 a.u. gewählt. Somit hat das gesamte Rechengitter eine Größe von umgerechnet $14 \times 14 \mu m$ bzw. $27 \times 27 \mu m$. Je größer die Pixelzahl, desto länger dauert die Rechnung. Dafür ist mit größerer Pixelzahl bei fest gewähltem Ortsbereich, der notwendig ist um die relevanten Phänomene zu untersuchen, der Ortsschritt Δz kleiner, was eine bessere Auflösung bedeutet. Diese Wahl der Gitterparameter hat sich als passend für das Problem herausgestellt.

Das Wechselwirkungspotential $g\delta(r)$ ($r = z_1 - z_2$) kann aufgrund des Charakters der Deltafunktion natürlich nicht exakt simuliert werden. Deshalb benutzt man für die Simulation in naheliegender Weise ein Kastenpotential mit der Breite d und der Höhe V . Für d , welches den räumlichen Bereich der Wechselwirkung

angibt, wurde der kleinstmögliche Wert verwendet um dem Charakter der Deltafunktion so nahe wie möglich zu kommen. Das bedeutet, man setzt das Wechselwirkungspotential $V_{int}(z_1, z_2)$ bei allen Werten mit der Bedingung $z_1 = z_2$ ($r = 0$, Diagonale des Rechengitters) auf den variablen Wert V und ansonsten auf 0. Damit entspricht d immer gerade der Auflösung des Rechengitters Δz und die Wechselwirkung wird über V kontrolliert. Um die numerischen Parameter V und d sinnvoll mit g vergleichen zu können, wurde folgender Ansatz gewählt, bei dem man das Integral des theoretischen Wechselwirkungspotentials betrachtet.

$$\int_{-\infty}^{\infty} V_{int}(r) dr = \int_{-\infty}^{\infty} g\delta(r) dr = g \quad (2.3)$$

Dieses vergleicht man mit dem Integral über das, in der Rechnung verwendete, Kastenpotential.

$$\int_{-\infty}^{\infty} V_{int.num.}(r) dr = \int_{-d/2}^{d/2} V dr = V \cdot d \quad (2.4)$$

Damit gilt der Vergleich

$$g = V \cdot d \quad (2.5)$$

Da V proportional zu g ist, kann man die asymptotischen Grenzfälle $g \rightarrow \infty$ oder $g \rightarrow -\infty$ nicht erreichen, was aber auch nicht nötig ist, da die Energie und damit die Wellenfunktion konvergiert (siehe Energiespektrum 1.6), so dass der Unterschied zu diesen Grenzfällen vernachlässigbar ist. In der Simulation wurde ein Minimalwert $V_{min} = -2 \cdot 10^{-10} a.u.$ und ein Maximalwert $V_{max} = 2 \cdot 10^{-10} a.u.$ festgelegt. Diese Werte haben sich während der Arbeit als ausreichend erwiesen um die Grenzfälle darzustellen.

Die Approximation mit dem Kastenpotential ist umso schlechter, desto kleiner der Betrag der Wechselwirkung g ist, da $|V|$ dann die Größenordnung von d erreicht. Dann wird der Charakter der Deltafunktion durch den Kasten schlecht genähert. Auf der anderen Seite spielt (wie in 1.1 erklärt) die exakte Form des Potentials wegen der großen De-Broglie-Wellenlänge keine Rolle. Deshalb war es bei der Wahl der Gitterparameter auch ein Kriterium, den Ortsschritt Δz nicht zu groß zu wählen, damit die Annahme der punktförmigen Wechselwirkung gerechtfertigt bleibt.

Das gesamte Zweiteilchen-Potential mit Wechselwirkung ist im folgenden 2-D Plot dargestellt.

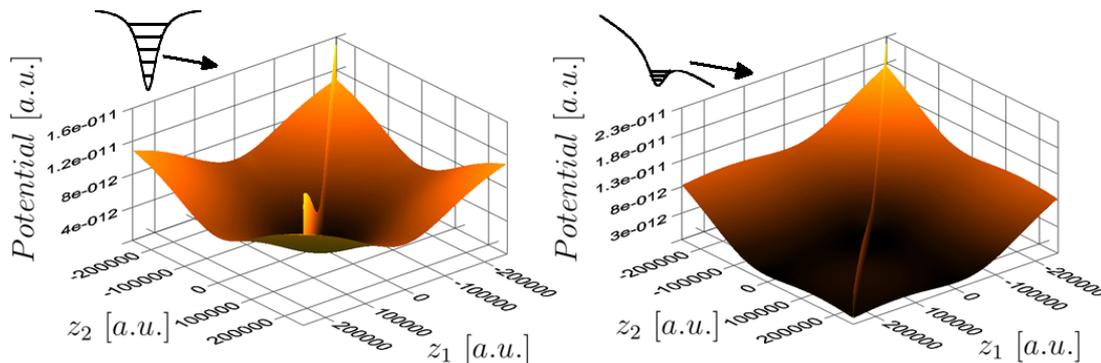


Abbildung 2.1: Die 2 Plots zeigen die numerisch berechneten Potentiale mit Wechselwirkung in Abhängigkeit der beiden Teilchenkoordinaten z_1 und z_2 auf einem Rechengitter von 512×512 Pixeln und Ortsschrittweite $\Delta z = 1000$ a.u.. Links ist das symmetrische und rechts das asymmetrische Potential dargestellt. Zur Anschauung wurde hier eine positive Wechselwirkung von $V = 5 \cdot 10^{-12}$ a.u. gewählt (Diagonale im Rechengitter). Da hier Parameter verwendet wurden, wie sie auch im Experiment vorkommen, ist die Potentialbarriere im rechten Plot kaum zu erkennen

2.2 Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung mit der Split-Step Methode

Die numerische Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung ist die Grundlage für die meisten numerischen Rechnungen in dieser Arbeit. Sie beschreibt die Dynamik eines Systems, also die zeitliche Änderung eines Zustandes. Deshalb sind deren Lösungen notwendig für alle zeitaufgelösten Computereperimente, die gemacht wurden, wie beispielsweise die Simulation der Tunnelexperimente. Der folgende Abschnitt wurde sehr eng an Kapitel [3.1] und [3.2] in [Din11] angelehnt, wo die Methode auch etwas genauer beschrieben wird.

Für das Zweiteilchen-Problem sieht die zeitabhängige Schrödingergleichung wie folgt aus

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t, z_1, z_2)\rangle = \mathcal{H}(t, \hat{z}_1, \hat{z}_2) |\Psi(t, z_1, z_2)\rangle \quad (2.6)$$

Eine analytische Lösung bietet folgender Ansatz

$$\begin{aligned} |\Psi(t, z_1, z_2)\rangle &= e^{-i \int_{t_0}^t \mathcal{H}(t', \hat{z}_1, \hat{z}_2) dt'} |\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle \\ &= e^{-i \int_{t_0}^t (\mathcal{H}_z + \mathcal{H}_p) dt'} |\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle \end{aligned} \quad (2.7)$$

Ist der Anfangszustand $|\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle$ (Zeitpunkt $t = 0$) bekannt, erhält man demnach durch die Anwendung des sogenannten Zeitentwicklungsoperators $\hat{U}(t, t_0) = e^{-i \int_{t_0}^t \mathcal{H}(t', \hat{z}_1, \hat{z}_2) dt'}$ die Lösung zu einem beliebigen Zeitpunkt t .

Grundlage für die **Split-Step Methode** ist die, in Gleichung 2.7 schon angegebene, Aufspaltung des Hamiltonoperators in einen Teil \mathcal{H}_z , der nur von den Ortsoperatoren \hat{z}_i abhängt und einen Teil \mathcal{H}_p (in unserem Fall nur der kinetische Anteil), der allein von den jeweiligen Impulsoperatoren \hat{p}_i abhängt. Nun legt man einen Zeitschritt Δt fest, der klein genug ist, dass \mathcal{H}_z und \mathcal{H}_p während dieses Schrittes als zeitlich konstant angenommen werden können. Damit kann der Zeitentwicklungsoperator für einen Zeitschritt wie folgt genähert werden.

$$\hat{U}(t_0 + \Delta t, t_0) = e^{-i \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t} (\mathcal{H}_z + \mathcal{H}_p) dt'} \approx e^{-i(\mathcal{H}_z + \mathcal{H}_p) \Delta t} \quad (2.8)$$

Also kann der Zustand zu einem Zeitpunkt $t = N \cdot \Delta t$ durch schrittweises Anwenden dieses genäherten Zeitentwicklungsoperators für den Zeitschritt Δt und den jeweiligen Zeitpunkt t_k in N Schritten berechnet werden. Es gilt demnach

$$\hat{U}(t, t_0) = \prod_{k=0}^{N-1} \hat{U}(t_k + \Delta t, t_k) = \prod_{k=0}^{N-1} e^{-i(\mathcal{H}_z + \mathcal{H}_p)_k \Delta t} \quad (2.9)$$

Die Operatoren \mathcal{H}_z und \mathcal{H}_p sind in Ortsraumdarstellung bzw. Impulsraumdarstellung diagonal und wirken in der jeweiligen Darstellung als Funktion der Orts- bzw. Impulskoordinaten einfach multiplikativ und nicht als Differentialoperator. Deshalb möchte man den Zustand gerne in der, für den jeweiligen Operator günstigen, Basisdarstellung entwickeln. Dazu macht man folgende Aufspaltung.

$$e^{-i(\mathcal{H}_z + \mathcal{H}_p)_k \Delta t} \approx e^{-i(\mathcal{H}_p)_k \Delta t} e^{-i(\mathcal{H}_z)_k \Delta t} \quad (2.10)$$

In dieser Näherung kann in jedem Zeitschritt t_k zunächst der Zustand im Ortsraum mit \mathcal{H}_z multiplikativ entwickelt werden. Dann kann der neue Zustand durch eine Fouriertransformation \mathcal{F} in die Impulsraumdarstellung transformiert werden und entsprechend im Impulsraum mit \mathcal{H}_p auch multiplikativ entwickelt werden. Danach wird der Zustand mittels der umgekehrten Fouriertransformation \mathcal{F}^{-1} wieder in den Ortsraum zurücktransformiert. Damit folgt für die Zeitentwicklung

über einen Zeitschritt mit der Split-Step Methode

$$|\Psi(z_1, z_2, t_k + \Delta t)\rangle = \mathcal{F}^{-1} e^{-i(\mathcal{H}_p)_k \Delta t} \mathcal{F} e^{-i(\mathcal{H}_z)_k \Delta t} |\Psi(z_1, z_2, t_k)\rangle \quad (2.11)$$

Bei dieser separierten Zeitentwicklung macht man einen Fehler, der unter anderem von dem Zeitschritt Δt abhängt. Je größer Δt ist, desto größer ist die, durch die Zeitpropagation bedingte Phasenänderung des Zustands, womit der Ausgangszustand für die jeweilige Teilentwicklung verfälscht wird.

2.3 Methoden zur Berechnung der Eigenzustände

Zunächst sei darauf hingewiesen, dass für die Simulation immer das exakte Potential verwendet wurde. Das heißt, die Vergleichbarkeit mit der analytischen Lösung (Abschnitt 1.3), welche die harmonische Näherung verwendet, ist beschränkt. Je höher die Energie der relevanten Zustände, desto schlechter ist die harmonische Näherung.

Am Anfang dieser Arbeit wurde als Methode zur Berechnung der Grundzustände für verschiedene Wechselwirkungen g die Methode der sogenannten **Imaginärzeitentwicklung** verwendet. Mit dieser Methode ist es möglich, ausgehend von einem zufälligen beliebigen Anfangszustand $|\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle$ mit passender Austauschsymmetrie, den Grundzustand des Systems zu erhalten. Mit dessen Kenntnis kann man dann auch den 1. angeregten Zustand mit der gleichen Methode ausrechnen. So kann man theoretisch iterativ vom Grundzustand ausgehend alle beliebig angeregten Zustände bestimmen (Die Methode wird in [Din11] erläutert). Der Nachteil dieser Methode ist, dass die jeweiligen Zustände mit einer bestimmten Energie eindeutig bestimmt sein müssen. Die Zustände dürfen also energetisch nicht entartet sein.

Ziel dieser Arbeit war es den gesamten Bereich zu simulieren, der im Experiment durchgefahen wird (siehe Abbildung 1.6). Da aber in der Simulation der Fermionisationsübergang, wie in 2.1 erklärt, nicht erreicht werden kann, müssen die Zustände oberhalb dieses Übergangs als angeregte Zustände für ein bestimmtes g berechnet werden. Es handelt sich aber um angeregte Zustände der Relativkoordinatenwellenfunktion $\Psi_r(r)$ im analytischen Modell. In der Simulation werden aber Lösungen für die Gesamtwellenfunktion $\Psi(R, r)$ betrachtet. Wie in der theoretischen Behandlung 1.3 beschrieben spielen für die Gesamtlösung noch die Schwerpunktsanregungen eine Rolle.

$$\Psi_n(R) \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (2.12)$$

Diese bewirken eine, von g unabhängige, Verschiebung der Energie, welche in der harmonischen Näherung wie folgt aussieht

$$\Delta E_{ges} = n \cdot \omega \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (2.13)$$

Diese Verschiebung bewirkt, dass es für bestimmte Gesamtenergien E_{ges} Entartungen gibt.

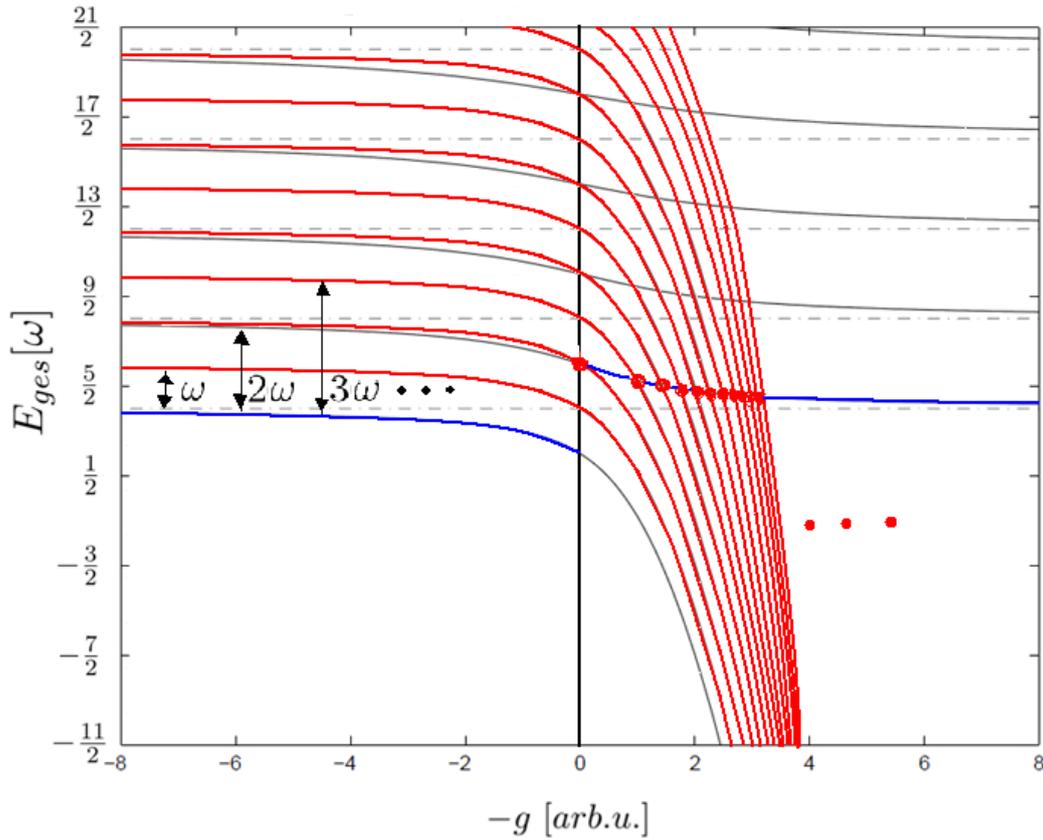


Abbildung 2.2: Die Abbildung zeigt das analytische Multispektrum der Gesamtenergie für das bosonartige Gas. In Blau ist wie in Abbildung 1.6 der relevante Messbereich markiert. Die roten Kurven zeigen am Beispiel der Grundzustandskurve die Energien der Zustände, die aus Schwerpunktsanregungen resultieren. Die Entartungen im relevanten Bereich sind mit roten Punkten markiert. Die Abbildung wurde aus [Tho98] entnommen und bearbeitet.

Durch diese Abbildung wird deutlich, dass sich die Imaginärzeitentwicklung nicht dazu eignet, die angeregten Zustände der Relativenergie (blauer Bereich rechts von der 0-Achse) zu berechnen. Denn erstens gibt es für $-g > 0$ sehr viele Zustände durch Schwerpunktsanregungen, welche energetisch zwischen dem Grund-

zustand und dem ersten angeregten Zustand der Relativenergie liegen. Deshalb müssten sehr viele Zustände berechnet werden, bis man am richtigen Level angekommen ist. Zweitens gibt es offensichtlich enorm viele Entartungen durch Schwerpunktsanregungen in diesem Bereich, was bei dieser Methode nicht sein darf. Deshalb wurde die Methode verwendet, um Lösungen im Bereich unter dem ‘‘Sprung‘‘ am Fermionisationspunkt (blauer Bereich links von der 0-Achse), wo diese Probleme nicht auftreten, zu finden.

Um die relevanten angeregten Zustände zu ermitteln galt es sicher zu stellen, dass die Schwerpunktsanregungen keine Rolle mehr spielen und nur noch die Anregungen der Relativbewegung vorkommen. Dazu wurde eine ganz andere Methode zur Bestimmung der Zustände entwickelt:

Vorraussetzung für diese Methode ist es zunächst das Energiespektrum des Systems zu kennen. Dazu wird die **zeitaufgelöste Fourieranalyse** verwendet. Dabei benutzt man, dass sich die Zeitentwicklung eines beliebigen Zustands in einem System folgendermaßen schreiben lässt

$$|\Psi(t_k, z_1, z_2)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{N}} c_n e^{-iE_n t_k} |\Psi_n(z_1, z_2)\rangle \quad (2.14)$$

$|\Psi_n(z_1, z_2)\rangle$ sind die Eigenzustände des Systems und E_n die zugehörigen Energien. c_n sind die jeweiligen Entwicklungskoeffizienten des Zustands $|\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle$ zum Anfangszeitpunkt t_0 . t_k ist die Diskretisierung der Zeit t (analog zu Abschnitt 2.2). Es treten also die Eigenenergien als Schwingungsfrequenzen auf. Nun vollführt man eine Fouriertransformation von der Zeitdarstellung mit Koordinate t in die Frequenzdarstellung mit Koordinate ω , welche in atomaren Einheiten identisch mit der Energie E ist und erhält somit das Spektrum mit den Eigenenergien E_n . Die zugehörigen Fourierkoeffizienten (Amplitude im Spektrum) a_n lauten dann

$$a_n = c_n |\Psi_n(z_1, z_2)\rangle \quad (2.15)$$

Die Intensitätsverteilung im Spektrum hängt also von den Teilchenkoordinaten (z_1, z_2) und von c_n , dem Anteil der jeweiligen Eigenzustände am Anfangszustand $|\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle$, ab. Ziel war es deshalb nun einen geeigneten Anfangszustand und geeignete Koordinaten (z_1, z_2) für die Spektralanalyse zu finden.

Bei der Wahl des Zustands war natürlich das Hauptkriterium, dass möglichst wenig Anteile von Zuständen mit angeregten Schwerpunktsbewegungen enthalten sind, aber auch möglichst viele Anteile von solchen mit angeregten Relativbewe-

gungen.

Deshalb wurde ein Anfangszustand $|\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle$ gewählt, welcher ungefähr einem Produktzustand aus der Grundzustandswellenfunktion der Schwerpunktskoordinate $\Psi_0(R)$ und einer stark in Relativrichtung ausgedehnten Wellenfunktion der Relativkoordinate $\Psi'(r)$ entspricht.

$$|\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle = |\Psi(t_0, R, r)\rangle = \Psi_0(R)\Psi'(r) \quad (2.16)$$

$\Psi_0(R)$ konnte aus dem, schon zuvor mittels Imaginärzeitentwicklung bestimmten Grundzustand $|\Psi_0(z_1, z_2)\rangle$ bzw. $|\Psi_0(R, r)\rangle$ bei $g = 0$ extrahiert werden. Dabei geht man in Anlehnung an die analytische Behandlung (Abschnitt 1.3) davon aus, dass sich dieser Zustand folgendermaßen als Produktzustand schreiben lässt

$$|\Psi_0(R, r)\rangle = \Psi_0(R)\Psi_0(r) \quad (2.17)$$

$\Psi_0(R)$ bzw. $\Psi_0(r)$ entsprechen in der harmonischen Näherung beide gerade dem Grundzustand des eindimensionalen harmonischen Oszillators, der einer Gaußfunktion entspricht. Aus dem normierten Grundzustand $|\Psi_0(R, r)\rangle$ erhält man $\Psi_0(R)$ dann durch Integration (Summation) über die Koordinate r im gesamten Bereich.

$$\Psi_0(R) = \sum_{r=z_1-z_2} \Psi_0(R)\Psi_0(r) = \sum_{r=z_1-z_2} |\Psi_0(R, r)\rangle \quad (2.18)$$

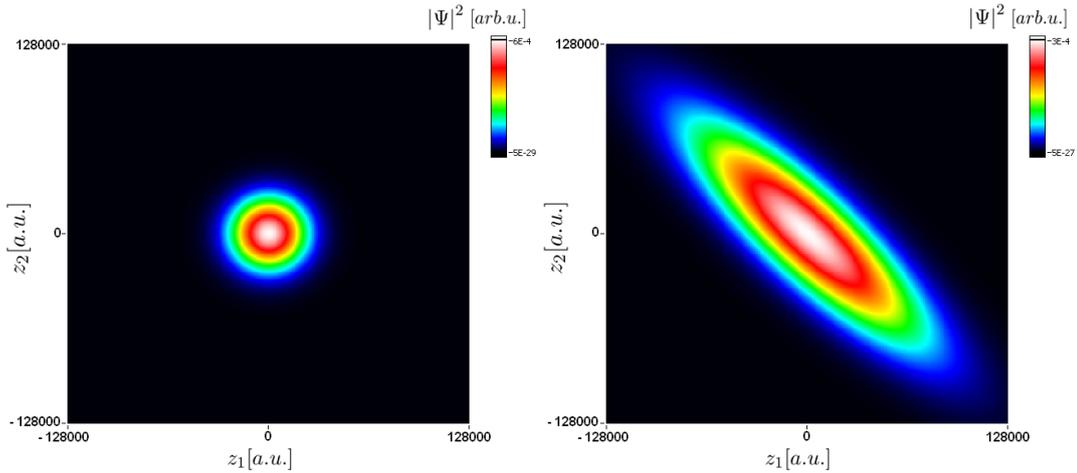


Abbildung 2.3: Diese Abbildung zeigt den Grundzustand $|\Psi_0(z_1, z_2)\rangle$ bei $g = 0$ (Bild links) und den künstlich stark in Relativrichtung ausgedehnten Produktzustand $|\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle$. Die Menge aller Werte mit einem bestimmten $R = \frac{1}{2}(z_1 + z_2)$ entsprechen der Projektion aller Werte auf die Diagonale $z_1 = z_2$ und alle Werte mit einem bestimmten $r = (z_1 - z_2)$ entsprechen der Projektion auf die Diagonale $z_1 = -z_2$ des Rechengitters.

Durch den Vergleich beider Wellenfunktionen erkennt man, dass die Breite der gaußähnlichen Funktion in Schwerpunktsrichtung bei beiden Funktionen gleich ist. Die Breite in Relativrichtung wurde jedoch bei $|\Psi(t_0, z_1, z_2)\rangle$ viel größer als beim Grundzustand gewählt, so dass möglichst viele Anregungen in dieser Richtung enthalten sind.

Als Koordinaten für die Analyse wurde der Punkt $(z_1, z_2) = (0, 0)$ gewählt, da an dort alle beliebig angeregten Zustände mit gerader Austauschsymmetrie (bosonartige Zustände) eine nicht verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit haben, ausgenommen die Punkte der Fermionisation, welche wir aber in unserem Simulationsbereich ohnehin nicht erreichen. Um die Resonanzen im Spektrum zu unterscheiden ist eine bestimmte Auflösung $\Delta\omega$ notwendig. Bei der diskreten Fourieranalyse hängt die Auflösung im Frequenzraum (Energieraum) wie folgt mit dem Zeitschritt Δt und der Schrittzahl N zusammen

$$\Delta\omega = \frac{2\pi}{N\Delta t} \quad (2.19)$$

Um eine notwendige Auflösung $\Delta\omega$ zu gewährleisten kann man demnach entweder den Zeitschritt Δt oder die Schrittzahl N größer wählen. Δt darf aber (wie in Abschnitt 2.2 erklärt) nicht zu groß gewählt werden. Deshalb ist eine bestimmte Schrittzahl N erforderlich, um die nötige Auflösung $\Delta\omega$ zu erreichen. In dieser Arbeit wurde eine Schrittzahl von $N = 40000$ und ein Zeitschritt von

$\Delta t = 2 \cdot 10^{-10}$ a.u. verwendet.

Mit Kenntnis der jeweiligen Eigenenergien E_n kann man nun, ausgehend von dem selben Anfangszustand, der auch zur Spektralanalyse verwendet wurde (siehe Abbildung 2.3 rechtes Bild), die Eigenzustände des Systems bestimmen. Dazu wird im Prinzip nochmals eine zeitaufgelöste Fourieranalyse dieses Zustands gemacht. Aber dieses Mal werden keine bestimmten Koordinaten ausgewählt, sondern die gesamte ortsabhängige Intensitätsverteilung an dem Punkt der nun bekannten Eigenenergie $E_{n'}$ ausgewertet. $E_{n'}$ bezeichnet die Eigenenergie zu dem gesuchten Eigenzustand $|\Psi_{n'}(z_1, z_2)\rangle$. Durch diese ortsabhängige Analyse ist der zugehörige Eigenzustand, bis auf einen Normierungsfaktor schon gegeben (siehe Gleichung 2.15). Im Folgenden wird aber nochmals eine genaue Herleitung präsentiert, die auch die numerische Vorgehensweise verdeutlicht.

Die ortsabhängige Fourieranalyse lautet

$$\mathcal{F}^{-1}(\Psi(t_k, z_1, z_2))(E_{n'}) = \sum_{k=0}^{(N-1)} |\Psi(t_k, z_1, z_2)\rangle e^{iE_{n'}t_k} \quad (2.20)$$

Benutzt man für $|\Psi(t_k, z_1, z_2)\rangle$ die Zeitentwicklung aus 2.14, so folgt

$$\sum_{k=0}^{(N-1)} |\Psi(t_k, z_1, z_2)\rangle e^{iE_{n'}t_k} = \sum_{k=0}^{(N-1)} \sum_{n \in \mathbb{N}} [c_n e^{-iE_n t_k} |\Psi_n(z_1, z_2)\rangle] e^{iE_{n'}t_k} \quad (2.21)$$

$$= \sum_{n \in \mathbb{N}} [c_n |\Psi_n(z_1, z_2)\rangle] \sum_{k=0}^{(N-1)} [e^{-i(E_n - E_{n'})t_k}] \quad (2.22)$$

Die Summe $\sum_{k=0}^{(N-1)} [e^{-i(E_n - E_{n'})t_k}]$ entspricht im Grenzfall des Integrals ($N \rightarrow \infty$) gerade dem Kronecker-Delta $\delta_{n'n}$. Daraus folgt schließlich

$$\mathcal{F}^{-1}(\Psi(t_k, z_1, z_2))(E_{n'}) \approx \sum_{n \in \mathbb{N}} [c_n |\Psi_n(z_1, z_2)\rangle] \delta_{n'n} \quad (2.23)$$

$$= c_{n'} |\Psi_{n'}(z_1, z_2)\rangle \quad (2.24)$$

Normiert man dieses Ergebnis erhält man am Ende also den gewünschten Zustand $|\Psi_{n'}(z_1, z_2)\rangle$ zur Eigenenergie $E_{n'}$. Der Zustand ist umso besser präpariert, desto kleiner der Zeitschritt Δt und desto größer die Schrittzahl N ist. Beide Größen wurden gleich zur vorherigen Fourieranalyse gewählt. Die obige Analyse gilt natürlich nur, wenn $|\Psi_{n'}(z_1, z_2)\rangle$ eindeutig, also nicht energetisch entartet ist. Da

der Anfangszustand aber so gewählt wurde, dass möglichst keine Schwerpunktsanregungen vorkommen und deshalb die Entartungen stark unterdrückt sind (vergleiche mit Abbildung 2.2), handelt es sich bei den numerischen Ergebnissen um die fast eindeutigen Eigenzustände mit Anregungen der Relativbewegung.

2.4 Simulation der Tunnelexperimente

Bei der Simulation der Tunnelexperimente wurde versucht, die experimentelle Vorgehensweise genau nachzustellen:

Die Ausgangssituation im Experiment ist der präparierte Eigenzustand des asymmetrischen Fallenpotentials (siehe Abbildung 2.1 rechts) mit Fallentiefeparameter $p = 0.795$ für eine bestimmte Wechselwirkung g .

Der Parameter p wird dann für eine bestimmte Tunnelzeit t' auf einen vorbestimmten Wert von $p = 0.6875$ abgesenkt, womit die Barrierehöhe niedriger wird. Dieses Absenken geschieht mit einer linearen zeitlichen Änderung von $dp/dt = 0.043 \text{ ms}^{-1}$. Durch diese langsame Änderung hat der Zustand immer genügend "Zeit" sich der neuen Situation anzupassen. Man spricht von einer sogenannten **adiabatischen Änderung**. Dabei passt sich der Zustand während der Änderung des Systems immer dem jeweils neuen Eigenzustand an. Dieser entspricht deshalb bei Erreichen des unteren Wertes für p dem jeweiligen Eigenzustand des geänderten Systems. Nach der gewünschten Tunneldauer t' wird die Barrierehöhe auf umgekehrte Weise wieder auf den Ausgangswert zurückgestellt. Im realen Experiment wird dann bestimmt, wie viele Atome im Mittel über eine Vielzahl an Messungen in der Falle geblieben sind um mit dem Zerfallsgesetz 1.16 die Zerfallsdauer τ zu bestimmen. Die experimentelle Vorgehensweise ist auch in [Zür11] beschrieben.

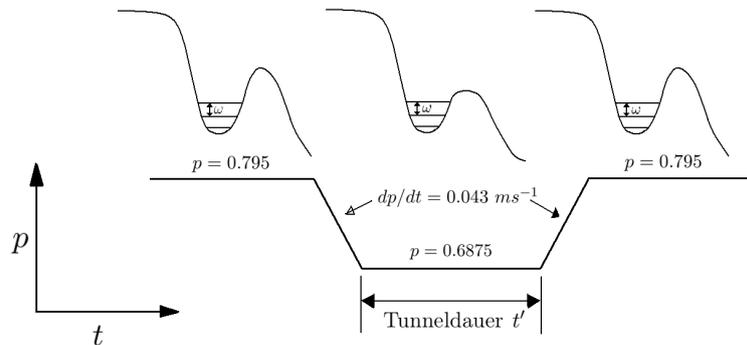


Abbildung 2.4

Das Hoch- und Runterfahren von p wird in der numerischen Zeitpropagation derart realisiert, dass in jedem Zeitschritt der Parameter p des Hamiltonian um $dp/dt \cdot \Delta t$ geändert wird und der Zustand mit diesem Hamiltonian über Δt entwickelt wird.

Da bei den numerischen Rechnungen nur ein endliches Raugitter zur Verfügung steht, würde ohne weitere Maßnahme das Atom, das aus der Falle getunnelt ist

und das Rechengitter auf der einen Seite verlässt, auf der anderen Seite wieder auftauchen. Dies liegt an den periodischen Randbedingungen für die Zweiteilchen-Wellenfunktion. Damit wäre die reale physikalische Situation verfälscht, in der ein getunneltes Atom verschwunden ist und keinen Einfluss mehr hat. Deshalb verwendet man eine künstliche **imaginärwertige Potentialbarriere** am Rand des Rechengitters, welche dafür sorgt, dass die lokale Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = |\Psi_n(t_k, z_1, z_2)|^2$ am Rand des Gitters zerfällt. Diese wird zusätzlich zum Hamiltonoperator als Potential aufaddiert. Es wurde die Potentialbarriere verwendet, welche auch in der Arbeit [Din11] zur Anwendung kam. Deren freie Parameter wurden für dieses Problem neu angepasst, so dass möglichst wenig an der Barriere reflektiert oder transmittiert, also das meiste absorbiert wird.

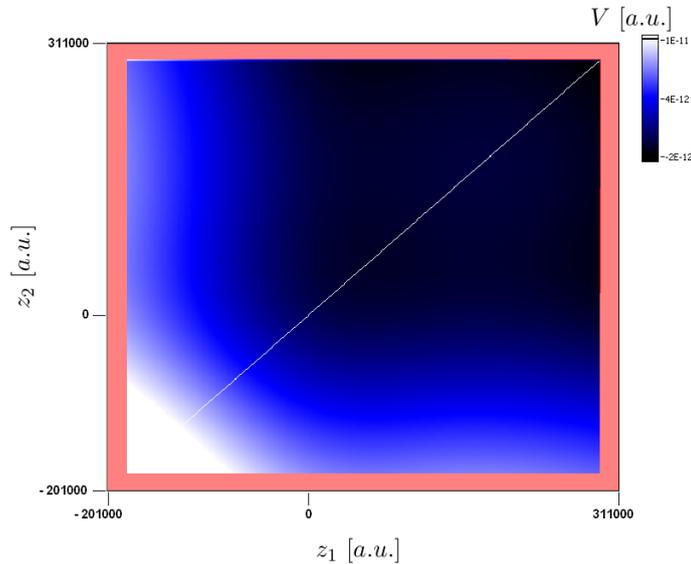


Abbildung 2.5: Darstellung des gesamten Zweiteilchen-Potentials inklusive imaginärwertiger Absorptionsbarriere am Rand, welche zur Differenzierung in Rot dargestellt ist. Zur Veranschaulichung wurde eine positive Wechselwirkung $V \cdot d$ gewählt (Diagonale des Rechengitters).

Die Abnahme der Gesamtwahrscheinlichkeit $\langle \Psi_n(t') | \Psi_n(t') \rangle$ (Quadrat der Norm von $\Psi_n(t')$) bis zur Tunneldauer t' ist eigentlich nicht vergleichbar mit der mittleren Atomanzahl $\overline{N(t')}$ der Atome, welche nach einer bestimmten Zeit noch in der Falle sind. Denn das Abnehmen der Wahrscheinlichkeit $\langle \Psi_n(t_k) | \Psi_n(t_k) \rangle$ einer Zweiteilchen-Wellenfunktion bedeutet, dass mindestens ein Teilchen mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit an der Randbarriere absorbiert wurde, also getunnelt ist. Es ist so aber unmöglich zu unterscheiden, ob eines alleine oder zwei zusammen getunnelt sind. Deshalb wird in der Simulation nicht nur die ge-

samte, durch die Absorption bedingte Abnahme von $\langle \Psi_n(t') | \Psi_n(t') \rangle$ nach einer bestimmten Zeit t' betrachtet. Außerdem wird die orts aufgelöste Absorption im Bereich der Senkrechten und Horizontalen und die im Bereich der Diagonalen ($z_1 = z_2$) des Rechengitters getrennt untersucht. Die Absorption im Bereich der Senkrechten und Horizontalen bedeutet, dass nur ein Atom alleine getunnelt ist, die auf der Diagonalen, dass zwei Atome gleichzeitig getunnelt sind.

Die orts aufgelöste Absorption nach einer bestimmten Tunneldauer t' wird folgendermaßen bestimmt

$$|\Psi_{abs.}(t', z_1, z_2)|^2 = \sum_{k=0}^{k=t'/\Delta t} |\Psi_{abs.}(t_k, z_1, z_2)|^2 \quad (2.25)$$

Es wird also die, über die jeweilige Tunneldauer t' absorbierte Wahrscheinlichkeitsdichte durch Aufsummieren der Wahrscheinlichkeit $|\Psi_{abs.}(t_k, z_1, z_2)|^2$, welche jeweils zum Zeitpunkt $t_k = k \cdot \Delta t$ über den Zeitschritt Δt absorbiert wurde, orts aufgelöst berechnet. Man erhält damit am Ende einen Plot, in dem für die jeweiligen Zweiteilchen-Koordinaten (z_1, z_2) auf dem Rechengitter, die bis zur Tunneldauer t' absorbierte Wahrscheinlichkeit zu erkennen ist. Jetzt kann man das Verhältnis des absorbierten Anteils auf der horizontalen und vertikalen Achse zu dem auf der diagonalen Achse für verschiedene Wechselwirkungen betrachten. Damit kann man Aussagen darüber treffen, ob erwartungsgemäß immer ein Atom alleine tunnelt (siehe Abschnitt 1.4) oder ob es auch einen signifikanten Anteil an gemeinsam tunnelnden Atomen gibt.

In dem Fall, dass einer der Prozesse stark überwiegt, kann man dann über die Absorption der entsprechenden Wahrscheinlichkeit letztendlich doch Rückschlüsse auf die mittlere Atomzahl $\overline{N}(t')$ ziehen. Beispielsweise für den erwarteten Fall, dass der Prozess, dass ein Atom alleine tunnelt stark überwiegt, kann dieser Fall als eindeutig angenommen werden. Die Absorption auf der Horizontalen und Vertikalen beschreibt dann die Wahrscheinlichkeit für diesen näherungsweise eindeutigen Fall. Die Gegenwahrscheinlichkeit

$$\overline{P} = 1 - \sum_{\text{Horizontale+Vertikale}} |\Psi_{abs.}(t', z_1, z_2)|^2 \quad (2.26)$$

beschreibt dann die Wahrscheinlichkeit für den eindeutigen Fall, dass dieses eine Atom nach der Tunneldauer t' noch in der Falle sitzt, ist also direkt vergleichbar mit dem Zerfall der mittleren Atomanzahl $\overline{N}(t')$. Durch Anpassung mit dem Zerfallsgesetz (1.16), kann man theoretisch einen mit dem Experiment vergleichbaren Wert für die Zerfallsdauer τ bestimmen.

Kapitel 3

Ergebnisse der Computerexperimente

3.1 Zustände und Energien

3.1.1 Symmetrisches Fallenpotential

Mit der Methode der Imaginärzeitentwicklung (siehe Abschnitt 2.3) wurden Zustände und Energien für das symmetrische Fallenpotential (Abbildung 2.1 links) mit $p = 0.6575$ im Bereich unter dem Fermionisationsübergang berechnet. Die Simulationsergebnisse sind auf der folgenden Seite dargestellt.

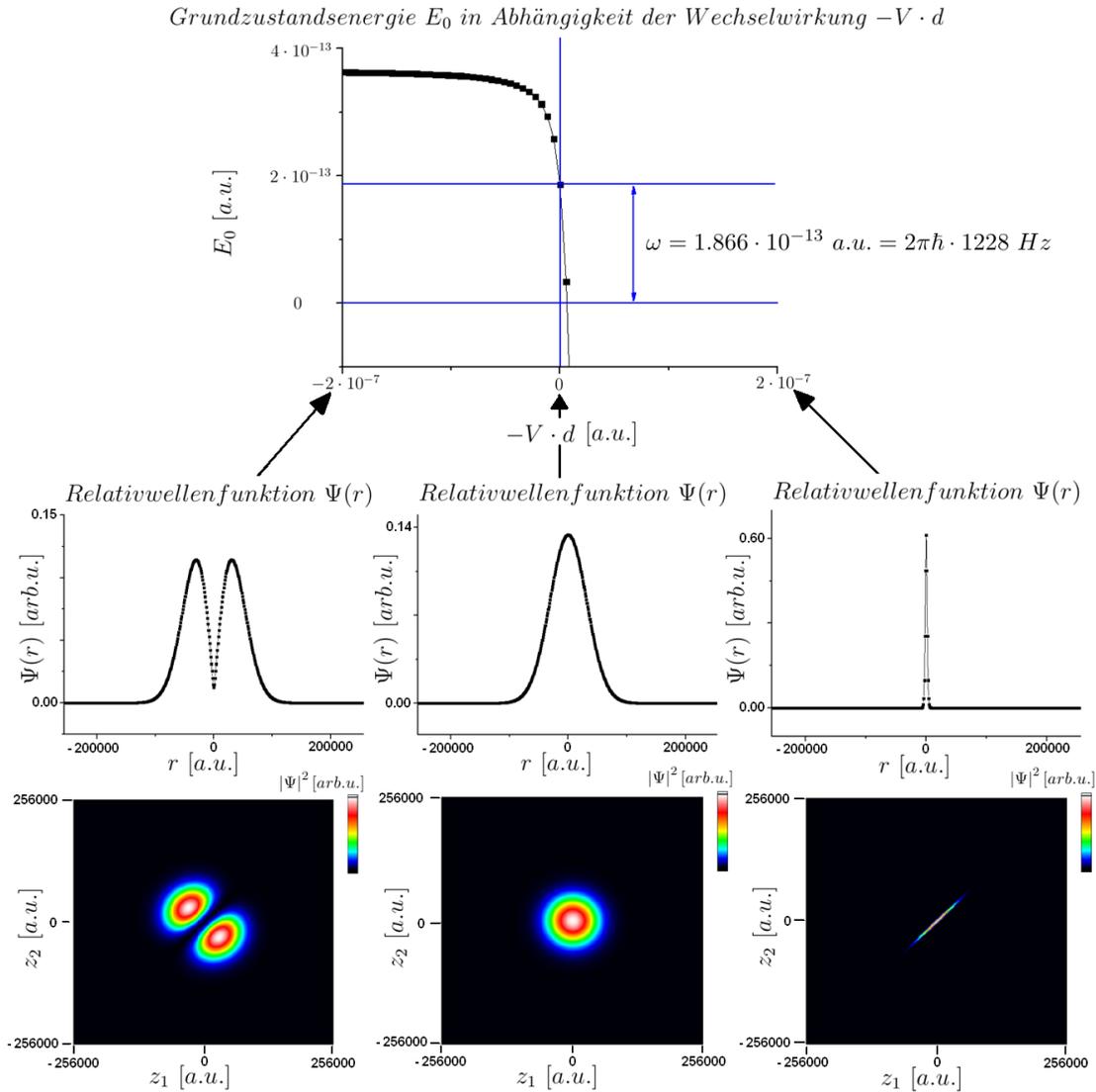


Abbildung 3.1: Diese Abbildung zeigt die Simulationsergebnisse für das symmetrische (“ungekippte“) Fallenpotential (siehe Abbildung 2.1 links) mit $p = 0.6575$

Am oberen Plot dieser Abbildung kann man gut den typischen Verlauf der Grundzustandsenergie in Abhängigkeit der Kopplungskonstanten $g = V \cdot d$ erkennen (vergleiche mit Abbildung 2.2 und 1.6). Theoretisch wäre beim Fermionisationsübergang $\Psi(r = 0)$ identisch 0. Dies ist bei der linken Wellenfunktion in der Abbildung, welche den Eigenzustand an diesem Übergang nähern soll, natürlich nicht ganz der Fall. Dies hängt mit dem eingeschränkten Bereich der Kopplungskonstanten $V \cdot d$ zusammen, aufgrund dessen der asymptotische Grenzwert nie erreicht werden kann. Beim anderen Extremfall für die Wechselwirkung (positive Schranke von $-V \cdot d \rightarrow V \cdot d$ ist maximal negativ) ziehen sich die Atome sehr stark an (rechte Wellenfunktion in der Abbildung). Der Grundzustand ohne Wechsel-

wirkung (mittlere Wellenfunktion in der Abbildung) ist derjenige, bei dem sich in der harmonischen Näherung beide Atome im Einteilchen-Grundzustand des harmonischen Oszillators befinden würden. Dessen Energie würde dann gerade der Oszillatorfrequenz ω entsprechen, wie sie im ersten Plot der Abbildung für diesen Fall gegeben ist.

3.1.2 Asymmetrisches Fallenpotential

Im Folgenden ist der relevante Ausschnitt im Multispektrum des wechselwirkenden Systems mit asymmetrischem Fallenpotential (Abbildung 2.1 rechts) mit $p = 0.795$ dargestellt. Diese Situation entspricht auch der experimentellen Ausgangssituation der Tunnelexperimente (vergleiche mit Abschnitt 2.4). Das Spektrum wurde mittels der zeitaufgelösten Spektralanalyse (siehe Abschnitt 2.3) berechnet. Es werden auch die Wellenfunktionen der signifikanten Eigenzustände angegeben, die mittels der zeitaufgelösten Fouriertransformation (2.Methode in Abschnitt 2.3) berechnet wurden.

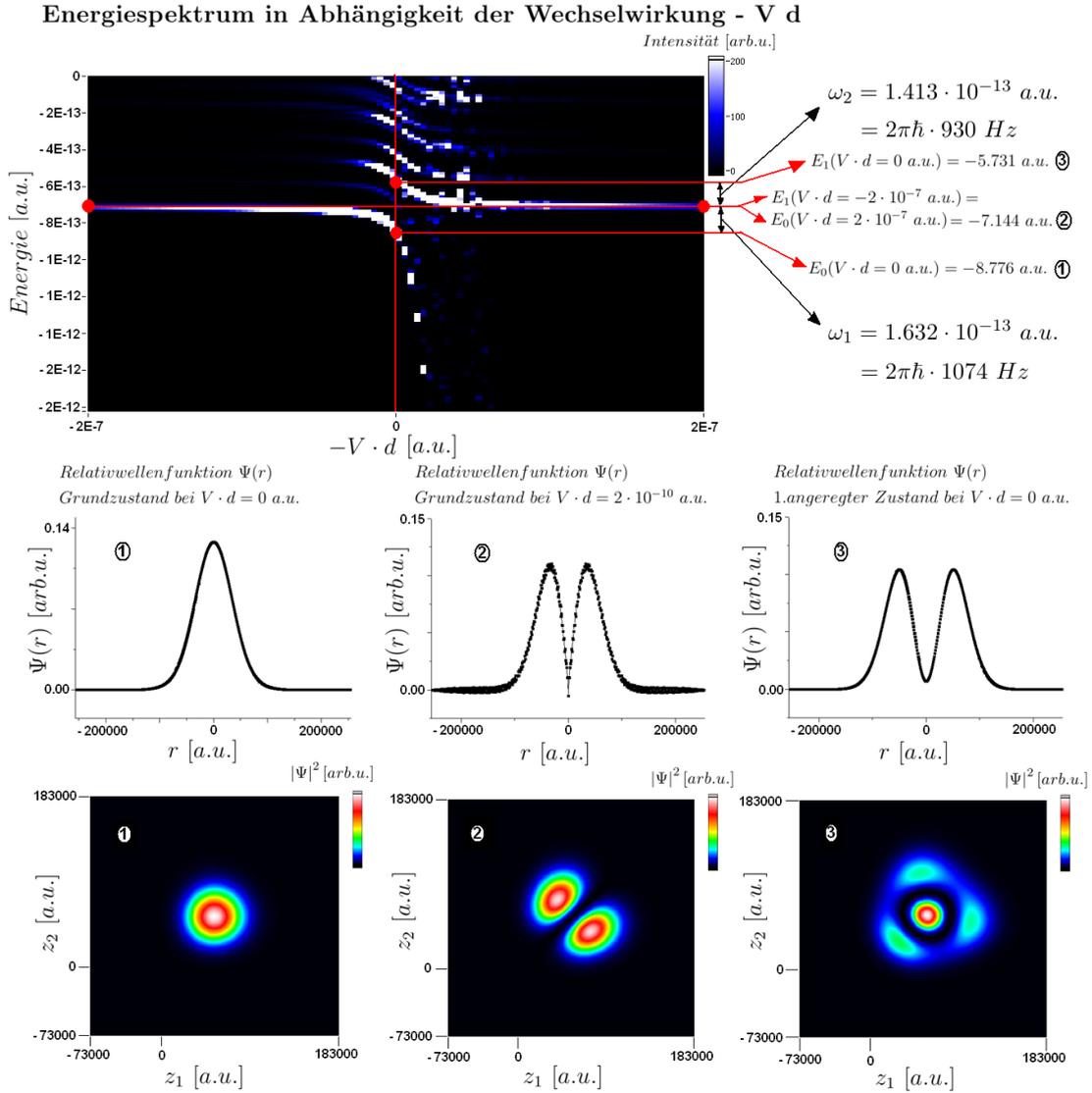


Abbildung 3.2: Die Abbildung zeigt die Simulationsergebnisse für das asymmetrische (“gekippete“) Fallenpotential (siehe Abbildung 2.1 rechts) mit $p = 0.795$. Für beide Grenzfälle $V \cdot d = -2 \cdot 10^{-7} \text{ a.u.}$ und $V \cdot d = 2 \cdot 10^{-7} \text{ a.u.}$ (simulierter Fermionisationsübergang) ist zur Veranschaulichung nur die Lösung für $V \cdot d = 2 \cdot 10^{-7} \text{ a.u.}$ angegeben, da die Lösung für den anderen Fall fast identisch ist.

Das Spektrum in der Abbildung oben macht deutlich, dass für die gewählte Startwellenfunktion der Spektralanalyse (siehe Abbildung 2.3 rechts) die relevanten Zustände der Relativbewegung mögliche Anregungen der Schwerpunktsbewegung (vergleiche mit Abbildung 2.2) überwiegen. Vergleicht man dieses Multispektrum aus der Simulation mit dem aus Abbildung 2.2, fällt auf, dass die Linien der Schwerpunktsanregungen in der Simulation kaum zu erkennen sind. Natürlich ist nicht gewährleistet, dass sich keine geringen Anteile von solchen ungewollten Zuständen mit Schwerpunktsanregungen, die mit der relevanten Funktion entartet sind, im präparierten Endzustand befinden. Beispielsweise könnte man bei der Wellenfunktion für den Endpunkt des Messbereichs im Spektrum (3) eine Schwerpunktsanregung vermuten, da es zwei lokale Maxima der Wahrscheinlichkeitsdichte auf der Diagonalen ($r = 0$) gibt. Auch die berechnete Relativwellenfunktion $\Psi(r)$ für diesen Fall unterscheidet sich deutlich von der theoretisch erwarteten Wellenfunktion in der harmonischen Näherung.

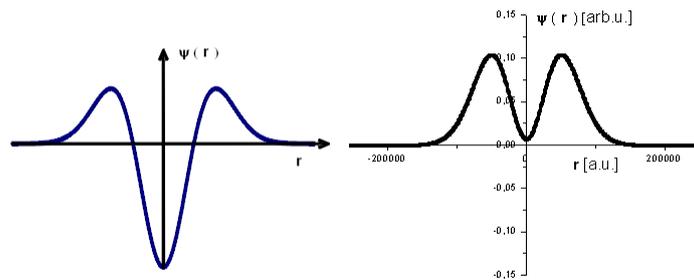


Abbildung 3.3: Die linke Abbildung zeigt die theoretische Wellenfunktion der Relativkoordinate des 1. angeregten Zustands bei $g = 0$ für das harmonische Fallenpotential. Die rechte Abbildung zeigt im Vergleich die entsprechende simulierte Wellenfunktion für das asymmetrische Fallenpotential. Die linke Abbildung wurde entnommen aus [Zür11] und bearbeitet.

Andererseits lässt die Form der Zweiteilchen-Wellenfunktion an diesem Punkt (Abbildung 3.2, rechte Wellenfunktion) auch vermuten, dass sich die Unterschiede des simulierten exakten Potentials zum harmonisch genäherten Potential bemerkbar machen. Denn ist die harmonische Näherung nicht mehr ausreichend, lässt sich das Problem nicht, wie in Abschnitt 1.3 beschrieben, in einen Schwerpunkts- und Relativanteil separieren. Das bedeutet, dass die Zustände dann auch keine Produktfunktionen aus $\Psi(R)$ und $\Psi(r)$ mehr sind. Dann macht die Betrachtung einer Relativwellenfunktion $\Psi(r)$, die gemäß Formel 2.18 berechnet wird, weniger Sinn. Wie bereits erklärt, macht sich die Abweichung von der harmonischen Näherung für Zustände mit größerer Energie bemerkbar. Dieser Zustand hat die

größte Energie von allen in der Simulation und seine Form lässt deutlich erkennen, dass es sich um keinen Produktzustand dieser Art mehr handelt.

Für diese Abweichung spricht außerdem, dass die Energieabstände vom Grundzustand ohne Wechselwirkung zum Fermionisationsübergang (ω_1 in Abbildung 3.2) und vom Fermionisationsübergang zum 1. angeregten Zustand ohne Wechselwirkung (ω_2 in Abbildung 3.2) signifikant unterschiedlich sind. In der harmonischen Näherung müssten diese ja exakt gleich sein.

Es gibt Vergleichswerte für den Energieabstand $\omega_1 = 2\pi\hbar \cdot 1074 \text{ Hz}$ und $\omega_2 = 2\pi\hbar \cdot 930 \text{ Hz}$, die mittels der sogenannten WKB-Methode (siehe [Zür11]) berechnet wurden.

$$\omega_{1_{calc}} = 2\pi\hbar \cdot 1009 \text{ Hz} \quad \omega_{2_{calc}} = 2\pi\hbar \cdot 942 \text{ Hz} \quad (3.1)$$

Diese Werte stimmen unter Berücksichtigung von Ungenauigkeiten der Simulationsergebnisse gut mit diesen überein.

3.2 Tunnelexperimente

Für die Tunnelexperimente wurden die vier bosonartigen Zustände aus dem vorherigen Abschnitt 3.1.2 als Anfangszustände verwendet. Diese wurden durch das Anhängen von 0-Elementen auf ein größeres Rechengitter von 512×512 Pixeln erweitert¹. Die Tunnelexperimente wurden gemäß der Methode, wie sie in Abschnitt 2.4 erklärt sind, für je zehn äquidistante Tunnelzeiten t' im Bereich von $t'_{min} = 0 \text{ a.u.}$ bis $t'_{max} = 420000 \cdot \Delta t = 420000 \cdot 10^{10} \text{ a.u.} = 102 \text{ ms}$ durchgeführt, was nach [Zür11] ausreichend ist, um die Zerfälle der Zustände zu beobachten.

In der folgenden Abbildung auf der nächsten Seite ist die orts aufgelöste Gesamtabsorption $|\Psi_{abs.}(t'_{max}, z_1, z_2)|^2$ nach der Maximaltunneldauer t'_{max} dargestellt. Zudem wird das Verhältnis des Horizontal- und Vertikalanteils zum Diagonalanteil $\frac{|\Psi_{abs.hor.ver.}(t'_{max})|^2}{|\Psi_{abs.diagonal}(t'_{max})|^2}$ angegeben, was dem Verhältnis von Einfachtunnelprozessen zu Zweifachtunnelprozessen entspricht. Die Nummerierung der vier Plots ist für den Vergleich mit den entsprechenden Startzuständen aus Abbildung 3.2.

¹Die Zustände wurden aus Zeitgründen auf dem kleineren Gitter von 256×256 Pixeln präpariert. Um genügend Raum für die Tunnelbarriere zur Verfügung zu haben ist jedoch ein größeres Gitter notwendig.

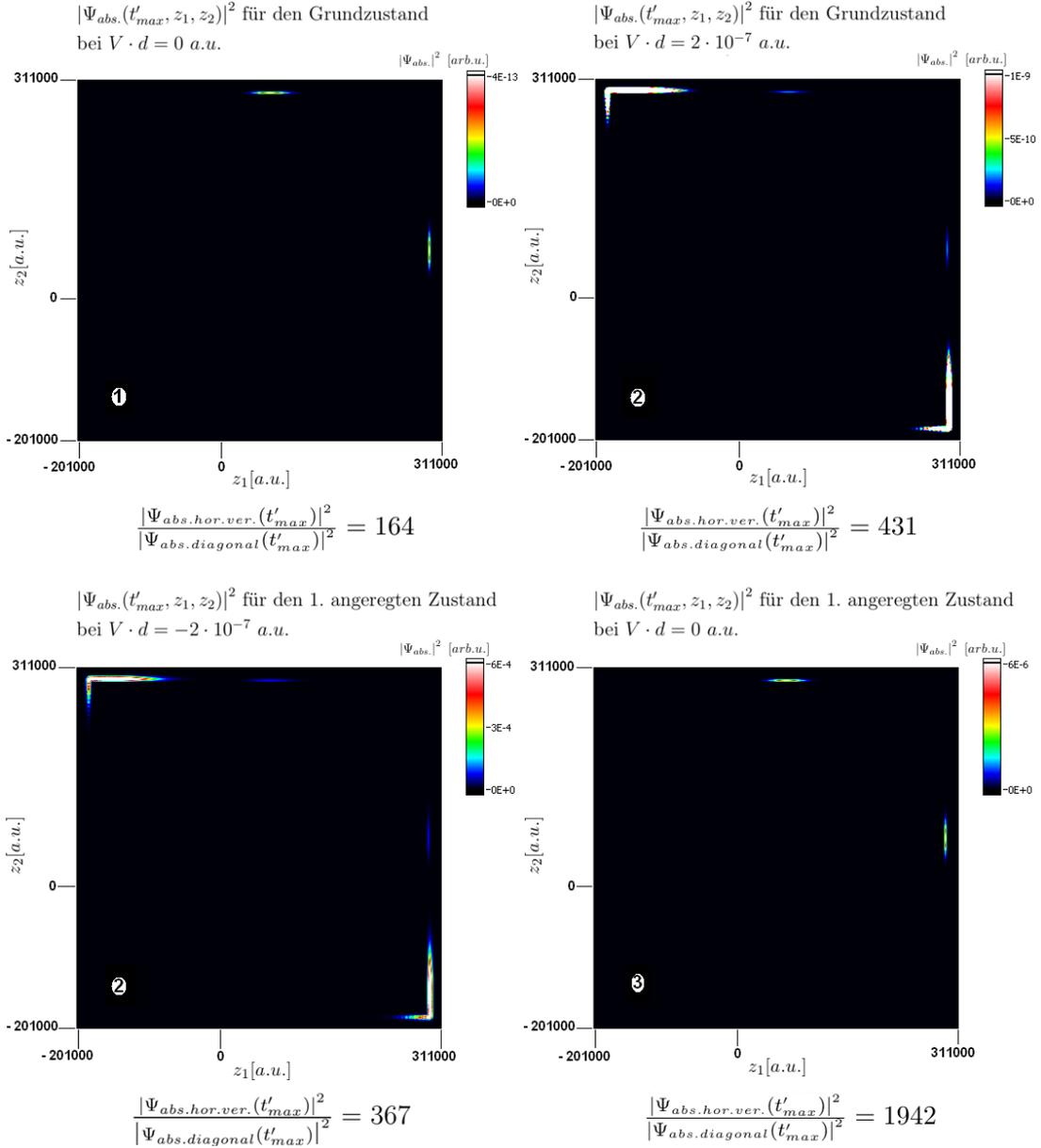


Abbildung 3.4: Die Abbildung zeigt orts aufgelöst, die von der imaginären Potentialbarriere absorbierte Gesamtwahrscheinlichkeit der Zweiteilchen-Wellenfunktion, die über die maximale Tunneldauer t'_{max} absorbiert wurde. Zusätzlich ist das Verhältnis des Anteils von Einfachtunnelvorgängen zu Zweifachtunnelvorgängen angegeben.

In allen vier Fällen überwiegen die Anteile auf der horizontalen und vertikalen Achse die auf der diagonalen Achse. Der Anteil auf der diagonalen Achse ist in den Plots gar nicht mehr wahrzunehmen. Also ist, wie erwartet, der Prozess, dass ein Atom alleine tunnelt, immer der dominante Prozess. In den beiden Plots mit nichtverschwindender Wechselwirkung $V \cdot d$ fällt auf, dass der größte Anteil der Absorption, weder auf der Diagonalen, noch auf der Horizontalen und Vertikalen liegt, sondern in der Nähe der Diagonalen $z_1 = -z_2$. Dies hängt vermutlich mit der Simulation des Wechselwirkungspotentials mit großem Sprung bei $r = 0$ (Diagonale $z_1 = z_2$ des Rechengitters) zusammen. Dadurch entstehen in der Zeitentwicklung immer kleine Anteile hoher Relativbewegungsanregungen, welche beispielsweise auch in Abbildung 3.2 an der entsprechenden Relativkoordinatenwellenfunktion $\Psi(r)$ als eine Art Rauschen zu erkennen ist. Diese hohen Anregungen sind nicht mehr in der Falle gebunden und werden deshalb ständig von der imaginären Absorptionsbarriere an den Rändern der Relativkoordinatenachse (Diagonale $z_1 = -z_2$) absorbiert. Theoretisch verschwindet die Lösung am Fermionisationsübergang ja für $r = 0$ und die Form der Punktwechselwirkung spielt keine Rolle mehr (siehe Abschnitt 1.3). In der Simulation ist dieser Punkt aber nur genähert, weshalb immer eine von 0 verschiedene Wahrscheinlichkeit bei $r = 0$ bleibt. Deshalb hat die Wechselwirkung in der Zeitentwicklung immer einen Einfluss, der sich anscheinend in Form dieser Anregungen zeigt.

Auffällig ist außerdem die Tendenz, dass der Zweifachtunnelprozess mit steigender Eigenenergie stärker unterdrückt ist. Die Begründung dafür wird anhand folgender Skizze deutlich, worin der energetisch niedrigste und höchste Fallenzustand der Simulation im Einteilchen-Niveau-Schema gegeben ist.

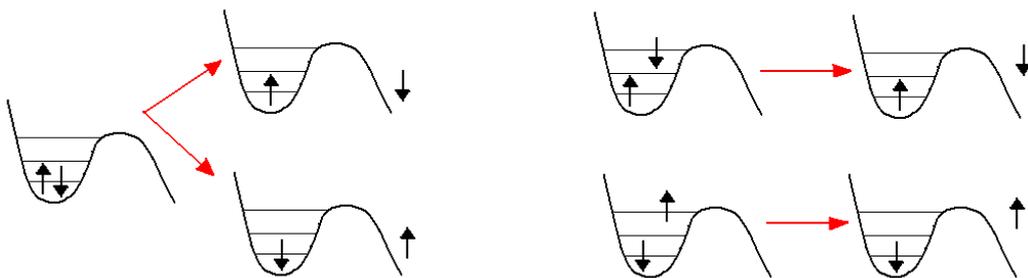


Abbildung 3.5: Die Abbildung zeigt schematisch den Tunnelprozess des Zweiteilchen-Grundzustands (links) und des 1. angeregten Zweiteilchen-Zustands (rechts) jeweils ohne Wechselwirkung im Einteilchen-Niveau-Schema. Die Pfeile bezeichnen den Spin des Atoms

Beim Grundzustand (links) befinden sich beide Atome im gleichen Einteilchen-

Energiezustand, weshalb die Tunnelwahrscheinlichkeit für beide Atome identisch ist. Diese Tatsache bevorzugt einen gleichzeitigen Tunnelprozess. Beim ersten angeregten Zustand hingegen befindet sich eines der Atome im dritten Energieniveau, während das andere im ersten ist. Das Atom im dritten Niveau tunnelt mit einer größeren Wahrscheinlichkeit als das Atom im Grundzustand, weshalb hauptsächlich das höherenergetische Atom tunnelt, was sich nachteilhaft auf ein gleichzeitiges Tunneln auswirkt.

Aufgrund des stark dominanten Prozess des Einfachtunnelns, wurde nun der Zerfall im Bereich der Horizontalen und Diagonalen des Rechengitters, wie in 2.4 beschrieben mit dem Zerfallsgesetz 1.16 angepasst und die Zerfallskonstante τ bestimmt. Die entsprechenden Zerfallsplots sind auf der nächsten Seite dargestellt. Zudem sind Vergleichswerte angegeben, die mittels der Daten des realen Experiments abgeschätzt wurden.

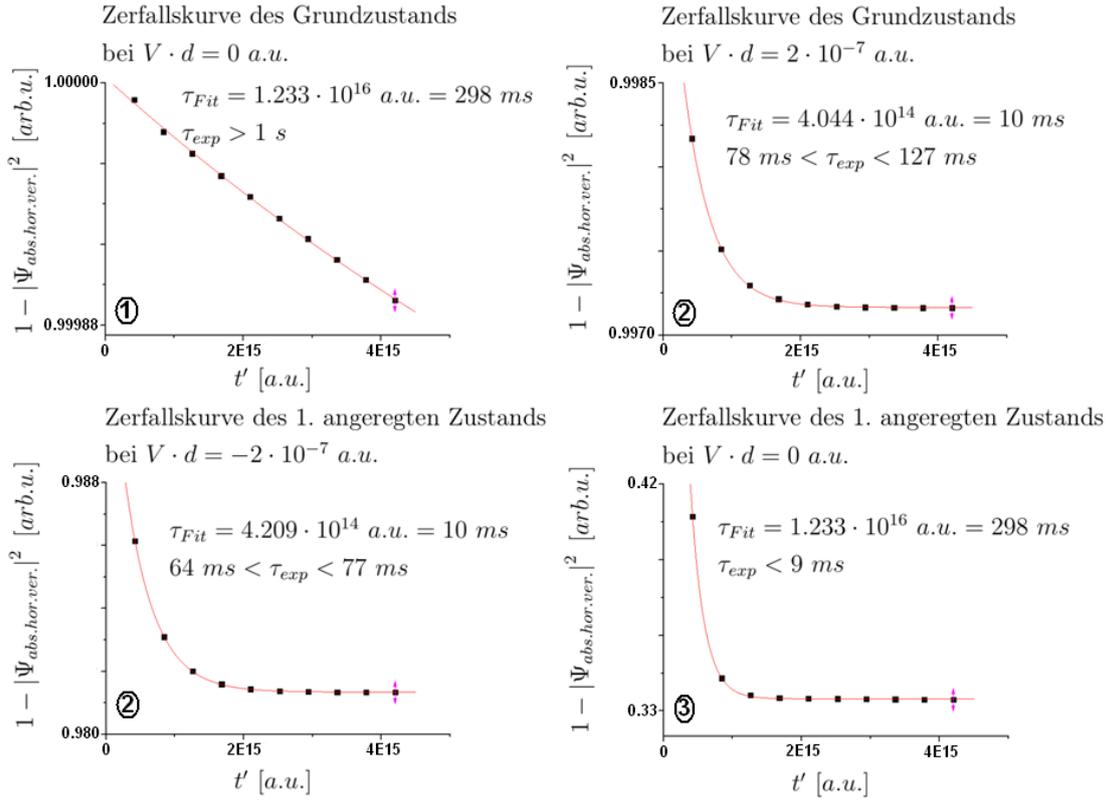


Abbildung 3.6: Darstellung der Zerfallskurven für die Eigenzustände des asymmetrischen Fallenpotentials ($p = 0.6875$). Die Nummerierung ist für den Vergleich mit Abbildung 3.2.

Es fällt auf, dass alle mittleren Zerfallszeiten τ_{Fit} weit unter den experimentellen Vergleichswerten liegen. Eine Erklärung für die Abweichung bei den beiden wechselwirkenden Fällen (2) könnte sein, dass der Tunnelprozess durch die kleinen ungewollten Anregungen, die in diesem Abschnitt oben diskutiert wurden, verfälscht wird. Dies erklärt aber nicht die große Abweichung beim nichtwechselwirkenden Grundzustand (1), die andere Ursachen haben muss. Trotzdem kann man erkennen, dass τ_{Fit} für die repulsive und attraktive Wechselwirkung identisch sind, was den Fermionisationsübergang charakterisiert (siehe Abschnitt 1.4).

Schlussfolgerung und Ausblick

Im Laufe dieser Arbeit wurde die physikalische Situation eines ultrakalten zweiatomigen fermionischen ${}^6\text{Li}$ Gases in einem eindimensionalen Fallenpotential mit Wechselwirkung am Computer zu simuliert.

Ausgangspunkt dafür ist das quantenmechanische Modell, welches neben dem gut bekannten Fallenpotential die für ultrakalte Gase typische Näherung der Punktwechselwirkung enthält. Eine Schwierigkeit dieser Arbeit war, eine Vergleichbarkeit zwischen der theoretischen Beschreibung der Punktwechselwirkung und der numerischen Realisierung auf einem diskreten Rechengitter herzustellen.

Mittels numerischer Methoden, die teilweise in dieser Arbeit entwickelt wurden, konnte das Energiespektrum und die Eigenzustände für das wechselwirkende Gas gefunden werden und mit den analytischen Lösungen verglichen werden. So konnten typische Charakteristika, wie der Übergang der Fermionisation nachvollzogen werden. Auf der anderen Seite konnte man aber auch Unterschiede zur harmonischen Näherung im analytischen Modell feststellen. Außerdem konnten Systemwerte berechnet werden, die als Vergleichswerte für zukünftige Experimente oder Rechnungen dienen könnten.

Im letzten Abschnitt sollten aktuelle Tunnelexperimente, bei denen man über die Zerfallscharakteristik eines Zustands Rückschlüsse auf dessen Eigenschaften zieht, exakt nachgestellt werden. Mit diesen Experimenten wird experimentell der Übergang der Fermionisation überprüft. Im Laufe dieser Simulationen wurden Probleme festgestellt, die möglicherweise auf dem eingeschränkten numerischen Modell beruhen und eine direkte Vergleichbarkeit quantitativer Ergebnisse mit dem Experiment erschwerten. Qualitativ konnte jedoch im Einklang mit dem Experiment beobachtet werden, dass Einfachtunnelprozesse im Vergleich zu Zweifachtunnelprozessen immer dominant sind. Außerdem konnte festgestellt werden, dass der Zweifachtunnelprozess mit steigender Zustandsenergie zunehmend unterdrückt ist. Schließlich konnte die typische Charakteristik am Fermionisationspunkt durch Messung identischer mittlerer Tunnelzeiten für attraktive und repulsive Wechselwirkung beobachtet werden.

Literaturverzeichnis

- [Din11] Thomas Ding, *Modellatom mit zwei Elektronen in jeweils einer Raumdimension in Wechselwirkung mit XUV- und IR-Laserfeldern*, 2011. (Verweis auf S. 15, 17, 25)
- [Gir60] M. Girardeau, *Relationship between Systems of Impenetrable Bosons and Fermions in One Dimension*, *Journal of Mathematical Physics* **1**, 516-523 (1960). (Verweis auf S. 11)
- [Mor06] Henning Moritz, *One-dimensional Atomic Gases*, Ph.D. thesis, Universität Heidelberg, 2006. (Verweis auf S. 5)
- [Ron11] Massimo Rontani, *Tunneling theory of two interacting atoms in a trap*, ArXiv e-prints **arXiv1111.3611** (2011). (Verweis auf S. 12)
- [Sch05] Franz Schwabl, *Quantenmechanik (QM1) Eine Einführung*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005. (Verweis auf S. 6)
- [Ser11] F. Serwane, G. Zürn, T. Lompe, T.B. Ottenstein, A.N. Wenz, and S. Jochim, *Deterministic Preparation of a Tunable Few-Fermion System*, *Science* **332**, 336-338 (2011). (Verweis auf S. 1, 3, 4, 5)
- [Tho98] Busch Thomas, Englert Berthold-Georg, Rzazewski Kazimierz, and Wilkens Martin, *Two Cold Atoms in a Harmonic Trap*, *Foundations of Physics* **28**, 549-559 (1998). (Verweis auf S. 1, 5, 10, 18)
- [Zür11] G. Zürn, F. Serwane, T. Lompe, A.N. Wenz, M.G. Ries, J.E. Bohn, and S. Jochim, *Fermionization of two distinguishable fermions*, ArXiv e-prints **arXiv1111.2727** (2011). (Verweis auf S. 1, 2, 3, 7, 24, 31, 32)

Erklärung

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Heidelberg, den 14.02.2012