

BAKKALAUREATSARBEIT

3-DIMENSIONALE NUMERISCHE SIMULATION VON
BOSE-EINSTEIN KONDENSATEN
DURCH DIE GROSS-PITAEVSKII GLEICHUNG

eingereicht

für das Studium Computational Sciences
an der Karl-Franzens Universität
Universitätsplatz 3, A-8010 Graz

vorgelegt von

CHRISTOPH DUSWALD
Bürmooserstrasse 20
5112 Lamprechtshausen

Betreuer

Ao. Univ. Prof. Dr. Ulrich Hohenester

Graz, am 29. September 2010

Abstract

This bachelor thesis is an accompanying guide to a new Matlab program simulating the dynamic behaviour of Bose-Einstein condensates (BEC) in three dimensions. The program is based on an existing code for two dimensional systems by Ao. Univ. Prof. Dr. Ulrich Hohenester, Karl-Franzens University, Graz. The thesis consists of three parts: *Scientific Background*, *Implementation* and *Results*.

Scientific Background (Grundlagen) briefly informs about the research history of Bose-Einstein condensation and the development of modern atom chips. It also provides the essentials of the physical properties of BECs and of the time dependent and stationary Gross-Pitaevskii equations.

Implementation (Methode) deals with the structure and the design of the Matlab program. The applied split operator method and various calculation details are presented. The final sections covers the output options and the demand on hardware resources.

Results (Ergebnisse) discusses the problems of oscillating and splitting BECs. The effect of changing parameters on the BEC is investigated and the results are compared to simulations of lower dimensions.

Finally, a short conclusion is drawn. The field of application as well as the limits of the simulation are presented.

Keywords: *Bose Einstein Kondensat, BEC, Atomchip, Gross Pitaevskii, Nichtlineare Schrödingergleichung*

Danksagung

Mein Dank gebührt besonders

Ao. Univ. Prof. Dr. Ulrich Hohenester für eine großartige Möglichkeit.

Dr. Julian Grond für viel Rat und noch mehr Geduld.

Univ. Prof. Dr. Stefan Hergarten und den Freunden von *Computational Sciences* für Ihr Engagement trotz widriger Umstände.

Bianca für all die Unterstützung.

Inhaltsverzeichnis

Abstract	i
Danksagung	ii
1 Einführung	1
2 Grundlagen	2
2.1 Bose-Einstein Kondensate	2
2.1.1 Historische Entwicklung	2
2.1.2 Physikalische Eigenschaften	4
2.2 Atomchips	5
2.3 Gross-Pitaevskii Gleichung	8
3 Methode	10
3.1 Grundzustand	10
3.2 Zeitpropagation	11
3.3 Ausgabe	13
3.4 Ressourcenbedarf	14
4 Ergebnisse	16
4.1 Einfluss Kopplungsfaktor g	16
4.2 Wechselwirkender Grundzustand	16
4.3 Schwingende BECs	19
4.4 Änderung in Z-Achse	20
4.5 Vergleich 1D, 2D, 3D	22
5 Conclusio	24
A Inhalt CD	26
Abbildungsverzeichnis	27
Literaturverzeichnis	28

Kapitel 1

Einführung

Die Erzeugung und Manipulation von Bose-Einstein Kondensaten (BEC) ist modernes und überaus beliebtes Themengebiet der modernen Physik. Seit der ersten erfolgreichen Herstellung von BECs im Juni 1995 gelang es durch laufende technische Fortschritte die notwendigen Apparaturen schrittweise zu verkleinern und zu vereinfachen. Atomchips mit einer Größe von nur wenigen Zentimetern Kantenlänge erlauben heute ein flexibles Erzeugen von BECs in Magnetfallen, wenige Mikrometer über der Chipoberfläche. Damit eröffnen sich neue Möglichkeiten das Verhalten von makroskopischen Quantenobjekte zu untersuchen und zu kontrollieren. Durch Variation der Fallenpotentiale können Kondensate verschoben, geteilt und wieder vereinigt werden, was die Grundlage für viele zukünftige Anwendungen darstellen könnte.

Im Rahmen dieser Arbeit wird das dynamische Verhalten von BECs in veränderlichen Potentialen auf einem Atomchip simuliert. Die Kondensate werden hierbei durch die *Gross-Pitaevskii Gleichung* in drei Dimensionen beschrieben. Von besonderem Interesse ist dabei das Ausmaß der Anregung des nahezu zylinderförmigen Kondensates in seiner Längsrichtung bei Variation des Potentialfeldes in den darauf normal stehenden Achsen. Dies soll unter anderem Aufschluss darüber geben, wie gut sich verschiedene Problemstellungen durch ein- oder zwei-dimensionale Lösungsmethoden annähern lassen.

Die Umsetzung der Simulation erfolgt in Matlab, als Erweiterung eines bereits existierenden Codes für zwei dimensionale Simulationen zu den Experimenten der *AtomChip* Gruppe von Prof. Dr. Jörg Schmiedmayer, Atominstitut der österreichischen Universitäten, Technische Universität Wien¹.

In Kapitel 2 werden die wesentlichsten Grundlagen zu BECs, Atomchips und der Gross-Pitaevskii Gleichung besprochen. Kapitel 3 beschreibt die zur Umsetzung verwendeten Methoden und in Kapitel 4 werden einige interessante Simulations-Ergebnisse vorgestellt und analysiert. Kapitel 5 fasst die gewonnenen Erkenntnisse zusammen und Anhang A gibt einen Überblick zu dem Inhalt der beiliegenden Daten CD.

¹siehe <http://atomchip.org>

Kapitel 2

Grundlagen

In diesem Kapitel werden die grundlegenden Eigenschaften und die historische Entwicklung der Bose-Einstein Kondensation, moderner Atomchips und der Beschreibung der Kondensate durch die Gross-Pitaevskii Gleichung gezeigt. Der Detaillierungsgrad der Ausführungen wird dabei durch das für das Verständnis der Simulation notwendige Ausmaß definiert. Empfohlene Literatur für weitergehende Informationen sind in den entsprechenden Unterkapiteln angegeben.

2.1 Bose-Einstein Kondensate

Ein BEC ist ein System von Bosonen, in dem sich ein Großteil der Teilchen in einem gemeinsamen Zustand, dem Grundzustand, befinden. Die Bosonen sind ununterscheidbar über den gesamten Bereich des Kondensats delokalisiert und das System lässt sich durch eine einzige Wellengleichung beschreiben. Heute realisierte Kondensate bestehen meist aus einigen tausend bis 10^6 Teilchen und erreichen eine räumliche Ausdehnung bis zu einigen Mikro- bis Millimetern. Damit ist es erstmals möglich typisch quantenmechanische Eigenschaften an makroskopischen Objekten zu beobachten.

2.1.1 Historische Entwicklung

Die theoretische Vorhersage von BECs geht auf den indischen Physiker Satyendra Nath Bose und Albert Einstein zurück. In 1924, dem selben Jahr in dem de Broglie's Arbeit über den Wellencharakter von Teilchen erschien, veröffentlichte Bose einen Artikel in dem er das Planck'sche Strahlungsgesetz auf Grundlage der Ununterscheidbarkeit gleichartiger Teilchen ableitete [1]. Aufbauend darauf publizierte Einstein von 1924 bis 1925 drei Texte über eine Quantentheorie des einatomigen Gases [4]. In der zweiten Abhandlung vom Januar 1925 stellte Einstein der klassischen Gastheorie eine quantenmechanische Gastheorie mit nicht unterscheidbaren, gleichartige Teilchen gegenüber. Hierin hieß es:

... Was geschieht nun aber, wenn ich bei dieser Temperatur $\frac{T}{V}$ die Dichte der Substanz noch mehr wachsen lasse? Ich behaupte, dass in diesem Falle eine mit der Gesamtdichte stets wachsende Zahl von Molekülen in den 1. Quantenzustand (Zustand ohne kinetische Energie) übergeht, während die übrigen Moleküle sich gemäß dem Parameterwert $\lambda = 1$ verteilen. ... Es tritt eine Scheidung ein; ein Teil »kondensiert«, der Rest bleibt ein »gesättigtes ideales Gas«. ...

Es wird hier die Existenz des heute als Bose-Einstein Kondensat bekannten Aggregatzustand vorhergesagt. Diese auf Boses's Arbeit aufbauende Abhandlung ist nebenbei die

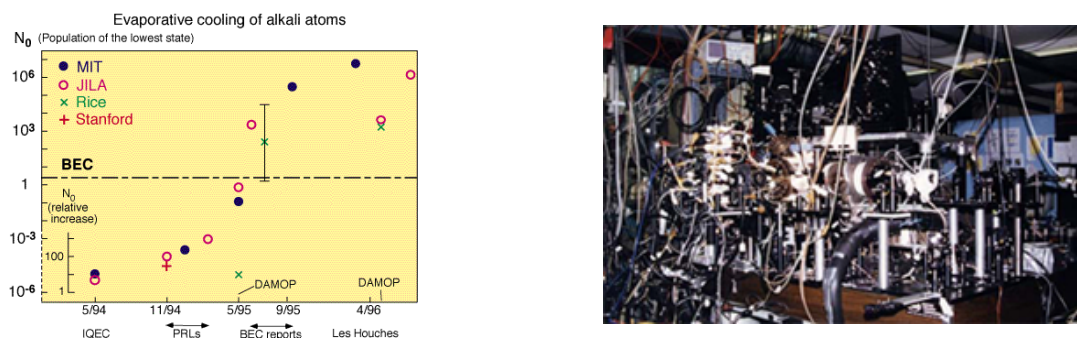


Abbildung 2.1: (a) Wettkampf um die erste Erzeugung eines Bose-Einstein Kondensates, (b) Apparatur des erfolgreichen Experiments, Gruppe MIT - W. Ketterle.

erste Arbeit überhaupt, die sich auf die neuen Ideen de Broglie's bezieht. Erwin Schrödinger soll erstmals durch diesen Text von de Broglie's Materiewellen gehört haben.

In den Jahren nach der Veröffentlichung von Einsteins Abhandlungen wurde wenig zu BECs geforscht. Ein Grund mag in der offenen Kritik George Uhlenbecks gelegen haben, dass eine entsprechende Kondensation in einem realen, endlichen System nicht stattfinden könnte. Erst mit deren formaler Widerlegung 1938 änderte sich dies und viele bekannte Physiker wie F. London, F. Landau und N. Bogoliubov widmeten sich dem Thema - meist auf der Suche einer gemeinsamen Beschreibung der Superfluidität und der Supraleitung. Einstein selbst publizierte keine weiteren Texte zu diesem Thema.

Von 1960 bis 1965 war das Thema BEC unter theoretischen Physikern sehr beliebt und ein großer Teil des heute selbstverständlichen theoretischen Wissens auf diesem Gebiet wurde zu dieser Zeit erarbeitet. Ein wesentlicher Beitrag wurde dabei von Lev Pitaevskii über zeit- und ortsabhängige makroskopische Wellenfunktionen geleistet. Unter anderem entstand die in Kapitel 2.3 behandelte Gross-Pitaevskii Gleichung. Außerhalb der Gemeinde der theoretischen Physiker fanden die Fortschritte kaum Beachtung, da eine entsprechende experimentelle Verwirklichung weder absehbar noch vorstellbar war¹.

In den Jahren bis ca. 1980 verbesserten sich die technischen Möglichkeiten zur Kühlung von Materie derart, dass die Erzeugung eines BEC erstmals möglich erschien. In den darauf folgenden 15 Jahren begann ein Wettkampf mehrerer Gruppen um den ersten experimentellen Nachweis eines Kondensats aus Wasserstoffgas. Im Laufe der Experimente zeigte sich dann, dass Gase von Alkali-Elementen besser für die Versuche geeignet sind.

Erst 1995 meldeten drei Gruppen eine erfolgreiche Erzeugung eines BEC: Die Gruppe JILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics), Boulder, Colorado um C. Wieman und E. Cornell, die Gruppe MIT (Massachusetts Institute of Technology), Cambridge, Boston um W. Ketterle und die Gruppe der Rice University in Houston, Texas um R. Hulet. Während die Ergebnisse der ersten beiden Gruppen von allen Experten unstrittig akzeptiert wurden gab es große Zweifel ob bei den Experimenten der Rice University Gruppe wirklich ein BEC erzeugt werden konnte. Abbildung 2.1 gibt einen Überblick über die Endphase des Wettkampfes um das erste BEC und zeigt die Apparatur der Gruppe MIT.

Für die unstrittigen Experimente wurden Rubidium-87 bzw. Natrium-23 Gase benutzt. Die Atome wurden zuerst durch eine magneto-optische Falle in einer Vakuumzelle gefangen. Unter Ausnutzung des Strahlungsdrucks wurden die Atome dann mit sechs Laserstrahlen auf eine Temperatur von wenigen Mikrokkelvin gekühlt. Um die für die Kondensation notwendige Temperatur von einigen Nanokelvin zu erreichen war ein weiteres Kühlverfahren,

¹Eine detaillierte historische Beschreibung der Forschungsarbeit bis ca. 1970 bietet [6]



Abbildung 2.2: A. Einstein, S.N. Bose, E. Cornell, C. Wiemann, W.Ketterle (von links nach rechts)

das so genannte Evaporationskühlen erforderlich. Hierbei wurde das Fallenpotential so verändert, dass die energiereichsten Teilchen der Falle entkommen konnten. Zurück blieb eine geringere Anzahl an kühleren Teilchen. Für den Nachweis der Kondensation wurde die Falle abgeschaltet und die Expansion der Atomwolke beobachtet. Eine asymmetrische räumliche Verteilung und eine schmale Impulsverteilung der Wolke waren Zeichen für ein erfolgreiches Experiment. Beim Experiment der Gruppe MIT wurden gleichzeitig zwei Kondensate erzeugt, wodurch sich beim Abschalten der Falle eine Interferenz der beiden expandierenden Wolken zeigen ließ. Die Kondensate bestanden aus ca. 2 000 Teilchen bei der Gruppe JILA und ca. 1 000 000 Teilchen bei der Gruppe MIT.

Im Jahre 2001 wurden Carl Wiemann, Eric Cornell und Wolfgang Ketterle zu gleichen Teilen mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet.

Bis 2009 wurden BECs aus Gasen von Li^7 , Na^{23} , K^{41} , K^{39} , Cr^{52} , Sr^{87} , Rb^{85} , Rb^{87} , Cs^{133} , Yb^{170} und Yb^{174} erzeugt. Mit leicht veränderten Kühl-Methoden gelang auch die Erzeugung von Kondensaten aus H^1 und He^4 Atomen. Durch eine Verbindung zu Paaren mit ganzzahligem Gesamtspin konnten inzwischen auch Fermionen-Kondensate realisiert werden.

2.1.2 Physikalische Eigenschaften

Bosonen sind Teilchen mit ganzzahligem Spin. Dabei kann es sich um Elementarteilchen wie Photonen und Gluonen oder wie in den hier diskutierten Fällen, um aus einer geraden Zahl von Fermionen (Teilchen mit halbzahligem Spin) zusammengesetzten Teilchen handeln. Eine wesentliche Eigenschaft ist, dass sich die Wellenfunktion eines Systems identischer Bosonen bei Vertauschung zweier beliebiger Teilchen nicht ändert. Bosonen unterliegen nicht dem Pauli'schen Ausschließungsprinzip und es können mehrere Teilchen denselben quantenmechanischen Zustand einnehmen.

Die mittlere Besetzung \bar{n} eines Quantenzustandes mit der Energie ϵ für ein System identischer Bosonen im Gleichgewicht lässt sich beschreiben durch

$$\bar{n}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} - 1}$$

mit

\bar{n} ... mittlere Anzahl von Teilchen im Quantenzustand mit der Energie ϵ

μ ... chemisches Potential

k_B ... Boltzmannfaktor

T ... Temperatur in Kelvin

Dieser Verteilung wird Bose-Verteilung genannt. Für hohe Temperaturen nähert sie sich der klassischen Boltzmannverteilung an.

Das chemische Potential μ ist temperaturabhängig. Bei sinkender Temperatur steigt μ und damit die Anzahl der Teilchen \bar{n} im jeweiligen Zustand. Augenscheinlich darf das chemische Potential jedoch niemals die Energie des Grundzustandes ϵ_{min} überschreiten, da die Bose-Verteilung für diesen Zustand sonst negative Ergebnisse brächte, was physikalisch sinnlos wäre. Die maximal mögliche Besetzung \bar{n}_{max} eines angeregten Quantenzustandes p ist damit gegeben durch

$$\bar{n}_{max,p} \leq \frac{1}{e^{(\epsilon_p - \epsilon_{min})/k_B T} - 1}$$

Wenn ein System mehr Teilchen als die Summe der maximal möglichen Besetzungen aller angeregten Zustände $\bar{n}_{max,1\dots\infty}$ enthält müssen alle übrigen Teilchen den Grundzustand besetzen, sie kondensieren. Die Temperatur bei der die Teilchen eines Systems die angeregten Zustände eines Systems voll besetzen nennt man Übergangstemperatur oder kritische Temperatur T_c . Unterhalb T_c wird der Grundzustand makroskopisch besetzt und ein BEC entsteht.

Die kritische Temperatur hängt von der Phasenraumdichte ϖ ab. Diese entspricht der Anzahl an Teilchen innerhalb eines Würfels mit der de Broglie Wellenlänge λ_T als Kantenlänge.

$$\varpi = n\lambda_T^3 = n \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right)^{\frac{3}{2}}$$

mit

n ... Teilchendichte N/V

\hbar ... reduziertes Plancksches Wirkungsquantum

λ ... de Broglie Wellenlänge

Für ein freies Bosonengas ohne innerer Wechselwirkung tritt Bose-Einstein Kondensation ab einer Phasenraumdichte von $\varpi \approx 2.6124$ auf, wobei der Wert von der Riemannschen Zeta-Funktion mit Parameter $3/2$ her rührt².

Die kritische Temperatur ergibt sich damit als

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{mk_B} \left(\frac{N}{2.6124} \right)^{\frac{2}{3}}$$

Für typische Dichten von Bosonengasen ergibt sich so eine kritische Temperatur von einigen hundert Nanokelvin, bei Rubidium-87 um die 200nK. Abbildung 2.3 (b) zeigt eine anschauliche Deutung der kritischen Temperatur. Bei abnehmender Temperatur vergrößert sich die de Broglie Wellenlänge bis sie bei T_c die Größenordnung des mittleren Teilchenabstandes erreicht. Die Teilchen werden damit immer stärker delokalisiert und sind nicht mehr zu unterscheiden.

2.2 Atomchips

Die für die Herstellung der ersten BEC notwendigen Apparaturen füllten noch ganze Räume. Um die notwendige Temperatur von wenigen hundert milliardstel Kelvin zu erreichen

²Für eine ausführliche Herleitung siehe [12]

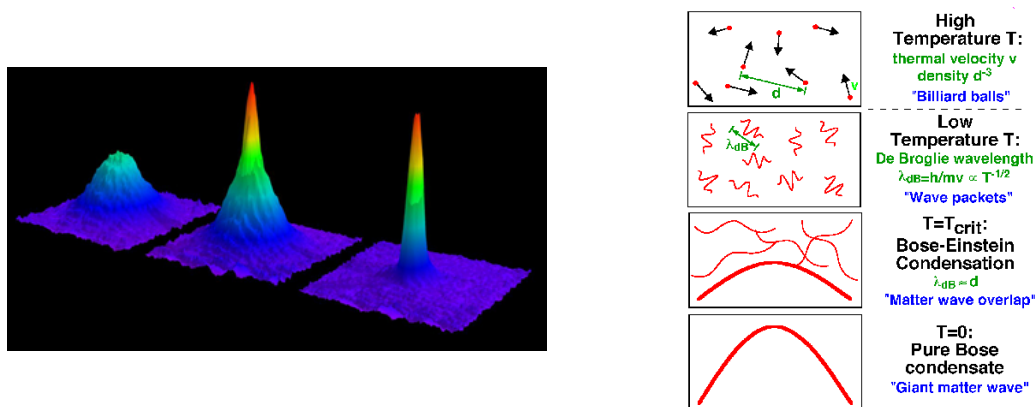


Abbildung 2.3: (a) Bose-Einstein Kondensat aus Rubidium-87 Gas (b) Anschauliche Bedeutung der kritischen Temperatur T_c , Bilder von Gruppe Alkali Quantum Gases, MIT.

war es wesentlich, mögliche Anregungen aus Wechselwirkungen mit der Umgebung, zu vermeiden. Dies stellte sehr hohe Ansprüche an die Qualität der Vakuumzelle und an die Abschirmung von unerwünschter Strahlung. Für die Magnetfallen waren Hochleistungselektromagneten notwendig um die Teilchen zu möglichst großer Dichte zu komprimieren.

Noch im Jahr der ersten erfolgreichen Herstellung eines BEC veröffentlichte eine Gruppe des California Institute of Technology (CIT) eine Arbeit über die Möglichkeit ein Kondensat mit Hilfe eines Mikrochips zu erzeugen. Das durch die stromdurchflossenen Leiterbahnen entstehende Magnetfeld könnte als Falle für die Gaswolke benutzt werden. Die Stärke des Feldes ist umgekehrt proportional zum Abstand des Leiters. Damit würde bei Abständen von nur wenigen Mikrometern von der Chipoberfläche schon ein Magnetfeld von geringer Stärke genügen, um eine Falle zu erzeugen die eine Gaswolke stärker einschließt als dies bei einem konventionellen Aufbau möglich wäre. Zudem würde eine so konstruierte Falle ein deutlich rascheres Abkühlen ermöglichen, wodurch die Anforderungen an die Vakuumzelle und die Abschirmung geringer werden. Ein weiterer Vorteil ist die hohe industrielle Erfahrung in der Produktion von Mikrochips wodurch ein exaktes und flexibles Herstellen dieser Medien möglich wäre. Als größtes Problem für diesen Entwurf wurde die Wärmeübertragung von der millionenfach heißeren Chipoberfläche gesehen. Im Entwurf der Gruppe CIT wurde daher ein umfangreiches Kühlsystem mit flüssigem Helium vorgesehen.

Bald darauf übernahmen andere Gruppen den Ansatz des Mikrochips als Magnetfalle, verzichteten aber auf eine Kühlung des Systems. Es zeigte sich, dass die Wärmeübertragung von der Chipoberfläche auf die Gaswolke bis zu einem räumlichen Abstand von ca. $50 \mu\text{m}$ vernachlässigt werden kann. In Bezug auf die Laserkühlung stellte sich das Problem, dass der Chip zumindest einem der drei normal aufeinander stehenden Laserpaare den Weg blockierte. Dies wurde durch eine Verspiegelung der Chipoberfläche gelöst, die zwei der Laserstrahlen bei richtiger Polarisation ausreichend gut reflektierte.

Viele Gruppen aus der ganzen Welt arbeiteten an der Entwicklung solcher Chip Magnetfallen und von der Gruppe um Prof. Dr. J. Schmiedmayer der Universität Heidelberg (heute Technische Universität Wien) wurde der heute gängige Name Atomchip geprägt. Mitte 2001 gelang den Gruppen um Theodor W. Hänsch, TU München bzw. um Claus Zimmermann, Universität Tübingen, erstmals und unabhängig voneinander die Erzeugung eines BEC auf einem Atomchip. Die Erforschung von BECs und daraus möglicher Anwendungen mit Hilfe von Atomchips gehört heute zu den viel versprechendsten Forschungsgebieten und wird an unzähligen Universitäten weltweit betrieben.

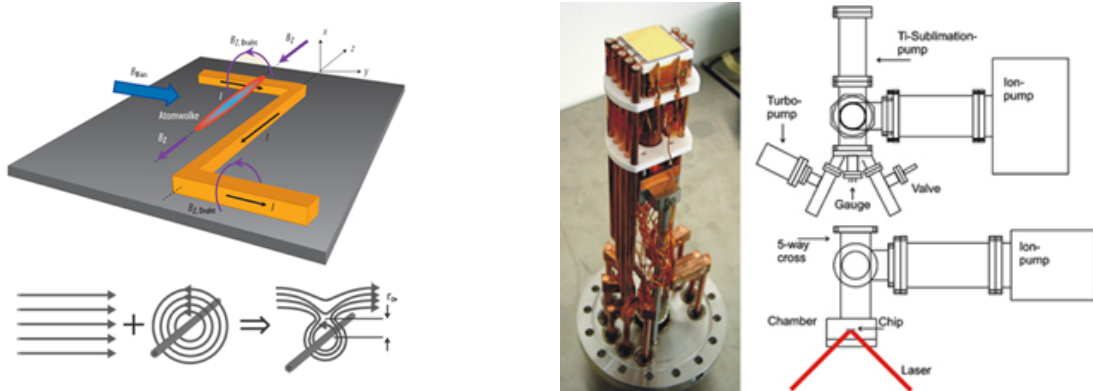


Abbildung 2.4: (a) Systemskizze Atomchip / Potentialminimum, [16] und [11] (b) Atomchip Gruppe J. Schmiedmayer, Atominstitut, TU Wien

Prinzipiell besteht ein Atomchip aus einer z-förmig gebogenen, Strom durchflossenen Leiterbahn und einem statischen, äußeren Magnetfeld B . Durch die Überlagerung des äußeren und des durch die durchflossene Leiterbahn entstandenen Magnetfeldes, entsteht im Abstand r_0 ein parallel zum Leiter laufendes Minimum in welchem sich die Gaswolke sammelt. Hierbei ist

$$r_0 = \frac{I\mu}{2\pi B}$$

mit

I ... Stromstärke im Leiter

μ ... magnetisches Moment des Teilchens

Die magnetischen Beiträge der beiden Schenkel des Leiters sorgen für die längenmäßige Begrenzung des Kondensats. Abbildung 2.4 (a) zeigt die Systemskizze eines Atomchips sowie des Potentialminimums parallel zur Leiterbahn. Zusätzlich zu diesen Bauteilen enthält ein Atomchip weitere Leiter und/oder magnetische Wechselfelder zur Manipulation des Fallenpotentials. So kann das annähernd harmonische Grundpotential zum Beispiel in ein Doppelwellenpotential umgewandelt werden, um ein Kondensat zu teilen oder Schwingungen aller Art zu induzieren. Mit Atomchips dieser Art lassen sich zigarrenförmige BECs mit einigen Millimetern Länge erzeugen. Ein Versuchsaufbau mit Systemskizze der Gruppe Prof. Dr. J. Schmiedmayer, Technische Universität Wien wird in Abbildung 2.4 (b) gezeigt.

Die Dynamik von BECs lässt sich sehr einfach mithilfe hochauflösender CCD-Kameras beobachten. So ist es bereits möglich BECs, aufgrund ihrer Sensibilität in Bezug auf Änderungen magnetischer Felder, als hochauflösende Magnetfeldsensoren einzusetzen in dem eine Kamera in kurzen Zeitintervallen den Schattenwurf des Kondensats aufzeichnet [16]. Abbildung 2.5 zeigt eine Versuchsanordnung zur Beobachtung von Interferenzmustern zweier BECs. Hierfür wird ein erzeugtes BEC durch Änderung des Fallenpotentials in zwei Teile getrennt und die Falle danach abgeschaltet. Die beiden BECs bewegen sich im freien Fall und expandieren dabei. Die bei der Überlappung erzeugte Interferenz wird wieder mit einer CCD-Kamera festgehalten.

Aktuelle Atomchips werden oft mit mehreren Lagen von Leiterbahnen für vielfältigste Manipulationsmöglichkeiten erzeugt. Forschungsziele gehen in Richtung mobiler und unempfindlicher BEC Schaltungen und Sensoren bzw. in weiterer Folge bis zur Manipulation einzelner Atome.

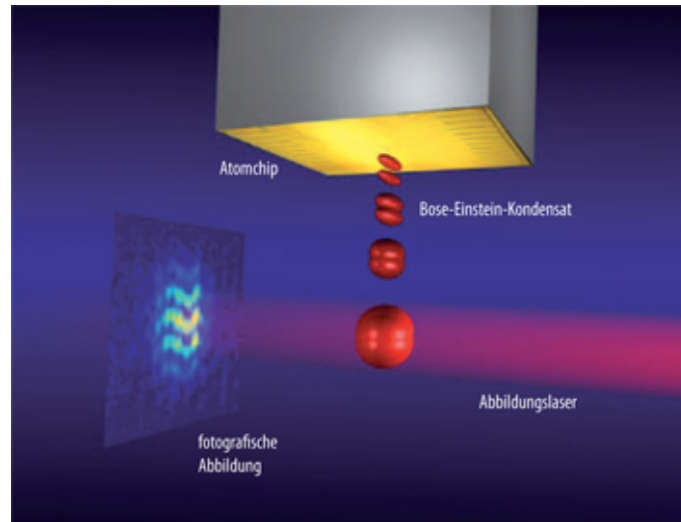


Abbildung 2.5: Interferenz von Bose-Einstein Kondensaten [16].

2.3 Gross-Pitaevskii Gleichung

Die Gross-Pitaevskii Gleichung ist eine Verallgemeinerung der Schrödinger Gleichung zur Beschreibung von BECs bei Temperaturen weit unter der kritischen Temperatur T_c , benannt nach den Physikern Eugene P. Gross und Lev P. Pitaevskii. Um die Dynamik des BEC bei veränderlichem Potential zu beschreiben, wird die zeitabhängige Gross-Pitaevskii Gleichung herangezogen:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + g|\Psi(r)|^2 \right) \Psi(r).$$

Der Faktor g kann positiv oder negativ sein und beschreibt dabei die Wechselwirkung zwischen zwei Bosonen. Er ist proportional zur Streudistanz

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}$$

mit

a ... Streudistanz der Teilchen

m ... Teilchenmasse.

Der Faktor $g|\Psi(r)|^2$ bringt einen nichtlinearen Anteil in die partielle Differentialgleichung. Für $g = 0$ entspricht die Gleichung der zeitabhängigen Schrödinger Gleichung. Im allgemeinen Fall sind Lösungen meist nicht exakt berechenbar und müssen durch numerische Verfahren approximiert werden.

Die Grundzustände werden über die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii Gleichung beschrieben:

$$\mu \Psi(r) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) + g|\Psi(r)|^2 \right) \Psi(r)$$

mit

μ ... chemische Potential

Die Gross-Pitaevskii Gleichung beschreibt BECs sehr gut bei hinreichend tiefen Temperaturen und ausreichender Teilchenzahl des Systems, wobei Effekte wie Austausch von Teilchen bei geteilten Kondensaten oder einer Fragmentierung des Kondensats nicht berücksichtigt werden.³

Alternativ zur Gross-Pitaevskii Gleichung werden zur Beschreibung von BEC heute auch Quantum Boltzmann Master Gleichungen oder Varianten der Uehling-Uhlenbeck Gleichung benutzt [5],[19].

³Für die Herleitung und Eigenschaften der Gross-Pitaevskii Gleichung siehe [13] und [12]

Kapitel 3

Methode

Die hier vorgestellte Simulation ist als Matlab-Code verfasst und wurde an den Matlab-Versionen 6.5, 2007a und 2008a getestet. Die Benennung der einzelnen Funktionen und Dateien erfolgte entsprechend den Konventionen des zu Beginn übergebenen Codes von Prof. Dr. Ulrich Hohenester. Es sind folgende Dateien beteiligt:

schroedingertimeGP3D.m Ausführbare Datei. Führt `initialize_schmiedmayer3D.m` aus und berechnet die Zeitpropagation aufbauend auf dem Grundzustand. Legt die Ausgabeform und -speicherung fest.

initialize_schmiedmayer3D.m Berechnet den Grundzustand des Systems für das Potential v bei $\lambda = 0$.

vdw_magnetic3D.m Beinhaltet function `[v, vp] = vdw_magnetic3D(lambda)`. Ruft das magnetische Potential v ab bzw. berechnet die Veränderung des Potentials vp abhängig von einem zeitabhängigen Parameter λ .

vdw_schmiedmayer3D.m Beinhaltet function `v = vdw_schmiedmayer3d(param)` und function `[bi, g, brf, det, kappa] = getparam(param)`. Berechnet das magnetische Potential v nach realen Parametern für den verwendeten Atomchip.

units.m Definiert grundlegende Einheiten und Naturkonstanten.

Für die nähere Beschreibung wird die Simulation in die drei elementaren Teile Berechnung des Grundzustandes, Durchführung der Zeitpropagation sowie Ausgabe und Speicherung der Ergebnisdaten aufgeteilt. Das letzte Unterkapitel beschäftigt sich mit dem Bedarf an Rechenzeit und Speicherplatz für die Berechnung.

3.1 Grundzustand

In der Datei `initialize_schmiedmayer3D.m` werden das räumliche und zeitliche Intervall und die Auflösung, sowie der Kopplungsfaktor g definiert.

Zur Berechnung des wechselwirkenden Grundzustands wird zuerst der Grundzustand ohne Berücksichtigung der Wechselwirkung der Teilchen untereinander, also für die klassische zeitunabhängige Schrödinger Gleichung, berechnet. Dafür wird die Matrixdarstellung des Hamiltonoperators \hat{H} mit der Dimension $N \times N$ mit $N = x_{points} \cdot y_{points} \cdot z_{points}$ aufgestellt. Ohne Wechselwirkung besteht der Hamiltonoperator aus einem kinetischen Anteil \hat{L} und einem potentiellen Anteil \hat{V}

$$\hat{H} = \hat{L} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x + \hat{V}$$

bzw. bei Benutzung von Einheiten, so dass $\hbar, m = 1$

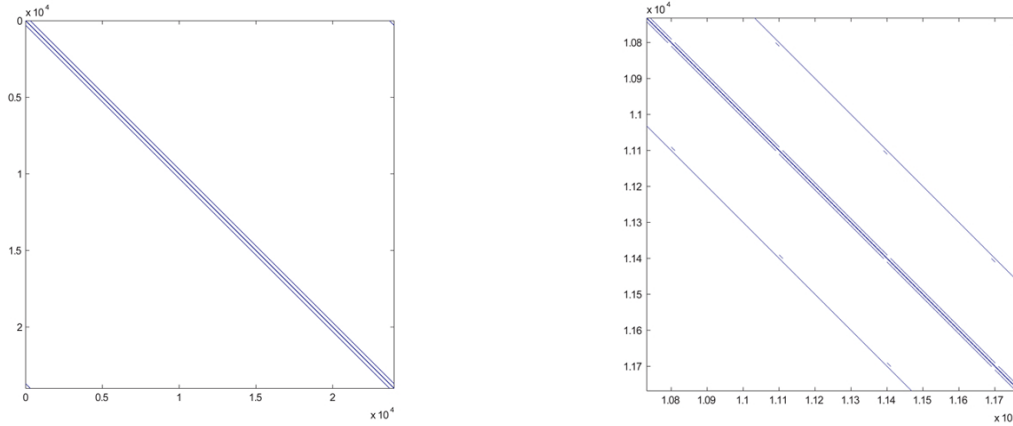


Abbildung 3.1: (a) Struktur Matrixdarstellung des Hamiltonoperators (b) Detailausschnitt im Bereich Hauptdiagonale.

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_x + \hat{V}$$

Die zweite Ortsableitung im kinetischen Anteil \hat{L} wird im 1D Fall dabei approximiert durch

$$\Delta_x \psi(x) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) \cong \frac{\psi(x - \delta x) + \psi(x + \delta x) - 2\psi(x)}{|\delta x|^2}$$

wobei die Anteile am Ort \vec{x} jeweils in der Hauptdiagonale stehen. Die Erweiterung auf den 2D und 3D Fall erfolgt dann sinngemäß. Der potentielle Anteil \hat{L} besteht aus einer Diagonalmatrix mit den Werten des Potentialfeldes \hat{V} als Einträge - $\hat{L}(i, i) = V(i)$.

Somit ergibt sich für den Hamiltonoperator \hat{H} eine Struktur mit einem Großteil Nulleinträgen (Sparse-Matrix) und Ähnlichkeiten mit einer Triagonalmatrix (siehe Abbildung 3.1).

Mit Hilfe von \hat{H} lässt sich nun der Grundzustand durch Lösung der Eigenwertgleichung

$$\hat{H}\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$$

berechnen. E sind die Eigenwerte von \hat{H} und ψ die zugehörigen Eigenvektoren. Der Eigenvektor ψ_0 zu dem algebraisch kleinstem Eigenwert ist der Grundzustand des Systems.

Aus dem nicht wechselwirkenden wird nun der wechselwirkende Grundzustand durch imaginäre Zeitpropagation errechnet. Dazu wird das in Kapitel 3.2 vorgestellte Split-Operator Verfahren für eine imaginäre Zeit $\tau = -it$ durchgeführt und dabei nach jedem Schritt auf $\int |\psi(\vec{x})|^2 d\vec{x} = 1$ normiert. ψ_0 konvergiert dabei gegen den wechselwirkenden Grundzustand. Als Abbruchkriterium für die Iteration wird hier der Absolutwert der summierten Differenz von $\psi_{0,neu} - \psi_{0,alt}$ mit einem Schwellenwert verglichen.

3.2 Zeitpropagation

Nach der Berechnung des Grundzustandes wird die Dynamik des BEC unter Veränderung des Potentialfeldes berechnet.

Bei $t = 0$ entspricht das magnetische Potential einem anharmonischen Oszillator mit einer Frequenz von ca. 2000 Hz in X- und Y-Richtung und ca. 20 Hz in Z-Richtung. Für die

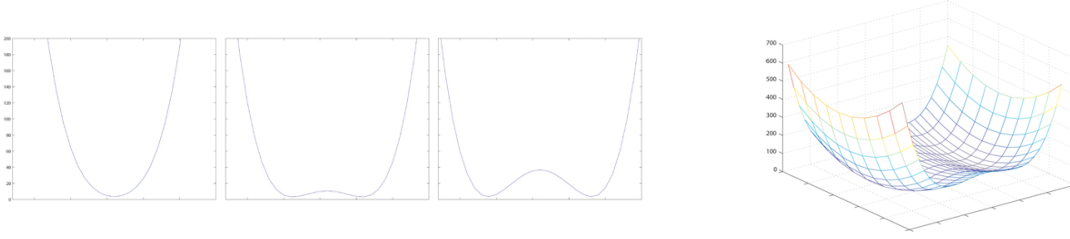


Abbildung 3.2: (a) Potential entlang X-Achse bei $\lambda = 0, 1/2, 1$ (b) Potential entlang X-,Y-Achsen bei $\lambda = 1$.

zeitliche Änderung wird ein von Lesanovsky et al. [8] vorgeschlagenes Potential, für eine Struktur aus vier, von Gleichstrom durchlossenen Drähten auf einem Atomchip, verwendet. Die Änderung des Potentials wird dabei durch einen Kontrollparameter λ gesteuert

$$B_{field} = 0.5 + \lambda \cdot G$$

wobei λ als Wurzelfunktion zwischen 0 und 1 definiert ist [7]. Abbildung 3.2 zeigt die Änderung des magnetischen Potentials von $\lambda = 0$ bis 1.

Die zeitliche Propagation der Wellenfunktion $\psi(t)$ ist gegeben durch

$$\psi(t) = e^{-i\hat{H}_w t} \psi_0$$

mit dem wechselwirkenden Hamiltonoperator \hat{H}_w

$$\hat{H}_w = \hat{L} + \hat{V} + \hat{G} = -\frac{1}{2}\Delta + \hat{V}(\lambda) + g|\psi(\vec{x})|^2$$

Für die weitere Berechnung wird in dieser Arbeit, für den potentiellen und den wechselwirkenden Anteil, ein effektives Potential $\hat{V}_{eff}(x) = \hat{V} + \hat{G} = \hat{V}(\lambda) + g|\psi(\vec{x})|^2$ eingeführt. Somit lässt sich

$$e^{-i\hat{H}_w \delta t} = e^{-i\hat{L}\delta t} e^{-i\hat{V}_{eff}\delta t} + \mathcal{O}(\delta t^2)$$

mit einem maximalen Fehler proportional zu δt^2 annähern. Damit kann man die Zeitpropagation schreiben als

$$\psi(t + \delta t) \cong e^{-i\hat{L}\delta t} e^{-i\hat{V}_{eff}\delta t} \psi(t)$$

Zur numerischen Berechnung wird der kinetische Anteil des Hamiltonoperators in seiner Impulsraumdarstellung $\hat{L}_I = \frac{k^2}{2}$ benutzt. Der Übergang von $\psi(x) \rightarrow \psi(k)$ wird dabei durch eine Fast-Fourier Transformation (FFT) erreicht. Die sich so ergebende Berechnungsform der Zeitpropagation wird *Split Operator Verfahren* genannt:

$$\psi(x, t + \delta t) = \text{IFFT} \left(e^{-i\frac{k^2}{2}\delta t} \text{FFT} \left[e^{-i\hat{V}_{eff}\delta t} \psi(x, t) \right] \right)$$

mit

k ... Wellenvektor

FFT ... Fast-Fourier Transformation

IFFT ... Inverse Fast-Fourier Transformation

Für die Berücksichtigung des nichtlinearen Anteils in \hat{V}_{eff} betrachten wir folgende zwei Eigenschaften der Wellengleichung. Da die Anteile des Hamiltonoperators aus unitären Matrizen bestehen, lässt sich die Kombination von \hat{L} und \hat{V}_{eff} alternativ auch symmetrisch aufteilen als

$$e^{-i\hat{H}\delta t} \cong e^{-i\hat{V}_{eff}\frac{\delta t}{2}} e^{-i\hat{L}\delta t} e^{-i\hat{V}_{eff}\frac{\delta t}{2}}$$

Außerdem ist die Wellengleichung zu allen Zeitpunkten t auf 1 normiert

$$\|\psi(t)\|^2 = \|\psi(t + \delta t)\|^2 = 1$$

Durch die Normierungsbedingung geht in den nichtlinearen Anteil $g|\psi_t|^2$ nur die Phase, also die zeitliche Fortschreitung von ψ_t ein. Der Betrag von $|\psi|^2$ ändert sich von Zeitschritt zu Zeitschritt nicht. Damit lässt sich die wechselwirkende Wellengleichung gut dadurch annähern, dass der wechselwirkende Term immer um einen Zeitschritt $\frac{\delta t}{2}$ versetzt berücksichtigt wird

$$e^{-i\hat{H}\delta t} \cong e^{-i\hat{V}_{eff}(t+\delta t)\frac{\delta t}{2}} e^{-i\hat{L}\delta t} e^{-i\hat{V}_{eff}(t)\frac{\delta t}{2}}$$

Zusammenfassend ergibt sich die Berechnung der Zeitpropagation damit als:

1. Starte mit $t = 0$. Definiere \hat{L} mit Schrittweite δt und \hat{V}_{eff} mit Schrittweite $\frac{\delta t}{2}$.
2. Berechne $\psi(t + \delta t) = \text{IFFT} \left(\hat{L}(t) \text{FFT} \left[\hat{V}_{eff}(t)\psi(t) \right] \right)$.
3. Bestimme $\hat{V}_{eff}(t + \delta t)$ mit Hilfe von $g|\psi(t + \delta t)|^2$.
4. Aktualisiere $\psi(t + \delta t) = \hat{V}_{eff}(t + \delta t) \psi(t + \delta t)$.
5. Setze $t = t + \delta t$. Gehe zu Punkt 2.

3.3 Ausgabe

In `schroedingertimeGP3D.m` sind drei mögliche Ausgabearten vordefiniert. Es kann zwischen einem 2D-Plot normal auf die X-, Y- oder Z-Achse mittels `imagesc`, einem entlang definierter Ebenen geschnittenen 3D-Plot mittels `splice` oder einem 3D-Plot von Isooberflächen mittels `isosurface` gewählt werden. Alle Ausgaben sind auf dem Bildschirm und wahlweise in eine `.avi` Datei möglich.

Es ist für alle Ausgabearten ratsam als erstes die Auflösung entlang aller drei Achsen zu bestimmen. Die gewählte Auflösung bestimmt maßgeblich die dabei benötigten Ressourcen (siehe dazu Kapitel 3.4). Für einen 2D-Plot in X- und Y-Richtung ist zum Beispiel eine deutliche geringere Auflösung entlang der Z-Achse notwendig als für einen Plot in X- und Z-Richtung oder einer 3D Isooberfläche. Die Festlegung der Auflösung erfolgt in der Datei `initialize_schmiedmayer3D.m`.

Generell ist für alle Ausgabearten das Plotten von $\sqrt{|\psi|}$ voreingestellt. Dies wurde von dem übergebenen Code (siehe dazu Kapitel 1) beibehalten und ermöglicht eine deutliche Darstellung von Veränderungen. Für die Ausgabe von ψ , oder wie oft üblich $|\psi|^2$ sind die jeweiligen Plot-Befehle entsprechend zu ändern.

Für einen 2D-Plot muss für die Variablen `psi0_draw` und `psit_draw` die Achse normal zur Schnittebene sowie die Lage der Schnittebene auf dieser Achse (Tiefe) definiert werden. Des weiteren sollte die Fenstergröße dem definierten Wertebereich der geplotteten

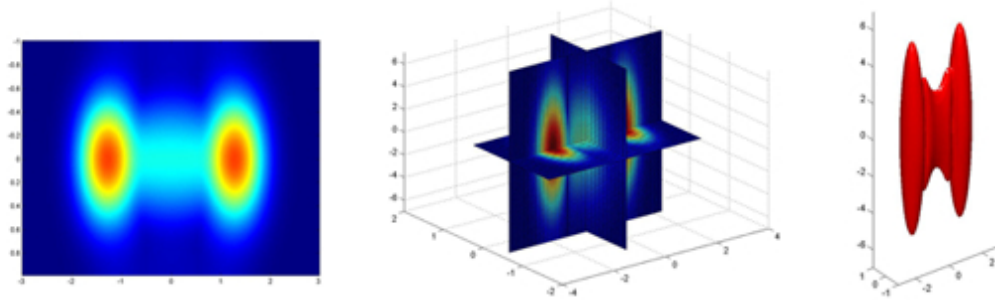


Abbildung 3.3: Drei Ausgabearten des selben Bose-Einstein Kondensates. (a) 2D-Plot normal auf die Z-Achse bei $z_{max}/2$, (b) 3D-Plot geschnitten in $\langle 0.35|0.35|0.35 \rangle$ und (c) Isooberfläche für $\sqrt{|\psi|} = 0.25$.

Raumrichtungen angepasst werden. Der Farbbereich ist standardmäßig für den Wertebereich von 0 bis zum 1.1fachen des maximalen Absolutwertes von ψ_0 definiert. Für den Vergleich zweier BECs mit unterschiedlichen Verteilungen des Grundzustands sollte der Wertebereich unabhängig von ψ_0 festgelegt werden.

Bei einem 3D-Plot entlang geschnittener Ebenen sind vor allem die Schnittebenen sowie die Plotgrenzen festzulegen. Das Definieren der Ebenen erfolgt direkt im `plot` Befehl, wobei auch das Festlegen mehrerer, paralleler Ebenen normal zu jeder der drei Achsen möglich ist.

Das Erzeugen einer Isooberfläche erfolgt über den Umweg eines `patch`. Neben dem Festlegen diverser grafischer Parameter für die Oberflächenfarbe, Kantenform, Lichtposition, usw. ist hier nur der gewünschte Absolutwert von $\sqrt{|\psi|}$, für den die Oberfläche gezogen werden soll, anzugeben.

Abbildung 3.3 zeigt ein BEC zu einem gegebenen Zeitpunkt t auf drei unterschiedliche Ausgabearten.

Für das Ausgeben eines Filmes in eine `.avi` Datei ist nur das Kommentarzeichen `%` vor der `movie2avi` Zeile zu entfernen und der gewünschte Dateiname innerhalb der Anführungsstriche einzugeben. Eine Komprimierung mittels dem `cinpack`-Packets ist voreingestellt.

3.4 Ressourcenbedarf

Der Bedarf an Arbeitszeit sowie an Haupt- und Arbeitsspeicher wird fast ausnahmslos von der gewählten Auflösung in X-, Y- und Z-Richtung bzw. einer eventuellen Aufzeichnung als Video bestimmt. Die Ausgabeart spielt dagegen kaum eine Rolle.

Für den maximalen Speicherbedarf sind hauptsächlich die drei Variablen `ham`, `hamkin` und `lap` verantwortlich. Es handelt sich dabei um Sparse-Matrizen mit double Einträgen (siehe dazu auch Kapitel 3.1). Die quadratischen Matrizen haben die Dimension $N \times N$ mit $N = x_{points} \cdot y_{points} \cdot z_{points}$ mit $3N$ Einträge ungleich 0. Bei einer vergleichsweise niedrigen Auflösung von $x_{points} = 30$, $y_{points} = 10$ und $z_{points} = 80$ ergeben sich damit Sparse-Matrizen mit einer Dimension von $N \times N = 24\,000 \times 24\,000$ und 72 000 spezifischen Einträgen. Als Speicherbedarf bedeutet dies ca. 2.4 Mb je Matrix. Als Berechnungsraum ist eine Box mit $x_{box} = \pm 3$, $y_{box} = \pm 1$ und $z_{box} = \pm 8$ vordefiniert. Bei einer Auflösung von $x_{points} = 60$, $y_{points} = 20$ und $z_{points} = 160$ beträgt N bereits 192 000 und bei einer für einen besseren 2D-Plot geeigneten Auflösung von zum Beispiel $x_{points} = 300$, $y_{points} = 100$ und $z_{points} = 20$ ergibt sich N bereits zu 600 000 mit 1 200 000 spezifischen Einträgen mit

rund 40 Mb je Matrix.

Für eine gewünschte Speicherung eines .avi Film ist das Aufzeichnen aller notwendigen Daten in einem **Struct Array** notwendig. Die Größe dieser Variabel ist von der Laufzeit (vordefiniert sind 250 Zeitschritte) und dem Ausgabeformat abhängig. Bei großen Formaten oder längeren Aufzeichnungen kann die maßgebende Variabel **F** eine Größe von einigen hundert Megabyte erreichen.

Der Bedarf an Rechenzeit bzw. Prozessorleistung wird zu einem Großteil durch die Berechnung des Grundzustands bestimmt. Dieser benötigt durch die notwendige Berechnung der Eigenwerte des Hamiltonoperators **ham** rund 60 – 70% der gesamten Prozessorleistung. Daher ist es ratsam, für die Berechnung verschiedener Zeitpropagationen (zum Beispiel durch unterschiedliche Verläufe von λ) oder alternativer Ausgabeformen, einmal das vollständige Programm zu starten und in Folge den bereits berechneten Grundzustand ψ_0 wieder zu benutzen. Dies lässt sich einfach durch das Entfernen des Aufrufs der Datei `initialize_schmiedmayer3D.m` erreichen.

Die Berechnung der Zeitpropagation samt Ausgabe der Grafik erfolgt selbst bei hohen Auflösungen meist rasch genug, um die Dynamik am Bildschirm direkt mitverfolgen zu können. Auf einem PC mit Intel Core2 Duo 2.4 GHz Prozessor benötigt, bei $x_{points} = 30$, $y_{points} = 10$ und $z_{points} = 80$, die Berechnung des Grundzustandes ca. 17 s und die grafische Ausgabe ca. 5 s. Bei $x_{points} = 60$, $y_{points} = 20$ und $z_{points} = 160$ werden für den Grundzustand ca. 112 s und für die Ausgabe ca. 43 s benötigt.

Kapitel 4

Ergebnisse

In diesem Kapitel werden einige ausgewählte Ergebnisse des im Rahmen dieser Bakkalaureatsarbeit vorgestellten Matlab Programmes, gezeigt. Die entsprechenden Filme im .avi Format sind auf der beiliegenden CD zu finden. Für einige Ergebnisse wurde das Programm um zusätzliche Ausgabearten oder Berechnungsmodis erweitert. Die meisten dieser Erweiterungen liegen ebenfalls auf der beiliegenden CD vor.

4.1 Einfluss Kopplungsfaktor g

Der Kopplungsfaktor g beschreibt die Stärke der interpartikularen Wechselwirkung des BEC. Positive Kopplungsfaktoren $g > 0$ erzeugen dabei eine repulsive, negative $g < 0$ eine anziehende Wechselwirkung. Bei $g = 0$ entfällt die Wechselwirkung und die Gross-Pitaevskii Gleichung wird zur linearen Schrödinger Gleichung.

Mit zunehmender Stärke von g zeigt das BEC vermehrt ein pulsierendes Verhalten. Das Kondensat beginnt im Ausgleich zwischen der abstoßenden Wechselwirkung und dem externen Potential leicht zu schwingen. Abbildung 4.1 zeigt vergleichend je sechs Schnittbilder in der X-Y Achse bei $z = z_{max}/2$ mit $g = 0$ und $g = 10$. Beide Reihen beginnen hier bei $t = 1$ mit demselben (nicht wechselwirkenden) Grundzustand. Die Wechselwirkung nimmt damit erst durch die Zeitpropagation Einfluss. Für die zeitliche Entwicklung wird die in Kapitel 3.2 beschriebene Veränderung des anharmonischen Ausgangspotentials in ein Doppelwellenpotential benutzt. Die Veränderung von $\lambda = 0$ bis 1 ist dabei in 25 Zeitschritte t geteilt, wovon die ersten 11 hier dargestellt werden.

In Zeitschritt $t = 3$ lässt sich bei $g = 10$ beispielhaft gut die größere Ausdehnung des BEC entlang der Y-Achse erkennen. Im Laufe der Simulation unterliegt das BEC einer in der X- und Y-Achse jeweils abwechselnden Expansion bzw. Kontraktion. Generell zeigt das BEC mit stärkerem Kopplungsfaktor eine geringere Lokalisierung in Zentrum, was leicht durch die größere innere Abstoßung erklärbar ist.

Bei negativen Kopplungsfaktoren ist das BEC stark lokalisiert und die Schwingungen durch Teilung des Kondensats werden stark gedämpft. Ein Pulsieren wie bei positiven Kopplungsfaktoren kann nicht beobachtet werden.

4.2 Wechselwirkender Grundzustand

Bei Berücksichtigung der Wechselwirkung für die Berechnung des Grundzustandes, zeigen sich einige der im vorhergehenden Kapitel beschriebenen Eigenschaften qualitativ bereits bei ψ_0 .

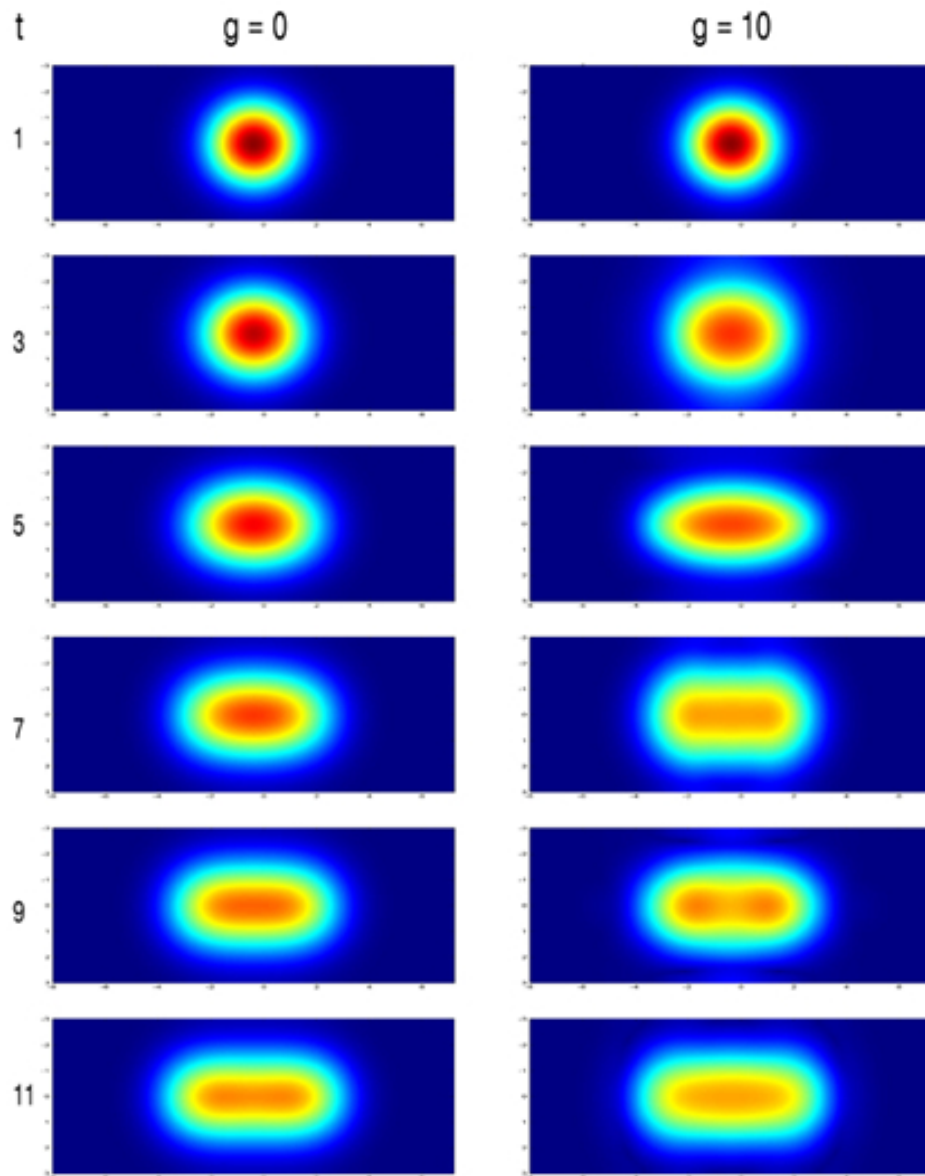


Abbildung 4.1: Schnittbilder der X-Y Achse mit $g = 0$ bzw. $g = 10$ bei Zwischenstufen von $t_{\lambda=0} = 1$ und $t_{\lambda=1} = 25$.

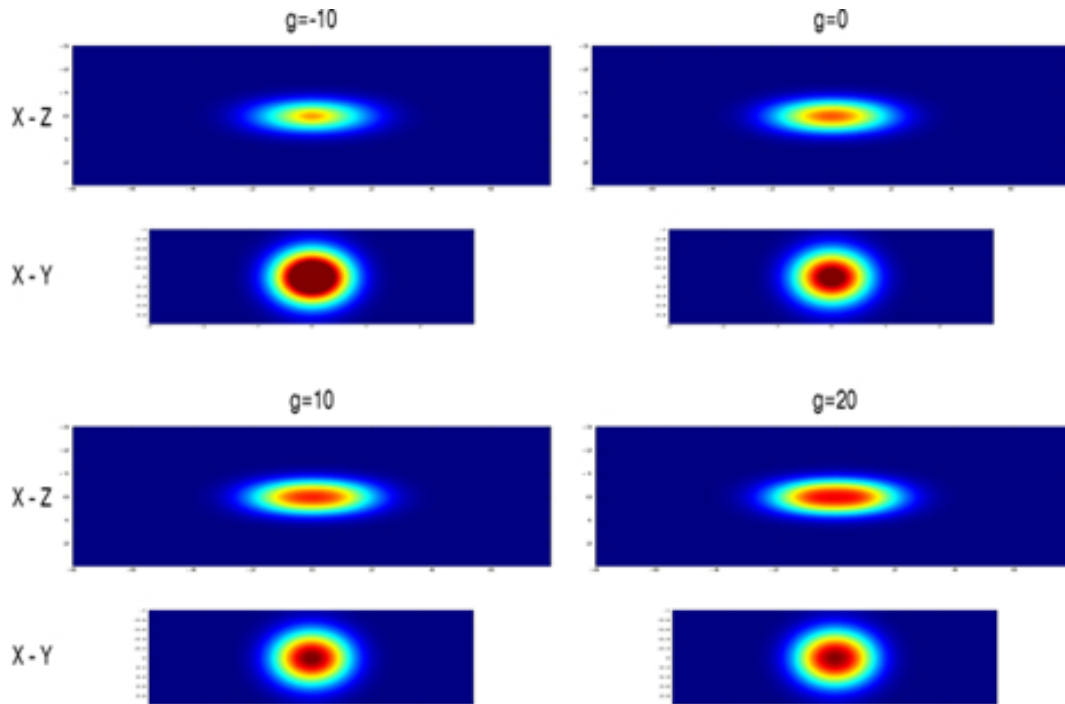


Abbildung 4.2: Schnittbilder der X-Y und X-Z Achsen mit $g = -10$, $g = 0$, $g = 10$ und $g = 20$ bei $t = 1$ (ohne einheitlichen Maßstab).

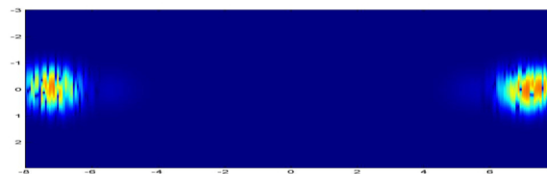


Abbildung 4.3: Schnittbild der X-Z Achse bei $g = 10$ mit numerischem Fehler nach ca. 500 imaginären Zeititerationen.

In Abbildung 4.2 sind vier wechselwirkende Grundzustände mit unterschiedlichem Kopplungsfaktor jeweils als 2D Plot der X-Y und der X-Z Achsen gezeigt. Die Fallenfrequenz in Z-Richtung beträgt hier 300 Hz. Auffällig ist die mit steigendem Kopplungsfaktor stetig abnehmende Fläche sehr hoher Wellenzahlen ψ bei ungefähr konstantem, erkennbarem Gesamtausmaß des BEC in den X-Y Schnitten. Bei den X-Z Schnitten lässt sich eine entgegengesetzte Tendenz erkennen. Das BEC ist durch die Anordnung des Fallenpotentials in X- und Y-Richtung ca. sieben mal so stark gefangen wie in Z-Richtung. Dadurch erfährt das Kondensat bei stark repulsiver Wechselwirkung in Z-Richtung weniger Widerstand und breitet sich entsprechend leichter aus als in X- oder Y-Richtung.

Bei der Berechnung des wechselwirkenden Grundzustandes durch imaginäre Zeitpropagation kommt es durch die in jedem Zeitschritt stattfindenden Massenverluste und die notwendige Normierung zu einem numerischen Fehler. Bei zu häufiger Iteration kommt es vor allem in Z-Richtung zu einer ungewünschten Aufspaltung des Kondensats. Dieser Effekt muss noch genauer untersucht werden. Abbildung 4.3 zeigt einen Schnitt entlang der X-Z Achsen nach ca. 500 Iterationen bei hoher Auflösung.

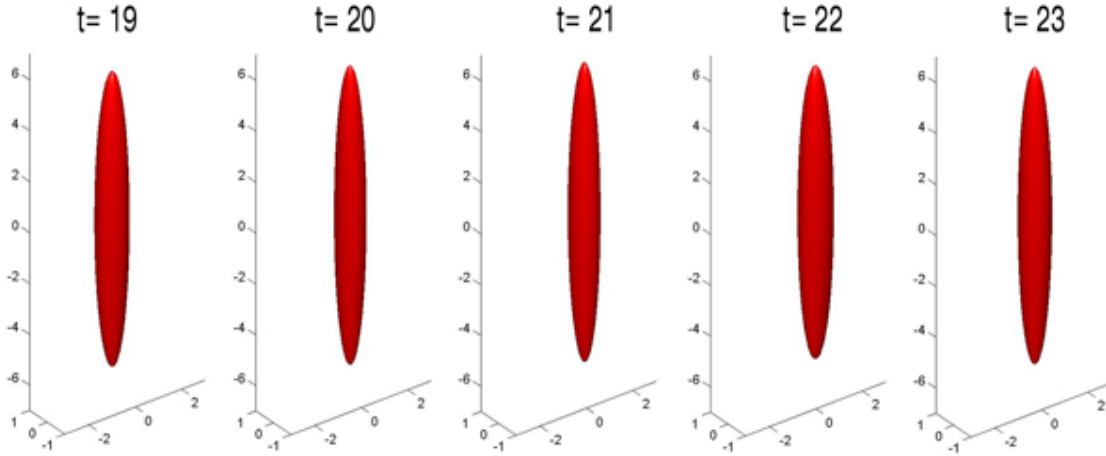


Abbildung 4.4: Isooberfläche von $\sqrt{|\psi|} = 0.25$ bei periodischer Auslenkung, $g = 10$.

4.3 Schwingende BECs

Zur Betrachtung unterschiedlich schwingender BECs werden konstante Potentialfelder entlang verschiedener Achsen dynamisch verschoben. In allen Fällen dient ein harmonisches Potential mit $\omega_x = \omega_y = 2000$ Hz und $\omega_z = 20$ Hz bei einem Betrachtungsraum von $X = \{-3 \dots +3\}$, $Y = \{-1 \dots +1\}$ und $Z = \{-8 \dots +8\}$ als Grundlage.

Durch die Verschiebung des Potentialfeldes beschleunigt das BEC in Richtung des negativen Gradienten bis es nach Überschreitung des Potentialminimums wieder gebremst wird und schließlich umkehrt. Bei dieser Schwingung kommt es zu Verformungen des Kondensats, auch in Richtungen normal zur Bewegungsbahn.

Abbildung 4.4 zeigt Isooberflächen von $\sqrt{|\psi|} = 0.25$ einer periodischen Auslenkung. Das Potentialminimum bei $t = 1$ befindet sich im Ursprung. Entlang der X-Achse wird das Potentialfeld folgend in 50 Zeitschritten t um $\text{exz}_x = r \cdot \sin(\nu)$ mit $r = 0.40$ und $\nu = \{0 \dots 4\pi\}$ verschoben. Das BEC folgt dem Potentialminimum immer hinterher, so dass es, je nach gewählter Geschwindigkeit der Sinusschwingung, teilweise das Minimum in gegenläufiger Bewegung kreuzt. Dadurch entsteht ab gewählten 4π , also zwei kompletten Sinusschwingungen, bei dem gewählten Potentialfeld kein regelmäßig schwingendes Kondensat. Die dadurch entstehenden Beschleunigungswege sind somit vergleichsweise kurz und die Verformungen relativ gering. Die gezeigten Ausschnitte zeigen die Verformungen des Kondensats während der Verzögerung und dem neu beschleunigen in die entgegengesetzte Richtung zirka zur Hälfte der simulierten Zeitspanne. Es lässt sich gut erkennen, dass das BEC in relativ symmetrischer und gedrungener Form von $x = 0$ kommt und bis ca. $x = 1$ schwingt und dabei verzögert. Dort, bei $t = 21$, verjüngt sich die Form, in X-Richtung stärker als in Y-Richtung und wächst in Z-Richtung an. Bei dem darauf folgenden Rückschwingen in Richtung $x = 0$ verformt es sich wieder annähernd zurück.

Während bei $g = 0$ die Expansion und Reduktion in einer Richtung ähnlich schnell erfolgt, beschleunigen bzw. verzögern hohe Kopplungsfaktoren je nach Vorzeichen eine der beiden Bewegungen. Bei zu hoher Geschwindigkeit der Sinusschwingung, also bei zu vielen Schwingungen je Zeiteinheit, kann das BEC dem Potentialminimum nicht mehr entsprechend nachfolgen und in der Simulation beginnt das Kondensat ab ca. 8π zu zerfließen.

In Abbildung 4.5 sind Isooberflächen bei einmaliger Auslenkung des BEC abgebildet. Bei $t = 1$ und bei der Berechnung des Grundzustandes liegt hier das Potentialminimum bei $(-1, 0, 0)$ und bleibt ab $t = 2$ konstant im Ursprung. Das BEC schwingt damit zwischen

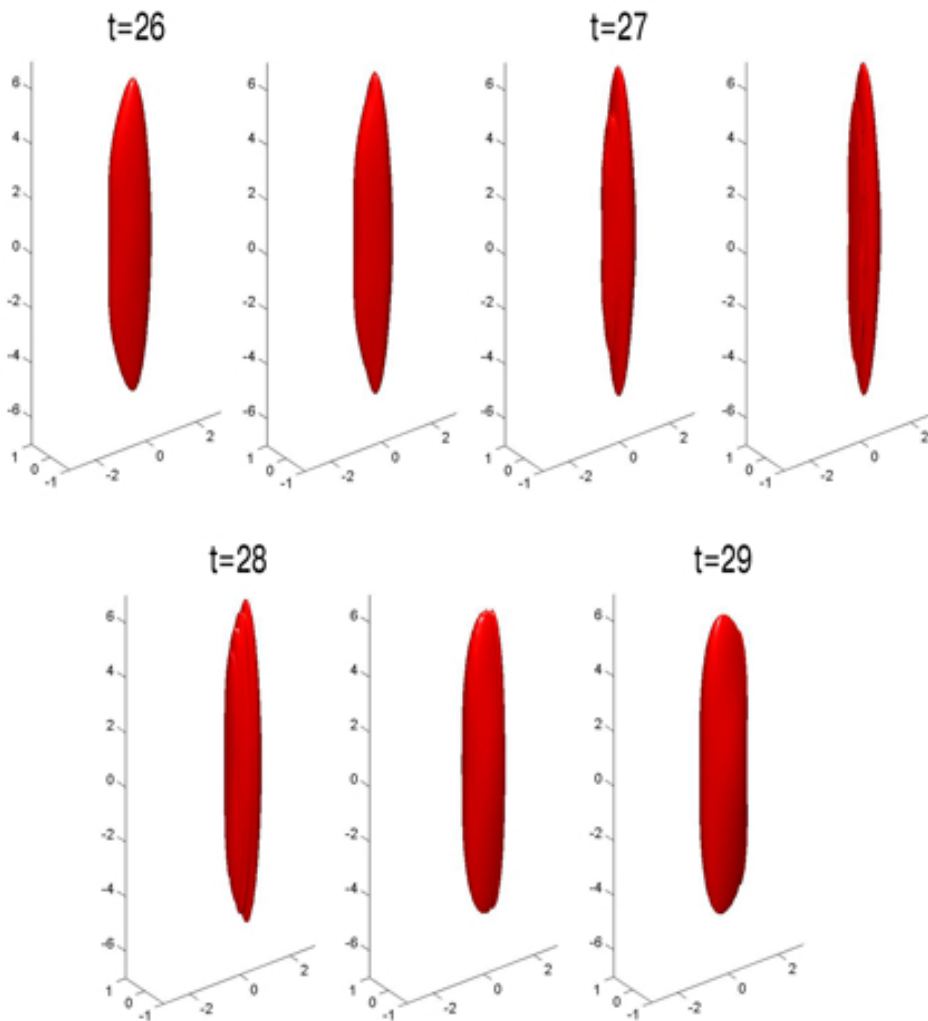


Abbildung 4.5: Isooberfläche von $\sqrt{|\psi|} = 0.25$ bei einmaliger Auslenkung, $g = 10$.

$X = -1$ und $X = +1$ regelmäßig, symmetrisch um den Nullpunkt. Durch den langen Weg und die hohe Beschleunigung finden hier wesentlich stärkere Deformationen statt als beim ersten Schwingungsbeispiel. Ab einer anfänglichen Ausmitte größer 1.50 erfährt das BEC eine so starke Ausdehnung in eine Dimension, dass der gewählte Beobachtungsraum nicht ausreicht es vollständig darzustellen bzw. versagt die Simulation aufgrund der periodischen Randbedingungen.

Bei langer Beobachtungsdauer bleibt bei jeder Schwingung ein etwas größerer Teil des BEC näher beim Nullpunkt zurück, bis das Kondensat über den Bereich aufgeteilt ist und ein immer geringerer Teil innerhalb des Kondensats schwingt. Ein niedriger oder negativer Kopplungsfaktor beschleunigt diesen Prozess, während ein hoher, positiver Faktor ihm entgegen wirkt.

4.4 Änderung in Z-Achse

In Kapitel 4.3 wurden Schwingungen entlang der Z-Achse beobachtet, welche durch Anregungen entlang der X- oder Y-Achse entstanden sind. Diese Schwingungen können in Isooberflächen oder Splices nur ungefähr geschätzt werden oder bei einem 2D Plot in der

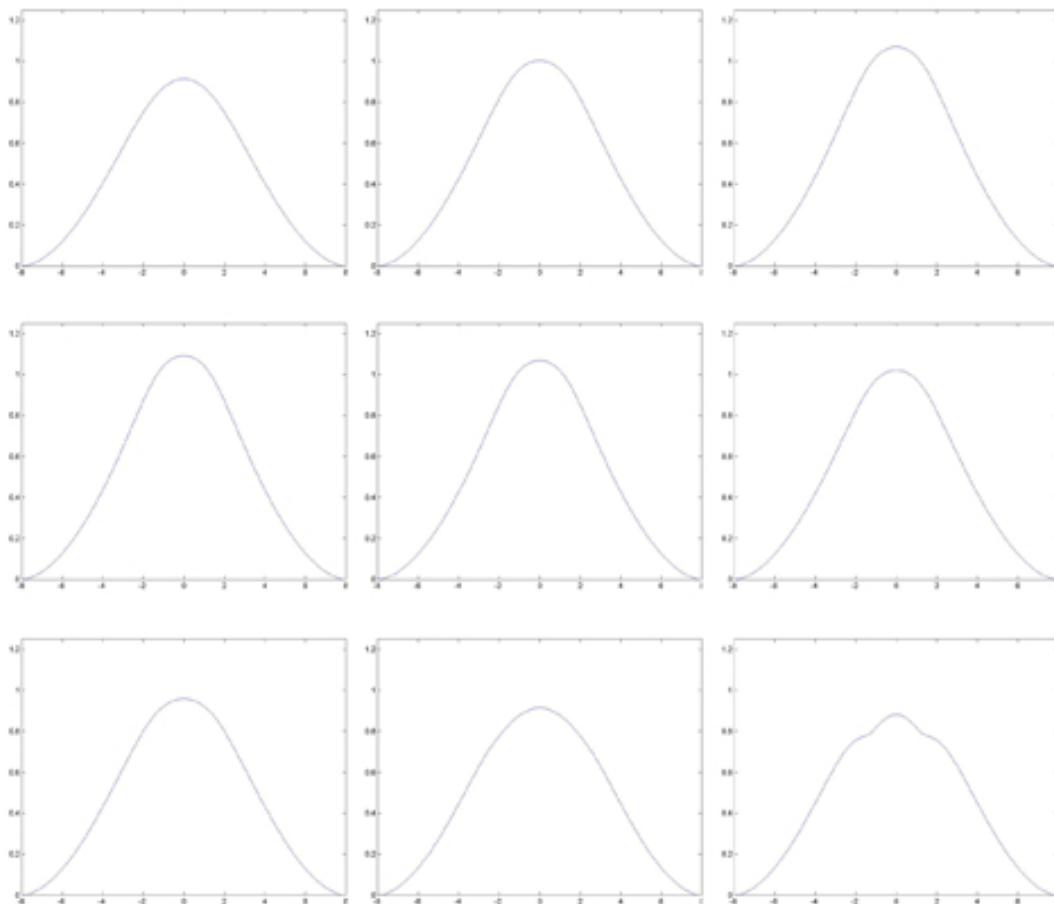


Abbildung 4.6: Integral über die X- und Y-Achse gegen Z Aufgetragen. Schwingung bei einmaliger Auslenkung, $g = 10$.

X-Z oder Y-Z Achse nur an einem Schnittbild erkannt werden.

Für eine exaktere Beurteilung des Verhaltens entlang einer Achse ist es sinnvoll zum Beispiel die Summe S_{XY} über die X- und Y-Achse gegen Z aufzutragen. Hierbei ist

$$S_{XY}(z) = \int \int_{-y,-x}^{+y,+x} \psi(x, y, z) \, dx \, dy$$

Abbildung 4.6 zeigt eine entsprechende Grafik für die im vorigen Kapitel vorgestellte Schwingung mit einmaliger Auslenkung. Die Veränderungen entlang der Z-Achse nehmen hier mit fortlaufender Zeit stetig zu. In der Abbildung ist gut zu erkennen, dass die stärksten Veränderungen nahe bei $Z=0$ stattfinden. Ab $|Z| > 4$ sind nur mehr unwesentliche Veränderungen zu erkennen. Es wird darauf hingewiesen, dass hier, wie in allen zuvor gezeigten Grafiken, immer $\sqrt{|\psi|}$ geplottet wird. Bei einer Darstellung von $|\psi|$ oder $|\psi|^2$ würden sich die Veränderungen entsprechend weniger stark zeigen.

Für das in Kapitel 3.2 vorgestellte Doppelwellenpotential entspricht die Grafik jener der hier gezeigten Schwingung, jedoch als glatte Kurve ohne die hier beobachteten, kleineren Störungen. Das Ergebnis ähnelt einem halben Kosinusbogen mit wechselnder Amplitude.

4.5 Vergleich 1D, 2D, 3D

Grundlage für die Entwicklung der hier vorgestellten BEC Simulation in 3D, war ein 2D Programm von Prof. Dr. Ulrich Hohenester, Karl-Franzens Universität Graz (siehe dazu Kapitel 1). Da es in der 3D Version möglich ist 2D Schnittbilder zu plotten, können die Ergebnisse der beiden Simulationen sehr einfach verglichen werden. Zusätzlich wurde eine, auf der selben Berechnungsart aufbauende, 1D Version der Simulation erstellt.

Abbildung 4.7 zeigt vergleichend die 2D (bzw. 1D) Plots bei Anwendung des in Kapitel 3.2 beschriebenen Doppelwellenpotentials mit Kopplungsfaktor $g = 10$ und nicht wechselwirkendem Grundzustand. Durch die unterschiedliche Anzahl an Dimensionen ist der Kopplungsfaktor der Simulationen jedoch nicht exakt zu vergleichen. Generell zeigt sich eine gute Übereinstimmung. Die unterschiedliche Farbskalierung rührt hier von der absoluten Definition des maximalen Farbwertes. Üblicherweise ist der Maximalwert jeweils mit $1.10 \cdot \max(|\psi_0|)$ festgelegt. Zum besseren Vergleich der Absolutwerte ist hier der auf diese Art berechnete Maximalwert der 2D Simulation auch als Fixwert in der 3D Simulation benutzt worden. In der 3D Simulation treten also tendenziell höhere Absolutwerte auf als bei der 2D Simulation.

Auffallend ist, dass sich hohe positive oder negative Kopplungsfaktoren stärker auswirken je weniger Dimensionen die Simulationen berücksichtigt. Bei weniger Dimensionen gibt es weniger Richtungen in denen kurzfristige Verformungen entlang einer Achse ausgeglichen werden können. Die notwendige Deformation entlang der verbleibenden Dimensionen steigt entsprechend. Dies ist sehr gut in den zugehörigen Videos der beiliegenden CD zu erkennen.

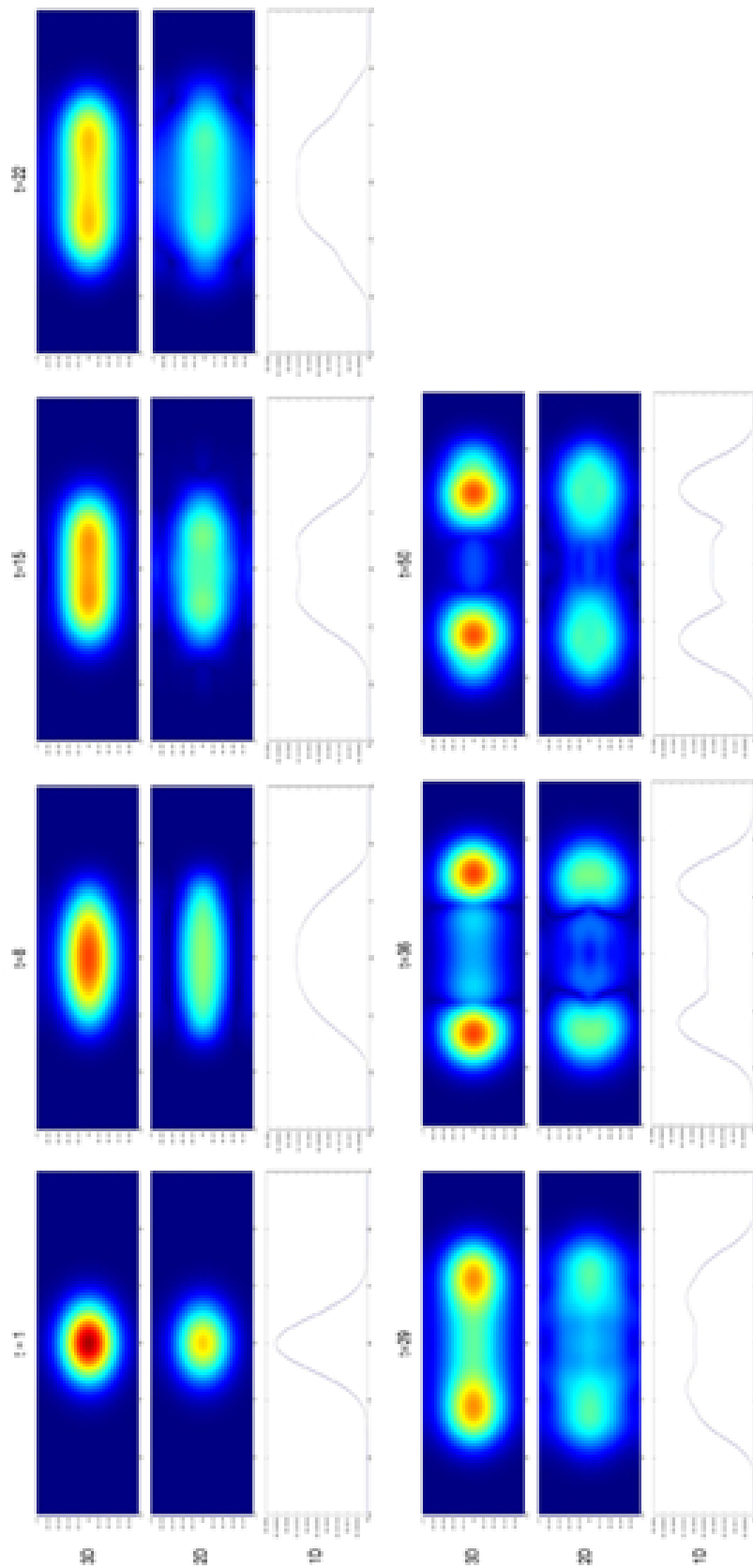


Abbildung 4.7: Vergleich von Schnittbildern in der X-Y Achse (bzw. X-Achse) bei 3D, 2D und 1D Berechnung, $g = 10$.

Kapitel 5

Conclusio

Ziel dieser Bakkalaureatsarbeit ist das Programmieren einer drei dimensional Simulation von Bose-Einstein Kondensaten mittels der Gross-Pitaevskii Gleichung in Matlab. Das Programm baut auf einer, mit kleineren Einschränkungen, funktionsfähigen zwei dimensional Simulation auf. Die Lösung der Gross-Pitaevskii Gleichung erfolgt dabei durch ein *Split Operator Verfahren*. Die Simulation soll für weitere Projekte der Gruppe *AtomChip* um Herrn Prof. Dr. J. Schmiedmayer verwendet werden, weshalb als dynamisches Potential meist ein von der Gruppe vorgegebenes Doppelwellenpotential benutzt wird.

Da zur Evaluierung der Korrektheit der Ergebnisse keine experimentellen Daten zur Verfügung stehen, dient diesbezüglich ein Vergleich mit der ursprünglichen, zwei dimensional Simulation sowie mit den grundsätzlichen physikalischen Erwartungen über das Verhalten des BEC. Ein Teil dieser gezogenen Vergleiche sind in Kapitel 4 vorgestellt.

Am einfachsten zu beurteilen ist der in Kapitel 4.5 gezeigte Vergleich mit der zwei- und der zusätzlich programmierten ein-dimensionalen Simulation. Grundsätzlich zeigt sich hier eine sehr gute Übereinstimmung der dynamischen Entwicklung aller drei Systeme. Die variierenden Absolutwerte und der ungleich starke Einfluss der Kupplungskonstante lassen sich dabei gut durch die zusätzlichen räumlichen Ausgleichsmöglichkeiten durch jede weitere, zur Verfügung stehende Dimension erklären. Dies steht im Einklang mit der Beobachtung, dass sich selbst bei kleinen Schwingungen, wie sie durch die Teilung des Kondensats in dem gegebenen Doppelwellenpotential auftritt, eine leichte Anregung entlang der Z-Achse zeigt (siehe Kapitel 4.4).

Die Beurteilung an Hand der physikalischen Erwartungen ist schwieriger. Der Einfluss der Kupplungskonstante, sowie die Veränderungen durch die neu hinzu programmierte Möglichkeit die Wechselwirkung in der Berechnung des Grundzustandes zu berücksichtigen, stimmen gut mit den theoretischen Annahmen überein. Auch das Verhalten bei stärkeren Schwingungen und großen Beschleunigungen entspricht den Erwartungen (siehe Kapitel 4.1, 4.2 und 4.3). Eine kleine Unsicherheit besteht bei der Änderung der räumlichen Ausdehnung in Z-Richtung zwischen wechselwirkendem und nicht wechselwirkendem Grundzustand bei hoher Kupplungskonstante und Potentialfeldern mit sehr geringer Fallenfrequenz in Z-Richtung. Hier kann es bei extremen Werten und positivem Kupplungsfaktor zur Aufteilung des Kondensates in Z-Richtung kommen. Eine entsprechende experimentelle Überprüfung wäre hier sehr interessant.

Alles in allem scheint die Simulation gut zu entsprechen und Ergebnisse in Übereinstimmung mit dem bereits bewährten 2D Programm zu zeigen. Die letzte Bestätigung kann jedoch erst durch den Vergleich mit experimentellen Messdaten erfolgen.

Für die sinnvolle Anwendung mit akzeptablen Auflösung ist unbedingt eine sehr gute Hardware mit großem Hauptspeicher erforderlich. Die Anforderungen an das System, vor

allem für die Berechnung des Grundzustandes durch die Bestimmung der Eigenwerte einer Matrix mit mehreren Milliarden Einträgen bereits bei einer mittleren Auflösung, sind enorm. Die fertige Simulation mit diversen Anpassungen an die in Kapitel 4 vorgestellten Situationen ist auf der Daten CD enthalten. Das Anpassen an die jeweiligen Problemstellungen kann größten teils durch auskommentieren bzw. aktiv setzen fertig vorhandener und auskommentierter Befehlszeilen erfolgen.

Anhang A

Inhalt CD

Auf der beiliegenden Daten CD ist diese Bakkalaureatsarbeit im .pdf Format sowie alle für die hier präsentierten Ergebnisse benötigten Matlab-Codes enthalten. Zusätzlich sind in den Verzeichnissen `Demo Bilder` und `Demo Videos` diverse Ausgaben der benutzten Simulationen im .jpg und .avi Format gespeichert.

Die Matlab-Codes sind auf mehrere Verzeichnisse aufgeteilt, wobei folgender Zusammenhang besteht:

Kapitel 4.1 ...Matlab\Standard - GP3D
Kapitel 4.2 ...Matlab>Wechselwirkender Grundzustand
Kapitel 4.3 ...Matlab\Schwingungen - periodische Auslenkung
Kapitel 4.3 ...Matlab\Schwingungen - einmalige Auslenkung
Kapitel 4.4 ...Matlab\Summe über 2 Achsen
Kapitel 4.5 ...Matlab\Vergleich 1D, 2D, 3D

Abbildungsverzeichnis

2.1	(a) Wettkampf um die erste Erzeugung eines Bose-Einstein Kondensates, (b) Apparatur des erfolgreichen Experiments, Gruppe MIT - W. Ketterle. . .	3
2.2	A. Einstein, S.N. Bose, E. Cornell, C. Wiemann, W.Ketterle (von links nach rechts)	4
2.3	(a) Bose-Einstein Kondensat aus Rubidium-87 Gas (b) Anschauliche Bedeutung der kritischen Temperatur T_c , Bilder von Gruppe Alkali Quantum Gases, MIT.	6
2.4	(a) Systemskizze Atomchip / Potentialminimum, [16] und [11] (b) Atomchip Gruppe J. Schmiedmayer, Atominstitut, TU Wien	7
2.5	Interferenz von Bose-Einstein Kondensaten [16].	8
3.1	(a) Struktur Matrixdarstellung des Hamiltonoperators (b) Detailausschnitt im Bereich Hauptdiagonale.	11
3.2	(a) Potential entlang X-Achse bei $\lambda = 0, 1/2, 1$ (b) Potential entlang X-,Y-Achsen bei $\lambda = 1$	12
3.3	Drei Ausgabearten des selben Bose-Einstein Kondensates. (a) 2D-Plot normal auf die Z-Achse bei $z_{max}/2$, (b) 3D-Plot geschnitten in $(0.35 0.35 0.35)$ und (c) Isooberfläche für $\sqrt{ \psi } = 0.25$	14
4.1	Schnittbilder der X-Y Achse mit $g = 0$ bzw. $g = 10$ bei Zwischenstufen von $t_{\lambda=0} = 1$ und $t_{\lambda=1} = 25$	17
4.2	Schnittbilder der X-Y und X-Z Achsen mit $g = -10, g = 0, g = 10$ und $g = 20$ bei $t = 1$ (ohne einheitlichen Maßstab).	18
4.3	Schnittbild der X-Z Achse bei $g = 10$ mit numerischem Fehler nach ca. 500 imaginären Zeititerationen.	18
4.4	Isooberfläche von $\sqrt{ \psi } = 0.25$ bei periodischer Auslenkung, $g = 10$	19
4.5	Isooberfläche von $\sqrt{ \psi } = 0.25$ bei einmaliger Auslenkung, $g = 10$	20
4.6	Integral über die X- und Y-Achse gegen Z Aufgetragen. Schwingung bei einmaliger Auslenkung, $g = 10$	21
4.7	Vergleich von Schnittbildern in der X-Y Achse (bzw. X-Achse) bei 3D, 2D und 1D Berechnung, $g = 10$	23

Literaturverzeichnis

- [1] S. N. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik*, 26, 1924.
- [2] E.A. Cornell C.E. Wieman et al. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science*, 269(5221):198–201, 1995.
- [3] F. Dalfovo et al. Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases. *Reviews of Modern Physics*, 71(3):463–512, 1999.
- [4] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases, Abhandlung 1, 2 und 3. In *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften, Physikalisch-mathematischen Klasse*, 1924/1925.
- [5] C. W. Gardiner and P. Zoller. Quantum kinetic theory: A quantum kinetic master equation for condensation of a weakly interacting Bose gas without a trapping potential. *Phys. Rev. A*, 55(4), Apr 1997.
- [6] A. Griffin. A Brief History of our Understanding of BEC: From Bose to Beliaev. In S. Stringari M. Inguscio and C. Wieman, editors, *Bose-Einstein Condensation in Atomic Gases*. Italian Physical Society, 1999.
- [7] U. Hohenester et al. Optimal quantum control of Bose Einstein condensates in magnetic microtraps. *Phys. Rev. A*, 75(2):023602, February 2007.
- [8] S. Hofferberth L.M. Andersson P. Kürger und J. Schmiedmayer I. Lesanovsky, T. Schumm. Manipulation of ultracold atoms in dressed adiabatic radio frequency potentials. *Phys. Rev. A*, 74:033619 ff, 2006.
- [9] W. Ketterle and N. J. van Druten. Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions. *Phys. Rev. A*, 54(1):656–660, July 1996.
- [10] I. Lesanovsky et al. Ultracold atoms in radio-frequency dressed potentials beyond the rotating-wave approximation. *Phys. Rev. A*, 76(1):013401, 2007.
- [11] J. D. Carter O. Cherry and J. D. D. Martin. An atom chip for the manipulation of ultracold atoms. *Canadian Journal of Physics*, 87(6):633–638, 2009.
- [12] C. J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, second edition, 2008.
- [13] L. Pitaevskii and Sandro Stringari. *Bose-Einstein Condensation*. Oxford University Press, 2003.
- [14] J. Reichel. Atom-Chips, Fließbänder für Quantenwolken. *Spektrum der Wissenschaft*, 8:76 ff, 2005.

- [15] T. Birkeland T. Sorevik and G. Oksa. Numerical solution of the 3D time dependent Schrödinger equation in spherical coordinates: Spectral basis and effects of split-operator technique. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 225:56–67, 2009.
- [16] T. Schumm und J. Schmiedmayer. Materiewellen auf dem Chip. *Physik Journal* 8, 1:23–28, 2009.
- [17] D. Jaksch W. Bao and P.A. Markowich. Numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation for Bose-Einstein condensation. *Journal of Computational Physics*, 187(1):318–342, 2003.
- [18] D. S. Durfee W. Ketterle and D. M. Stamper-Kurn. Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates. In *Bose-Einstein condensation in atomic gases: Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi Course*. IOS Press, 1999.
- [19] R. Walser, J. Williams, J. Cooper, and M. Holland. Quantum kinetic theory for a condensed bosonic gas. *Phys. Rev. A*, 59(5):3878–3889, May 1999.