

Untersuchung von Wechselwirkungsintegralen in ultrakalten Gasen

BACHELORARBEIT

zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science
(B. Sc.)
im Fach Physik



eingereicht an der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
Institut für Physik
Humboldt-Universität zu Berlin

von
Herr Paul Winter
geboren am 14.01.1996 in Berlin

Gutachter:

1. *Prof. Dr. Alejandro Saenz*
2. *Prof. Dr. Kurt Busch*

eingereicht am: *9. Januar 2018*

Zusammenfassung

Es wird ein Schema zur Berechnung von sechsdimensionalen Wechselwirkungintegralen aus der Elektronenstrukturechnung analysiert und auf die Verwendung in einer Konfigurationswechselwirkungsrechnung im Rahmen von ultrakalten Gasen angepasst. Weiterhin werden verschiedene Näherungsfunktionen für ein numerisches Wechselwirkungspotential miteinander verglichen und deren Basisintegrale im Rahmen des Algorithmus und unter anderem mit der Verwendung eines Renormierungsschemas gelöst. Anschließend wird eine Implementierung des Schemas vorgestellt und für einfache Fälle getestet und diskutiert.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
---	------------	---

Abbildungsverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Nach der ersten experimentellen Realisierung von Bose-Einstein-Kondensaten (*engl.: Bose-Einstein-Condensate*, kurz BEC) im Jahre 1995 ([?],[?],[?]), ca. 70 Jahre nach der theoretischen Vorhersage und dem darauf folgenden Nobelpreis [?] im Jahre 2001 hat sich ein neues Forschungsgebiet der Atom- und Molekülphysik sowie in der Quantenoptik eröffnet.

BECs sind makroskopische Quantenobjekte. Sie bestehen aus ultrakalten, neutralen, bosonischen Atomen, die quantenmechanisch überwiegend den Grundzustand des Systems besiedeln. Dabei ist die Wellenfunktion eines einzelnen Teilchens stark delokalisiert.

Eine sehr erfolgreiche Methode BECs theoretisch zu beschreiben, liefert die "Meanfield-Theorie" bei der angenommen wird, dass sich der quantenmechanische Zustand des Mehrteilchensystems durch eine einzige effektive Wellenfunktion beschreiben lässt. Durch iterative Verfahren kann so nicht nur die Energie, sondern auch die Form des BECs abgeschätzt werden. Da neutrale Atome im ultrakalten Regime, das heißt im Mikro- bis Nanokelvin Bereich, nur auf einer sehr kurzen Distanz wechselwirken (s-Wellen-Streuung), stellt das sogenannte δ -Pseudopotential eine gute Näherung dar. Es entspricht einer Kontaktwechselwirkung mit effektiver Streulänge.

Will man darüber hinaus eine genauere Berechnung durchführen, bietet sich eine Konfigurationswechselwirkungsrechnung (*engl.: Configuration Interaction*, kurz CI) an. Dabei stellt man schnell fest, dass bei klassischen BECs mit einer Teilchenzahl in der Größenordnung von 10^5 (vergleiche mit [?]) eine zu große Anzahl an Konfigurationen im System vorhanden sind und so die Berechnung fast unmöglich scheint.

Seit 2011 ist es möglich, einzelne Atome in optischen Dipol-Fallen, das heißt, mit Lasern zu halten [?] und diese zu untersuchen. Weiterhin gibt es die Variante, sogenannte optische Gitter zu erstellen, womit BECs sogar 3d-periodisch angeordnet werden können (siehe u.a. in [?], [?]). Daher kann für solche sehr kleinen Systeme dieser Ansatz wieder verfolgt werden.

Das Problem ist nun jedoch, dass eine genauere Berechnung von BECs mithilfe des Deltapotentials im Rahmen einer CI-Rechnung in 3d nicht möglich ist. [?] zeigt, dass die Energie hierbei nicht konvergiert. Für immer größere Konfigurationen entsteht eine immer höhere Energie des Systems.

Es gibt zwei Herangehensweisen, um mit einer solchen Divergenz umzugehen. Zum einen kann versucht werden, die Berechnung zu renormieren, das heißt die Unendlichkeit durch eine Re-Definition von Operatoren zu umgehen. Ein solches Vor-

gehen ist unter anderem in [?] erfolglos versucht worden. Ein anderer Weg wäre es, ein realistischeres Wechselwirkungspotential zu benutzen. Dieses setzt sich prinzipiell aus zwei Teilen zusammen: Einen abstoßenden Part, der verhindert, dass sich zwei Teilchen am exakt selben Ort befinden und einen anziehenden Part, der durch die Van-der-Waals Wechselwirkung beschrieben wird. Wechselwirkungspotentiale sind sehr kurzreichweitig. Auf der anderen Seite werden BECs in optischen Fallen gehalten, die in erster Näherung durch ein harmonisches Potential beschrieben werden können. Das Fallenpotential ist auf Grund der makroskopischen Größe der Apparatur langreichweitig gegenüber der Ausdehnung des BECs. Beide Potentiale sollen bei einer genaueren Berechnung berücksichtigt werden, was auf Grund der unterschiedlichen Skalen der Ausdehnung die Rechnung erschwert.

Es entstehen schwer zu berechnende Wechselwirkungsintegrale, die prinzipiell von 6 Koordinaten abhängen und im Allgemeinen nicht separieren.

Für das Zweiteilchenproblem in einem optischen Gitter hat man in [?] eine analytische Lösung in Relativ- und Schwerpunktskoordinaten gefunden. Dieses Vorgehen kann jedoch für mehr als zwei Teilchen nicht mehr angewendet werden.

Im Kontext der Elektronenstrukturechnungen von Molekülen stößt man auch auf solche sechsdimensionalen Wechselwirkungsintegrale. 2015 wird in der Arbeit [?] ein Vorgehen präsentiert, wie eine sehr allgemeine Klasse der Integrale erst vereinfacht und anschließend über eine Schar an Basisintegralen berechnet werden kann.

Ziel dieser Arbeit soll es also sein, den vorgestellten Algorithmus zu überprüfen, zu implementieren und die Anwendbarkeit auf die Berechnung von ultrakalten Gasen mittels CI abzuschätzen. Damit wäre ein neuer Zugang zu einer genaueren Berechnung und damit ein tieferes Verständnis von BECs möglich.

Zukünftig können BECs in vielen Anwendungsbereichen zum Einsatz kommen. Vorstellbar wären Bereiche wie Quantencomputer, Quantensimulatoren oder auch Quantensensoren. Einige Ideen zur Nutzung von BECs im Rahmen von Quantencomputern können in [?] gefunden werden. Weiterhin zeigt [?] ein Beispiel der Anwendung für Quantensensoren. Letztere versprechen äußerst präzise Messungen auf der Skala einzelner Atome. Um zum Beispiel Quantensensoren zu realisieren bzw. zu verbessern, muss es auch theoretische Grundlagen und präzise Vorhersagen bzgl. des Verhaltens von BECs auf einer sehr kleinen Skalierung und mit hoher Genauigkeit geben.

Demzufolge erklärt diese Arbeit zunächst das betrachtete System und die theoretische Grundlage erklärt, worauf eine CI Rechnung basiert. Anschließend wird der Algorithmus zur Berechnung von sechsdimensionalen Integralen vorgestellt und an das hier betrachtete Problem angepasst. In Kapitel 3 wird die Implementierung erläutert und getestet. Danach wird ein Fazit gegeben und ein Ausblick auf die nächsten Schritte dargestellt.

Selbständigkeitserklärung

Ich erkläre hiermit, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und noch nicht für andere Prüfungen eingereicht habe. Sämtliche Quellen einschließlich Internetquellen, die unverändert oder abgewandelt wiedergegeben werden, insbesondere Quellen für Texte, Grafiken, Tabellen und Bilder, sind als solche kenntlich gemacht. Mir ist bekannt, dass bei Verstößen gegen diese Grundsätze ein Verfahren wegen Täuschungsversuchs bzw. Täuschung eingeleitet wird.

Berlin,