

Stationäre und dynamische Eigenschaften von dipolaren Bose-Einstein-Kondensaten in verschiedenen Fallenpotentialen

Von der Fakultät Mathematik und Physik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von

Damir Zajec

aus Stuttgart

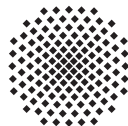
Hauptberichter:

Prof. Dr. Günter Wunner

Mitberichter:

Prof. Dr. Christian Holm

Tag der mündlichen Prüfung: 04. Dezember 2015



1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart

2015

Inhaltsangabe

Gegenstand dieser Arbeit ist die theoretische Untersuchung von dipolaren Bose-Einstein-Kondensaten in verschiedenen externen Potentialen. Maßgeblich relevant sind hierbei Effekte, welche sich aus der dipolaren Wechselwirkung ergeben und zu interessanten neuen Einblicken führen.

Die theoretische Beschreibung erfolgt über eine voll-numerische Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung auf einem dreidimensionalen Gitter. Der diesbezügliche Algorithmus ist für die Verwendung der hierfür notwendigen CUDA Hardware hochparallelisiert implementiert worden und ermöglicht erstmals eine systematische Untersuchung vieler Eigenschaften dipolarer Bose-Einstein-Kondensate in verschiedensten externen Potentialen. Als maßgeblicher Fortschritt erweist sich hierbei der Umstand, dass sowohl auf die Verwendung von Näherungen zur Reduktion der Rechenzeit sowie auf die Benutzung großer Rechencluster verzichtet werden kann. Die Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung mit Hilfe der Imaginär- und Realzeitentwicklung erlaubt die Bestimmung von Grundzuständen und der hieraus resultierenden Dynamik des Kondensats. Insbesondere letzteres ermöglicht die Simulation von experimentnahen Situationen, beispielsweise durch die zeitliche Änderung wichtiger Systemparameter. Da die Verwendung eines Gitters die Implementierung nahezu beliebiger Potentiale ermöglicht, sind weitreichende Vorhersagen zum Verhalten dipolarer Bose-Einstein-Kondensate in einem Experiment möglich.

Das präsentierte numerische Verfahren wird auf insgesamt drei unterschiedliche Systeme angewandt. Das erste behandelte System umfasst die Kollisionsdynamik von quasizweidimensionalen Solitonen. Hierbei werden unterschiedliche Startparameter wie Anfangsimpuls, Streuparameter und Phasendifferenzen betrachtet, um einen möglichst breiten Überblick über die qualitativ mögliche Kollisionsdynamik zu geben.

Das zweite System behandelt Drei-Mulden-Potentiale, welche ein Modellsystem für periodische optische Gitter darstellen. Solche Systeme ermöglichen es, Effekte wie die Selbstorganisation und Strukturbildung in Systemen mit dipolarer Wechselwirkung zu untersuchen. Präsentiert werden unter anderem ein Phasendiagramm, in welchem die qualitativ vorkommenden Grundzustände in Abhängigkeit wichtiger Systemparameter dargestellt sind, sowie Realzeitentwicklungen, welche unter anderem die zeitliche Dynamik von metastabilen Zuständen demonstrieren. Die Simulationen zu den Solitonen und dem Drei-Mulden-Potential sind auf Grund der Skalierungseigenschaften der verwendeten Einheitensysteme für alle dipolaren Systeme gültig und werden jeweils durch Vergleiche mit Ergebnissen aus einem Variationsansatz verglichen und komplettiert.

Das letzte untersuchte System umfasst Rechnungen zu Kondensaten mit Dysprosium. Diese sollen der Arbeitsgruppe von Professor Pfau am 5. Physikalischen Institut für Phy-

sik der Universität Stuttgart bei der Realisierung eines dipolaren Kondensats mit ^{164}Dy behilflich sein und sind auf die gewünschten experimentellen Spezifikationen angepasst. Untersucht werden strukturierte Grundzustände, Stabilitätsgrenzen und Expansionsdynamiken, mit deren Hilfe sich unter anderem die Streulänge von ^{164}Dy bestimmen lässt.

Abstract

This work investigates dipolar Bose-Einstein condensates in several different external potentials with a special emphasis on effects which are caused by the dipolar interaction and which lead to new and interesting insights.

For the theoretical description a fully-numerical solution of the Gross-Pitaevskii equation on a three-dimensional grid is applied. To this end, the highly parallelized algorithm is implemented for the usage of the CUDA hardware. Due to this approach, for the first time the systematical study of many properties of Bose-Einstein condensates in various external potentials is possible. The essential progress made by the parallel implementation of the algorithm is that one does not need to use approximations to reduce the time for calculations and that one does not have to execute the algorithm on huge computer clusters. Solving the Gross-Pitaevskii equation with the imaginary- and real-time evolution yields the ground state and the dynamics of the condensate. The latter allows for simulations which are close to a possible experimental setup, e.g. by changing important parameters of the system over time. Due to the usage of a grid it is possible to implement almost arbitrary potentials and one can make far reaching predictions with respect to the properties of dipolar Bose-Einstein condensates in the context of an experiment.

Our algorithm is applied to three different physical systems. The first application covers the dynamics of collisions of quasi two-dimensional solitons with respect to different starting parameters as initial momenta, scattering parameters und phase differences. A second investigation focuses on three-well potentials, which are used as a model system for periodic optical lattices. Such potentials allow for the study of effects like self-organization and pattern formation in dipolar systems. Here we present a phase diagram which shows how the ground states depend on relevant parameters of the system and study the dynamics of metastable states.

Due to the scaling properties of the systems of units used in this work, the results for both the collision of the solitons and the investigation of the three-well potential are valid for all dipolar systems. They are completed by a comparison with calculations obtained by a variational ansatz.

The last investigation focuses on computations for a condensate with dysprosium, which shall assist the group of Professor Pfau from the 5th Institute of Physics of the University of Stuttgart by realizing a condensate with ^{164}Dy . Here simulations will cover structured ground states, borders of stability and the dynamics of expansion, which are helpful in determining the scattering length of ^{164}Dy .

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| 1. Einleitung | 11 |
| 1.1. Motivation | 11 |
| 1.2. Aufbau der Arbeit | 14 |
| 2. Bose-Einstein-Kondensation | 15 |
| 2.1. Die Bose-Einstein-Kondensation des idealen Gases | 15 |
| 2.2. Die nichtdiagonale Fernordnung | 18 |
| 2.3. Wechselwirkungen zwischen Teilchen | 19 |
| 2.3.1. Die Kontaktwechselwirkung | 20 |
| 2.3.2. Feshbach-Resonanzen | 21 |
| 2.3.3. Die dipolare Wechselwirkung | 22 |
| 2.4. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung | 23 |
| 2.5. Das Integral der dipolaren Wechselwirkung | 26 |
| 2.6. Die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen | 27 |
| 2.7. Die Thomas-Fermi-Näherung | 29 |
| 3. Numerische Methoden und Implementierung | 33 |
| 3.1. Die Split-Operator-Methode | 33 |
| 3.2. Die Imaginärzeitentwicklung | 34 |
| 3.3. Implementierung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen | 36 |
| 4. Kollision quasi-zweidimensionaler Solitonen | 39 |
| 4.1. Das dipolare Einheitensystem | 40 |
| 4.2. Motivation und Präparation | 41 |
| 4.3. Ergebnisse | 42 |
| 5. Drei-Mulden-Potential | 51 |
| 5.1. Das Drei-Mulden-Einheitensystem und das externe Potential | 51 |
| 5.2. Ergebnisse | 53 |
| 5.2.1. Schnitt bei $Na_{dd} = 0.4$ | 56 |
| 5.2.2. Schnitt bei $Na_{dd} = 0.2$ | 57 |
| 6. Dipolares Bose-Einstein-Kondensat mit Dysprosium | 63 |
| 6.1. Expansionsdynamik | 63 |
| 6.1.1. Auswertung der Expansionsdynamik in der TF-Näherung | 69 |

| | |
|--|------------|
| 6.2. Strukturierte Grundzustände | 72 |
| 6.3. Selbstinduzierter Josephson-Kontakt | 75 |
| 6.4. Ausblick auf kommende Experimente mit ^{164}Dy | 84 |
| 7. Zusammenfassung und Ausblick | 85 |
| 7.1. Zusammenfassung | 85 |
| 7.2. Ausblick | 87 |
| 8. Summary | 89 |
| 8.1. Introduction | 89 |
| 8.2. Theoretical Background | 90 |
| 8.3. Numerical Methods | 92 |
| 8.4. Results | 93 |
| 8.4.1. Collision of two-dimensional solitons | 93 |
| 8.4.2. Triple-well potential | 94 |
| 8.4.3. Dipolar Bose-Einstein condensate with dysprosium | 95 |
| A. CUDA | 97 |
| A.1. Parallele Programmierung mit <i>CUDA C</i> | 97 |
| A.2. Fourier-Transformationen mit CUDA | 102 |
| A.3. Parallelisierte Addition mit CUDA | 102 |
| Literaturverzeichnis | 105 |
| Lebenslauf | 111 |
| Danksagung | 113 |

Abbildungsverzeichnis

| | |
|---|----|
| 2.1. Wärmekapazität C_V eines idealen Bose-Einstein-Kondensats | 17 |
| 2.2. Einteilchen-Dichtematrix | 19 |
| 2.3. Feshbach-Resonanz: (a) Verlauf des Potentials, (b) Streulänge als Funktion der Magnetfeldstärke | 21 |
| 2.4. Wechselwirkung von Dipolen | 23 |
| 2.5. Typischer Verlauf der dipolaren anisotropen Funktion | 31 |
| 4.1. Absorptionsbilder für $k = 10$ und $\Delta\phi = 0, \pi/2$ und π | 44 |
| 4.2. Absorptionsbilder für $\Delta\phi = 0$ und $k = 5, 30$ und 60 | 45 |
| 4.3. Absorptionsbilder für $k = 10$ und $\Delta\phi = 0, \pi/2$ und π mit Drehimpuls | 46 |
| 4.4. Vergleich der kinetischen Energie zwischen Variationsrechnung und Gitterrechnung | 47 |
| 4.5. Varianz für lange Zeiten | 48 |
| 5.1. Phasendiagramm der repulsiven Konfiguration | 53 |
| 5.2. Phasendiagramm der attraktiven Konfiguration | 54 |
| 5.3. Tangenten- und Heugabelbifurkation | 55 |
| 5.4. Besetzung der drei Mulden bei einer Variation der Streulänge von Na von -0.05 zu -0.06 für $Na_{\text{dd}} = 0.4$ | 56 |
| 5.5. Besetzung der drei Mulden bei einer Variation der Streulänge Na von -0.01 zu -0.03 und von -0.03 zu -0.05 für $Na_{\text{dd}} = 0.2$ | 58 |
| 5.6. Realteile der Stabilitätseigenwerte der drei ersten Moden aus der Auswertung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen | 59 |
| 5.7. Vergleich der <i>mean-field</i> -Energie während der Imaginärzeitentwicklung eines Variationsansatzes und eines willkürlichen Gaußansatzes | 60 |
| 5.8. Vergleich der Realzeitentwicklungen des Variationsansatzes und der Gitterrechnungen für den metastabilen Zustand bei $Na = -0.2$ | 61 |
| 6.1. Absorptionsbilder der Expansionsdynamik in y -Richtung für $0^\circ, 10^\circ, 30^\circ$ und 60° | 66 |
| 6.2. Absorptionsbilder der Expansionsdynamik in z -Richtung für $0^\circ, 10^\circ, 30^\circ$ und 60° | 67 |
| 6.3. Schnitte des Betragsquadrats der Wellenfunktion für unterschiedliche Winkel während der Expansion | 68 |

| | |
|---|----|
| 6.4. Absorptionsbilder der Expansionsdynamik in y -Richtung für 45° und $\epsilon = 0.8$ und $\epsilon = 1.1$ | 69 |
| 6.5. Vergleich der Expansionsdynamik der Thomas-Fermi-Näherung und der Gross-Pitaevskii-Gleichung für $\epsilon = 0.8$ und $\epsilon = 1.2$ | 70 |
| 6.6. Vergleich der Expansionsdynamik der Thomas-Fermi-Näherung und der Gross-Pitaevskii-Gleichung für $t = 3$ ms und $t = 6$ ms | 71 |
| 6.7. Stabilitätsdiagramm für unterschiedliche Werte von ϵ | 72 |
| 6.8. Phasendiagramm für die Sichtbarkeit der strukturierten Grundzustände für $\epsilon = 1.2$ | 73 |
| 6.9. Phasendiagramm für die Sichtbarkeit der strukturierten Grundzustände für $\epsilon = 1.3$ | 74 |
| 6.10. Visualisierung der toroidalen Falle | 76 |
| 6.11. Grundzustand für den selbstinduzierten Josephson-Kontakt nahe der Stabilitätsgrenze | 77 |
| 6.12. Stabilitätsdiagramm für den selbstinduzierten-Josephson-Kontakt: Teilchenzahl über ϵ | 78 |
| 6.13. Grundzustand für den selbstinduzierten Josephson-Kontakt | 79 |
| 6.14. Stabilitätsdiagramm für den selbstinduzierten Josephson-Kontakt: Drehwinkel über ϵ | 80 |
| 6.15. Realzeitentwicklung für den selbstinduzierten Josephson-Kontakt mit Josephson-Oszillationen | 81 |
| 6.16. Realzeitentwicklung der <i>running phase mode</i> | 82 |
| 6.17. Realzeitentwicklung für den selbstinduzierten Josephson-Kontakt mit <i>running phase mode</i> und Josephson-Oszillationen | 83 |

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzungen im Text

| | |
|--------------------|-------------------------------------|
| BEK | Bose-Einstein-Kondensat(ion) |
| BdG (-Gleichungen) | Bogoliubov-de Gennes (-Gleichungen) |
| GPG | Gross-Pitaevskii-Gleichung |
| MQST | macroscopic quantum self-trapping |
| TF (-Näherung) | Thomas-Fermi (-Näherung) |

Physikalische Konstanten

| Symbol | Bedeutung | Wert [1] |
|---------|---|---|
| a_B | Bohr-Radius | $5.2917721092(17) \times 10^{-11} \text{ m}$ |
| \hbar | reduziertes Plancksches Wirkungsquantum | $1.054571726(47) \times 10^{-34} \text{ Js}$ |
| μ_0 | Vakuumpermeabilität | $4\pi \times 10^{-7} \text{ TmA}^{-1}$ |
| μ_B | Bohr-Magneton | $9.27 \times 10^{-24} \text{ TmA}^{-1}$ |
| k_B | Boltzmann-Konstante | $1.3806488(13) \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ |

Symbole

| Symbol | Bedeutung | Wert / Kommentar |
|---------------------------------|---|--|
| Ψ, ψ | Wellenfunktion | |
| m | Atomare Masse | 8.63×10^{-26} kg für ^{52}Cr 27.22×10^{-26} kg für ^{164}Dy |
| μ | Magnetisches Moment | $6\mu_{\text{B}}$ für ^{52}Cr $10\mu_{\text{B}}$ für ^{164}Dy |
| E_{mf} | <i>Mean-field</i> -Energie | |
| ε | Chemisches Potential | |
| ϵ | Verhältnis von Dipollänge zu Streulänge | |
| a | Streulänge | |
| a_{dd} | Dipollänge | |
| N | Teilchenzahl | |
| α | Drehwinkel der externen Falle | |
| λ | Frequenzverhältnis der externen Falle Stärke der Störung (BdG) | vom Kontext abhängig |
| T | Temperatur | |
| P | Besetzung der Mulden | |
| ω | Kreisfrequenz der externen Falle Eigenwert (BdG) | vom Kontext abhängig |
| f | Fallenfrequenz | |
| $\mathcal{F}, \mathcal{F}^{-1}$ | Fourier- und inverse Fourier- Transformation | |
| R | Thomas-Fermi-Radius | |
| ϕ | Phase | |
| N | Teilchenzahl | |

1. Einleitung

1.1. Motivation

Wird ein Gas unter eine Temperatur T_c (einige hundert nK) gekühlt, so kann sich ein neuer Aggregatzustand ausbilden, welcher als Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet wird. Dieser Aggregatzustand ist nach Satyendranath Bose und Albert Einstein benannt, welche ihn 1924 [2–4] vorhergesagt haben. Eine experimentelle Realisierung eines Bose-Einstein-Kondensats gelang jedoch erst sieben Jahrzehnte später. Im Jahre 1995 haben Cornell *et al.* und Ketterle *et al.* die Verwirklichung von Kondensaten mit ^{87}Rb [5] bzw. ^{23}Na [6] bekannt gegeben. Ein Aspekt, welcher die Arbeit mit Bose-Einstein-Kondensaten interessant macht, ist der Umstand, dass in solchen Systemen makroskopisch kontrollierbare Effekte der Quantenmechanik untersucht werden können. Bose-Einstein-Kondensate zeichnen sich dadurch aus, dass alle Partikel des Gases eine kohärente Wellenfunktion aufweisen und somit ein makroskopisches Quantenobjekt vorliegt. In Kombination mit den ultra-tiefen Temperaturen, welche für die Kondensation notwendig sind und die Dynamik im System verlangsamen, ist eine Untersuchung mittels simpler optischer Apparate möglich.

Die Bose-Einstein-Kondensation ist eng verwandt mit anderen makroskopischen Quanteneffekten wie der Suprafluidität und der Supraleitung. Während diese beiden Effekte interessanterweise experimentell recht früh entdeckt wurden (Supraleitung 1911, Suprafluidität 1938), ist die mikroskopische theoretische Beschreibung erst wesentlich später bzw. bis zum heutigen Tage nur unvollständig gelungen. Die Supraleitung wurde von Bardeen, Cooper und Schrieffer als schwache durch Phononen vermittelte attraktive Kopplung von Elektronen beschrieben [7], welche zu einem makroskopisch kohärentem Strom führt. Eine theoretische Beschreibung der Suprafluidität wiederum wurde durch Landau [8] mit Hilfe der Dispersionskurve einer als Roton bezeichneten Elementaranregung, welche erst ab einer gewissen minimalen Geschwindigkeit des Suprafluids eine Dissipation erlaubt, gegeben.

Als Modellsysteme sind ultrakalte Gase insbesondere für die Festkörper- bzw. Vielteilchenphysik [9] von Interesse. Hierbei macht man sich zunutze, dass Bose-Einstein-Kondensate die Untersuchung von Systemen ermöglichen, welche zu einem Verständnis vieler ungeklärter Phänomene der Festkörperphysik beitragen können. Als vorteilhaft erweist sich in diesem Fall, dass die üblichen Komplikationen, wie Fehl- und Störstellen ausbleiben und man wichtige Systemparameter wie das externe Potential oder die interatomare Wechselwirkung, mit hoher Präzision dynamisch variieren kann. Dies ermöglicht

Untersuchungen mit optischen Gittern, in welchen der Übergang von der suprafluiden zur Mott-Isolator-Phase [10] oder das Tonks-Girardeau-Regime [11] betrachtet werden können.

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Untersuchung dipolarer Bose-Einstein-Kondensate. Die Realisierung solcher Kondensate lässt sich durch Atome mit starkem magnetischem Dipolmoment wie ^{52}Cr [12–14], ^{164}Dy [15, 16] oder ^{168}Er [17] erreichen. Zudem wird momentan intensiv an der Realisierung mit polaren Molekülen geforscht [18], welche sich durch ein besonders starkes elektrisches Dipolmoment auszeichnen. Die dipolare Wechselwirkung ist von ihrer Natur aus langreichweitig, anisotrop, nichtlinear und nicht-lokal. Sie ermöglicht so die Beobachtung neuer Phänomene wie strukturierte Grundzustände, Solitonen, Roton-Maxon-Spektren und vielem mehr. Eine Übersicht über die neusten Entwicklungen wird von Lahaye *et al.* [14] und Baranov *et al.* [19] gegeben.

Dipolare Bose-Einstein-Kondensate lassen sich mathematisch über eine Vielteilchen-Schrödingergleichung beschreiben, welche sich unter anderem über statistische Methoden wie dem Quanten-Monte-Carlo-Verfahren [20–22] lösen lassen. In der Praxis werden jedoch häufig Näherungsverfahren angewandt. Hierbei bedient man sich eines *mean-field*-Ansatzes oder, wie bei der Beschreibung von optischen Gittern geläufig, des Bose-Hubbard-Modells [23]. In dieser Arbeit verwenden wir erstere Methode und lösen die Gross-Pitaevskii-Gleichung, welche eine nichtlineare Schrödingergleichung in *mean-field*-Näherung darstellt, voll-numerisch auf einem Gitter. Als numerische Methoden werden die Imaginär- und Realzeitentwicklung verwendet. Erstere ermöglicht die Bestimmung von Grundzuständen, während zweitere die Dynamik eines Kondensats beschreiben kann. Gitterrechnungen zeichnen sich durch ihre große Flexibilität aus und ermöglichen mit relativ wenig Vorgaben die Berechnung von Phasendiagrammen (siehe hierzu insbesondere Kapitel 5 und 6) oder auch die Implementierung neuer externer Potentiale. Schwachstellen des verwendeten Algorithmus liegen darin, keine angeregten Zustände bestimmen zu können und auf Grund der Endlichkeit des Gitters Rechnungen dynamischer Vorgänge, wie der Expansionsdynamik, häufig vorzeitig beenden zu müssen. Hierzu sind alternative Methoden wie Variationsrechnungen notwendig. Vergleiche mit den Ergebnissen solcher Rechnungen von Fortanier *et al.* [24, 25] bzw. Eichler *et al.* [26] werden an geeigneter Stelle vorgestellt.

Untersucht werden im Folgenden drei unterschiedliche Systeme. Das erste System umfasst die Kollision von quasi-zweidimensionalen Solitonen, welche sich dadurch auszeichnen, dass die externe Falle nur in einer Raumrichtung vorliegt, das Kondensat jedoch seine Form beibehält und nicht, wie aus der linearen Schrödinger-Theorie her zu erwarten wäre, zerfließt. Dies ist ein Effekt der Nichtlinearität der Gross-Pitaevskii-Gleichung und ist in dieser Form bereits aus der nichtlinearen Optik bekannt. In [27, 28] wurde die dynamische Erzeugung eines Solitons unter experimentnahen Bedingungen untersucht. Die hier präsentierten Ergebnisse bauen auf den Untersuchungen in [27, 28] auf und ergänzen diese in Bezug auf die Stabilität gegenüber starken Störungen. Hierbei bietet sich die Kollision zweier Solitonen als besonders elegante Methode an, wobei im Gegensatz zu [27, 28] keine Rücksicht auf experimentelle Umstände wie Verluste durch

Drei-Teilchen-Kollisionen oder Rauschen in der Streulänge genommen wird. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen wurden in [26] veröffentlicht.

Das zweite System, welches in dieser Arbeit untersucht wird, ist das Drei-Mulden-Potential und baut auf der Veröffentlichung von Peter *et al.* [29] auf. Dieses Potential stellt ein Modellsystem für periodische Strukturen dar und ist in Bezug auf Phänomene wie Strukturbildung und Selbstorganisation von Relevanz. In der Literatur werden in dieser Hinsicht häufig optische Gitter untersucht [30]. Beschränkt man sich auf Systeme mit möglichst wenig Mulden, so ist es für dipolare Kondensate sinnvoll, nicht nur das Zwei-Mulden-Potential [31, 32] zu betrachten, da der langreichweitige Charakter der dipolaren Wechselwirkung vollständig nur in einem System zum Tragen kommt, in welchem zwischen den Effekten innerhalb einer Mulde durch die kurzreichweitige Wechselwirkung und den Effekten zwischen zwei Mulden, die durch die dipolare Wechselwirkung entstehen, unterschieden werden kann. Ein Minimalsystem zur Untersuchung solcher Effekte ist das Drei-Mulden-Potential und wird in dieser Arbeit eingehend in Bezug auf die dabei auftretenden Phasen hin untersucht. Hierbei wird ein Phasendiagramm berechnet, welches die Phasen in Abhängigkeit jener Systemparameter angibt, die maßgeblich für die inter-atomare Wechselwirkung im System sind. Das sich ergebende Bild wird durch eine Reihe von Realzeitentwicklungen vervollständigt, welche die dynamische Entwicklung für Übergänge zwischen unterschiedlichen Bereichen des Phasendiagramms sowie der in diesem System auftretenden metastabilen Zustände veranschaulichen sollen. Die Ergebnisse dieses Teils wurden in [25] veröffentlicht.

Die Arbeit wird abgeschlossen durch Simulationen zu einem Bose-Einstein-Kondensat mit ^{164}Dy , welches der Arbeitsgruppe von Professor Pfau des 5. Physikalischen Instituts der Universität Stuttgart bei der Realisierung eines solchen Kondensats behilflich sein soll. Die Realisierung von Kondensaten mit größeren atomaren Dipolmomenten ist für die praktische Arbeit von großer Relevanz, da hiermit die Hoffnung verknüpft ist, Kondensate vorliegen zu haben, welche ohne größere Eingriffe von außen bereits einen stark dipolaren Charakter aufweisen. Zwar ist über das Ausnutzen von Feshbach-Resonanzen [33, 34] eine Manipulation der Streulänge möglich, jedoch verringert diese die Lebenszeit eines Kondensats, was sich unter anderem in Versuchen zu der Kollision von Solitonen negativ auswirken würde, da hierbei lange Beobachtungszeiten notwendig sind. Die vorgestellten Ergebnisse reichen von strukturierten Grundzuständen bis hin zur Untersuchung von Expansionsdynamiken. Im letzteren Fall wird unter anderem die Gültigkeit der Thomas-Fermi-Näherung während der Expansionszeit untersucht, da die Anwendbarkeit dieser Näherung den Rechenaufwand für Untersuchungen, wie sie für die Kalibrierung der Versuchsanordnung notwendig sind, stark reduzieren. Für künftige Untersuchungen des Systems besonders wichtig ist die Bestimmung der Streulänge von ^{164}Dy , welche über eine Drehung der Dipole relativ zur Ausrichtung der externen Falle und der damit verbundenen Ausmessung der Stabilitätsgrenze erfolgen kann. Die Ergebnisse dieses Teils wurden in [35] veröffentlicht.

1.2. Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 wird eine kurze Übersicht über die Beschreibung eines Bose-Einstein-Kondensats gegeben. Das Kapitel beginnt mit einer quantenstatistisch motivierten Einführung des Phänomens der Kondensation und führt über die Darstellung der relevanten Wechselwirkungen und der Einführung der nichtdiagonalen Fernordnung letztlich zur *mean-field*-Beschreibung und der hierfür relevanten Gross-Pitaevskii-Gleichung, wobei explizit dargelegt wird, wie das Integral der dipolaren Wechselwirkung in der Gross-Pitaevskii-Gleichung behandelt werden kann. Anschließend werden die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen eingeführt, welche eine Stabilitätsanalyse der mittels der Gross-Pitaevskii-Gleichung berechneten Grundzustände ermöglichen. Zuletzt wird in Kapitel 2 die Thomas-Fermi-Näherung behandelt, welche eine analytische Lösung ermöglicht und für die Untersuchung der Expansionsdynamik von Bedeutung ist. Kapitel 3 behandelt die numerischen Methoden und Details der Implementierung.

In Kapitel 4 werden die Ergebnisse der Kollisionsdynamik quasi-zweidimensionaler Solitonen präsentiert. Das Kapitel beginnt damit, dass ein neues Einheitensystem eingeführt wird, wodurch insbesondere der Vergleich zu älteren Arbeiten auf diesem Gebiet erleichtert wird. Der Vergleich mit Ergebnissen von Variationsrechnungen ermöglicht eine Aussage über die langfristige Entwicklung der Solitonen nach der Kollision und hilft so Aussagen über die Stabilität von Solitonen gegenüber starken nichtlinearen Wechselwirkungen zu treffen. In Kapitel 5 werden die Ergebnisse für das Drei-Mulden-Potential vorgestellt. Nach der Einführung eines neuen Einheitensystems, welches für die Beschreibung besser geeignet ist als das im Kapitel zuvor verwendete Einheitensystem, wird ein Phasendiagramm präsentiert, welches die qualitativen Zustände des Systems in Abhängigkeit wichtiger Systemparameter darstellt. Hiervon ausgehend wird über die Verwendung von Realzeitentwicklungen die Dynamik des Kondensats, insbesondere jene metastabiler Zustände, untersucht. Zuletzt werden in Kapitel 6 eine Reihe von Simulationen präsentiert, welche der Arbeitsgruppe von Professor Pfau vom 5. Physikalischen Institut der Universität Stuttgart bei der Realisierung eines dipolaren Bose-Einstein-Kondensats mit ^{164}Dy behilflich sein sollen. Die Ergebnisse dieser Arbeit werden in Kapitel 7 zusammengefasst.

2. Bose-Einstein-Kondensation

In diesem Kapitel soll eine kurze Übersicht über das Phänomen der Bose-Einstein-Kondensation (BEK) sowie seiner mathematischen Beschreibung gegeben werden. Hierbei wird das BEK sowohl mit den üblichen Methoden der Quantenstatistik über die Bose-Einstein'sche Verteilungsfunktion als auch über den allgemeineren Ansatz mittels der Einteilchen-Dichtematrix beschrieben. Um eine möglichst realistische Darstellung des BEK zu ermöglichen, werden zudem die Kontaktwechselwirkung und die langreichweitige dipolare Wechselwirkung eingeführt und die mathematische Beschreibung des BEK in *mean-field*-Näherung über die Gross-Pitaevskii-Gleichung gegeben. Des Weiteren wird mit den Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen eine Methode vorgestellt, um Aussagen über die Stabilität stationärer Lösungen in Bezug auf kleine Störungen zu treffen, sowie die Thomas-Fermi-Näherung eingeführt, welche eine Abschätzung der räumlichen Ausdehnung des Kondensats in der Falle und während der Expansion ermöglicht.

2.1. Die Bose-Einstein-Kondensation des idealen Gases

Während das Phänomen der gewöhnlichen Kondensation eines Gases üblicherweise von den Wechselwirkungen zwischen Teilchen angetrieben wird, handelt es sich bei der Bose-Einstein-Kondensation um einen Effekt, welcher ausschließlich auf die Ununterscheidbarkeit und die Symmetrieeigenschaften der Teilchen zurückzuführen ist. Im Gegensatz zur klassischen Mechanik, in welcher sich identische Teilchen dadurch unterscheiden lassen, dass die Trajektorien deterministisch für alle Zeiten vorherbestimmt sind, gestatten die Gesetze der Quantenmechanik keine Unterscheidung von Teilchen, welche sich in einem Volumen befinden, das kleiner als die Einheitszelle des Phasenvolumens h^3 ist. Wie auch bei einem Flüssigkeitstropfen findet eine Separation der Phasen statt. Bei der BEK werden die Phasen jedoch nicht im Ortsraum, sondern vielmehr im Impulsraum separiert. Die kondensierten Teilchen nehmen hierbei allesamt denselben Quantenzustand mit dem Impuls null ein, während die restlichen Teilchen Zustände mit einem endlichen Impuls besetzen.

Für bosonische Teilchen wird die mittlere Besetzungszahl f_{BE} für einen beliebigen Einteilchen-Zustand der Energie E_i durch die Bose-Einstein'sche Verteilungsfunktion

$$f_{\text{BE}}(E_i) = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \varepsilon)} - 1} \quad (2.1)$$

beschrieben, deren Herleitung sich in den Standardlehrbüchern der statistischen Physik

[36] findet, mit ε als chemischem Potential sowie $\beta = \frac{1}{k_B T}$ mit T als Temperatur. Mittels dieser Verteilungsfunktion lässt sich eine kritische Temperatur

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m} \left(\frac{n}{g_{3/2}(1)} \right)^{2/3} \approx \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m} \left(\frac{n}{2.612} \right)^{2/3} \quad (2.2)$$

herleiten, in welcher m die Masse der betrachteten Teilchen und n die Teilchendichte bezeichnet und

$$g_m(z) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{z^p}{p^m} \quad (2.3)$$

das Bose-Einstein-Integral darstellt, welches für das Argument $z = 1$ identisch mit der Riemann- ζ Funktion ist. Für Temperaturen, die gleich oder kleiner sind als die kritische Temperatur, nimmt das chemische Potential den Wert null an. Wird das Gas unter T_c gekühlt, so führt dies zu einer makroskopischen Besetzung des Quantenzustandes mit der Energie $E_i = 0$. Die Teilchendichte n lässt sich hierbei in eine Kondensatsdichte n_0 und eine Normaldichte n_n aufteilen, d.h.

$$n = n_0 + n_n. \quad (2.4)$$

Der Anteil der kondensierten Teilchen lässt sich kompakt in der Form

$$\frac{n_0}{n} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \quad (2.5)$$

darstellen. Aus dieser Beziehung wird ersichtlich, dass für $T = 0$ alle Teilchen im kondensierten Zustand vorliegen, während für Temperaturen zwischen null und T_c die Kondensatsdichte von n kontinuierlich auf null fällt. Betrachtet man die Wärmekapazität

$$C_V = \frac{\partial u}{\partial T} \quad (2.6)$$

mit u als mittlerer Energie pro Teilchen, so ergibt sich für Temperaturen unterhalb von T_c der Ausdruck

$$C_V = \frac{15}{4} \frac{g_{5/2}(1)}{g_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} k_B \quad (2.7)$$

wohingegen man für $T \gg T_c$ die bekannte Beziehung für ein klassisches ideales Gas

$$C_V = \frac{3}{2} k_B, \quad (2.8)$$

findet. Die erste Ableitung der Wärmekapazität weist bei T_c eine Diskontinuität auf (vgl. Abbildung 2.1), so dass die Bose-Einstein-Kondensation tatsächlich einen thermodynamischen Phasenübergang darstellt, da ein solcher sich durch die Unstetigkeit in der Ableitung thermodynamischer Potentiale äußert.

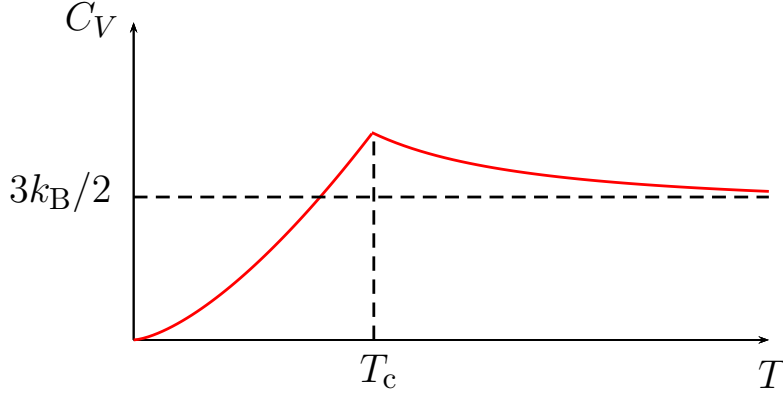


Abbildung 2.1.: Wärmekapazität C_V eines idealen Bose-Einstein-Kondensats als Funktion der Temperatur T . Der Knick bei der kritischen Temperatur T_c ist gleichbedeutend mit einer Diskontinuität der ersten Ableitung von C_V und weist auf einen thermodynamischen Phasenübergang hin. Für große Temperaturen $T \gg T_c$ konvergiert die Wärmekapazität gegen den entsprechenden Wert des klassischen idealen Gases.

Die bisherige Voraussetzung eines freien Gases mit unendlicher Teilchenzahl ist bei der experimentellen Realisierung eines BEK nicht mehr gegeben. Stattdessen liegt ein Kondensat mit endlicher Teilchenzahl in einer Falle vor. Beide Einschränkungen lassen sich über Korrekturterme in der kritischen Temperatur und dem kondensierten Anteil der Teilchen berücksichtigen [37]. Für ein BEK in einer harmonischen Falle lässt sich unter der Annahme eines wechselwirkungsfreien Gases die Gesamtwellenfunktion aus dem Produkt aller Einteilchenwellenfunktionen berechnen. Hierbei erhält man für die Einteilchenzustände eine Gauß-Funktion, welche jeweils unabhängig von der Gesamtanzahl an Teilchen ist. Das Verhältnis der Breiten $\sigma_i = (\frac{\hbar}{2m\omega_i})^{1/2}$ der Wellenfunktionen ist identisch mit dem Verhältnis der inversen Fallenfrequenzen $\frac{1}{\omega_i}$, d.h. $\sigma_x : \sigma_y : \sigma_z = \frac{1}{\omega_x} : \frac{1}{\omega_y} : \frac{1}{\omega_z}$. Im Vergleich hierzu sind die Breiten $\sigma_i^{\text{th}} = (\frac{\hbar}{m\omega_i})^{1/2} (\frac{k_B T}{\hbar\omega_i})^{1/2}$ einer thermischen Gaswolke, welche durch die Maxwell-Boltzmann-Verteilung beschrieben wird, wesentlich größer. Betrachtet man die Impulsverteilung eines BEK, so zeigt sich, dass im Gegensatz zur thermischen Wolke die Impulsverteilung in einer anisotropen Falle auch eine Anisotropie aufweist. Für die Varianz findet man $\sigma_{p,i} = (\frac{\hbar m \omega_i}{2})^{1/2}$, so dass ein Kondensat nach langer Expansionszeit (nach Ausschalten der externen Falle) in der Richtung mit der höchsten Frequenz ω_i die breiteste Ausdehnung aufweisen wird, wohingegen eine thermische Wolke eine sphärische Verteilung annimmt.

2.2. Die nichtdiagonale Fernordnung

Eine allgemeinere Beschreibung eines Bose-Einstein-Kondensats ermöglicht die Einführung der Einteilchen-Dichtematrix [38],

$$\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (2.9)$$

wobei sich die Feldoperatoren aus der Fouriertransformierten des jeweiligen Erzeugungs- und Vernichtungsoperators für Bosonen im Zustand \mathbf{k} ergeben:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}, \quad (2.10)$$

$$\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}^\dagger. \quad (2.11)$$

Hat man ein System vorliegen, in welchem nur ein Zustand \mathbf{k}_0 mit der Besetzungszahl N_0 makroskopisch besetzt ist, so folgt für die Impulsverteilung $n_{\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \rangle$ ein Ausdruck der Form

$$n_{\mathbf{k}} = N_0 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_0} + f(\mathbf{k}). \quad (2.12)$$

Damit ergibt sich für (2.9) die Beziehung

$$\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = n_0 + \frac{2}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} f(\mathbf{k}). \quad (2.13)$$

Ist die Funktion $f(\mathbf{k})$ hinreichend glatt, so verschwindet die Fouriertransformierte für große $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, so dass nur der konstante Beitrag

$$\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle \rightarrow n_0 \quad (2.14)$$

verbleibt (vgl. Abbildung 2.2), aus welchem sich das Vorhandensein eines Kondensats ergibt. Dies wird auch als nichtdiagonale Fernordnung bezeichnet.

Anschaulich bedeutet dies, dass die Erzeugung eines Teilchens an der Stelle \mathbf{r} sowie die Vernichtung eines Teilchens an der Stelle \mathbf{r}' eine kohärente Amplitude und Phase aufweist. In einer normalen Flüssigkeit hingegen ist ein solcher Vorgang außer für Orte \mathbf{r} und \mathbf{r}' , welche dicht beieinander liegen, inkohärent. Da man im Grenzfall $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$ für die Einteilchen-Dichtematrix eine Konstante erhält, lassen sich die Orte \mathbf{r} und \mathbf{r}' als statistisch unabhängig betrachten, so dass man die Einteilchen-Dichtematrix zu

$$\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle \rightarrow \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \rangle \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle \quad (2.15)$$

umschreiben kann. An dieser Stelle lässt sich über

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle \quad (2.16)$$

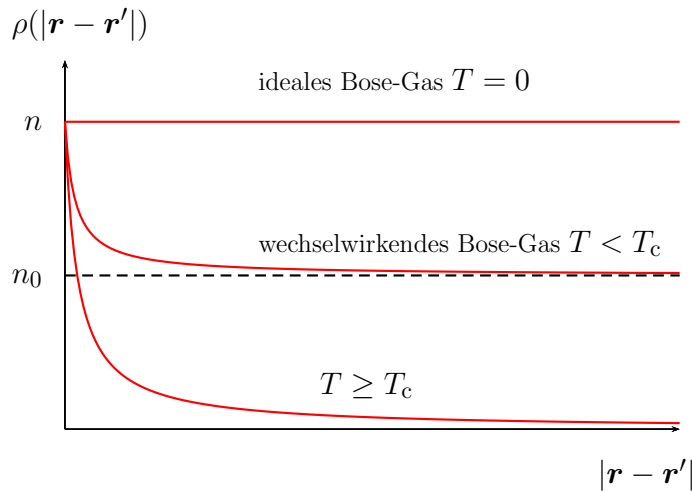


Abbildung 2.2.: Einteilchen-Dichtematrix $\rho(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ als Funktion des Abstandes $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Für ein ideales Bose-Gas ergibt sich bei $T = 0$ eine Konstante n , wohingegen das wechselwirkende Bose-Gas für $T < T_c$ mit zunehmendem Abstand von n aus gegen eine kleinere Konstante n_0 konvergiert. Oberhalb der kritischen Temperatur ist die Kondensatsdichte null, so dass die Einteilchen-Dichtematrix schnell gegen null konvergiert.

ein Ordnungsparameter bzw. eine makroskopische Wellenfunktion definieren, welche über

$$\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \psi_0^*(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}') \quad (2.17)$$

mit der Einteilchen-Dichtematrix verknüpft ist und für $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ die Teilchendichte im Kondensat beschreibt. Der Vorteil in der Beschreibung eines Kondensats über die Einteilchen-Dichtematrix ist auf die allgemeine Anwendbarkeit zurückzuführen. Liegt in einem System eine Wechselwirkung zwischen Teilchen vor, so lässt sich häufig kein Einteilchen-Zustand mehr definieren, so dass das System nicht mehr wie in Abschnitt 2.1 behandelt werden kann. Die Einteilchen-Dichtematrix jedoch ermöglicht auch die Beschreibung eines Systems mit starken Korrelationen wie im Fall von flüssigem ^4He , in welchem für $T = 0$ nur ca. 8% der Teilchen in der kondensierten Phase vorliegen [39].

2.3. Wechselwirkungen zwischen Teilchen

Die auftretenden Wechselwirkungen zwischen den Partikeln lassen sich durch ihren kurz- und langreichweitigen Charakter unterscheiden. Da für diese Arbeit nur verdünnte BEK von Bedeutung sind, beschränken sich die folgenden Ausführungen auf Wechselwirkungen zwischen zwei Teilchen. In Kondensaten mit hoher Dichte führen Kollisionen von drei Teilchen zu einem Teilchenverlust und beschränken die Lebensdauer des BEK.

Um kurz- und langreichweitige Wechselwirkungen zu unterscheiden, verwenden wir das Kriterium, wonach Wechselwirkungen mit endlichem totalen Wirkungsquerschnitt und einem differentiellen Wirkungsquerschnitt ohne singuläres Verhalten als kurzreichweitige Wechselwirkung betrachtet werden. Es lässt sich zeigen, dass ein Wechselwirkungspotential in diesem Fall für große Abstände schneller als $1/r^3$ gegen null abfällt.

2.3.1. Die Kontaktwechselwirkung

Der kurzreichweitige Teil der Wechselwirkung in Kondensaten wird über eine isotrope Streuung an einem schwachen Potential beschrieben. Die Einschränkung auf schwache Potentiale ermöglicht eine analytische Beschreibung über die Störungstheorie. Hierbei werden die eingehenden Partikel in großer Entfernung zum Potential als frei angenommen und über eine ebene Welle beschrieben, welche sich der Einfachheit halber mit der Wellenzahl k in z -Richtung bewegen soll. Die Wellenfunktion setzt sich für $|r| \rightarrow \infty$ aus der eingehenden ebenen Welle und einer ausgehenden Kugelwelle zusammen:

$$\psi_k(r) = e^{ikz} + f(\vartheta, k) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (2.18)$$

Die Größe $f(\vartheta, k)$ wird als Streuamplitude bezeichnet und hängt für sphärisch symmetrische Potentiale von ϑ und k ab, wobei der Winkel ϑ in Bezug auf die z -Achse gemessen wird. Die Streuamplitude ist von besonderer Bedeutung, da ihr Betrag über den differentiellen Wirkungsquerschnitt

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta, k)|^2 \quad (2.19)$$

messbar ist. Führt man eine Partialwellenzerlegung

$$f(\vartheta, k) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \vartheta) \quad (2.20)$$

durch, wobei l die Drehimpuls-Quantenzahl und P_l die Legendre-Polynome darstellen, so beinhalten die relativen Phasen δ_l sämtliche für den Streuvorgang relevanten Informationen. Diese relativen Phasen beschreiben den Phasenunterschied zwischen ausgehender Welle mit und ohne Streupotential. Da im Folgenden nur sehr tiefe Temperaturen relevant sind und folglich $k \approx 0$ gilt, nutzt man aus, dass für kurzreichweitige Potentiale im Falle von $k \rightarrow 0$ die Phasenverschiebungen für $l > 0$ rasch gegen null tendieren. In diesem Grenzbereich definiert man die s-Wellen-Streulänge a zu

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} \frac{\delta_0}{k} \quad (2.21)$$

und erhält für die Streuamplitude eine isotrope Funktion $f = -a$. Aufgrund der sehr tiefen Temperaturen wird in einem BEK die de Broglie-Wellenlänge so groß, dass die Wellenfunktion in dem Raumbereich, in welchem sich das Potential auf selbige auswirkt, als

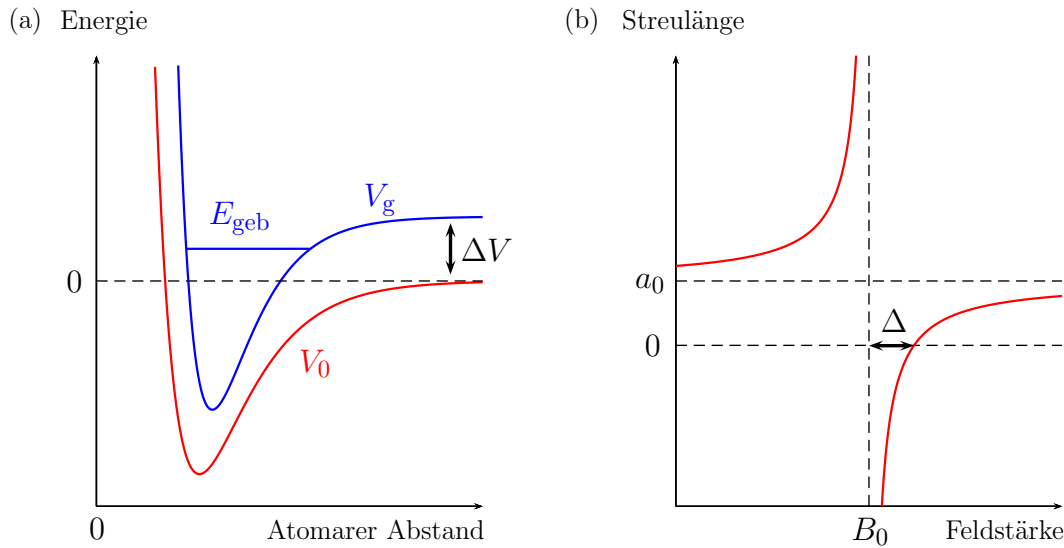


Abbildung 2.3.: (a) Potential des geschlossenen und offenen Kanals V_g und V_0 als Funktion des Abstandes. Die Streulänge ist von ΔV abhängig. (b) Streulänge als Funktion der Magnetfeldstärke. In der Umgebung von B_0 divergiert die Streulänge, so dass durch diese Feshbach-Resonanz theoretisch der gesamte Wertebereich angenommen werden kann.

nahezu konstant betrachtet werden kann. Dadurch genügt es, das tatsächliche Streupotential durch ein punktförmiges Pseudopotential zu ersetzen, welches die gleichen Streueigenschaften aufweist. Der Hamiltonoperator, welcher die Streuung beschreibt, lässt sich in dieser Näherung durch

$$H_s = \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \delta(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

darstellen, wobei m die Masse des Partikels darstellt.

2.3.2. Feshbach-Resonanzen

Um die Streulänge a in einem Experiment mit einem BEK zu ändern, macht man sich das Phänomen der Feshbach-Resonanz [33, 34] zunutze. Hierbei ändert sich die Streulänge drastisch durch eine Kopplung zwischen den eingehenden und üblicherweise freien Partikeln und einem gebundenen Zustand im Streupotential. Die unterschiedlichen gebundenen Zustände sind auf die inneren Freiheitsgrade der Atome zurückzuführen, welche jeweils zu einem unterschiedlichen Wechselwirkungspotential führen können. Wie man in Schaubild 2.3 erkennen kann, lassen sich geschlossene und offene Kanäle unterscheiden. Beim offenen Kanal ist das eingehende Partikel frei, wohingegen für den geschlossenen Kanal ein gebundener Zustand für $E > 0$ ermöglicht wird. Die Stärke der Kopplung

wird durch die Verschiebung ΔV bestimmt, welche sich über ein externes Magnetfeld variieren lässt, falls die beiden unterschiedlichen atomaren Zustände sich in ihren magnetischen Momenten unterscheiden. Da die Streulänge a von der Verschiebung ΔV abhängig ist, lässt sich so die Streulänge magnetisch ändern. Hierbei liegt die Streulänge für $E_{\text{geb}} > 0$ unter dem Wert a_0 , welcher ohne geschlossenen Kanal vorliegt, während für $E_{\text{geb}} < 0$ ein Wert angenommen wird welcher über a_0 liegt. Der Fall $E_{\text{geb}} = 0$ wird als Feshbach-Resonanz bezeichnet.

Nahe dieser Resonanz, lässt sich der Zusammenhang von Streulänge und externem Magnetfeld durch die Beziehung [40]

$$a(B) = a_0 \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right) \quad (2.23)$$

darstellen. Hierbei ist B_0 die Magnetfeldstärke, bei welcher der gebundene Zustand im Kontinuum von V_0 die Energie null aufweist, während Δ die Breite der Resonanz beschreibt. Der Verlauf dieser Funktion wird in Schaubild 2.3 graphisch wiedergegeben. Theoretisch kann durch eine Feshbach-Resonanz der gesamte Wertebereich der Streulänge angenommen werden. Jedoch führt die starke Änderung der Streulänge nahe der Resonanz dazu, dass in diesem Bereich das externe Magnetfeld sehr genau kontrolliert werden muss. Zudem führen Feshbach-Resonanzen verstärkt zu Dreikörper-Kollisionen [41], welche die Lebensdauer des BEK reduzieren.

2.3.3. Die dipolare Wechselwirkung

Atome mit magnetischen Dipolmomenten wie ^{52}Cr und ^{164}Dy ermöglichen es, BEK mit einer langreichweitigen und anisotropen Wechselwirkung zu realisieren. Die Wechselwirkungsenergie zweier punktförmiger Dipole $\boldsymbol{\mu}_1$ und $\boldsymbol{\mu}_2$ an den Orten \mathbf{r} und \mathbf{r}' lässt sich über die Beziehung

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\mu}_2 - 3(\boldsymbol{\mu}_1 \mathbf{e}_r)(\boldsymbol{\mu}_2 \mathbf{e}_r)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} - \frac{2}{3} \mu_0 \boldsymbol{\mu}_1 \boldsymbol{\mu}_2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.24)$$

beschreiben. Man beachte, dass der zweite Term einen fixen Wert aufweist und die Streulänge aus der Kontaktwechselwirkung entsprechend verschiebt. Wird in einem Experiment die Streulänge gemessen, so erhält man tatsächlich die Summe dieser beiden Werte. In den folgenden Abschnitten wird entsprechend der fixe Beitrag aus der dipolaren Wechselwirkung in der zuvor definierten Streulänge a mitberücksichtigt, so dass mit der dipolaren Wechselwirkung folglich ausschließlich der langreichweitige Anteil gemeint ist. Da wir in dieser Arbeit nicht an einer willkürlichen Ausrichtung der Dipole interessiert sind, kann der Ausdruck für die dipolare Wechselwirkung vereinfacht werden, indem wir annehmen, dass alle Dipole durch ein äußeres Magnetfeld in z -Richtung orientiert

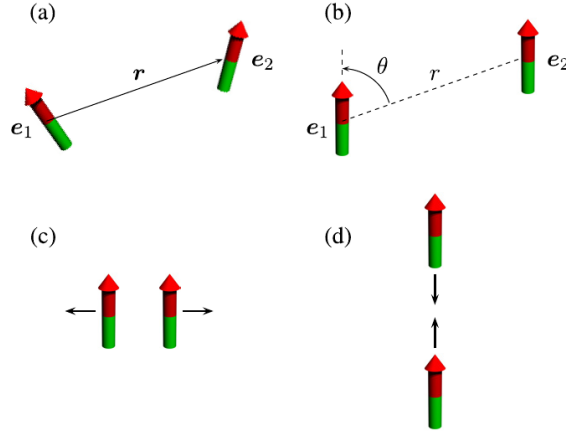


Abbildung 2.4.: Wechselwirkung zweier Dipole. (a) Nicht-polarisierter Fall. (b) Polarisierter Fall. (c) Zwei Dipole, welche horizontal benachbart sind, stoßen sich ab (*side-by-side* Konfiguration). (d) Zwei Dipole, welche vertikal benachbart sind, ziehen sich an (*head-to-tail* Konfiguration). Aus [14].

sind. Man erhält hieraus für identische magnetische Dipole μ die Beziehung

$$U_d(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \frac{1 - 3\cos^2 \theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}. \quad (2.25)$$

Hierbei ist θ der Winkel zwischen der z -Achse und dem Vektor $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Der Kosinus lässt sich auch in Abhängigkeit der kartesischen Koordinaten als $\cos^2 \theta = (z - z')^2 / (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2$ darstellen. Aus (2.25) wird ersichtlich, dass sich zwei Dipole abstoßen, falls sie horizontal benachbart sind ($\theta = 90^\circ$), wohingegen sie sich bei vertikaler Nachbarschaft ($\theta = 0^\circ$) anziehen. Diese beiden Fälle werden im Folgenden als *side-by-side* bzw. *head-to-tail* Konfiguration bezeichnet (vgl. Abbildung 2.4).

2.4. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung

Mit Hilfe der Quantenfeldtheorie lässt sich ein Vielteilchen-System mathematisch besonders elegant beschreiben. Hierbei lässt sich der Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung durch

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d^3r \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.26)$$

darstellen, wobei m die Masse, V bzw. U das externe und das Wechselwirkungspotential sowie $\hat{\Psi}$ die bosonischen Feldoperatoren bezeichnen. Aufgrund der Symmetriebedingungen für Bosonen müssen die bosonischen Feldoperatoren die folgenden Vertauschungsrelationen erfüllen:

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \right] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.27)$$

$$\left[\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') \right] = 0, \quad (2.28)$$

$$\left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right] = 0. \quad (2.29)$$

Die Zeitentwicklung der Feldoperatoren im Heisenbergbild wird durch die Relation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H} \right] \quad (2.30)$$

beschrieben und ergibt mit Hilfe der Vertauschungsrelationen (2.27) bis (2.29) nach einigen Umformungen letztlich eine Operatorgleichung für die Zeitentwicklung des Feldoperators:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \int d^3r' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}', t) \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Im nächsten Schritt wird nun angenommen, dass sich die Dichteverteilung über ein Skalarfeld mit kleinen Fluktuationen beschreiben lässt. Dies bedeutet, dass sich der Feldoperator zu

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle + \delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) \quad (2.32)$$

schreiben lässt, wobei $\langle \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle$ der Ordnungsparameter ist und $\delta\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ die Fluktuationen beschreibt. In der *mean-field*-Näherung werden die Fluktuationen vernachlässigt und es wird wie in Abschnitt 2.2 der Feldoperator durch einen skalaren Ordnungsparameter ersetzt. Die Vernachlässigung der Fluktuationen setzt voraus, dass sich die meisten der Teilchen im Grundzustand befinden. Daher ist die *mean-field*-Näherung nur für Kondensate anwendbar, deren Temperatur deutlich unterhalb der kritischen Temperatur T_c liegen. Mit dem Wechselwirkungspotential

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}, \quad (2.33)$$

dem externen harmonischen Potential

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (2.34)$$

und der Einführung der Einteilchen-Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}, t) = N^{-\frac{1}{2}}\langle\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$, welche auf $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ normiert ist, erhält man die erweiterte zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (GPG):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\hat{h} + N \left(\frac{4\pi a\hbar^2}{m} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{\mu_0\mu^2}{4\pi} \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi(\mathbf{r}', t)|^2 \right) \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.35)$$

mit

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m(\omega_x^2x^2 + \omega_y^2y^2 + \omega_z^2z^2). \quad (2.36)$$

Gleichung (2.35) weist die Form einer nichtlinearen Schrödingergleichung auf und bestimmt die zeitliche Entwicklung der Einteilchen-Wellenfunktion, welche die Dichteverteilung des Kondensats bei $T = 0$ beschreibt. Für diese Temperatur sind alle Teilchen im Grundzustand und die Gesamtwellenfunktion lässt sich als Produkt aller Einteilchen-Wellenfunktionen schreiben. Hierfür muss die Längenskala, welche durch die Dichte im BEK vorgegeben wird, größer sein als jene, welche durch die Wechselwirkungen im System bestimmt wird, da hierdurch Korrelationen vernachlässigt werden können. In Systemen mit ausschließlich kurzreichweitigen Wechselwirkungen ist dies die Streulänge a . Wie sich mittels Quanten-Monte-Carlo-Simulationen zeigen lässt, ist auch der langreichweitige Charakter der dipolaren Wechselwirkung unproblematisch [42], falls die Abhängigkeit der Streulänge vom Dipolmoment mitberücksichtigt wird¹. Zudem haben Yi *et al.* [43] gezeigt, dass die zeitgleiche Verwendung des richtigen dipolaren Potentials und eines Pseudopotentials in der GPG gerechtfertigt ist, da man für das Pseudopotential in erster Born'scher Näherung wieder das exakte dipolare Potential selbst erhält, so dass die GPG eine ausreichend genaue Beschreibung der Grundzustände und der Dynamik in einem BEK ermöglicht.

Als *mean-field*-Energie wird der Erwartungswert des Vielteilchen-Hamiltonoperators (2.26)

$$E_{\text{mf}} = N \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \hat{h} \psi(\mathbf{r}) + \frac{N^2}{2} \int d^3r \left(\frac{4\pi a\hbar^2}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{\mu_0\mu^2}{4\pi} \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2\theta'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi(\mathbf{r}')|^2 \right) |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.37)$$

bezeichnet, wohingegen der Erwartungswert des Hamiltonoperators aus der *mean-field*-Näherung (2.35)

¹Die Abhängigkeit der Streulänge vom Dipolmoment lässt sich darauf zurückführen, dass im dipolaren Potential (2.24) ein kurzreichweitiger Term auftritt. Für diese Arbeit relevant sind jedoch ausschließlich ⁵²Cr und ¹⁶⁴Dy, welche jeweils ein permanentes konstantes Dipolmoment aufweisen.

$$\begin{aligned} \varepsilon = & \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \hat{h} \psi(\mathbf{r}) \\ & + N \int d^3r \left(\frac{4\pi a \hbar^2}{m} |\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2\vartheta'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi(\mathbf{r}')|^2 \right) |\psi(\mathbf{r})|^2 \end{aligned} \quad (2.38)$$

als chemisches Potential bezeichnet wird. Hierbei bezeichnet $\psi(\mathbf{r})$ den Ortsteil der stationären Gesamtwellenfunktion, welche sich aus dem Produkt von $\psi(\mathbf{r})$ und einem Phasenfaktor $e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t}$ ergibt.

2.5. Das Integral der dipolaren Wechselwirkung

Anspruchsvoll an der Auswertung der GPG ist die Singularität, über welcher bei der Auswertung der dipolaren Wechselwirkung

$$\Phi_d(\mathbf{r}) = \int_{V'} d^3r' \frac{1 - 3\frac{(z-z')^2}{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi(\mathbf{r}')|^2 \quad (2.39)$$

integriert werden muss. Eine mögliche Lösung besteht darin, das Integral über die Fourier-Transformation zu bestimmen. Hierzu nutzt man die aus der klassischen Elektrodynamik bekannte Relation

$$\Delta_{\mathbf{r}} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = (\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2) \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -4\pi \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.40)$$

aus, wobei in diesem Fall nur die Ableitung nach z relevant ist:

$$\partial_z^2 \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = -\frac{1 - 3\frac{(z-z')^2}{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} - \frac{4\pi}{3} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.41)$$

Hierdurch lässt sich der Ausdruck (2.39) unter Ausnutzung der Kommutativität von Integration und Differentiation zu

$$\Phi_d(\mathbf{r}) = -\partial_z^2 \xi(\mathbf{r}) - \frac{4\pi}{3} |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.42)$$

schreiben, wobei

$$\xi(\mathbf{r}) = \int_{V'} d^3r' \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\psi(\mathbf{r}')|^2 \quad (2.43)$$

die Poisson-Gleichung

$$\Delta \xi(\mathbf{r}) = -4\pi |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.44)$$

erfüllt. Im nächsten Schritt wird (2.44) mit Hilfe der Fourier-Transformation gelöst:

$$\xi(\mathbf{r}) = 4\pi \mathcal{F}^{-1} \left\{ \frac{\mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r})|^2\}}{k^2} \right\}. \quad (2.45)$$

Von Bedeutung ist hierbei auf Grund von (2.42) letztlich die zweite Ableitung nach z , d.h.

$$\partial_z^2 \xi(\mathbf{r}) = 4\pi \mathcal{F}^{-1} \left\{ -\frac{k_z^2}{k^2} \mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r})|^2\} \right\}. \quad (2.46)$$

Setzt man diesen Ausdruck in (2.42) ein, so erhält man einen Ausdruck, welcher keine Singularität mehr enthält [44]:

$$\begin{aligned} \Phi_d(\mathbf{r}) &= -\partial_z^2 \xi(\mathbf{r}) - \frac{4\pi}{3} |\psi(\mathbf{r})|^2 \\ &= \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F} \left\{ -4\pi \mathcal{F}^{-1} \left\{ -\frac{k_z^2}{k^2} \mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r})|^2\} \right\} - \frac{4\pi}{3} |\psi(\mathbf{r})|^2 \right\} \right\} \\ &= \frac{4\pi}{3} \mathcal{F}^{-1} \left\{ \left(\frac{3k_z^2}{k^2} - 1 \right) \mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r})|^2\} \right\}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Mit Hilfe des Faltungssatzes der Fourier-Transformation lässt sich zudem die Fourier-transformierte des dipolaren Potentials bestimmen. Hierzu schreibt man (2.39) zu

$$\begin{aligned} \Phi_d(\mathbf{r}) &= \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F} \left\{ \int_{V'} d^3 r' \frac{1 - 3\frac{(z-z')^2}{(\mathbf{r}-\mathbf{r}')^2}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3} |\psi(\mathbf{r}')|^2 \right\} \right\} \\ &= \sqrt{2\pi}^3 \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F} \left\{ \frac{1 - 3\frac{z^2}{\mathbf{r}^2}}{|\mathbf{r}|^3} \right\} \mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r})|^2\} \right\} \end{aligned} \quad (2.48)$$

und erhält über einen Vergleich mit (2.47) den Ausdruck

$$\tilde{U}_d(\mathbf{k}) = \sqrt{2\pi}^3 \mathcal{F} \left\{ \frac{1 - 3\frac{z^2}{\mathbf{r}^2}}{|\mathbf{r}|^3} \right\} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{3k_z^2}{k^2} - 1 \right). \quad (2.49)$$

2.6. Die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen

Auf Grund der Nichtlinearität der GPG können stationäre Zustände bezüglich kleiner Störungen sowohl stabil als auch instabil sein. Die Auswertung der Bogoliubov-de

Gennes-Gleichungen ermöglicht es, die Dynamik des Systems in der Umgebung eines stationären Zustandes zu untersuchen. Hierdurch sind Aussagen über die Stabilität dieser Zustände möglich. Die Störung wird durch eine Relation der Form

$$\psi(\mathbf{r}, t) = (\psi_0(\mathbf{r}) + \lambda\vartheta(\mathbf{r}, t)) e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon t} \quad (2.50)$$

beschrieben, wobei $\psi_0(\mathbf{r})$ eine stationäre Lösung der GPG ist. Da wir eine schwache Störung annehmen gilt zudem $|\lambda| \ll 1$, während für die Form der Störung ein Ansatz gemäß

$$\vartheta(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + v^*(\mathbf{r})e^{i\omega t} \quad (2.51)$$

gewählt wird. Der Ansatz (2.50) für die Wellenfunktion wird nun in die erweiterte zeitabhängige GPG (2.35) eingesetzt, wobei auf Grund von $|\lambda| \ll 1$ nur Terme, welche linear in λ sind, berücksichtigt werden (Terme nullter Ordnung ergeben gerade die zeitunabhängige GPG), so dass letztlich die Beziehung

$$\begin{aligned} & \hat{h}u(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + \hat{h}v^*(\mathbf{r})e^{i\omega t} \\ & + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 [u(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + v^*(\mathbf{r})e^{i\omega t}] \\ & + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_0^*(\mathbf{r}') [u(\mathbf{r}')e^{-i\omega t} + v^*(\mathbf{r}')e^{i\omega t}] \psi_0(\mathbf{r}) \\ & + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}') [u^*(\mathbf{r}')e^{i\omega t} + v(\mathbf{r}')e^{-i\omega t}] \psi_0(\mathbf{r}) \\ & = (\varepsilon + \hbar\omega)u(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + (\varepsilon - \hbar\omega)v^*(\mathbf{r})e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (2.52)$$

verbleibt. Sortiert man nun die Terme vor $e^{-i\omega t}$ und $e^{i\omega t}$, so erhält man für $\omega \neq 0$ die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen

$$\begin{aligned} \hbar\omega u(\mathbf{r}) & = \left[\hat{h} - \varepsilon + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \right] u(\mathbf{r}) \\ & + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\psi_0^*(\mathbf{r}')u(\mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r}')v(\mathbf{r}')] \psi_0(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.53)$$

$$\begin{aligned} -\hbar\omega v(\mathbf{r}) & = \left[\hat{h} - \varepsilon + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \right] v(\mathbf{r}) \\ & + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\psi_0^*(\mathbf{r}')u(\mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r}')v(\mathbf{r}')] \psi_0^*(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.54)$$

Für den Fall $\omega = 0$ erhält man mit der Definition $w(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) + v^*(\mathbf{r})$ die Relation

$$\begin{aligned}
 0 = & \left[\hat{h} - \varepsilon + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \right] w(\mathbf{r}) \\
 & + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\psi_0^*(\mathbf{r}') w(\mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r}') w^*(\mathbf{r}')] \psi_0(\mathbf{r}). \quad (2.55)
 \end{aligned}$$

Hierbei sind die Lösungen von (2.53) und (2.54) für $u(\mathbf{r}) = w(\mathbf{r})$ und $v(\mathbf{r}) = w^*(\mathbf{r})$ mit enthalten, so dass (2.53) und (2.54) auch für $\omega = 0$ gelten. Die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen stellen ein lineares Eigenwertproblem für die Frequenz ω dar und beschreiben die Dynamik des Systems in der Umgebung der stationären Lösung. Man erhält hierbei das gesamte Bogoliubov-Spektrum $\{\omega_i\}$, welches die Eigenmoden einer kollektiven Anregung beschreibt, bei welcher sich alle Teilchen im selben Zustand befinden. Wie aus (2.51) folgt, beschreiben Lösungen mit reeller Frequenz ein stabiles System, wohingegen für imaginäre Eigenwerte eine dynamische Instabilität auftritt, da sich das System exponentiell vom stationären Zustand entfernt.

2.7. Die Thomas-Fermi-Näherung

Die Berechnung von Grundzuständen und der Dynamik eines Kondensats ist üblicherweise nur auf numerischem Wege, etwa über die Auswertung der GPG, möglich. Gewisse Näherungen erlauben jedoch analytische Lösungen und ermöglichen hierdurch sowohl die Kontrolle der numerischen Ergebnisse als auch auf Grund der vorhandenen mathematischen Struktur einen tiefer gehenden physikalischen Einblick. Eine solche Näherung liegt darin, den kinetischen Term in der GPG zu vernachlässigen. Dieser Ansatz wird als Thomas-Fermi (TF)-Näherung bezeichnet und liefert dann gute Ergebnisse, wenn die kinetische Energie gegenüber der Wechselwirkungsenergie vernachlässigbar ist. Für ein dipolares BEK in der TF-Näherung lässt sich zeigen [45, 46], dass die Dichteverteilung eine invertierte Parabel der Form

$$n(\mathbf{r}, t) = n_0 \left(1 - \frac{x^2}{R_x^2(t)} - \frac{y^2}{R_y^2(t)} - \frac{z^2}{R_z^2(t)} \right) \quad (2.56)$$

annimmt, mit n_0 als maximaler Dichte

$$n_0 = \frac{15N}{8\pi R_x(t) R_y(t) R_z(t)}, \quad (2.57)$$

wobei N die Teilchenzahl darstellt. Die Größen R_i bezeichnen die Thomas-Fermi-Radien und entsprechen der Ausdehnung des Kondensats in den drei Raumrichtungen. Für den Zusammenhang aus Fallenfrequenzen und TF-Radien erhält man [47, 48]² die Ausdrücke

²Laut [48] beinhaltet [47] einen Vorzeichenfehler. Im Folgenden angegeben ist die korrigierte Version aus [48].

$$\omega_x^2 = \bar{\omega}_x^2 \left(1 - \epsilon \left(f_{\text{dip}} + \kappa_{yx} \frac{\partial f_{\text{dip}}}{\partial \kappa_{yx}} + \kappa_{zx} \frac{\partial f_{\text{dip}}}{\partial \kappa_{zx}} \right) \right), \quad (2.58)$$

$$\omega_y^2 = \bar{\omega}_y^2 \left(1 - \epsilon \left(f_{\text{dip}} - \kappa_{yx} \frac{\partial f_{\text{dip}}}{\partial \kappa_{yx}} \right) \right), \quad (2.59)$$

$$\omega_z^2 = \bar{\omega}_z^2 \left(1 - \epsilon \left(f_{\text{dip}} - \kappa_{zx} \frac{\partial f_{\text{dip}}}{\partial \kappa_{zx}} \right) \right). \quad (2.60)$$

Hierbei sind ω_i die Fallenfrequenzen in den jeweiligen drei Raumrichtungen, während $\bar{\omega}_i = 8\pi a \hbar^2 n_0 / (m^2 R_i^2)$ und $\kappa_{yx} = R_y / R_x$ sowie $\kappa_{zx} = R_z / R_x$ die Breitenverhältnisse des Kondensates darstellen. Die Größe ϵ gibt das Verhältnis aus dipolarer Länge und Streulänge wieder. Die Funktion f_{dip} wird als *dipolare anisotrope Funktion* bezeichnet und hat die Form

$$f_{\text{dip}}(\kappa_{yx}, \kappa_{zx}) = 1 + 3\kappa_{yx}\kappa_{zx} \frac{E(\phi, k) - F(\phi, k)}{(1 - \kappa_{zx}^2)\sqrt{1 - \kappa_{yx}^2}}, \quad (2.61)$$

wobei E und F unvollständige elliptische Integrale erster und zweiter Art sind, während die Argumente dieser Integrale durch die Ausdrücke

$$\sin \phi = \sqrt{1 - \kappa_{yx}^2} \quad (2.62)$$

und

$$k^2 = \frac{1 - \kappa_{zx}^2}{1 - \kappa_{yx}^2} \quad (2.63)$$

gegeben sind. Der typische Verlauf dieser Funktion ist in Abbildung 2.5 wiedergegeben und liegt zwischen den Werten -2 und 1, wobei sich die Abbildung auf den Spezialfall gleicher Argumente beschränkt³.

Betrachtet man nicht nur stationäre Zustände in einer externen Falle, sondern auch die Expansionsdynamik eines Kondensats, so ist die Verwendung der TF-Näherung nur noch bedingt sinnvoll. Während der Expansionsphase wird die Wechselwirkungsenergie des Kondensats in kinetische Energie umgewandelt, so dass diese nicht mehr vernachlässigbar ist. Jedoch lässt sich die kinetische Energie in zwei Beiträge separieren, dem vernachlässigbaren Beitrag des Quantendrucks und jenem, welcher durch die Expansion hinzukommt. Analytisch lässt sich der Unterschied beschreiben, indem man eine Wellenfunktion der Form

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{n(\mathbf{r})} e^{iS(\mathbf{r})} \quad (2.64)$$

³In diesem Fall nimmt f_{dip} die Form $f_{\text{dip}}(\kappa, \kappa) = \frac{1+2\kappa^2}{1-\kappa^2} - \frac{3\kappa^2 \tanh^{-1} \sqrt{1-\kappa^2}}{(1-\kappa^2)^{3/2}}$ an.

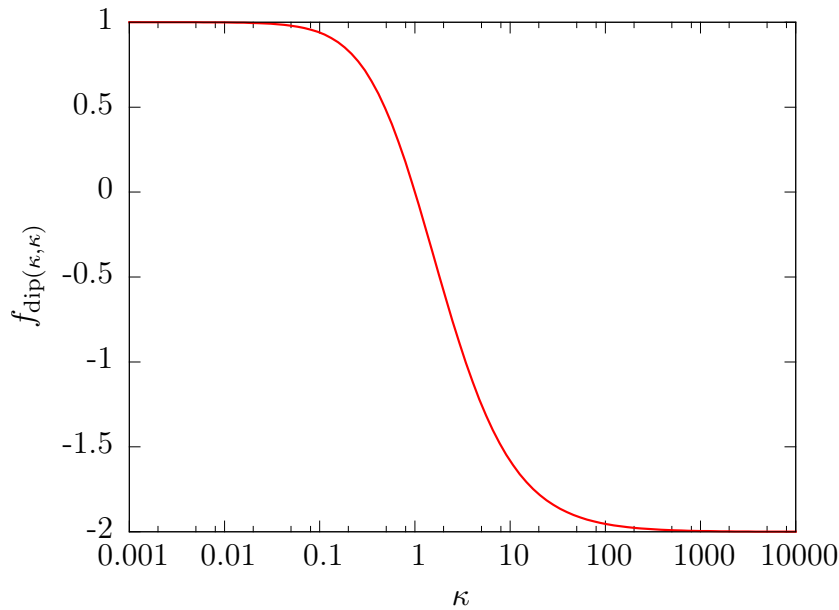


Abbildung 2.5.: Typischer Verlauf der *dipolaren anisotropen Funktion* f_{dip} . Aufgetragen ist der Spezialfall für gleiche Argumente. Eine ausführliche Diskussion von f_{dip} findet sich in [47].

betrachtet. Der vernachlässigbare Quantendruck ergibt sich aus der Variation der Dichte $\nabla n(\mathbf{r})$, während sich der geschwindigkeitsabhängige Teil aus der Variation der Phase $\nabla S(\mathbf{r})$ ergibt. Ist der Ausdruck

$$\xi = \frac{\hbar}{\sqrt{2m\varepsilon}}, \quad (2.65)$$

welcher auch als *healing length* bezeichnet wird, kleiner als der Ausdruck

$$l = \left(\frac{\nabla^2 \sqrt{n}}{\sqrt{n}} \right), \quad (2.66)$$

so ist der Quantendruck vernachlässigbar und es lässt sich eine hydrodynamische Gleichung zur Beschreibung der Expansionsdynamik herleiten. Hieraus folgen letztlich Skalierungsgleichungen für die Expansion des Kondensats der Form

$$\frac{\partial^2 b_x}{\partial t^2} = \frac{\bar{\omega}_x^2}{b_x^2 b_y b_z} \left(1 - \epsilon \left(f_{\text{dip}} - b_x \frac{\partial f_{\text{dip}}}{\partial b_x} \right) \right), \quad (2.67)$$

$$\frac{\partial^2 b_y}{\partial t^2} = \frac{\bar{\omega}_y^2}{b_x b_y^2 b_z} \left(1 - \epsilon \left(f_{\text{dip}} - b_y \frac{\partial f_{\text{dip}}}{\partial b_y} \right) \right), \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial^2 b_z}{\partial t^2} = \frac{\bar{\omega}_z^2}{b_x b_y b_z^2} \left(1 - \epsilon \left(f_{\text{dip}} - b_z \frac{\partial f_{\text{dip}}}{\partial b_z} \right) \right), \quad (2.69)$$

mit $f_{\text{dip}} = f_{\text{dip}}(\kappa_y^0 b_y/b_x, \kappa_z^0 b_z/b_x)$, $b_i = b_i(t) = R_i(t)/R_i(0)$, $\kappa_y^0 = R_y(0)/R_x(0)$ und $\kappa_z^0 = R_z(0)/R_x(0)$. Man beachte, dass $\bar{\omega}$ aus dem anfänglichen Radius des Kondensates resultiert und somit nicht von der Zeit abhängig ist. Durch die Abhängigkeit von f_{dip} und $\partial f_{\text{dip}}/\partial \kappa$ ist die Expansionsdynamik nichtlinear. Dies kann dazu führen, dass im Gegensatz zum idealen Gas (siehe Abschnitt 2.1) keine Invertierung des Breitenverhältnisses während der Expansion zustande kommt.

3. Numerische Methoden und Implementierung

Bei der GPG handelt es sich um eine nichtlineare partielle Integro-Differentialgleichung, für welche nur in wenigen Spezialfällen, wie der TF-Näherung, analytische Lösungen existieren. Zur Lösung der GPG bieten sich sowohl ein voll-numerischer Ansatz, bei welchem eine Wellenfunktion auf einem Gitter vorgegeben und hieraus der Grundzustand bestimmt wird, als auch ein Variationsansatz an, bei welchem über Variationsparameter die entsprechende Lösung gefunden wird. Der Variationsansatz bietet den Vorteil, eine klare mathematische Struktur zu besitzen, ist jedoch weniger flexibel als der voll-numerische Ansatz, da die möglichen Lösungen stärker vom vorgegebenen Ansatz abhängig sind. Im Folgenden soll mit der Split-Operator-Methode und der Imaginärzeitentwicklung das für diese Arbeit relevante numerische Werkzeug zur Bestimmung der Grundzustände beschrieben werden. Die Split-Operator-Methode ermöglicht es zudem, bei Verwendung der realen Zeit die Dynamik des Kondensats zu untersuchen. Zuletzt werden die für die Implementierung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen notwendigen mathematischen Umformungen vorgestellt.

3.1. Die Split-Operator-Methode

Die Zeitentwicklung eines quantenmechanischen Zustandes $|\varphi\rangle$ lässt sich über die Anwendung des Zeitentwicklungsoperators (ab hier gilt $\hbar = 1$)

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t} \tag{3.1}$$

beschreiben, wobei \hat{H} den Hamiltonoperator darstellt. Bei dem Zeitentwicklungsoperator \hat{U} handelt es sich um einen unitären Operator, wodurch die Norm des Zustandes auch nach dessen Anwendung erhalten bleibt. Der Hamiltonoperator \hat{H} besteht im Allgemeinen aus zwei Teilen, dem kinetischen Teil \hat{T} und einem Potentialterm \hat{V} . Mit Hilfe der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel [49] lässt sich der Zeitentwicklungsoperator symmetrisch aufteilen:

$$\begin{aligned} \hat{U}(\Delta t) &= e^{-i\hat{H}\Delta t} = e^{-i(\hat{T}+\hat{V})\Delta t} \\ &\approx e^{-i\frac{1}{2}\hat{T}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{1}{2}\hat{T}\Delta t}. \end{aligned} \tag{3.2}$$

Der Fehler, welcher durch diese Näherung verursacht wird, ist von der Ordnung $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Der Nutzen in dieser Aufteilung liegt darin, dass der Zeitentwicklungsoperator in dieser Form leicht anwendbar ist, da \hat{T} im Fourierraum und \hat{V} im Ortsraum diagonal ist. Projiziert man das Resultat der Anwendung des Zeitentwicklungsoperators auf die Ortsbasis und macht von der Vollständigkeitsrelation $\int d\nu |\nu\rangle \langle \nu| = 1$ Gebrauch, so erhält man:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \left\langle \mathbf{r} \left| \hat{U}(\Delta t) \right| \psi \right\rangle \\ &= \left\langle \mathbf{r} \left| e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2}\Delta t} e^{-iV(\hat{\mathbf{r}})\Delta t} e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2}\Delta t} \right| \psi \right\rangle \\ &= \int d^3p' d^3r' d^3p \langle \mathbf{r} | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2}\Delta t} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | e^{-iV(\hat{\mathbf{r}})\Delta t} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2}\Delta t} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^9} \int d^3p' d^3r' d^3p e^{i\mathbf{r}\mathbf{p}'} e^{-i\frac{p'^2}{2}\Delta t} e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}'} e^{-iV(\mathbf{r}')\Delta t} e^{i\mathbf{r}'\mathbf{p}} e^{-i\frac{p^2}{2}\Delta t} \tilde{\psi}(\mathbf{p}). \quad (3.3) \end{aligned}$$

Der Ausdruck (3.3) legt das folgende Vorgehen nahe:

- Zu Beginn ist eine Startwellenfunktion $\psi(\mathbf{r})$ auf einem Gitter definiert, und man erhält hieraus über eine Fourier-Transformation $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$.
- Die Fourier-Transformierte wird mit $e^{-i\frac{p^2}{2}\Delta t}$ multipliziert.
- Das Ergebnis wird nun in den Ortsraum zurücktransformiert und mit $e^{-iV(\mathbf{r})\Delta t}$ multipliziert.
- Es folgt eine weitere Fourier-Transformation und Multiplikation mit $e^{-i\frac{p^2}{2}\Delta t}$.
- Zuletzt erfolgt erneut eine Rücktransformation in den Ortsraum.

Berücksichtigt man die zwei Fourier-Transformationen für die Berechnung der dipolaren Wechselwirkung (2.47), so sind pro Zeitschritt sechs Fourier-Transformationen notwendig. Ist man hingegen nicht daran interessiert, die Wellenfunktion im Ortsraum nach jedem durchgeführten Zeitschritt auslesen zu können, so müssen pro Zeitschritt nur vier Fourier-Transformationen berechnet werden.

3.2. Die Imaginärzeitentwicklung

Mit Hilfe des Zeitentwicklungsoperators (3.1) lässt sich nicht nur die zeitliche Dynamik eines Systems beschreiben, vielmehr bietet diese Methode durch Einführung einer imaginären Zeit $\tau = it$ (Wick-Rotation) eine Möglichkeit, Grundzustände durch sukzessives Dämpfen der angeregten Zustände zu berechnen. Hierzu schaut man sich die Wirkung

des Zeitentwicklungsoperators mit imaginärer Zeit τ auf einen Zustand $|\varphi\rangle$ an, welcher auf die Eigenbasis $|\phi_n\rangle$ des Hamilton-Operators \hat{H} projiziert wird:

$$U(\tau) |\varphi\rangle = e^{-\hat{H}\tau} \sum_n |\phi_n\rangle \langle\phi_n| \varphi\rangle = \sum_n e^{-\epsilon_n\tau} c_n |\phi_n\rangle. \quad (3.4)$$

Wie man sieht, wird jeder Eigenzustand mit der Entwicklung gedämpft, wobei dies jedoch für angeregte Zustände schneller geschieht als für den Grundzustand. In einem linearen System führt diese Entwicklung zwangsläufig zur Konvergenz in den Grundzustand. Da jedoch die Beschreibung eines BEK über die nichtlineare GPG erfolgt, ist in dem hier vorliegenden Fall eine Konvergenz hin zum Grundzustand mathematisch nicht garantiert, da die Eigenbasis vom Zustand selbst abhängig ist und sich somit nach jedem Zeitschritt ändert. Daher ist in der Praxis der Vergleich mit Ergebnissen der Variationsrechnungen oder die Wahl einer Startwellenfunktion, welche dem angestrebten Grundzustand hinreichend ähnlich ist, notwendig. Da die Imaginärzeitentwicklung nur in der Lage ist, Grundzustände zu berechnen, muss für angeregte Zustände auf Variationsrechnungen zurückgegriffen werden. Es ist jedoch möglich, die zeitliche Entwicklung eines angeregten Zustandes in der Realzeit t mit Hilfe der im vorherigen Abschnitt vorgestellten Split-Operator-Methode zu berechnen, falls die Lösungen der Variationsrechnungen als Startwellenfunktion für die Gitterrechnungen verwendet werden. Bei Verwendung der Imaginärzeitentwicklung ist darauf zu achten, dass der Zeitentwicklungsoperator nun nicht mehr unitär ist. Daher bleibt bei der Anwendung des Operators die Norm des Zustandes nicht erhalten, so dass der Zustand nach jedem Zeitschritt von neuem normiert werden muss.

Um entscheiden zu können ob nach einer gewissen Anzahl an Zeitschritten der Grundzustand bereits vorliegt, wird nach jedem Zeitschritt eine Größe, welche den Zustand charakterisiert, berechnet und mit dem entsprechenden Wert vor Ausführung des Zeitschritts verglichen. Als Konvergenzkriterium wird das chemische Potential verwendet. Um hierbei nicht auf die numerisch aufwändige Berechnung über (2.38) zurückgreifen zu müssen, verwenden wir stattdessen die Norm des Zustandes. Hat man sich über die Imaginärzeitentwicklung dem Grundzustand bereits hinreichend genau angenähert, so erhält man bei nochmaliger Anwendung von \hat{U} auf den aktuellen Zustand die Beziehung

$$\hat{U}(\Delta\tau) |\phi_0\rangle = e^{-\epsilon_0\Delta\tau} |\phi_0\rangle = |\tilde{\phi}_0\rangle. \quad (3.5)$$

Berechnet man die Norm \mathcal{N} des neuen Zustandes, so folgt

$$\mathcal{N}^2 = \langle\tilde{\phi}_0|\tilde{\phi}_0\rangle = e^{-2\epsilon_0\Delta\tau}, \quad (3.6)$$

woraus sich letztlich für den Eigenwert der Ausdruck

$$\epsilon_0 = -\frac{\ln \mathcal{N}}{\Delta\tau} \quad (3.7)$$

ergibt. Physikalisch hat dieser Ausdruck nur im Grenzwert $\tau \rightarrow \infty$ eine Bedeutung. Jedoch eignet er sich hervorragend als Konvergenzkriterium, da seine Berechnung numerisch weniger aufwändig ist als Berechnungen der *mean-field*-Energie über (2.37) oder des chemischen Potentials über (2.38).

3.3. Implementierung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen

Im Drei-Mulden-Einheitensystem (siehe Abschnitt 5.1) nehmen die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen (2.53) und (2.54) die folgende Form an:

$$\begin{aligned} \omega u(\mathbf{r}) = & \left[\hat{h} - \varepsilon + 8\pi Na |\psi_0(\mathbf{r})|^2 + 3Na_d \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2 \vartheta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \right] u(\mathbf{r}) \\ & [4\pi Na \psi_0(\mathbf{r})^2] v(\mathbf{r}) + 3Na_d \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2 \vartheta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} [\psi_0^*(\mathbf{r}')u(\mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r}')v(\mathbf{r}')] \psi_0(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} -\omega v(\mathbf{r}) = & \left[\hat{h} - \varepsilon + 8\pi Na |\psi_0(\mathbf{r})|^2 + 3Na_d \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2 \vartheta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \right] v(\mathbf{r}) \\ & [4\pi Na \psi_0^*(\mathbf{r})^2] u(\mathbf{r}) + 3Na_d \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2 \vartheta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} [\psi_0^*(\mathbf{r}')u(\mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r}')v(\mathbf{r}')] \psi_0^*(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Unter der Annahme einer reellen Wellenfunktion $\psi_0(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}$, erhält man hieraus mit den Definitionen

$$f(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) + v(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

$$-g(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r}), \quad (3.11)$$

$$A\chi = 4\pi Na \psi_0(\mathbf{r})^2 \chi(\mathbf{r}), \quad \chi = f, g, \quad (3.12)$$

$$B\chi = 3Na_d \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2 \vartheta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \psi_0(\mathbf{r}')^2 \chi(\mathbf{r}), \quad (3.13)$$

$$C\chi = 3Na_d \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2 \vartheta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \psi_0(\mathbf{r}') \chi(\mathbf{r}') \psi_0(\mathbf{r}) \quad (3.14)$$

die kompakte Form

$$\begin{pmatrix} 0 & -\hat{h} + \varepsilon - A - B \\ -\hat{h} + \varepsilon - 3A - B - 2C & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(\mathbf{r}) \\ g(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} f(\mathbf{r}) \\ g(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

Eine zweite Anwendung der Matrix führt zu einer Diagonalform

$$\begin{pmatrix} X_1 & 0 \\ 0 & X_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f(\mathbf{r}) \\ g(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \omega^2 \begin{pmatrix} f(\mathbf{r}) \\ g(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

mit

$$X_1 = (\hat{h} - \varepsilon + A + B)(\hat{h} - \varepsilon + 3A + B + 2C) \quad (3.17)$$

$$X_2 = (\hat{h} - \varepsilon + 3A + B + 2C)(\hat{h} - \varepsilon + A + B). \quad (3.18)$$

Die Matrixelemente des Laplace-Operators lassen sich über eine Fourier-Transformation bestimmen:

$$\Delta\chi(\mathbf{r}) = \mathcal{F}^{-1} \{k^2 \mathcal{F}(\chi(\mathbf{r}))\}. \quad (3.19)$$

Da die Matrix für das hier vorliegende Problem hochdimensional ist, bietet sich die Verwendung eines iterativen Verfahrens an. Für diese Arbeit wurde die *implicitly restarted Arnoldi method* aus der Fortran-Bibliothek ARPACK [50] verwendet.

4. Kollision quasi-zweidimensionaler Solitonen

Die Existenz von Solitonen ist ein bereits aus der nichtlinearen Optik bekanntes Phänomen [51]. Während in der linearen Optik ein Lichtpuls während der Propagation durch ein Medium auf Grund der Abhängigkeit des Brechungsindex von der Frequenz zerfließt, hängt in der nichtlinearen Optik der Brechungsindex auch von der Amplitude der Welle ab, so dass diese beiden Effekte sich in der Summe kompensieren können. Dies führt zu einem Lichtpuls, welcher seine Form während der Ausbreitung durch das Medium zeitlich beibehält. Analog hierzu kann in der nichtlinearen Quantenmechanik das Zerfließen eines Wellenpakets, wie man es für die Beschreibung eines Systems von Teilchen außerhalb einer einschließenden externen Falle durch die lineare Schrödingergleichung kennt, verhindert werden. Legt man in zwei Dimensionen eine starke externe Falle an, so lässt sich die mögliche Bewegung eines Kondensats auf *eine* räumliche Dimension reduzieren. Die resultierende eindimensionale GPG mit kurzreichweitiger Wechselwirkung zeigt für diesen Fall stabile räumlich lokalisierte Lösungen [52], wobei man für eine attraktive Wechselwirkung ein lokalisiertes Wellenpaket (helles Soliton) erhält, wohingegen eine repulsive Wechselwirkung zu einem lokalisierten Dip (dunkles Soliton) führt. Die Existenz von Solitonen in solch einem quasi-eindimensionalen BEK ist durch Strecker *et al.* [53] und Khaykovich *et al.* [54] experimentell gezeigt worden. Für quasi-zweidimensionale Systeme ist eine stabile Lösung für ausschließlich kurzreichweitige Wechselwirkungen im Allgemeinen nicht vorhanden. Wie jedoch von Tikhonenkov *et al.* [55] gezeigt wurde, ist eine stabile Lösung für dipolare quasi-zweidimensionale Systeme, in welcher die Dipole senkrecht zur externen Falle ausgerichtet sind, möglich. Die dynamische Erzeugung eines quasi-zweidimensionalen hellen Solitons unter realistischen experimentellen Bedingungen ist bereits von Köberle *et al.* [28] untersucht worden, während Eichler *et al.* [56] die Stabilitätseigenschaften und die Dynamik eines thermisch angeregten quasi-zweidimensionalen Solitons mit Hilfe eines Variationsansatzes betrachtet haben. Im Folgenden wird die Kollisionsdynamik zweier quasi-zweidimensionaler heller Solitonen in Bezug auf verschiedene Parameter wie kinematischem Impuls und Drehimpuls untersucht. Zudem werden die Ergebnisse der Gitterrechnungen mit jenen von Fortanier [24] verglichen, welche durch einen Variationsansatz gewonnen wurden.

4.1. Das dipolare Einheitensystem

Da die in der Atomphysik auftretenden Größen bei Verwendung des üblichen SI-Einheitensystems eher unhandlich sind, geht man häufig dazu über, ein besser angepasstes Einheitensystem zu verwenden. Um eine Vergleichbarkeit mit früheren Publikationen zu ermöglichen, wird in diesem Kapitel das dipolare Einheitensystem eingeführt. Hierbei wird als Längenskala die Dipollänge

$$a_d = \frac{m\mu_0\mu^2}{2\pi\hbar^2} \quad (4.1)$$

verwendet. Darauf aufbauend lassen sich Ort-, Energie-, Zeit- und Frequenzskala gemäß

$$[\mathbf{r}] = a_d, \quad [E] = \frac{\hbar^2}{2ma_d^2} = E_d, \quad [t] = \frac{2ma_d^2}{\hbar} = t_d, \quad [\omega] = \frac{1}{t_d} = \omega_d \quad (4.2)$$

definieren. Skaliert man nun die Orts- und Zeitkoordinate gemäß (4.2), d.h. $\mathbf{r} = a_d\tilde{\mathbf{r}}$ und $t = t_d\tilde{t}$, so folgt aus der Erhaltung der Norm unter der Skalierung der Koordinaten

$$\int d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = a_d^3 \int d^3\tilde{r} |\psi(a_d\tilde{\mathbf{r}}, t_d\tilde{t})|^2 = \int d^3\tilde{r} |\tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t})|^2 \quad (4.3)$$

für die skalierte Wellenfunktion die Form

$$\psi(\mathbf{r}, t) = a_d^{-\frac{3}{2}} \tilde{\psi}(\tilde{\mathbf{r}}, \tilde{t}). \quad (4.4)$$

Verwendet man zudem die mit der Teilchenzahl N skalierten Größen

$$\psi = N^{-3/2} \tilde{\psi}, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{r} = N\tilde{\mathbf{r}}, \quad (4.6)$$

$$t = N^2\tilde{t}, \quad (4.7)$$

$$\gamma_i = N^{-2}\tilde{\gamma}_i, \quad (4.8)$$

$$E_{mf} = N^{-1}\tilde{E}_{mf}, \quad (4.9)$$

$$\varepsilon = N^{-2}\tilde{\varepsilon}, \quad (4.10)$$

wobei $\gamma_i = \omega_i/2\omega_d$, so erhält man unter Weglassung des Tildesymbols für die GPG die folgende teilchenzahlunabhängige Darstellung:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\hat{h} + 8\pi a |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2\vartheta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi(\mathbf{r}', t)|^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.11)$$

mit

$$\hat{h} = -\Delta + \sum_{i=x,y,z} \gamma_i^2 r_i^2 \quad (4.12)$$

für eine harmonische externe Falle. Wie man an (4.11) erkennt, ist die Längenskala a_d so gewählt, dass der Vorfaktor des Dipolintegrals eins ergibt. Für ein Kondensat aus ^{52}Cr Atomen, nehmen die Einheiten (4.2) die Werte $a_d = 4.8 \text{ nm}$, $t_d = 3.77 \cdot 10^{-8} \text{ s}$, $\omega_d = 2.65 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$ und $E_d = 2.79 \cdot 10^{-27} \text{ J}$ an.

4.2. Motivation und Präparation

Die Stabilität von quasi-zweidimensionalen Solitonen in Bezug auf schwache Störungen ist in [28, 55, 56] bereits untersucht worden. Da Solitonen ihre Form unter einer Bewegung beibehalten, ist eine Untersuchung ihrer Stabilität in Bezug auf starke Störungen durch eine Kollision besonders interessant. Solche Kollisionen wurden bereits von Pedri *et al.* [57] mit einem eindimensionalen harmonischem Einschluss, und von Adhikari *et al.* [58] mittels eines optischen Gitters untersucht. Die Konfiguration, unter welcher die Solitonen erzeugt wurden, unterscheidet sich jedoch insofern von der von Tikhonenkov *et al.* [55] vorgeschlagenen, als dass hierbei die Dipole in Richtung der externen Falle ausgerichtet sind, und daher eine Invertierung des Vorzeichens der dipolaren Wechselwirkung notwendig ist. Experimentell ist eine solche Invertierung durch eine Rotation der Dipolausrichtung möglich [59], wodurch das Potential der dipolaren Wechselwirkung die Form $U_d(\mathbf{r}) = -\alpha(3\cos^2\vartheta - 1)/r^3$ annimmt, wobei $-1/2 \leq \alpha \leq 1$. In unserem Fall verwenden wir analog zu [55] eine Konfiguration, bei welcher die Dipole in z -Richtung orientiert sind und die externe Falle ausschließlich in y -Richtung angelegt wird, d.h. es ist

$$V(\mathbf{r}) = \gamma_y^2 y^2. \quad (4.13)$$

Der erste Schritt zur Präparation liegt darin, mit Hilfe der Imaginärzeitentwicklung den Grundzustand des Systems zu bestimmen, wobei als Startwellenfunktion ein simpler dreidimensionaler Gaußansatz gewählt werden kann und man sich zunutze macht, dass die Startwellenfunktion in einem recht groben Parameterbereich zur Konvergenz führt. Anschließend wird das Gitter in x -Richtung verdoppelt, so dass nun zwei Solitonen in der repulsiven *side-by-side* Konfiguration nebeneinander platziert werden können. Hierbei ist der Abstand zwischen den Solitonen so groß, dass die dipolare Wechselwirkung zwischen den Solitonen anfangs vernachlässigbar ist, und sich erst im Laufe der Kollision bemerkbar macht. Um einen kinematischen Impuls einzuführen, werden die zwei Wellenfunktionen mit jeweils einer ebenen Welle der Form e^{ikx} für das Soliton, welches sich in die positive x -Richtung bewegt, und e^{-ikx} für jenes, welches sich in die negative x -Richtung bewegt, multipliziert. Analog hierzu kann über die Multiplikation von $e^{i\phi}$ eine Phase an eine Wellenfunktion multipliziert werden, wodurch eine Phasendifferenz zwischen den Solitonen ins System eingeführt wird. Neben einem kinematischen Impuls und einer Phase lässt sich auch ein Drehimpuls einführen. Hierzu wird das Gitter zusätzlich in z -Richtung erweitert, und es werden die Solitonen entgegengesetzt in die positive bzw. negative z -Richtung verschoben.

Abhängig von der Größe des kinematischen Impulses k und der Phasendifferenz, lassen sich grob drei qualitative Bereiche für die Kollisionen unterscheiden. Für sehr kleine k kann die repulsive dipolare Wechselwirkung nicht überwunden werden und es findet kein Verschmelzungsvorgang beider Kondensate statt. Wird der Anfangsimpuls k etwas erhöht, so verschmelzen für passende Phasendifferenzen ($\Delta\phi \approx 0$) die Solitonen und bilden ein zusammenhängendes Kondensat. Hierbei werden zwar einzelne Partikel nach außen emittiert, jedoch ist keine Trennung der beiden Kondensate zu beobachten. Für große k hingegen, lässt sich nach einer gewissen Zeitdauer, in welcher die Wellenfunktionen beider Solitonen stark überlappen und sich effektiv ein Kondensat herausbildet, eine Trennung beobachten. Wie sich im Folgenden zeigen wird, sind die Gitterrechnungen zwar gut geeignet um den Kollisionsprozess zu beschreiben, jedoch können auf Grund der Endlichkeit des Gitters keine Aussagen über die langfristige Entwicklung der Solitonen bzw. Kondensate gemacht werden. Zur Vervollständigung der theoretischen Untersuchung werden daher die Ergebnisse der Variationsrechnungen von Fortanier [24] herangezogen. Da für die experimentelle Untersuchung der langfristigen Entwicklung jedoch die Lebensdauer im Labor vorraussichtlich nicht ausreichend groß ist, ist dies für das Experiment selbst letztlich unerheblich.

4.3. Ergebnisse

Die im Folgenden präsentierten Ergebnisse sind für alle dipolaren Systeme gültig, jedoch werden die entsprechenden Werte für ein Kondensat aus ^{52}Cr mit jeweils 20 000 Teilchen pro Soliton mit angegeben. Für die Fallenfrequenz nehmen wir einen Wert von $\gamma_y = 20\,000$ (426 Hz) an. Man beachte, dass ein Soliton nur in einem bestimmten Wertebereich der Streulänge stabil sein kann. Während es für zu große Werte zerfließt, führen zu kleine Werte zu einem Kollaps. Im Folgenden wird durchgehend der Wert $a = 0.14$ verwendet und der Kollisionsprozess über eine Reihe von Absorptionsbildern visualisiert. Hierbei wird das Betragsquadrat der Wellenfunktion in y -Richtung integriert, und für jedes Bild von neuem in Bezug auf den maximalen Wert normiert. Dies ermöglicht einen hohen Kontrast und damit eine gute Sichtbarkeit der Strukturen auf allen Absorptionsbildern, verringert jedoch die Vergleichbarkeit der Absorptionsbilder untereinander. Dies resultiert daher, dass ein Abfall in der Amplitude während des zeitlichen Verlaufs der Kollisionsdynamik nur indirekt über die Ausdehnung zu erahnen ist, jedoch nicht mehr direkt aus den Bildern herausgelesen werden kann. Abbildung 4.1 zeigt von links nach rechts die Absorptionsbilder für $k = 10$ (Geschwindigkeit $v = 127 \mu\text{m/s}$) mit den Phasendifferenzen $\Delta\phi = 0, \pi/2$ und π . Aufgetragen ist die xz -Ebene (x Abszisse, z Ordinate) mit einem Sichtbereich von 1.4×1.4 ($135 \times 135 \mu\text{m}^2$). Für den Fall ohne Phasendifferenz liegt konstruktive Interferenz vor, und die Solitonen verschmelzen und trennen sich wieder. Es ist klar zu sehen, dass die räumliche Ausdehnung der Solitonen nach der Kollision größer als im Anfangszustand ist. Dies ist als Indiz dafür zu werten, dass durch den Kollisionsprozess kinetische in interne Energie umgewandelt wird. Je-

doch lässt sich auf Grund der Endlichkeit des verwendeten Gitters nicht sagen, ob die Solitonen nach der Kollision zerfließen oder nur eine Oszillationsmode angeregt wird. Für eine Phasendifferenz von $\Delta\phi = \pi/2$ ist der Überlapp im Zentrum ($x = 0$) deutlich kleiner, wodurch zugleich die Umwandlung von kinetischer in interne Energie verringert wird.

Auffällig ist die Brechung der Symmetrie durch den Kollisionsprozess. Die Amplitude des Solitons auf der rechten Seite ($x > 0$) ist kleiner als jene auf der linken Seite ($x < 0$). Dies wird verständlich, wenn man bedenkt, dass nur für die Phasendifferenzen $\Delta\phi = 0$ und π die Wellenfunktion ein Eigenzustand des Paritätsoperators darstellt. So erhält man für $\Delta\phi = \pi$ den Ausdruck

$$\begin{aligned}\Pi\Psi &= \Pi(e^{ikx}e^{i\pi}\psi_1(\mathbf{r}) + e^{-ikx}\psi_2(\mathbf{r})) \\ &= e^{i\pi}(e^{-ikx}\psi_1(-\mathbf{r}) + e^{ikx}e^{i\pi}\psi_2(-\mathbf{r})).\end{aligned}\quad (4.14)$$

Unter Berücksichtigung von $\psi_1(-\mathbf{r}) = \psi_2(\mathbf{r})$ und $\psi_2(-\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r})$ folgt hiermit $\Pi\Psi = -\Psi$. Für $\Delta\phi = \pi/2$ hingegen liegt kein entsprechender Eigenzustand vor, da

$$\begin{aligned}\Pi\Psi &= \Pi(e^{ikx}e^{i\pi/2}\psi_1(\mathbf{r}) + e^{-ikx}\psi_2(\mathbf{r})) \\ &= e^{-i\pi/2}(e^{ikx}e^{i\pi/2}\psi_1(\mathbf{r}) + e^{-ikx}e^{i\pi}\psi_2(\mathbf{r})),\end{aligned}\quad (4.15)$$

woraus sich letztlich eine asymmetrische Dynamik ergibt. Die letzte Spalte zeigt Absorptionsbilder für den Fall $\Delta\phi = \pi$. Hierbei liegt wegen der ungeraden Parität der Wellenfunktion ein Knoten im Zentrum vor, so dass sich eine destruktive Interferenz beobachten lässt. Die Menge an transferierter Energie sollte in diesem Fall am kleinsten sein.

Abbildung 4.2 zeigt, von links nach rechts, Absorptionsbilder für $\Delta\phi = 0$ und $k = 5, 30$ und 60 . Für kleine Impulse k reicht der verbliebene effektive Impuls nicht aus, um nach der Verschmelzung eine Separation der Solitonen zu erreichen. Stattdessen oszilliert das Kondensat und emittiert hierbei Partikel¹ nach außen. Auch hier sind Aussagen über die langfristige Stabilität des Kondensats auf Grund der Endlichkeit des Gitters nicht möglich. Vergrößert man den kinetischen Impuls, so zeigt sich ein stärkeres Interferenzmuster. Dies ist dadurch bedingt, dass eine Erhöhung des Anfangsimpulses auch zu einer Erhöhung des effektiven Impulses während der Kollision führt. In Kombination mit der verkürzten Verschmelzungsdauer, ist von den Absorptionsbildern ausgehend ein kleinerer Energietransfer als im Fall von $k = 10$ zu vermuten. Die letzte Reihe von Absorptionsbildern (Abb. 4.3) zeigt, von links nach rechts, die Kollisionsdynamik mit Drehimpuls für $k = 10$ mit $\Delta\phi = 0, \pi/2$ und π . Im ersten Fall kommt es analog zur Kollision ohne

¹Streng genommen werden durch die GPG nur Wellenpakete beschrieben. Jedoch wird dies im Kontext eines Experiments als eine Emission von Partikeln interpretiert.

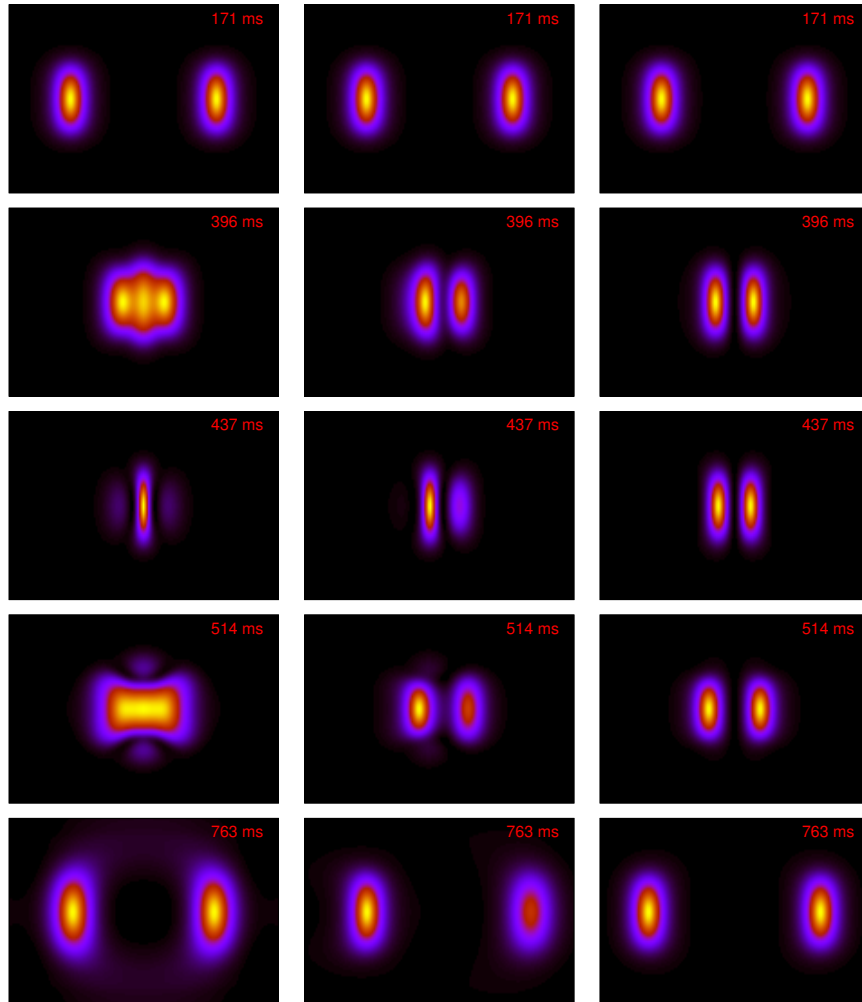


Abbildung 4.1.: Absorptionsbilder in y -Richtung (x Abszisse, z Ordinate) für $k = 10$ und $\Delta\phi = 0, \pi/2$ und π (von links nach rechts). Die Zeiten beziehen sich auf ein Kondensat mit ^{52}Cr . Je nach Phasendifferenz ist der Übertrag von kinetischer in interne Energie unterschiedlich, was sich in der räumlichen Ausdehnung der Solitonen nach der Kollision bemerkbar macht.

Drehimpuls zu einer Verschmelzung und anschließenden Separation. Während des Kollisionsprozesses entstehen hierbei wirbelartige Strukturen, welche sich nach einiger Zeit

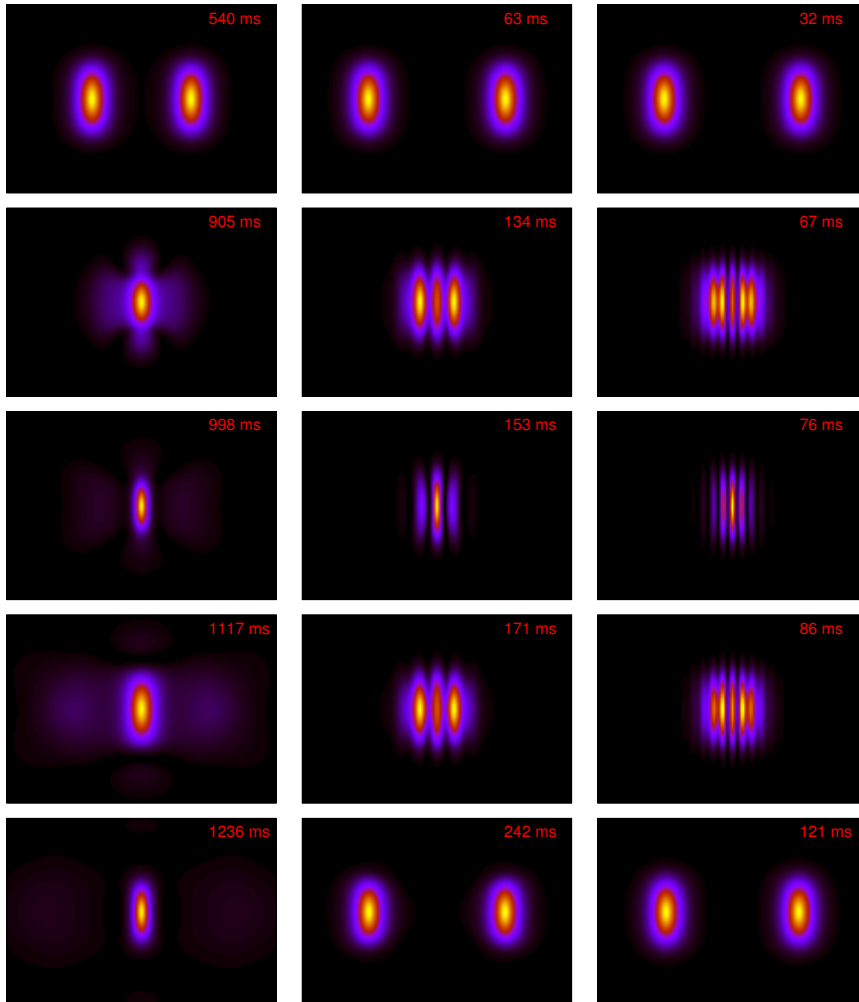


Abbildung 4.2.: Absorptionbilder in y -Richtung (x Abszisse, z Ordinate) für $\Delta\phi = 0$ und $k = 5, 30$ und 60 (von links nach rechts). Die Zeiten beziehen sich auf ein Kondensat mit ^{52}Cr . Für einen kleinen Impuls ist keine Separation der Kondensate nach der Verschmelzung zu beobachten. Mit zunehmendem Anfangsimpuls sind die Interferenzmuster stärker ausgeprägt, da hierdurch auch der effektive Impuls während der Kollision größer ist.

wieder auflösen. Für $\Delta\phi = \pi/2$ wird wie im Falle ohne Drehimpuls die Symmetrie der

4. Kollision quasi-zweidimensionaler Solitonen

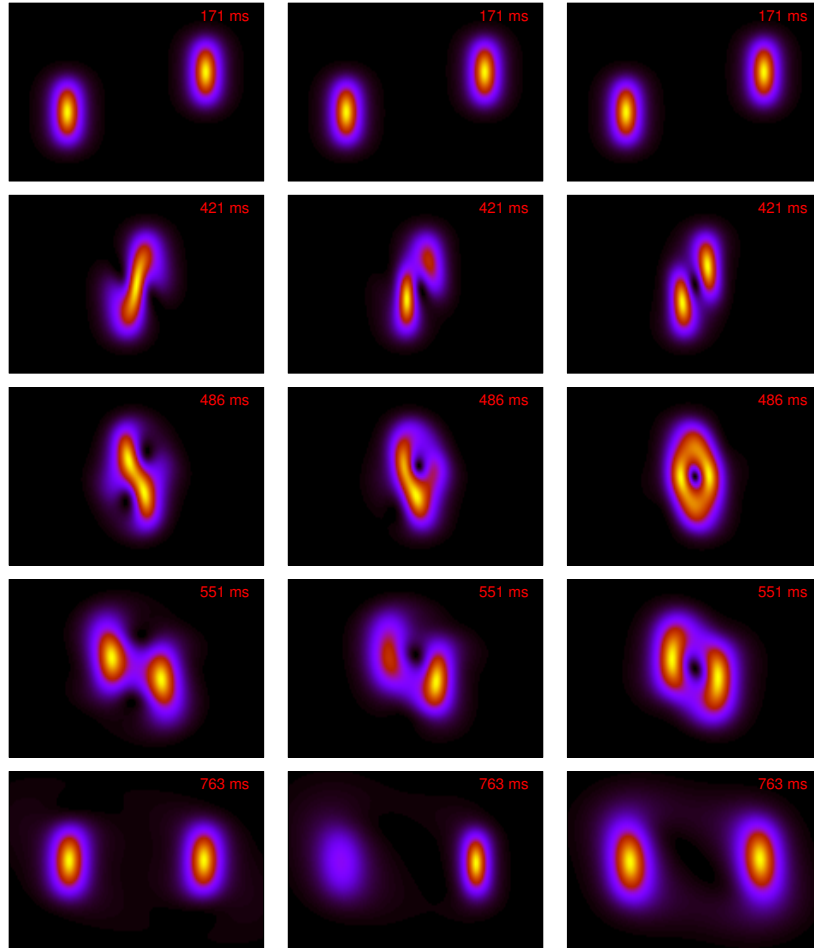


Abbildung 4.3.: Absorptionsbilder in y -Richtung (x Abszisse, z Ordinate) für $k = 10$ und $\Delta\phi = 0, \pi/2$ und π (von links nach rechts) mit Drehimpuls. Die Zeiten beziehen sich auf ein Kondensat mit ^{52}Cr . Je nach Phasendifferenz ist der Übertrag von kinetischer in interne Energie unterschiedlich, was sich in der räumlichen Ausdehnung der Solitonen nach der Kollision bemerkbar macht. Insbesondere zeigt sich, dass im Gegensatz zum Fall ohne Drehimpuls für eine Phasendifferenz von $\Delta\phi = \pi$ der größte Übertrag vorliegt und die Wechselwirkung zwischen den Kondensaten zu einer Richtungsänderung führt.

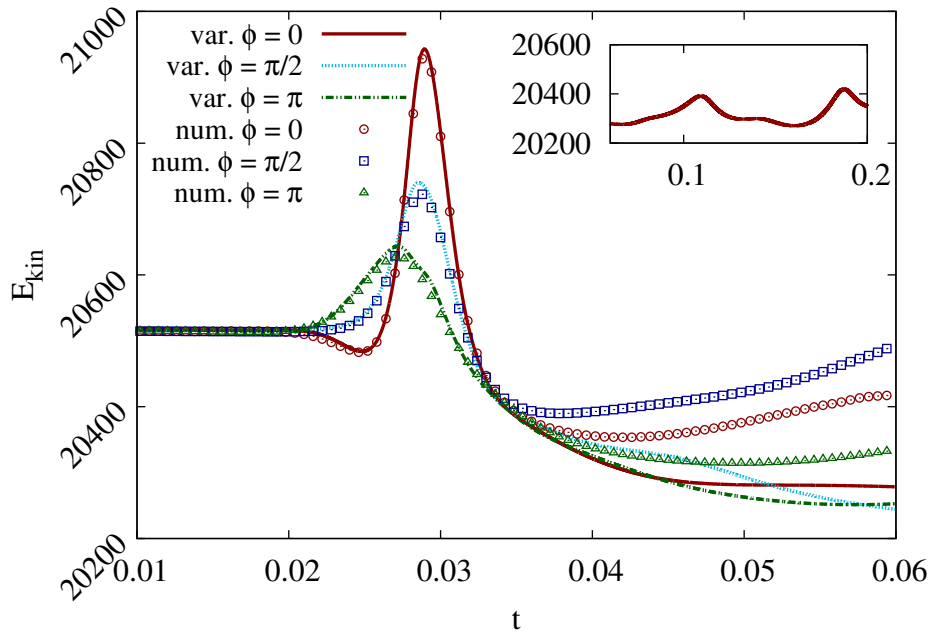


Abbildung 4.4.: Aufgetragen ist die kinetische Energie über der Zeit (jeweils in dipolaren Einheiten) für $k = 10$ und $\Delta\phi = 0, \pi/2$ und π , wobei neben den Ergebnissen der Gitterrechnungen auch jene der Variationsrechnungen von Fortanier [26] zu sehen sind. Die Zunahme an kinetischer Energie in den Gitterrechnungen für große Zeiten ist auf unphysikalische Oszillationen der Wellenfunktion auf Grund der Endlichkeit des Gitters zurückzuführen. Das kleine Schaubild innerhalb der Abbildung zeigt den Verlauf der kinetischen Energie des Variationsansatzes für $\phi = 0$ für sehr lange Zeiten. Die auftretende Oszillation ist ein klarer Indikator dafür, dass die Solitonen nach der Kollision nicht zerfließen, sondern vielmehr eine Oszillationsmode angeregt wird.

Kollisionsdynamik gebrochen, jedoch ist nun der Grad der Verschmelzung größer. Für $\Delta\phi = \pi$ lässt sich während der Kollision das Auftreten einer ringartigen Struktur beobachten. Von der Ausdehnung der Solitonen nach der Kollision ausgehend kann darauf geschlossen werden, dass in diesem Fall der Transfer von kinetischer zu interner Energie größer ist als dies für andere Phasendifferenzen der Fall ist. Man beachte, dass im Fall ohne Drehimpuls der Energieübertrag für eine verschwindende Phasendifferenz am größten ist. Alle drei Kollisionen mit Drehimpuls zeigen, dass die Wechselwirkung zwischen den Kondensaten zu einer Richtungsänderung führt.

In Abbildung 4.4 ist die kinetische Energie über der Zeit für alle drei Fälle mit Bahndrehimpuls dargestellt. Berechnet wird die kinetische Energie über zwei Fourier-Transformationen. Hierbei ergibt sich für die Fourier-Transformation des Laplace-Opera-

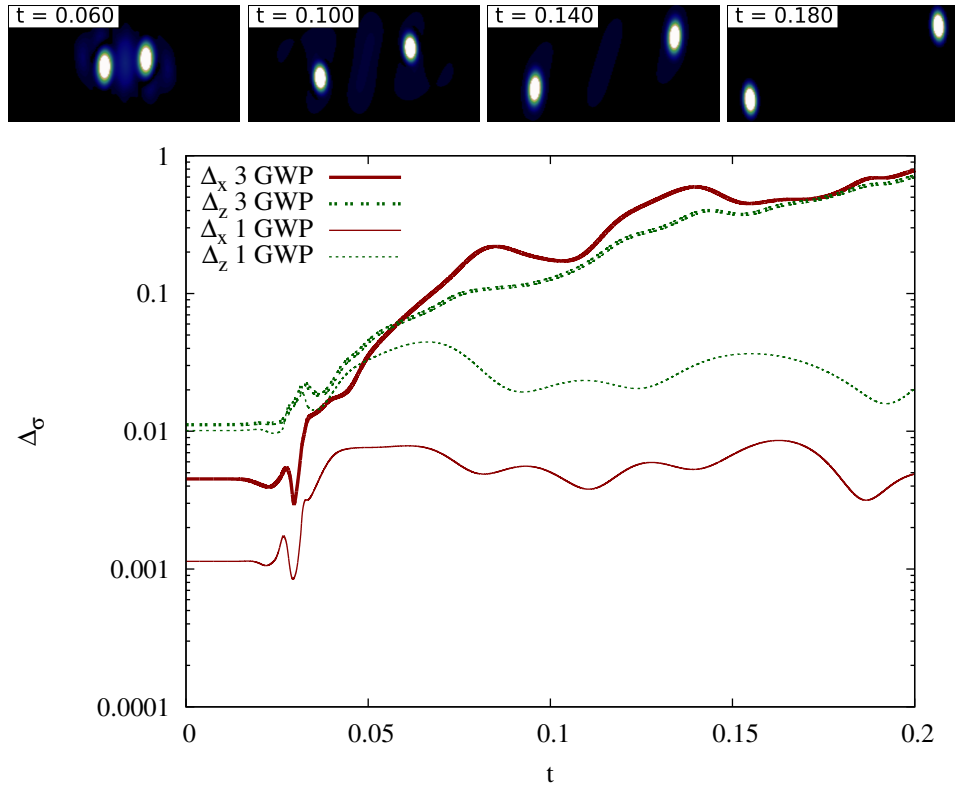


Abbildung 4.5.: Aufgetragen ist die Varianz $\Delta_\sigma = \langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2$ mit $\sigma = x, z$ und GWP als Gauß'sches Wellenpaket des in den obigen Absorptionbildern rechten Solitons über lange Zeiten (aus dem Variationsansatz jeweils in dipolaren Einheiten). Jedes Soliton wird von drei Gauß'schen Wellenpaketen beschrieben. Isoliert man das dominante Wellenpaket, so zeigt sich deutlich ein oszillierendes Verhalten, während die anderen Wellenpakete die Emission von Partikeln beschreiben. Dies stützt die These, dass durch die Kollision eine Oszillationsmode angeregt wird.

tors der Ausdruck

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}\{\Delta\psi\} &= \int (\Delta\psi)e^{-i\mathbf{k}r} d^3r = \underbrace{(\nabla\psi)e^{-i\mathbf{k}r}}_{=0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int (\nabla\psi)(\nabla e^{-i\mathbf{k}r}) d^3r \\
 &= -\underbrace{\psi(\nabla e^{-i\mathbf{k}r})}_{=0} \Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int \psi(\Delta e^{-i\mathbf{k}r}) d^3r = -(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\mathcal{F}\{\psi\}. \quad (4.16)
 \end{aligned}$$

Unter Berücksichtigung von $\psi = \mathcal{F}^{-1}\{\mathcal{F}\{\psi\}\}$ ergibt sich hiermit letztlich die Beziehung

$$-\Delta\psi = \mathcal{F}^{-1}\{(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)\mathcal{F}\{\psi\}\}, \quad (4.17)$$

womit sich über den Erwartungswert des Laplace-Operators die kinetische Energie berechnen lässt. Die Abbildung beinhaltet neben den Werten aus den Gitterrechnungen auch die Werte des Variationsansatzes, wobei eine klare Übereinstimmung zwischen beiden Methoden erkennbar ist. Die auftretenden Abweichungen für große Zeiten sind auf unphysikalische Oszillationen der Wellenfunktion auf dem Gitter zurückzuführen. Diese resultieren daher, dass durch die Endlichkeit des Gitters emittierte Partikel am Rand reflektiert werden. Wie man jedoch an den Werten kurz nach der Separation erkennen kann, ist der Energieübertrag für den Fall $\Delta\phi = \pi$ tatsächlich am größten, wohingegen für $\Delta\phi = \pi/2$ am wenigsten Energie übertragen wird. Das kleine Schaubild in Abbildung 4.4 zeigt die Werte der kinetischen Energie aus dem Variationsansatz für verschwindende Phasendifferenz für sehr große Zeiten. Hierbei ist eine Oszillation der Energie zu beobachten, was als klarer Indikator für eine angeregte Oszillationsmode anzusehen ist.

Diese Interpretation wird zudem von den Ergebnissen der Variationsrechnungen in Abbildung 4.5 gestützt. In dieser Abbildung ist die Varianz $\Delta_\sigma = \langle \sigma^2 \rangle - \langle \sigma \rangle^2$ mit $\sigma = x, z$ eines einzelnen Solitons über lange Zeiten aufgetragen². Isoliert man das dominante Gauß'sche Wellenpaket (jedes Soliton wird durch die Überlagerung von drei Gauß'schen Wellenpaketen beschrieben), so erkennt man ein oszillierendes Verhalten, während die beiden anderen Wellenpakete die Emission von Partikeln beschreiben. Die Notwendigkeit, die Solitonen über eine lange Zeitdauer zu beobachten, um entscheiden zu können, ob durch die Kollision eine Oszillationsmode angeregt wird oder das Kondensat letztlich zerfließt, macht eine experimentelle Untersuchung sehr problematisch.

Ein detaillierterer Vergleich der Gitterrechnungen mit dem Variationsansatz findet sich in [26]. Hierbei werden neben dem Vergleich der kinetischen Energie während des Kollisionsprozesses (siehe Abbildung 4.4), auch die in den Abbildungen 4.1 - 4.3 präsentierten Absorptionbilder mit denen der Variationsrechnung verglichen, wobei eine beeindruckende Übereinstimmung beider Methoden erkennbar ist.

Im Gegensatz zu den Rechnungen in [28], sind für die Kollisionsdynamik Teilchenverluste durch Drei-Teilchen-Kollisionen nicht systematisch mitberücksichtigt worden. Kontrollrechnungen zeigen jedoch, dass ein solcher Verlustterm trotz der langen Beobachtungszeit nur wenig Auswirkungen hat. Dies erklärt sich unter anderem dadurch, dass die Teilchenverluste eine quadratische Proportionalität zur Teilchendichte aufweisen³, die Verschmelzung der Kondensate jedoch nur von kurzer Dauer ist. Neben der Vernachlässigung von Teilchenverlusten wird auch das Rauschen des Stromes in den Feshbach-Spulen⁴ nicht mitberücksichtigt, welches sich durch eine fluktuierende Streulänge bemerkbar macht.

Um die Vorhersagen der Variationsrechnungen zu den Solitonenkollisionen für lange Zeiten verifizieren zu können, wäre auf Grund der derzeit beschränkten Rechenressour-

²Streng genommen ist eine Unterscheidung beider Solitonen während der Zeiten, in welchen die Wellenfunktionen beider Kondensate überlappen, physikalisch nicht sinnvoll.

³Ein entsprechender Verlustterm lässt sich durch den Ausdruck $-i\frac{L_3}{N^2}|\psi(\mathbf{r}, t)|^4$ in der GPG mitberücksichtigen [60].

⁴Hierunter versteht man diejenigen Spulen, welche für das Magnetfeld B in (2.23) verantwortlich sind.

4. Kollision quasi-zweidimensionaler Solitonen

cen eine Rechnung auf einem zweidimensionalen Gitter notwendig. Dies jedoch macht eine Verwendung des *frozen Gaussian* Ansatzes notwendig, bei welchem die Wellenfunktion in einer Richtung (in diesem Falle in y -Richtung) durchgehend einen konstanten Verlauf annimmt. Wie von Eichler *et al.* [56] gezeigt, ist es jedoch möglich, dass dieser zusätzliche Freiheitsgrad Energie aufnimmt bzw. abgibt und somit die Kollisionsdynamik beeinflusst.

5. Drei-Mulden-Potential

BEKs stellen einen vielversprechenden Ansatz dar, Quanteneffekte durch präzise Eingriffe ins System untersuchen zu können. Insbesondere eröffnet die Realisierung dipolarer BEKs die Möglichkeit, Effekte der dipolaren Wechselwirkung eingehender zu studieren, welche unter anderem mit Phänomenen wie der Selbstorganisation bzw. Strukturbildung verknüpft sind. Menotti *et al.* [61] haben gezeigt, dass die Existenz eines Suprasolids eng mit dem Auftauchen von metastabilen Zuständen in einem optischen Gitter zusammenhängt. Für die Untersuchung solcher Effekte ist als möglichst simples Modellsystem das Drei-Mulden-Potential geeignet. Dipolare BEKs in einem Zwei-Mulden-Potential wurden bereits in [31, 32] untersucht. Hierbei kommt es neben Phasen, in welchen beide Mulden zu gleichen Teilen besetzt sind oder auf Grund von Instabilitäten zu einem Kollaps führen, auch zu Zuständen, in welchen eine ungleiche Besetzung beider Mulden vorliegt. Dieser Effekt wird als *macroscopic quantum self-trapping* (MQST) [62] bezeichnet und resultiert aus der Interaktion der Partikel bzw. der Nichtlinearität der GPG.

In [63] wird das Modellsystem eines Drei-Mulden-Potentials mit dem Bose-Hubbard-Modell beschrieben. Hierbei zeigt sich die Existenz von vier Phasen, wobei das Bose-Hubbard-Modell der Beschränkung unterliegt, nur wenige Teilchen beschreiben zu können. Tatsächlich wird in [63] ein System mit nur 18 dipolaren Bosonen verwendet. Zhang *et al.* [64] haben zur Untersuchung des Drei-Mulden-Potentials eine *mean-field*-Drei-Moden-Approximation verwendet. Sowohl das Bose-Hubbard-Modell als auch die Drei-Moden-Approximation sind jedoch nicht in der Lage, eine Aussage über die Stabilität der untersuchten Phasen in einem makroskopischen BEK zu treffen. Für eine solche Fragestellung ist die Verwendung der GPG wie bei Peter *et al.* [29] notwendig. Hierbei zeigt sich, dass zwischen den in [63] gefundenen Phasen keine strikte Trennung vorliegt und einige der gefundenen Zustände instabil sind. Das folgende Kapitel soll an die Ergebnisse aus [29] anknüpfen und überdies einen Vergleich mit den Variationsrechnungen von Fortanier [24] ermöglichen.

5.1. Das Drei-Mulden-Einheitensystem und das externe Potential

Im Folgenden werden Effekte untersucht, welche sich aus dem Wechselspiel der kurz- und langreichweitigen Wechselwirkung ergeben und formal eine Variation dieser Wechselwirkungsparameter notwendig machen. Daher ist ein Übergang zu einem Einheitensystem sinnvoll, in welchem die Längenskala aus dem konstanten externen Potential

resultiert. Hierbei wählen wir analog zu [29] als Längenskala den Abstand l der Mulden. Als Energie- und Zeiteinheit wählen wir

$$[E] = \frac{\hbar^2}{ml^2} \quad \text{und} \quad [t] = \frac{ml^2}{\hbar}. \quad (5.1)$$

Hieraus ergibt sich für die GPG die Darstellung (ohne Skalierung der Teilchenzahl)

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left(\hat{h} + 4\pi Na|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + 3Na_{\text{dd}} \int d^3r' \frac{1 - 3\cos^2\vartheta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi(\mathbf{r}', t)|^2 \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (5.2)$$

mit

$$\hat{h} = -\frac{1}{2}\Delta - V_0 \sum_{s=-1}^1 \exp\left(-\frac{2x^2}{L_x^2} - \frac{2y^2}{L_y^2} - \frac{2(z-s)^2}{L_z^2}\right). \quad (5.3)$$

In diesem Einheitensystem wird die Dipollänge mit a_{dd} bezeichnet und ist als

$$a_{\text{dd}} = \frac{m\mu_0\mu^2}{12\pi\hbar^2} \quad (5.4)$$

definiert. Ein Vergleich mit dem dipolaren Einheitensystem ergibt den Zusammenhang $a_{\text{dd}} = a_{\text{d}}/6$. Die Wahl der Dipollänge a_{dd} ist dadurch bestimmt, dass für Werte der Streulänge unterhalb von a_{dd} ein homogenes Kondensat instabil gegenüber lokalen Dichteschwankungen wird. Für das so gewählte externe Drei-Mulden-Potential lassen sich zwei bedeutsame Konfigurationen unterscheiden. Sind die Dipole in x -Richtung (bzw. y -Richtung) ausgerichtet, so liegt eine repulsive Konfiguration vor, während bei einer Ausrichtung in z -Richtung die Konfiguration attraktiv ist. Die Breitenparameter L_i sind so gewählt, dass eine Änderung der Polarisation möglichst keine Änderung in der Energie des Kondensats in einer einzigen Mulde bewirken soll ($L_x = L_z$) und die Stabilität des Kondensats größer sein soll als im sphärischen Fall ($L_y > L_{x,z}$). Des Weiteren sollen die Werte der Breitenparameter so gewählt sein, dass die Mulden klar voneinander separiert sind. Jedoch darf die Tunnelrate zwischen den Mulden nicht zu gering werden, da sonst weder mit der Imaginärzeitentwicklung noch im Experiment der Grundzustand gefunden werden kann. Analog darf die Muldentiefe nicht zu groß gewählt werden, da hierdurch die Tunnelrate zu klein wird. Für zu kleine Tiefen hingegen ist es nicht möglich, die Partikel in den Mulden zu fangen. Im Folgenden übernehmen wir für die Parameter die Werte von Peter *et al.* [29] mit $L_{x,z} = 0.5$ und $L_y = 4$ sowie $V_0 = 80$ (dies entspricht in etwa 16 *recoil*-Energien¹). Es sei nochmals darauf hingewiesen, dass im Folgenden die Parameter Na und Na_{dd} als frei wählbar vorgegeben werden. Dies trägt dem Umstand Rechnung, dass die in diesem System physikalisch bedeutsamen Effekte sich aus dem

¹Die *recoil*-Energie in einem optischen Gitter ist definiert als $E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ mit $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, wobei λ die Wellenlänge der Gitterphotonen bezeichnet.

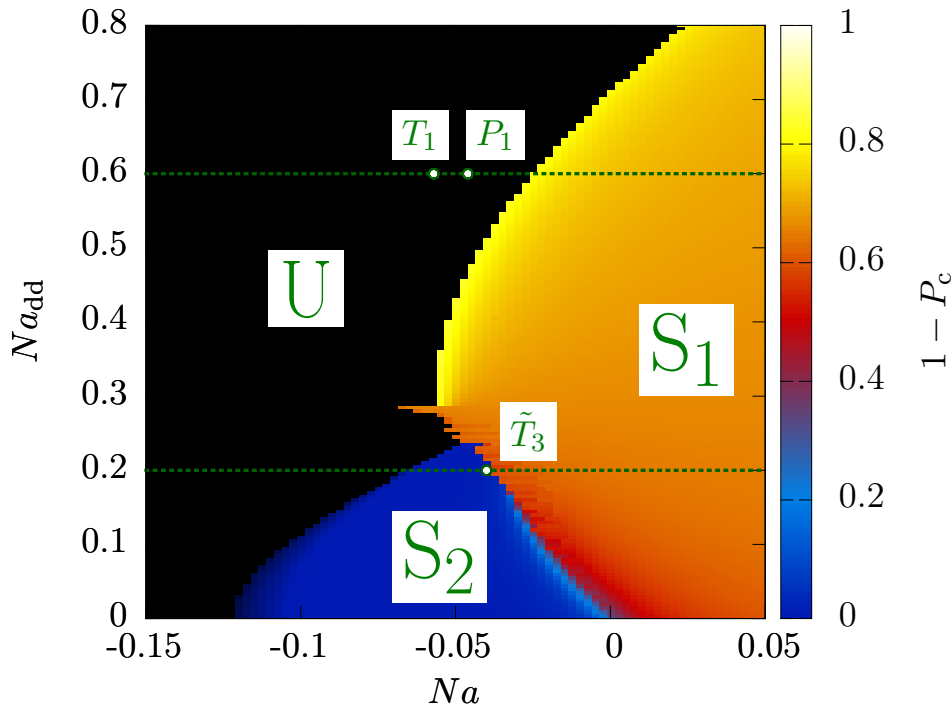


Abbildung 5.1.: Phasendiagramm für die repulsive Konfiguration. Die farbigen Bereiche stellen Regionen des Parameterraumes dar, in welchem die Imaginärzeitentwicklung konvergiert, während Zustände im schwarzen Bereich instabil sind. Der Farbbalken rechts vom Phasendiagramm repräsentiert die Besetzung $1 - P_c$ der beiden äußeren Mulden, wobei P_c die Besetzung der mittleren Mulde angibt.

Wechselspiel der kurz- und langreichweitigen Wechselwirkungen ergeben. Die Ergebnisse sind auf Grund der Skalierungseigenschaften von (5.2) nicht von der Teilchenanzahl N abhängig.

5.2. Ergebnisse

Wie schon bei der Untersuchung der Solitonenkollision ist für die Bestimmung des Grundzustandes im Drei-Mulden-Potential als Startwellenfunktion ein simpler Gaußansatz ausreichend. In den Abbildungen 5.1 und 5.2 sind die Phasendiagramme für die repulsive und die attraktive Konfiguration abgebildet. Zur Berechnung des Phasendiagramms wird für jeden Wert von Na_{dd} das Diagramm horizontal berechnet, d.h. die entsprechenden Werte von Na sukzessive durchlaufen. Als Startwellenfunktion wird hierbei jeweils bei $Na = 0.05$ der gleiche Gaußansatz gewählt, und anschließend beim Durchlaufen der restlichen Werte von Na die jeweils zuvor berechnete Grundzustandswellenfunktion als

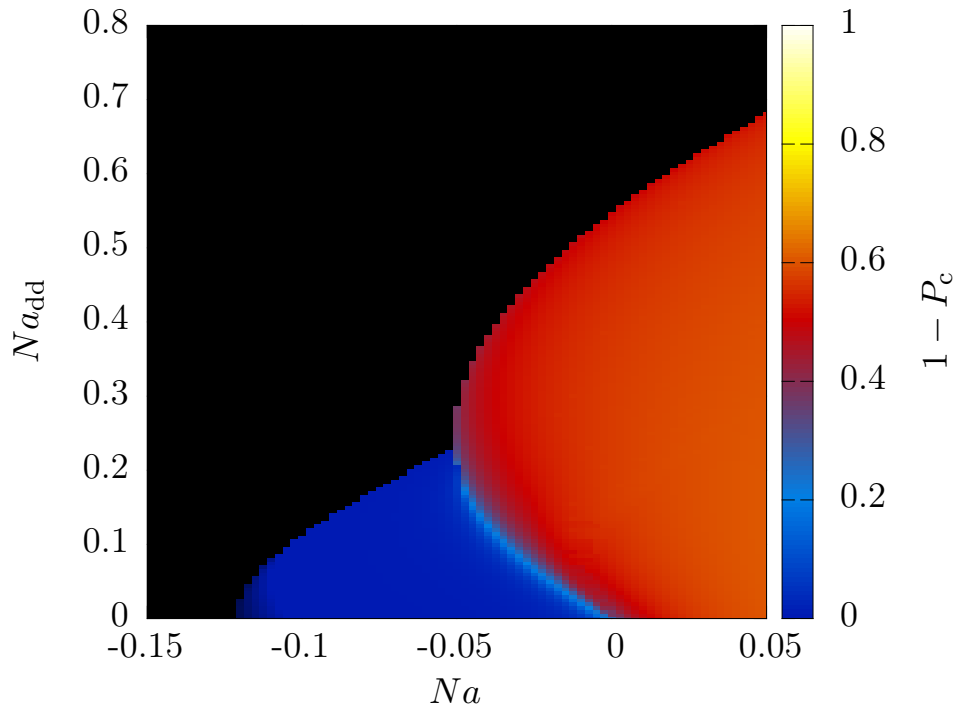


Abbildung 5.2.: Phasendiagramm für die attraktive Konfiguration. Die farbigen Bereiche stellen Regionen des Parameterraumes dar, in welchem die Imaginärzeitentwicklung konvergiert, während Zustände im schwarzen Bereich instabil sind. Der Farbbalken rechts vom Phasendiagramm repräsentiert die Besetzung $1 - P_c$ der beiden äußeren Mulden, wobei P_c die Besetzung der mittleren Mulde angibt.

Startwellenfunktion für den neuen Parametersatz verwendet. Farblich markiert sind die Bereiche des Parameterraumes, in welchem die Imaginärzeitentwicklung konvergiert, wohingegen in den schwarzen Bereichen kein stabiler Grundzustand gefunden werden kann. Die Farbskala rechts vom Phasendiagramm repräsentiert die Besetzung $1 - P_c$ der äußeren Mulden, wobei P_c die Besetzung der mittleren Mulde darstellt. Da die attraktive Konfiguration eine geringere Vielfalt an Phasen zeigt, beschränkt sich die folgende Diskussion auf die repulsive Konfiguration. Hierbei sind in Bereichen, welche eine orangefarbene Farbe aufweisen, alle drei Mulden in etwa gleich stark besetzt, wohingegen die Besetzung der äußeren Mulden für den gelben Streifen, welcher ab $Na_{dd} \approx 0.3$ die stabilen von den instabilen Zuständen trennt, jeweils die Besetzung der mittleren Mulde übertrifft. Im blauen Bereich wiederum überwiegt die Besetzung der mittleren Mulde. Das Phasendiagramm ist in die Bereiche U, S_1 und S_2 aufgeteilt, wobei U den Bereich des Phasendiagramms bezeichnet, in welchem die Imaginärzeitentwicklung nicht konvergiert, während S_1 und S_2 zwei stabile Bereiche markieren sollen, welche sich in ihrer Muldenbesetzung qualitativ stark unterscheiden. Zum Vergleich mit den Variationsrechnungen von Fortanier

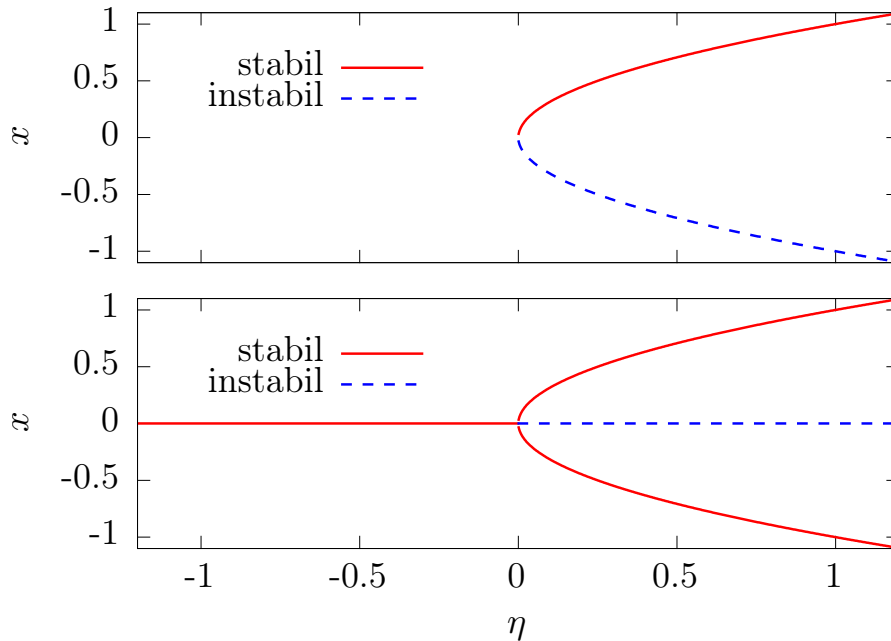


Abbildung 5.3.: Beispiele für Bifurkationen. Oben: Tangentenbifurkation der Gleichung $\dot{x} = \eta - x^2$. Unten: Heugabelbifurkation der Gleichung $\dot{x} = \eta x - x^3$. Aufgetragen sind die stationären Lösungen ($\dot{x} = 0$). Die Stabilität ergibt sich aus der Betrachtung von $\partial_x \dot{x}$. Ist der resultierende Ausdruck negativ, so stellt der betreffende Zweig eine stabile Lösung dar. Für einen positiven Ausdruck hingegen liegt eine instabile Lösung vor.

[25], sind in Abbildung 5.1 zudem bei den Werten $Na_{\text{dd}} = 0.2$ und $Na_{\text{dd}} = 0.6$ jeweils die aus dem Variationsansatz resultierenden Tangentenbifurkationen T_1 und \tilde{T}_3 sowie die Heugabelbifurkation P_1 aufgetragen. Als Bifurkationen werden Punkte im Phasenraum bezeichnet, an welchen sich die Lösungen qualitativ ändern, indem neue Lösungen hinzukommen. Abbildung 5.3 stellt Beispiele für die Tangenten- und Heugabelbifurkation dar.

Der Vergleich mit dem Variationsansatz liefert für den Schnitt bei $Na_{\text{dd}} = 0.6$ Bifurkationen, welche weiter in den Bereich negativer Streulängen hineinreichen, als dies für die Gitterrechnungen der Fall ist. Da für die Variationsrechnungen nur ein Gauß'sches Wellenpaket pro Mulde verwendet wird, ist zu erwarten, dass die Verwendung von mehr Wellenpaketen in einer Konvergenz hin zu den Ergebnissen der Gitterrechnung führt. Ein vergleichbares Phasendiagramm ist von Peter *et al.* [29] veröffentlicht worden. Im Unterschied zu dem hier präsentierten Diagramm ist bei Peter *et al.* im blauen Bereich keine Konvergenz der Imaginärzeitentwicklung vorhanden, während sich neben dem gelben Streifen ab $Na_{\text{dd}} \approx 0.3$ ein weiterer weißer Streifen befindet, welcher Zustände repräsentiert, in welchem praktisch alle Partikel in den beiden äußeren Mulden sitzen.

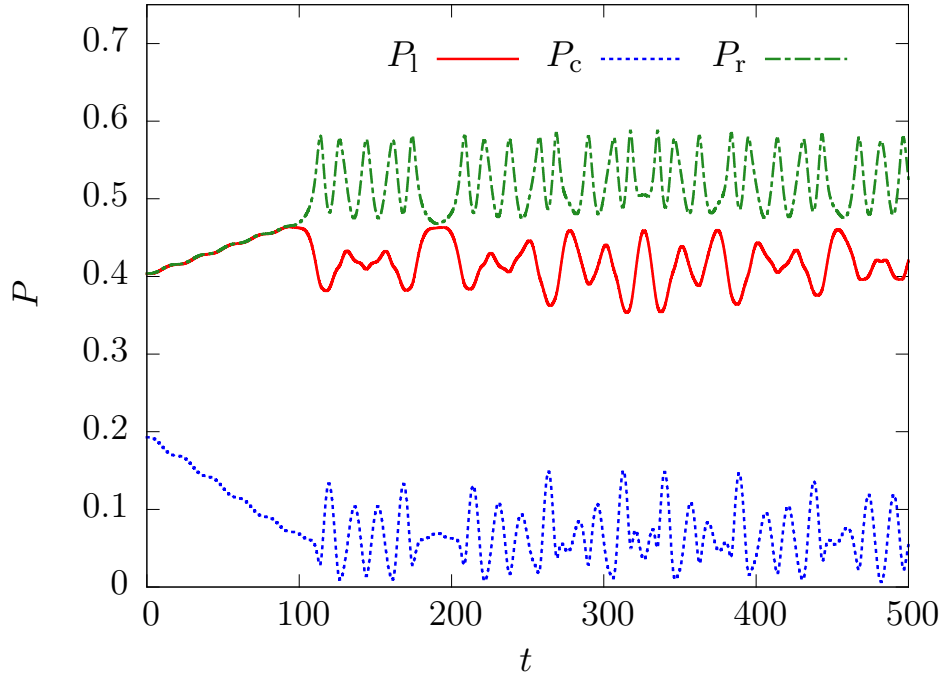


Abbildung 5.4.: Besetzung der drei Mulden bei einer Variation der Streulänge Na von -0.05 zu -0.06 über einer Zeit von $\Delta t = 100$ für $Na_{\text{dd}} = 0.4$. Nach anfänglich kleinen Oszillationen kommt es ab $t \gtrsim 100$ zu einer heftigen zeitlichen Änderung in den Besetzungszahlen, durch welche zudem die symmetrische Verteilung der Partikel auf die Mulden gebrochen wird.

Diese Unterschiede verdeutlichen, dass die hier verwendete numerische Prozedur nahe der Stabilitätsgrenze sehr sensibel in Bezug auf Startwellenfunktion und Konvergenzkriterium reagiert. Daher wurden in dieser Arbeit für das sukzessive Durchlaufen des Parameterraumes eine sehr kleine Schrittweite sowie ein sehr strenges Konvergenzkriterium gewählt, um diesen Bereich möglichst akkurat wiederzugeben.

Um eine eingehendere Analyse der auftretenden Zustände zu ermöglichen, werden in den folgenden Abschnitten die Ergebnisse zweier horizontaler Schnitte im Phasendiagramm für $Na_{\text{dd}} = 0.2$ und $Na_{\text{dd}} = 0.4$ präsentiert. Eine Analyse der angeregten Zuständen findet sich bei Fortanier *et al.* [24, 25].

5.2.1. Schnitt bei $Na_{\text{dd}} = 0.4$

Betrachtet man einen horizontalen Schnitt durch das Phasendiagramm (von rechts nach links) bei $Na_{\text{dd}} = 0.4$, so lässt sich bis zu der Stabilitätsgrenze eine langsam zunehmende Besetzung der beiden äußeren Mulden feststellen. Dies ist auf die repulsive Konfiguration der dipolaren Wechselwirkung zurückzuführen, welche hierdurch die Zustände gegen

die zunehmend attraktive Kontaktwechselwirkung stabilisiert. Eine Möglichkeit, die Zustände links von der Stabilitätsgrenze zu untersuchen, ist die dynamische Änderung der Streulänge, was in einem Experiment über die Feshbach-Resonanz möglich ist. Hierbei wird die Streulänge so lange variiert, bis das System in einem Bereich des Phasenraumes ist, in welchem durch die Imaginärzeitentwicklung kein stabiler Grundzustand mehr gefunden werden kann. In Abbildung 5.4 ist die Besetzung aller drei Mulden über der Zeit aufgetragen, während die Streulänge Na über eine Zeitperiode von $\Delta t = 100$ jeweils von -0.05 zu -0.06 geändert wird. Die Variation erfolgt bewusst über eine lange Zeitperiode, um Anregungen durch eine nicht-adiabatische Änderung der Streulänge zu vermeiden. In einem Experiment ist eine solch langsame Variation auf Grund der beschränkten Lebensdauer des Kondensats, welche insbesondere durch die Feshbach-Resonanzen stark verkürzt wird, vorraussichtlich nicht möglich. Geht man von einem Kondensat mit 420 ^{52}Cr Atomen aus, wobei $a_{\text{dd}} \approx 0.79$ nm und $a \approx 5.8$ nm sind, so benötigt man bei einem Muldenabstand von $l = 1.7\mu\text{m}$ [29] für die Änderung der Streulänge ca. 240 ms. Die nach $t = 100$ auftretenden heftigen Oszillationen deuten auf das Vorhandensein von metastabilen Zuständen entlang der Stabilitätsgrenze hin. Bemerkenswert ist hierbei insbesondere der Bruch in der Symmetrie in den Besetzungen der Mulden. Wird die Streulänge zu noch negativeren Werten hin geändert, so kollabiert das Kondensat schließlich.

5.2.2. Schnitt bei $Na_{\text{dd}} = 0.2$

Der horizontale Schnitt für $Na_{\text{dd}} = 0.2$ zeichnet sich durch einen sehr markanten Übergang von einer Phase aus, in welcher alle Mulden in etwa gleich besetzt sind, hin zu einer Phase, in welcher nahezu ausschließlich die mittlere Mulde besetzt wird. Die Abbildung 5.5 zeigt die Besetzungszahlen der Mulden zweier Realzeitentwicklungen für die Übergänge von -0.01 zu -0.03 sowie -0.03 zu -0.05 . Für die Variation von -0.01 zu -0.03 zeigen sich wie erwartet nur leichte Fluktuationen in der Besetzungszahl der mittleren Mulde, da der Übergang zwischen zwei Zuständen stattfindet, welche im Phasendiagramm im stabilen (orangenen) Bereich S_1 liegen. Die Variation von -0.03 zu -0.05 hingegen zeigt während des Übergangs das Auftreten heftiger periodischer und symmetrischer Oszillationen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass dieser Übergang zwischen zwei Zuständen erfolgt, welche sich qualitativ stark unterscheiden und im Phasendiagramm scharf voneinander getrennt sind. Betrachtet man die Besetzungszahlen für einen Übergang von -0.05 zu -0.03 , so zeigen sich analog heftige periodische und symmetrische Oszillationen in den Besetzungszahlen. Ein Vergleich mit den Ergebnissen der Variationsrechnungen von Fortanier [24, 25] bestätigt dieses Verhalten, wobei diese ein etwas späteres Eintreten der Oszillationen vorhersagen. Wie schon zuvor diskutiert ist dies vermutlich darauf zurückzuführen, dass nur *ein* Gauß'sches Wellenpaket pro Mulde verwendet wird. Eine experimentelle Untersuchung der Zustände im Bereich S_2 dürfte vorraussichtlich mit einem Zustand in S_1 beginnen, woraufhin eine Variation der Streulänge notwendig wäre. Das Auftreten dieser Oszillationen kann daher eine experimentelle Untersuchung der

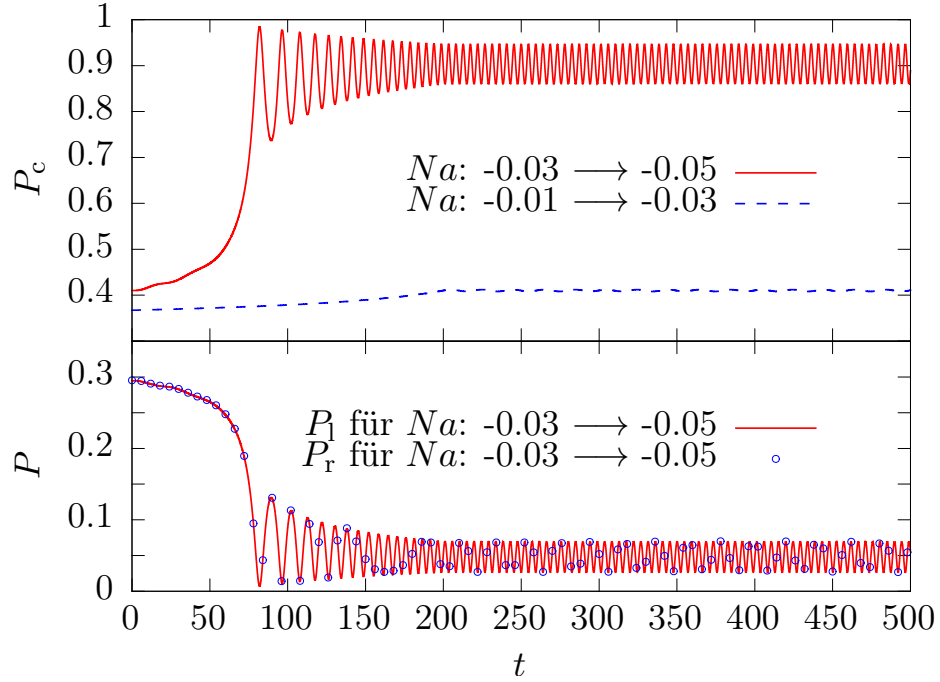


Abbildung 5.5.: Besetzung der drei Mulden bei einer Variation der Streulänge Na von -0.01 zu -0.03 und von -0.03 zu -0.05 über einer Zeit von $\Delta t = 200$ für $Na_{\text{dd}} = 0.2$. Der Übergang von -0.03 zu -0.05 endet in einem Bereich, in welchem nahezu ausschließlich die mittlere Mulde besetzt ist. Oben (mittlere Mulde): Der Übergang -0.03 zu -0.05 äußert sich in dem Auftreten von starken periodischen Oszillationen in den Besetzungszahlen der Mulden. Unten (rechte und linke Mulde): Die für den Übergang von -0.03 zu -0.05 auftretenden Oszillationen sind symmetrisch, d.h. die beiden äußeren Mulden sind jeweils gleich stark besetzt.

Zustände im blauen Bereich des Phasendiagramms erschweren, falls die Dissipation im Experiment durch eine zu schwache Ankopplung an die thermische Wolke nicht ausreicht, um die auftretenden Oszillationen innerhalb der Lebensdauer des Kondensats ausreichend stark zu dämpfen.

Die Lösung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen zeigt, dass die durch die Imaginärzeitentwicklung gefundenen Zustände entlang des Schnittes für $Na_{\text{dd}} = 0.2$ des Phasendiagramms tatsächlich stabil sind², da die Imaginärteile der Stabilitätseigenwerte durchgehend null sind. Für die Realteile (siehe Abbildung 5.6) wiederum lässt sich durch das lokale Minimum bei $Na = -0.03$ eine qualitative Änderung der Wellenfunkti-

²Die Variationsrechnungen sagen im blauen Bereich des Phasenraums keine stabilen Grundzustände vorher.

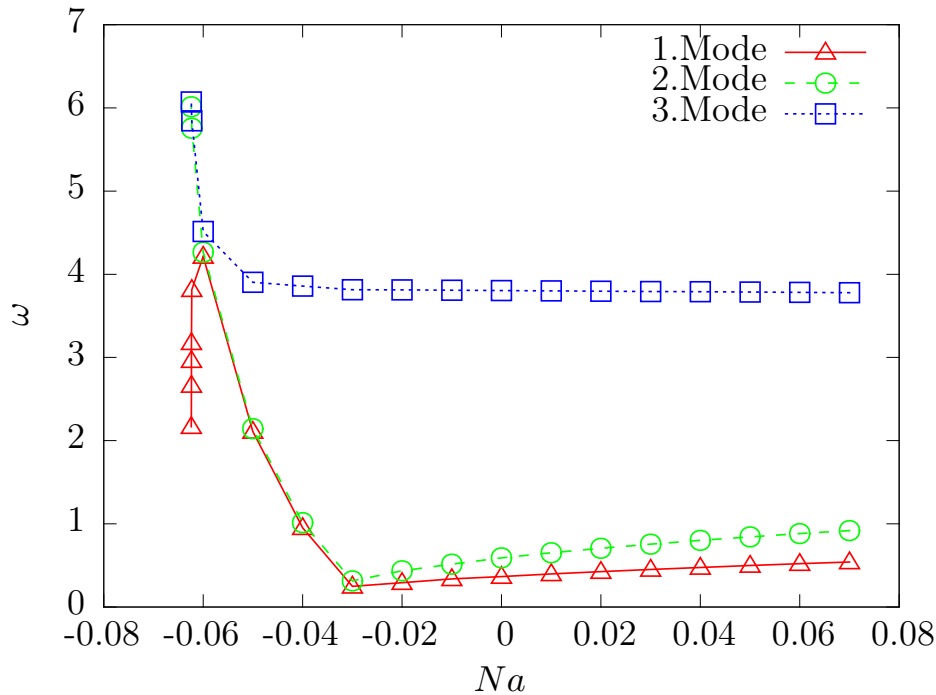


Abbildung 5.6.: Realteile der Stabilitätseigenwerte der drei Moden mit dem kleinsten aber endlichen Eigenwert aus der Lösung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen. Das Minimum der ersten beiden Ordnungen bei $Na = -0.03$ kann als Indikator für eine qualitative Änderung des Zustandes betrachtet werden. Die Divergenz für Werte unterhalb von $Na = -0.06$ weist auf eine Bifurkation hin.

on erwarten. Da die Eigenwerte der ersten Mode für Werte unterhalb von $Na = -0.06$ gegen null tendieren, gibt die Lösung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen in Übereinstimmung mit der Imaginärzeitentwicklung an dieser Stelle des Phasenraumes eine Bifurkation vor.

Da bei der Berechnung des Phasendiagramms entlang der horizontalen Schnitte zur Berechnung der Zustände für einen Parametersatz der Grundzustand des vorherigen Parametersatzes als Startwellenfunktion verwendet wird, ist es nicht praktikabel, Aussagen über die Existenz von Stabilitätsinseln links der Stabilitätsgrenze zu machen. Variationsrechnungen verweisen jedoch darauf, dass abseits der stabilen Regionen im Parameterraum zumindest metastabile Zustände vorzufinden sind. In Abbildung 5.7 ist der Verlauf der *mean-field*-Energie während der Imaginärzeitentwicklung für zwei unterschiedliche Startwellenfunktionen für $Na = -0.2$ zu sehen. Während die gestrichelte Kurve einen typischen Verlauf für einen willkürlich gewählten Gaußansatz wiedergibt, stellt die durchgezogene Kurve den Verlauf für eine Startwellenfunktion dar, für welche Breitenparameter aus der Lösung des Variationsansatzes verwendet werden. Auffällig ist

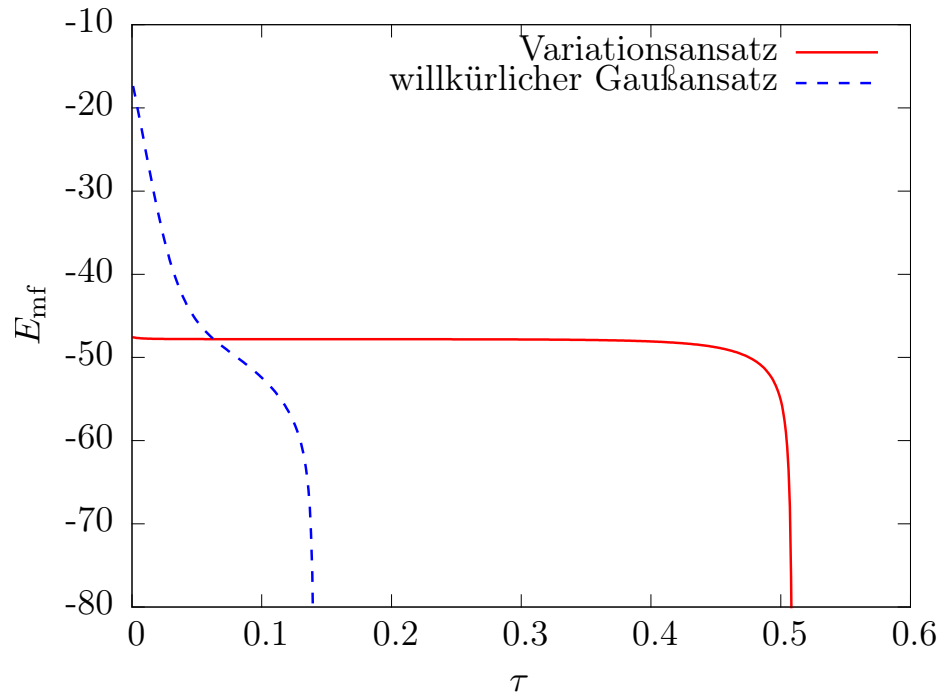


Abbildung 5.7.: *Mean-field*-Energie während der Imaginärzeitentwicklung zweier Zustände für $Na = -0.2$. Die gestrichelte Kurve stellt den typischen Verlauf für einen willkürlich gewählten Gaußansatz als Startwellenfunktion dar, wohingegen die durchgezogene Kurve die Breitenparameter einer mit dem Variationsansatz gefundenen Lösung für die Startwellenfunktion verwendet. Man beachte das Plateau in der Energie für die Lösung des Variationsansatzes, welches auf einen metastabilen Zustand hindeutet.

das Auftreten eines Plateaus während der Imaginärzeitentwicklung, was auf das Vorliegen eines metastabilen Zustandes verweist, welcher jedoch mit Hilfe der Gitterrechnungen letztlich, wie an der Divergenz der Energie erkennbar ist, nicht berechnet werden kann.

In Abbildung 5.8 sind die Realzeitentwicklungen des Variationsansatzes und der Gitterrechnungen für diesen Zustand dargestellt. Für die Variationsrechnungen wird als Maß für die Besetzung der Mulden der Überlapp $I^k = \langle g^k | g^k \rangle$ gebildet, wobei g^k die Gaußfunktion in der k -ten Mulde darstellt. Während die Variationsrechnungen anfänglich noch keine Dynamik zeigen, und erst über eine Phase, in welcher es von $t \approx 10$ bis $t \approx 40$ zu periodisch symmetrischen Oszillationen kommt, letztlich zu chaotischen und unsymmetrischen Oszillationen gelangen, sind die Oszillationen in den Gitterrechnungen bereits ab $t \approx 4$ chaotisch unsymmetrisch. Durch die Oszillationen wird das Kondensat dynamisch stabilisiert und ein sofortiger Kollaps verhindert. Der anfänglich unsymmetrische Charakter in den Gitterrechnungen ist ein Indiz dafür, dass der durch den

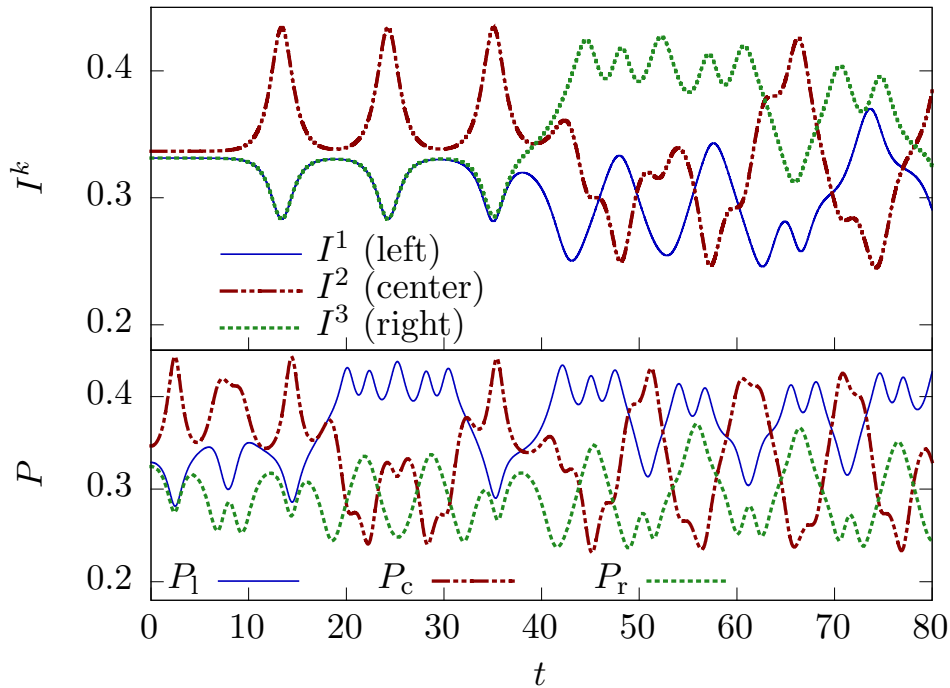


Abbildung 5.8.: Vergleich der Realzeitentwicklungen des Variationsansatzes und der Gitterrechnungen für den metastabilen Zustand bei $Na = -0.2$. Im oberen Teil des Schaubildes sind die Ergebnisse der Variationsrechnung dargestellt. Hierbei wird als Maß für die Besetzung der Mulden der Überlapp $I^k = \langle g^k | g^k \rangle$ gebildet, wobei g^k die Gaußfunktion in der k -ten Mulde bezeichnet. Während der Variationsansatz erst ab $t \approx 40$ chaotische Oszillationen zeigt, ist dies bei den Gitterrechnungen von Anfang an der Fall.

Variationsansatz berechnete Zustand noch nicht auskonvergiert ist und daher auf dem Gitter nicht genau getroffen wird. Dies ist auch daran zu erkennen, dass die Besetzung der Mulden bereits zum Startpunkt nicht perfekt symmetrisch ist.

6. Dipolares Bose-Einstein-Kondensat mit Dysprosium

Für die Realisierung eines dipolaren BEK ist die Verwendung von Partikeln mit einem magnetischen Dipolmoment wie ^{52}Cr [12–14], ^{164}Dy [15, 16] und ^{168}Er [17] notwendig. Zudem werden momentan große Fortschritte an der Umsetzung eines dipolaren BEKs mittels polarer Moleküle berichtet [18], welche sich durch ein großes elektrisches Dipolmoment auszeichnen. Die Kondensation von stark dipolaren Partikeln ist besonders wünschenswert, da hierdurch der dipolare Charakter der Kondensate stärker hervortritt. Soll in einem Experiment der Bereich starker dipolarer Wechselwirkungen untersucht werden, so ist bei Verwendung großer Dipolmomente eine geringere Anzahl an Partikeln im Kondensat notwendig. Zudem ist es von Vorteil, wenn das Verhältnis ϵ von dipolarer Länge a_{dd} zu Streulänge a möglichst hoch ist, da dies als Maß für den dipolaren Charakter eines BEK herangezogen werden kann. Betrachtet man den Fall von ^{52}Cr , so liegt hierbei ein Verhältnis von $\epsilon \approx 0.13$ vor. Dies ist ein wesentlich kleinerer Wert, als das für die Realisierung eines Solitons in Kapitel 4 notwendige Verhältnis von $\epsilon \approx 1.2$. Solche Werte sind für ^{52}Cr zwar mit Hilfe von Feshbach-Resonanzen zu erreichen, jedoch wird hierdurch die Lebensdauer des Kondensats reduziert¹. Dies ist insbesondere problematisch, wenn man bedenkt, dass die Untersuchung der Kollisionsdynamik zweier Solitonen üblicherweise über einen Zeitraum von mehreren 100 ms erfolgt.

Im Folgenden soll nun über eine Reihe von Simulationen die experimentelle Auswertung des 5. Physikalischen Instituts der Arbeitsgruppe von Professor Pfau an der Universität Stuttgart unterstützt werden. Hierzu werden zuerst experimentelle Vorhersagen zur Expansionsdynamik eines Kondensats mit ^{164}Dy von Lu *et al.* [16] überprüft und anschließend Ergebnisse von Simulationen, welche speziell auf die Anforderungen der Arbeitsgruppe von Professor Pfau zugeschnitten sind, präsentiert. Hierbei werden unter anderem strukturierte Grundzustände, die Gültigkeit der Thomas-Fermi-Näherung während der Expansionsphase und ein selbstinduzierter Josephson-Kontakt untersucht.

6.1. Expansionsdynamik

Im Jahre 2011 berichteten Lu *et al.* von der Realisierung eines dipolaren BEK mit ^{164}Dy [16], welches sich durch ein großes magnetisches Dipolmoment von $\mu = 10\mu_{\text{B}}$ auszeich-

¹Die Lebensdauer im Labor beträgt prinzipiell ca. 1-2 Sekunden.

net². Hierbei wurde unter anderem die Expansionsdynamik eines anfänglich oblaten Kondensats untersucht, bei welchem die magnetischen Dipole durch ein äußeres Magnetfeld von der Symmetrieachse weggekippt werden. Es zeigte sich der bereits bekannte Effekt eines Übergangs von einer oblaten zu einer prolaten Dichteverteilung. Als neuen Effekt beobachteten Lu *et al.*, dass sich ein expandierendes Kondensat aus Dysprosiumatomen zudem in Richtung des Magnetfeldes dreht, und hierbei seine elongierte Form aus dem magnetfeldfreien Fall beibehält. Eine solche Drehung konnte in der Expansionsdynamik eines mit Chrom realisierten BECs nicht festgestellt werden [65], wofür zwei Erklärungen denkbar sind:

- Auf Grund des relativ kleinen magnetischen Moments ist die Zeitdauer, unter welcher man eine Drehung im Falle des ⁵²Cr Kondensats im Labor feststellen könnte, zu lang.
- Da das ¹⁶⁴Dy Kondensat nur über den Zeitraum von einer Woche realisiert werden konnte, handelt es sich bei der beobachteten Drehung des Kondensats nicht um einen physikalischen Effekt des Systems, sondern ist vielmehr auf derzeit unbekannte äußere Störungen zurückzuführen.

Für die Berechnung der Expansionsdynamik werden analog zu Lu *et al.* für den harmonischen Einschluss die Fallenparameter $f_{x,y,z} = (205, 195, 760)$ Hz verwendet, während für die Teilchenzahl ein für BEK üblicher Wert von $N = 10^4$ angenommen wird. Aus der Definition der Dipollänge $a_{\text{dd}} = \frac{\mu_0 \mu^2 m}{12\pi \hbar^2}$, folgt damit für die Dipolstärke Na_{dd} (im Drei-Mulden-Einheitensystem mit der Längenskala $l = \sqrt{\hbar/m}$) ein Wert von $Na_{\text{dd}} = 3.6$. Da zum Zeitpunkt der Berechnungen die Streulänge von ¹⁶⁴Dy noch nicht bekannt war, ist im Folgenden für die Stärke der Streuwechselwirkung ein Wert von $Na = 3.27$ verwendet worden. Dies stellt sicher, dass das Kondensat auf Grund von $\epsilon = 1.1$ einen ausreichend dipolaren Charakter aufweist. Im Folgenden werden Ergebnisse von vier Expansionsdynamiken präsentiert, bei welchen jeweils eine unterschiedliche relative Ausrichtung von Dipolen zur externen Falle vorliegt. Im Experiment wird über ein von außen angelegtes Magnetfeld die Polarisationsrichtung vorgegeben, d.h. die Dipole können relativ zur z -Achse gekippt werden. In den Simulationen hingegen wird die Änderung der Polarisationsrichtung durch eine physikalisch äquivalente Drehung der externen Falle in entgegengesetzter Richtung vorgenommen. Wählt man als Kippebene der Dipole die xz -Ebene, so wird die Falle also um die y -Achse gedreht. Die entsprechenden Werte im gedrehten (gestrichenen) Koordinatensystem erhält man mit α als Drehwinkel aus der Koordinatentransformation

$$\begin{aligned} x' &= x \cos\alpha + z \sin\alpha, \\ y' &= y, \\ z' &= -x \sin\alpha + z \cos\alpha. \end{aligned} \tag{6.1}$$

²Zum Vergleich: ⁵²Cr weist ein magnetisches Dipolmoment von $\mu = 6\mu_B$ auf.

Hieraus folgt für die externe harmonische Falle die Darstellung

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{1}{2}([\omega_x^2]x'^2 + [\omega_y^2]y'^2 + [\omega_z^2]z'^2) \\
 &= \frac{1}{2}([\omega_x^2 \cos^2 \alpha + \omega_z^2 \sin^2 \alpha]x^2 + [\omega_y^2]y^2 \\
 &\quad [\omega_x^2 \sin^2 \alpha + \omega_z^2 \cos^2 \alpha]z^2 + 2[\omega_x^2 - \omega_z^2] \cos \alpha \sin \alpha \, xz). \quad (6.2)
 \end{aligned}$$

In den Abbildungen 6.1 und 6.2 sind die Absorptionsbilder in y - und z -Richtung für vier Expansionadynamiken zu sehen, für welche der Reihe nach die externe Falle um 0° , 10° , 30° und 60° relativ zur fest in z -Richtung vorgegeben Polarisationsachse gedreht ist. Die Fallenparameter werden innerhalb von 0.1 ms linear auf null gefahren, wobei Kontrollrechnungen zeigen, dass eine Änderung der Fallenparameter über 1 ms zu keinerlei qualitativen Veränderungen in der Expansionsdynamik führt. Die Absorptionsbilder in y -Richtung zeigen, dass das Kondensat primär in der Richtung expandiert, in welcher der anfängliche Falleneinschluss am stärksten ist. Dieses Verhalten ist bereits aus der Untersuchung idealer BEK bekannt (siehe Kapitel 2.1), und führt zu einer Umkehrung des Breitenverhältnisses. Diese Expansionsdynamik steht in Widerspruch zu den Messungen von Lu *et al.*, da eine Drehung des Kondensats einer Expansion in Polarisationsrichtung entsprechen würde. Zwar ist davon auszugehen, dass die Polarisationsrichtung die Expansion beeinflusst, jedoch ist auf den Absorptionsbildern klar zu erkennen, dass dieser Effekt von der Invertierung des Breitenverhältnisses deutlich überlagert wird. Die Absorptionsbilder in z -Richtung in Abbildung 6.2 veranschaulichen die Expansion in der xy -Ebene. Hierbei stellt man fest, dass für kleine oder verschwindende Drehwinkel während der Expansion Strukturen entstehen. Für einen Drehwinkel von 0° , lässt sich ab ungefähr 4.5 ms eine ringartige Struktur erkennen. Eine Zunahme des Drehwinkels führt zu einer Zerstörung der Rotationssymmetrie der Strukturen in der xy -Ebene, wobei diese in x -Richtung schwächer ausgeprägt sind als dies in der y -Richtung der Fall ist. Untersucht man die Expansion für 0° mit $N = 10^3$ Teilchen, d.h. für die Parameter $Na = 0.327$ und $Na_{\text{add}} = 0.36$, so ist auf den Absorptionsbildern in der z -Richtung keine ringartige Struktur während der Expansion erkennbar. Das Auftreten von Strukturen ist also nicht nur auf den dipolaren Charakter des Kondensats zurückführbar (für $N = 10^3$ und $N = 10^4$ gilt jeweils $\epsilon = 1.1$), sondern auch noch von der tatsächlichen Stärke der Wechselwirkung abhängig, welche mit steigender Teilchenzahl zunimmt.

In Abbildung 6.3 sind Schnitte des Betragsquadrats der Wellenfunktion $|\Psi|$ entlang der x - und y -Richtung aufgetragen, wobei zusätzlich noch in z -Richtung integriert wird, d.h.

$$|\Psi_x|^2 = \int dz |\psi(x, 0, z)|^2, \quad (6.3)$$

$$|\Psi_y|^2 = \int dz |\psi(0, y, z)|^2. \quad (6.4)$$

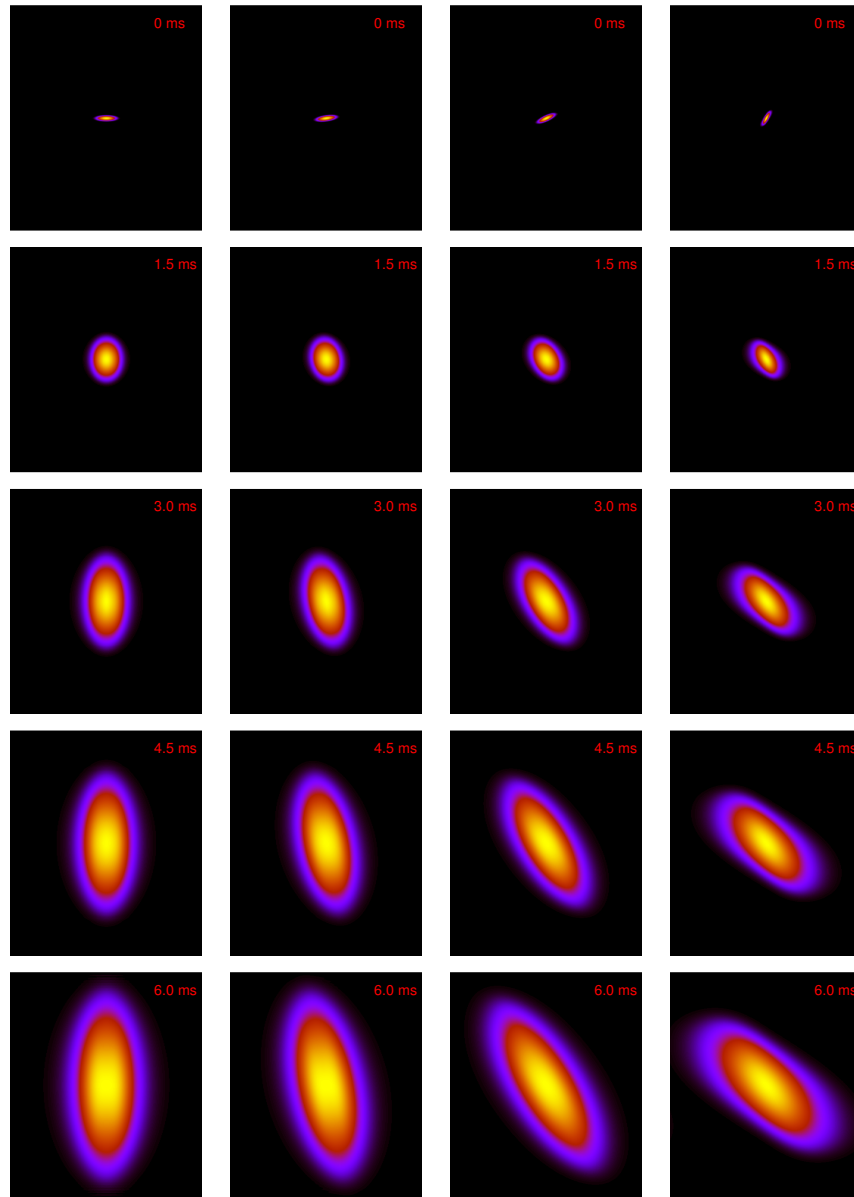


Abbildung 6.1.: Absorptionbilder in y -Richtung (x Abszisse, z Ordinate) mit einem Sichtbereich von 2.4×4.0 für (von links nach rechts) 0° , 10° , 30° und 60° , wobei die Dipole in z -Richtung ausgerichtet sind und der zeitliche Verlauf, beginnend bei 0 ms, in Abständen von jeweils 1.5 ms (von oben nach unten) dargestellt ist. Die Expansion erfolgt primär in Richtung des stärksten Falleneinschlusses, wodurch es zu einer Invertierung des Aspektverhältnisses des Kondensats kommt.

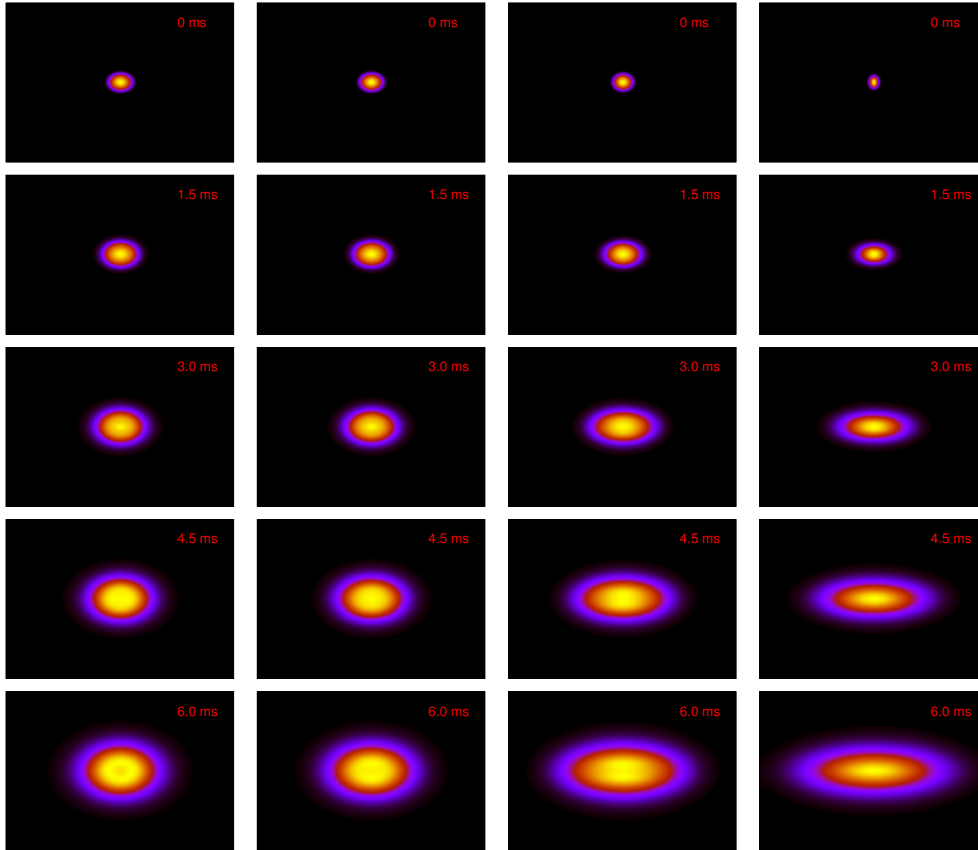


Abbildung 6.2.: Absorptionbilder in z -Richtung (x Abszisse, y Ordinate) mit einem Sichtbereich von 2.4×2.4 für (von links nach rechts) 0° , 10° , 30° und 60° , wobei die Dipole in z -Richtung ausgerichtet sind und der zeitliche Verlauf, beginnend bei 0 ms, in Abständen von jeweils 1.5 ms (von oben nach unten) dargestellt ist. Während der Expansion entstehen für kleine Drehwinkel ringartige Strukturen in der Dichteverteilung.

Man erkennt hierbei deutlich, dass eine gedrehte Falle die Strukturbildung in der xy -Ebene abschwächt und zudem die Rotationssymmetrie zerstört. Auf Grund der geringen Sichtbarkeit

$$c = \frac{n_{\max} - n_{\min}}{n_{\max} + n_{\min}}, \quad (6.5)$$

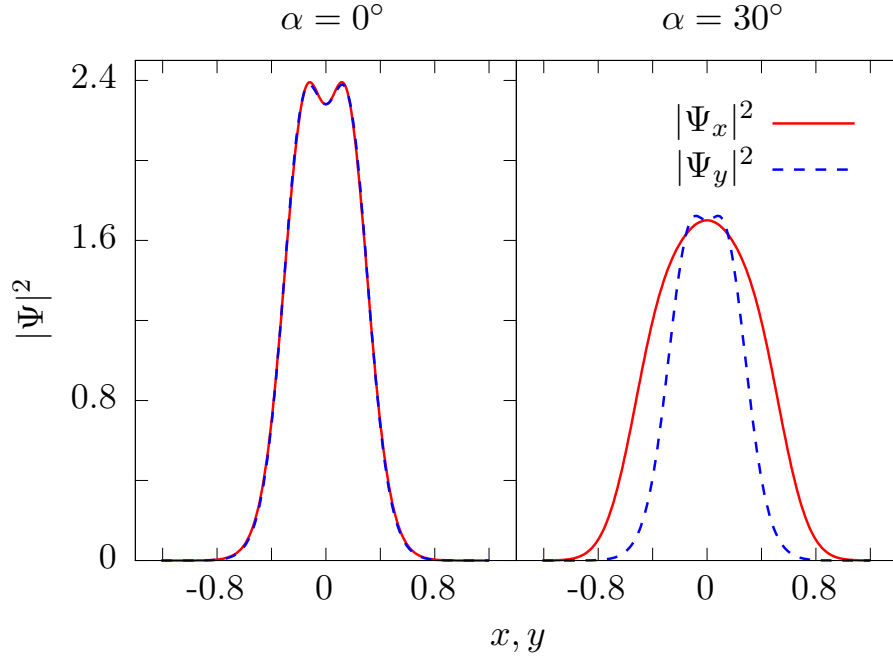


Abbildung 6.3.: Schnitte des Betragsquadrats der Wellenfunktion entlang der x - und y -Richtung, wobei zusätzlich noch in z -Richtung integriert wird für die Drehwinkel $\alpha = 0^\circ$ und 30° nach 6 ms. Für eine zunehmend gedrehte Falle ist die Strukturbildung während der Expansion entlang der x -Achse schwächer ausgeprägt. Die Sichtbarkeit c (siehe (6.5)) ist mit 0.023 ($\alpha = 0^\circ$) und 0.006 ($\alpha = 30^\circ$) sehr gering, so dass die Strukturbildung nach 6 ms experimentell nur schwer nachzuweisen ist.

wobei

$$n = \int dz |\psi(\mathbf{r})|^2, \quad (6.6)$$

mit n_{\min} als dem Wert, welcher sich exakt in der Mitte der xy -Ebene (bzw. der Dichteverteilung) vorfindet und n_{\max} als dem maximalem Wert in selbiger Ebene, dürfte ein experimenteller Nachweis dieser Strukturen während der Expansionsphase nur schwer durchführbar sein.

Reduziert man das Frequenzverhältnis der Falle, indem die Fallenfrequenz f_z vermindert wird, so verkleinert sich die Anisotropie in der Impulsverteilung des Kondensats und die Polarisationsrichtung macht sich für große ϵ während der Expansion bemerkbar. In Abbildung 6.4 ist die Expansionsdynamik für die Fallenfrequenzen $f_{x,y,z} = (205, 195, 360)$ Hz und $\epsilon = 0.8$ sowie $\epsilon = 1.1$ zu sehen. Hierbei wird deutlich, dass für Kondensate, in welcher die Dipolwechselwirkung dominant ist, die Expansion nicht mehr einzig durch

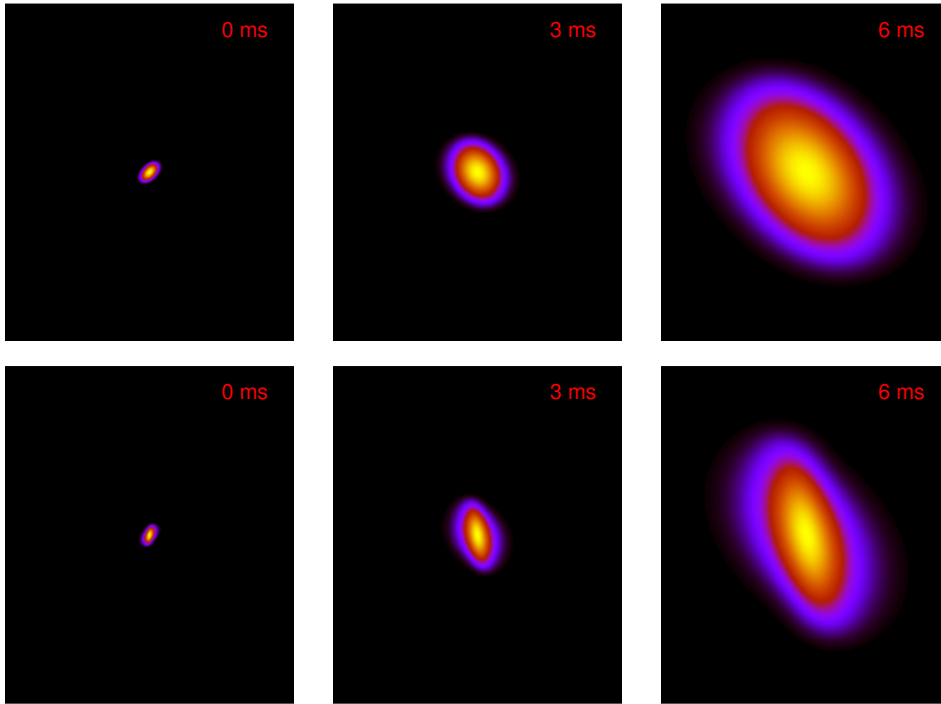


Abbildung 6.4.: Absorptionsbilder in y -Richtung (x Abszisse, z Ordinate) mit einem Sichtbereich von 2.4×4.0 für $\alpha = 45^\circ$ und $\epsilon = 0.8$ (oben) und $\epsilon = 1.1$ (unten), wobei die Dipole in z -Richtung ausgerichtet sind und der zeitliche Verlauf, beginnend bei 0 ms, in Abständen von jeweils 3 ms (von links nach rechts) dargestellt ist. Für $\epsilon = 1.1$ wird die Expansionsrichtung des Kondensats deutlich von der Polarisationsrichtung der Dipole beeinflusst.

die Invertierung des Aspektverhältnisses dominiert wird.

6.1.1. Auswertung der Expansionsdynamik in der TF-Näherung

Auf Grund des numerischen Aufwandes ist eine Berechnung der Expansionsdynamik über die Lösung der GPG zum Zweck der Kalibrierung einer entsprechenden Versuchsvorrichtung unpraktikabel. Jedoch stellt die Auswertung der Expansionsdynamik eines Kondensats mit Hilfe der TF-Näherung eine effiziente Methode dar, die die Ausdehnung des Kondensats während der Expansion in Abhängigkeit der Streulänge zu untersuchen. Hierbei greift man auf die in Kapitel 2.7 präsentierten Beziehungen zurück, aus welchen sich sowohl die Ausdehnung des Kondensats in der Falle als auch während der Expansion ergeben. Dies ist in der Praxis unter anderem hilfreich, um den Zusammenhang

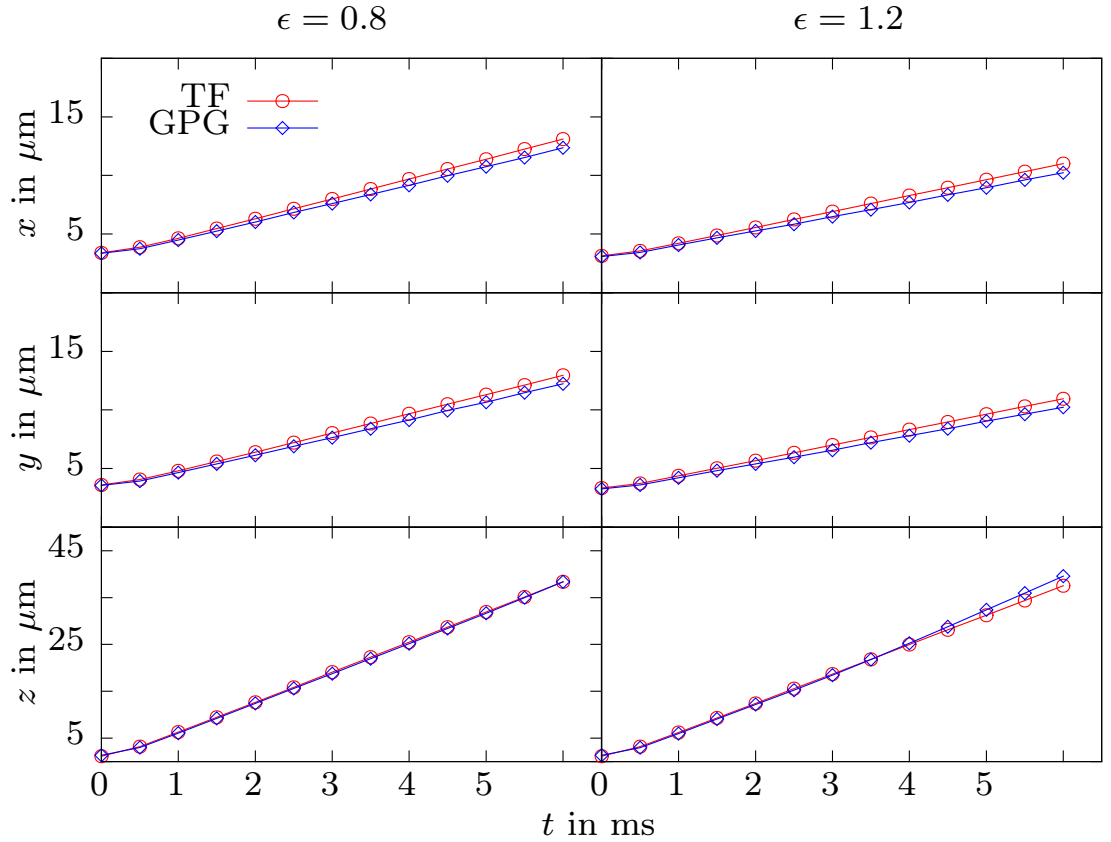


Abbildung 6.5.: Vergleich der Expansionsdynamik, welche sich aus der Anwendung der TF-Näherung und der Auswertung der GPG ergibt. Aufgetragen ist die Ausdehnung des Kondensats über der Zeit, wie sie sich explizit aus der Auswertung der Gleichungen (2.67) - (2.69) und dem Fit von invertierten Parabeln an die numerisch bestimmte Wellenfunktion ergibt. Es werden die Fälle $\epsilon = 0.8$ (links) und $\epsilon = 1.2$ (rechts) mit Drehwinkel $\alpha = 0^\circ$ und $N_{\text{add}} = 3.6$ verglichen. Als Fallenparameter werden wie schon zuvor die Frequenzen von Lu *et al.* [16] verwendet, d.h. $f_{x,y,z} = (205, 195, 760)$ Hz.

zwischen der Streulänge und der Stromstärke der Feshbach-Spule zu bestimmen, wobei man ausnutzt, dass die Ausdehnung des Kondensats während der Expansionsphase von der Streulänge abhängig ist.

In den Abbildungen 6.5 und 6.6 ist der Vergleich zwischen der TF-Näherung³ und der Auswertung der GPG für $\epsilon = 0.8$ und $\epsilon = 1.2$ bzw. zu den Zeiten $t = 3$ sowie $t = 6$

³Für die Auswertung der Expansion in der TF-Näherung wurde ein von der Arbeitsgruppe von Professor Pfau zur Verfügung gestelltes *Mathematica* Skript verwendet.

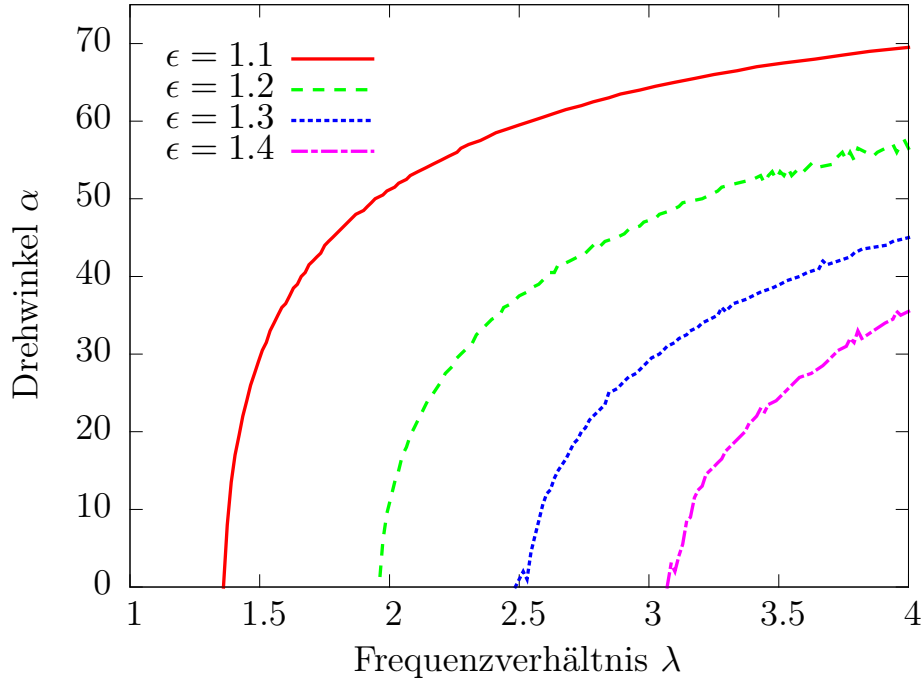


Abbildung 6.7.: Stabilitätsdiagramm für unterschiedliche Werte von $\epsilon = a_{\text{dd}}/a$, wobei Na_{dd} durchgehend den Wert 3.6 aufweist. Aufgetragen ist der maximale Drehwinkel α über dem Frequenzverhältnis λ , für welchen das Kondensat noch stabil ist. In Bezug auf den Drehwinkel der Falle, wird das Kondensat mit größerem ϵ früher instabil als jenes mit kleinerem ϵ . Gleiches gilt für den Übergang von einer oblaten ($\lambda > 1$) hin zu einer sphärischen Fallengeometrie ($\lambda \rightarrow 1$).

der z -Richtung für Zeiten bis zu 6 ms noch klein genug, um eine Kalibrierung $a = a(I_{\text{FB}})$ zuverlässig durchführen zu können.

6.2. Strukturierte Grundzustände

Strukturen sind nicht nur während der Expansionsphase zu erkennen, sondern können auch in gewissen Bereichen des Parameterraumes in den stationären Grundzuständen beobachtet werden. Abbildung 6.7 zeigt ein Stabilitätsdiagramm für vier unterschiedliche Werte von ϵ , wobei durchgehend $\epsilon > 1$ gewählt wurde, um den Fokus auf den dipolaren Charakter zu legen. Als Frequenz für die Falle in z -Richtung wird mit 760 Hz wieder der Wert von Lu *et al.* [16] verwendet, während die Frequenzen der x - und y -Richtung durch das Frequenzverhältnis λ über $\omega_{x,y} = \omega_z/\lambda$ bestimmt werden. Für die Stärke der dipolaren Wechselwirkung gilt durchgehend $Na_{\text{dd}} = 3.6$, d.h. wir ge-

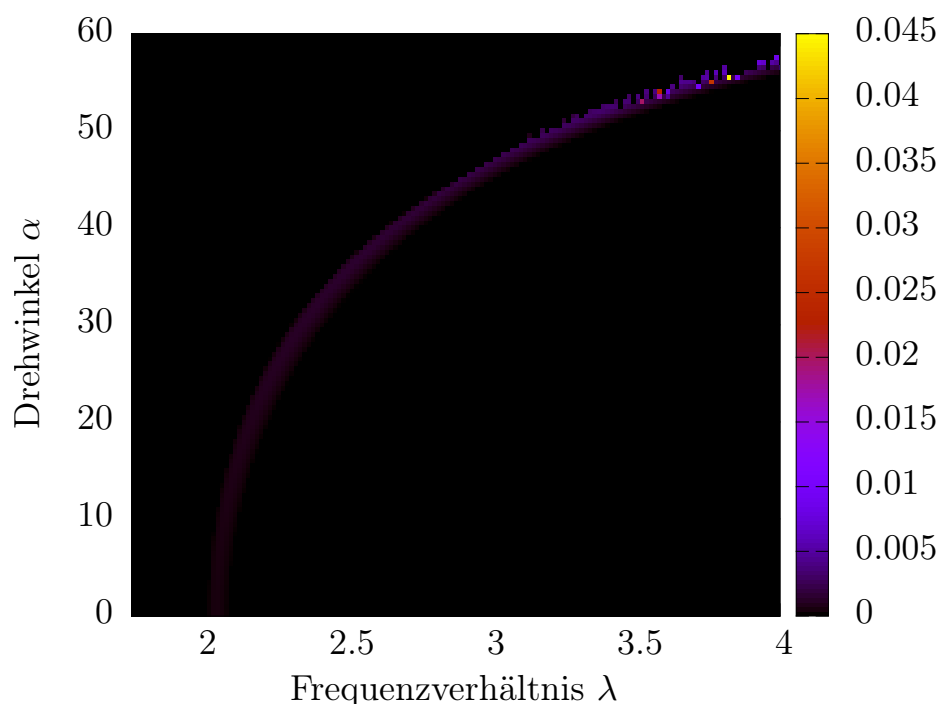


Abbildung 6.8.: Phasendiagramm für die Sichtbarkeit c für $\epsilon = 1.2$. Die schwachen Strukturen sind generell entlang der Stabilitätsgrenze anzufinden. Jedoch machen sowohl die schmale Breite der Region, in welcher die Strukturen auftreten, als auch ihre geringe Sichtbarkeit einen experimentellen Nachweis schwierig.

hen von einem Kondensat mit $N = 10^4$ Teilchen aus, wobei sich die Variation von ϵ durch eine Änderung der Stärke der Streuwechselwirkung Na ergibt. Am Stabilitätsdiagramm lässt sich ablesen, bis zu welchem Drehwinkel der externen Falle relativ zur fest in z -Richtung vorgegebenen Polarisationsachse bei gegebenem Frequenzverhältnis λ die Imaginärzeitentwicklung noch konvergiert. Für Drehwinkel über der Stabilitätslinie liegt keine Konvergenz vor, so dass Zustände in diesem Bereich als instabil zu betrachten sind. Wie auch beim Phasendiagramm in Abbildung 5.1 wird für die Berechnung der Zustände als Startwellenfunktion immer der Grundzustand des vorherigen Parametersatzes verwendet, wobei hier nun jedoch sukzessive in vertikaler statt horizontaler Richtung gerechnet wird. Es ist klar ersichtlich, dass für gleiche Frequenzverhältnisse λ Kondensate mit schwächerem dipolarem Charakter hin zu größeren Drehwinkeln stabil sind als jene mit starkem dipolarem Charakter. Dies ist ein klares Indiz dafür, dass die Instabilität durch die dipolare Wechselwirkung induziert wird. Anschaulich wird dieser Sachverhalt vor allem für größere Frequenzverhältnisse klar, da ein großes λ einer stark oblaten Fallengeometrie entspricht. Werden nun in einer solchen Geometrie die Dipole relativ zu der externen Falle gekippt, so liegen bei ausreichend oblater Dichteverteilung

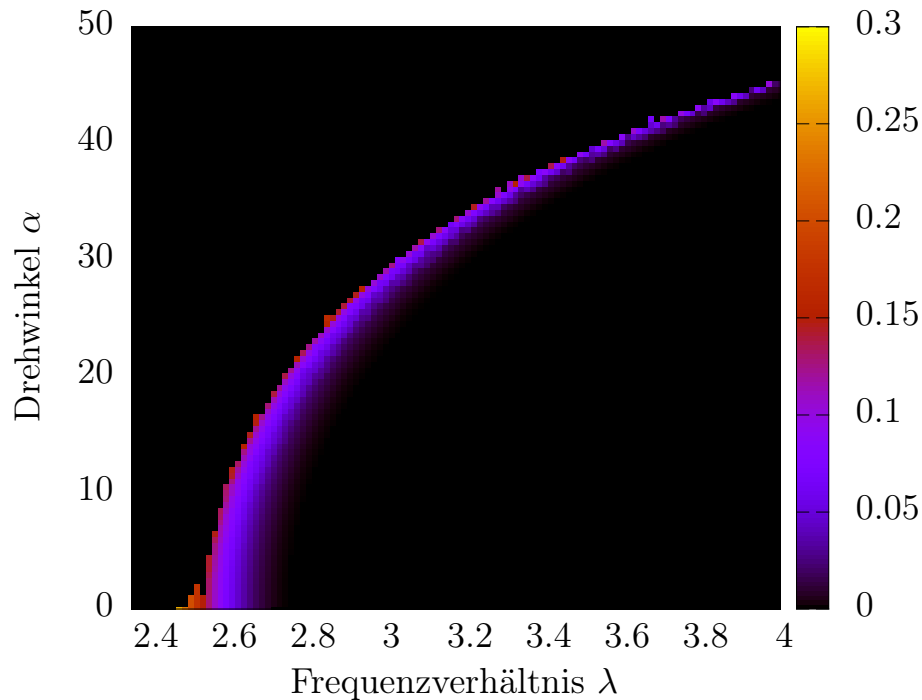


Abbildung 6.9.: Phasendiagramm für die Sichtbarkeit c für $\epsilon = 1.3$. Die nun deutlich erkennbaren Strukturen sind entlang der Stabilitätsgrenze aufzufinden. Im Vergleich zum Fall für $\epsilon = 1.2$ (Abbildung 6.8) sind die Strukturen sowohl in ihrer Sichtbarkeit als auch bezüglich des großen Bereiches, in welchem sie auftreten, experimentell leichter nachzuweisen.

nahezu alle Dipole in der attraktiven und tendenziell instabilen *head-to-tail* Konfiguration vor. Zugleich ist ersichtlich, dass für konstante Drehwinkel das Kondensat mit weniger starkem dipolarem Charakter hin zu kleineren Frequenzverhältnissen stabil ist als jene mit starkem dipolarem Charakter, wobei kleine λ einer zunehmend sphärischen Fallengeometrie entsprechen. Auch dieses Verhalten ist anschaulich verständlich, falls man der Einfachheit halber den Fall für $\alpha = 0^\circ$ genauer betrachtet. Hierbei ist ein Übergang von einer oblaten zu einer sphärischen Dichteverteilung mit einer Zunahme der *head-to-tail* Konfiguration verbunden, welche für Kondensate mit stark dipolarem Charakter eher zu einer Instabilität führt.

In den Abbildungen 6.8 und 6.9 ist die Sichtbarkeit c (siehe (6.5)) der Strukturen der Grundzustände im vom Drehwinkel α und dem Frequenzverhältnis λ aufgespannten Phasenraum aufgetragen. Der Vergleich beider Schaubilder zeigt, dass Strukturen nur in gewissen Bereichen des Phasenraumes vorhanden sind. Wie schon zu erwarten war, treten strukturierte Grundzustände nahe der Stabilitätsgrenze auf. Aus experimenteller Sicht dürfte für den Nachweis strukturierter Grundzustände vor allem die Untersuchung für den Fall $\epsilon = 1.3$ aussichtsreich sein. Hier liegt ein breiter Streifen mit $c \approx 0.1$ vor,

was ausreichend sein sollte, um anhand von experimentell aufgenommenen Absorptionsspektren nachweisbar zu sein. Die Tatsache, dass in diesem System strukturierte Grundzustände auftreten, kann als Vorstufe für die Existenz eines Rotons betrachtet werden. Die Bezeichnung Roton ergibt sich aus dem Anregungsspektrum für eine oblate Falengeometrie, in welcher die Dipole senkrecht zur Richtung des stärksten Einschlusses ausgerichtet sind. Hierbei liegt ein quasi-zweidimensionales Gas vor, welches bei ausreichend starker Wechselwirkung jedoch einen dreidimensionalen Charakter aufweist und infolgedessen auf Grund der attraktiven dipolaren Wechselwirkung bei entsprechender Anregung ein sogenanntes Roton-Minimum aufweist. Die Dispersionsrelation nimmt in diesem Fall qualitativ denselben Verlauf an, welcher auch bei der Dispersionsrelation eines Quasiteilchens in suprafluidem Helium [8] vorliegt. Es ist zu beachten, dass für die Herausbildung einer Roton-Instabilität eigentlich eine Anregung notwendig ist [66], jedoch zeigt die Analyse von Modellsystemen, dass zwischen dem Auftreten von strukturierten Grundzuständen und der Roton-Instabilität ein Zusammenhang besteht [27].

6.3. Selbstinduzierter Josephson-Kontakt

Neben der Realisierung eines BEK mit Dysprosium soll der neue Aufbau der Arbeitsgruppe von Professor Pfau auch das Arbeiten mit komplexeren Potentialen als dem harmonischem Einschluss ermöglichen. Ein Beispiel hierfür ist das in Kapitel 5 beschriebene Drei-Mulden-Potential. Für dipolare Kondensate von Bedeutung ist jedoch auch ein Potential mit oblatem harmonischem Einschluss und einem Gauß'schen Potentialhügel in einer Ebene senkrecht zur Symmetrieachse, durch welchen das externe Potential eine toroidale Form erhält und dem Kondensat ein Loch in der Dichteverteilung aufgeprägt werden kann (siehe 6.10). Liegt die Polarisationsrichtung in dieser Ebene, so kommt es auf Grund der Anisotropie der dipolaren Wechselwirkung zu einer Anhäufung von Teilchen in Richtung der Achse, welche sowohl senkrecht zur Polarisationsrichtung als auch der Symmetrieachse liegt, wodurch die Dichteverteilung jener eines Zwei-Mulden-Potentials entspricht. Eine solche Konfiguration kann als Josephson-Kontakt betrachtet werden, welcher bereits aus der Supraleitung bekannt ist. Hierbei werden zwei Supraleiter über einen Kontakt (*weak link*) miteinander verbunden. Die in diesem System resultierenden Josephson-Effekte (Tunneln von Cooper-Paaren durch den Kontakt) sind eine Folge der makroskopischen Kohärenz, so dass folglich auch für BEK vergleichbare Effekte wie die bei Supraleitern auftretenden Supraströme, welche aus der Phasendifferenz beider beteiligter Supraleiter resultiert, zu erwarten sind. Zur Realisierung eines selbstinduzierten Josephson-Kontakts, wird ein externes Potential der Form

$$V_{\text{extern}} = \frac{1}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + V_0 e^{-2(x^2+z^2)/\sigma_0^2} \quad (6.7)$$

angelegt, wobei im Folgenden die z -Richtung die Polarisationsachse darstellt. Als Parameter für den Gauß'schen Potentialhügel werden die Werte $V_0 = 3.286 \cdot 10^5$ ($2.5 \mu\text{K}$)

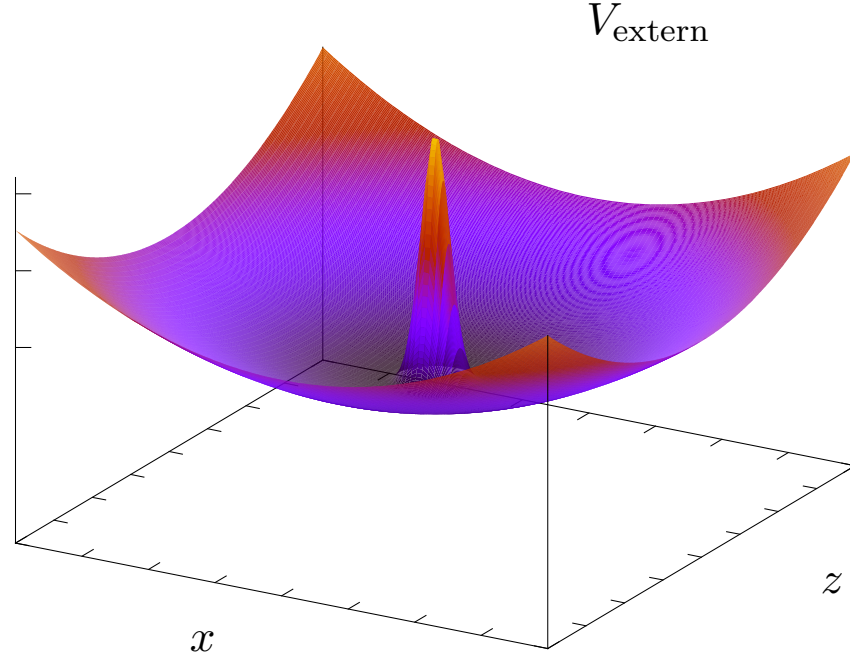


Abbildung 6.10.: Visualisierung der toroidalen Falle gemäß (6.7), für $y = 0$.

und $\sigma_0 = 0.0764$ ($5 \mu\text{m}$) verwendet.

In Abbildung 6.11 ist der Grundzustand des selbstinduzierten Josephson-Kontakts für $f_{x,y,z} = (50, 250, 50)$ Hz sowie $Na_{\text{dd}} = 1.8$ und $Na = 1.7$ zu sehen. Hierbei werden im linken Teil der Abbildung Schnitte des Betragsquadrats der Wellenfunktion $|\Psi|$ entlang der x - und z -Richtung gezeigt, wobei zusätzlich noch in y -Richtung integriert wird, d.h.

$$|\Psi_x|^2 = \int dy |\psi(x, y, 0)|^2, \quad (6.8)$$

$$|\Psi_z|^2 = \int dy |\psi(0, y, z)|^2. \quad (6.9)$$

Im rechten Teil der Abbildung ist ein Absorptionbild in y -Richtung dargestellt. An beiden Abbildungen lässt sich klar die ringartige Struktur der Dichteverteilung erkennen, wobei zudem eine Anhäufung von Partikeln in Richtung der x -Achse zu sehen ist, welche sich aus der Anisotropie der dipolaren Wechselwirkung ergibt. Für eine experimentelle Realisierung eines stabilen Grundzustandes sind die Stabilitätseigenschaften in Bezug auf die Teilchenzahl und der relativen Ausrichtung der Polarisationsachse zur externen Falle von großer Bedeutung. In Abbildung 6.12 ist das Stabilitätsdiagramm für vier unterschiedliche harmonische Fallenfrequenzen f_y dargestellt. Aufgetragen ist hierbei die

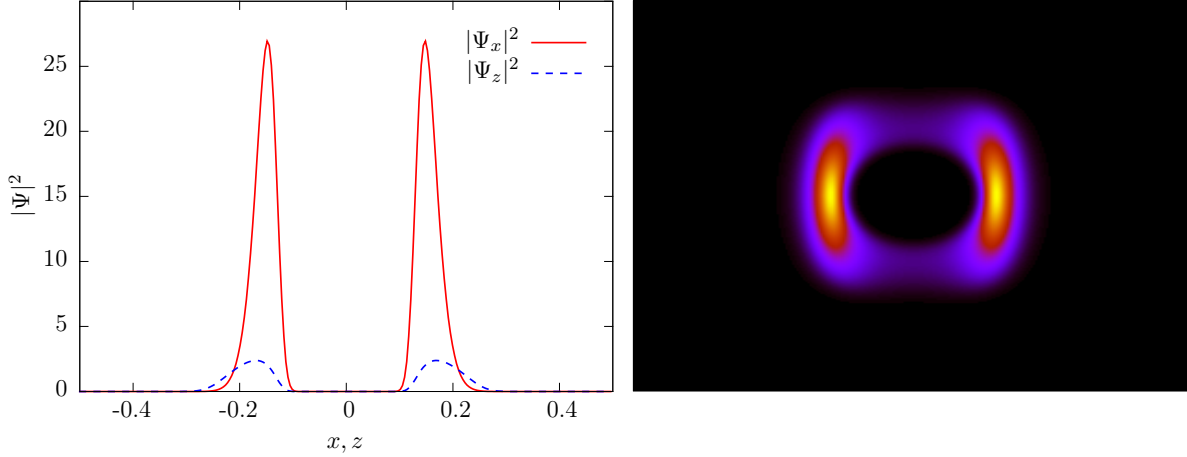


Abbildung 6.11.: Grundzustand des selbstinduzierten Josephson-Kontakts für $f_{x,y,z} = (50, 250, 50)$ Hz sowie $Na_{\text{dd}} = 1.8$ und $Na = 1.7$. Links: Schnitte des Betragsquadrats der Wellenfunktion entlang der x - bzw. z -Richtung, wobei zusätzlich entlang der y -Richtung integriert wird. Rechts: Absorptionsspektrum in y -Richtung (x Abszisse, z Ordinate). Die Ringstruktur wird durch den Gauß'schen Potentialhügel aufgeprägt, wohingegen die anisotrope Dichteverteilung aus der dipolaren Wechselwirkung resultiert.

maximal mögliche Teilchenzahl N für ein gegebenes Verhältnis von $\epsilon = a_{\text{dd}}/a$, wobei a_{dd} durchgehend den Wert $3.6 \cdot 10^{-4}$ aufweist. Analog zu den bisherigen Stabilitätsdiagrammen wird auch hier sukzessive der Grundzustand des vorherigen Parametersatzes als Startwellenfunktion für den folgenden Satz verwendet, wobei in vertikaler Richtung gerechnet wird. Wie zu erwarten ist, verschiebt sich die Stabilitätsgrenze mit abnehmender Fallenstärke in y -Richtung hin zu größeren Teilchenzahlen, da hierdurch mehr Dipole in die repulsive *side-by-side* Konfiguration übergehen können. Betrachtet man für $\epsilon \gtrsim 1.325$ Zustände entlang der Stabilitätsgrenze, so findet man statt der ringförmigen Dichteverteilung Zustände vor, welche die Struktur eines MQST (*macroscopic quantum self-trapping*) aufweisen. Hierbei ist im Zwei-Mulden-Potential statt beider nur eine Mulde besetzt. Abbildung 6.13 stellt die in y -Richtung integrierten Schnitte $|\Psi_x|^2$ und $|\Psi_z|^2$, sowie das Absorptionsspektrum in y -Richtung dar, wobei beide deutlich den MQST-artigen Charakter der Dichteverteilung aufzeigen.

Abbildung 6.14 zeigt die Stabilitätsgrenze für drei unterschiedliche Teilchenzahlen in Bezug auf die relative Ausrichtung von Polarisationsachse und externer Falle, wobei wiederum sukzessive in vertikaler Richtung gerechnet wird. Für den Drehwinkel $\alpha = 0^\circ$ liegt

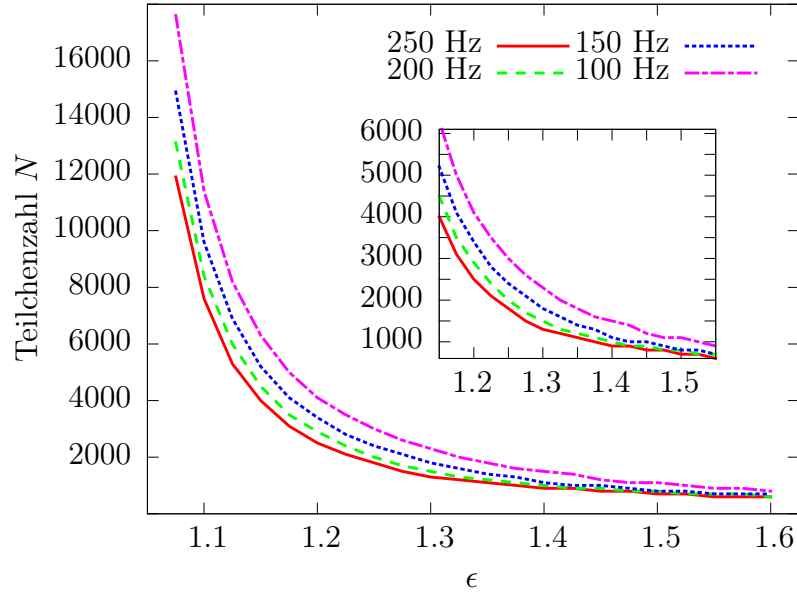


Abbildung 6.12.: Stabilitätsdiagramm für vier unterschiedliche Fallenfrequenzen f_y und $f_{x,z} = 50$ Hz für den selbstinduzierten Josephson-Kontakt, wobei die maximale Teilchenzahl über ϵ aufgetragen ist. Die Polarisationsachse liegt parallel zur z -Achse, so dass die Dipole senkrecht zum starken Falleneinschluss, jedoch aber in der Ebene mit dem Gauß'schen Potentialhügel, ausgerichtet sind.

die Polarisationsachse parallel zur Symmetrieachse in z -Richtung, und somit senkrecht auf der Ebene, in welcher der Gauß'sche Potentialhügel (nun in der xy - statt der xz -Ebene)⁴ angelegt wird. Für größere Drehwinkel wird die externe Falle gemäß 6.1 um die y -Achse gedreht, bis die Polarisationsachse für $\alpha = 90^\circ$ in der Ebene senkrecht zur Symmetrieachse, jedoch aber in der Ebene des Potentialhügels liegt. Wie zu erwarten war, wird das Kondensat für zunehmende Teilchenzahlen bereits bei kleineren Drehwinkeln instabil, da eine Drehung für größere N eine noch stärkere Zunahme der attraktiven dipolaren Wechselwirkung als im Falle kleinerer N bewirkt. Dies kommt dadurch zustande, dass die Dipole von der repulsiven *side-by-side* in die attraktive *head-to-tail* Konfiguration übergehen.

Als Kriterium dafür, ob im System die Bedingung für ein *weak link* erfüllt ist, betrachtet man die Potentialhöhe ΔV_{eff} , durch welche die Partikel tunneln müssen, in Relation zum chemischen Potential ε , wobei für die Potentialhöhe das effektive Potential, bestehend aus der externen Falle und dem dipolaren Wechselwirkungspotential ausschlaggebend ist. Liegt dieses Verhältnis bei Werten deutlich über eins, so kann das

⁴Der Potentialhügel hat nun also die Form $V_{\text{Gauß}} = V_0 e^{-2(x^2+y^2)/\sigma_0^2}$.

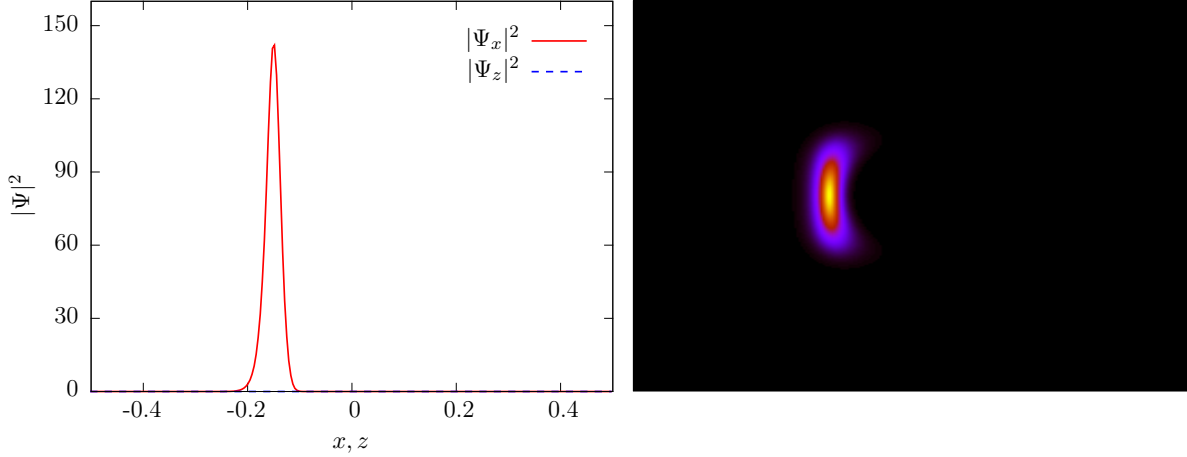


Abbildung 6.13.: Grundzustand des selbstinduzierten Josephson-Kontakts für $f_{x,y,z} = (50, 250, 50)$ Hz sowie $\epsilon = 1.5$ und $N = 700$. Links: Schnitte des Betragsquadrats der Wellenfunktion entlang der x - bzw. z -Richtung, wobei zusätzlich entlang der y -Richtung integriert wird. Rechts: Absorptionsbild in y -Richtung (x Abszisse, z Ordinate). Die Dichteverteilung weist die Struktur eines MQST auf.

System als selbstinduzierter Josephson-Kontakt betrachtet werden [67]. Im Folgenden wird die Dynamik einiger Anfangskonfigurationen untersucht, welche sich in der Stärke der einschließenden harmonischen Falle und der Besetzung der beiden Potentialmulden unterscheiden. Als Teilchenzahl ist für alle Rechnungen ein Wert von $N = 5000$ gewählt worden, wobei die Polarisationsachse jeweils in der Ebene senkrecht zur Symmetrieachse und in der Ebene des Gauß'schen Potentialhügels liegt.

Betrachtet wird die Dynamik anhand der zeitlichen Entwicklung des Besetzungsunterschiedes der Mulden und der Phasendifferenz beider Teilkondensate. Für die Besetzung der Mulden wird jeweils das Betragsquadrat der Wellenfunktion über der entsprechenden Hälfte des Gitters berechnet, d.h.

$$N_{1,r}(t) = \int_{1,r} d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (6.10)$$

Der Besetzungsunterschied ergibt sich aus der Differenz $P = (N_r(t) - N_l(t))/N$. Analog hierzu folgt die Phasendifferenz ϕ aus den Phasen $\phi_{1,r}(t)$ beider Teilkondensate der linken

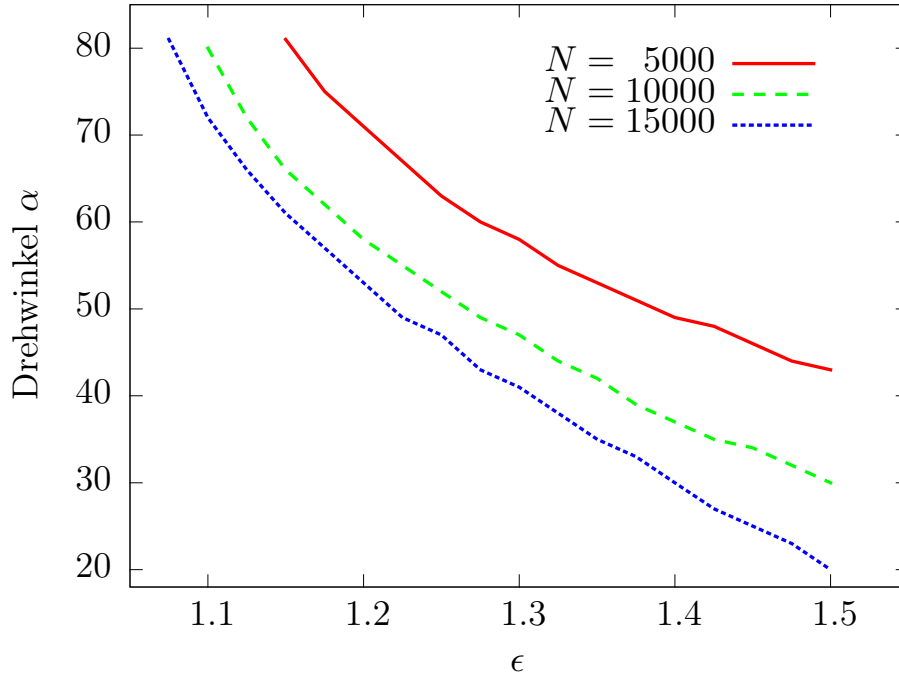


Abbildung 6.14.: Stabilitätsdiagramm für drei unterschiedliche Teilchenzahlen N für $f_{x,y,z} = (50, 50, 250)$ Hz für den selbstinduzierten Josephson-Kontakt, wobei der maximale Drehwinkel über ϵ aufgetragen ist. Die Polarisationsachse liegt für $\alpha = 0^\circ$ in der Richtung der Symmetrieachse und senkrecht zum Gauß'schen Potentialhügel. Mit zunehmendem Drehwinkel wird die externe Falle relativ zur festen Polarisationsachse gedreht, bis diese für $\alpha = 90^\circ$ in der Ebene senkrecht zur Symmetrieachse, jedoch aber in der Ebene des Potentialhügels liegt.

und rechten Hälfte. Hierbei wird zuerst eine gemittelte Wellenfunktion $\bar{\psi}$ [68]

$$\bar{\psi}_{1,r} = \frac{1}{N_{1,r}} \int_{1,r} d^3r |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \psi(\mathbf{r}, t) \quad (6.11)$$

bestimmt und hieraus über

$$\phi_{1,r} = \arctan \frac{\text{Im } \bar{\psi}_{1,r}}{\text{Re } \bar{\psi}_{1,r}} \quad (6.12)$$

die jeweilige Phase. Um eine Dynamik im System beobachten zu können, ist es notwendig, für die Anfangskonfiguration einen Besetzungsunterschied in den Mulden vorzugeben. Dies erreicht man, indem man bei der Imaginärzeitentwicklung für den Gauß'schen

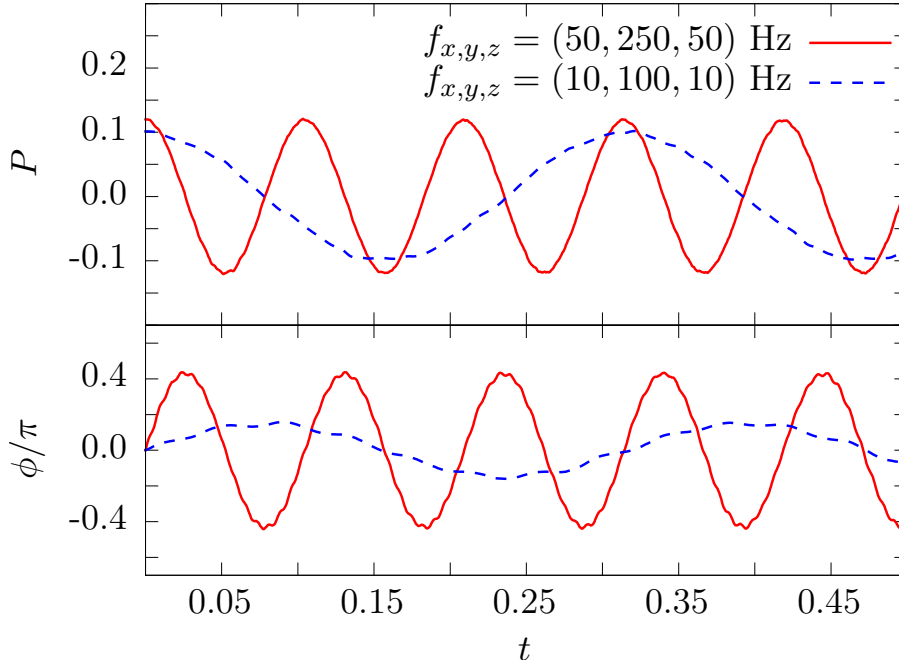


Abbildung 6.15.: Dynamik für den selbstinduzierten Josephson-Kontakt mit Josephson-Oszillationen für zwei unterschiedliche harmonische Fallenfrequenzen $f_{x,y,z}$ mit $\gamma_l = 0.95$ und $\gamma_r = 1.05$ für den starken Falleneinschluss, und $\gamma_l = 0.9$ und $\gamma_r = 1.1$ für den schwachen Falleneinschluss sowie $N_{a_{dd}} = 1.8$ und $N_a = 1.7$. Oben: Der Besetzungsunterschied P der beiden Mulden zeigt einen sinusförmigen Verlauf. Ein stärkerer Falleneinschluss führt zu einer Verkürzung der Periodendauer und erleichtert auf Grund der begrenzten Lebensdauer des Kondensats die experimentelle Beobachtung. Unten: Analog zum Besetzungsunterschied zeigt auch die Phasendifferenz einen sinusförmigen Verlauf.

Potentialhügel einen Ansatz der Form

$$V_{\text{Gauß}} = V_0 e^{-2(\gamma_{l,r}x^2+z^2)/\sigma_0^2} \quad (6.13)$$

verwendet und den Wert $\gamma_{l,r}$ für beiden Hälften des Gitters unterschiedlich wählt. Anschließend wird der damit berechnete Zustand als Startwellenfunktion für eine Realzeitentwicklung mit symmetrischem Gauß'schen Potentialhügel, d.h. $\gamma_{l,r} = 1$, verwendet.

Abbildung 6.15 zeigt die Realzeitentwicklung zweier Anfangskonfigurationen für die harmonischen Fallenfrequenzen $f_{x,y,z} = (50, 250, 50)$ Hz bzw. $f_{x,y,z} = (10, 100, 10)$ Hz, sowie jeweils $N_{a_{dd}} = 1.8$ und $N_a = 1.7$. Für beide Konfigurationen liegt der anfängliche Besetzungsunterschied bei ca 0.1. Sowohl die Dynamik der Besetzung als auch die

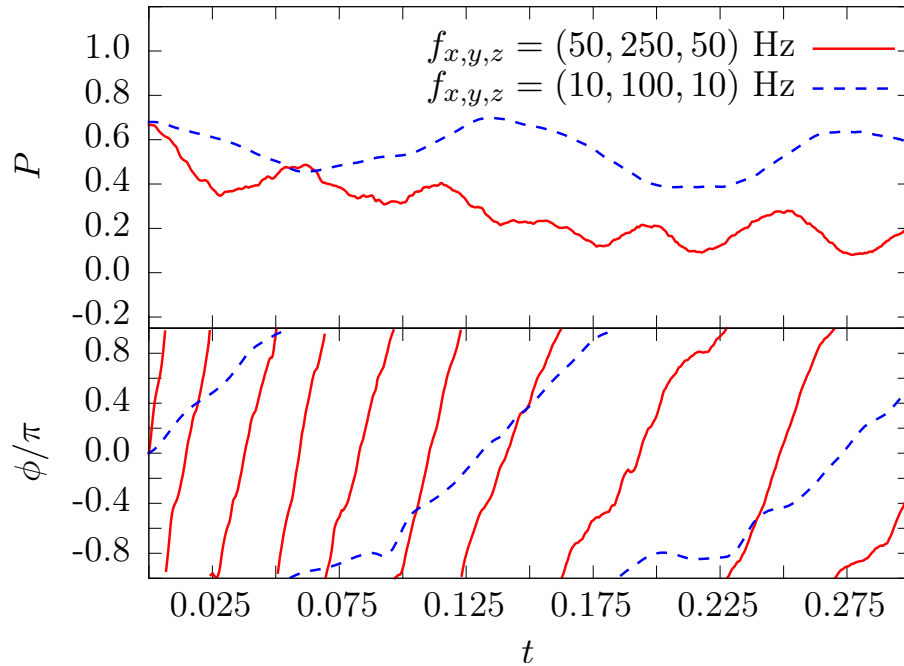


Abbildung 6.16.: Dynamik für einen größeren anfänglichen Besetzungsunterschied für zwei unterschiedliche harmonische Fallenfrequenzen $f_{x,y,z}$ mit $\gamma_l = 0.7$ und $\gamma_r = 1.3$ für den starken Falleneinschluss und $\gamma_l = 0.4$ und $\gamma_r = 1.6$ für den schwachen Falleneinschluss sowie $N_{\text{add}} = 1.8$ und $N_a = 1.7$. Oben: Der Besetzungsunterschied P der beiden Mulden zeigt keinen sinusförmigen Verlauf mehr. Vielmehr ist die Dynamik maßgeblich durch Effekte des MQST bestimmt, wodurch es dem System nicht mehr gelingt die Unterschiede in der Besetzung periodisch zu kompensieren. Unten: Analog zum Besetzungsunterschied, zeigt auch die Phasendifferenz keinen sinusförmigen Verlauf mehr. Die Phasendifferenz verläuft jedoch periodisch mit veränderlicher Periodendauer nahezu linear von $-\pi$ zu π . Dies wird als *running phase mode* bezeichnet.

der Phasendifferenz zeigten durch einen sinusförmigen Verlauf den erwarteten Charakter einer Josephson-Oszillation. Die Zeitskala der Oszillation wird dabei maßgeblich vom harmonischem Falleneinschluss vorgegeben. Da das Kondensat im Experiment nur eine beschränkte Lebensdauer aufweist und ein experimenteller Nachweis einer Josephson-Oszillation mindestens eine Periode umfassen sollte, ist ein Kompromiss zwischen Periodendauer, für welche ein möglichst starker Falleneinschluss wünschenswert ist, und der Stabilität, welche einen möglichst schwachen Falleneinschluss benötigt, notwendig.

Behält man alle Systemparameter bei und erhöht ausschließlich den anfänglichen Besetzungsunterschied auf ca. 0.7, so erhält man eine Dynamik, wie sie in Abbildung 6.16

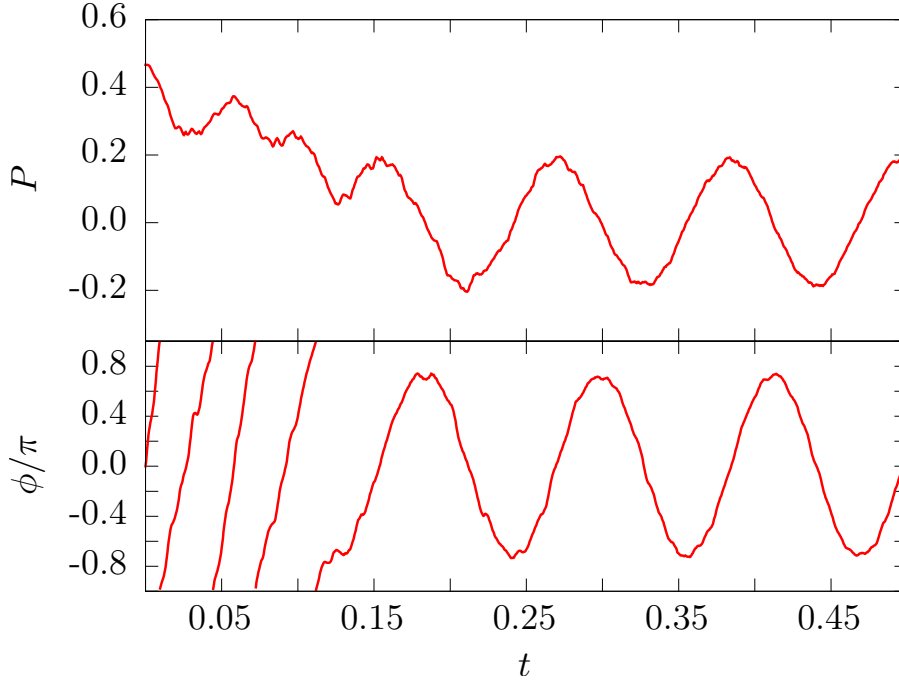


Abbildung 6.17.: Dynamik einer Konfiguration für $f_{x,y,z} = (50, 250, 50)$ Hz mit $\gamma_l = 0.8$ und $\gamma_r = 1.2$ sowie $Na_{\text{dd}} = 1.8$ und $Na = 1.7$. Wird der anfängliche Besetzungsunterschied auf einen Wert von ca. 0.5 gesetzt, so ergibt sich eine Dynamik welche einen Übergang von der *running phase mode* hin zu Josephson-Oszillationen zeigt.

dargestellt ist. Das System ist nicht mehr in der Lage den Besetzungsunterschied periodisch auszugleichen und wird stattdessen vom MQST geprägt. Hierbei bleibt eine Mulde dauerhaft stärker besetzt während die Phasendifferenz periodisch mit veränderlicher Periodendauer nahezu linear von $-\pi$ zu π verläuft (*running phase mode*). Abad *et al.* [69] haben gezeigt, dass sich bei der *running phase mode* in Regionen kleinerer Dichte vor Erreichen des Minimums des Besetzungsunterschiedes ein Vortex-Antivortex-Paar herausbildet. Nach der Herausbildung trennt sich das Paar und durchquert das Kondensat in entgegengesetzter Richtung. Hierbei kommt es zum Phasensprung, durch welchen die Flussrichtung der Partikel invertiert wird. Betrachtet man die Dynamik für einen anfänglichen Besetzungsunterschied von ca. 0.5, so zeigt sich wie in Abbildung 6.17 erkennbar ein Übergang von der *running phase mode* zu Josephson-Oszillationen.

6.4. Ausblick auf kommende Experimente mit ^{164}Dy

Zum Zeitpunkt der Publikation dieser Arbeit befindet sich das Projekt zur Realisierung eines dipolaren BEKs mit ^{164}Dy der Arbeitsgruppe von Professor Pfau in der Endphase. Dies lässt für die kommenden Jahre eine Vielzahl an Experimenten zu strukturierten Grundzuständen, Solitonen und vielem mehr erwarten. Maßgeblich relevant sind Experimente zur Bestimmung der Hintergrundstreuwellenlänge a von ^{164}Dy . Hierzu bieten sich generell alle Versuche an, in welchen sich die Streuwellenlänge auf die beobachtbaren Eigenschaften des Kondensats auswirkt. Besonders geeignet ist jedoch eine Untersuchung von Stabilitätsgrenzen, wie sie in Abbildung 6.7 zu erkennen sind. Während in den diesbezüglichen Simulationen die externe Falle relativ zur festen Ausrichtung der Dipolmomente gedreht wird, ist dies in einem Experiment nicht möglich. Jedoch kann die Polarisationsrichtung der Dipole durch ein externes magnetisches Feld sehr präzise kontrolliert werden. Sind die Teilchenzahl sowie die Fallenfrequenzen ausreichend genau bekannt, so kann hierüber durch einen Vergleich zwischen Experiment und Theorie die Hintergrundstreuwellenlänge von ^{164}Dy bestimmt werden. Wie am Anfang des vorigen Kapitels erwähnt, ermöglicht der neue Versuchsaufbau das Arbeiten mit komplexeren Potentialen als dem einfachen harmonischem Einschluss. Dies lässt Experimente zu Kondensaten in Mehr-Mulden-Potentialen erwarten, in welchen die Effekte der dipolaren Wechselwirkung eingehend studiert werden können. Zudem dürften Untersuchungen an Systemen folgen, in welchen man hofft strukturierte Grundzustände ohne ein entsprechendes externes Potential, durch welches die Dichtemodulationen aufgeprägt werden, beobachten zu können. Wie [27] zu entnehmen ist, kann die Dichteverteilung eines dipolaren Kondensat bei sehr hohen Dichten die Symmetrie der externen Falle brechen und ein Schachbrettmuster aufweisen.

7. Zusammenfassung und Ausblick

7.1. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden, ausgehend von der Gross-Pitaevskii-Gleichung, stationäre und dynamische Eigenschaften von dipolaren Bose-Einstein-Kondensaten in verschiedenen externen Potentialen untersucht. Zur numerischen Auswertung der Gross-Pitaevskii-Gleichung auf einem dreidimensionalen Gitter wurde die Imaginärzeitentwicklung verwendet, welche eine Berechnung der Grundzustände eines Systems ermöglicht. Diese so berechneten Zustände wurden anschließend als Startwellenfunktion für eine Realzeitentwicklung verwendet, wodurch sich weitreichende Aussagen über die Dynamik dipolarer Bose-Einstein-Kondensate treffen ließen. An geeigneter Stelle wurden die Ergebnisse der Gitterrechnungen mit jenen von Fortanier bzw. Eichler [24–26] verglichen, welche durch einen Variationsansatz gewonnen wurden. Der Variationsansatz ermöglicht neben den Grundzuständen auch die Berechnung der angeregten Zustände und dient unter anderem der Vervollständigung der Gitterrechnungen. Dabei zeigt sich, dass eine systematische Berechnung von Phasendiagrammen (siehe Abbildungen 5.1 und 5.2 sowie 6.8 und 6.9) und Stabilitätsgrenzen (siehe Abbildungen 6.7 und 6.12 sowie 6.14), welche für eine experimentelle Untersuchung von essentieller Bedeutung sind, nur mit Hilfe von Gitterrechnungen in einer adäquaten Auflösung und Zeitdauer durchgeführt werden können. Auch ist eine Kontrolle der von Fortanier berechneten Lösungen durch die Gitterrechnungen notwendig, da der Lösungsraum des Variationsansatzes durch die Vorgabe der Startwellenfunktion wesentlich stärker eingeschränkt ist als im Falle der Gitterrechnungen, so dass *a priori* keine Aussage über die Vollständigkeit der Lösungen des Variationsansatzes getroffen werden kann. Als bedeutsamer Bestandteil der Arbeit hat sich daher die Implementierung und Erweiterung des von Köberle [27] in *Fortran* geschriebenen Algorithmus in *C* und darauf aufbauend in *CUDA C* erwiesen, da eine systematische Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung auf einem dreidimensionalen Gitter ohne die Verwendung von Hardware zur hochparallelisierten Implementierung des Algorithmus aus Gründen der Rechenzeit nicht praktikabel ist.

Aufbauend auf der Arbeit von Köberle *et al.* [27, 28], wurde die Stabilität von quasi-zweidimensionalen Solitonen in Bezug auf starke Störungen untersucht. Als quasi-zweidimensionales Soliton wird hierbei eine Konfiguration verstanden, in welcher der externe Falleneinschluss nur in einer Dimension senkrecht zur Polarisationsrichtung angelegt wird. Da Solitonen unter einer Bewegung ihre Form beibehalten, ist zur Untersuchung ihrer Stabilität eine Kollision zweier Solitonen mit entgegengesetztem inertialen Im-

puls besonders geeignet. Neben dem Anfangsimpuls lassen sich zur systematischen Untersuchung möglicher Kollisionsdynamiken auch die relative Phasendifferenz sowie ein durch Verschieben der Solitonen senkrecht zur Bewegungsrichtung im System eingeführter Bahndrehimpuls variieren. Die Auswertung unterschiedlicher Szenarien ergab einen Überblick über die in einem Experiment zu erwartenden Dynamiken, welche über Absorptionsbilder sehr gut mit künftigen Kollisionen in einem Experiment vergleichbar sein sollten. Es zeigte sich, dass die transferierte Menge an kinetischer zu innerer Energie stark vom jeweiligen Szenario, d.h. von der relativen Phasendifferenz sowie dem Anfangsimpuls und vom Drehimpuls abhängig ist. Neben den für künftige Experimente relevanten Erkenntnissen ermöglichten die hier präsentierten Ergebnisse auch eine Kontrolle der Rechnungen, welche durch einen Variationsansatz gewonnen wurden. Hierbei ergab sich eine beeindruckende Übereinstimmung in Bezug auf die während der Kollision erstellten Absorptionsbilder [26]. Zeitgleich machten die Kollisionsdynamiken jedoch auch die Limitierung von Gitterrechnungen deutlich. Auf Grund der Endlichkeit des Gitters war eine Beobachtung des Solitonenverhaltens für lange Zeiten nach der Kollision nicht möglich. Im hier präsentierten Fall war es daher nicht möglich zu entscheiden, ob die Anregung der Solitonen während der Kollision zu einer Anregung einer Oszillationsmode führt oder das Kondensat letztlich zerfließen wird. Erst die Hinzunahme der Variationsrechnungen zeigte, dass eine Oszillationsmode mit zeitgleicher Emission von Partikeln angeregt wird. Da jedoch die Lebensdauer der Kondensate im Experiment vorraussichtlich nicht ausreichend groß sein dürfte um die langfristige Entwicklung der Solitonen nach der Kollision zu studieren, sind die Gitterrechnungen in der Lage alle relevanten Details der Kollisionsdynamik zu beschreiben.

Aufbauend auf den Arbeiten von Peter *et al.* [29] wurde zudem das Verhalten von dipolaren Kondensaten in Drei-Mulden-Potentialen untersucht. Dieses Potential dient als Minimalsystem zur Untersuchung dipolarer Effekte in größeren periodischen Strukturen, welche in Bezug auf Strukturbildung und Selbstorganisation von Relevanz sind. Ein Vergleich des berechneten Phasendiagramms für stationäre Zustände im Drei-Mulden-Potential mit jenem von Peter *et al.* [29] ergab entlang der Stabilitätsgrenze deutliche Abweichungen. Dies spiegelt die Sensitivität gegenüber Startwellenfunktionen und Konvergenzkriterien in Bereichen des Phasenraumes nahe der Stabilitätsgrenze wieder. Deshalb wurde in dieser Arbeit großen Wert auf eine möglichst akkurate Berechnung der Phasendiagramme gelegt, indem Zustände sukzessiv aus zuvor berechneten Grundzuständen anderer Parametersätze als Startwellenfunktion mit möglichst kleiner Schrittweite und möglichst strengen Konvergenzkriterien berechnet wurden. Bereiche, in welchen nur von Peter *et al.* stationäre Zustände gefunden wurden, lassen sich über eine Variation der Streulänge in einer Realzeitentwicklung erreichen. Hierbei kommt es zu chaotischen und unsymmetrischen Oszillationen in den Besetzungszahlen der Mulden, welche die Existenz von metastabilen Zuständen in diesem Bereich vermuten lassen. Betrachtet man hingegen eine Realzeitentwicklung mit einer Variation der Streulänge in einen Bereich hinein, in welchem überwiegend die mittlere Mulde besetzt ist, so kommt es auf Grund des scharfen Übergangs zwischen zwei qualitativ stark verschiedenen Zu-

ständen zu heftigen periodischen und symmetrischen Oszillationen, welche eine Untersuchung dieses Bereichs in einem Experiment erschweren können. Die Auswertung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen lässt die Schlussfolgerung zu, dass die hier gefundenen Grundzustände tatsächlich stationär sind. Zur Untersuchung metastabiler Inseln wird als Startwellenfunktion für die Realzeitentwicklung auf dem Gitter die Lösung des Variationsansatzes benötigt. Hierbei zeigt sich eindrucksvoll, wie Oszillationen in den Besetzungszahlen der Mulden das Kondensat dynamisch stabilisieren und einen sofortigen Kollaps unterbinden.

Im abschließenden Teil der Arbeit wurde eine Reihe von Simulationen durchgeführt, welche die Arbeitsgruppe von Professor Pfau vom 5. Institut für Physik der Universität Stuttgart bei der Realisierung eines dipolaren Kondensats mit ^{164}Dy unterstützen sollen. Hierbei wurden die Expansionsdynamik sowie die Stabilitätsgrenzen und hieraus resultierend strukturierte Zustände auf ihre experimentelle Sichtbarkeit hin studiert. Des Weiteren wurde die Gültigkeit der Thomas-Fermi-Näherung untersucht, welche für die Kalibrierung der Versuchsaappatur von Nutzen ist, da hierbei die räumliche Ausdehnung des Kondensats in der Falle und unter gewissen Einschränkungen auch während der Expansionsphase mit einem numerisch geringen Aufwand berechenbar ist. Um das dipolare Kondensat auch in komplexeren externen Potentialen untersuchen zu können, beschäftigt sich das abschließende Kapitel mit Kondensaten in einer toroidalen Falle. Hierbei entsteht auf Grund der Anisotropie der dipolaren Wechselwirkung ein effektives Zwei-Mulden-Potential, in welchem unter den entsprechenden Anfangsbedingungen sowohl Josephson-Oszillationen sowie eine *running phase mode* zu beobachten war. Neben der Dynamik in einem toroidalen Potential wurden zudem auch Stabilitätsgrenzen in Bezug auf die Teilchenzahl und die relative Ausrichtung der Falle zur Polarisationsrichtung berechnet sowie ein Grundzustand entdeckt, in welchem nur eine Mulde besetzt ist und die Dichteverteilung somit die Struktur eines *macroscopic quantum self-trapping* aufweist.

7.2. Ausblick

Durch die Implementierung mit *CUDA C* ist der für diese Arbeit verwendete Algorithmus in der Lage, systematische Rechnungen in großem Umfang durchzuführen. Auf Grund der großen Flexibilität der Methode ist die Implementierung neuer externer Potentiale sowie darauf aufbauend die Berechnung sowohl von Phasendiagrammen als auch Stabilitätsgrenzen möglich. Hierdurch lassen sich insbesondere für Experimentatoren wichtige Vorhersagen treffen. Im Bereich der Mehr-Mulden-Potentiale steht eine Untersuchung der nichtlinearen Anordnung der Mulden noch aus. Für ein Drei-Mulden-Potential ist beispielsweise eine Anordnung in einem Dreieck denkbar, welches als Modellsystem für zweidimensionale Strukturen dient. Zudem lassen sich durch sukzessives Hinzufügen von weiteren Mulden kreisförmige Strukturen untersuchen und mit den Ergebnissen der toroidalen Falle vergleichen. Im Bereich vieler Mulden sind auch größere zweidimensionale

7. Zusammenfassung und Ausblick

Strukturen wie beispielsweise Schachbrettmuster oder eine längere lineare Anordnung in Richtung optischer Gitter denkbar. Hierdurch ist eine genaue Untersuchung von Systemen möglich, welche für künftige Versuche am 5. Institut für Physik der Universität Stuttgart angedacht sind. Allerdings wird eine Analyse großer zweidimensionaler Strukturen momentan durch die verfügbaren Rechenressourcen eingeschränkt.

8. Summary

8.1. Introduction

The topic of this thesis is the study of dipolar Bose-Einstein condensates in various external potentials. Dipolar condensates have recently been realized with particles such as ^{52}Cr [12–14] and ^{164}Dy [15, 16], which are characterized by large magnetic dipole moments of 6 and 10 μ_B , respectively. Bose-Einstein condensates are important due to the fact that many-body problems, especially in the field of solid state physics, are in general hard to investigate. Working in the regime of ultracold atoms however, enables the experimenter to exactly control important parameters of the system such as interactions between particles and the properties of the external confinement. The dipole-dipole interaction is nonlinear, long-ranged, non-local, and anisotropic. Due to these features dipolar Bose-Einstein condensates can show a variety of different phenomena, which cannot be observed for only short-ranged condensates like the elongation of the cloud along the axis of polarization (magnetostriction), geometrical stabilization due to the external confinement, and the occurrence of a maxon-roton spectrum in an oblate trap [14].

In this thesis we solve the Gross-Pitaevskii equation numerically exact on a grid by means of the imaginary- and real-time evolution. The Gross-Pitaevskii equation is a consequence of a mean-field ansatz, in which all atoms are assumed to be in their motional ground state. This means that the solutions are only valid for temperatures far beyond the critical temperature at which the condensation takes place. However, comparisons with quantum Monte Carlo calculations and experimental data show impressive agreement with the results obtained by solving the Gross-Pitaevskii equation [14]. Using the imaginary-time evolution restricts the space of solutions to the ground state, whereas the real-time evolution determines the dynamics of every condensate of which the wave function can be mapped on the grid. On the one hand the method is very flexible since it allows for almost every form of the wave function. On the other hand the finite grid size limits the space taken into account in the calculations. For this case the method can be extended with alternative methods such as a variational ansatz. Where appropriate, we have compared the results of the grid calculations with results obtained by a variational ansatz, based on a representation of the wave functions by a superposition of Gaussians.

8.2. Theoretical Background

In section 2.1 we show how the phenomena of Bose-Einstein condensation of an ideal gas can be described by means of a quantum statistical approach, where the expected occupation f_{BE} of an energy state E_i is given by

$$f_{\text{BE}}(E_i) = \frac{1}{e^{\beta(E_i - \varepsilon)} - 1}. \quad (8.1)$$

Here $\beta = \frac{1}{k_B T}$ is the inverse temperature and ε is the chemical potential. Expression (8.1) can be used to show that the critical temperature T_c , below which the condensation occurs, is given by

$$T_c \approx \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m} \left(\frac{n}{2.612} \right)^{2/3}, \quad (8.2)$$

where m is the mass and n denotes the density of particles. The fraction n_0 of particles occupying the ground state $E_i = 0$ is then given by

$$\frac{n_0}{n} = 1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2}. \quad (8.3)$$

By means of the heat capacity at constant volume C_V figure 2.1 shows that the phenomenon of Bose-Einstein condensation is actually a thermodynamical phase transition. A more realistic description of a condensate takes into account a finite number of particles and external trapping of the gas, where the wave function of the system is the product of one-particle wave functions given by a Gaussian. One important feature of a trapped condensate in an anisotropic confinement is the anisotropy of its momentum distribution. By ramping down the external trap and thus releasing the gas one can investigate the dynamics of its expansion. Here the anisotropy of the momentum distribution manifests itself in the anisotropy of the density distribution.

In section 2.2 we discuss the concept of off-diagonal long range order. This approach allows for a more general description of a condensate. Here the introduction of a one-particle density matrix

$$\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (8.4)$$

is necessary. We show that for large $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ the existence of a condensate corresponds to

$$\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle \rightarrow n_0. \quad (8.5)$$

By neglecting correlations we can finally introduce a macroscopic wave function

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \langle \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (8.6)$$

which is related to the one-particle density by

$$\rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \psi_0^*(\mathbf{r})\psi_0(\mathbf{r}'), \quad (8.7)$$

and corresponds to the density of the condensate for $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$.

Section 2.3 discusses the various kinds of interactions which are important for dipolar Bose-Einstein condensates. We start by looking at short-range interactions, where the scattering of particles can be described by a Fermi-like contact interaction term which is characterized by an isotropic scattering length a . This scattering length can be manipulated by means of a Feshbach resonance. Here an external magnetic field changes the coupling between a bound state and a state of an incoming particle. The scattering length is then given by

$$a(B) = a_0 \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (8.8)$$

where B_0 is the position of the resonance at which a diverges, and Δ is the resonance width.

For the dipole-dipole interaction we have to take both a long and short-ranged contribution into account. Here the former introduces an anisotropic and non-local interaction into the system, whereas the latter adds a shift to the scattering length a . This means that in general the scattering length now depends on the dipole moment. Since ^{52}Cr and ^{164}Dy have permanent dipole moments we can neglect this dependence for the further discussion. The total interaction potential is given by

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{4\pi a \hbar^2}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3}, \quad (8.9)$$

where μ is the dipole moment and θ is the angle between the axis of polarization and $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. The side-by-side configuration $\theta = 90^\circ$ (see figure 2.4) gives rise to a repulsive contribution of the long-range part of the interaction, whereas the head-to-tail configuration $\theta = 0^\circ$ leads to an attractive dipole-dipole interaction.

In section 2.4 we use a quantum field theoretical approach to derive the Gross-Pitaevskii equation, which is a nonlinear Schrödinger equation in the mean-field limit. We introduce a bosonic field operator $\hat{\Psi}$ and neglect fluctuations, thus replacing the field operator by a scalar order parameter $\langle \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle$. After the introduction of the one-particle wave function $\psi(\mathbf{r}, t) = N^{-\frac{1}{2}} \langle \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle$ this approach finally yields the Gross-Pitaevskii equation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left(\hat{h} + N \left(\frac{4\pi a \hbar^2}{m} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 + \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi} \int d^3 r' \frac{1 - 3\cos^2\theta}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} |\psi(\mathbf{r}', t)|^2 \right) \right) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (8.10)$$

where

$$\hat{h} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (8.11)$$

if the external confinement is a harmonic trap. Due to the occurring singularity, we calculate the integral of the dipole-dipole interaction by means of the convolution theorem and show in section 2.5 how this approach results in two Fourier transforms

$$\Phi_d(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{3} \mathcal{F}^{-1} \left\{ \left(\frac{3k_z^2}{k^2} - 1 \right) \mathcal{F} \{ |\psi(\mathbf{r})|^2 \} \right\}. \quad (8.12)$$

In Section 2.6 we present an ansatz to investigate the stability of stationary states with respect to small excitations. This yields the Bogoliubov-de Gennes equations

$$\begin{aligned} \hbar\omega u(\mathbf{r}) &= \left[\hat{h} - \varepsilon + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \right] u(\mathbf{r}) \\ &\quad + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\psi_0^*(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}')] \psi_0(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (8.13)$$

$$\begin{aligned} -\hbar\omega v(\mathbf{r}) &= \left[\hat{h} - \varepsilon + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') |\psi_0(\mathbf{r}')|^2 \right] v(\mathbf{r}) \\ &\quad + N \int d^3r' U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\psi_0^*(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}') + \psi_0(\mathbf{r}') v(\mathbf{r}')] \psi_0^*(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (8.14)$$

where the solution is the Bogoliubov spectrum $\{\omega_i\}$. This spectrum characterizes collective excitations of the whole condensate above the stationary state ψ_0 , while all particles remain in the same state. Solutions with real frequencies correspond to stable systems, whereas imaginary frequencies describe dynamical instabilities.

If we neglect the kinetic term in the Gross-Pitaevskii equation it is possible to find an analytic solution. This is called the Thomas-Fermi approximation and is the subject of section 2.7. Here the density distribution is an inverted parabola and we outline the approximations necessary for the derivation of the equations for an expanding condensate.

8.3. Numerical Methods

Chapter 3 outlines the numerical methods and details of the implementation of our algorithm. In section 3.1 we use the split-operator method to apply a time evolution operator $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t}$ (where $\hbar = 1$) upon a state $|\varphi\rangle$. By means of the Baker-Campbell-Hausdorff formula we find

$$\begin{aligned}
\psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \langle \mathbf{r} | \hat{U}(\Delta t) | \psi \rangle \\
&= \langle \mathbf{r} | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2}\Delta t} e^{-iV(\hat{\mathbf{r}})\Delta t} e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2}\Delta t} | \psi \rangle \\
&= \int d^3p' d^3r' d^3p \langle \mathbf{r} | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2}\Delta t} | \mathbf{p}' \rangle \langle \mathbf{p}' | e^{-iV(\mathbf{r})\Delta t} | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2}\Delta t} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}^9} \int d^3p' d^3r' d^3p e^{i\mathbf{r}\mathbf{p}'} e^{-i\frac{p'^2}{2}\Delta t} e^{-i\mathbf{p}'\mathbf{r}'} e^{-iV(\mathbf{r}')\Delta t} e^{i\mathbf{r}'\mathbf{p}} e^{-i\frac{p^2}{2}\Delta t} \tilde{\psi}(\mathbf{p}). \quad (8.15)
\end{aligned}$$

This expression suggests the following numerical scheme:

- Start with a wave function $\psi(\mathbf{r})$ on the grid and calculate its Fourier transform $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$.
- Multiply the Fourier transform with $e^{-i\frac{p^2}{2}\Delta t}$.
- Perform an inverse Fourier transform and multiply with $e^{-iV(\mathbf{r})\Delta t}$.
- Calculate the Fourier transform and multiply with $e^{-i\frac{p^2}{2}\Delta t}$.
- Perform the inverse Fourier transform back to real space.

Section 3.2 illustrates the calculation of the ground state by applying the imaginary-time evolution, where we use the numerical scheme presented above and introduce an imaginary time $\tau = it$. This leads to the expression $U(\tau) |\varphi\rangle = \sum_n e^{-\epsilon_n \tau} c_n |\phi_n\rangle$, which means that the imaginary-time evolution dampens the excited states until we obtain the ground state. Finally, section 3.3 shows how the Bogoliubov-de Gennes equations can be modified in order to simplify their implementation.

8.4. Results

8.4.1. Collision of two-dimensional solitons

In chapter 4 we study the collisions of anisotropic two-dimensional solitons, where the one-dimensional external confinement is perpendicular to the axis of polarization. The dynamical creation and stability with respect to small excitations has been investigated in previous publications. Here we are interested in the stability with respect to strong excitations. Since solitons do not change their form while propagating through space, the collision of two solitons is an effective way for this purpose.

We start by placing two solitons in the repulsive side-by-side configuration und multiply the wave functions by a plane wave in order to introduce kinematic momentum.

By additionally introducing a phase factor and shifting the solitons in a direction perpendicular to the direction of motion we can investigate soliton collisions with different phase relations and angular momentum. Figure 4.1 shows absorption images (integral of the modulus square of the wave function along the axis of confinement) for kinematic momentum $k = 10$ and phase differences $\Delta\phi = 0, \pi/2, \pi$ (from left to right) and no angular momentum. For no phase difference constructive interference occurs and the solitons merge and split up again. After the collision both condensates have a larger spatial distribution than before. This indicates a transfer of kinetic energy to internal energy and might either induce the dispersal of the solitons or lead to breathing-mode-like oscillations. For the remaining scenarios with phase difference, the transfer of energy is obviously lower since the spatial distribution after the collision is smaller. In the case of $\Delta\phi = \pi/2$ the absorption images show an asymmetric dynamics. This is due to the fact that in this case the wave function is not an eigenfunction of the parity operator, whereas it is for $\Delta\phi = 0$ and π . In Figure 4.2 we show absorption images with kinematic momentum $k = 5, 30$ and 60 and no phase difference or angular momentum. For small momenta the kinetic energy is not large enough for a split and we can observe an oscillating condensate with emission of particles, whereas collisions with larger kinetic momenta show strong patterns of interference followed by a split. The cases with $k = 10$ and $\Delta\phi = 0, \pi/2, \pi$ (from left to right) and finite angular momentum are presented in figure 4.3. Here the dynamics of the collision shows the emergence of transient eddy-like structures, where the spatial distribution after the collisions once more clearly indicates a transfer of kinetic to internal energy. The kinetic energy for these three collisions with finite angular momenta is depicted in figure 4.4. Here we compare our results with results obtained by a variational ansatz. We find excellent agreement up to the point where the finite size of the grid manifests itself in oscillations of the wave function's amplitude. The inset in figure 4.4 indicates the oscillatory behaviour of the condensate for long times, where grid calculations break down due to the finite size of the grid. The oscillatory character of the excitation can be confirmed by investigating the variance of the Gaussian wave packets of the variational ansatz in figure 4.5. Since the lifetime of a condensate in an experimental setup is very limited, the behaviour for long times probably cannot be investigated experimentally. This means that grid calculations cover all of the essential details of the collision dynamics which can be observed in an experiment.

8.4.2. Triple-well potential

The subject of chapter 5 is the investigation of ground states and dynamics of dipolar condensates in triple-well potentials. Such potentials are a minimum system for the study of phenomena like self-organization and pattern formation in optical lattices. We present a phase diagram of the ground states in the parameter space of the scattering (Na) and the dipolar (Na_{dd}) interaction for the repulsive (figure 5.1) and attractive (figure 5.2) configuration, where the color bar represents the occupation of the outer wells. For the repulsive configuration we find states with uniform occupation of all three

wells and small regions of the parameter space with primarily occupation of both outer wells or the center well. In figures 5.4 and 5.5 we change the scattering length over time and thus investigate the dynamics of the condensate for a transition from one region of the parameter space to another. The first figure depicts the occupation of all three wells for a transition from a region in space where the imaginary-time evolution converges to a region where we do not find any ground states. Here the occupation numbers show small and chaotic oscillations, which indicate the existence of a ground state which was not found by our numerical approach. The second figure investigates the dynamics of a transition which starts in a region of parameter space with almost uniform occupation and ends in a region where only the center well is occupied. The sudden change in the occupation numbers in the phase diagram leads to large symmetric and periodic oscillations. In figure 5.6 we present the solution of the Bogoliubov-de Gennes equations for $Na_{\text{dd}} = 0.2$. All imaginary parts of the stability eigenvalues vanish, which means that all calculated ground states for $Na_{\text{dd}} = 0.2$ are dynamically stable. Additionally, the real parts of the stability eigenvalues confirm all results obtained by the imaginary-time evolution. Finally, we map the solution of the variational ansatz onto the grid and demonstrate the existence of a metastable state in a region of the parameter space in which the imaginary-time evolution does not converge. In figure 5.8 we compare the results of the grid calculation and the results obtained by the variational ansatz for the dynamics of the metastable state.

8.4.3. Dipolar Bose-Einstein condensate with dysprosium

In chapter 6 we present a series of calculations, which shall assist the group of Professor Pfau of the 5th Institute of Physics of the University of Stuttgart by realizing a dipolar condensate with ^{164}Dy . First we show in subsection 6.1 that for the trap parameters used in the experiment of Lu *et al.* the anisotropy in the momentum distribution is too large for dipolar effects to influence the expansion dynamics (figure 6.1). Additionally, we show that the expansion dynamics leads to the emergence of a structured density distribution (figure 6.2), and we investigate the validity of the Thomas-Fermi approximation (figures 6.5 and 6.6). In section 6.2 we investigate the occurrence and visibility of structured ground states along the border of stability. Here we rotate the harmonic trap until the dipole-dipole interaction induces an instability and the imaginary-time evolution does not converge anymore. By adding a Gaussian potential to the harmonic trap, we realize a toroidal confinement and study a self-induced Josephson contact. This is the subject of section 6.3, where we once more investigate borders of stability with respect to the number of particles (figure 6.12) and the rotation of the external confinement (figure 6.14). Additionally we examine Josephson oscillations and running phase modes with special emphasis on the time scale of the dynamics with respect to the trap frequencies.

A. CUDA

Die Verwendung der CUDA-Architektur (*Compute Unified Device Architecture*) von NVIDIA ermöglicht die Verwendung einer hoch-parallelierten Computer Hardware zur Lösung wissenschaftlicher Fragestellungen. Parallele Rechenarchitekturen ermöglichen einen Zuwachs an Rechengeschwindigkeit, ohne die Taktrate einzelner Kerne erhöhen zu müssen. So wird in der Praxis unter anderem bei Bildgebungsverfahren in der Medizin oder Berechnungen zur Fluid Dynamik die CUDA-Technologie verwendet [70]. Im hier vorliegenden Fall ermöglicht erst die Verwendung der CUDA-Architektur die systematische Untersuchung von Solitonenkollisionen oder die Berechnung von Phasendiagrammen. So benötigt beispielsweise die dynamische Solitonenerzeugung in [27] mit einer Auflösung von $512 \times 128 \times 512$ Gitterpunkten auf einer CPU mit 8 Kernen eine Rechenzeit von 6 Wochen.

Für den wissenschaftlichen Gebrauch ist die CUDA-Architektur besonders geeignet, da die hierfür von NVIDIA zur Verfügung gestellte Programmiersprache *CUDA C* den häufig verwendeten Sprachen *C* oder *C++* sehr ähnlich ist. Hierdurch vermeidet man die Verwendung von Programmierschnittstellen wie OpenGL oder DirectX, welche speziell für graphische Anwendungen gedacht sind und die Implementierung von nicht-graphischen Applikationen unnötig verkomplizieren. Im Gegensatz zu früheren Generationen von GPUs (*graphics processing units*), welche als Recheneinheiten Pixel- und Vertex-Shader verwendet haben, basiert die CUDA-Architektur auf dem Konzept der *Unified Shader*. Hierdurch wird eine universelle Einsetzbarkeit der Hardware garantiert, da jede Recheneinheit allgemeine Berechnungen durchführen kann.

Im Folgenden soll ein kurzer Überblick über die für diese Arbeit relevanten Aspekte von *CUDA C* gegeben werden. Für eine vertiefende Behandlung sei an dieser Stelle auf [70, 71] verwiesen.

A.1. Parallele Programmierung mit CUDA C

Wird ein Algorithmus mittels *CUDA C* implementiert, so ist im Allgemeinen zwischen dem Teil des Codes, welcher auf dem *Host* (der CPU des Rechners), und jenem, welcher auf dem *Device* (GPU der Grafikkarte) ausgeführt wird zu unterscheiden. Eine Funktion, welche auf dem Device ausgeführt wird, bezeichnet man als *Kernel*. Ein Kernel kann mehrfach parallelisiert ausgeführt werden, hat jedoch nicht die Möglichkeit, eine Funktion auf dem Host aufzurufen. Die Parallelisierung findet auf zwei Ebenen statt. Die obere Ebene besteht aus dem *Grid*, welches mehrere *Blocks* beinhaltet. In der Ebene darunter

befindet sich ein einzelner Block, welcher aus einer Vielzahl an *Threads* besteht. Die einzelnen Funktionsinstanzen werden von jeweils einem Thread abgearbeitet. Da ein Block auf jeweils einem Multiprozessor bearbeitet wird, ermöglicht dies eine Synchronisation oder den Zugriff auf einen gemeinsamen Speicherbereich aller Threads eines Blocks.

In *CUDA C* muss für jede Variable angegeben werden, in welchem Speicherbereich Platz reserviert werden soll. Dies erreicht man, indem bei der Variablendeklaration zusätzlich ein `__global__`, `__device__`, `__constant__` oder `__shared__` hinzugefügt wird. Das Attribut `__global__` ist für Funktionen gedacht, welche auf dem Device ausgeführt werden sollen. Selbiges gilt für `__device__`, wobei hier zu beachten ist, dass Funktionen mit dieser Deklaration nur als Unterfunktionen eines Kernels ausführbar sind. Ist in der Deklaration ein `__constant__` enthalten, so wird auf den Konstantenspeicher zugegriffen, wohingegen `__shared__` Zugriff auf den Speicherbereich ermöglicht, welcher von allen Threads eines Blocks geteilt werden. Verzichtet man auf diese Angaben, so wird die entsprechende Variable als Hostvariable deklariert.

Es ist zu beachten, dass Kernelfunktionen nur eine eingeschränkte Funktionalität beinhalten. So gibt es Anwendungen, welche gar nicht oder nur auf neueren Grafikkarten ausgeführt werden können. Beispielsweise ist die rekursive Programmierung, bei welcher sich eine Prozedur oder Funktion selbst aufruft oder auch eine Operation mit Gleitkommazahlen in doppelter Genauigkeit (*double-precision floating-point operations*) erst für Grafikkarten mit der sogenannten *compute capability* ≥ 1.3 enthalten.

Um einen Kernel aufzurufen, bedient man sich der folgenden Syntax:

- `Kernelname<<<Gridgröße, Blockgröße>>>(Argument 1, ...);`

Die Blockgröße ist dadurch beschränkt, dass pro Block nur 1024 Threads erlaubt sind. In *CUDA C* können analog zu den Funktionen `malloc` und `free` aus *C* zur dynamischen Anforderung von Speicherplatz die folgenden Funktionen verwendet werden:

- `cudaError_t cudaMalloc(void** pointer, size_t size)`
Diese Funktion reserviert im globalen Speicher der Grafikkarte einen Bereich der angeforderten Größe. Der Verweis auf diesen Bereich erfolgt über einen Zeiger `pointer`.
- `cudaError_t cudaFree(void* pointer)`
Diese Funktion gibt den reservierten Speicher wieder frei.

Der folgende Befehl dient zum Kopieren des Speicherinhalts:

- `cudaError_t cudaMemcpy(void* dst, const void* src, size_t count, enum cudaMemcpyKind kind)`
Kopiert den Speicherort von der Quelle an den Zielort, wobei `cudaMemcpyHostToDevice` vom RAM auf die Grafikkarte und `cudaMemcpyDeviceToHost` von der Grafikkarte auf den RAM kopiert.

Für die eindeutige Indizierung eines einzelnen Threads wird ein Befehl der folgenden Form verwendet:

- `int tid = threadIdx.x + blockIdx.x * blockDim.x;`

Die Variablen `threadIdx` und `blockIdx` entsprechen dem Wert des Thread- bzw. Blockindex, während `blockDim` die Anzahl an Threads entlang einer Dimension eines Blocks angibt. Die Definition dieser Variablen wird von *CUDA* selbst übernommen, wobei die Endung `.x` notwendig ist, da *CUDA C* die Definition einer Gruppe von Grids, Blocks oder Threads in zwei Dimensionen gestattet. Formal entspricht diese Indizierung einer Konvertierung eines zweidimensionalen in einen eindimensionalen Index, also beispielsweise der aus *C* wohlbekannten Indizierung $i + j * N$, wobei i und j Indizes sowie N eine Dimension darstellen.

Ein einfaches Beispiel für die praktische Anwendung soll der folgende Algorithmus geben, welcher zuerst die Gitterpunkte auf dem Host setzt und anschließend das externe harmonische Potential parallel auf dem Device berechnet:

```
#include <stdio.h>

void __global__ Potential(int N_x, int N_y, int N_z, double *V_gpu, double
*X_gpu, double *Y_gpu, double *Z_gpu, double omega_x, double omega_y,
double omega_z);

main()
{

int    i, j, k,
        N_x, N_y, N_z, // number of gridpoints
        grid_size, block_size; // grid and block size
double *V_cpu, *V_gpu, // potential
        *X_cpu, *X_gpu, *Y_cpu, *Y_gpu, *Z_cpu, *Z_gpu, // grid co-ordinates
        omega_x, omega_y, omega_z, // trap frequencies
        L_x, L_y, L_z, // edge length
        step_size_x, step_size_y, step_size_z; // step size

// set parameters
N_x = N_y = N_z = 128;
```

A. CUDA

```
L_x = L_y = L_z = 1.0;
omega_x = omega_y = omega_z = 50.0;
step_size_x = L_x/N_x;
step_size_y = L_y/N_y;
step_size_z = L_z/N_z;
grid_size = (N_x*N_y*N_z)/1024;
block_size = 1024;

// allocate memory on host
cudaMallocHost((void*)&V_cpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double));
cudaMallocHost((void*)&X_cpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double));
cudaMallocHost((void*)&Y_cpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double));
cudaMallocHost((void*)&Z_cpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double));

// allocate memory on device
cudaMalloc((void*)&V_gpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double));
cudaMalloc((void*)&X_gpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double));
cudaMalloc((void*)&Y_gpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double));
cudaMalloc((void*)&Z_gpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double));

// set grid points on host
for(i=0; i<N_x; i++)
{
    for(j=0; j<N_y; j++)
    {
        for(k=0; k<N_z; k++)
        {
            X_cpu[i*N_y*N_z + j*N_z + k] = -L_x/2.0 + i*step_size_x;
            Y_cpu[i*N_y*N_z + j*N_z + k] = -L_y/2.0 + j*step_size_y;
            Z_cpu[i*N_y*N_z + j*N_z + k] = -L_z/2.0 + k*step_size_z;
        }
    }
}

// copy memory (grid points) from host to device
cudaMemcpy(X_gpu, X_cpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double),
cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(Y_gpu, Y_cpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double),
```

```
cudaMemcpyHostToDevice);
cudaMemcpy(Z_gpu, Z_cpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double),
cudaMemcpyHostToDevice);

// call kernel to calculate potential on device
Potential<<<grid_size, block_size>>> (N_x, N_y, N_z, V_gpu, X_gpu, Y_gpu,
Z_gpu, omega_x, omega_y, omega_z);

// copy memory (potential) from device to host
cudaMemcpy(V_cpu, V_gpu, N_x*N_y*N_z*sizeof(double), cudaMemcpyDeviceToHost);

// free memory on device
cudaFree(X_gpu);
cudaFree(Y_gpu);
cudaFree(Z_gpu);
cudaFree(V_gpu);

// free memory on host
cudaFreeHost(X_cpu);
cudaFreeHost(Y_cpu);
cudaFreeHost(Z_cpu);
cudaFreeHost(V_cpu);

}

void __global__ Potential (N_x, N_y, N_z, double *V_gpu, double *X_gpu, dou-
ble *Y_gpu, double *Z_gpu, double omega_x, double omega_y, double omega_z)
{

    int tid = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;

    if (tid < N_x*N_y*N_z)
    {
        V_gpu[tid] = 0.5 * ( pow(omega_x * X_gpu[tid],2) +
        pow(omega_y * Y_gpu[tid],2) + pow(omega_z * Z_gpu[tid],2) );
    }
}
```

}

A.2. Fourier-Transformationen mit CUDA

NVIDIA stellt für CUDA eine Reihe von Bibliotheken bereit, wobei für diese Arbeit die cuFFT für Fourier-Transformationen von außerordentlicher Bedeutung ist. Es handelt sich hierbei um eine CUDA-Implementierung der FFTW¹ (*Fastest Fourier Transform in the West*). Um eine Fourier-Transformation aufrufen zu können, muss zuerst ein Plan erstellt werden, welcher alle Daten beinhaltet, die für eine Transformation gewisser Dimension, Größe und eines gewissen Typs notwendig sind. Der Plan für eine dreidimensionale Transformation beispielsweise kann über den folgenden Ausdruck erstellt werden:

- `cufftPlan3d(cufftHandle *plan, int sizeX, int sizeY, int sizeZ, cufftType type);`

Soll eine Transformation einer komplexen Funktion in doppelter Genauigkeit zu einer ebenfalls komplexen Funktion in doppelter Genauigkeit durchgeführt werden, so ist der anzugebende Typ `CUFFT_Z2Z`. Eine Auflistung der restlichen Typen findet sich in [72]. Ein Aufruf einer Fourier-Transformation erfolgt über den folgenden Befehl:

- `cufftExecZ2Z(cufftHandle plan, cufftDoubleComplex *idata, cufftDoubleComplex *odata, int direction);`

Die Variable `direction` gibt an, ob eine Fourier- oder eine inverse Fourier-Transformation ausgeführt werden soll. Die hierfür möglichen Werte sind `CUFFT_FORWARD` und `CUFFT_INVERSE`.

A.3. Parallelisierte Addition mit CUDA

Für eine hohe Rechenleistung ist eine Parallelisierung der Addition mit CUDA zwingend erforderlich. Der für diese Arbeit verwendete Algorithmus verwendet die in [73] präsentierte Methode. Hierbei wird zunächst der Inhalt aus dem globalen Speicher in den gemeinsamen Speicher der Threads eines Blocks geladen. In jedem Block werden anschließend die Werte durch die Threads aufaddiert. Hierbei addiert jeweils ein Thread pro Schleifendurchlauf zwei Werte, bis letztlich pro Block ein Wert verbleibt. Dieser Wert wird nun aus dem gemeinsamen Speicher wieder in den globalen Speicher kopiert, wonach dieselbe Prozedur nochmals durchgeführt werden kann, bis letztlich alle Werte aufaddiert sind.

¹siehe www.fftw.org


```
__global__ void reduce1(int *g_idata, int *g_odata) {
extern __shared__ int sdata [];

// each thread loads one element from global to shared mem
unsigned int tid = threadIdx.x;
unsigned int i = blockIdx.x * blockDim.x + threadIdx.x;
sdata[tid] = g_idata[i];
__syncthreads();

// do reduction in shared mem
for (unsigned int s = 1; s < blockDim.x ; s *= 2) {
    int index = 2 * s * tid;
    (index < blockDim.x) {
        sdata[index] += sdata[index + s];
    }
    __syncthreads();
}

// write result for this block to global mem
if (tid == 0) g_odata[blockIdx.x] = sdata[0];
}
```

In [73] werden neben der hier verwendeten Methode noch schnellere Möglichkeiten zur parallelisierten Addition präsentiert, jedoch ist der hierdurch gewonnene Geschwindigkeitszuwachs für den in dieser Arbeit verwendeten Algorithmus nicht weiter ausschlaggebend.

Literaturverzeichnis

- [1] P. J. Mohr, B. N. Taylor und D. B. Newell. CODATA recommended values of the fundamental physical constants: 2010. *Rev. Mod. Phys.* 84, 1527 (2012).
- [2] S. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Z. Phys.* 26, 178 (1924).
- [3] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.* Seite 261 (1924).
- [4] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. Zweite Abhandlung. *Sitzber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.* Seite 3 (1925).
- [5] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science* 269, 198 (1995).
- [6] K. B. Davies, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969 (1995).
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper und J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. *Phys. Rev.* 108, 1175 (1957).
- [8] L. D. Landau. The theory of superfluidity of Helium II. *J. Phys. USSR* 54, 71 (1941).
- [9] I. Bloch, J. Dalibard und W. Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.* 80, 885–964 (2008).
- [10] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hansch und I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature* 415, 39–44 (2002). 10.1038/415039a.
- [11] B. Paredes, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T. W. Hansch und I. Bloch. Tonks–Girardeau gas of ultracold atoms in an optical lattice. *Nature* 429, 277–281 (2004).
- [12] A. Griesmaier, J. Werner, S. Hensler, J. Stuhler und T. Pfau. Bose-Einstein Condensation of Chromium. *Phys. Rev. Lett.* 94, 160401 (2005).

- [13] Q. Beaufils, R. Chicireanu, T. Zanon, B. Laburthe-Tolra, E. Maréchal, L. Vernac, J.-C. Keller und O. Gorceix. All-optical production of chromium Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 77, 061601 (2008).
- [14] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein und T. Pfau. The physics of dipolar bosonic quantum gases. *Rep. Progr. Phys.* 72, 126401 (2009).
- [15] M. Lu, S. H. Youn und B. L. Lev. Trapping Ultracold Dysprosium: A Highly Magnetic Gas for Dipolar Physics. *Phys. Rev. Lett.* 104, 063001 (2010).
- [16] M. Lu, N. Q. Burdick, S. H. Youn und B. L. Lev. Strongly Dipolar Bose-Einstein Condensate of Dysprosium. *Phys. Rev. Lett.* 107, 190401 (2011).
- [17] K. Aikawa, A. Frisch, M. Mark, S. Baier, A. Rietzler, R. Grimm und F. Ferlaino. Bose-Einstein Condensation of Erbium. *Phys. Rev. Lett.* 108, 210401 (2012).
- [18] K.-K. Ni, S. Ospelkaus, M. H. G. de Miranda, A. Pe'er, B. Neyenhuis, J. J. Zirbel, S. Kotochigova, P. S. Julienne, D. S. Jin und J. Ye. A High Phase-Space-Density Gas of Polar Molecules. *Science* 322, 231–235 (2008).
- [19] M. A. Baranov, M. Dalmonte, G. Pupillo und P. Zoller. Condensed Matter Theory of Dipolar Quantum Gases. *Chemical Reviews* 112, 5012–5061 (2012). PMID: 22877362.
- [20] S. Giorgini, J. Boronat und J. Casulleras. Ground state of a homogeneous Bose gas: A diffusion Monte Carlo calculation. *Phys. Rev. A* 60, 5129 (1999).
- [21] P. Grüter, D. Ceperley und F. Laloë. Critical Temperature of Bose-Einstein Condensation of Hard-Sphere Gases. *Phys. Rev. Lett.* 79, 3549 (1997).
- [22] W. Krauth. Quantum Monte Carlo Calculations for a Large Number of Bosons in a Harmonic Trap. *Phys. Rev. Lett.* 77, 3695 (1996).
- [23] D. Jaksch, C. Bruder, J. I Cirac, C. W. Gardiner und P. Zoller. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 81, 3108 (1998).
- [24] R. Fortanier. *Variational approaches to dipolar Bose-Einstein condensates*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2014).
- [25] R. Fortanier, D. Zajec, J. Main und G. Wunner. Dipolar Bose-Einstein condensates in triple-well potentials. *J. Phys. B* 46, 235301 (2013).
- [26] R. Eichler, D. Zajec, P. Köberle, J. Main und G. Wunner. Collisions of anisotropic two-dimensional bright solitons in dipolar Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 86, 053611 (2012).

- [27] P. Köberle. *Ground-state structures and dynamics of dipolar Bose-Einstein condensates in single and multi-layered traps*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2011).
- [28] P. Köberle, D. Zajec, G. Wunner und B. A. Malomed. Creating two-dimensional bright solitons in dipolar Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 85, 023630 (2012).
- [29] D. Peter, K. Pawłowski, T. Pfau und K. Rzażewski. Mean-field description of dipolar bosons in triple-well potentials. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 45, 225302 (2012).
- [30] K. Góral, L. Santos und M. Lewenstein. Quantum Phases of Dipolar Bosons in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 88, 170406 (2002).
- [31] B. Xiong, J. Gong, H. Pu, W. Bao und B. Li. Symmetry breaking and self-trapping of a dipolar Bose-Einstein condensate in a double-well potential. *Phys. Rev. A* 79, 013626 (2009).
- [32] M. Asad-uz Zaman und D. Blume. Aligned dipolar Bose-Einstein condensate in a double-well potential: From cigar shaped to pancake shaped .
- [33] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne und E. Tiesinga. Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.* 82, 1225–1286 (2010).
- [34] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn und W. Ketterle. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. *Nature* 392, 151–154 (1998). 10.1038/32354.
- [35] Damir Zajec und Günter Wunner. Mean-field predictions for a dipolar Bose-Einstein condensate with ^{164}Dy . *Phys. Rev. A* 92, 053609 (2015).
- [36] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 6: Statistische Physik*. Springer (2007).
- [37] W. Ketterle und N. J. van Druten. Bose-Einstein condensation of a finite number of particles trapped in one or three dimensions. *Phys. Rev. A* 54, 656 (1996).
- [38] J. F. Annett. *Supraleitung, Suprafluidität und Kondensate*. Oldenbourg (2011).
- [39] O. Penrose und L. Onsager. Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium. *Phys. Rev.* 104, 576–584 (1956).
- [40] A. J. Moerdijk, B. J. Verhaar und A. Axelsson. Resonances in ultracold collisions of ^6Li , ^7Li , and ^{23}Na . *Phys. Rev. A* 51, 4852–4861 (1995).
- [41] J. Werner, A. Griesmaier, S. Hensler, J. Stuhler und T. Pfau. Observation of Feshbach Resonances in an Ultracold Gas of ^{52}Cr . *Phys. Rev. Lett.* 94, 183201 (2005).

- [42] D. C. E. Bortolotti, S. Ronen, J. L. Bohn und D. Blume. Scattering Length Instability in Dipolar Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 97, 160402 (2006).
- [43] S. Yi und L. You. Trapped atomic condensates with anisotropic interactions. *Phys. Rev. A* 61, 041604(R) (2000).
- [44] K. Góral und L. Santos. Ground state and elementary excitations of single and binary Bose-Einstein condensates of trapped dipolar gases. *Phys. Rev. A* 66, 023613 (2002).
- [45] D. H. J. O'Dell, S. Giovanazzi und C. Eberlein. Exact Hydrodynamics of a Trapped Dipolar Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* 92, 250401 (2004).
- [46] C. Eberlein, S. Giovanazzi und D. H. J. O'Dell. Exact solution of the Thomas-Fermi equation for a trapped Bose-Einstein condensate with dipole-dipole interactions. *Phys. Rev. A* 71, 033618 (2005).
- [47] S. Giovanazzi, P. Pedri, L. Santos, A. Griesmaier, M. Fattori, T. Koch, J. Stuhler und T. Pfau. Expansion dynamics of a dipolar Bose-Einstein condensate. *Phys. Rev. A* 74, 013621 (2006).
- [48] J. Metz. *Collapse of dipolar Bose-Einstein condensates for different trap geometries*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2010).
- [49] M. D. Feit, J. A. Fleck Jr. und A. Steiger. Solution of the Schrödinger equation by a spectral method. *J. Comp. Phys.* 47, 412 (1982).
- [50] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen und C. Yang. *ARPACK Users' Guide*. Siam (1998).
- [51] G. I. Stegeman und M. Segev. Optical Spatial Solitons and Their Interactions: Universality and Diversity. *Science* 286, 1518 (1999).
- [52] V. E. Zakharov und A. B. Shabat. Interaction between solitons in a stable medium. *JETP* 37, 1627 (1972).
- [53] K. E. Strecker, G. B. Partridge, A. G. Truscott und R. G. Hulet. Formation and propagation of matter-wave soliton trains. *Nature* 417, 150–153 (2002). 10.1038/nature747.
- [54] L. Khaykovich, F. Schreck, G. Ferrari, T. Bourdel, J. Cubizolles, L. D. Carr, Y. Castin und C. Salomon. Formation of a Matter-Wave Bright Soliton. *Science* 296, 1290–1293 (2002).
- [55] I. Tikhonenkov, B. A. Malomed und A. Vardi. Anisotropic Solitons in Dipolar Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 100, 090406 (2008).

-
- [56] R. Eichler, J. Main und G. Wunner. Variational calculations for anisotropic solitons in dipolar Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 83, 053604 (2011).
- [57] P. Pedri und L. Santos. Two-Dimensional Bright Solitons in Dipolar Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 95, 200404 (2005).
- [58] S. K. Adhikari und P. Muruganandam. Two-dimensional dipolar Bose-Einstein condensate bright and vortex solitons on a one-dimensional optical lattice. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 45, 045301 (2012).
- [59] S. Giovanazzi, A. Görlitz und T. Pfau. Tuning the Dipolar Interaction in Quantum Gases. *Phys. Rev. Lett.* 89, 130401 (2002).
- [60] T. Lahaye, J. Metz, B. Fröhlich, T. Koch, M. Meister, A. Griesmaier, T. Pfau, H. Saito, Y. Kawaguchi und M. Ueda. d -Wave Collapse and Explosion of a Dipolar Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* 101, 080401 (2008).
- [61] C. Menotti, C. Trefzger und M. Lewenstein. Metastable States of a Gas of Dipolar Bosons in a 2D Optical Lattice. *Phys. Rev. Lett.* 98, 235301 (2007).
- [62] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni und S. R. Shenoy. Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates: Josephson effects, π oscillations, and macroscopic quantum self-trapping. *Phys. Rev. A* 59, 620–633 (1999).
- [63] T. Lahaye, T. Pfau und L. Santos. Mesoscopic Ensembles of Polar Bosons in Triple-Well Potentials. *Phys. Rev. Lett.* 104, 170404 (2010).
- [64] A. X. Zhang und J. K. Xue. Dipolar-induced interplay between inter-level physics and macroscopic phase transitions in triple-well potentials. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 45, 145305 (2012).
- [65] T. Pfau, H. Kadau, T. Maier und M. Schmitt. Private Mitteilung (2013).
- [66] L. Santos, G. V. Shlyapnikov und M. Lewenstein. Roton-Maxon Spectrum and Stability of Trapped Dipolar Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 90, 250403 (2003).
- [67] M. Abad, M. Guilleumas, R. Mayol, M. Pi und D. M. Jezek. A dipolar self-induced bosonic Josephson junction. *EPL* 94, 10004 (2011).
- [68] M. Melé-Messeguer, B. Juliá-Díaz, M. Guilleumas, A. Polls und A. Sanpera. Weakly linked binary mixtures of $F = 1$ ^{87}Rb Bose-Einstein condensates. *New. J. Phys.* 13, 033012 (2011).
- [69] M. Abad, M. Guilleumas, R. Mayol, M. Pi und D. M. Jezek. Phase slippage and self-trapping in a self-induced bosonic Josephson junction. *Phys. Rev. A* 84, 035601 (2011).

- [70] J. Sanders und E. Kandrot. *CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming*. Addison Wesley (2011).
- [71] *NVIDIA CUDA C Programming Guide* (2011).
- [72] *cuFFT: CUDA Toolkit Documentation* . <http://docs.nvidia.com/cuda/cufft/#axzz3JcVMGY2U>.
- [73] M. Harris. *Optimizing Parallel Reduction in CUDA*. <http://developer.download.nvidia.com/assets/cuda/files/reduction.pdf>.

geboren am 24.03.1986 in Stuttgart

Schulbildung

1993–1996 **Grundschule.**
1996–2005 **Gymnasium.**

Studium

2005–2011 **Studium der Physik an der Universität Stuttgart.**
2007 **Diplomvorprüfung.**
April 2010 - April 2011 **Diplomarbeit, Selbstkonsistente Berechnungen von gebunden-frei Übergängen bei leichten bis mittelschweren Mehrelektronenatomen in superstarken Magnetfeldern**, 1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart, unter Betreuung von Prof. Dr. Günter Wunner.
21. April 2011 **Diplom in Physik.**

Wissenschaftliche Tätigkeiten

Jun. 2011 - Dez. 2011 **Wissenschaftliche Hilfskraft**, 1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart.
Dez. 2011 - 2015 **Wissenschaftlicher Mitarbeiter**, 1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart.
Jun. 2011 - 2015 **Promotion, Stationäre und dynamische Eigenschaften von dipolaren Bose-Einstein-Kondensaten in verschiedenen externen Potentialen**, 1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart, unter Betreuung von Prof. Dr. Günter Wunner.

Vorträge

März 2011 **DPG-Tagung, Hartree-Fock calculations of the photoionization of lights to medium atoms and ions in neutron star magnetic fields**, Dresden, Poster.
März 2012 **DPG-Tagung, Collision of two-dimensional anisotropic solitons**, Stuttgart, Poster.
März 2013 **DPG-Tagung, Ground states of dipolar Bose-Einstein condensates in triple-well potentials**, Hannover, Vortrag.
DPG-Tagung, Variational investigation of dipolar BEC in multi-well potentials, Hannover, Vortrag.
März 2014 **DPG-Tagung, Basic properties of a dipolar Bose-Einstein condensate with dysprosium**, Berlin, Poster.

Veröffentlichungen

- [1] P. Köberle, D. Zajec, G. Wunner und B. A. Malomed, Creating two-dimensional bright solitons in dipolar Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 85, 023630 (2012).
- [2] R. Eichler, D. Zajec, P. Köberle, J. Main und G. Wunner, Collisions of anisotropic two-dimensional bright solitons in dipolar Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 86, 053611 (2012).
- [3] R. Fortanier, D. Zajec, J. Main und G. Wunner, Dipolar Bose-Einstein condensates in triple-well potentials. *J. Phys. B* 46, 235301 (2013).
- [4] D. Zajec und G. Wunner, Mean-field predictions for a dipolar Bose-Einstein condensate with ^{164}Dy . *Phys. Rev. A* 92, 053609 (2015).

Danksagung

Diese Arbeit wäre ohne die tatkräftige Unterstützung und Hilfe zahlreicher Kollegen aus dem ITP1 nicht möglich gewesen. An dieser Stelle gilt mein Dank insbesondere Prof. Dr. Günter Wunner für die Aufnahme an das Institut und die kompetente Betreuung während der vergangenen Jahre sowie Prof. Dr. Christian Holm für die freundliche Übernahme des Mitberichts. Zudem möchte ich mich für die enge Kooperation und die vielen Diskussionen bei Patrick Köberle, Rüdiger Fortanier, Prof. Dr. Jörg Main und den Kollegen vom PI5 Holger Kadau, Thomas Maier, Matthias Schmitt und Prof. Dr. Tilman Pfau bedanken.

Nachdem keine Arbeit ohne die akribische Korrektur durch kritische Kollegen auskommen kann, seien an dieser Stelle die Bemühungen von Thorsten Kersting, Manuel Kreibich und Holger Cartarius erwähnt, welche sich durch die ersten Versionen der Dissertation gelesen haben. Auch möchte ich mich an dieser Stelle bei Tina Mathea für das scharfsinnige Auffinden eines bis dato übersehenen Tippfehlers bedanken.

Zudem möchte ich die Arbeit der IT-Administratoren Christoph Schimeczek, Robin Gutöhrlein und Holger Cartarius lobend erwähnen, welche mir bei jeglichen Problemen immerzu hilfreich und kompetent zur Seite standen.

Weiter möchte ich mich bei allen Mitarbeitern des Instituts für die stets geistreichen und humorvollen Kaffee- und Kuchenrunden bedanken, und insbesondere auch bei meinem Zimmerkollegen Thorsten Kersting für die angenehme Arbeitsatmosphäre und die konstruktive Zusammenarbeit.

Zuletzt möchte ich mich bei meiner Familie und meinen Freunden für all die Unterstützung die ich während des Studiums erhalten habe bedanken.

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre, dass ich diese Dissertation, abgesehen von den ausdrücklich bezeichneten Hilfsmitteln, selbständig verfasst habe.

Stuttgart, den 10. August 2015

Damir Zajec