

## Institut für Angewandte Physik der Universität Bonn

Wegelerstr. 8 53115 Bonn

# Dynamik neutraler Atome in der magnetischen Quadrupolfalle

von Stefan aus der Wiesche

## Diplomarbeit in Physik

angefertigt im Institut für Angewandte Physik der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn im März 1996

> Referent: Prof. Dr. D. Meschede Korreferent: Prof. Dr. F. von Busch

# Dynamik neutraler Atome in der magnetischen Quadrupolfalle

von

Stefan aus der Wiesche

Diplomarbeit in Physik angefertigt im

Institut für Angewandte Physik

vorgelegt der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität

Bonn

im März 1996

## Zusammenfassung

Es wird die Dynamik neutraler Atome in der magnetischen Quadrupolfalle untersucht. Nach einer Diskussion der adiabatischen Näherung wird ein effektiv zweidimensionales HAMILTONSches System als klassisches nichtlineares Modell im Hinblick auf die Regularität der Trajektorien einzelner gefangener Atome untersucht. Es zeigt sich, daß für niedrige Energien ein integrabler Ausdruck der Bewegungsformen herleitbar wird, der als Ansatzpunkt für eine störungstheoretische Abschätzung verwendet werden kann. Die gefundenen analytischen Ergebnisse werden mit umfangreichen numerischen Rechnungen verglichen, die von der Methode der POINCAREschnitte Gebrauch machen. Eine Quantisierung der klassischen integrablen Dynamik gestattet näherungsweise eine Bestimmung der zu erwartenden Energieniveaus für ultrakalte Ensembles sowie die Herleitung der kanonischen Verteilungsfunktionen.

Im Hinblick auf vorhergehende wie auch auf geplante Experimente der Arbeitsgruppe kann der Einfluß nichtadiabatischer Übergänge als ein die Speicherzeit limitierender Faktor diskutiert werden. Desweiteren wird auf mögliche Kühlmechanismen eingegangen. Wir fühlen, daß, selbst wenn alle *möglichen* wissenschaftlichen Fragen beantwortet sind, unsere Lebensprobleme noch gar nicht berührt sind. Freilich bleibt dann eben keine Frage mehr; und eben dies ist die Antwort.

Ludwig Wittgenstein; Tractatus, 6.52

## Inhaltsverzeichnis

Einleitung		Seite	1
Vanital	1 1 Dia magnetaantische Falle		3
Kapiter	Die Funktionsusion der magnetoontigehen Falle		2
1.1.	Die Funktionsweise der magnetooptischen Falle		3
1.2.	Magnetooptische Eigenschaften des Caesiumatoms		4
1.3.	Zum Betrieb der magnetooptischen Falle		C
Kapitel	1 2 Dynamische Grundgleichungen der magnetischen Falle		6
2.1.	Bewegungsgleichungen in der Quadrupolfalle		7
2.2.	Nichtadiabatische Übergänge		8
Kapitel	1 3 Dynamik in der Quadrupolfalle		12
3.1.	Hamiltonsche Bewegungsgleichungen		12
3.2.	Reguläre und stochastische Bewegung		14
3.3.	Normalkoordinaten		17
3.4.	Klassifikation der Bewegung		22
Kapitel	4 Numerische Resultate		25
4.1.	Abstand der Trajektorien vom Ursprung		25
4.2.	Aufbruch ins Chaos		31
4.	.2.1. Das vollständig integrable System		31
4.	.2.2. Resonanzen		32
4.	.2.3. Globales Chaos		38
4.	.2.4. Vernachlässigung der Gravitation		41
4.3.	Frequenzverhältnisse und Stabilität		44
4.	.3.1. Kanonische Störungsrechnung		44
4.	.3.2. Kommensurabilität und Stabilität		47
4.4.	Verteilungsfunktionen		50

Kapitel	5 Quantenmechanische Behandlung	Seite	52
5.1.	Stationäre Schrödingergleichung		52
5.2.	Diskussion der harmonischen Näherung		54
5.3.	Quantenstatistik und Thermodynamik		56
Kapitel	6 Kühlmechanismen und Speicherzeiten		61
6.1.	Evaporatives Kühlen		61
6.2.	Thermodynamische Nichtgleichgewichtszustände		63
6.3.	Nichtadiabatische Übergänge		63
6.4.	Ausblick		65
Anhang			66
A.1.	Übergangswahrscheinlichkeiten nach Majorana		66
A.2.	Kanonische Verteilungsfunktion für den Drehimpuls		66
Literatu	rverzeichnis		68
Danksag	Danksagung		

->

## Einleitung

Bezeichnenderweise stellt FEYNMAN in seinem originellen Lehrbuch der Physik die Vorstellung vom Aufbau der Materie aus chemisch unteilbaren Atomen als *das* Paradigma des modernen naturwissenschaftlichen Weltbildes dar [FEYNMAN 63]. Im Anschluß an KUHN [KUHN62] wird in diesem Zusammenhang deutlich, daß diese nicht zuletzt durch populäre Magazine und Zeitungen weitverbreitete These keineswegs selbstverständlich ist und eine übergreifende kulturhistorische Dimension besitzt, die schwerlich zu überschätzen ist.

1

Der Triumph wie auch das Scheitern der naiven Anschauung wird in Experimenten an räumlich eng lokalisierten einzelnen Atomen in faszinierender Weise deutlich: zum einen drängt sich das Modell vom Atom als klassischer Punktmasse auf, die vom Experimentator manipuliert wird, zum anderen können mit einzelnen Atomen auch nichtklassische Effekte demonstriert werden, die nur im Rahmen einer vollständig quantenmechanischen Theorie zu verstehen sind. So lassen sich beispielsweise das Spektrum der Resonanzfluoreszenz eines einzelnen Atomes in einem quasimonochromatischen LASERlichtfeld oder die Wechselwirkung des Atomes mit seinem eigenen Strahlungsfeld in einem Resonator hoher Güte (sog. Ein-Atom-MASER) nur durch die Quantenelektrodynamik voll beschreiben [MESCHEDE 84]. Desweiteren gestattet die Spektroskopie von langsamen, räumlich gefangenen Atomen auch Auflösungen, die durch nahezu keine in konventionellen Experimenten auftretenden Verbreiterungsmechanismen der Linien limitiert werden, und unter anderem zur Definition von Frequenzstandards genutzt werden können [DEMARCHI 89].

Die technische Realisierung dieser Art von Experimenten ist allerding sehr schwierig und es werden höchste Anforderungen an die Apparaturen gestellt. Das Fangen von einzelnen Atomen in makroskopischen Fallen ist für geladene Teilchen aufgrund der relativ starken elektrischen Wechselwirkung zwar bedeutend einfacher als für neutrale Atome, doch verhindert dann die gegenseitige COULOMBabstoßung in der Falle vielfach das Erreichen einer hinreichenden Annäherung der Atome um spezifisch quantenmechanische Korrelationseffekte zu untersuchen [NEUHAUSER 78]. Für Atome mit einem nichtverschwindenden magnetischen Moment bietet es sich an, die Wechselwirkung mit einem äußeren inhomogenen Magnetfeld zu nutzen, doch weisen diese magnetischen Fallen im allgemeinen ein so "seichtes" Potential auf, daß nur sehr langsame Atome, deren kinetische Energien Temperaturen im Submillikelvin-Bereich entsprechen, gefangen werden können. Dies führte in der Vergangenheit dazu, daß nur die nicht ausfrierenden Elemente Wasserstoff und Helium durch Thermalisierung an kalten Wänden eine magnetische Speicherung gestatteten [SILVERA 80].

Erst die effektive Manipulierung von Atomen mit Licht stellte einen geeigneten dissipativen Mechanismus zur Verfügung, der die Möglichkeit bietet eine Vielzahl von weiteren interessanten Elementen zu fangen, insbesondere die Alkalimetalle, deren Termschemata im Hinblick auf die weiteren Experimente besonders attraktiv sind. Über den heutigen Stand der Fallentechnik und ihrer Anwendung informiert beispielsweise der Übersichtsartikel von METCALF und VAN DER STRAATEN [METCALF 94], oder es sei auf die dort angegebene Referenzliteratur verwiesen.

Aufallenderweise wurde in der Literatur bislang der klassischen Dynamik gefangener Atome und ihrer Trajektorien in Fallen nur wenig Beachtung geschenkt. Selbst in der einfachsten - rein magnetischen - Fallenkonfiguration handelt es sich schon um ein nichtlineares dynamisches Problem, dessen klassische Behandlung bereits eine Vielzahl von Eigenschaften aufdecken kann, die für Fragen der Speicherzeiten wie der Kühlung relevant sind. Von zentraler Bedeutung wird in diesem Zusammenhang die noch im stürmischen Aufbruch befindliche Theorie des deterministischen Chaos und der Stabilität von Trajektorien sein. Dieser ursprünglich für astronomische Zwecke im vergangenen Jahrhundert geschaffene Formalismus wurde bereits in den ersten Jahren der Quantenmechanik auch auf mikroskopische Objekte angewandt und, nachdem leistungsstarke Großrechner zur Verfügung standen, in nahezu allen Bereichen der Physik mit Erfolg genutzt. Es zeigte sich, daß wichtige Observable, oder die Stabilität von gebundenen Zuständen ganz wesentlich von den Nichtlinearitäten der dynamischen Gleichungen bestimmt werden und für sich selbst schon ein attraktives Forschungsgebiet darstellen.

Im Bereich der Neutralatomfallen kann diesbezüglich nahezu nur auf eher phänomenologisch orientierte Untersuchungen verwiesen werden. So zeigte BERGEMAN durch numerische Integration der Bewegungsgleichungen, daß schon ein einfaches Modell der magnetischen Quadrupolfalle in der adiabatischen Näherung bereits globales chaotisches Verhalten neben regulären Bahnen aufweisen kann [BERGEMAN 95]. ANTILLÓN et al. diskutierten ebenfalls auf einer numerischen Ebene die Stabilität der Trajektorien, ihr Frequenzspektrum sowie eine Dichteverteilung eines gespeicherten Ensembles und betonten dabei die Regularität der Dynamik [ANTILLÓN 92]. Für die IoFFEfalle lieferten SURKOV et al. analytische Resultate, die eine Diskussion im Hinblick auf Kühlmechanismen gestattet [SURKOV94]. Allen Autoren gemeinsam ist die Modellannahme einer zu vernachlässigenden Gravitation, die in der Praxis allerdings zu observablen Effekten führt.

Die Vorraussetzungen für eine Untersuchung von quantenmechanischen Korrelationseffekten im LAMB-DICKE-Regime sind tiefste Temperaturen und eine enge Lokalisierung der betrachteten Atome. Außerdem ist die Stabilität der Konfiguration über hinreichend lange Zeiträume für den Nachweis von entscheidender Bedeutung. Es kann vermutet werden, daß bereits ein klassisches Modell von wechselwirkungsfreien Atomen wesentliche Einblicke in die zugrundeliegende Dynamik gestattet, sowie Wege zu einer gezielten Manipulierung der Versuchsobjekte im Sinne der obigen Problematik aufzeigt.

5

## Kapitel 1

## Die magnetooptische Falle

Der von EINSTEIN 1917 vorhergesagte und von FRISCH 1933 experimentell bestätigte Einfluß von Photonen auf die Bewegung von Atomen [EINSTEIN 17] kann in einem äußeren Quadrupolmagnetfeld einen wirkungsvollen Fallenmechanismus bedeuten. Die Standardkonfiguration dieser sogenannten magnetooptischen Falle, die für viele Experimente mittlerweile zu einem unentbehrlichen Hilfsmittel geworden ist, wurde von DALIBARD vorgeschlagen und 1987 von RAAB erstmals demonstriert [RAAB 87]. In diesem Kapitel sollen nur die für das Verständnis der Arbeit wichtigsten Punkte kurz referiert werden und es sei auf ausführliche Darstellungen dieser Thematik beispielsweise in [HANSCH 75] verwiesen.

#### 1.1. Die Funktionsweise der magnetooptischen Falle

Die prinzipielle Funktionsweise einer magnetooptischen Falle kann in einem eindimensionalen Modell leicht erklärt werden. Man betrachte hierzu ein Atom mit dem Grundzustand  $|g;J=0\rangle$  und dem angeregten Zustand  $|a;J'=1\rangle$ , das sich in einem äußeren Quadrupolmagnetfeld bewege. Werden aufgrund der ZEEMANVerschiebung die atomaren Energieniveaus - wie in der Skizze angedeutet - verschoben und strahlt man antilinear entgegengesetzt zirkular polarisiertes Licht ein, dessen Frequenz gegenüber der atomaren Resonanz rotverstimmt ist, so entsteht aufgrund der unterschiedlichen Absorptionswahrscheinlichkeiten eine zum Ursprung des Magnetfeldes rücktreibende Kraft.



Abbildung 1: Eindimensionales Modell der magnetooptischen Falle (links) und dreidimensionale Standardkonfiguration in der Anti-Helmholtz-Anordnung.

Wie die Theorie zeigt [ASHKIN 70], kann für nicht zu große LASERintensitäten die Kraft auf das Atom als die Summe der beiden von den Strahlen erzeugten Kräften geschrieben werden und es ergibt sich die Bewegungsgleichung eines gedämpften harmonischen Oszillators

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\alpha \frac{dx}{dt} - \kappa x, \tag{1}$$

mit den Zusammenhängen

$$\alpha = -\frac{4\hbar k^2 \Delta}{\Gamma} \frac{s_o}{\left(1 + s_o + (2\Delta/\Gamma)^2\right)^2} , \qquad \kappa = \alpha \frac{\mu}{\hbar k} \frac{\partial B}{\partial x}, \qquad (2)$$

wobei  $s_o$  der Sättigungsparameter,  $\Gamma$  die Breite der atomaren Resonanz,  $\Delta$  die Verstimmung der LASERfrequenz zur atomaren Resonanz und  $\mu$  das effektive magnetische Moment ist.

Die unterste Grenze für die durch diesen Kühlmechanismus mögliche Temperatur  $T_{dopp}$  ergibt sich in der obigen DOPPLERtheorie aus der Beziehung [PHILLIPS 90]

$$k_B T_{dopp} = \frac{1}{2} \hbar \Gamma, \tag{3}$$

doch zeigt sich in Experimenten, daß die Temperaturen des gefangenen Ensembles weit unter dieser Grenze liegen können, was auf Polarisationseffekte der eingestrahlten Lichtfelder zurückzuführen ist [LETT 88, STEANE 91]. So berechnet sich für das im weiteren verwendete Element Caesium die DoppLertemperatur zu  $T_{dopp} = 125 \,\mu\text{K}$  und in vorhergehenden Experimenten der Arbeitsgruppe wurden Temperaturen unter 40  $\mu\text{K}$  gemessen [Höpe 93].

#### 1.2. Magnetooptische Eigenschaften des Caesiumatoms

Caesium als das schwerste Alkalimetall eignet sich nicht zuletzt aufgrund seiner relativ großen Masse von 133 au im besonderen Maße für Experimente in der magnetooptischen Falle, denn ein Laden ist bereits aus dem Hintergrundgas möglich [HAUBRICH 93]. Als Alkalimetall ist das Termschema des Caesiums, das nur ein stabiles Isotop <sup>133</sup>Cs besitzt, trotz des hohen Kernspins von I = 7/2 strukturell einfach und erlaubt einen effektiven Kühlkreislauf, der zudem in einem spektral auch von kostengünstigen Halbleiterdioden-LASERn

zugänglichen Bereich liegt. Nachteilig wirkt sich allerdings aus, daß Caesium als das unedelste aller Metalle im äußeren Umgang gewisse Schwierigkeiten aufwirft.

Das Termschema für den  $6^2S_{1/2}$ -Grundzustand und den beiden ersten angeregten Zuständen (rechts) läßt erkennen, daß sich die D<sub>2</sub>-Linie mit der Wellenlänge von 852,124 nm für kommerziell erhältliche LASERdioden hervoragend für magnetooptische Manipulationen eignet.

Der eigentliche Kühlkreislauf benützt den Übergang F = 4 nach F' = 5 und stellt aufgrund der Auswahlregeln prinzipiell ein geschlossenes Zwei-Niveau-System dar, jedoch ist in praxi eine resonante Anregung des F' = 4 Unterzustandes des



 $6^{2}P_{3/2}$ -Zustandes nicht auszuschließen und von diesem ist ein Zerfall in den für den Kühlkreislauf verlorenen Grundzustand mit der Gesamtdrehimpulszahl F = 3 möglich. Aus diesem Grunde wird im magnetooptischen Fallenbetrieb zu den Kühlstrahlen zusätzlich noch

ein Rückpump-LASER mit geringer Intensität eingestrahlt, der die Atome in den Kühlkreislauf zurückbefördert. Die Lebensdauer des oberen Zustandes beträgt rund 30 ns und die Sättigungsintensität für den Kühlübergang liegt bei 1,1 mW/cm<sup>2</sup>.

Das effektive magnetische Moment des Caesiums in einem äußeren Magnetfeld **B** läßt sich nach der BREIT-RABI-Formel [BREIT 31] als negative Ableitung des vom Magnetfeld abhängigen Energieniveaus analytisch aus  $\mu_{eff} = -\partial V/\partial \mathbf{B}$  berechnen. Für den Grundzustand ergeben sich daher die in Abbildung 2 gezeigten Verläufe.



Abbildung 2: Effektive magnetische Momente für den Grundzustand des Caesiums.

#### 1.3. Zum Betrieb der magnetooptischen Falle

Das Quadrupolmagnetfeld kann über zwei Stromspulen in der Anti-HELMHOLTZ-Konfiguration oder durch axial magnetisierte Permanentmagnete erzeugt werden. Üblicherweise werden in magnetooptische Fallen Gradienten von bis zu 20 Gauß/cm verwendet und es können 10<sup>10</sup> Atome gefangen werden. Die erreichbaren Dichten liegen im Bereich von 10<sup>12</sup> cm<sup>-3</sup>. Die gemessenen Temperaturen liegen zum Teil weit unter dem DoppLERlimit von 125µK für das hier verwendete Caesium.

Wie HOPE et al. demonstrierte, kann die magnetooptische Falle auch bei wesentlich steileren Gradienten betrieben werden, wobei dann die Verwendung von Permanentmagneten gegenüber den kühltechnisch schwer handhabbaren Stomspulen vorteilhafter ist [HOPE 93, 94]. Durch ein einfaches Modell kann die mittlere Zahl  $N_s$  der gefangenen Atome in Abhängigkeit des äußeren Gradienten bestimmt werden und man erhält als Resultat [HAUBRICH 93]

$$N_s \sim \left(\frac{\partial |\mathbf{B}|}{\partial z}\right)^{-14/3},\tag{4}$$

daß heißt man verringert mit steileren Gradienten die Zahl der gefangenen Atome, so daß bei weitgehender Reduzierung des Caesiumstrahles aus einem Reservoir, das die magnetooptische Falle lädt, ein Ensemble aus wenigen gespeicherten Atomen präparierbar ist [HAUBRICH 95]. Kompensiert die magnetische Kraft die Gravitation, so kann durch instantanes Abschalten der LASER eine Überführung der Atome in die nun entstandene magnetische Falle errreicht werden, was durch HAUBRICH et al. bereits demonstriert wurde [HAUBRICH 95].

## Kapitel 2

## Dynamische Grundgleichungen der magnetischen Falle

Grundsätzlich bietet die Existenz eines nichtverschwindenden Multipolmomentes eines Atoms die Möglichkeit dieses in inhomogenen äußeren Feldern zu fangen. Aufgrund von Symmetrieüberlegungen wird klar, daß neutrale Atome kein permanentes elektrisches Dipolmoment besitzen können und man daher auf die Wechselwirkung des effektiven magnetischen Momentes in einem inhomogenen Magnetfeld angewiesen ist, wenn auf das Einstrahlen von intensiven Lichtfeldern verzichtet werden soll. Sowohl im Hinblick auf große Ensembles als auch für die lokalisierte Speicherung einzelner neutraler Atome ist man daher an magnetischen Fallen interessiert, die in verschiedenen Ausführungen existieren. Über die Konstruktion, wie auch über die prinzipiellen Eigenschaften dieser Fallen informiert beispielsweise der Übersichtsartikel von Bergeman et al. [Bergeman 87]. Gemäß des WINGschen Theorems [WING 84], was die Existenz von lokalen Feldmaxima verbietet, muß man sogenannte schwachfeldsuchende Atome betrachten, bei denen die potentielle Energie mit dem Feld ansteigt. Wird das effektive magnetische Moment des Atomes von der Richtung des Spins gegenüber dem äußeren Feld bestimmt, so ist auf die Dynamik des Spins zu achten, d. h. man erhält zwei gekoppelte Systeme von Differentialgleichungen, wobei das eine die räumliche Bewegung und das andere die intrinsische Dynamik des Atomes beschreibt. Während in der klassischen Physik eine stetige Einstellung des Spins gegenüber dem Feld möglich ist, ergibt sich quantenmechanisch nur noch eine diskrete Anzahl von Einstellungen. Dies bedeutet, daß man mit einer Quantisierung des effektiven magnetischen Momentes zu rechnen hat, wie es durch das Experiment von STERN und GERLACH erstmals an neutralen Silberatomen demonstriert worden ist [GERLACH 22].

Magnetostatische Fallen sind konservativ, d. h. sie besitzen keine dissipative Kraft, so daß man zum Laden der Falle auf einen vorherigen Kühlmechanismus angewiesen ist. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die magnetische Falle immer durch instantanes Ausschalten der LASER aus der magnetooptischen Falle geladen. Dabei werden alle Atome, die sich in einem starkfeldsuchenden Zustand befinden, ausgestoßen und es verbleibt nur noch der schwachfeldsuchende Anteil des Ensembles. Für die Frage nach der Begrenzung der Speicherzeiten einer magnetischen Falle sind nun mehrere Faktoren relevant. Zum einen können aufgrund von nichtadiabatischen MAJORANAübergängen die Atome in starkfeldsuchende Zustände übergehen, zum anderen kann dies auch durch Stöße mit dem Restgas geschehen. Als bedeutender Verlustfaktor sind für Ensemble aus wenigen Atomen streifende Stöße mit dem Hintergrundgas zu sehen, die einen Energieübertrag bewirken, so daß das Atom aus der Falle entkommen kann [MIGDALL 85].

Im Hinblick auf diese Punkte kann vermutet werden, daß das Studium der Dynamik der Atome wesentliche Rückschlüsse auf Speicherzeiten, Temperaturen und Kühlmechanismen in der Falle gestattet. Ausgangspunkt ist hierfür die Modellannahme einer kollisionsfreien klassischen Bewegung der Atome in einem äußeren Potential. Es zeigt sich, daß diese sogenannte adiabatische Näherung auch für dichtere Ensembles gerechtfertigt ist und die Annahme der Kollisionsfreiheit, d. h. die Bedingung, daß die mittlere freie Weglänge  $\lambda$  sehr viel größer als die charakteristischen Längen der atomaren Wolke ist, nicht nur auf Ensembles gespeicherter einzelner Atome beschränkt bleibt [METCALF 94, SURKOV 94]. Wie die Erfahrung aus anderen Gebieten der Mikrophysik, etwa beim diamagnetischen KEPLERproblem für atomaren Wasserstoff in Rydbergzuständen zeigt, sind solche klassischen Behandlungen auch für eigentlich in Strenge nur quantenmechanisch zu behandelnde Systeme aufschlußreich, da wesentliche Resultate im Sinne eines Korrespondenzprinzips Analogien zeigen [SCHWEIZER93].

#### 2.1. Bewegungsgleichungen in der Quadrupolfalle

Ein den Gesetzen der klassischen Physik unterworfenes Teilchen der Masse *m* und Spin S, der ein magnetisches Moment  $\mu = (g_L e/2mc)S$  bewirkt, besitzt in einem äußeren Magnetfeld B die potentielle Energie  $V = -\mu \cdot B$  und erfährt ein Drehmoment  $\mathbf{T} = -\mu \times \mathbf{B}$ . Die Bewegungsgleichungen lauten daher ohne Berücksichtigung der Gravitation

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{p_i}{m}, \qquad \frac{dp_i}{dt} = \frac{g_L e}{2mc} \mathbf{S} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial x_i} \quad \text{und} \quad \frac{dS_i}{dt} = \frac{g_L e}{2mc} [S_j B_k - S_k B_j], \tag{5}$$

wobei i,j,k zyklisch aus {1,2,3} stammen. Eine Vereinfachung ergibt sich, wenn die LARMORfrequenz sehr viel größer als die Änderungsrate des Magnetfeldes ist, da dann die Orientierung des Spins dem Feld adiabatisch folgt. Dieses Sachverhalt bleibt - wie weiter unten noch gezeigt wird - auch quantenmechanisch gültig [MAJORANA 32]. Dann kann die Dynamik als Bewegung eines Punktteilchens in einem äußeren ortsabhängigen Potential beschrieben werden und man erhält in kartesischen Koordinaten mit in z-Richtung weisender Gravitation die HAMILTONfunktion zu<sup>1</sup>

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \mu_{eff} |\mathbf{B}| + mgz.$$
(6)

Für den gebräuchlichsten Fallentyp liegt für nicht zu große Auslenkungen vom Ursprung ein Quadrupolfeld an, so daß sich der Betrag des Magnetfeldes audrückt als [BERGEMAN 87]

$$|\mathbf{B}| = \frac{1}{2}B\sqrt{x^2 + y^2 + 4z^2} , \qquad (7)$$

mit dem in z-Richtung weisenden Gradienten  $B = \partial |\mathbf{B}|/\partial z$ . Für das in dieser Arbeit betrachtete Caesium im Zustand  $|F = 3, m_F = -3\rangle$ , das in moderaten Feldern ein magnetisches Moment von  $\mu_{eff} = (3/4) \mu_{Bohr}$  besitzt, kann also eine magnetische Speicherung für Gradienten  $B \ge 31 \ G/cm$  erfolgen, da dann die magnetische Kraft die Gravitation überkompensiert, wie aus der Kraftgleichung  $\mu_{eff}B \ge mg$  unmittelbar ersichtlich ist

Die klassischen Trajektorien der Atome in der Falle ergeben sich in der adiabatischen Näherung aus der Integration eines autonomen Systems gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen erster Ordnung, das explizit lautet

$$\frac{dx}{dt} = v_x; \frac{dy}{dt} = v_y; \frac{dz}{dt} = v_z;$$

$$\frac{dv_x}{dt} = \frac{-Cx}{2\sqrt{x^2 + y^2 + 4z^2}}; v_y \text{ analog}; \frac{dv_z}{dt} = \frac{-2Cz}{\sqrt{x^2 + y^2 + 4z^2}} - g,$$
(8)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> In Zukunft wird auch der Ausdruck "Anschauungsraum" für die Menge der kartesischen Koordinaten aus offensichtlichen Gründen benützt werden.

wobei  $C = \mu_{eff}B/m$  die magnetische Beschleunigung in z-Richtung ist. Eine analytische Lösung des Systems (8) ist im allgemeinen nicht mehr möglich und man ist auf numerische Integrationen angeweisen, die kommerzielle Computerprogramme leicht ausführen können.<sup>2</sup> Ordnet man der kinetischen Energie der Atome eine Temperatur T gemäß  $v_{mitt} = \sqrt{k_B T/2m}$  zu und berücksichtigt typische Werte für Ort und Temperaturen unter 1 mK in der magnetischen Falle [METCALF 94], so kann man ein anschauliches Bild von der Bewegung der Atome im Quadrupolpotential gewinnen. In Abbildung 3 und 4 sind zur Illustration die Projektionen einer Trajektorie auf die vertikale und horizontale Symmetrieebene dargestellt.

#### 2.2. Nichtadiabatische Übergänge

Für die Herleitung der HAMILTONfunktion (6) war die Annahme einer adiabatischen Mitnahme der Orientierung des Spins gegenüber dem äußeren Feld wichtig. Um ein Kriterium für den Gültigkeitsbereich dieser Näherung zu erhalten, bietet sich eine quantenmechanische Betrachtung an, da man auf diese Weise auch die Übergangswahrscheinlichkeiten in

starkfeldsuchende Zustände abschätzen kann, was eine Diskussion der Verlustfaktoren in der Falle gestattet<sup>3</sup>.

Zunächst sei eine Skizzierung der Nomenklatur des Problemes gegeben (rechts). Betrachtet werde ein Atom mit Spin S, das sich entlang der z-Achse Dabei erfahre es bewegen möge. zudem die magnetische Wechselwirkung mit einem äußeren Feld **B**, was im Punkt 0 einen Richtungswechsel besitzt. Es wird angenommen, daß der Spin zum Zeitpunkt  $t \rightarrow -\infty$  gegenüber dem Feld **B** ausgerichtet ist und es wird nun nach den Übergangswahrscheinlichkeiten in andere Spinzustände nach Passieren des Punktes 0 für  $t \rightarrow \infty$  gefragt. Unter einer adiabatischen Mitnahme versteht man, daß sich die Orientierung des Spins gegenüber dem Feld erhalten hat, andernfalls spricht



man von einem nichtadiabatischen Übergang. Handelt es sich um ein Atom mit Gesamtspin F, das änfanglich im magnetischen Unterzustand m gegenüber dem Feld war, so ergibt sich nach MAJORANA die Übergangswahrscheinlichkeit in den Unterzustand n aus<sup>4</sup>

$$W(F; m, n; \alpha) = \left(\sin\frac{\alpha}{2}\right)^{4F} (F+m)! (F+n)! (F-m)! (F-n)! (F-n)! (F-n)! (F-n)! (F-n)! (F-n)! (F-n)! (F-n)! (F-n)! (F-n-k)! (F-n-k)!$$

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Es wurde zum einen das Programm "MATHEMATICA" von Wolfram Research und zum anderen das Programm "ODE" aus der Sammlung [Korsch 94] benützt, auf die auch für andere Rechenaufgaben zurückgegriffen werden konnte.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Selbstverständlich könnte man auch eine klassische Rechnung durchführen, doch ist die quantenmechanische Behandlung des Problemes in gewisser Weise einfacher [MAJORANA 32]. Die so gewonnen Resultate lassen sich als Verlustwahrscheinlichkeiten zudem leichter interpretieren.

Es wird hier die Notation nach [BLOCH 45] benützt.



Abbildung 3: Trajektorie im Anschauungsraum eines in der Quadrupolfalle gefangenen Caesiumatomes im Zustand  $|F = 3, m_F = -3\rangle$  nach 2 Sekunden. Gezeigt ist die Projektion auf die horizontale Symmetriebene, was einem Blick von oben entspricht. Es wurde ein Gradient von 250 G/cm gewählt, die Anfangswerte waren  $(x_0 = 500 \,\mu m, y_0 = 0 \,\mu m, z_0 = -31 \,\mu m, v_{x0} = v_{z0} = 32 \,cm/s, v_{y0} = 14 \,cm/s)$ . Deutlich ist die rosettenhafte Bewegung um den Ursprung zu erkennen.



Abbildung 4: Bedingungen wie oben. Gezeigt wird die Projektion auf die vertikale Ebene, was einem Blick von der Seite entspricht. Man erkennt, daß infolge der Gravitation eine Verschiebung der Bahnen nach unten erfolgt.

wobei die Konvention benützt wird, daß nur über nichtnegative Fakultäten zu summieren ist. Der Winkel  $\alpha$  kann aus

$$\sin\frac{\alpha}{2} = \exp\left[-\left(\frac{\omega_L \cdot B_t}{(dB_z/dt)}\right)\frac{\pi}{4}\right]$$
(10)

bestimmt werden. Dabei ist  $\omega_L = \mu_{eff} |\mathbf{B}|/\hbar$  die Larmorfrequenz des Atomes,  $B_t$  und  $B_z$  die transversale beziehungsweise die in der Bewegungsrichtung des Atomes auftretende Magnetfeldkomponente. Die Gleichungen (9) und (10) gelten dabei im Ruhesystem des Atomes. Faßt man in (10) den in der runden Klammer stehenden Ausdruck als den Parameter der Übergangswahrscheinlichkeit  $l = \omega_L B_t / (dB_z/dt)$  auf, so kann die Bedingung für das Auftreten rein adiabatischer Übergänge auch als l >>1 formuliert werden. Als Abschätzung erhält man hieraus die bekannte Adiabasiebedingung

$$\frac{1}{|\mathbf{B}|} \left( \frac{\partial |\mathbf{B}|}{\partial z} \right) v_z \ll \omega_L = \frac{\mu_{eff} |\mathbf{B}|}{\hbar} , \qquad (11)$$

die für ein Quadrupolfeld (7) auf ein kritisches Fallenvolumen in Abhängigkeit der Geschwindigkeit der Atome führt. Für magnetische Fallen mit Caesium ergeben sich typischerweise kritische Entfernungen im Mikrometerbereich, d. h. die Trajektorien dürfen diese minimale Distanz vom Ursprung nicht unterschreiten.

Nach Gleichung (9) können nun in Abhängigkeit vom Parameter l die Übergangswahrscheinlichkeiten für Caesium im schwachfeldsuchenden Zustand  $|F=3, m=-3\rangle$  zu den übrigen Unterzuständen  $|F=3, n=3\rangle$ ,  $|3, 2\rangle$ , ...,  $|3, -2\rangle$  berechnet werden. Die auftretenden Funktionen sind explizit im Anhang zu finden und in den Abbildungen 5 und 6 aufgetragen.

Es zeigt sich, daß die nichtadiabatischen Übergänge direkt in starkfeldsuchende Unterzustände exponentiell mit wachsendem l abnehmen und man daher als dominanten Verlustkanal kaskadenhafte Übergänge zu letztendlich starkfeldsuchenden Unterzuständen anzusehen hat. Da typische Schwingungsperioden der atomaren Bewegungen im Bereich von 100 Hz liegen, können im Mittel auch Übergangswahrscheinlichkeiten von wenigen Promill die Speicherzeit, die im Sekundenbereich liegt, limitieren. Allerdings ist selbst für den schwachfeldsuchenden Übergang  $|3, -3\rangle \rightarrow |3, -2\rangle$  diese für  $l \ge 10$  praktisch auf Null gefallen. Bewegen sich die Caesiumatome mit Geschwindigkeiten von einigen wenigen cm/s in einem Quadrupolfeld von 250 G/cm, so bedeutet dies, daß nur für Atome, deren Annäherung an den Ursprung 10 µm unterschreitet, die oben aufgeführten nichtadiabatischen Übergänge überhaupt relevant werden. Damit ist bereits eine Aufgabe einer Diskussion der Trajektorien der Atome formuliert, d. h. man hat die Statistik der Annäherungen an den Ursprung zu untersuchen.

Abschließend sei noch daraufhin gewiesen, daß die obigen Ausführungen nur gültig sind, wenn keine Übergänge zu anderen Gesamtdrehimpulszahlen F möglich sind und wenn die DEBROGLIE-Wellenlänge des Atomes kleiner ist als charakteristische Abstände zwischen denen sich das Magnetfeld ändert [BLOCH 45]. Ersteres ist gleichbedeutend mit der Forderung, daß der energetische Abstand zwischen den einzelnen F-Zuständen groß gegenüber der Hyperfeinaufspaltung ist. Diese Bedingungen sind für die im Rahmen dieser Arbeit behandelten Sachverhalte immer erfüllt.



Abbildung 5: Übergangswahrscheinlichkeiten des Zustandes  $|F=3, m_F=-3\rangle$  in starkfeldsuchende (unten) und schwachfeldsuchende Zustände (oben) gleicher Gesamtdrehimpulszahl F in Abhängigkeit des Parameters l gemäß Gleichung (9)



Abbildung 6: Übergangswahrscheinlichkeiten des Zustandes  $|F = 3, m_F = -2\rangle$  in starkfeldsuchende Zustände gleichen Gesamtdrehimpulses F.

11

## Kapitel 3

#### Dynamik in der Quadrupolfalle

Ausgehend von der adiabatischen Näherung kann die kollisionsfreie Dynamik der gefangenen Atome als ein konservatives Potentialproblem verstanden werden. Die Diskussion der Bewegung soll aufgrund der nichtlinearen Differentialgleichungen insbesondere die Frage nach der Regularität beziehungsweise Stochastizität der Trajektorien klären, da ihr Verständnis die Grundlage für Kühlmechanismen und begrenzende Faktoren der Speicherzeit darstellt. Als wichtigste Elemente der Bewegung werden die Bahnfrequenzen angesehen, da ihr qualitatives wie quantitatives Spektrum - ähnlich den DELAUNAYschen Elementen der Himmelsmechanik - den besten Einblick in die Art der Dynamik gestattet. Insbesondere wird auf die Theorie der nichtlinearen Dynamik zurückgegriffen, um eine Klassifizierung der entstehenden Bewegungsformen zu gestatten.

#### 3.1. Hamiltonsche Bewegungsgleichungen

Die HAMILTONfunktion des gefangenen Atomes in der Quadrupolfalle lautet in den der Symmetrie des Problemes am besten angepaßten Zylinderkoordinaten

$$H = \frac{1}{2m} \left( P_z^2 + P_\rho^2 + \frac{P_\phi^2}{\rho^2} \right) + \frac{1}{2} \mu_{eff} B \sqrt{\rho^2 + 4z^2} + mgz.$$
(12)

Unmittelbar ist aus (12) die Erhaltung der z-Komponente des Drehimpulses ersichtlich, so daß sich das Problem auf zwei Freiheitsgrade in den generalisierten Koordinaten ( $\rho$ , z) reduziert. Da  $P_{\phi}$  zudem eine adiabatische Invariante ist, d. h. die Bedingung

$$P_{\phi} = \frac{1}{2\pi} \oint P_{\phi}(\phi) d\phi$$

erfüllt, bietet es sich an, den Drehimpulsteil zu einem effektiven Potential

$$V_{eff}(\rho, z) = m \frac{1}{2} \mu_{eff} B \sqrt{\rho^2 + 4z^2} + mgz + \frac{P_{\phi}^2}{2m\rho^2}$$
(13)

zu zählen. Man erhält dann nach Einführung der magnetischen Kopplungskonstanten  $C := \mu_{eff} B \frac{1}{m}$  sowie des charakteristischen Radius  $\rho_o = \left(\frac{2P_{\phi}^2}{m\mu_{eff}B}\right)^{1/3}$  und des Verhältnisses  $\zeta = \frac{g}{C}$  zwischen der gravitativen und der magnetischen Beschleunigungen das effektive Potential zu

$$V_{eff}(\rho, z) = mC \left( \frac{1}{2} \sqrt{\rho^2 + 4z^2} + \zeta z + \frac{\rho_o^3}{4\rho^2} \right)$$
(14)

Das nichtlineare System der Hamiltonschen Gleichungen lautet daher explizit

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{P_{\rho}}{m}; \frac{dz}{dt} = \frac{P_z}{m};$$

$$\frac{dP_{\rho}}{dt} = -mC \left( \frac{\rho/2}{\sqrt{\rho^2 + 4z^2}} - \frac{\rho_o^3}{2\rho^3} \right); \frac{dP_z}{dt} = -mC \left( \frac{2z}{\sqrt{\rho^2 + 4z^2}} + \zeta \right)$$
(15)

und läßt sich auf die Form eines autonomen Systems von Differentialgleichungen [LEIPHOLZ68]

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, \dots, x_{2N}; \alpha_1, \dots)$$

mit i = 1, 2, ..., 2N, wobei N die Zahl der Freiheitsgrade ist (sowie den Systemparametern  $\alpha_1, ...$ ), bringen.

Das System (15) besitzt bei Wahl von  $\zeta \leq 1$  einen Fixpunkt F, der zum Ausdruck bringt, daß unter dieser Bedingung die magnetische Kraft die Gravitation kompensiert und daher das Quadrupolfeld als Falle wirkt (siehe hierzu auch Seite 7). Er berechnet sich aus dem simultanen Lösen der Fixpunktgleichungen [LEIPHOLZ 68]

$$f_i(x_1^F, ..., x_{2N}^F; \alpha_1^F, ...) = 0$$
 für alle  $i=1,2,...,2N$ 

und kann durch Betrachtung der Eigenwerte der charakteristischen Matrix

$$(\mathbf{A})_{ij} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right) \left(x_1^F, \dots, x_{2N}^F, \alpha_1^F, \dots\right)$$

klassifiziert werden. Hier ergibt sich nun ein elliptischer Fixpunkt an der Stelle

$$(\rho_m, z_m) = \frac{\rho_o}{(1-\zeta^2)^{1/6}} \left( 1, -\frac{\zeta/2}{(1-\zeta^2)^{1/2}} \right)$$
(16)

im Konfigurationsraum, der mit dem Minimum des effektiven Potentials zusammenfällt. Für den Grenzfall  $\zeta \rightarrow 0$ , d. h. für sehr steile Gradienten reduziert sich (16) auf ( $\rho_o$ , 0). Es sollte betont werden, daß im Anschauungsraum kein Fixpunkt existiert und die Beziehung (16) dort einen Kreis um die Symmetrieachse definiert. Der besseren Übersicht halber sei eine Höhenliniendarstellung des effektiven Potentials in der Nähe des Fixpunktes für verschiedene Parameter C gegeben (Abbildung 7). Die eingezeichneten Konturen entsprechen den Kurven gleicher potentieller Energie und es bietet sich die Vorstellung eines Potentialtopfes an, in dem das Atom gebundene oszillierende Bewegungen ausführt. Deutlich wird, daß mit steileren Gradienten (das heißt stärkerer Kopplungskonstanten C) die unsymmetrischen Anharmonizitäten des Potentials abnehmen.

Abschließend sei noch eine Bemerkung für den Fall eines verschwindenden Drehimpulses  $P_{\phi}$  angeführt. In diesem Spezialfall verschwindet die Singularität der Symmetrieachse und das Atom kann durch den Ursprung schwingen, was ansonsten durch die Drehimpulsbarriere verhindert wird. Es existiert dann auch eine fundamentale Trajektorie, d. h. Atome mit



Abbildung 7: Höhenliniendarstellung des effektiven Potentials in der Umgebung des Fixpunktes für die Werte  $P_{\phi}/m=7.04$  10<sup>-5</sup> m<sup>4</sup>/s<sup>2</sup> und C=80 m/s<sup>2</sup>(links) und C=20 m/s<sup>2</sup>(rechts), wie sie für den magnetischen Fallenbetrieb typisch sind. Deutlich ist die mit kleineren Gradienten zunehmende Anharmonizität des Potentials sowie die Verschiebung des Fixpunktes zu erkennen.

anfänglich verschwindender radialer Auslenkung und Geschwindigkeit oszillieren nun entlang der z-Achse mit einer Schwingungsdauer von

$$T = 2 \cdot \int_{z_{\min}}^{z_{\max}} \frac{dz}{\sqrt{2(H/m - gz - C|z|)}},$$
(17)

mit  $z_{\min}$  und  $z_{\max}$  als minimale beziehungsweise maximale vertikale Auslenkung. Auch wenn dieser Spezialfall eine integrable Bewegung liefert, lohnt sich die weitere Diskussion aus physikalischen Gründen nicht. Zum einen werden die durch den Ursprung oszillierenden Atome sehr schnell infolge nichtadiabatischer Übergänge aus der Falle gestoßen, zum anderen entwickelt sich das effektive Potential (14) aufgrund der singulären z-Achse nicht stetig aus dem Spezialfall  $P_{\phi} = 0$ . Da nun aber die Menge der Atome mit genau dieser Bedingung eine Menge vom Maße Null im Sinne der Maßtheorie definiert, würde bei einer Fortführung der Diskussion nur ein in praxi irrelevanter Teil des Ensembles involviert sein.

#### 3.2. Reguläre und stochastische Bewegung

Da nichtlineare dynamische Systeme das Superpositionsprinzip der Lösungen verletzen, kann ihre Lösungsmannigfaltigkeit nicht so einfach übersehen werden, wie bei linearen Systemen. Insbesonders ist nun eine allen linearen Systemen unbekannte dynamische Stochastizität der Bewegung möglich, so daß ein qualitatives Verständnis der auftretenden Arten der Bewegung in Abhängigkeit der Anfangsbedingungen eine gesonderte Untersuchung erfordert. Die Frage nach der Stabilität der resultierenden Bewegungen, ihr Langzeitverhalten und die Kopplung der Freiheitsgrade kann weitreichende Aufschlüsse über die Natur der Dynamik selbst liefern, was bei einer Betrachtung der dynamischen Grundgleichungen im allgemeinen nicht mehr möglich ist. Der Begriff des deterministischen Chaos tauchte in himmelsmechanischen Arbeiten gegen Ende des vergangenen Jahrhunderts zum ersten mal auf und wurde in der Folge auch für andere Gebiete der Physik als bedeutsam erkannt. Eine Übersicht des Gesamtstoffes vermittelt beispielsweise [LICHTENBERG 82] sowie [BERRY 78].

Für ein HAMILTONSCHES System  $H(q_1, q_2, ..., q_N, p_1, ..., p_N) = H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$  ohne explizite Zeitabhängigkeit kann gezeigt werden, daß es genau dann allgemein integrabel ist, wenn die Zahl der in Involution stehenden allgemeinen Integrale der Bewegung F gleich der Zahl der Freiheitsgrade N beträgt [LICHTENBERG 82]<sup>1</sup>. Die Lösungsmannigfaltigkeiten des dynamischen Systems im 2N-dimensionalen Phasenraum werden dann auf einer N-dimensionalen Hyperfläche beschränkt bleiben. Diese hat dabei die Topologie eines Hypertorus. Für die und weitere Diskussion ist die Verwendung von Wirkungs-Winkelvariablen  $(J_1, J_2, ..., \omega_1, \omega_2, ...) = (\mathbf{J}, \boldsymbol{\omega}) = (J_k, \omega_k)$  sinnvoll<sup>2</sup>. In diesem Fall drückt sich die Integrabilität des dynamischen Systems im Sachverhalt der Separabilität der HAMILTON-JACOBI-Gleichung aus, d. h. die Winkelvariablen sind alle zyklisch. Es wird also eine kanonische Transformation

$$q_k, p_l = \frac{\partial S(q_k, J_k)}{\partial q_l} \iff J_k, \omega_l = \frac{\partial S(q_k, J_k)}{\partial J_l} \quad \text{mit } H(q_k, p_k) \to H(J_k)$$

gesucht, so daß die Bewegungsgleichungen trivial werden:

$$\frac{dJ_l}{dt} = -\frac{\partial H(J_k)}{\partial \omega_l} = 0 \rightarrow J_l = const.$$
$$\frac{d\omega_l}{dt} = \frac{\partial H(J_k)}{\partial J_l} = v_l \rightarrow \omega_l = v_l \cdot t + \delta_l$$

Für gebundene Bewegungen folgt aus der Periodizität der Wirkungs- und Winkelvariablen, daß sich die alten Koordinaten und Impulse in einer diskreten FOURIERreihe entwickeln lassen [FUES 27]. Somit stehen bereits zwei Kriterien für die Integrabilität der Bewegung zur Verfügung: die Bewegung wird vollständig regulär sein, wenn die Lösungsmannigfaltigkeiten auf einer *N*-dimensionalen Hyperebene eingeschränkt sind, beziehungsweise wenn das Frequenzspektrum der Koordinaten und Impulse diskret ist.

Im allgemeinen gestatten nichtlineare System keine vollständige Separierung der HAMILTON-JACOBI-Gleichung, d. h. selbst bei Abwesenheit einer stochastischen Kraft von außen zeigt die Mannigfaltigkeit der Lösungen unter Umständen ein stochastisches Verhalten, was auch als *deterministisches Chaos* bezeichnet wird. In diesem Fall reicht die Zahl der allgemeinen Integrale der Bewegung nicht aus, um die Trajektorien auf einen *N*-dimensionalen Hypertorus einzuschränken. Im Formalismus der Wirkungs- und Winkelvariablen drückt sich dies im Nichtverschwinden der Winkelvariablen in der HAMILTONfunktion aus. Ob ein gegebenes System integrabel ist, läßt sich nicht a priori entscheiden, so daß man gegebenenfalls auf numerische Rechnungen angewiesen ist<sup>3</sup>.

Für das weitere soll die Diskussion der Übersicht halber für den Fall N = 2 durchgeführt werden, da dieser für die vorliegende spezielle Problematik realisiert ist (die erhaltenen

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> In Involution stehend bedeutet, daß die Intergale der Bewegung unabhängig sind, d. h. ihre POISSONklammern verschwinden,  $\{F_m, F_n\}=0$ . Desweiteren bedeutet "allgemein", daß die Integrale der Bewegung Funktionen der Koordinaten und Impulse sind.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Es wird hier und im Folgenden die Notation des Artikels von Fues aus dem "Handbuch der Physik" [Fues 27] übernommen.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Als Kriterium, daß über die Integrabilität eines gegeben Systems entscheiden soll, wird in der Literatur manchmal PAINLEVÉS Test genannt [MILONNI 87], doch im allgemeinen ist auch damit noch kein sicheres Urteil möglich.

Ergebnisse lassen sich unschwer verallgemeinern, doch ist dann ihre Struktur nicht mehr so transparent).

Die Trajektorien eines integrablen autonomen HAMILTONSchen Systems liegen auf einem 2-dimensionalen Torus in einem 4-dimensionalen Phasenraum dessen Radien durch die konstanten Wirkungsvariablen gegeben sind. Dies ist genau dann der Fall, wenn zur erhaltenen Energie (also die HAMILTONfunktion selbst) noch ein weiteres allgemeines Integral der Bewegung existiert. Stehen die Frequenzen  $v_1$  und  $v_2$  in einem *rationalen* Verhältnis zueinander so ist die Bahnkurve auf dem Torus geschlossen (man sagt, es liege eine *periodische Bewegung* vor), andernfalls überstreicht die Kurve ergodisch den Torus (dann wird auch von einer *bedingt periodischen Bewegung* gesprochen, die keinesfalls mit einer *ergodischen Bewegung* verwechselt werden darf, bei der nur das Energieintegral existiert und daher der gesamte energetisch erlaubte Phasenraum überstrichen wird).

Die von POINCARÉ eingeführte Methode des POINCARÉSchnittes kann nun benützt werden, um eine Aussage über die Art der Bewegung zu fällen. Hierbei werden die Schnittpunkte der Trajektorie mit einer (2N-1)-dimensionalen Hyperebene, deren Wahl an sich beliebig ist, aufgetragen. Für den betrachteten Fall von N = 2 bedeutet dies, daß periodische Bewegungen endlich viele diskrete Punkte, bedingt periodische Bewegungen geschlossene Kurven und stochastische Bewegungen ganze Schnittpunktflächen ergeben, da nun die Trajektorie in einem Volumen liegt.



Abbildung 8: Zur Topologie integrabler zweidimensionaler Probleme (links) und zur Methode der POINCARÉschnitte (rechts). Die Erklärung findet sich im Haupttext.

Kann man die nichtintegrable Hamiltonfunktion in einen integrablen Anteil  $H_o$ , der nur noch von den Wirkungsvariablen abhängt, und einen Störterm  $\varepsilon H_1$ , der klein gegnüber dem ungestörten Anteil sein muß, mit dem Störparameter  $\varepsilon$  formulieren,

$$H(J_k, \omega_k) = H_o(J_k) + \varepsilon H_1(J_k, \omega_k), \tag{18}$$

so gestattet das KAM-Theorem (benannt nach <u>KOLMOGOROV</u>, <u>ARNOLD</u> und <u>MOSER</u>) weitgehende qualitative Aussagen über die gestörte Bewegung [KAM 63]. Ist die ungestörte Dynamik nichtentartet, das heißt gilt

$$\det\left(\frac{\partial^2 H_o}{\partial J_k \partial J_l}\right) \neq 0,\tag{19}$$

so wird im Sinne der Maßtheorie die überwiegende Zahl der Tori mit irrationalem Frequenzverhältnis im Phasenraum weiterhin existieren und durch die Störung nur deformiert werden. Tori mit einem rationalem Frequenzverhältnis brechen auf und führen zu stochastischen Regionen im Phasenraum, die zwischen den noch erhaltenen Tori für N = 2 eingeschlossen bleiben<sup>4</sup>. Wie das POINCARÉ-BIRKHOFF-Theorem zeigt [LICHTENBERG 82], brechen die Tori dabei in eine selbstähnliche Kette von elliptischen und hyperbolischen dynamischen Fixpunkten auf, die in POINCARÉschnitten eine charakteristische Struktur von gegebenenfalls deformierten Ellipsen oder stochastischen Schnittpunktflächen ergeben.



Abbildung 9: Illustration des KAM-Theorems und des POINCARÉ-BIRKHOFFschen Satzes über dynamische Fixpunkte eines konservativen HAMILTONSchen Systems. Skizziert ist die Deformation der Tori beziehungsweise ihr Aufbruch in eine selbstähnliche Kette von elliptischen und hyperbolische Fixpunkte.

#### 3.3. Normalkoordinaten

Die Existenz eines elliptischen Fixpunktes (16) legt eine TAYLOREntwicklung des effektiven Potentials (14) um diesen Punkt nahe. Aus

$$V(\rho, z) = \sum_{s,t=0}^{\infty} \frac{1}{s!t!} \left. \frac{\partial^{s+t} V(\rho, z)}{\partial \rho^s \partial z^t} \right|_{(\rho_m, z_m)} \cdot (\rho - \rho_m)^s (z - z_m)^t$$

folgt nach Einführung der verschobenen Koordinaten  $\bar{\rho} = \rho - \rho_m$  und  $\bar{z} = z - z_m$  und bei Unterdrückung des für die Bewegungsgleichungen irrelevanten konstanten Termes in unterster Ordnung

$$V(\overline{\rho},\overline{z}) = \frac{1}{2}\varpi_{\rho}^{2}\overline{\rho}^{2} + \frac{1}{2}\varpi_{z}^{2}\overline{z}^{2} + s\overline{\rho}\overline{z} + \dots$$
(20)

Hierbei wurden die Bahnfrequenzen

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Die genaue Formulierung des KAM-Theorems und des Beweises übersteigen aufgrund seiner mathematischen Subtilitäten den Rahmen dieser Arbeit bei weitem. Für seine weitere Diskussion wird daher auf die Literatur [KAM 63, LICHTENBERG 82] verwiesen. Erwähnt werden sollte, daß sich als eine Folge des KAM-Theorems und seiner Arithmetik der Tori-Destruktion das Ringsystem des Saturns oder die Struktur des Asteroidengürtel zwischen Mars und Jupiter ausgebildet hat [BERRY 78].

$$\boldsymbol{\varpi}_{\rho}^{2} := \left(\frac{\partial^{2} V}{\partial \rho^{2}}\right)_{(\rho_{m}, \boldsymbol{z}_{m})} = (3 + \zeta^{2})(1 - \zeta^{2})^{2/3} \boldsymbol{\varpi}_{o}^{2}, \qquad (21.a)$$

$$\varpi_z^2 := \left(\frac{\partial^2 V}{\partial z^2}\right)_{(\rho_m, z_m)} = 4(1-\zeta^2)^{2/3} \varpi_o^2$$
(21.b)

sowie

$$s := \left(\frac{\partial^2 V}{\partial \rho \partial z}\right)_{(\rho_m, z_m)} = 2\zeta (1 - \zeta^2)^{2/3} \varpi_o^2$$
(21.c)

mit der charakteristischen Bahnfrequenz  $\varpi_o^2 = \left(\frac{C}{2\rho_o}\right)$  für verschwindende Gravitation benützt. Wie zu erwarten, skalieren die Größen mit der selben Potenz des Drehimpulsparameters. Ihre funktionale Abhängigkeit vom Verhälnis  $\zeta$  bezogen auf die charakteristische Bahnfrequenz ist in Abbildung 10 gegeben.



Abbildung 10: Die auf die charakteristische Bahnfrequenz  $\varpi_o$  normierten Frequenzen  $\varpi_z$  und  $\varpi_\rho$  sowie  $s/\varpi_o^2$  in Abhängigkeit des Verhältnisses  $\zeta = g/C$ . Für vernachlässigbare Gravitation wird das effektive Potential zunehmend diagonal, wie am Verschwinden von  $s/\varpi_o^2$  für  $\zeta \to 0$  erkennbar ist.

Bezeichnenderweise lassen sich die Verhältnisse zwischen den Bahnfrequenzen untereinander und gegenüber dem Störterm *s* als elementare Funktionen des Verhältnisses  $\zeta = g/C$  schreiben. So erhält man aus (21) unmittelbar

$$\frac{\overline{\varpi}_z}{\overline{\varpi}_{\rho}} = \sqrt{\frac{4}{3+\zeta^2}} \qquad \text{mit dem Grenzfall } \lim_{C \to \infty} \left(\frac{\overline{\varpi}_z}{\overline{\varpi}_{\rho}}\right) = \frac{2}{\sqrt{3}}$$

und

$$\frac{s}{\varpi_z^2} = \frac{\zeta}{2} = \frac{g}{2C}$$

Für nicht zu hohe Energien, das heißt für kleine Anfangsgeschwindigkeiten und Auslenkungen um das Minimum des Potentials (14) wird die Näherung der kleinen Schwingungen sinnvoll sein<sup>5</sup>. Wie die Theorie zeigt [LANDAU 90] ist in diesem Falle eine Transformation zu Normalkoordinaten ( $\theta_1, \theta_2$ ) möglich, so daß die neue HAMILTONfunktion vollständig in zwei Normalschwingungen entkoppelt. Im Grenzfall der kleinen Energien ergibt sich daher:

$$H = \sum_{i=1}^{2} \frac{1}{2} \left( \left( \frac{d\theta_i}{dt} \right)^2 + \Omega_i^2 \theta_i^2 \right),$$
(22)

so daß die Lösung in Normalkoordinaten offensichtlich ohne Beschränkung der Allgemeinheit durch

$$\theta_i(t) = c_i \sin[\Omega_i t] \text{ mit einer Konstanten } c_i$$
(23)

gegeben ist. Der Zusammenhang zwischen den verschobenen generalisierten Koordinaten  $(\bar{\rho}, \bar{z})$  und den Normalkoordinaten ist bekanntlich ein Linearer

$$\begin{pmatrix} \bar{\rho} \\ \bar{z} \end{pmatrix} = \frac{1}{\varpi_o^2} \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{12} \\ \Delta_{21} & \Delta_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{pmatrix},$$
(24)

wobei sich die Entwicklungskoeffizienten aus den Bahnfrequenzen berechnen und von daher Funktionen des Drehimpulsparameters wie der Kopplungskonstanten C sind. Der Normierungsfaktor  $(1/\varpi_o^2)$  der linearen Transformation wurde aufgrund des asymptotischen Verhaltens der beiden Koordinatensysteme für  $\zeta \rightarrow 0$  eingeführt. Wie in Abbildung 12 gezeigt, können dann die Normalkoordinaten direkt mit den generalisierten Koordinaten identifiziert werden. Der Vollständigkeit halber seien die Entwicklungskoeffizienten mit den Ausdrücken für die Normalfrequenzen angegeben und ihre Abhängigkeit vom Verhältnis  $\zeta$  in den Abbildungen 11 und 12 graphisch dargestellt.

$$\Delta_{11} = \varpi_{z}^{2} - \Omega_{1}^{2}, \quad \Delta_{12} = \varpi_{z}^{2} - \Omega_{2}^{2}$$

$$\Delta_{21} = \varpi_{\rho}^{2} - \Omega_{1}^{2}, \quad \Delta_{22} = \varpi_{\rho}^{2} - \Omega_{2}^{2}$$

$$\Omega_{1}^{2} = \frac{1}{2} \left( \varpi_{\rho}^{2} + \varpi_{z}^{2} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{\left( \varpi_{\rho}^{2} - \varpi_{z}^{2} \right)^{2} + 4s^{2}}$$

$$\Omega_{2}^{2} = \frac{1}{2} \left( \varpi_{\rho}^{2} + \varpi_{z}^{2} \right) - \frac{1}{2} \sqrt{\left( \varpi_{\rho}^{2} - \varpi_{z}^{2} \right)^{2} + 4s^{2}}$$
(25)
(25)

Als Funktion der charakteristischen Bahnfrequenz  $\varpi_o$  und des Verhältnisses  $\zeta$  lauten sie explizit

$$\Omega_{1}^{2} = \frac{1}{2} \varpi_{o}^{2} (1 - \zeta^{2})^{2/3} \left\{ (7 + \zeta^{2}) + \sqrt{(1 - \zeta^{2})^{2} + 16\zeta^{2}} \right\}$$

$$\Omega_{2}^{2} = \frac{1}{2} \varpi_{o}^{2} (1 - \zeta^{2})^{2/3} \left\{ (7 + \zeta^{2}) - \sqrt{(1 - \zeta^{2})^{2} + 16\zeta^{2}} \right\}$$
(26.b)

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Was dies genau bedeutet, wird im folgenden Kapitel näher erläutert. Hier steht zunächst nur die Herleitung eines analytischen Ausdruckes für die Bewegung des Atomes bei niedrigen Energien im Mittelpunkt.



Abbildung 11: Die Normalfrequenzen (26) in ihrer Abhängigkeit vom Verhältnis  $\zeta = g/C$ . Oben links:  $\Omega_1/\varpi_o$  sowie  $\Omega_2/\varpi_o$  als Funktion von  $\zeta$ . Der Grenzfall  $\zeta \to 0$  entspricht exakt den Bahnfrequenzen, doch ist der funktionale Verlauf für schwächere Gradienten ein anderer. Daneben: das für die Störungstheorie bedeutsame Verhältnis der Normalschwingungen  $\Omega_1/\Omega_2$  in der Abhängigkeit von  $\zeta$  - und damit vom äußeren Gradienten. Unten: die normierte Abweichung der Normalschwingung (26) von den Bahnfrequenzen (21).

(21). Links:  $\frac{\Omega_1 - \varpi_z}{\Omega_1 + \varpi_z}$ , rechts daneben  $\frac{\Omega_1 - \varpi_{\rho}}{\Omega_1 + \varpi_{\rho}}$ . Deutlich ist zu erkennen, daß mit zunehmenden C die Normalschwingungen mit den Bahnfrequenzen identifiziert werden können (hier  $\Omega_1$  mit  $\varpi_z$ ), was auf den abnehmenden Einfluß von s (siehe Abbildung 10) zurückzuführen ist.



Abbildung 12: Funktionale Abhängigkeit der Transformationskoeffizienten (25) vom Verhältnis  $\zeta$ . Dargestellt ist das Schema  $\frac{1}{\varpi_o^2} \begin{pmatrix} \Delta_{11} & \Delta_{12} \\ \Delta_{21} & \Delta_{22} \end{pmatrix}$ . Deutlich ist die mit wachsendem C zunehmende Identifikation der

Normalkoordinaten mit den generalisierten Koordinaten anhand des asymptotischen Grenzfalles  $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ 

zu erkennen.

Wie die Bahnfrequenzen (21) skalieren auch die Normalfrequenzen (26) mit der selben Potenz des Drehimpulsparameters beziehungsweise der charakteristischen Bahnfrequenz. ihre funktionale Abhängigkeit von der magnetischen Kopplungskonstanen und damit des Gradienten des Magnetfeldes ist in Abbildung 11 gezeigt. Ein Verständnis ihrer physikalischen Bedeutung kann aus der Betrachtung des Grenzfalles *s* gegen Null beziehungsweise für  $\zeta \rightarrow 0$ gewonnen werden. Dann entspricht der Normalkoordinate  $\theta_1$ die radiale Koordinate  $\bar{z}$  und Analoges gilt für  $\theta_2$  und  $\bar{\rho}$ .

Der Übergang zu Normalkoordinaten bedeutet nun, daß gegenüber dem ursprünglichen Koordinatensystem ein im allgemeinen gedrehtes und gestauchtes System gewählt wurde, in dem sich das effektive Potential (14) als diagonale quadratische Form schreiben läßt. Die Äquipotentialkurven sind dort Ellipsen, deren Achsen den neuen Koordinatenachsen entsprechen. Deutlich wird aus der linearen Transformation (24) sowie des Ausdruckes (23) der Normalkoordinaten, daß die radiale und vertikale Bewegung im allgemeinen eine Superposition von zwei harmonischen Schwingungen ist.

Es sollte nochmals betont werden, daß diese Ausführungen nur im Bereich der Näherung der kleinen Schwingungen Gültigkeit besitzen, das heißt wenn nur die ersten Terme der Entwicklung (20) relevant sind.

#### 3.4. Klassifikation der Bewegung

In der Näherung der kleinen Schwingungen ist das dynamische Problem eines Atoms in der Quadrupolfalle dem System zweier unabhängiger harmonischer Oszillatoren äquivalent. Die HAMILTONfunktion lautet daher in Wirkungs- und Winkelvariablen [GOLDSTEIN 91]

$$H(J_1, J_2) = \Omega_1 J_1 + \Omega_2 J_2, \tag{27}$$

wobei die folgenden Beziehungen gelten:

$$\theta_i = \sqrt{\frac{2J_i}{\Omega_i}} \sin\left[2\pi\omega_i\right], \qquad \frac{d\theta_i}{dt} = \sqrt{2J_i\Omega_i} \cos\left[2\pi\omega_i\right].$$
(28)

Die einfache Struktur der Lösungen in den Normalkoordinaten beziehungsweise deren zugeordneten Wirkungs- und Winkelvariablen gestattet eine Klassifizierung der auftretenden Trajektorien, die im Anschauungsraum offensichtlich die folgende Zeitentwicklung haben

$$x(t) = (\rho_m + c_1 \Delta_{11} \sin [\Omega_1 t] + c_2 \Delta_{12} \sin [\Omega_2 t]) \cdot$$

$$\cos \left[ \sqrt{g} \frac{P_{\phi}}{m} \int_0^t \frac{d\tau}{(\rho_m + c_1 \Delta_{11} \sin [\Omega_1 \tau] + c_2 \Delta_{12} \sin [\Omega_2 \tau])^2} + \phi_o \right],$$

$$y(t) = (\rho_m + c_1 \Delta_{11} \sin [\Omega_1 t] + c_2 \Delta_{12} \sin [\Omega_2 t]) \cdot$$

$$\sin \left[ \sqrt{g} \frac{P_{\phi}}{m} \int_0^t \frac{d\tau}{(\rho_m + c_1 \Delta_{11} \sin [\Omega_1 \tau] + c_2 \Delta_{12} \sin [\Omega_2 \tau])^2} + \phi_o \right],$$

$$z(t) = z_m + c_1 \Delta_{21} \sin [\Omega_1 t] + c_2 \Delta_{22} \sin [\Omega_2 t].$$
(29)

Der triviale Fall einer gänzlich fehlenden Anregung der Normalschwingungen, das heißt  $\theta_k(0) = 0$ ,  $(d\theta_k/dt)_{(0)} = 0$  für alle k, bedeutet daher, daß das Atom eine gleichförmige Kreisbewegung um die z-Achse mit dem Radius  $\rho_m$  in der Höhe  $z_m$  ausführt.

Schon der nächst kompliziertere Fall der Anregung nur einer Normalschwingung, zum Beispiel  $\theta_2(0) = 0 = d\theta_2/dt$ , führt auf diffizile Bahnen in der x-y-Ebene, währenddessen die Bewegung entlang der z-Achse eine harmonische Schwingung mit der Frequenz  $\Omega_1$  ist. Die allgemeine Lösung läßt sich nach einer elementaren Integration für diesen Fall für x(t) (und analog für y(t)) schreiben als

$$x(t) = (\rho_m + c_1 \Delta_{11} \sin [\Omega_1 t]) \cdot \cos(\sqrt{g} \frac{P_{\phi}}{m} \cdot \left(\frac{c_1 \Delta_{11} \cos [\Omega_1 t]}{\Omega_1 \left(\rho_m^2 - c_1^2 \Delta_{11}^2\right) \left(\rho^2 + c_1 \Delta_{11} \sin [\Omega_1 t]\right)} + \frac{2\rho_m}{\Omega_1 \left(\rho_m^2 + c_1^2 \Delta_{11}^2\right)^{3/2}} \arctan\left[\frac{\rho_m \tan\left[\frac{\Omega_1 t}{2}\right] + c_1 \Delta_{11}}{\sqrt{\rho_m^2 - c_1^2 \Delta_{11}^2}}\right]\right)$$

Geschlossene Trajektorien ergeben sich immer dann, wenn das Verhältnis der Normalschwingungfrequenzen rational ist, das heißt wenn

$$\frac{\Omega_1}{\Omega_2} = \frac{p}{q} \qquad \text{mit} \qquad p, q \in \mathbb{N}$$
(30)

gilt. Im Raum der Normalkoordinaten entstehen dann geschlossene LISSAJOUSSche Figuren, die für inkommensurable Verhältnisse zu bedingt periodischen Bewegungen führen, die den ganzen Torus ergodisch überstreichen. Es wurde bereits erwähnt, daß Trajektorien mit rationalen Frequenzverhältnissen gegenüber dynamischen Störungen störungstheoretisch sehr anfällig reagieren. Insbesondere sind Frequenzverhältnisse mit kleinen p und q in (29) bereits für minimale Störungen sensitiv. Da in der magnetischen Falle mit höheren Termen der Entwicklung (20) gerechnet werden muß, stellen solche Trajektorien prinzipiell instabile Lösungen dar. Umgekehrt sind Trajektorien mit Frequenzverhältnissen, die im Sinne des KAM-Theorems als äußerst irrational anzusehen sind, besonders stabil<sup>1</sup>. Die Fequenzverhältnisse sind aufgrund des Skalenverhaltens der Frequenzen eine universelle Eigenschaften für alle Teilchen - ungeachtet ihrer kinematischen Anfangsbedingungen - in der Falle und hängen nur noch von der Kopplungskonstanten C ab. Betrachtet man daher ein Ensemble im selben magnetischen Unterzustand, so sollten sich bei Variation des Gradienten eine Auswirkung auf die Regularität der Trajektorien nachweisen lassen.<sup>2</sup>

Abschließend sei noch auf eine topologische Eigenschaft der Trajektorien hingewiesen. Im integrablen Fall der kleinen Schwingungen existiert neben der Energie und der z-Komponente des Drehimpulses noch ein weiteres allgemeines Integral der Bewegung, was die Trajektorien im Anschauungsraum auf einen Unterraum einschränkt. In den Normalkoordinaten kann dieses dritte allgemeine Integral sofort angegeben werden: es ist zum Beispiel die Gesamtenergie *einer* Normalschwingung. Wie oben erläutert, ist deshalb im Raum der Normalkoordinaten die Trajektorie eine LISSAJOUSSche Kurve innerhalb einer rechteckigen Fläche. Betrachtet man allerdings die Trajektorie im Raum der verschobenen generalisierten Koordinaten ( $\bar{\rho}, \bar{z}$ ), so kann der Zusammenhang zwischen den Normalkoordinaten und diesen durch das Maß der "Verzerrung" der rechteckigen Grundfläche der LISSAJOUSSchen Figuren veranschaulicht werden: je kleiner die Wirkung des *s*-Termes in der Entwicklung (20) ist, desto weniger verzerrt wird auch die Grundfläche der Bahnen sein (siehe hierzu auch Abbildung 13 und 14).

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Eine genaue Definition der Irrationalität eines Frequenzverhältnisses und einen Überblick des zahlentheoretischen Stoffes vermittelt beispielsweise der Artikel von BERRY [BERRY 78]. Gewöhnlich sind Tori mit einem Frequenzverhältnis, das dem Goldenen Schnitt entspricht, unter Störungen die Stabilsten, doch kann dies nicht in voller Allgemeinheit behauptet werden [LICHTENBERG 82].

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Die Situation sollte dann in gewisser Weise der Situation der Asteroidengürtel zwischen Mars und Jupiter vergleichbar sein.



Abbildung 13: Trajektorie im Raum der generalisierten Koordinaten nach 1,5 Sekunden. Gewählt wurde  $C = 80, \rho_o = 100 \ \mu m$ . Die Anfangswerte für die Koordinaten war durch das Minimum (16) des effektiven Potentials (14) gegeben und die Anfangsgeschwindigkeiten betrugen jeweils 3,16 mm/s. Man erkennt, daß eine nach dem Konzept der Normalkoordinaten zu erwartende Lissajoussche Figur entsteht, die allerdings aufgrund der Nichtdiagonalität des Potentials bezüglich der generalisierten Koordinaten leicht geschert erscheint.



Abbildung 14: Unter denselben Bedingungen wie oben, allerdings für veränderte Anfangsgeschwindigkeiten  $(dz/dt = 3, 16 \text{ mm/s}, d\rho/dt = 4, 74 \text{ cm/s})$  resultiert zufällig eine geschlossene Trajektorie. Aufgrund der höheren Energie wirken sich die vom Konzept der Normalkoordinaten nicht erfaßten höheren Terme der Entwicklung (20) verzerrend auf die Lissaloussche Figur aus.

#### Kapitel 4

#### Numerische Resultate

Im vorhergehenden Kapitel wurde ein analytischer Ausdruck für die Trajektorien in der Quadrupolfalle hergeleitet, der eine einfache Klassifizierung der Bewegung gestattet. Es erhebt sich nun die Frage, wann die Linearisierung des Potentials, die zu den Normalkoordinaten führt, gerechtfertigt ist und wie die in der TAYLORreihe nicht berücksichtigten Terme die Lösungen beeinflussen. Ebenfalls ist zu prüfen, für welche Anfangsbedingungen stochastische Trajektorien aus dem Differentialgleichungssystem (8) beziehungsweise (15) resultieren. Hierzu ist man auf numerische Integrationen angewiesen, die mit den Ergebnissen einer Störungsrechnung verglichen werden können. Für die Diskussion der Stochastizität der Trajektorien bietet sich für den hier vorliegenden Fall von zwei Freiheitsgraden die Diskussion der POINCAREschnitte an, die ebenfalls aus numerischen Integrationen gewonnen werden können. Abschließend wird in diesem Kapitel auf die Verteilungsfunktionen eines Ensembles eingegangen, wie sie für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimente relevant sind.

#### 4.1. Abstand der Trajektorien vom Ursprung

Neben einer Illustration des klassischen Bildes der Bewegung eines Atomes in der Falle gestattet die Diskussion der Trajektorien im Anschauungsraum auch einen ersten Zugang zur Frage nach einer minimalen beziehungsweise maximalen Entfernung vom Fallenzentrum, was für die Abschätzung von Verlustmechanismen in der Falle aufgrund von nichtadiabatischen Übergängen wichtig ist. Wie in Kapitel 2 aufgeführt, kann aus der Adiabasiebedingung (11) ein kritischer Abstand vom Ursprung abgeschätzt werden, so daß bei dessen Unterschreitung eine nicht mehr von Null verschiedene Übergangswahrscheinlichkeit in einen anderen magnetischen Unterzustand möglich ist. Da der Ausdruck (7) für das Quadrupolfeld nur für einen ursprungsnahen Bereich eine gute Näherung ist, verbleibt noch die Frage nach der maximalen Entfernung der Atome. Bei Auslenkungen von mehr als einem halben Zentimeter muß mit Korrekturtermen zum Quadrupolpotential gerechnet werden [BERGEMAN 87], so daß man insgesamt an einer Statistik der extremalen Abstände interessiert ist.

Für den vorliegenden Fall wurde ein Ensemble von Caesiumatomen im Zustand  $|F=3, m_F=-3\rangle$  in einer magnetischen Falle mit einem Gradienten von 250 G/cm rechnerisch modelliert. Hierbei wurden die kinematischen Anfangswerte zufällig in einem Intervall von -1mm bis +1 mm, beziehungsweise von -10 cm/s bis +10 cm/s für jeden Freiheitsgrad und Geschwindigkeitsrichtung vorgegeben und anschließend das Differentialgleichungssystem (8) numerisch integriert. Aus den resultierenden Trajektorien kann nun die zeitliche Entwicklung des Abstandes vom Ursprung r(t) gewonnen werden und die extremalen Werte, die nach einer simulierten Zeit von 10 s auftraten wurden daraufhin für das gesamte Ensemble ausgewertet.

Zur Illustration der zeitlichen Entwicklung der Trajektorien sind für drei Fälle die r(t)-Diagramme sowie die dazugehörigen POINCARÉschnitte in Abbildung 15 bis 17 dargestellt.

Als Schnittebene wurde eine Fläche durch den Ursprung mit der Bedingung, daß der vertikale Impuls verschwindet, gewählt. Für die Diskussion der POINCAREschnitte ist es in jedem Falle günstig, im zweidimensionalen Raum der generalisierten Koordinaten zu arbeiten, da sich nun reguläre Trajektorien - wie in Kapitel 3 ausgeführt wurde - durch Schnittlinien mit der Ebene auszeichnen und daher leicht erkannt werden können.

In Abbildung 15 kann man einen sehr regulären Verlauf des Abstandes in der Zeit erkennen, was auf eine Regularität der Bewegung insgesamt hinweist. Dieses wird durch den zugehörigen POINCARÉschnitt, der als Schnitt durch einen Hypertorus, auf dem die bedingt periodische Bewegung verläuft, angesehen werden kann auch bestätigt. In Abbildung 16 erkennt man nun eine zunehmende Verschleierung der regulären zeitlichen Entwicklung des Abstandes, doch läßt sich eine periodische Grundstruktur noch unschwer erkennen. Das Langzeitverhalten dieser Trajektorie kann nach Betrachtung des zugehörigen POINCARÉschnitt beweist. Hier wird zugleich die Überlegenheit der topologischen Methode gegenüber rein qualitativen Betrachtungen des Aussehens der Trajektorie in der Fragestellung nach der Regularität deutlich. Die Entwicklung des Abstandes in Abbildung 17 würde man chaotisch nennen, doch ist die Trajektorie in Strenge regulär.

Die Statistik über die minimalen beziehungsweise maximalen Abstände vom Ursprung ist in einem Diagramm in Abbildung 18 beziehungsweise 19 zusammengefaßt. Man erkennt, daß nur ein verschwindend geringer Teil der Atome (in diesem Fall weniger als ein Prozent) eine Annäherung an den Ursprung von weniger als 50  $\mu$ m erreichte. Keine der Trajektorien führte auf eine minimale Entfernung unter 10  $\mu$ m, so daß MAJORANAübergänge als Verlustfaktor für dieses Ensemble ausscheiden können. Die gefundenen numerische Resultate stehen in Übereinstimmung mit ähnlich durchgeführten Simulation von ANTILLÓN et al. [ANTILLÓN 92]. Die maximale Entfernung vom Ursprung der Trajektorien überstieg niemals 3 mm, so daß vermutet werden kann, daß höhere Korrekturterme des Magnetfeldes keinen wesentlichen Einfluß auf die Stabilität der Trajektorien haben werden<sup>1</sup>.

Das Nebenmaximum der Verteilung für die Statistik der maximalen Abstände bei r = 2,2mm muß wohl als numerisches Artefakt angesehen werden, was bei einer Erhöhung der Zahl der simulierten Trajektorien verschwinden wird. Streicht man die Datenpunkte des Nebenmaximums so ergeben sich nach einer numerischen Anpassung an einer Normalverteilung für die Mittelwerte  $\langle r_{\min} \rangle = 256 \,\mu m$  beziehungsweise  $\langle r_{\max} \rangle = 1,015 \,mm$  mit den zugehörigen Standardabweichungen von  $\sigma_{\min} = 107 \,\mu m$  beziehungsweise  $\sigma_{\max} = 0,371 \,mm$ . Die Temperatur des simulierten Ensembles betrug rund 100  $\mu$ K.

2

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Diese Behauptung ist sicherlich richtig, wenn die weiteren Terme die Symmetrie des Quadrupolfeldes nicht stören, was der Fall ist. Für geringe Symmetriebrechungen kann - da die z-Komponente des Drehimpulses eine adiabatische Invariante ist - mit einem ähnlich geringen Einfluß gerechnet werden.



Abbildung 15: Erklärung siehe Haupttext. Gewählte Anfangskoordinaten  $(x,y,z)=(780,340,890)\mu m$  und Anfangsgeschwindigkeiten (1.5,9.6,0.9)cm/s.



Abbildung 16: Wie Oben, doch mit den Anfangswerten (290,870,-380)µm und (3.3,-5.4,-0.8)cm/s.



Abbildung 17: Wie Oben, doch mit den Anfangswerten (-480,20,680)µm und (0.5,6.3,2.4)cm/s.



Abbildung 18: Diagramm der minimalen Abstände vom Ursprung gemäß des im Haupttext erläuterten Verfahrens. Die Gesamtzahl der Teilchen betrug 500.



Abbildung 19: Diagramm der maximalen Abstände vom Ursprung gemäß des im Haupttextes erläuterten Verfahrens.
### 4.2. Aufbruch ins Chaos

Bislang wurden nur reguläre Trajektorien, die als Lösungskurven aus dem Differentialgleichungssystem (15) resultieren, betrachtet. Die markanteste Eigenschaft eines Systems nichtlinearer Gleichungen ist allerdings die Möglichkeit, daß ein chaotisches Verhalten der zugehörigen Lösungsmannigfaltigkeit auftreten kann. Unter dem Fluß eines Differentialgleichungssystems versteht man die Gesamtheit aller Integralkurven des dynamischen Systems [SCHECK 90] und in Abhängigkeit der Anfangswerte läßt sich der Fluß somit als eine Abbildung verstehen, die das Verhalten des dynamischen Systems beschreibt: tritt für infinitesimal benachbarte Anfangswerte nach einer Zeit t eine endliche Entfernung der zugehörigen Punkte im Phasenraum auf, so wird im allgemeinen das Verhalten der Flusses chaotisch sein. Dies bedeutet, daß schon die geringste Unkenntnis des Anfangszustandes keine Vorhersage des Verhaltens des physikalischen Systems über einen endlichen Zeitraum gestattet.

Betrachtet man das vorliegende nichtlineare Problem, so schließt sich daher unmittelbar die Frage an, ob und unter welchen Bedingungen ein solches Verhalten auftritt. Als Zugang bietet sich hier eine Diskussion der zu verschiedenen Anfangswerten gehörigen POINCARÉschnitte an, die - wie im vorhergehenden Abschnitt - numerisch gewonnen werden können. Die folgenden Unterpunkte markieren die Bedeutung der Stochastizität für die Gesamtheit des Flusses: von den integrablen Tori gelangt man zum Phänomen der Resonanz und für hohe Energien wird im Phasenraum eine laterale Ausbreitung der stochastischen Regionen zu sehen sein.

### 4.2.1. Das vollständig integrable System

Das dem dynamischen System (15) zugehörige linearisierte Problem wird durch die HAMILTONfunktion

$$H_o = \frac{1}{2} \left( p_\rho^2 + p_z^2 + \varpi_\rho^2 \overline{\rho}^2 + \varpi_z^2 \overline{z}^2 \right) + s \overline{\rho} \overline{z}$$
(31)

im Raum der generalisierten Koordinaten ( $\overline{p}, \overline{z}$ ) beschrieben. Die allgemeine Lösung läßt sich mithilfe der Normalkoordinaten - wie in Kapitel 3 demonstriert - leicht angeben. Gesucht wird nun der aus dem System (31) resultierende POINCAREschnitt in einer Ursprungsebene mit der Bedingung  $p_z = 0$ . Man erhält dann aus (31) unmittelbar die implizite Funktion

$$2H_o = p_{\rho}^2 + \varpi_{\rho}^2 \bar{\rho}^2 + \varpi_z^2 \bar{z}^2 + 2s \bar{\rho} \bar{z} \quad . \tag{32}$$

Betrachtet man die entstehenden Schnitte in der Ebene der radialen Variablen  $(\bar{p}, p_{\rho})$ , so ist zur erhaltenen Gesamtenergie noch ein weiteres unabhängiges Integral der Bewegung erforderlich, um durch algebraische Umformungen die z-Abhängigkeit aus (32) zu eliminieren. Hierfür bietet sich die Energie einer Normalschwingung F - ausgedrückt in den generalisierten Koordinaten - an.

Führt man die Umformungen aus, so erhält man eine implizite Funktion, die eine Kurve in der  $(\overline{\rho}, p_{\rho})$ -Ebene definiert. Explizit ergibt sich

$$2\left(H_{o} - \frac{\varpi_{o}^{4} \varpi_{z}^{2} F}{\nabla_{12}^{2} \Omega_{1}^{2}}\right) = p_{\rho}^{2} \left(1 - \frac{\varpi_{z}^{2}}{\Omega_{1}^{2}} \left(\frac{\nabla_{11}}{\nabla_{12}}\right)^{2}\right) + \bar{\rho}^{2} \left(\varpi_{\rho}^{2} + \varpi_{z}^{2} \left(\frac{\nabla_{11}}{\nabla_{12}}\right)^{2} - 2s \frac{\nabla_{11}}{\nabla_{12}}\right)$$

$$\pm \bar{\rho} \sqrt{2F - \frac{\nabla_{11}^{2} p_{\rho}^{2}}{\varpi_{o}^{2}}} \left(\pm \frac{\varpi_{o}^{2} 2s}{\nabla_{12} \Omega_{1}} - \frac{2\varpi_{z}^{2}}{\Omega_{1}} \frac{\varpi_{o}^{2} \nabla_{11}}{\nabla_{12}^{2}}\right),$$
(33)

wobei sich die Koeffizienten  $\nabla_{ij}$  aus der zur linearen Transformation (24) inversen Matrix ergeben. Die Funktion (33) liefert im allgemeinen zwei sich schneidende Kreise, deren Mittelpunkte einen Abstand proportional zu  $\sqrt{F}$  haben.

Um die Gültigkeit des linearisierten Systems in der Niederenergienäherung zu testen, wurden für verschiedene Kopplungskonstanten C und charakteristische Radien für verschiedene Energien POINCARÉschnitte angefertigt und mit der analytischen Formel (33) verglichen. Dabei entsprach physikalisch der Variabilitätsbereich der Parameter Gradienten zwischen 50 G/cm und 1500 G/cm beziehungsweise Temperaturen bis über 1 mK für Caesium im Zustand  $|F=3, m_F=-3\rangle$ .

Es ergab sich für nicht zu schwache Gradienten und Energien, denen Temperaturen im Mikrokelvinbereich entsprechen, im Rahmen der Rechengenauigkeit hervorragende Übereinstimmungen mit dem linearisierten Ausdruck, was als Bestätigung des Konzeptes angesehen werden kann. In Abbildung 20 sind zur Illustration des Gesagten zwei POINCARÉschnitte und ihre zugehörigen Trajektorien im Anschauungsraum dargestellt. Mit wachsender Energie (entsprechend einer Erhöhung der Anfangswerte der Geschwindigkeiten bei gleicher Anfangslage) ist eine zunehmende Deformation der Kurve (33) aufgrund der Wirkung höherer Terme der Entwicklung (20) zu erkennen. Wie zu erwarten, weichen dann auch die Trajektorien im Anschauungsraum zunehmend von der analytisch durch (29) Beschriebenen ab.

#### 4.2.2. Resonanzen

Aus der allgemeinen Theorie der nichtlinearen Dynamik ist das Phänomen der Resonanz für Frequenzen, die in einem rationalen Verhältnis zueinander stehen, bekannt [WALKER 41]. Dies kann unter Umständen auch bei niedrigen Energien beziehungsweise für schwache Störungen eines integrablen Systems zu stochastischen Bewegungen führen.

Tori mit rationalen Frequenzverhältnissen brechen dabei gemäß des POINCARÉ-BIRKHOFF-Theorems in elliptische und hyperbolische Fixpunkte auf [LICHTENBERG 82]. Diese stochastischen Trajektorien liegen für zweidimensionale Probleme aufgrund topologischer Bedingungen zwischen den noch erhaltenen Tori und füllen daher begrenzte Volumen im Phasenraum aus, so daß sie sich in POINCARÉschnitten als Flächen für hyperbolische Fixpunkte beziehungsweise als sekundäre Tori (im Englischen auch suggestiv als "chains of islands" bezeichnet) für elliptische Fixpunkte zeigen.

Gewissermaßen als exemplarische Illustration der allgemeinen Theorie dient die folgende Reihe von Abbildungen 21 und 22. Hierbei wurden bei jeweils festen Konstanten C = 80 (dies entspricht im obigen Zustand einem Gradienten von 250 G/cm) und  $\rho_o = 500 \,\mu m$  numerisch POINCAREschnitte für verschiedene Anfangswerte der vertikalen Geschwindigkeit dz(0)/dt als Parameter erstellt. Die Anfangslage des Atoms war dabei durch das Minimum (16) vorgegeben und die Anfangsgeschwindigkeit in radialer Richtung betrug stets 3,16 cm/s. Systematisch konnte nun die vertikale Anfangsgeschwindigkeit variiert werden, so daß diese als Kontrollparameter für den Fluß des dynamischen Systems (15) dient.



Abbildung 20: Trajektorien im Anschauungsraum (oben) und der zugehörige POINCARÉschnitt (unten). Es wurde C=80, was einem Gradienten von 250 G/cm für Caesium im Grundzustand  $|F=3, m_F=-3\rangle$ entspricht, und ein charakteristischer Radius  $\rho_o = 500 \mu m$  gewählt. Die Anfangslage war durch das Minimum (16) gegeben und die Anfangsgeschwindigkeiten betrugen wenige mm/s. Deutlich ist für die geringe Energie des Atoms die gemäß (29) zu erwartende Trajektorie, beziehungsweise das charakteristische POINCARÉschnittbild (33) zu erkennen.



Abbildung 20, Teil 2: Trajektorie und POINCARÉschnitt wie in der vorhergehenden Abbildung, doch wurden Anfangsgeschwindigkeiten von wenigen cm/s und damit eine erhöhte Energie des Atoms gewählt. Man erkennt, daß die Trajektorie sowie der zugehörige POINCARÉschnitt von den Formeln (29) beziehungsweise (33) abweichen, da die Niederenergienäherung zunehmend verletzt wird.

Würde man die Energie noch weiter erhöhen, entstünden die Trajektorien der Abbildungen 3 und 4. Diese besitzen offensichtlich keinerlei Ähnlichkeit mit den Niederenergienäherungen und sie sind tatsächlich trotz ihrer augenscheinlichen Symmetrie chaotische Trajektorien, wie ein POINCARÉschnitt zeigt (nicht abgebildet). Für eine vertikale Anfangsgeschwindigkeit von

$$k \equiv \frac{dz}{dt}(t=0)\frac{1}{[cm/s]} = 3,162$$

erkennt man das deformierte Schnittbild des vollständig integrablen Systems (31) wieder. Die Abweichungen von der analytischen Kurve (33) sind eine Folge der höheren Terme der Entwicklung (20), die für die vorliegende Energie offenbar noch als kleine Störung auffassbar sind. Mit der Erhöhung der Energie, das heißt des Kontrollparameters k, wird auch die Deformation stärker, so daß sich für k = 22,136 bereits eine Überschneidungsfreiheit der beiden geschlossenen Kurven ergibt. Für k = 25,3 ist die Separation der beiden Schnittfiguren erkennbar gewachsen.

Aus Gründen der Übersicht beschränken sich die nun folgenden Bilder der Abbildung 22 auf jeweils nur Schnittfigur. Desweiteren braucht man aus Symmetriegründen gegebenenfalls nur auf eine Hälfte der spiegelbildlichen Muster einzugehen. Für k = 28,460 ist das Schnittbild des deformierten Torus dargestellt und mit der oberen Hälfte des Bildes für k = 28,461verglichen. Man erkennt deutlich, daß nun eine Bifurkation eintrat, das heißt eine geringe Änderung des Kontrollparameters k (in diesem Fall entspricht die besagte Änderung einer Geschwindigkeitszunahme von  $10 \,\mu m/s$ ) ergibt eine qualitativ andere Bewegungsart. Aus einer auf einem Torus gebundenen Trajektorie ist eine stochastische geworden, wie aus der Entstehung sekundärer Tori unmittelbar zu erkennen ist. Diese sind ebenfalls bei der Wahl von Zylinderkoordinaten nach Art der erhaltenen Tori deformiert, so daß sich ihre Mittelpunkte (also die elliptischen Fixpunkte) nur ungenau ermitteln lassen.

Die folgende Sequenz läßt eine Verfolgung der sekundären Tori in Abhängigkeit des Kontrollparameters zu. Für k = 37,631 verschwindet die Resonanzerscheinung, das heißt ab diesem Wert des Kontrollparameters sind die Frequenzen in einem irrationalen Verhältnis und die Trajektorien verlaufen wieder auf erhaltenen Tori.

Um dieses Phänomen deutlicher zu illustrieren, wird in Abbildung 23 die aus den Schnittbildern abgeschätzte radiale Lage der Mittelpunkte der Tori in Abhängigkeit des Kontrollparameters aufgetragen. Zunächst ist ein linearer Anstieg der Mittelpunkte der Tori mit k erkennbar, bis mit  $k = k_{Bif}$  eine Bifurkation in insgesamt vier sekundäre Tori eintritt. Die radialen Koordinaten ihrer Mittelpunkte werden ebenfalls in Abhängigkeit von k aufgetragen, wobei aufgrund der starken Verzerrung der Ellipsen nur ungefähre Angaben ermittelt werden können. Ab k = K verschwindet dieses Phänomen und ein linearer Anstieg der radialen Lage der Tori mit k ist wieder erkennbar.

Folgende Seite:

Abbildung 21: POINCARÉschnitte für das im Haupttext beschriebene System.

#### Übernächste Seite:

Abbildung 22: Detailstudie der POINCARÉschnitte für das im Haupttext beschriebene System.



500



Aufbruch ins Chaos

37



Abbildung 23: Radiale Lage der Mittelpunkte der primären und sekundären Tori in Abhängigkeit des Kontrollparameters k. Weitere Erklärung im Haupttext.

#### 4.2.3. Globales Chaos

Mit höheren Energien erwartet man eine stärkere Auswirkung der im linearen Ansatz nicht berücksichtigten höheren Terme, die das dynamische Problem nicht mehr integrabel machen. Tatsächlich können diese eine dynamisch stärkere Bedeutung als der integrable Anteil von zwei harmonischen Oszillatoren in der HAMILTONfunktion (18) gewinnen, nämlich dann, wenn die Bedingung

$$\frac{1}{2} \left( \varpi_{\rho}^{2} \overline{\rho}^{2} + \varpi_{z}^{2} \overline{z}^{2} + 2s \overline{\rho} \overline{z} \right) >> \sum_{s+t\geq 3}^{\infty} \left. \frac{\partial^{s+t} V}{\partial \rho^{s} \partial z^{t}} \right|_{(\rho_{m}, \overline{z}_{m})} \cdot \overline{\rho}_{\underline{z}}^{s} \overline{z}^{t}$$
(34)

verletzt ist. Anschaulich bedeutet (34), daß das dynamische Problem im wesentlichen durch zwei nur schwach gekoppelte harmonische Oszillatoren bestimmt wird, wobei die rechte Seite der Ungleichung (34) als kleiner Störterm  $\varepsilon H_1(J_k, \theta_k)$  in der Darstellung der Wirkungs- und Winkelvariablen in die HAMILTONfunktion eingeht.

Erhöht man daher die Energie, so wird ein laterales Aufbrechen der Tori im Phasenraum zu erwarten sein, so daß für bestimmte Werte sogar mit ergodischen Bewegungen zu rechnen ist. In diesem Fall wäre nur noch eine verschwindende Menge der Trajektorien auf erhaltene Tori eingeschränkt und die Mehrzahl der Trajektorien würde ergodisch die energetisch erlaubten Phasenraumuntervolumina ausfüllen.

In der Literatur stehen zumeist Potentialprobleme mit Dissoziationsgrenzen im Vordergrund [HÉNON 64]. Gewöhnlich kann dann eine dramatische Zunahme der ergodisch ausgefüllten Phasenraumuntervolumina mit einer Annäherung an die Dissoziationsgrenze bemerkt werden, doch auch unendlich tiefe Potentialtöpfe können ergodisches Verhalten

zeigen. Für den hier vorliegenden Fall handelt es sich um ein Problem ohne Dissoziationsgrenze, doch zeigt eine Höhenliniendarstellung des effektiven Potentials (14) für größere Auslenkungen vom Minimum, daß mit einem "strukturierten SINAI-Billard" unter Umständen gerechnet werden muß.



Abbildung 24: Höhenliniendarstellung des effektiven Potentials für die Werte C = 80 und  $\rho_o = 100 \,\mu m$ für große Abstände, die einer Hochenergiesituation entsprechen. Der schwarze Balken links ist drucktechnisch bedingt und zeigt, daß die Drehimpulsbarriere wie eine Wand wirkt.

Um das Verhalten des Flusses für hohe Energien (wenn der störungstheoretische Ansatz versagt) zu testen, wurden numerisch POINCARÉschnitte für vorgegebene Energien und bei festgehaltenen Konstanten C = 80 und  $\rho_o = 100 \,\mu m$  angefertigt. Dabei war die Anfangslage stets das Minimum des effektiven Potentials (16) und die Anfangsgeschwindigkeiten wurden für vorgegebene kinetische Anfangsenergien

$$T_o = \frac{1}{2} \left( \left( \frac{P_{\rho}(t=0)}{m} \right)^2 + \left( \frac{P_z(t=0)}{m} \right)^2 \right) \frac{1}{[m^2/s^2]}$$

variiert.

In Abbildung 25 sind für  $T_o = 10^{-3}$ , dies entspricht einer Temperatur von 30  $\mu K$  für Caesium, POINCARÉschnitte von 4 Trajektorien mit einer Ursprungsebene unter der Bedingung  $P_z = 0$  für die Variablen ( $\bar{\rho}, P_{\rho}/m$ ) dargestellt. Deutlich ist erkennbar, daß bis auf eine Trajektorie mit zwei mal 7 sekundären Tori, was auf eine Resonanzerscheinung zurückzuführen Trajektorien regulär ist, die restlichen sind. Im Rahmen der Rechnergenauigkeit konnte kein stochastisches Verhalten der geschlossenen Kurven nachgewiesen werden. Die Existenz von Fixpunkten, um die sich die erhaltenen Tori formiern, ist klar zu erkennen.

Analog zeigt Abbildung 26 die Situation für  $T_o = 10^{-2}$ , wo neben regulären Trajektorien und den bekannten Resonanzerscheinungen auch eine sogenannte Separatrix dargestellt ist. Diese sich selbst schneidende Kurve zeigt an den Schnittpunkten, denen hyperbolische Fixpunkte entsprechen, bereits das Auftreten von stochastischen Regionen.



Abbildung 25: POINCARÉschnitte für T=30µK. Erklärung im Hauptext. Deutlich ist die Dominanz der Regularität der Trajektorien zu erkennen.



Abbildung 26: POINCARÉSchnitte für  $T=300\mu$ K. Erklärung im Haupttext. Mit der Erhöhung der Energie ist eine Zunahme der Stochastizität der Trajektorien verbunden. Man beachte die heteroklinen hyperbolischen Fixpunkte als Schnittpunkte der Separatrix mit sich selbst.



Abbildung 27: POINCARÉSchnitte für T=3mK. Erklärung im Haupttext. Bis auf kleine Inseln der Stabilität ist die globale Stochastizität der Trajektorien unverkennbar.

In Abbildung 27 ist schließlich das Aufbrechen nahezu aller Tori in Regionen globaler Stochastizität für  $T_o = 0, 1$  gezeigt. Interessanterweise entspricht die Schwelle für die dramatische Zunahme der ergodisch erfüllten Phasenraumuntervolumina in etwa der experimentell gesicherten Tiefe der magnetischen Falle. Da von der reinen Quadrupolnäherung (7) ausgegangen wurde, kann das Aufbrechen der Tori nicht durch eine Potentialschwelle motiviert werden.

Vom Standpunkt der Störungstheorie aus wird in Abschnitt 4.3. eine quantitative Diskussion des Ausbrechens stochastischer Regionen geführt werden, doch zunächst soll noch auf den Sonderfall verschwindender Gravitation eingegangen werden.

#### 4.2.4. Vernachlässigung der Gravitation

Für steile Gradienten, das heißt für  $\zeta \rightarrow 0$ , könnte aufgrund des konvergenten asymptotischen Verhaltens der Bahnfrequenzen (21) beziehungsweise (26) oder der Lage des Minimums des effektiven Potentials (16) angenommen werden, daß in solchen Fällen eine Vernachlässigung des gravitativen Termes *mgz* des Potentials gerechtfertigt wäre. In der Literatur wird diese Näherung stets vollzogen (vergleiche hierzu auch die Einleitung), so daß an dieser Stelle ein Vergleich mit dem die Gravitation berücksichtigenden Modelles sinnvoll erscheint.

In diesem Fall lautet die HAMILTONfunktion des Problemes einfach

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{2}\mu_{eff}B\sqrt{x^2 + y^2 + 4z^2}.$$
(35)

In sphärischen Parabolidkoordinaten  $\{u, v, \phi\}$  (definiert wie in [SPIEGEL 59] wird die Auswirkung der vorliegenden Spiegelsymmetrie bezüglich der x-y-Ebene besonders transparent, wie an der vollständigen Gleichberechtigung der beiden nichtzyklischen Veränderlichen u und v zu erkennen ist:

$$H = \frac{1}{2m} \left( \frac{p_u^2}{u^2 + v^2} + \frac{p_v^2}{u^2 + v^2} + \frac{p_\phi^2}{u^2 v^2} \right) + \frac{1}{2} \mu_{eff} B \sqrt{u^4 + v^4 - u^2 v^2} .$$
(36)

Die HAMILTONfunktion (36) ist in diesem Falle neben einer Translationsinvarianz in t und  $\phi$ auch invariant gegenüber der - allerdings nicht von einem Parameter stetig abhängenden -Symmetrietransformation  $u \rightarrow v$  und  $v \rightarrow u$ . Nach dem Theorem von E. NOETHER muß mit der letzten Symmetrie zwar keine zusätzliche Erhaltungsgröße verbunden sein [SCHECK 90], dennoch führt diese Symmetrie zu qualitativ fundamental unterschiedlichen Trajektorien gegenüber dem realistischerem System (12). Hierzu wurde - wie in 4.2.3. - für das nun vorliegende dynamische System ohne gravitativen Term für die Parameter C=80 und  $\rho_o = 100\mu m$  und für verschiedene Energien numerisch PONNCARÉschnitte mit einer Ebene durch den Ursprung und der Bedingung  $P_z = 0$  angefertigt. Abbildung 28 zeigt die Resultate für  $T_o = 0, 1$ , die mit der Abbildung 27 korrespondieren.



Abbildung 28: POINCARÉschnitte für die Quadrupolfalle ohne Berücksichtigung der Gravitation für Energien, die einer Temperatur von T=3mK entsprechen. Gegenüber Abbildung 27, die die entsprechenden Resultate für  $g=9,81 \text{ m/s}^2$  zeigt, treten fundamentale qualitative Unterschiede auf: es fehlen völlig die großen ergodischen Zonen innerhalb des zugelassenen Phasenraumvolumens und stochastische Regionen sind nur als dünne Bänder innerhalb der regulären KAM-Tori zu finden.

Die Ursache für die Unterschiede kann in einer erheblich stärkeren Unempfindlichkeit gegenüber Aufbrucherscheinungen der KAM-Tori im nichtgravitativen System gesehen werden. Die entstandenen POINCAREschnittbilder lassen sich selbst bei hohen Energien, bei denen die KAM-Tori des gravitativen Systems schon längst lateral aufgebrochen sind, noch auf die ungestörten Tori zurückführen.

Diese Resultate demonstrieren, daß die in der Literatur vollzogene Vernachlässigung der Gravitation fragwürdig erscheinen muß und daß eine exakte Behandlung des dynamischen Systems in Hinblick auf die Ergodizität der Trajektorien notwendig ist. Zur Illustration des oben Gesagten zeigt Abbildung 29 eine Reihe von numerisch gewonnenen POINCARÉschnitten, bei denen die gravitative Ankopplung schrittweise verringert wurde.



Abbildung 29: Erklärung im Haupttext.

Hierbei wurde C=80,  $T_o = 0$ , 1 und  $\rho_o = 100 \mu m$  wie in den vorherigen numerischen Beispielen gewählt. Die Anfangslage wurde durch das Minimum (16) bestimmt und die Anfangsgeschwindigkeiten betrugen rund 37 cm/s beziehungsweise 25 cm/s in radialer beziehungsweise vertikaler Richtung. Variiert wurde dabei die gravitative Beschleunigung g, die Werte von 9.81, 5.0, 1.0 und 0.0 m/s<sup>2</sup> annahm.

## 4.3. Frequenzverhältnisse und Stabilität

Im Zusammenhang mit der Erwähnung globaler Eigenschaften von autonomen HAMILTONSCHEN Systemen wurde bereits auf die Bedeutung der Frequenzverhältnisse der Normalschwingungen für Fragen der Stabilität der Trajektorien gegenüber Störungen eingegangen. Diese entsprechen dabei den Winkelfrequenzen der Wirkungs- und Winkelvariablen der allgemeinen Theorie, so daß für eine weitere Diskussion auf den Formalismus der kanonischen Störungsrechnung zurückgegriffen werden kann. Wie die vorangegangenen numerischen Ergebnisse zeigen, werden die Tori des vollständig integrablen Systems (31) mit wachsender Energie durch die höheren Terme der Entwicklung (20) zunächst deformiert und können später sogar global aufbrechen. In diesem Abschnitt soll dieses Verhalten vom Standpunkt der Winkelfrequenzen aus untersucht werden. Insbesondere wird der Frage nach dem Auftreten von stochastischen Zonen um "besonders rationale" Frequenzverhältnisse nachgegangen werden, die unter Umständen einen experimentell beobachtbaren Einfluß auf die Speicherzeiten eines Ensembles in der magnetischen Falle haben könnten.

#### 4.3.1. Kanonische Störungsrechnung

Das vorliegende autonome HAMILTONSche System lasse sich als Summe eines nur noch von den Wirkungsvariablen  $J_k$  abhängigen integrablen Anteil  $H_o(J_k)$  und einer kleinen nichtintegrablen Störung  $\varepsilon H_1(J_k, \omega_k)$  schreiben

$$H(J_k, \omega_k) = H_o(J_k) + \varepsilon H_1(J_k, \omega_k), \tag{37}$$

wobei  $\varepsilon$  ein geeignet gewählter Störparameter sei. Die der kanonischen Störungstheorie zugrundeliegende Idee ist es nun, die Wirkungs- und Winkelvariablen in einer Potenzreihe nach dem Störparameter  $\varepsilon$  zu entwicklen

$$\omega_{k} = \omega_{k}^{(0)} + \varepsilon \omega_{k}^{(1)} + \varepsilon^{2} \omega_{k}^{(2)} + \dots$$

$$J_{k} = J_{k}^{(0)} + \varepsilon J_{k}^{(1)} + \varepsilon^{2} J_{k}^{(2)} + \dots$$
(38)

und die Reihenentwicklungen (38) in (37) einzusetzen. Für jede Potenz des Störparameters ergeben sich sukzessiv neue kanonische Gleichungen, die in unterster Ordung explizit lauten

$$\frac{dJ_{k}^{(0)}}{dt} = -\frac{\partial H_{o}\left(J_{l}^{(0)}\right)}{\partial \omega_{k}^{(0)}} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{d\omega_{k}^{(0)}}{dt} = \frac{\partial H_{o}\left(J_{l}^{(0)}\right)}{\partial J_{k}^{(0)}} = \mathbf{v}_{k}^{(0)} = const. \tag{39.a}$$
$$\frac{dJ_{k}^{(1)}}{dt} = -\frac{\partial H_{1}\left(J_{l}^{(0)}, \omega_{l}^{(0)}\right)}{\partial \omega_{k}^{(0)}} \quad \text{und} \quad \frac{d\omega_{k}^{(1)}}{dt} = \frac{\partial H_{1}\left(J_{l}^{(0)}, \omega_{l}^{(0)}\right)}{\partial J_{k}^{(0)}} \quad . \tag{39.b}$$

Ein wichtiger Fall tritt ein, wenn die Störung periodisch in den Winkelvariablen ist. Dann kann  $H_1$  in einer FOURIERreihe

$$H_1\left(J_k^{(0)}, \omega_k^{(0)}\right) = \sum_{m_1, \dots, m_f} C_{m_1 \dots m_f}\left(J_k^{(0)}\right) \exp\left[i\sum_{l=1}^f m_l \omega_l^{(0)}\right]$$
(40)

ausgedrückt werden, die unter Ausnutzung von (39.a) übergeht in

$$H_1\left(J_k^{(0)}, \mathbf{v}_k^{(0)}, t\right) = \sum_{m_1, \dots, m_f} C_{m_1 \dots m_f}\left(J_k^{(0)}\right) \exp\left[i \sum_{l=1}^f m_l\left(\mathbf{v}_l^{(0)}t + \delta_l\right)\right].$$
(41)

Damit lassen sich die kanonischen Gleichungen (39) integrieren und man erhält aus (41) Summanden mit der Zeitabhängigkeit

$$\frac{1}{\sum_{l} m_{l} \mathbf{v}_{l}^{(0)}} \exp\left[i \sum_{l} m_{l} \mathbf{v}_{l}^{(0)} t\right].$$
(42)

Für rationale Frequenzverhältnisse  $v_p^{(0)}/v_q^{(0)}$  tritt das Problem der verschwindenden Nenner auf, wie aus (42) unmittelbar ersichtlich ist. Mit der Zeit *t* nehmen die Störungen kontinuierlich zu, so daß man auch von *säkularen Störungen* spricht. Dies führt dazu, daß Störungsreihen im allgemeinen *semikonvergenten* Charakter haben, das heißt sie gestatten nur für begrenzte Zeiträume - wenn überhaupt - eine näherungsweise erfüllte Beschreibung.

Die gefundenen Resultate vereinfachen sich für den Fall irrationaler Frequenzverhältnisse aufgrund der Äquivalenz von Zeit- und Ensemblemittel

$$\lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\int_{0}^{1}L(\omega_{k}(t))dt = \frac{1}{(2\pi)^{f}}\int_{Torus}^{\cdots}d\omega_{1}...d\omega_{f}L(\omega_{k}) := \langle L \rangle$$
(43)

auf den Tori im Phasenraum, so daß man aus (39.b) die Näherung

$$\frac{dJ_k^{(1)}}{dt} = 0 \text{ und } \frac{d\omega_k^{(1)}}{dt} = \frac{\partial}{\partial J_k^{(0)}} \left\langle H_1(J_l^{(0)}) \right\rangle = v_k^{(1)} = const.$$
(44)

erhält.

Für die störungstheoretische Behandlung des dynamischen Problemes (20) ist die Beschränkung auf irrationale Normalfrequenzverhältnisse aufgrund der damit verbundenen Vereinfachungen sinnvoll. In diesem Fall reduzieren die Beziehungen (43) und (44) die Reihenentwicklung des Störpotentials

$$H_{1}(\bar{\rho}, \bar{z}) = \sum_{s+t\geq 3}^{\infty} \frac{1}{s!t!} \left( \frac{\partial^{s+t} V_{eff}}{\partial \rho^{s} \partial z^{t}} \right)_{(\rho_{m}, z_{m})} \bar{\rho}^{s} \bar{z}^{t}$$
$$= \sum_{s+t\geq 3} \frac{1}{s!t!} \left( \frac{\partial^{s+t} V_{eff}}{\partial \rho^{s} \partial z^{t}} \right)_{(\rho_{m}, z_{m})} \frac{1}{\varpi_{o}^{2(s+t)}} (\Delta_{11}\theta_{1} + \Delta_{12}\theta_{2})^{s} (\Delta_{21}\theta_{1} + \Delta_{22}\theta_{2})^{t} (45)$$

auf die Summanden, die sowohl in  $\theta_1$  als auch in  $\theta_2$  gerade sind. In unterster Ordnung erhält man daher aus (45) aufgrund der Transformation in Wirkungs- und Winkelvariablen

$$\theta_k = \sqrt{\frac{2J_k}{\Omega_k}} \sin\left[\omega_k\right] \tag{46}$$

die störungstheoretisch relevante HAMILTONfunktion zu

$$H(J_k, \omega_k) = \Omega_1 J_1 + \Omega_2 J_2$$

$$= \varepsilon \left( \frac{4J_1^2}{\Omega_1^2} C_1 \sin^4[\omega_1] + \frac{4J_2^2}{\Omega_2^2} C_2 \sin^4[\omega_2] + \frac{4J_1 J_2}{\Omega_1 \Omega_2} C_{12} \sin^2[\omega_1] \sin^2[\omega_2] \right),$$
(47)

wobei sich die Koeffizienten  $C_1$ ,  $C_2$  und  $C_{12}$  algebraisch aus den partiellen Ableitungen vierter Ordnung an der Stelle (16) des effektiven Potentials und den Matrixelementen (25) ergeben.

Ohne auf die unübersichtlichen Ausdrücke der Koeffizienten  $C_i$  explizit einzugehen, sei auf die Grenzen der grundsätzlichen Anwendbarkeit der Störungstheorie eingegangen. Eine einfache Abschätzung der Grenze folgt aus der Bedingung (34), die die Kleinheit aller nichtbilinearen Terme der TAYLORreihenentwicklung des effektiven Potentials gegenüber den integrablen bilinearen Termen fordert. In guter Näherung ergibt sich daher nach Rückgriff auf die charakteristische Frequenz  $\varpi_o^2 = \left(\frac{C}{2\rho_o}\right)$  sowie des charakteristischen Radius  $\rho_o = \left(\frac{2P_{\phi}^2}{m^2C}\right)^{1/3}$  und nach Vernachlässigung von Termen in der Größenordnung von Eins die

notwendige Bedingung

$$H_o \approx \frac{1}{\rho_o} R^2 >> \frac{1}{\rho_o^2} R^3 + \frac{1}{\rho_o^3} R^4 + \frac{1}{\rho_o^4} R^5 + \dots \approx H_1 \quad , \tag{49}$$

wobei die maximale Entfernung

$$R^2 = \rho_{\max}^2 + z_{\max}^2$$
(50)

eingeführt worden ist. Aus (49) resultiert daher mit Hilfe der geometrischen Reihe eine majorisierende Abschätzung zu

$$2 \gg \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{R}{\rho_o}\right)^n = \frac{1}{1 - (R/\rho_o)}$$
(51)

Schätzt man nun die maximale Entfernung R mit Hilfe der Beziehung

$$R \approx \sqrt{\frac{kT}{m}} \frac{1}{\varpi_o}$$
(52)

ab, so erhält man schließlich die für die Anwendbarkeit der Störungstheorie notwendige Bedingung

$$1 >> 4\sqrt{\frac{kT}{m}} \cdot \varpi_o \cdot \frac{\zeta}{g}.$$
(53)

Wie auch intuitiv zu erwarten war, ist die störungstheoretische Behandlung des nichtlinearen Systems (20) nur im Grenzfall kleiner Temperaturen T und steiler Gradienten möglich. Daneben darf die charakteristische Frequenz nicht zu groß sein, was für hohe Drehimpulsanregungen immer erfüllt ist. (53) kann auch für eine Aussage über die zu erwartende Ergodizität eines in einer magnetischen Quadrupolfalle gefangenen Ensembles

herangezogen werden. Ist eine störungstheoretische Behandlung der Dynamik nicht möglich, so muß mit ergodischen Bewegungen im Raum der generalisierten Koordinaten ( $\bar{\rho}, \bar{z}$ ) gerechnet werden. Umgekehrt weist die Erfüllung von (53) auf hohe Auffindwahrscheinlichkeiten für regulären Trajektorien hin.

In Abbildung 30 sind zur Verdeutlichung für vier repräsentative Temperaturen die rechte Seite der Ungleichung (53) graphisch dargestellt. Dabei wurde  $m = 2,2 \ 10^{-25}$  kg als Caesiummasse und typische charakteristische Frequenzen  $\varpi_o$  von 0 bis 500 Hz beziehungsweise 10 kHz angenommen.



Abbildung 30: Illustration der Grenzen der Störungstheorie. Dargestellt sind die rechten Seiten der Ungleichung (53) für die im Hauptext beschriebenen Parameter m und T sowie der Argumente  $\varpi_o$  und  $\zeta$ . Das Erreichen des Plateauwertes von Eins kann als Unmöglichkeit eines störungstheoretischen Ansatzes interpretiert werden; umgekehrt deuten Bereiche mit Funktionswerten um Null auf vorwiegend reguläre Trajektorien hin.

Interessant ist in diesem Zusammenhang ein Vergleich mit den Abbildungen 25 bis 27. Die dort gefundenen Resultate lassen sich anhand der Abbildung 30 leicht motivieren. Für niedrige Temperaturen (Abbildung 25) führt das oben gewählte  $\zeta = 0, 125$  praktisch im gesamten Variabilitätsbereich der charakteristischen Frequenz zu einer Erfüllung der Bedingung (53), wie die untere rechte Graphik der Abbildung 30 zeigt. Lediglich störungstheoretisch nicht direkt berücksichtigbare Resonanzerscheinungen führen zu nichtregulären Trajektorien. Umgekehrt zeigt die obere linke Graphik der Abbildung 30, daß für nahezu alle Trajektorien die Bedingung (53) schwer verletzt ist und von daher mit stochastischen Trajektorien in lateraler Verbreitung gerechnet werden muß.

#### 4.3.2. Kommensurabilität und Stabilität.

Das Verhältnis der ungestörten Normalschwingungen

$$\frac{\Omega_1}{\Omega_2} = \sqrt{\frac{(7+\zeta^2) + \sqrt{(1-\zeta^2)^2 + 16\zeta^2}}{(7+\zeta^2) - \sqrt{(1-\zeta^2)^2 + 16\zeta^2}}}$$
(54)

ist - wie bereits in Kapitel 3.4 betont wurde - eine universelle Eigenschaft der gefangenen Atome. Stehen die Normalschwingungen in einem kommensurablen Verhältnis zueinander, so ist eine störungstheoretische Behandlung aufgrund des Problemes der verschwindenden Nenner nicht möglich. Auch zeigt die Erfahrung mit anderen dynamischen Systemen, daß sich bei Vorliegen von "sehr kommensurablen" Verhältnissen, das heißt mit kleinen Zählern und Nennern, Zonen erhöhter Instabilität ausbilden können<sup>1</sup>. In Tabelle 1 sind in diesem Zusammenhang für sehr kommensurable Frequenzverhältnisse die entsprechenden Werte von  $\zeta = g/C$  beziehungsweise des Gradienten *B* aufgetragen.

$\Omega_1$ : $\Omega_2$	ζ	$B [G/cm]^1$		
5:3	0.92302	33.6		
8:5	0.84121	36.8		
3:2	0.71102	43.6		
7:5	0.56930	54. <del>5</del> *		
4:3	0.46570	66.6		
9:7	0.38499	80.5		
5:4	0.31845	97.2		
6:5	0.20898	148.3		
7:6	0.10335	300.0		
<sup>1</sup> für Caesium im Zustand [ $F=3, m_F=3>$				

Tabelle 1: Kommensurable Frequenzverhältnisse und entsprechende Gradienten

Um diesen Sachverhalt weiter zu beleuchten, wurden numerische Rechnungen durchgeführt, die die Stabilität der Trajektorien in Abhängigkeit des Verhältnisses (54) - und damit letztendlich vom äußeren Gradienten *B* des Quadrupolfeldes - betrafen. Hierbei wurde

Vergleiche hierzu auch die Fußnoten auf den Seiten 17 und 23.

48

1

für den stets festen Drehimpulsparameter  $(P_{o}/m) = 10^{-5}$  der Gradient *B* beziehungsweise  $\zeta$  schrittweise variiert und für jeden gewählten Wert dieser Größe für verschiedene Anfangswerte der Energie die Stabilität der resultierenden Trajektorien anhand von numerisch ermittelten POINCARÉschnitten untersucht. Die Anfangslage war dabei der besseren Vergleichbarkeit der Ergebnisse wegen stets durch das Minimum (16) gegeben und die Anfangswerte der Geschwindigkeiten wurden innerhalb der vorgegebenen Energien variiert.

Zu jedem Wert  $\zeta$  brach in Abhängigkeit der gewählten Anfangswerte ab bestimmten kritischen Energien T<sub>krit</sub> das Chaos aus. Diese wurden dann gemittelt und der resultierende Wert als T<sub>krit</sub>( $\zeta$ ) als Diagramm in Abbildung 31 aufgetragen.



Abbildung 28: Die gemittelte kritische Energie T ab der die chaotischen Bewegungen dominieren in Abhängigkeit des Gradienten. Deutlich ist der starke Abfall von T in den Zonen, denen kommensurable Verhältnisse gemäß Tabelle 1 entsprechen, sowie die für steilere Gradienten überdeutlich hohe Schwelle für ein chaotisches Aufbrechen der Trajektorien zu erkennen.

In den numerischen Simulationen konnte also ein direkter Einfluß der Frequenzverhältnisse auf die Stabilität der Trajektorien nachgewiesen werden, der in seiner Phänomenologie im wesentlichen dem KAM-Theorem folgt. Dies ist um so erstaunlicher, als daß die nichtintegrable Reihe (45) für die gewählten Parameter im Sinne der Störungstheorie eine überstarke Störung darstellt und desweiteren der integrable Anteil der HAMILTONfunktion intrinsisch entartet ist, das heißt die Bedingung (19) verletzt. Streng genommen ist daher die hervorragende Übereinstimmung mit der Theorie kein notwendiges, wenn aber auch ein besonders schönes Resultat<sup>2</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Dennoch kann auch in den meisten dynamischen Problemen, die mathematisch gesehen vom KAM-Theorem nicht erfaßt werden, in der Regel ein dadurch beschriebenes Verhalten bemerkt werden [Lichtenberg 82].

#### 4.4. Verteilungsfunktionen

Vom experimentellen Standpunkt aus ist man häufig an der Angabe von Verteilungsfunktionen für ein gespeichertes Ensemble in der magnetischen Falle interessiert. Diese erhält man für nicht zu hohe Dichten in guter Näherung aus der klassischen Beschreibung gefangener einzelner Atome, wie sie in den vorhergehenden Abschnitten entwickelt wurde.

Wird die magnetische Falle durch instantanes Abschalten der LASER aus der magnetooptischen Falle geladen, kann die kanonische Verteilungsfunktion der z-Komponente des Drehimpulses leicht angegeben werden. Ist das Ensemble der magnetooptischen Falle in Impuls und Ort GAUBverteilt, so erhält man - wie die Rechnung im Anhang A.2. zeigt - für den Impuls  $P_{\phi}$  die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$w(P_{\phi}) = \frac{1}{\sqrt{2m} \, kT\gamma} \exp\left[-\frac{1}{\sqrt{2m} \, kT\gamma} P_{\phi}\right] \qquad \text{fur} \qquad P_{\phi} \ge 0 \tag{54}$$

beziehungsweise für die daraus resultierende z-Komponente des Minimums (16) aus (A.8)

$$w(z') = const. \cdot \sqrt{z'} \exp\left[-\frac{(z')^{3/2}}{kT\gamma}(1-\zeta^2)\sqrt{\frac{2\mu_{eff}B}{\zeta^3}}\right], \text{ für } 0 \le z' = -z.$$
(55)

wobei  $\gamma$  proportional zur anfänglichen Standardabweichung des Ensembles in der horizontalen Ebene der magnetooptischen Falle ist,  $\zeta = g/C = mg/\mu_{eff}B$  das Verhältnis der Beschleunigungen und *T* die absolute Temperatur bezeichnet.

Geht man nun für hinreichend niedrige Temperaturen des Ensembles davon aus, daß das die Trajektorien der Atome im wesentlichen durch den integrablen Teil der HAMILTONfunktion (37) bestimmt werden, so kann mithilfe der Beziehung (16) für das Minimum des effektiven Potentials die Ortsverteilung der gefangenen Atome bestimmt werden. Dabei wird vorausgesetzt, daß die Bewegung der Atome im Mittel zu einer GAUßförmigen Verschmierung der Atome um ihre jeweiligen effektiven Potentialminima führt. Für die Ortsverteilung in vertikaler Richtung erhält man daher ein Faltungsintegral

$$g(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(u)h(z-u)du$$
(56)

mit der Verteilungsfunktion der z-Komponente des Potentialminimums (16)

$$f(u) = \begin{cases} c \cdot \sqrt{u} \exp\left[\alpha \cdot u^{3/2}\right], & u \ge 0\\ 0, & sonst \end{cases},$$
(57)

die direkt aus (16) und (55) mit den entsprechenden Konstanten  $\alpha$  und c folgt, sowie der phänomenologisch eingeführten Punktverschmierungsfunktion

$$h(z) = \exp\left[-\frac{z^2}{4\beta}\right], \quad \text{mit } 0 < \beta = const.$$
(58)

Die Ausführung der nicht analytisch lösbaren Integration (56) führt dann auf die Ortsverteilungsfunktion in vertikaler Richtung

In Abbildung 31 ist auf Grundlage von (56-58) sowie der entsprechenden horizontalen Verteilungsfunktion das Fluoreszenzspektrums eines Ensembles, das den oben ausgeführten Bedingungen unterliegt, rechnerisch modelliert. Die dreidimensionale Graphik entspräche in diesem Fall der von einer CCD-Kamera aufgenommenen Intensität des Fluoreszenzlichtes in Abhängigkeit der vertikalen beziehungsweise der horizontalen Koordinate. Hierbei wird angenommen, daß die einmalige Einstrahlung eines wenig intensiven Probe-LASERs keinerlei Auswirkung auf die mittlere Ortsverteilung des Ensembles in der Falle besitzt.



Abbildung 31: Links: die Ortsverteilungsfunktion des Ensembles in vertikaler Richtung gemäß (56-58). Die normierte Wahrscheinlichkeit ist gegen die z-Koordinate aufgetragen. Rechts: modelliertes Intensitätsprofil. Wie zu erwarten ist in horizontaler Richtung ein GAUBförmiges Profil zu erkennen.

Man erkennt deutlich, daß die atomare Wolke aufgrund der Gravitation eine Asymmetrie aufweist und nach unten "durchhängt", was in der Arbeitsgruppe experimentell bestätigt worden ist [Höpe 94]. Würde der Gradient erhöht werden und eine starke Lokalisierung der Wolke um den Ursprung bewirken, entstünde im Grenzfall ein gaußförmiges Profil. Mißt man die Abnahme des Intensitätsprofils für z < 0, so kann numerisch eine charakteristische Funktion

$$w(u) = const \cdot \sqrt{u} \cdot \exp\left[-\frac{u^{3/2}}{kT\gamma}f(\mu_{eff}, B, m)\right]$$
(59)

angepaßt werden, woraus sich die Temperatur bestimmen läßt.

Es sollte abschließend bemerkt werden, daß diese Ausführungen für Ensemble gelten, die ihre Drehimpulsverteilung noch aus der magnetooptischen Falle übernommen haben. Dies ist dann der Fall, wenn die Teilchen noch nicht genügend Zeit gehabt hatten, um auf den neuen Gleichgewichtszustand in der magnetischen Falle durch Stoßprozesse zu relaxieren.

# Kapitel 5

# Quantenmechanische Behandlung

Für sehr niedrige Temperaturen wird eine Quantisierung der Bewegung zu erwarten sein [BERGEMAN 89]. Die dort ausgeführte Diskussion zeigt, daß im Grenzfall niedrigster Energien der Atome mit einer dem harmonischen Oszillator ähnlichen Quantisierung zu rechnen ist. Vom Standpunkt des in dieser Arbeit gewählten Zuganges erhält man aus dem Konzept der Normalkoordinaten auf einfachem Wege näherungsweise die Wellenfunktionen und das Energiespektrum der Atome. Für experimentell realisierbare Temperaturen kann umgekehrt der in den vorherigen Kapiteln gewählte klassische Ansatz gerechtfertigt werden.

### 5.1. Stationäre Schrödingergleichung

Die stationäre Schrödingergleichung für ein zylindersymmetrisches Potentialproblem lautet in der Ortsdarstellung [FLügge 65]

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(\rho, z)]\right)\Psi(\rho, z, \phi) = 0.$$
(60)

Der Separationsansatz

$$\Psi(\rho, z, \phi) = \chi(\phi) F(\rho, z) \tag{61}$$

führt hierbei auf die beiden Differentialgleichungen

$$\frac{\rho^2}{F} \left( \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 F}{\partial z^2} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V] \rho^2 = \lambda \qquad (62)$$

$$\frac{1}{\chi} \frac{\partial^2 \chi}{\partial \phi^2} = -\lambda ,$$

wobei die Lösung der Azimutalgleichung

$$\chi(\phi) = A \sin\left[\sqrt{\lambda}\phi\right] + B \cos\left[\sqrt{\lambda}\phi\right]$$
  
mit  $l = \sqrt{\lambda} = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$  (63)

aufgrund der Eindeutigkeit der Wellenfunktion auf die Quantisierung der z-Komponente des Drehimpulses führt. Mit dem Ansatz

$$F(\rho, z) = \frac{1}{\sqrt{\rho}} f(\rho, z)$$

erhält man daraufhin aus (62) eine partielle Differentialgleichung in der nur noch Ableitungen zweiter Ordnung auftreten zu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] + V(\rho, z) + \frac{1}{2m}\frac{\hbar^2\left(l^2 - \frac{1}{4}\right)}{\rho^2}\right]f = Ef .$$
(64)

Für das Quadrupolproblem in der adiabatischen Näherung unter Berücksichtigung der Gravitation ergibt sich aus (64) im HEISENBERGbild der HAMILTONOperator in Analogie zur klassischen HAMILTONfunktion zu

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}}_{\rho}^{2} + \hat{\mathbf{P}}_{z}^{2} \right) + \frac{1}{2} \mu_{eff} B \sqrt{\hat{\rho}^{2} + 4\hat{\mathbf{z}}^{2}} + mg\hat{\mathbf{z}} + \frac{1}{2m} \frac{\hbar^{2} \left( l^{2} - \frac{1}{4} \right)}{\hat{\rho}^{2}} , \qquad (65)$$

wobei die klassischen Frequenzen und Beziehungen unter der Ersetzung

$$P_{\phi}^{2} \rightarrow \hbar^{2} \left( l^{2} - \frac{1}{4} \right) \tag{66}$$

direkt übernommen werden können<sup>1</sup>. Insbesondere gestaltet sich dabei die Integration der SCHRÖDINGERgleichung in der harmonischen Näherung trivial. Hierbei entwickelt man das Quadrupolpotential wie in der klassischen Näherung in einer TAYLORreihe um das Minimum des effektiven Potentials und kann dann das Energiespektrum in unterster Ordnung aus den Eigenwerten des HAMILTONOPERATORS

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}}_{1}^{2} + \hat{\mathbf{P}}_{2}^{2} \right) + \frac{1}{2} m \left( \Omega(l)_{1}^{2} \hat{\mathbf{Q}}_{1}^{2} + \Omega(l)_{2}^{2} \hat{\mathbf{Q}}_{2}^{2} \right) + V_{eff}(\rho_{m}, z_{m})(l)$$
(67)

bestimmen. Die Argumente der Wellenfunktion werden dabei durch die entsprechenden linearen Transformationen von den Normalkoordinaten wieder zu den Ortskoordinaten ( $\rho, z$ ) im Konfigurationsraum zurücktransformiert; der Term  $V_{eff}(\rho_m, z_m)(l)$  drückt dabei den von der Drehbewegung resultierenden kinetischen Energieanteil aus und wird mit wachsendem lgrößer.

In der harmonischen Näherung ergibt sich daher das Energiespektrum des Atoms in der Besetzungszahldarstellung aus (67) unmittelbar zu [LANDAU 79]

$$E_{n_1n_2l} = \sum_{k=1}^{2} \frac{\varepsilon_k}{\left(l^2 - 1/4\right)^{1/6}} \left(n_k + \frac{1}{2}\right) + \varepsilon_o \left(l^2 - 1/4\right)^{1/3} , \qquad (68)$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Bei dieser Ersetzung der Differentialoperatoren durch die Impulsoperatoren im HEISENBERGbild ist eine gewisse Vorsicht angebracht: die Wellenfunktion f muß am Ursprung nämlich verschwinden, da ansonsten ein zusätzlicher deltaförmiger Term in der Schröddingergleichung auftauchen müßte. Dieser Sachverhalt wird von der suggestiven Schreibweise des HAMILTONOPERators (65) verdeckt, doch muß für das Folgende darauf aus offensichtlichen Gründen nicht mehr eingegangen werden, da mit Normalkoordinaten gerechnet wird.

wobei die Quantenzahlen  $n_k$  wie gewohnt aus  $\{0,1,2,...\}$  stammen und l Element der Menge der ganzen Zahlen ausschließlich der Null ist. Der Vollständigkeit seien die analytischen Ausdrücke der charakteristischen Energien  $\varepsilon_k$  noch angegeben:

$$\varepsilon_{\frac{1}{2}} = \left(\frac{1}{2}\right)^{2/3} \hbar^{2/3} m^{1/3} g^{2/3} \left(\frac{1}{\zeta}\right)^{2/3} f_{\pm}(\zeta)$$

$$\varepsilon_{o} = 3 \left(\frac{1}{2}\right)^{5/3} \hbar^{2/3} m^{1/3} g^{2/3} \zeta^{2/3} (1-\zeta^{2})^{1/3} ,$$
(69.b)

wobei die nur vom Verhältnis der Beschleunigungen abhängenden Funktionen  $f_{\pm}(\zeta)$  in Abbildung 11 als Verhältniss  $\Omega_k/\varpi_o$  aufgetragen sind und aus (26.b) unmittelbar folgen. Graphisch ergeben sich für die charakteristischen Energien die in Abbildung 32 gezeigten Verläufe in Abhängigkeit des Verhältnisses  $\zeta$ .



Abbildung 32: Verlauf der charakteristischen Energien (69) in Abhängigkeit des Verhältnisses der Beschleunigungen. bei Wahl von  $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ . Man beachte, daß für den Ansatz g = 0 bei nichtverschwindenden Gradienten die Divergenz der charakteristischen Energien für  $\zeta \rightarrow 0$  behoben werden.

### 5.2. Diskussion der harmonischen Näherung

Die adiabatische Näherung ist - wie in Kapitel 2 ausführlich dargelegt - nur für nicht zu kleine Entfernungen vom Ursprung gültig. In einer ersten Näherung können die nichtadiabatischen Übergänge durch einen exponentiell abfallenden zusätzlichen phänomenologischen Faktor in der Wellenfunktion berücksichtigt werden, der vom Gradienten und der Drehimpulszahl *l* abhängt. Man erhält daher in guter Näherung Wellenfunktionen derart

$$\Psi(\rho, z, \phi, t) = \chi(\phi) \frac{1}{\sqrt{\rho}} f(\rho, z) \cdot \exp\left[-i\frac{E}{\hbar}t\right] \cdot \exp\left[-\kappa(l, \zeta)t\right],$$

wobei sich die Energie und die stationäre Wellenfunktionen in der harmonischen Näherung leicht angeben lassen<sup>2</sup>.

An dieser Stelle soll auf die Gültigkeit der harmonischen Näherung eingegangen werden. Für kleine Quantenzahlen  $n_k$  ist die Annäherung des effektiven Potentials durch einen einfachen bilinearen Ausdruck sicherlich dann gerechtfertigt, wenn der charakteristische Radius  $\rho_o(l)$  hinreichen weit von der nichtadiabatischen Verlustzone entfernt ist. Die hierfür erforderlichen minimalen Drehimpulsquantenzahlen l liegen in der Größenordnung von 100 bis 1000, wie die Tabelle 2 zeigt.

l	$\varpi_o$ in [Hz]	$\rho_o$ in [ $\mu m$ ]	$\varepsilon_o \cdot (l^2 - 1/4)^{1/3}/kHz$
1	13.700	0.17	1.4
10	6.075	0.9	7.2
100	2.806	4	32
1.000	1.302	19	150
5.000	761	56	440
10.000	605	90	700

Tabelle 2: Charakteristische Größen für verschiedene Drehimpulszahlen bei Wahl von  $\zeta = 0, 15$ , was für das oben betrachtete Caesium einem Gradienten von 200 G/cm entspräche.

Man entnimmt dem bisher Ausgeführten, daß der klassische Ansatz der Kapitel 2 bis 4 durchaus gerechtfertigt war, da die entsprechenden Quantenzahlen alle in Bereichen lagen, bei denen aufgrund des Korrespondenzprinzips die Quantenmechanik in die klassische Mechanik einmündet. Für die Dynamik der Atome bei tiefsten Temperaturen, die experimentell noch nicht realisierbar sind, muß allerdings mit einem verstärkten Auftreten typisch quantenmechanischer Gesetzmäßigkeiten gerechnet werden. Gewissermaßen im Vorgriff auf experimentelle Ergebnisse sind daher in Tabelle 3 die zugehörigen Energieniveaus dargestellt, die sich aus der Beziehung (68) näherungsweise ergeben.

Wie zu erwarten, gehen für hohe Drehimpulszahlen l die Energieniveaus der harmonischen Potentiale in eine quasikontinuierliche Verteilung über, zwischen denen unter anderem auch aufgrund von Photonenrückstoßen Übergange möglich sind. Für Caesium liegt die Rückstoßenergie für optische Übergänge bei rund 2 kHz, was bedeutet, daß nur für sehr niedrige Drehimpulszahlen l die Energieniveauabstände der harmonischen Potentiale die Emissions- und Absorptionsprozesse dominant beeinflussen werden. Für l in der Größenordnung um 10 werden dann durch diese Prozesse Übergänge  $|n_1n_2l\rangle \rightarrow |n_1n_2l'\rangle$  zu verschiedenen Drehimpulszuständen wahrscheinlicher.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Tatsächlich ergeben sich in der harmonischen Näherung die bekannten GAUB-HERMITE-Polynome, die man für die Konstruktion der die Zeitentwicklung korrekt beschreibenden kohärenten Zustände benützen kann. In diesem Falle erhielte man oszillierende beziehungsweise umlaufende Wellenpakete in Analogie zu den Teilchentrajektorien der klassischen Physik.



Tabelle 3: Energieniveaus der Atome für tiefste Temperaturen. Es werden die untersten Oszillatoranregungen für die in Tabelle 2 aufgeführten Größen gezeigt. Die Energie wird dabei auf die Grundzustandsenergie skaliert, zu der jeweils noch die letzte Spalte von Tabelle 2 addiert werden müßte.

## 5.3. Quantenstatistik und Thermodynamik

Für ein hinreichend verdünntes Gas, daß die Bedingung  $\lambda^3 >> V/N$  mit der DEBROGLIE-Wellenlänge  $\lambda$  und dem Fallenvolumen V sowie der Teilchenzahl N erfüllt, kann in sehr guter Näherung mit der klassischen BOLTZMANNverteilung gerechnet werden [FLIESSBACH 93]. Dann ergibt sich die kanonische Zustandsumme Z aus

$$Z = spur\left[\exp\left(-\hat{\mathbf{H}}/kT\right)\right],\tag{70}$$

woraus sich beispielsweise die freie Energie F und damit alle anderen thermodynamischen Größen - wie Entropie S, Druck p oder mittlere Energie E - aus den Beziehungen

$$F = -kT \ln Z$$
,  $S = -\frac{\partial F}{\partial T}\Big|_{V}$ ,  $p = \frac{\partial F}{\partial V}\Big|_{T}$ ,  $E = kT^{2}\frac{\partial}{\partial T}\ln Z$ 

ergeben. Geht man von der harmonischen Näherung aus, so gestaltet sich die Berechnung der Zustandsumme aufgrund der Quantisierung prinzipiell als Auswertung der dreifachen Summe

$$Z = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{l=1}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{kT} l^{-1/3} (\varepsilon_1(n_1 + 1/2) + \varepsilon_2(n_2 + 1/2) + \varepsilon_0 l)\right].$$
(71)

Es sollte an dieser Stelle daraufhingewiesen werden, daß streng genommen in einer magnetischen Falle mit einer endlichen Fallentiefe nicht mit einer Gleichgewichtsverteilung (70) gerechnet werden kann, da höherenergetische Atome die Falle verlassen müßten [LUITEN96].

Ohne auf weitere thermodynamische Einzelheiten einzugehen, kann die Verteilung (70) zu einer Abschätzung von Verlusten aufgrund von MAJORANAübergängen benützt werden. Für einen festen Wert des Verhältnisses  $\zeta$  und bei verschiedenen Temperaturen kann das Verteilungsverhältnis

$$w(l^{\prime}, l) = \exp\left[-\frac{E_{ool^{\prime}} - E_{ool}}{kT}\right]$$
(72)

der Drehimpulsquantenzahlen l und l' im Oszillatorgrundzustand ( $n_k = 0$ ) berechnet werden. Wählt man für l' einen Wert, für den der charakteristische Radius weit außerhalb der nichtadiabatischen Zone liegt, so stellt die Annäherung des Verhältnisses w(l', l) als Funktion von l für l < l' an die Eins ein Maß für eine geringe thermische Besetzung von prinzipiell verlustbehafteten Drehimpulszuständen dar.

Für den vorliegenden Fall wurde  $\zeta = 0, 1$  gewählt, was für das betrachtete Caesium einem Gradienten von rund 300 G/cm entspricht. Gemäß Tabelle 2 und der Abschätzung des kritischen Radius aus Kapitel 2 erscheint eine Drehimpulszahl von 1000 ausreichend, um nichtadiabatische Verluste weitestgehend auszuschließen, so daß man an einer Bestimmung des Besetzungszahlverhältnisses in Abhängigkeit der Temperatur für kleine l interessiert ist. In Abbildung 33 sind daher die berechneten Verteilungsverhältnisse w(1000,l;T) für drei verschiedene Temperaturen dargestellt. Die jeweils von den Kurven und der Linie y = 1eingeschlossene Fläche kann daher als Maß für den nichtspeicherbaren Anteil der Atome Man erkennt sehr deutlich, daß selbst für  $T = 1 \,\mu K$  dieser Anteil angesehen werden. überschaubar ist und bereits für  $T = 10 \ \mu K$  einen nur noch geringen Beitrag zum gesamten Ensemble leistet. Bedenkt man, daß im experimentellen Fallenbetrieb diese Temperatur niemals unterschritten wurde (siehe hierzu auch Kapitel 1), so können auch vom statistischen Zugang her direkte nichtadiabatische Übergänge als dominante Verlustursache ausgeschlossen werden. Diese Betrachtung ändert sich allerdings, wenn die Temperaturen drastisch gesenkt werden. Dann muß mit einer zunehmenden Schärfe des Minimums des Verteilungsverhältnisses w(l', l) gerechnet werden, was gleichbedeutend mit drastisch ansteigenden Verlusten ist. So zeigt die Auswertung von (72) für Temperaturen von einigen nK, daß praktisch kein Fallenbetrieb möglich sein sollte.

Bemerkenswerterweise besitzt das Verteilungsverhältnis für l um 20 stets ein Minimum, was bedeutet, daß diese Drehimpulszustände die höchste Besetzungswahrscheinlichkeit im thermodynamischen Gleichgewicht besitzen. Dieses Verhalten wird von der klassischen Verteilungsfunktion (54) natürlich nicht wiedergegeben, da Letztere aus einem ganz anderen Potential hergeleitet worden ist und von daher auch eine andere Abhängigkeit vom Drehimpuls besitzt<sup>3</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Die in diesem Kapitel hergeleitete Verteilungsfunktion beschreibt eine magnetische Falle für tiefste Temperaturen, während dem gegenüber (54) die sich durch keinen Ausgleichsprozeß geänderte Verteilung der magnetooptischen Falle widerspiegelt.



Abbildung 33: Verhältnis der Drehimpulsbesetzungszahlen. Erklärung im Hauptext.

Ist man an einer Verteilung der Drehimpulszahl l interessiert, so bildet man in (70) die Spur nur über die Quantenzahlen  $n_k$  und erhält daraus dann direkt die Verteilung w(l). Vernachlässigt man die bei der Verwendung der idealen Oszillatorniveaus auftretenden Fehler in der Auswertung, so ergibt sich für die Drehimpulsverteilung in der magnetischen Falle der Ausdruck

$$w(l) = \exp\left[-\frac{\varepsilon_o l^{2/3}}{kT}\right] \left(4 \sinh\left[\frac{\varepsilon_1}{kTl^{1/3}}\right] \sinh\left[\frac{\varepsilon_2}{kTl^{1/3}}\right]\right)^{-1},\tag{73}$$

was mit der Verteilung bei strikter Annahme einer Nichtbesetzung der angeregten Zustände der Oszillatorniveaus

$$w(l)_{n_k=0} = \exp\left[-\frac{1}{kT}\frac{1}{l^{1/3}}\left(\varepsilon_o l + \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2}\right)\right]$$
(74)

verglichen werden sollte. In Abbildung 34 sind die beiden Verteilungen, die ihrerseits die beiden Grenzfälle der physikalischen Verteilung darstellen, aufgetragen.

Es wurden für alle Verteilungen eine Temperatur von 1  $\mu$ K und ein Gradient von 300 G/cm angenommen. In der oberen Graphik sind (73) und (74) für Caesium dargestellt, während die untere Graphik die entsprechende Verteilung (74) für atomaren Wasserstoff zeigt. Nicht mehr zu erkennen ist das Maximum der Verteilung (74) für Caesium, daß gemäß der Abbildung 33 bei l = 20 liegen sollte. Die mittlere Zahl N der Atome, deren Drehimpulszahl zwischen  $l_1$  und  $l_2$  liegt, ergibt sich aus der Verteilung v(l) gemäß

$$N = \int_{l_1}^{l_2} v(l) dl$$

und man entnimmt aus der Abbildung, daß der dominante Beitrag des Ensembles einen Wert bis um  $l = 100\ 000$  besitzt.

Ist der Grenzfall des dichten Quantengases realisiert, so muß für Bosonen mit der statistischen Multilizität 1 die mittlere Besetzungszahl

$$\langle n \rangle_{n_1 n_2 l} = \frac{1}{\exp\left[-(E_{n_1 n_2 l} - \mu)/kT\right] - 1}$$
 (75)

benützt werden. In diesem Falle wird das chemische Potential  $\mu$  bei strenger Teilchenzahlerhaltung aus der impliziten Funktion

$$N(T, V, \mu) = \sum_{n_1} \sum_{n_l} \sum_{l=1}^{\infty} \langle n \rangle_{n_1 n_2 l}$$
(76)

bestimmt und in (73) eingesetzt. Dieses Regime ist allerdings experimentell in der Arbeitsgruppe noch nicht realisiert worden und liegt auch außerhalb der gestellten Ziele mit einzelnen Atomen zu experimentieren.

Folgende Seite:

Abbildung 34: Normierte Wahrscheinlichkeitsdichte für die Drehimpulszahl I. Oben: Caesium. Unten: atomarer Wasserstoff. Die Temperatur bertug 1  $\mu$ K und der äußere Gradient wurde zu 300 G/cm angenommen.



# Kapitel 6

# Kühlmechanismen und Speicherzeiten

Für alle Experimente mit magnetisch gefangenen Atomen wird eine minimale Temperatur und eine größtmögliche Lokalisierung der Ensembles im Mittelpunkt stehen. Sowohl für das Erreichen von hinreichend hohen Phasenraumdichten, um für große Ensembles kollektive Quanteneffekte zu ermöglichen, als auch für Versuche an einzelnen neutralen Atomen, die ein ideales Experimentierfeld für quantenelektrodynamische Fragestellungen darstellen, sind daher effiziente Kühlmechanismen und eine weitestgehende Vermeidung von Fallenverlusten erforderlich. Wie bereits in der Einleitung angedeutet, kann erwartet werden, daß das Studium der Dynamik neutraler Atome in der magnetischen Falle eine Abschätzung von den Grenzen dieser Mechanismen gestattet.

#### 6.1. Evaporatives Kühlen

Das Phänomen der Evaporation, das heißt des auf thermalen Prozessen beruhenden Entkommens eines Anteiles eines gebundenen Ensembles und der Abkühlung des verbleibenden Teils, wurde ursprünglich im Zusammenhang mit der Dynamik von Sternenhaufen entwickelt [SPITZER 87]. Mit den Bemühungen, die Phasenraumdichten in Atomfallen weiter zu erhöhen, geriet der Mechanismus des evaporativen Kühlens zunehmend in den Mittelpunkt des Interesses, da dieser eine Unterschreitung der in magnetooptischen Fallen aufgrund von Lichtkräften bestehenden Grenzen ermöglicht. Eine erste experimentelle Demonstration gelang Hess et al. [Hess 87] für atomaren Wasserstoff und aus heutiger Sicht ist dieses Kühlverfahren ein nahezu unentbehrliches Hilfsmittel für Versuche mit ultrakalten Atomen geworden [PETRICH 95].

Eine theoretische Beschreibung des in magnetischen Fallen ablaufenden evaporativen Prozesses liefern LUITEN et al. auf der Grundlage der höheren kinetischen Gastheorie [LUITEN96]. Die Phasenraumverteilung  $f(\mathbf{r},\mathbf{p})$  des als den Gesetzen der klassischen Physik unterworfen angesehenen Ensembles gehorcht hierbei der BOLTZMANNgleichung

$$\left(\frac{\mathbf{p}}{m}\nabla_{\mathbf{r}} - (\nabla_{\mathbf{r}}\mathcal{V}) \cdot \nabla_{\mathbf{p}} + \frac{\partial}{\partial t}\right) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = I(\mathbf{r}, \mathbf{p})$$
(77)

mit dem Stoßintegral für s-Streuung

$$I(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{\sigma}{2\pi m h^3} \int d^3 p_3 \int d\Omega \, q\{f(\mathbf{r},\mathbf{p}_1)f(\mathbf{r},\mathbf{p}_2) - f(\mathbf{r},\mathbf{p}_3)f(\mathbf{r},\mathbf{p})\},\tag{78}$$

wobei  $\sigma$  der energieunabhängige Wirkungsquerschnitt ist,  $\mathbf{p}_3$  und  $\mathbf{p}$  die Impulse vor und  $\mathbf{p}_1$ und  $\mathbf{p}_2$  nach dem Stoß sind,  $\mathbf{q}$  der relative Impuls ist und  $\Omega$  in bezug auf die Richtung der relativen Impulse definiert wird. Eine weitere Auswertung dieser nichtlinearen Integro-Differentialgleichung gelingt im allgemeinen nur dann, wenn man die Annahme des "molekularen Chaos", das heißt der Ergodizität der Trajektorien macht. Diese Annahme kann als Grundpostulat einer Theorie des evaporativen Kühlens angesehen werden und ist sicherlich dann gerechtfertigt, wenn bereits die einzelnen Trajektorien der Atome stochastisch verlaufen.

Für zylindersymmetrische Fallen kann dies aufgrund der Existenz eines weiteren unabhängigen allgemeinen Integrals der Bewegung neben der Energie in Strenge nicht erfüllt sein, doch genügt unter Umständen auch die Annahme einer "hinreichenden Ergodizität" [LUITEN 96] im Raum der generalisierten Koordinaten. Wendet man die in den vorhergehenden Kapiteln entwickelten Ausführungen über die Regularität der Trajektorien an, so wird die kinetische Theorie des evaporativen Kühlens in der magnetischen Quadrupolfalle sicherlich dann schwerer zu motivieren sein, wenn die Bedingung (53)

$$1 >> 4\sqrt{\frac{kT}{m}} \, \varpi_o \frac{\zeta}{g} = \sqrt{\frac{8kT}{g}} \left(\frac{\mu_{eff}B}{2}\right)^{1/6} m^{1/6} \left(\frac{1}{P_\phi}\right)^{1/3} \tag{79}$$

erfüllt ist<sup>1</sup>. Wie man den vorhergehenden Kapiteln entnimmt, ist dies für Caesium in der überwiegenden Zahl der Fälle erfüllt (vergleiche hierzu auch Abbildung 30). In diesem Zusammenhang kann die Frage nach der Verwendung anderer Elemente als das des schwersten Alkalimetalles gestellt werden. So besitzt atomarer Wasserstoff eine um 133 mal geringere Masse als Caesium, was bei einem nur unwesentlich größerem effektiven magnetischen Moment zu deutlich anderen Werten für die charakteristischen Frequenzen, dem Radius und dem Verhältnis der Beschleunigungen führt. Läßt man in (77) die Temperatur Tkonstant, so ergibt sich für das Verhältnis der rechten Seiten der Ungleichung (77) für die zwei Atomsorten Cs und H

$$\frac{Cs}{H}: \approx 2,15 \cdot \left(\frac{l_H}{l_{Cs}}\right)^{1/3}$$

Vergleicht man dies mit den mittleren Drehimpulszahlen der beiden Elemente (siehe hierzu auch Abbildung 34), so kann keine Bevorzugung der leichten Elemente festgestellt werden. Allerdings ist zu beachten, daß diese Abschätzung nur für hinreichend niedrige Temperaturen gültig ist, das heißt wenn die Beschreibung der Bewegung durch den integrablen Teil der Dynamik überhaupt sinnvoll ist. Im Falle des Wasserstoffs ist unter Umständen diese Annahme nicht erfüllt.

Als allgemeine Bemerkung zu möglichen Kühlmechanismen kann gesagt werden, daß in der magnetischen Quadrupolfalle aufgrund der Regularität der Trajektorien für einen dominanten Anteil der Ensembles eine enge Kopplung der vertikalen und horizontalen Freiheitsgrade besteht. Dies kann dahingehend ausgenutzt werden, daß beispielsweise nur in einer geometrischen Richtung ein dissipativer Mechanismus bestehen muß und die Kühlung auch auf den anderen Freiheitsgrad übergreift. Denkbar wäre beispielsweise ein Kühlstrahl in z-Richtung, der aufgrund der Kopplung der Freiheitsgrade auch in der  $\rho$ -Richtung kühlt.<sup>2</sup>

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Sind die Trajektorien der einzelnen Atome im wesentlichen regulär, so wird nur noch über innere Stöße die Herstellung des molekularen Chaos möglich sein. Aufgrund der großen mittleren freien Weglängen kann allerdings in magnetisch gespeicherten Ensembles eine solche Argumentation erschwert werden. Als sicher darf allerdings angenommen werden, daß der Mechanismus des evaporativen Kühlens dann effektiver wird, wenn die Atome bereits einzeln stochastische Bewegungen ausführen würden.

In Analogie zu den bekannten Sachverhalten in Ionenfallen.

### 6.2. Thermodynamische Nichtgleichgewichtszustände

Wird die magnetische Falle durch instantanes Abschalten der LASERstrahlen geladen, so wird sich aus der Verteilung (54) der Drehimpulszahl *l* und der damit zusammenhängenden Verteilung der Minima durch innere Stoßprozesse das Ensemble auf den neuen Gleichgewichtszustand in der magnetischen Falle einstellen. Untersucht man in der Zwischenzeit die vertikale Ortsverteilung, so können Rückschlüsse auf die innere Dynamik gezogen werden.

Für ein zylindersymmetrisches Potential mit dem quadratischen radialen Anteil

$$U(\rho) = \frac{1}{2}m\omega_{xy}^2\rho^2 \tag{80}$$

ergibt sich gemäß der Rechnungen im Anhang und in Kapitel 4 eine Drehimpulsverteilung zu

$$w^{quadr}(l) \sim \exp\left[-\frac{\omega_{xy}}{kT}l\right] , l > 0$$
 (81)

mit der eine Verteilung der z-Komponente des Minimums (vergleiche Kapitel 4)

$$w^{quadr}(u) \sim \sqrt{u} \exp\left[-\frac{2\omega_{xy}\mu B\sqrt{g}}{kT}\frac{(1-\zeta^2)}{\zeta}u^{3/2}\right], \text{ für } 0 < u = -z$$
(82)

verbunden ist. Es ist klar, daß sich in der magnetischen Falle mit einem seichteren effektiven Potential als (80) ein neuer Gleichgewichtszustand einstellen muß, mit einer neuen charakteristischen Drehimpulsverteilung. Benützt man hierzu die Resultate aus Kapitel 5, so findet man aus (73) beziehungsweise (74) für die neue Verteilung der z-Komponente des Minimums

$$w^{mag}(u) \sim \sqrt{u} \exp\left[-\frac{\alpha}{kT}u\right] \cdot g(\sqrt{u})$$
 (83)

mit der positiven Konstanten  $\alpha$  und einer Funktion g, die für große u abfällt. Wichtig ist in (82) beziehungsweise (83) die Abhängigkeit von der Potenz von u im Exponenten. Der nur noch lineare Zusammenhang in (83) kommt aufgrund des seichteren Potentials zustande, das eine Aufblähung der Wolke gestattet.

Untersucht man die zeitliche Entwicklung der vertikalen Ortsverteilung anhand der Intensität des Fluoreszenzlichtes, so kann indirekt auf die Stoßdynamik zurückgeschlossen werden. Dies ist allerdings nur dann der Fall, wenn die Temperatur des Ensembles so gering ist, daß der Verlauf der jeweiligen effektiven Potentialminima den Schwerpunkt des Intensitätslichlichtes bestimmt.

### 6.3. Nichtadiabatische Übergänge

Durch die gesamte Arbeit zog sich bereits die Frage nach der Bedeutung nichtadiabatischer Übergänge in der magnetischen Quadrupolfalle. In diesem Abschnitt soll eine zusammenfassende Diskussion im Hinblick auf bestimmte Fallenanwendungen durchgeführt werden. Die minimale Annäherung an den Fallenursprung wird durch die Drehimpulsanregung und der Energie des Atoms bestimmt. Wie die Verteilungsfunktionen für den Drehimpuls zeigten, wird für derzeit experimentell realisierte Bedingungen nur ein geringer Teil des Ensembles über so kleine Drehimpulse verfügen, die ausreichen, um in die kritische Zone der nichtadiabatischen Übergänge zu gelangen. Dies wurde durch eine numerische Simulation der minimalen Abstände in der magnetischen Quadrupolfalle bestätigt. Somit kann geschlossen werden, daß direkte nichtadiabatische Übergänge bislang nicht die dominanten Verlustquellen waren und somit Stöße mit dem Hintergrundgas die Speicherzeit limitierten<sup>3</sup>. Dieser Sachverhalt ändert sich allerdings dramatisch, wenn Lokalisierungen von besser als ein Mikrometer der Atome um den Ursprung erreicht werden sollen<sup>4</sup>. In diesem Falle werden die Verlustwahrscheinlichkeiten aufgrund der MAJORANAübergänge zunehmend wahrscheinlicher, wie ein Vergleich der charakteristischen Frequenzen mit der LARMORfrequenz des Atomes zeigt. In guter Näherung kann in der magnetischen Quadrupolfalle die LARMORfrequenz abgeschätzt werden zu

$$\boldsymbol{\varpi}_{L} = \frac{\boldsymbol{\mu}_{eff} |\mathbf{B}|}{\boldsymbol{h}} \approx \frac{1}{2} \frac{\boldsymbol{\mu}_{eff} B}{\boldsymbol{h}} \boldsymbol{\rho}_{o} \,. \tag{84}$$

In Tabelle 4 sind bei einem Gradienten von 200 G/cm die charakteristischen Frequenzen und Radien sowie die abgeschätzte LARMORfrequenz für Caesium im Zustand  $|F = 3, m_F = -3\rangle$  für verschiedene Drehimpulsanregungen *l* aufgetragen.

l	$\varpi_o$ in [kHz]	$\boldsymbol{\varpi}_L$ in [ <i>kHz</i> ]	$\rho_o$ in [ $\mu m$ ]
1	13.7	11.7	0.17
10	6.1	61.6	0.9
100	2.8	274	4
1.000	1.3	1.3 MHz	19

 Tabelle 4: Vergleich von Bahn- und LARMORfrequenz

Aus der Tabelle wird deutlich, daß für eine dauerhafte Speicherung von eng lokalisierten Atomen die magnetische Quadrupolfalle nicht geeignet ist. Wird insbesondere das Erreichen des LAMB-DICKE-Regimes angestrebt, so muß über eine Modifizierung des Fallentypes nachgedacht werden. Anbieten würde sich beispielsweise die sogenannte "TOP-Trap", bei der ein magnetisches Drehfeld zusätzlich zu einem stationären Quadrupolfeld einen nichtverschwindenden effektiven Betrag des Magnetfeldes im Ursprung erreicht, was die Verlustwahrscheinlichkeiten aufgrund von nichtadiabatischen Übergängen drastisch reduziert [PETRICH 95].

Geht man davon aus, daß stochastisch verteilte Stöße die Trajektorien der Atome in der Falle ablenken können und somit kritische Annäherungen an den Ursprung oder ein evaporatives Entkommen möglich würden, so wird die Regularität der Trajektorien bedeutend. Es kann angenommen werden, daß reguläre Trajektorien im Mittel unempfindlicher gegenüber streifenden Stößen reagieren, was sich in einer längeren mittleren Speicherzeit dokumentieren sollte. Wie die numerischen Untersuchungen zeigten, dominieren für physikalisch interessante ultrakalte Ensembles die Regularität der Bewegung, so daß

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Dies wird auf die vorhergehenden Experimente der Arbeitsgruppe bezogen. Vergleiche hierzu [HAUBRICH 93, 95, Höpe 93, 94].

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Mit Lokalisierung ist hier der dauerhafte Aufenthalt der Atome gemeint und nicht die Lage des Intensitätsschwerpunktes der beobachteten Fluoreszenzstrahlung.

insbesondere für kleine Ensembles der Einfluß von stufenweisen Stoßprozessen innerhalb der Wolke begrenzt sein wird und eher Stöße mit dem nicht gekühlten Hintergundgas der Falle zu den Verlustraten beitragen.

### 6.4. Ausblick

Ein fernes experimentelles Ziele kann die Untersuchung der mikroskopischen Dynamik einzelner Atome in der magnetischen Falle sein. Technisch wird eine direkte Observation der Atome entlang klassischer Trajektorien wegen der geringen Intensitäten des gestreuten Lichtes sehr schwierig sein und aufgrund der im Vergleich zu typischen Detektorauflösungszeiten hohen Bahnfrequenzen kann unter Umständen eine Auflösung der Bewegung unmöglich werden. Zu berücksichtigen wäre in jedem Falle auch die Auswirkung des Photonenrückstoßes auf die Bahn, der zum Teil ein Vielfaches der Energieabstände der quantisierten Niveaus der Atome ausmacht.

Unter Umständen kann aber der subtile Einfluß des Verhältnisses der Normalfrequenzen der Bewegung auf die Speicherzeit demonstriert werden. Wie schon in den vorhergehenden Kapiteln dargelegt, hängt dieses Verhältnis - und damit die Stabilität der Trajektorien innerhalb eines gewissen Temperaturbereichs - nur vom äußeren Gradienten ab. Argumentiert man mit einer Interdependenz von Regularität und Stoßwirkung, so kann erwartet werden, daß die experimentell bestimmbaren Speicherzeiten eine ähnliche Abhängigkeit vom angelegten äußeren Gradienten besitzen, wie die Aufbruchsenergie in Abbildung 28.

# Anhang

### A.1. Übergangswahrscheinlichkeiten nach Majorana

Gemäß der MAJORANAformel (9) lassen sich die Übergangswahrscheinlichkeiten W(F,m,n,l)vom Zustand  $|F,m\rangle$  nach  $|F,n\rangle$  in Abhängigkeit eines Parameters l als Polynome von einfachen Exponentialfunktionen

$$s \equiv \sin\left[\frac{\alpha}{2}\right] = \exp\left[-\frac{l\pi}{4}\right]$$
 und  $c \equiv \cos\left[\frac{\alpha}{2}\right] = \sqrt{1 - \exp\left[-\frac{l\pi}{2}\right]}$  (A.1)

ausdrücken. Der adiabatische Grenzfall ist für  $l \to \infty$  realisiert;  $l \to 0$  ergibt den vollständig nichtadiabatischen Fall. Aus der Struktur der Formel (9) sind folgende Symmetrierelationen für gleiche F und l unmittelbar ersichtlich:

W(m,n) = W(n,m), aus W(m,n) ergibt sich W(m,-n) durch Vertauschen von s und c.

Die in Abbildung 5 und 6 dargestellten Übergangswahrscheinlichkeiten lauten nun explizit

(A.2)

 $W(-3,3) = s^{12} \qquad W(-3,-3) = c^{12}$   $W(-3,2) = 6c^{2}s^{10} \qquad W(-3,-2) = 6c^{10}s^{2}$   $W(-3,1) = 15c^{4}s^{8} \qquad W(-3,-1) = 15c^{8}s^{4}$   $W(-3,0) = 20c^{6}s^{6}$   $W(-2,2) = s^{12} - 10c^{2}s^{10} + 25c^{4}s^{8}$   $W(-2,1) = 10c^{2}s^{10} + 40c^{6}s^{6} - 40c^{4}s^{8}$  $W(-2,0) = 5c^{4}s^{8} - 10c^{6}s^{6} + 5c^{8}s^{4}$ 

## A.2. Kanonische Verteilungsfunktion für den Drehimpuls

Die Normierungsbedingung der Wahrscheinlichkeit führt für ein Teilchen eines kanonischen Ensembles mit der Temperatur T auf die Gleichung

$$1 = \iiint_{-\infty}^{\infty} dq_1 dq_2 dq_3 \iiint_{-\infty}^{\infty} dp_1 dp_2 dp_3 \frac{1}{Z} e^{-H(q_1, \dots, p_3)/kT},$$
 (A.3)

66
mit der kanonischen Zustandssumme Z. Die kanonische Verteilungsfunktion für eine beliebige kanonische Observable  $P_o$  ergibt sich nun, indem man diese durch eine kanonische Transformation zu einer neuen kanonischen Variablen macht und über alle übrigen Variablen integriert. Für die Wahrscheinlichkeit  $w(P_o)dP_o$ , das die Observable des Teilchens im Intervall  $[P_o, P_o + dP_o]$  liegt, folgt daher mit der Normierungskonstanten z.

$$w(P_o)dP_o = z \left( \iiint_{-\infty}^{\infty} d^3 Q \iint_{-\infty}^{\infty} dP_1 dP_2 \ e^{-H(Q_1,\dots,P_o,\dots,P_3)/kT} \right) dP_o \quad , \tag{A.4}$$

wobei ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Observable als neuer kanonischer Impuls gewählt wurde. Die Richtigkeit der obigen Behauptung ergibt sich unmittelbar aus dem LIOUVILLESchen Satz. Eine Anwendung ist bekanntlich die MAXWELLSche Geschwindigkeitsverteilung für das ideale Gase.

Wie die Erfahrung zeigt, sind in einer magnetooptischen Falle in guter Näherung Ort und Impuls der Teilchen GAUBverteilt, das heißt man kann mit einer phänomenologischen HAMILTONfunktion der Form

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \frac{1}{4\gamma^2}(x^2 + y^2) + \frac{1}{4\gamma'^2}z^2$$
(A.5)

rechnen, wobei  $\gamma$  und  $\gamma'$  Konstanten sind, die im wesentlichen die Breite der Ortsverteilung bezeichnen. Wird die magnetische Falle durch instantanes Abschalten der LASERstrahlen geladen, so wird die Verteilung der z-Komponente des Drehimpulses in guter Näherung durch die Verteilung in der zugehörigen magnetooptischen Falle beschrieben werden können, da die für die Einstellung eines neuen thermodynamischen Gleichgewichtes benötigte Zeit bei weitem die Zeit des Abschaltens übersteigt. Um die gesuchte Verteilungsfunktion daher zu erhalten, geht man zweckmäßigerweise zu Zylinderkoordinaten über und führt alle restlichen Integrationen aus. Aus der Normierung der Einzelwahrscheinlichkeiten folgt dann unmittelbar

$$w(P_{\phi})dP_{\phi} = z' \left( \int_{0}^{\infty} d\rho \exp\left[ -\frac{1}{2mkT} \frac{P_{\phi}^{2}}{\rho^{2}} - \frac{1}{4kT\gamma^{2}} \rho^{2} \right] \right) dP_{\phi} \quad (A.6)$$

Die Integration läßt sich elementar ausführen und man erhält als Resultat für den Betrag des Drehimpulses

$$w(|P_{\phi}|) = \frac{1}{\sqrt{2m} \, kT\gamma} \exp\left[-\frac{1}{\sqrt{2m} \, kT\gamma}|P_{\phi}|\right]. \tag{A.7}$$

Die Indifferenz des gefundenen Resultates vom Vorzeichen des Drehimpulses spiegelt hierbei die physikalische Gleichartigkeit eines Rechts- beziehungsweise Linkssystems wider.

Sucht man bei einer gegebenen Wahrscheinlichkeitsdiche w(x) die entsprechende Verteilung v(y), wobei y = f(x) eine differenzierbare monotone Funktion ist, so gilt [ACKERMANN 55]

$$v(y) = \frac{w(x(y))}{f'(x(y))} .$$
 (A.8)

## Literaturverzeichnis

- [ACKERMANN 55] W.-G. ACKERMANN, "Einführung in die Wahrscheinlichkeitsrechnung", Leipzig 1955
- [ANTILLÓN 92] A. ANTILLÓN, A. GÓNGORA-T., T. H. SELIGMAN, Z. Phys. D 24, 347 (1992);
  A. GÓNGORA-T., A. ANTILLÓN, T. H. SELIGMAN, Phys. Rev. A 42, 3139 (1990)
- [ASHKIN 70] A. ASHKIN, Phys. Rev. Lett. 24, 156 (1970); ders., Phys. Rev. Lett. 25, 1321 (1970)
- [BERGEMAN 87] T. BERGEMAN, G. EREZ, H. J. METCALF, Phys. Rev. A 35, 1535 (1987)
- [BERGEMAN 89] T. BERGEMAN, P. MCNICHOLL, J. KYCIA, H. METCALF, N. I. BALAZS, J. Opt. Soc. Am. B 6, 2249 (1989)
- [BERGEMAN 95] T. BERGEMAN, private Mitteilung; teilweise veröffentlicht in [METCALF 94]
- [BERRY 78] M. V. BERRY, "Regular and Irregular Motion", in: AIP Conference Proceedings 46 "Topics in Nonlinear Dynamics - A Tribute to Sir Edward Bullard", eds. S. JORNA, New York 1978
- [BLOCH 45] F. BLOCH, I. I. RABI, Rev. of Modern Physics 17, 237 (1945)
- [BREIT 31] G. BREIT, I. I. RABI, Phys. Rev. 38, 2082 (1931)
- [DEMARCHI 89] A. DE MARCHI (ed.), "Frequency Standards and Metrology", Springer Berlin 1989; sowie: K. GIBBLE, S. CHU, Metrologia 29, 201 (1992)
- [EINSTEIN 17] A. EINSTEIN, Z. Phys. 18, 121 (1917); O. FRISCH, Z. Phys. 86, 42 (1933)
- [FEYNMAN 63] R. P. FEYNMAN, R. B. LEIGHTON, M. SANDS, "The Feynman Lectures on Physics", Addison-Wesley Publishing Comp. Reading (Massachusetts) 1963
- [FLIESSBACH 93] T. FLIESSBACH, "Statistische Physik", Mannheim 1993
- [FLÜGGE 65] S. FLÜGGE, "Rechenmethoden der Quantentheorie", Heidelberg 1965

- [FUES 27] E. FUES, "Störungsrechnung", in: "Handbuch der Physik Band V", eds. H. GEIGER, K. SCHEEL, Springer Berlin 1927
- [GERLACH 22] W. GERLACH, O. STERN, Z. Phys. 8, 110 (1922); dies., Z. Phys. 9, 349 (1922)
- [GOLDSTEIN 91] H. GOLDSTEIN, "Klassische Mechanik", 11. Auflage Aula-Verlag Wiesbaden 1991
- [HÄNSCH 75] T. W. HÄNSCH, A. L. SCHAWLOW, Opt. Commun. 13, 68 (1975); sowie: K. LINDQUIST, M. STEPHENS, C. WIEMAN, Phys. Rev. A 46, 4082 (1992); sowie: A. M. STEANE, M. CHOWDHURY, C. J. FOOT, J. Opt. Soc. Am. B 9, 2142 (1992)
- [HAUBRICH 93] D. HAUBRICH, A. HÖPE, D. MESCHEDE, Opt. Commun. 102, 225 (1993)
- [HAUBRICH 95] D. HAUBRICH, Thesis (unveröffentlicht), Universität Hannover 1995
- [HÉNON 64] M. HÉNON, C. HEILES, Astron. J. 69, 73 (1964)
- [HESS 87] siehe unter [SILVERA 80]
- [HÖPE 93] A. HÖPE, D. HAUBRICH, G. MÜLLER, W. G. KAENDERS, D. MESCHEDE, Europhys. Lett. 22, 669 (1993)
- [HÖPE 94] A. HÖPE, Thesis (unveröffentlicht), Universität Hannover 1994
- [KAM 63]
  V. I. ARNOLD, Russ. Math. Surveys 18, 5 (1963); A. N. KOLMOGOROV, C. R. Dokt. Acad. Sci. USSR 98, 525 (1959); J. MOSER, Math. Ann. 169, 163 (1967)
- [KORSCH 94] H. J. KORSCH, H.-J. JODL, "Chaos A Programm Collection for the PC", Springer Berlin 1994
- [KUHN 62] T. S. KUHN, "The Structure of Scientific Revolutions", Chicago 1962
- [LANDAU 79] L. D. LANDAU, E. M. LIFSCHITZ, "Lehrbuch der Theoretischen Physik Band III - Quantenmechanik", 9. Auflage Akademie-Verlag Berlin 1979
- [LANDAU 90] L. D. LANDAU, E. M. LIFSCHITZ, "Lehrbuch der Theoretischen Physik Band I - Mechanik", 13. Auflage Akademie-Verlag Berlin 1990
- [LEIPHOLZ 68] H. LEIPHOLZ, "Stabilitätstheorie", Teubner Stuttgart 1968

- [LETT 88] P. D. LETT, R. N. WATTS, C. I. WESTBROOK, W. D. PHILLIPS, P. L. GOULD, H. J. METCALF, Phys. Rev. Lett. 61, 169 (1988)
- [LICHTENBERG82] A. J. LICHTENBERG, M. A. LIEBERMANN, "Regular and Stochastic Motion", Springer Heidelberg-New York 1982
- [LUITEN 96] O. J. LUITEN, M. W. REYNOLDS, J. T. M. WALRAVEN, Phys. Rev. A 53, 381 (1996)
- [MAJORANA 32] E. MAJORANA, Nuovo Cimento 9, 43 (1932)
- [MESCHEDE 84] D. MESCHEDE, H. WALTHER, G. MÜLLER, Phys. Rev. Lett. 54, 551 (1984)
- [METCALF 94] H. J. METCALF, P. VAN DER STRAATEN, Physics Reports 244, 203 (1994)
- [MIGDALL 85] A. L. MIGDALL, J. V. PRODAN, W. D. PHILLIPS, T. BERGEMAN, H. J. METCALF, Phys. Rev. Lett. 54, 2596 (1985)
- [MILONNI 87] P. MILONNI, MEI-LI SHIH, J. R. ACKERHALT, "Chaos in Laser Matter Interactions", World Scientific Singapur 1987
- [NEUHAUSER 78] W. NEUHAUSER, M. HOHENSTETT, P. TOSCHEK, H. DEHMELT, Phys. Rev. Lett. 41, 233 (1978); dies. Phys. Rev. A 22, 1137 (1980); sowie: F. DIEDRICH, H. WALTHER, Phys. Rev. Lett. 58, 203 (1987)
- [PETRICH 95] W. PETRICH, M. H. ANDERSON, J. R. ENSHER, E. A. CORNELL, Phys. Rev. Lett. 74, 3352 (1995); sowie: M. H. ANDERSON, J. R. ENSHER, M. R. MATTHEWS, C. E. WIEMAN, E. A. CORNELL, Science 269, 198 (1995); sowie: C. C. BRADLEY, C. A. SACKETT, J. J. TOLLETT, R. G. HULET, Phys. Rev. Lett. 75, 1687 (1995)
- [PHILLIPS 90] W. D. PHILLIPS, "LASER-Cooling, Optical Traps and Optical Molasses", in: Les Houches Summer-School, Course 2, Session LIII, Fundamental Systems in Quantum Optics (1990), eds. J. DALIBARD, J. M. RAIMOND, J. ZINN-JUSTIN, Elsevier Science Publishers B. V. 1992
- [RAAB 87] E. L. RAAB, M. PRENTIS, A. CABLE, S. CHU, D. E. PRITCHARD, Phys. Rev. Lett. 59, 2631 (1987)
- [SCHECK 90] F. SCHECK, "Mechanik", 2. Auflage Springer Berlin 1990
- [SCHWEIZER 93] W. SCHWEIZER, R. NIEMEIER, G. WUNNEL, H. RUDER, Z. Phys. D 25, 95 (1993); sowie: D. A. SADOVSKII, J. A. SHAW, J. B. DELOS, Phys. Rev. Lett. 75, 2120 (1995)

[Silvera 80]	I. F. SILVERA, J. T. M. WALRAVEN, Phys. Rev. Lett. 44, 164 (1980); sowie: H. F. HESS, G. P. KOCHANSKI, J. M. DOYLE, N. MASUHARA, D. KLEPPNER, T. J. GREYTAK, Phys. Rev. Lett. 59, 672 (1987)
[Spiegel 59]	M. R. SPIEGEL, "Vector Analysis", McGraw-Hill Comp. New York 1959
 [Spitzer 87]	L. SPITZER JR., "Dynamical Evolution of Globular Clusters", Princeton 1987
[Steane 91]	A. M. STEANE, C. J. FOOT, Europhys. Lett. 14, 231 (1991); sowie: J. DALIBARD, C. COHEN-TANNOUDJ, J. Opt. Soc. Am. B 6, 2023 (1989)
[Surkov 94]	E. L. SURKOV, J. T. M. WALRAVEN, G. V. SHLYAPNIKOV, Phys. Rev. A 49, 4778 (1994)
[Walker 69]	G. H. WALKER, J. FORD, Phys. Rev. 188, 416 (1969)
[WING 84]	W. WING, Prog. Quantum Electron. 8, 181 (1984)

\_

2

## Danksagung

"Ich hätte gerne ein gutes Buch hervorgebracht. Es ist nicht so ausgefallen; aber die Zeit ist vorbei, in der es von mir verbessert werden könnte."

Ludwig Wittgenstein, Philosophische Untersuchungen, Vorwort

Mein Dank gilt Herrn Professor Meschede, der mir die Möglichkeit für die Anfertigung dieser Diplomarbeit in seiner Arbeitsgruppe gab. Ich möchte mich besonders für das in mich gesetzte Vertrauen und die Anregungen bedanken, ohne die diese Arbeit nicht entstanden wäre.

Herrn Professor von Busch möchte ich für die kurzfristige Übernahme des Koreferates und der damit verbundenen Mühen danken.

Den Angestellten und Angehörigen des Institutes für Angewandte Physik danke ich für ihre Unterstützung, die ich in dieser Zeit erfahren durfte.

## Erklärung

Ich versichere, daß ich diese Arbeit selbstständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benützt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Bonn, im März 1996

Referent:Prof. Dr. D. MeschedeKoreferent:Prof. Dr. F. von Busch