

# Relaxationsprozesse in stark gekoppelten ultrakalten Plasmen

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

Doctor rerum naturalium  
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt

der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften  
der Technischen Universität Dresden

von

**Dipl.-Phys. Georg Bannasch**

geboren am 26.08.1981 in Stuttgart

Eingereicht am 05.10.2012

Die Dissertation wurde in der Zeit von Oktober 2008 bis September 2012  
am Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme angefertigt.

Eingereicht am 05.10.2012

Verteidigt am 01.03.2013

1. Gutachter: Prof. Dr. Jan-Michael Rost
2. Gutachter: Prof. Dr. Ronald Redmer

# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Erzeugung und Evolution ultrakalter Plasmen . . . . .	3
1.2. Theoretische Zugänge . . . . .	5
1.3. Aufbau der Arbeit . . . . .	7
<b>2. Bildung von Rydbergatomen</b>	<b>11</b>
2.1. Theorie der Drei-Körper-Rekombination und ihre Grenzen . . . . .	12
2.1.1. Ratengleichungen . . . . .	13
2.1.2. Stoßinduzierte Übergangsraten zwischen atomaren Zuständen und dem Kontinuum . . . . .	17
2.1.3. Grenzen der Theorie isolierter Drei-Körper-Stöße . . . . .	19
2.2. Rekombination in stark gekoppelten Ein-Komponenten-Plasmen . . .	21
2.2.1. Vielteilchen-Modell und Initialisierung der Simulation . . . . .	21
2.2.2. Propagation der Elektronen . . . . .	24
2.2.3. Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung . . . . .	29
2.3. Rekombinationsdynamik . . . . .	30
2.3.1. Dynamik der Rydberg-Zustände . . . . .	30
2.3.2. Kinetischer Flaschenhals . . . . .	33
2.3.3. Rekombinationsrate . . . . .	37
2.4. Rekombinationsdynamik im Zwei-Komponenten-Plasma . . . . .	40
2.4.1. MD-Simulationen . . . . .	40
2.4.2. Ratengleichungen . . . . .	41
2.4.3. Korrelationszeiten und Relaxation der Rydberg-Zustände . . .	42
<b>3. Relaxation der ionischen Geschwindigkeitsverteilung</b>	<b>47</b>
3.1. Landau-Spitzer-Theorie und ihre Grenzen . . . . .	48
3.1.1. Landau-Spitzer-Theorie . . . . .	49
3.1.2. Erweiterungen auf starke Kopplung . . . . .	54
3.2. Optische Messung der Ionen-Relaxation . . . . .	56
3.2.1. Optische Manipulation der Geschwindigkeitsverteilung . . . . .	57
3.2.2. Fluoreszenzmessung . . . . .	58
3.3. Semiklassische Modellierung des Experiments . . . . .	61
3.3.1. Quantendynamik der Ionenanregung und klassische Plasma- dynamik . . . . .	61
3.3.2. Relaxation der mittleren Ionen-Geschwindigkeit . . . . .	68
3.4. Relaxationsdynamik . . . . .	71
3.4.1. Geschwindigkeitsabhängigkeit des Relaxationsprozesses . . . .	72

3.4.2. Markovsche Beschreibung . . . . .	74
3.4.3. Nicht-markovsche Beschreibung . . . . .	75
3.5. Relaxationsrate . . . . .	78
3.5.1. Geschwindigkeitsabhängigkeit der Relaxationsrate . . . . .	78
3.5.2. Mittlere Relaxationsrate . . . . .	82
3.6. Kinetische Theorie der Relaxation . . . . .	85
3.6.1. Landau-Näherung . . . . .	89
3.6.2. Korrelationen bei schwacher Kopplung . . . . .	90
<b>4. Erzeugung stark gekoppelter Ionen</b>	<b>97</b>
4.1. Konventionelle Erzeugung ultrakalter Plasmen . . . . .	97
4.2. Plasmaerzeugung aus einem Ensemble korrelierter Rydberg-Atome . .	102
4.3. Rydberg-Rydberg-Korrelationen im atomaren Gas . . . . .	105
4.3.1. Anregung eines Rydberg-Zustands im Drei-Niveau-System . .	105
4.3.2. Korrelierte Vielteilchen-Anregungsdynamik . . . . .	107
4.3.3. Monte-Carlo-Simulation der Vielteilchen-Anregungsdynamik .	109
4.4. Ionisation der Rydberg-Atome . . . . .	111
4.4.1. Atomares Modell . . . . .	113
4.4.2. Monte-Carlo-Simulation klassischer Trajektorien . . . . .	115
4.5. Relaxation korrelierter Ionen . . . . .	119
4.6. Kontrolle der Kopplungsstärke . . . . .	120
4.6.1. Rydberg-Zustand und Dichte der Grundzustandsatome . . . .	121
4.6.2. Dauer der Rydberg-Anregung . . . . .	125
4.6.3. Laserverstimmung . . . . .	127
4.6.4. Anteil ionisierter Rydberg-Atome . . . . .	130
4.7. Maximierung der Kopplungsstärke . . . . .	131
<b>5. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>135</b>
<b>Anhang</b>	<b>139</b>
<b>A. Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung in periodischen Systemen</b>	<b>141</b>
A.1. Ewald-Summation . . . . .	141
A.2. Fast Multipole Method (FMM) . . . . .	146
<b>B. Analyse der Fluoreszenzspektren</b>	<b>149</b>
<b>C. Kinetische Theorie der Plasmadynamik</b>	<b>155</b>
<b>D. Quantendynamik der Rydberganregung</b>	<b>161</b>

# 1. Einleitung

Bis Ende der 70er Jahre galt flüssiges Helium mit Temperaturen um 4 Kelvin als kältester experimentell zugänglicher Zustand der Materie. Mit der Entwicklung der Laserkühlung [11, 20, 57, 280] konnte diese Schranke jedoch in weniger als 20 Jahren um viele Größenordnungen unterboten werden. Dieser rasante Fortschritt experimenteller Techniken zur Präparation atomarer und molekularer Ensembles mit nur wenigen Hundert Nanokelvin über dem absoluten Nullpunkt führte schließlich 1995 zur ersten Erzeugung eines Bose-Einstein-Kondensats [8, 67] und leitete eine neue Ära in der Atomphysik ein. Während sich die Erforschung dieser ultrakalten Gase zunächst auf schwache und kurzreichweitige Wechselwirkungen konzentrierte [9, 119, 175, 184, 249], eröffnen sich heutzutage faszinierende Möglichkeiten, stark korrelierte Vielteilchensysteme mit langreichweitigen Wechselwirkungen zu untersuchen, in denen die zufällige thermische Dynamik der Teilchen selbst bei extrem geringen Dichten eine untergeordnete Rolle spielt. Als besonders vielversprechend erweisen sich hierbei polare Moleküle [19, 154] oder sehr hoch angeregte, so genannte *Rydberg-Atome* [60, 89, 172, 200, 232], die aufgrund ihrer starken Dipol-Dipol- oder Van-der-Waals-Wechselwirkung zu komplexen kollektiven Effekten [87, 173, 244, 260] oder exotischen Materiezuständen [58, 121] führen.

Die interatomaren Kräfte werden jedoch noch einmal um viele Größenordnungen von der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den atomaren Bestandteilen, d.h. zwischen Elektronen und Ionen, übertroffen. Die kontrollierte Erzeugung freier Elektronen und Ionen in einem ultrakalten Gas gelang erstmals 1999 durch Photoionisation lasergekühlter Xenon-Atome [140]. Eine hinreichend starke Ionisierung führte dabei zur Ausbildung eines metastabilen neutralen Plasmazustandes. In der Folgezeit konnten diese so genannten *ultrakalten Plasmen* (UKP) aus einer Vielzahl atomarer [56, 62, 140, 227] und molekularer [189] Spezies erfolgreich produziert werden, wodurch heutzutage verschiedenste Eigenschaften von UKP erforscht werden können. Hierzu zählen plasmaphysikalische Fragestellungen wie die freie Expansion eines Plasmas ins Vakuum [149, 153, 188, 202, 204, 224, 225, 263], die Eigenschaften von ionischen [50, 182, 242] und elektronischen kollektiven Moden [27, 82, 174, 181] oder Plasma-Instabilitäten [229, 286]; aber auch atomphysikalische Prozesse wie die Rekombination von Elektronen und Ionen zu neutralen Atomen sind intensiv untersucht worden [26, 83, 110, 141, 210], d.h. die Bildung von hoch angeregten Rydberg-Atomen bei extrem tiefen Temperaturen. Umgekehrt kann sich aus einem ultrakalten Rydberg-Gas spontan ein UKP bilden [165, 227], was den engen Zusammenhang zwischen diesen beiden Systemen zu verdeutlichen vermag [88, 105]. Neben diesen fundamentalen Aspekten finden UKP auch technische Anwendung, z. B. zur Erzeugung von kalten Elektronenstrahlen [59, 179] und Ionenstrahlen [118, 217], die u.a. in der Nanotechnologie eine wichtige Rolle spielen.

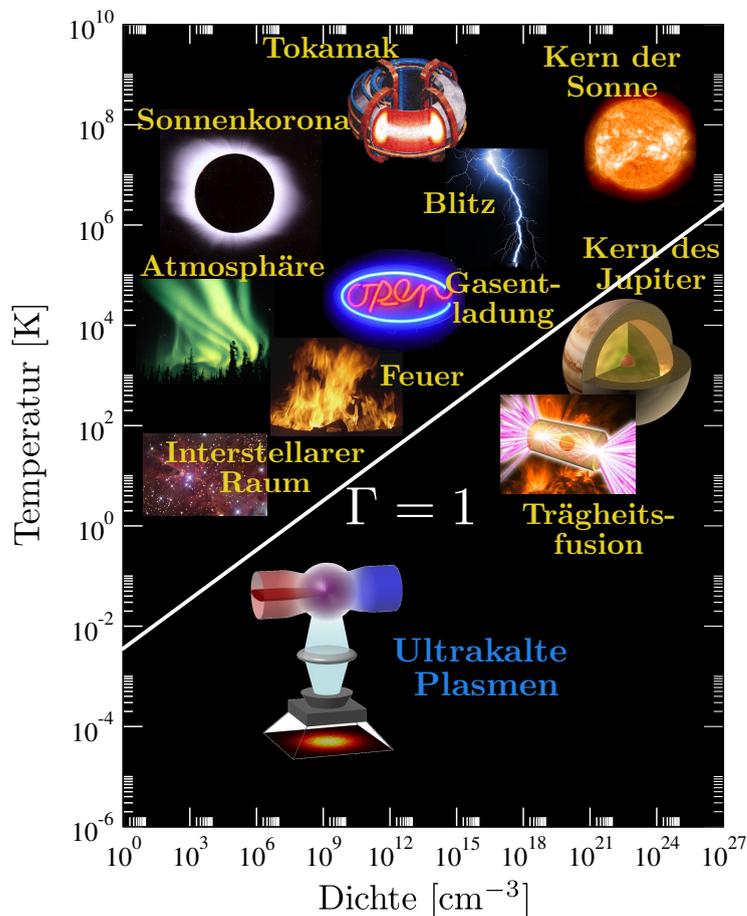


Abbildung 1.1.: Einordnung verschiedener Plasmen in der Temperatur-Dichte-Ebene.

Die charakteristischen Dichten und Temperaturen von UKP sind in Abbildung 1.1 schematisch dargestellt, zusammen mit einer Vielfalt an natürlich vorkommenden und künstlich erzeugten Plasmen, die sich über einen enormen Parameterbereich erstrecken. Zum Großteil besitzen diese deutlich höhere Dichten im Bereich bis  $\rho \lesssim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  und sehr hohe Temperaturen von  $T \gtrsim 10^3 \text{ K}$ . Letztere sind erforderlich, um einen stabilen Plasmazustand aufrecht zu erhalten, bei dem sich Rekombinations- und Ionisationsprozesse die Waage halten.

In der Regel können solche Hochtemperatur-Plasmen als ideale Systeme angesehen werden, deren Verhalten hauptsächlich durch kollektive Effekte aufgrund der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung und weniger durch Korrelationseffekte bestimmt wird. Die Bedeutung von Korrelationen kann mittels des so genannten Coulomb-Kopplungsparameters  $\Gamma$  charakterisiert werden, der das Verhältnis aus mittlerer potentieller zu kinetischer Energie eines Plasmateilchens angibt. In idealen oder schwach gekoppelten Plasmen dominiert die thermische Energie, d.h.  $\Gamma < 1$ .

Daneben findet man aber auch exotischere, stark korrelierte Plasmazustände, wie beispielsweise im Inneren von Sternen oder großen Gas-Planeten (siehe Abbildung 1.1). Die starke Kopplung ergibt sich hierbei aus den extremen Dichten dieser Systeme, so dass auch bei hohen Temperaturen die direkte Wechselwirkung der Ladungen entscheidend ist [35, 76, 125, 192, 214, 215]. Die hohen Dichten, die in der Regel zur Erzeugung von stark gekoppelten Plasmen nötig sind, lassen sich auf der Erde z.B. durch Ionisation von Festkörpern und schockartige Kompression realisieren [2, 51, 90, 98, 158, 171, 221]. Neben bedeutenden fundamentalen Fragestellungen bezüglich stark korrelierter Vielteilchensysteme und ihrer astrophysikalischen Relevanz sind stark gekoppelte Plasmen auch für zukünftige Technologien wie die Trägheitsfusion [171] von großer Wichtigkeit.

Im Gegensatz dazu erlauben die extrem tiefen Temperaturen in UKP den Bereich der starken Kopplung schon bei sehr geringen Dichten von  $\rho \sim 10^9 \text{ cm}^{-3}$  zu erreichen. Da die typische Zeitskala der Plasmadynamik stark mit abnehmender Dichte zunimmt, läuft die Evolution von UKP wesentlich langsamer ab. Zusammen mit dem hohen Maß an experimenteller Kontrolle bei der Erzeugung sowie dem umfangreichen zur Verfügung stehenden Instrumentarium zur Diagnose ultrakalter Gase bieten UKP damit vielversprechende Voraussetzungen zur genauen Untersuchung von Relaxationsprozessen in stark gekoppelten Plasmen.

## 1.1. Erzeugung und Evolution ultrakalter Plasmen

Den Ausgangspunkt zur Herstellung eines UKP bilden kalte Atome mit Temperaturen im Bereich von wenigen Hundert Mikrokkelvin bis zu einigen Millikelvin. Diese Temperaturen werden durch Dopplerkühlung in einer magneto-optischen Falle erreicht, welche gleichzeitig einen stabilen Einschluss der kalten Atome gewährleistet. Nach Abschalten der Falle wird ein Bruchteil von 10% – 50% der Atome mittels schmalbandiger Laser ionisiert. Um eine möglichst hohe Ionisationseffizienz zu erzielen, erfolgt diese in der Regel über einen resonanten Zweiphotonenprozess, d.h. mit Hilfe von zwei Laserfeldern. Während die Ionen zunächst die Temperatur der zuvor gekühlten Atome beibehalten, wird wegen des ungleichen Massenverhältnisses zwischen Ionen und Elektronen die Überschussenergie der absorbierten Photonen nahezu vollständig an die ionisierten Elektronen übertragen. Durch Variation der Laserfrequenz lässt sich damit die anfängliche Elektronentemperaturen präzise in einem weiten Bereich von  $T_e \sim 1 - 1000 \text{ K}$  einstellen.

Unmittelbar nach der Photoionisation verlässt ein Bruchteil ( $< 5\%$ ) der freien Elektronen das Reaktionszentrum [142]. Dieser Teilchenverlust endet, sobald die daraus resultierende positive Raumladung der Ionen den Großteil der erzeugten Elektronen einfängt, so dass sich ein quasineutrales Plasma bildet.

Das so erzeugte Plasma durchläuft im Anschluss verschiedene Relaxationsstadien, die zum einen zu einem erheblichen Temperaturanstieg und zum anderen zum Zerfall des Plasmas, d.h. zur Bildung von neutralen Atomen, führen. Der typische Verlauf der Elektronen- und Ionentemperatur,  $T_e$  bzw.  $T_i$ , ist schematisch in Abbildung 1.2 dargestellt. Da das Plasma fernab vom Gleichgewicht erzeugt wird, relaxieren die

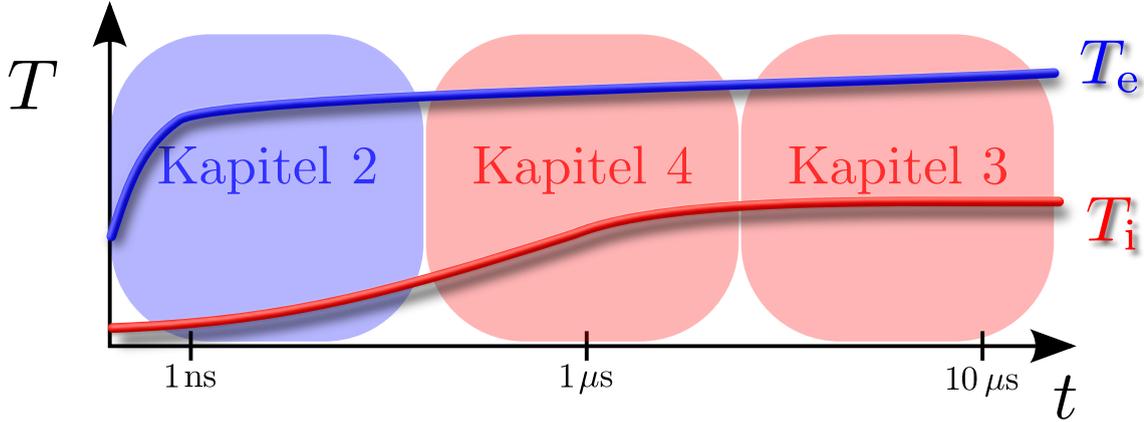


Abbildung 1.2.: Schematische Darstellung der Entwicklung von Elektronen- und Iontemperatur,  $T_e$  bzw.  $T_i$ . Die Kurzzeitdynamik wird durch elektronisches Korrelationsheizen und Rekombination dominiert (Kapitel 2), später setzt das ionische Korrelationsheizen ein (Kapitel 4), und die Dynamik bei langen Zeiten wird geprägt durch Relaxationsprozesse in einem metastabilen Gleichgewicht (Kapitel 3).

Elektronen und Ionen zunächst separat auf eine lokale quasistationäre thermische Verteilung. Die hierfür typische Zeitskala kann durch die inverse Plasmafrequenz

$$\omega_{p,e/i}^{-1} = \sqrt{\frac{m_{e/i}}{4\pi e^2 \rho_{e/i}}} \quad (1.1)$$

charakterisiert werden. Sie gibt die Zeit an, die ein Elektron bzw. Ion der Masse  $m_{e/i}$  zur Überwindung des mittleren Teilchenabstands benötigt, wenn es durch ein Teilchen mit der Elementarladung  $e$  beschleunigt wird. Für typische Plasmadichten stellt sich der elektronische Gleichgewichtszustand bereits nach  $\omega_{p,e}^{-1} \sim \text{ns}$  ein.

Diese Thermalisierung der Elektronen führt zu einem starken Temperaturanstieg [142, 151] (siehe Abbildung 1.2), da die Elektronenrelaxation auch mit einer Umwandlung von potentieller in kinetische Energie verbunden ist. Gleichzeitig setzen auch Rekombinationsprozesse ein, die durch inelastische Elektron-Ion-Stöße getrieben werden und während der gesamten Lebensdauer des Plasmas ablaufen. Die Bildung von Atomen führt ebenfalls zu einer stetigen, jedoch langsamen Erhöhung der Elektronentemperatur (siehe Abbildung 1.2). In Kapitel 2 werden wir uns beiden Prozessen intensiver widmen, um insbesondere den bislang ungeklärten Ablauf der Atombildung bei tiefen Temperaturen besser zu verstehen.

Die Ionendynamik kommt erst deutlich nach dem elektronischen Korrelationsheizen in Gang und führt zu einer Equilibrierung der Ionen auf der Zeitskala von  $\omega_{p,i}^{-1} \sim \mu\text{s}$ . Analog zur elektronischen Thermalisierung kommt es auch hier aufgrund der Ausbildung von räumlichen Korrelationen zwischen den Ionen zu einem starken Heizen (siehe Abbildung 1.2). Dieses erhöht die ionische Temperatur von den ursprünglichen  $T_i \approx 1 \text{ mK}$  auf  $T_i \approx 1 \text{ K}$ . In Kapitel 4 werden wir dieses Korrelationsheizen [95, 142, 191, 207] näher betrachten und ein neuartiges Verfahren zur

Plasmaerzeugung vorstellen, das eine starke Unterdrückung der Heizprozesse und die erstmalige Realisierung von sehr stark gekoppelten UKP ermöglicht.

Da das System nicht durch elektrische oder magnetische Felder eingeschlossen ist, beginnt das Plasma zudem frei ins Vakuum zu expandieren. Dieser Prozess wird allein durch den thermischen Druck der Elektronen getrieben und läuft deshalb auf deutlich längeren Zeitskalen ab, wodurch Dichte und Temperatur des Plasmas langsam abnehmen. Für hinreichend große Plasmen und typische Zeitspannen von  $t \lesssim 10 \omega_{p,i}^{-1}$  ist die Expansionsgeschwindigkeit im Zentrum der Plasmawolke jedoch vernachlässigbar. Daraus ergeben sich nahezu konstante Bedingungen, die eine detaillierte Analyse des so erzeugten metastabilen Gleichgewichtszustands gestatten. Diesen Aspekt werden wir in Kapitel 3 nutzen, um erstmals die stoßgetriebene Relaxationsrate von stark gekoppelten Plasmen aus direkten zeitaufgelösten Messungen zu bestimmen.

Den langsamsten Relaxationsprozess bilden elastische Elektron-Ion-Stöße, die während der gesamten Evolution des Plasmas von untergeordneter Bedeutung bleiben [206]. Somit können wir während der kompletten Lebensdauer des Plasmas von einem Zweitemperatursystem von Elektronen und Ionen mit  $T_e \gg T_i$  ausgehen.

Insgesamt weist die Evolution eines UKP also ein Fülle von Prozessen auf, die teilweise auf wohlseparierten Zeitskalen ablaufen, sich teilweise aber auch zeitlich überschneiden. Daraus ergibt sich eine interessante, jedoch ebenso komplexe Dynamik, die eine theoretische Beschreibung von UKP vor einige Herausforderungen stellt, welche wir im nächsten Abschnitt kurz beleuchten wollen.

## 1.2. Theoretische Zugänge

Im Gegensatz zu vielen dichten Plasmen und ultrakalten atomaren Systemen können UKP in der Regel klassisch beschrieben werden. Dies wird zum Beispiel an dem Verhältnis aus kinetischer Energie und der Fermi-Energie  $E_F$  der Elektronen

$$\Theta = \frac{k_B T_e}{E_F} \quad (1.2)$$

deutlich [126]. Hierbei bezeichnet  $k_B$  die Boltzmann-Konstante, und die Fermi-Energie ist gegeben durch

$$E_F = \frac{(\hbar k_F)^2}{2m_e} \quad (1.3)$$

mit der Fermi-Wellenzahl

$$k_F = (3\pi^2 \rho)^{1/3}. \quad (1.4)$$

Selbst bei den tiefsten bisher in UKP erreichten Temperaturen von  $T_e \approx 0.1$  K sind die Elektronen aufgrund der geringen Dichten von  $\rho \approx 10^9$  cm<sup>-3</sup> weit entfernt von einer Entartung,  $\Theta \gtrsim 10^3$  und können deshalb klassisch beschrieben werden. Ebenso bilden rekombinierende Atome aufgrund der geringen Temperaturen überwiegend so hoch angeregte Bindungszustände, dass eine klassische Beschreibung zulässig ist. Die Ionen können daher aufgrund ihrer sehr viel größeren Masse ebenfalls klassisch behandelt werden [215]. So verhalten sich ionische Ein-Komponenten-Plasmen, d. h.

lasergekühlte Ionen [129, 143, 185], selbst bei sehr viel geringeren Temperaturen vollkommen klassisch und bilden klassische Wigner-Kristalle [279].

Die Eigenschaften klassischer Plasmakomponenten lassen sich, abgesehen von dem Massenverhältnis der einzelnen Spezies, durch eine einzige Größe, den *Coulomb-Kopplungsparameter*,

$$\Gamma_{e/i} = \frac{e^2}{a} \frac{1}{k_B T_{e/i}} \quad (1.5)$$

charakterisieren. Er beschreibt das Verhältnis aus der Wechselwirkungsenergie  $e^2/a$  der Ladungen bei einem mittleren Abstand

$$a = \left( \frac{4}{3} \pi \rho \right)^{-\frac{1}{3}} \quad (1.6)$$

und ihrer mittleren kinetischen Energie  $\sim k_B T_{e/i}$ . Der Kopplungsparameter  $\Gamma$  bestimmt also die Bedeutung von Wechselwirkungseffekten und stellt damit ein Maß für den Einfluss von Korrelationen im Plasma dar.

Die Stärke von räumlichen Korrelationen in schwach gekoppelten Plasmen lässt sich alternativ auch über die *Debye-Länge*

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi e^2 \rho}} \quad (1.7)$$

ausdrücken. Diese gibt den Abstand an, bei dem das Coulomb-Potenzial einer Ladung durch umgebende Plasmateilchen abgeschirmt wird. Für sehr kleine  $\Gamma$  ist die Debye-Länge groß und viele Ladungen tragen zur Abschirmung eines einzelnen Teilchens bei ( $\rho \lambda_D^3 \gg 1$ ). In endlichen Systemen, wie UKP, ist das Verhältnis aus der Abschirmlänge und der Systemgröße entscheidend für die Existenz eines Plasmas. Um eine makroskopische Neutralität des Plasmas zu gewährleisten, muss die Systemgröße  $\lambda_D$  deutlich übersteigen. Für die typischen Parameter eines UKP findet man mit  $\lambda_D \sim \mu\text{m}$  einen Wert, der weitaus geringer als der typische Durchmesser der Plasmawolke von  $\sigma \sim 200 - 1500 \mu\text{m}$  ist.

Schwach gekoppelte Plasmen können wir in der Regel im Rahmen einer Entwicklung in  $\Gamma$  beschreiben [39, 123, 124]. Die Limitierung eines solchen Ansatzes auf  $\Gamma \lesssim 1$  zeigt sich direkt anhand des Zusammenhangs zwischen der Debye-Länge und dem Kopplungsparameter

$$\frac{a}{\lambda_D} = (3\Gamma)^{-1/2}. \quad (1.8)$$

Im stark gekoppelten Bereich wird demnach die Abschirmlänge kleiner als der mittlere Teilchenabstand  $a$ . Dies würde offensichtlich ein Verschwinden jeglicher Wechselwirkung bedeuten, so dass das Konzept der Debye-Abschirmung folglich zusammenbricht.

Wie eingangs beschrieben, heizen sich UKP nach ihrer Erzeugung rasch auf. Dies führt zu einer stringenten Limitierung der elektronischen Kopplungsstärken auf  $\Gamma_e \lesssim 1$  und der ionischen Kopplungsstärken auf  $\Gamma_i \approx 1 - 3$ . Damit realisieren UKP neutrale Zwei-Komponenten-Plasmen mit schwach korrelierten Elektronen und stark

gekoppelten Ionen, wodurch sich die theoretische Behandlung einiger Fragestellungen erheblich vereinfacht.

So kann beispielsweise die langsame Expansion des Plasmas und die Entwicklung der Elektronentemperatur  $T_e$  mit hydrodynamischen Gleichungen [142, 149] oder Vlasov-Gleichung [110, 153], welche Elektronenkorrelationen gänzlich vernachlässigen, gut beschrieben werden. Um die korrelierte Dynamik der Ionen zu behandeln, wurden diese Ansätze mit molekulardynamischen (MD) Simulationen kombiniert [203, 204, 207], die es erlauben, die Evolution des Plasmas auch auf langen Zeiten zu verfolgen. Für die Kurzzeitdynamik der Elektronen bietet sich ebenso ein solcher Ansatz an [18, 151, 152, 174, 178, 197], wobei dann die Ionen als statisch angesehen werden können und lediglich einen neutralisierenden Hintergrund darstellen.

Eine vollständige mikroskopische Beschreibung im Rahmen von MD-Simulationen beider Teilchensorten ist jedoch aufgrund der hohen numerischen Komplexität selbst mit heutigen Computerkapazitäten nicht möglich. Wir werden daher in dieser Arbeit die für die jeweiligen Relaxationsprozesse relevanten Zeitskalen isolieren und nach geeigneten Ansätzen suchen, die eine weitestgehend näherungsfreie Beschreibung gestatten. Insbesondere kann die verhältnismäßig langsame Expansion des Plasmas für alle hier relevanten Fragestellungen ausgenommen werden. Wir konzentrieren uns damit zu großen Teilen auf Prozesse im Zentrum der ultrakalten Plasmawolke, die auch ein ideales Modellsystem für ausgedehnte Plasmen im thermodynamischen Limes darstellt.

### 1.3. Aufbau der Arbeit

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit Effekten von starken Korrelationen auf verschiedene Relaxationsprozesse, die insbesondere, aber nicht ausschließlich in UKP eine bedeutende Rolle spielen. Neben dem fundamentalen Interesse an diesen Prozessen gilt ein Augenmerk auch möglichen experimentellen Tests der getroffenen Vorhersagen. Ein solcher Test konnte bereits in enger Zusammenarbeit mit Prof. Thomas C. Killian (Rice University, Houston, USA) realisiert werden, dessen Ergebnisse in Kapitel 3 vorgestellt werden. Die ersten beiden Hauptteile der Arbeit sind der elektronischen Komponente (Kapitel 2) und der Relaxation der Ionen (Kapitel 3) gewidmet. Im dritten Teil (Kapitel 4) wird die Relaxation von ionischen Korrelationen detailliert untersucht, wobei ein alternatives Verfahren zur Plasmaerzeugung entworfen wird, das in naher Zukunft ein neues Parameterregime für UKP eröffnen könnte.

Die Relaxation von Bindungszuständen, d. h. die stoßinduzierte Bildung von Atomen im ultrakalten Regime, steht im Zentrum von Kapitel 2. Für ideale Plasmen ist dieser Prozess gut verstanden und kann fundiert im Rahmen von isolierten Dreikörper-Kollisionen beschrieben werden. Wie wir in Abschnitt 2.1 sehen werden, bricht dieser Ansatz jedoch im stark gekoppelten Regime zusammen, und eine geeignete Erweiterung ist bislang umstritten. Dies ist unter anderem darauf zurückzuführen, dass eine weitgehend näherungsfreie Behandlung dieser Problematik mit einem erheblichen numerischen Aufwand verbunden ist. In Abschnitt 2.2 werden wir uns dieser

Aufgabe im Rahmen von klassischen Simulationen, basierend auf einem eigens entwickelten Propagationsalgorithmus, stellen. Daneben zieht die Charakterisierung der atomaren Bindungszustände, d.h. die Einführung eines chemischen Bildes, in stark gekoppelten Plasmen ein besonderes Problem nach sich, das in Abschnitt 2.3 gelöst werden wird. Dies ermöglicht schließlich, die Rekombinationsrate im stark gekoppelten Bereich zu bestimmen, welche in Abschnitt 2.3.3 eingehend diskutiert wird. Da in UKP-Experimenten bislang jedoch nur schwach gekoppelte Elektronen erzeugt werden konnten, wird letztlich in Abschnitt 2.4 die Rekombinationsdynamik auch unter dem zusätzlichen Einfluss des elektronischen Korrelationsheizens analysiert. Hierbei stellt sich heraus, dass die elektronische Kopplungsstärke unabhängig vom Ausgangszustand des Plasmas auf  $\Gamma \lesssim 0.5$  limitiert bleibt. Die sich daraus ergebenden Konsequenzen für eine experimentelle Messung des geänderten Rekombinationsverhaltens bei tiefen Temperaturen werden erörtert und denkbare Perspektiven für zukünftige Experimente aufgezeigt.

In Kapitel 3 werden wir die Evolution der ionischen Geschwindigkeitsverteilung betrachten, die durch elastische Ion-Ion-Kollisionen getrieben wird. Dieser Prozess setzt wesentlich später ein als die Rekombination (siehe Abbildung 1.2) und läuft auf deutlich längeren Zeitskalen  $\omega_{p,i}^{-1}$  ab. In Abschnitt 3.1 wird die Landau-Spitzer-Theorie zur Beschreibung von Stoßprozessen in schwach gekoppelten Plasmen skizziert. Da diese wiederum für große  $\Gamma$  ihre Gültigkeit verliert, werden in diesem Abschnitt außerdem bisher vorgeschlagene Erweiterungen thematisiert sowie damit verbundene Probleme sowohl aus theoretischer als auch experimenteller Sicht beleuchtet. Im Rahmen dieser Arbeit konnten nun erstmals direkte Messungen [48] der Relaxationsraten im stark gekoppelten Bereich realisiert werden, die in Abschnitt 3.2 vorgestellt werden. Die Grundidee basiert auf einer gezielten Lasermanipulation von internen Ionenzuständen. Die mit Hilfe von quanten-klassischen Vielteilchensimulationen realisierte theoretische Beschreibung wird in Abschnitt 3.3 näher erläutert. Diese Rechnungen gestatten einerseits die Bestimmung der Relaxationsdynamik aus den experimentellen Rohdaten und erlauben andererseits, das Relaxationsverhalten in einem vielfach erweiterten Parameterbereich zu studieren. Im Regime starker Kopplung finden wir signifikante Retardierungseffekte, weshalb in Abschnitt 3.4 ein einfaches nicht-markovsches Relaxationsmodell besprochen werden soll, das eine direkte Bestimmung der Relaxationsraten aus der laser-induzierten Plasmadynamik ermöglicht. Die resultierenden Raten werden in Abschnitt 3.5 eingehend diskutiert, wobei insbesondere deren Geschwindigkeitsabhängigkeit und die Relaxationsdynamik bei hohen  $\Gamma$  im Vordergrund stehen. Hierbei zeigt sich, dass Korrelationseffekte sogar bereits in schwach gekoppelten Plasmen einen signifikanten Einfluss auf die Relaxationsdynamik haben können. Um diesen Aspekt näher zu beleuchten, wird in Abschnitt 3.6 die Relaxationsrate im Rahmen einer kinetischen Beschreibung im Limes schwacher Kopplung berechnet.

Wenngleich die Messungen zur ionischen Geschwindigkeitsrelaxation zeigen, dass die ionische Komponente von UKP einen vielversprechenden Zugang zur Untersuchung stark gekoppelter Plasmen bietet, kann dieses Potential aufgrund des starken Korrelationsheizens in derzeitigen Experimenten nicht voll ausgeschöpft werden. In Kapitel 4 wird deshalb ein alternatives Verfahren zur Plasmaerzeugung vorgeschla-

gen, das mit äußerst geringem zusätzlichem Aufwand die ionische Kopplungsstärke um mindestens eine Größenordnung steigern kann. Nach einer ausführlichen Erläuterung der derzeitigen Probleme bei der Plasmaerzeugung in Abschnitt 4.1 wird in 4.2 die Grundidee dieses neuen Verfahrens präsentiert. Ausgangspunkt ist die Anregungsblockade von stark wechselwirkenden Rydberg-Atomen, über deren theoretische Beschreibung Abschnitt 4.3 informiert. Diese führt zu starken atomaren Korrelationen, so dass die selektive Ionisation eines solchen ultrakalten Rydberg-Gases (Abschnitt 4.4) zu einem erheblichen Anstieg der ionischen Kopplungsstärke im Zuge der anschließenden Thermalisierung (Abschnitt 4.5) führt. Zur Optimierung des Verfahrens werden in Abschnitt 4.6 die verschiedenen Möglichkeiten zur Kontrolle der erreichbaren Kopplungsstärken ausführlich diskutiert und abschließend in Abschnitt 4.7 die wesentlichen Voraussetzungen zur Maximierung der Korrelationen zusammengefasst.



## 2. Bildung von Rydbergatomen

Die Rekombination von Elektronen und Ionen zu neutralen Atomen stellt den bestimmenden Faktor für die Lebensdauer ultrakalter Plasmen dar. Wegen der tiefen Temperaturen gibt es keinen stabilen Plasmazustand und das Plasma zerfällt innerhalb einiger hundert  $\mu\text{s}$ . Der Gleichgewichtszustand des Systems entspricht dem atomaren Gas, das zuvor Ausgangspunkt für die Erzeugung des Plasmas war. Dieses Verhalten steht im krassen Gegensatz zu Hochtemperaturplasmen, bei denen sich aufgrund der hohen Teilchenenergien ein Gleichgewicht zwischen Ionisation und Rekombination einstellt, das zu stabilen Plasmazuständen führt.

Allgemein ist die Rekombination in atomaren Plasmen in drei Mechanismen einteilbar: (i) Strahlungsrekombination, bei der ein Elektron und ein Ion unter Aussendung eines Photons ein Atom bilden, (ii) dielektronische Rekombination, bei der die frei werdende Bindungsenergie des rekombinierenden Elektrons in die Anregung eines anderen gebundenen Elektrons des neu entstandenen Atoms übergeht, und (iii) Dreikörper-Rekombination (DKR), bei der ein Dreierstoß zwischen zwei Elektronen und einem Ion zur Bildung eines Atoms führt, wobei das zusätzliche Elektron zur Erhaltung von Impuls und Energie dient.

In kalten Plasmen ist lediglich der letzte Mechanismus relevant, da die DKR-Rate mit der Elektronentemperatur<sup>1</sup>  $T$  wie

$$\nu \sim T^{-9/2} \quad (2.1)$$

skaliert [177], während die anderen Mechanismen eine Abhängigkeit von  $\sim T^{-1}$  oder schwächer aufweisen [252]. Dadurch übersteigt im Regime der UKP die stoßinduzierte Rekombination die anderen Rekombinationsprozesse um mehr als sechs Größenordnungen.

Sowohl experimentelle als auch theoretische Arbeiten haben die Skalierung (2.1) für heiße Plasmen ( $T > 1000$  K) bestätigt [122, 177]. Im ultrakalten Bereich liefert Gleichung (2.1) jedoch offensichtlich eine Divergenz der Rate, die zu unphysikalisch großen Werten von  $\nu$  führt. Bereits für Temperaturen  $T \lesssim 3$  K wird die Rekombinationszeit  $\nu^{-1}$  kleiner als die typische Zeitskala der Dynamik freier Elektronen in UKP. Dieses widersprüchliche Verhalten weist deutlich auf einen Zusammenbruch von Gleichung (2.1) im ultrakalten und somit auch stark gekoppelten Bereich hin. Die ersten Experimente an UKP [140, 141] waren deshalb vor allem durch die Frage nach der Atombildung bei tiefen Temperaturen motiviert, die jedoch bis heute ungeklärt ist.

Zur Beantwortung dieser Frage wird die Rekombination in diesem Kapitel eingehend theoretisch untersucht und eine Lösung der oben skizzierten Problematik

---

<sup>1</sup>Zur Vereinfachung der Notation beziehen sich in diesem Kapitel sämtliche Parameter ohne Index auf elektronische Größen.

aufgezeigt. Für eine detailliertere Darstellung der bisherigen Studien soll zunächst in Abschnitt 2.1 die konventionelle Theorie der stoßinduzierten Rekombination und ihre Limitierung auf schwach gekoppelte Plasmen diskutiert werden. Die Erweiterung dieser Theorie auf den stark gekoppelten Bereich [18] wird in den folgenden Abschnitten vorgenommen und jeweils mit den ursprünglichen Resultaten verglichen. Besonders ausführlich wird die Rekombinationsdynamik isoliert anhand eines einzelnen Ions untersucht, das von einem elektronischen Ein-Komponenten-Plasma umgeben ist. Zusammen mit dem entsprechenden Simulationsverfahren wird dieses Modell in Abschnitt 2.2 erläutert. Die resultierenden Ergebnisse zum „kinetischen Flaschenhals“, der als Kriterium zur Identifikation rekombinierter Elektronen essenziell ist, sowie zur Rekombinationsrate werden in den Abschnitten 2.3.2 und 2.3.3 vorgestellt. Zur Verallgemeinerung dieses Modells auf typische UKP-Experimente werden in Abschnitt 2.4 schließlich Simulationen eines Zwei-Komponenten-Plasmas diskutiert.

## 2.1. Theorie der Drei-Körper-Rekombination und ihre Grenzen

Wie schon in der Einleitung erwähnt, basiert die DKR auf einem Stoß zwischen zwei Elektronen und einem Ion (siehe Abbildung 2.1(a)). Während ein Elektron in der Regel zunächst einen schwachen Bindungszustand mit dem Ion eingeht, dient das zweite Elektron zur Erhaltung von Energie und Impuls. Durch anschließende Stöße des schwach gebundenen Elektron-Ion-Paares mit freien Elektronen kann das gebundene Elektron zu tieferen Bindungszuständen getrieben oder auch wieder ionisiert werden (siehe Abbildung 2.1(b)). Bei der Abregung bzw. der Relaxation der Rydberg-Atome in den Grundzustand wird die frei werdende Bindungsenergie an die freien Elektronen abgegeben und führt im Laufe der Plasmaevolution zu einer Zunahme der Elektronentemperatur  $T$  [83, 110, 204, 224, 225].

Bereits anhand einfacher physikalischer Argumente lässt sich die starke Temperaturabhängigkeit der DKR-Rate  $\nu$  in der Form (2.1) nachvollziehen: In einem Plasma der Elektronentemperatur  $T$  bewegen sich die Elektronen mit der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v \rangle \sim \sqrt{T}$ . Die Stoßfrequenz eines Elektrons beträgt demnach  $\nu_c = \langle v \rangle b^2 \rho$ , wobei der Wirkungsquerschnitt für einen Stoß durch den minimalen Abstand  $b \sim T^{-1}$  zwischen zwei Elektronen abgeschätzt wird. Für einen Drei-Körper-Prozess ist noch ein zusätzliches Elektron in der Nähe der stoßenden Teilchen nötig, um die frei werdende Bindungsenergie aufzunehmen. Die Wahrscheinlichkeit ein weiteres Elektron innerhalb des Abstands  $b$  anzutreffen, beträgt  $b^3 \rho$ . Somit erhält man insgesamt für die DKR-Rate

$$\nu \sim \nu_c b^3 \rho \sim \rho^2 T^{-9/2}. \quad (2.2)$$

Diese starke Temperaturabhängigkeit wurde schon vor mehr als vierzig Jahren sowohl experimentell als auch durch numerische Berechnungen bestätigt [122, 177] und seitdem durch weitere theoretische Arbeiten [210, 252, 271, 290] und Messungen in heißen Plasmen ( $T > 10000$  K) [122, 252, 271] sowie in UKP mit mäßiger Kopplungsstärke ( $\Gamma \lesssim 0.2$ ) [83, 210] untermauert.

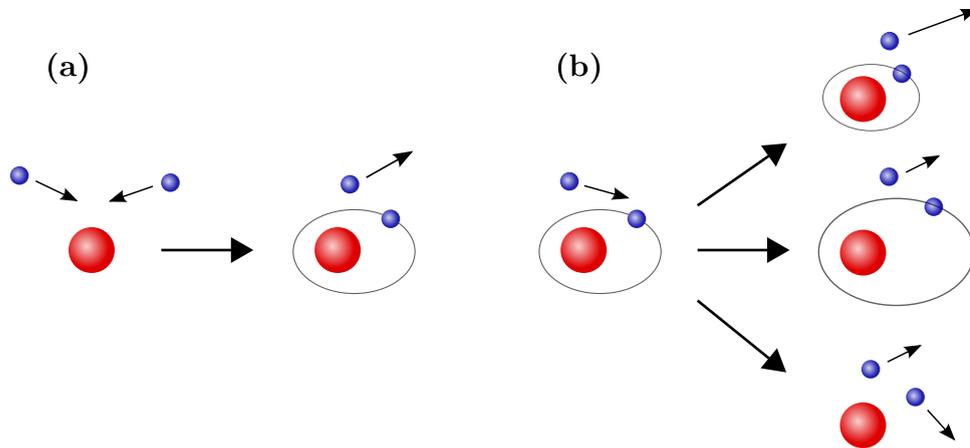


Abbildung 2.1.: (a) Schematische Darstellung der Dreikörperrekombination durch Kollision zweier Elektronen (blau) und einem Ion (rot). (b) Anschließende Stöße zwischen dem neu entstandenen Rydberg-Atom mit freien Elektronen führen zu Abregung, Anregung oder Ionisation des Rydberg-Atoms (von oben nach unten).

Für eine fundiertere theoretische Herleitung des Zusammenhangs (2.2) kommt in der Regel ein System gekoppelter Differentialgleichungen zum Einsatz, das die Evolution der Dichten verschiedener Spezies im Plasma beschreibt. Dieser Formalismus soll im Folgenden zusammengefasst werden.

### 2.1.1. Ratengleichungen

Der konventionelle Ansatz zur Beschreibung der Rekombinationsdynamik [22, 45, 177, 210, 252, 271, 289] basiert auf einem System gekoppelter Differentialgleichungen für die Dichten der freien Elektronen  $\rho_e$  und Ionen  $\rho_i$  sowie die Dichten der gebundenen Zustände  $\rho_n$  in den atomaren Energieniveaus  $n$ . Eine Änderung dieser Dichten wird verursacht durch

- Rekombination freier Elektronen in einen Rydberg-Zustand  $n$  mit der Rate  $R_{\text{rek}}(n)$ ,
- Ionisation von Rydberg-Zuständen  $n$  mit der Rate  $R_{\text{ion}}(n)$ ,
- An- und Abregungsprozesse, die zu einem Übergang des Rydberg-Zustands  $n$  nach  $m$  führen, mit der Rate  $R(n, m)$ .

Diese Prozesse sind schematisch in Abbildung 2.1 skizziert. Ihre Auswirkungen auf die Dichten der verschiedenen Plasmakonstituenten lassen sich kompakt in Form der Ratengleichungen

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_n}{dt} = & \rho_e(t) \sum_{n' \neq n} [\rho_{n'}(t) R(n', n) - \rho_n(t) R(n, n')] \\ & + \rho_e(t)^3 R_{\text{rek}}(n) - \rho_e(t) \rho_n(t) R_{\text{ion}}(n), \end{aligned} \quad (2.3a)$$

$$\frac{d\rho_e}{dt} = \rho_e(t) \sum_{n'} [\rho_{n'}(t) R_{\text{ion}}(n') - \rho_e(t)^2 R_{\text{rek}}(n')] \quad (2.3b)$$

ausdrücken. In den Gleichungen (2.3) wurde der Fall eines neutralen Plasmas angenommen, d. h.  $\rho_i = \rho_e$  und  $\dot{\rho}_i = \dot{\rho}_e$ . Der Term  $\rho_e(t)^3 R_{\text{rek}}(n)$  entspricht also dem Dreierstoß zwischen zwei freien Elektronen und einem Ion, der zu einem Bindungszustand im Niveau  $n$  führt, während alle anderen Terme binäre Stöße zwischen Elektronen und angeregten Atomen repräsentieren.

Zur Illustration der resultierenden Rydberg-Zustandsdynamik sehen wir in Abbildung 2.2 die Ergebnisse der numerischen Lösung des Gleichungssystems (2.3) unter Verwendung der im nächsten Abschnitt vorgestellten Übergangsraten. Die hohen Rydberg-Zustände ( $n \gtrsim 50$ ) werden innerhalb weniger ns populiert. Da die Größe und damit auch der Wirkungsquerschnitt der Rydberg-Atome mit dem Anregungsniveau abnimmt, sind zum Erreichen tiefer liegender Bindungszustände jedoch deutlich längere Zeiten nötig. Die dargestellten Niveau-Populationen mit  $n > 1$  nehmen zunächst linear zu, bis sich ein stationärer Zustand einstellt, in dem sich An- und Abregungsprozesse die Waage halten (*detailliertes Gleichgewicht*). Diese Gleichgewichtsverteilung  $\rho_n^G$  der Dichten gehorcht der Boltzmann-Statistik und ist durch die Saha-Gleichung [22, 233, 290]

$$\frac{\rho_n^G}{\rho_i} = \rho_e \Lambda_{\text{th}}^3 n^2 \exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right) \quad (2.4)$$

gegeben (siehe Abbildung 2.3), wobei  $\Lambda_{\text{th}} = \sqrt{\frac{h^2}{2\pi m k_B T}}$  die thermische de-Broglie-Wellenlänge,  $E_n = -\mathcal{R}/n^2$  die Energie des Rydberg-Zustands  $n$ ,  $\mathcal{R}$  die Rydberg-Konstante,  $h$  die Planck-Konstante,  $m$  die Elektronenmasse und  $k_B$  die Boltzmann-Konstante bezeichnen. Bei den hier betrachteten Temperaturen ist die Ionisation aus dem Grundzustand vernachlässigbar klein, so dass die Grundzustandspopulation weiter linear anwächst, solange noch freie Ionen und Elektronen im Plasma vorhanden sind.

Bates, Kingston und McWhirter [22] nutzten die gegenüber  $\rho_1$  deutlich raschere Relaxation der hohen Anregungszustände, um die Rate der Grundzustandspopulationszunahme (bzw. die gesamte Rekombinationsrate)  $\nu$  mit Hilfe einer quasistatischen Näherung zu bestimmen. Dazu nimmt man einen stationären Zustand für alle an-

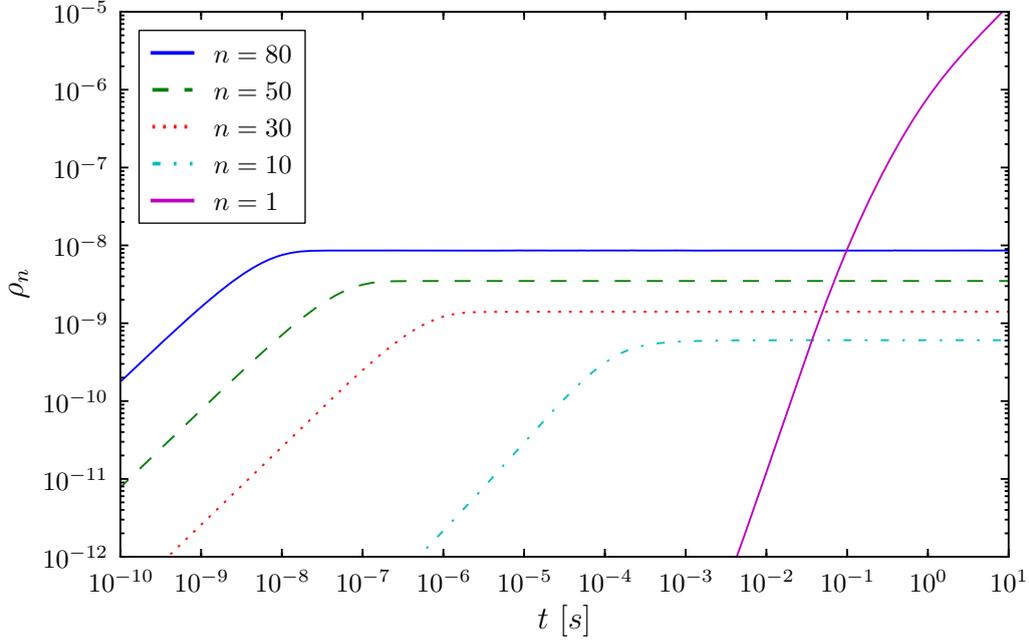


Abbildung 2.2.: Evolution der Levelpopulationen  $\rho_n$  gemäß den Ratengleichungen (2.3) für eine Plasmadichte  $\rho = 10^8 \text{ cm}^{-3}$  und Elektronentemperatur  $T = 1000 \text{ K}$ .

geregten Energieniveaus direkt nach Einsetzen der Rekombination an und geht von einem unendlich großen Elektronenreservoir aus, d. h. es gilt

$$\frac{d\rho_n}{dt} = 0 \quad \text{für alle } n > 1, \quad (2.5a)$$

$$\frac{d\rho_e}{dt} = 0. \quad (2.5b)$$

Die aus der Bedingung (2.5) resultierende Form der Ratengleichungen (2.3) lässt sich in einer Matrix- und Vektornotation zusammenfassen [290], indem wir die folgenden Größen definieren:

$$\boldsymbol{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_2 \\ \rho_3 \\ \vdots \\ \rho_{n_{\max}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_1 = \begin{pmatrix} R(1,2) \\ R(1,3) \\ \vdots \\ R(1, n_{\max}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_{\text{rek}} = \begin{pmatrix} R_{\text{rek}}(2) \\ R_{\text{rek}}(3) \\ \vdots \\ R_{\text{rek}}(n_{\max}) \end{pmatrix}, \quad (2.6a)$$

$$\hat{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} 0 & R(3,2) & \dots & R(n_{\max},2) \\ R(2,3) & 0 & \dots & R(n_{\max},3) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R(2, n_{\max}) & R(3, n_{\max}) & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.6b)$$

$$D_{ij} = \delta_{ij} \left( \sum_{k=1}^{n_{\max}} R(i+1, k) + R_{\text{ion}}(i+1) \right). \quad (2.6c)$$

In den Gleichungen (2.6) haben wir ein maximales Energieniveau  $n_{\max}$  eingeführt, bei dem das atomare Energiespektrum abgeschnitten wird. Bei der numerischen Auswertung der Ratengleichungen wird  $n_{\max}$  so gewählt, dass die Ergebnisse unabhängig von dieser oberen Grenze sind. Eine Konvergenz wird erreicht, wenn  $n_{\max}$  so groß ist, dass die Zahl der Elektronen, die aus dem Kontinuum in ein Niveau oberhalb von  $n_{\max}$  rekombinieren und anschließend den Grundzustand erreichen, der Zahl der Elektronen gleicht, die aus dem Kontinuum in ein Niveau unterhalb von  $n_{\max}$  rekombinieren und anschließend ionisiert werden [122].

Mit der Bedingung (2.5) und den Größen (2.6) lassen sich die Ratengleichungen (2.3a) für  $n \neq 1$  zusammenfassen zu

$$\hat{\mathbf{D}}\boldsymbol{\rho} = \hat{\mathbf{R}}\boldsymbol{\rho} + \mathbf{R}_1\rho_1 + \mathbf{R}_{\text{rek}}\rho_e^2. \quad (2.7)$$

Für die  $i$ -te Zeile beschreibt nun die rechte Seite in Gleichung (2.7) den Zuwachs und die linke Seite den Verlust der Dichte  $\rho_{i+1}$ .

Mit Gleichung (2.7) stehen  $n_{\max} - 1$  Gleichungen zur Verfügung, die es erlauben, die Populationen  $\rho_n$ ,  $1 < n \leq n_{\max}$ , in Abhängigkeit von  $\rho_1$ ,  $\rho_e$  und den verschiedenen Übergangsraten zu bestimmen. Die resultierenden  $\rho_n$  lassen sich nun in die Ratengleichung (2.3a) für  $n = 1$  einsetzen, und so erhalten wir bei Vernachlässigung der Ionisation aus dem Grundzustand

$$\dot{\rho}_1 = \nu\rho_e. \quad (2.8)$$

Die Rekombinationsrate  $\nu$  ist hierbei mit Hilfe des Vektors

$$\mathbf{R}_1^\dagger = \left( R(2, 1), R(3, 1), \dots, R(n_{\max}, 1) \right) \quad (2.9)$$

definiert als [290]

$$\nu = R_{\text{rek}}(1)\rho_e + \mathbf{R}_1^\dagger \left( \hat{\mathbf{D}} - \hat{\mathbf{R}} \right)^{-1} \mathbf{R}_{\text{rek}}\rho_e. \quad (2.10)$$

Da die Rate  $R_{\text{rek}}(1)$  für eine direkte Rekombination aus dem Kontinuum sehr gering ist, macht der zweite Summand auf der rechten Seite von Gleichung (2.10) den Hauptteil der Rekombinationsrate aus. Dieser Term erlaubt eine stochastische Interpretation des Rekombinationsprozesses, die besonders in der unten folgenden Formulierung der Rate  $\nu$  über die Rekombinationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{rek}}(n)$  deutlich wird. Der Ausdruck in Gleichung (2.10) lässt sich jedoch auch bereits in diesem Sinne interpretieren: Ausgelöst wird der Prozess durch die Rekombination eines freien Elektrons in einen Rydberg-Zustand  $n$  mit der Rate  $\mathbf{R}_{\text{rek}}\rho_e$ . Die Matrix  $(\hat{\mathbf{D}} - \hat{\mathbf{R}})^{-1}$  beschreibt die anschließende Kaskade des Atoms in den Zustand  $m$  über verschiedene Zwischenzustände  $n', n'' \dots$  unter Berücksichtigung aller möglichen Wege im Energieraum. Schließlich geht der am Ende der Kaskade erreichte Zustand  $m$  mit der Rate  $\mathbf{R}_1^\dagger$  in den Grundzustand über.

Um den zugrundeliegenden stochastischen Prozess deutlicher hervorzubringen, führen wir in Gleichung (2.10) eine Taylor-Entwicklung von  $(\hat{\mathbf{D}} - \hat{\mathbf{R}})^{-1}$  durch und schreiben die resultierenden Summanden um [290]:

$$\nu = R_{\text{rek}}(1)\rho_e + \rho_e \sum_{n=1}^{n_{\max}} P_{\text{rek}}(n) R_{\text{rek}}(n). \quad (2.11)$$

Die Wahrscheinlichkeit zur Rekombination in den Zustand  $n$

$$P_{\text{rek}}(n) = \frac{R(n, 1)}{A(n)} + \sum_{n' \neq 1, n} \frac{R(n, n') R(n', 1)}{A(n) A(n')} + \dots \quad (2.12)$$

beinhaltet nun die Kaskade in Form einer unendlichen Folge von Summanden, eine anfängliche Rekombination aus dem Kontinuum in den Zustand  $n$  mit der Rate  $\rho_e R_{\text{rek}}(n)$  vorausgesetzt. Die Gesamtrate zum Verlassen des Niveaus  $n$  beträgt dabei  $A(n) = \sum_{n' \neq n} R(n, n') + R_{\text{ion}}(n)$ . Der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.12) entspricht der bedingten Wahrscheinlichkeit für einen direkten Übergang aus dem Niveau  $n$  in den Grundzustand. Der nächste Summand repräsentiert den Prozess zweiter Ordnung, bei dem das im Zustand  $n$  gebundene Elektron vor Erreichen des Grundzustands zwischenzeitlich noch einen anderen Energiezustand  $n'$  einnimmt. Die weiteren Summanden berücksichtigen dann zwei und mehr Zwischenschritte über Zustände  $n', n'', \dots$

### 2.1.2. Stoßinduzierte Übergangsraten zwischen atomaren Zuständen und dem Kontinuum

Wie aus den Gleichungen (2.11) und (2.12) ersichtlich, ist die entscheidende Voraussetzung zur Berechnung der Rekombinationsrate  $\nu$  eine präzise Bestimmung der Übergangsraten  $R(n, m)$  und  $R_{\text{rek}}(n)$ . In der Vergangenheit sind dazu klassische analytische Abschätzungen [108, 109], Born-Näherungen [270], semi-klassische Rechnungen [91] und kombinierte Ansätze [271] gemacht worden. Insbesondere sei hier die grundlegende Arbeit von Mansbach und Keck [177] erwähnt, in der die Übergangsraten mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen klassischer Trajektorien (*classical trajectory monte carlo*, CTMC) (siehe auch Abschnitt 4.4) ermittelt wurden. In diesen Rechnungen werden die newtonschen Bewegungsgleichungen der drei stoßenden Teilchen numerisch integriert und physikalische Größen durch Mittelung über ein Ensemble von Trajektorien mit verschiedenen Anfangsbedingungen gewonnen. Mit ihrer ausführlichen numerischen Analyse konnten Mansbach und Keck die starke Temperaturabhängigkeit (2.2) der Rekombinationsrate  $\nu$  bestätigen und die entsprechende Proportionalitätskonstante berechnen.

In der vorliegenden Arbeit werden die Übergangsraten aus [210] verwendet, die ebenfalls mit CTMC-Rechnungen, jedoch mit deutlich höherer Präzision und unter Berücksichtigung eines wesentlich größeren Energiespektrums als in [177] bestimmt wurden. Die numerischen Daten werden durch die folgenden analytischen Ausdrücke im gesamten untersuchten Bereich akkurat beschrieben:

- Die Anregungsrate vom Niveau  $n$  nach  $n' > n$  ist gegeben durch

$$R(n, n') = k_0 \epsilon_{n'}^{3/2} e^{\epsilon_{n'} - \epsilon_n} \left[ \frac{22}{(\epsilon_n + 0.9)^{7/3}} + \frac{9/2}{\epsilon_n^{5/2} \Delta \epsilon^{4/3}} \right], \quad (2.13)$$

- die Abregungsrate von  $n$  nach  $n' < n$  durch

$$R(n, n') = k_0 \frac{\epsilon_n^{5/2}}{\epsilon_{n'}} \left[ \frac{22}{(\epsilon_{n'} + 0.9)^{7/3}} + \frac{9/2}{\epsilon_{n'}^{5/2} \Delta \epsilon^{4/3}} \right], \quad (2.14)$$

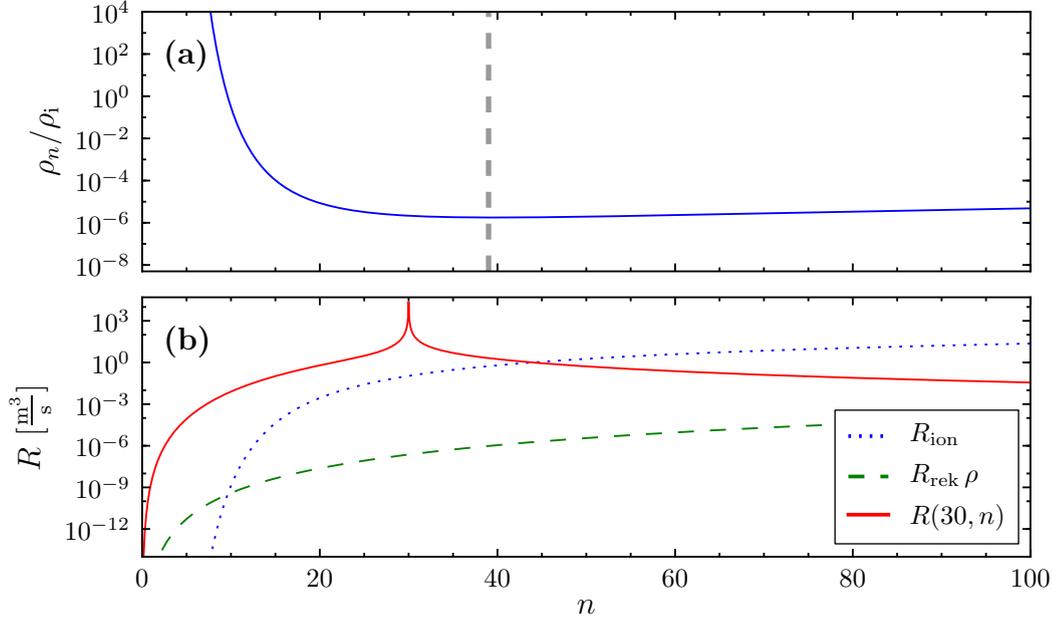


Abbildung 2.3.: Für die Plasmadichte  $\rho = 10^9 \text{ cm}^{-3}$  und Elektronentemperatur  $T = 100 \text{ K}$ : (a) Besetzungswahrscheinlichkeit  $P(n)$  der atomaren Zustände  $n$  im Saha-Gleichgewicht nach Gleichung (2.4). Die senkrechte Linie markiert das Thomson-Niveau  $n_T$  gemäß Gleichung (2.53). (b) Übergangsraten gemäß den Gleichungen (2.13) bis (2.16).

- die Rate für Ionisation eines Atoms im Zustand  $n$  durch

$$R_{\text{ion}}(n) = \frac{11 \sqrt{\mathcal{R}/k_B T} k_0 e^{-\epsilon_n}}{\epsilon_n^{7/3} + 4.38 \epsilon_n^{1.72} + 1.32 \epsilon_n}, \quad (2.15)$$

- die Rate für Rekombination aus dem Kontinuum in den Zustand  $n$  durch

$$R_{\text{rek}}(n) = \frac{11 \sqrt{\mathcal{R}/k_B T} k_0 n^2 \Lambda^3}{\epsilon_n^{7/3} + 4.38 \epsilon_n^{1.72} + 1.32 \epsilon_n}. \quad (2.16)$$

Die Rekombinationsrate  $R_{\text{rek}}$  folgt aus dem detaillierten Gleichgewicht mit der Ionisationsrate  $R_{\text{ion}}$ ,

$$\rho_i \rho_e R_{\text{rek}}(n) = \rho_n^G R_{\text{ion}}(n). \quad (2.17)$$

Hierbei wird die Gleichgewichtsverteilung  $\rho_n^G$  gemäß Gleichung (2.4) genutzt, und es gilt  $k_0 = e^4 / (k_B T \sqrt{m \mathcal{R}})$ ,  $\epsilon_n = |E_n| / (k_B T)$ ,  $\Delta \epsilon = |\epsilon_n - \epsilon_{n'}|$ .

Abbildung 2.3(b) veranschaulicht die Raten aus den Gleichungen (2.13) bis (2.16) für eine Temperatur von  $T = 100 \text{ K}$ . Alle Raten gehen für kleine  $n$  gegen Null, wobei die Ionisationsrate  $R_{\text{ion}}$  am stärksten abfällt. Die Rate für eine direkte Rekombination

aus dem Kontinuum in den Grundzustand ist um ca. 10 Größenordnungen kleiner als die Rate für die Bildung eines Rydberg-Zustands mit  $n \gtrsim 50$ . Da hingegen ein Austausch von energetisch dicht benachbarten Niveaus besonders häufig erfolgt (z. B.  $R(30, 29) \approx 10^8 R_{\text{rek}}(29)$ ), werden Grundzustandsatome vorwiegend durch eine Kaskade über eine Folge von Rydberg-Zuständen gebildet.

Im Gegensatz zu den Ergebnissen von Mansbach und Keck [177], die auf der Untersuchung von Stößen mit großem Energietransfer  $\Delta\epsilon > 0.5$  beruhen, basieren die Ausdrücke (2.13) - (2.14) auf einer Untersuchung mit  $\Delta\epsilon > 10^{-3}$  und erlauben somit eine deutlich präzisere Bestimmung der Übergangsraten. So liefern sie im Limes  $n \rightarrow m$  die in [177] fehlende Divergenz von  $R(n, m)$  und zeigen damit das gleiche Verhalten wie die in [271] vorgeschlagenen Raten. Außerdem sind die Ionisations- und Rekombinationsraten in den Gleichungen (2.15) und (2.16) kleiner als die in [177] gefundenen Ausdrücke. Sie erlauben eine treffende Beschreibung neuerer Experimente in UKP [83] und korrigieren die von Mansbach und Keck berechnete gesamte Rekombinationsrate  $\nu$  um ca. 30% nach unten.

Durch Einsetzen von Gleichung (2.13) bis (2.16) in Gleichung (2.10) erhalten wir die Rate

$$\nu = C_{\text{rek}} T^{-9/2} \quad (2.18)$$

mit der Proportionalitätskonstante

$$C_{\text{rek}} \approx 2.8 \times 10^{-9} \text{ K}^{9/2} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}. \quad (2.19)$$

### 2.1.3. Grenzen der Theorie isolierter Drei-Körper-Stöße

Die verschiedenen theoretischen Ansätze zur Bestimmung der Übergangsraten gleichen sich in der Hinsicht, dass sie von isolierten Drei-Körper-Stößen ausgehen, die nicht durch kollektive Plasmaeffekte beeinflusst werden. Bei hohen Kopplungsstärken können jedoch die Plasmaelektronen in der Umgebung der stoßenden Teilchen signifikante Auswirkungen auf die Rekombinationsdynamik haben, beispielsweise durch kollektive Elektronenbewegung, Stöße höherer Ordnung und nicht-markovsche Dynamik (siehe dazu auch Kapitel 3).

Auf die Vernachlässigung von Effekten dieser Art ist das Versagen von Gleichung (2.2) bei tiefen Temperaturen zurückzuführen, für die sie unphysikalisch hohe Raten voraussagt. Diese Divergenz der Rekombinationsrate war tatsächlich auch eine wichtige Motivation für die ersten experimentellen Untersuchungen von UKP [140, 141]. Besonders deutlich wird das Versagen der konventionellen Theorie durch Vergleich mit Zeitskalen anderer physikalischer Prozesse. Dazu drücken wir die Abhängigkeit der Rate in Form der Kopplungsstärke  $\Gamma$  und der elektronischen Plasmafrequenz  $\omega_p = \sqrt{4\pi e^2 \rho / m}$  aus,

$$\nu \sim \rho^2 T^{-9/2} \sim \omega_p \Gamma^{9/2}. \quad (2.20)$$

Die Plasmafrequenz repräsentiert die Zeitskala elektronischer Plasmadynamik. Ihr Inverses entspricht der Zeit, die ein Elektron benötigt, um einen Weg von der Größenordnung des mittleren Abstands  $\sim a$  zurückzulegen, wenn es lediglich durch

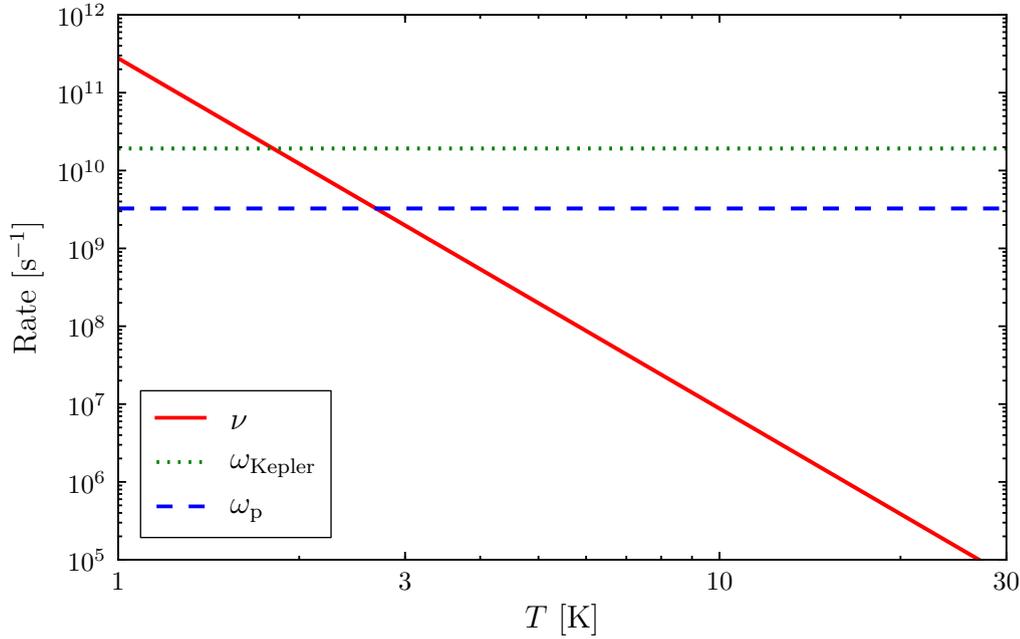


Abbildung 2.4.: Überschneidung der Zeitskalen verschiedener elektronischer Prozesse im Bereich tiefer Temperaturen für die Dichte  $\rho_e = 10^9 \text{ cm}^{-3}$  und den Rydberg-Zustand  $n = 70$ .

die Wechselwirkung mit einem anderen Elektron beschleunigt wird. Für  $\Gamma \gtrsim 1$  gilt nach (2.20)  $\nu > \omega_p$  (siehe Abbildung 2.4); die Atombildung würde demnach schneller ablaufen, als Elektronen im Plasma aufeinander treffen. Zudem übersteigt die Rekombinationsrate  $\nu$  in diesem Fall auch die Umlauffrequenz

$$\omega_{\text{Kepler}} = \frac{e}{\sqrt{m} a_0^{3/2} n^3} \quad (2.21)$$

eines hochangeregten Elektrons auf seinem klassischen Kepler-Orbit um den Atomkern, wobei  $a_0$  der Bohrsche Radius ist. Für den Fall einer Plasmadichte von  $\rho = 10^9 \text{ cm}^{-3}$  und einer Elektronentemperatur von  $T = 1 \text{ K}$  gilt  $\nu/\omega_{\text{Kepler}} \approx 10$  bereits im Rydberg-Zustand  $n = 70$  (siehe Abbildung 2.4). Während des Rekombinationsprozesses bliebe für das Elektron somit keine Zeit, um klar definierte Bindungszustände einzunehmen und die oben beschriebene Kaskade über eine Folge von Rydberg-Zuständen durch sukzessive Stöße mit freien Elektronen zu durchlaufen. Diese unphysikalische Überschneidung der Zeitskalen weist deutlich auf einen Zusammenbruch der konventionellen DKR-Theorie hin und legt eine geänderte Temperaturabhängigkeit im stark gekoppelten Bereich nahe.

Die Erzeugung von Anti-Wasserstoff aus einem ultrakalten Antiproton-Positron-Plasma in Experimenten am CERN [4, 85, 86] hat in den letzten Jahren zusätzliches Interesse an Rekombinationsprozessen bei tiefen Temperaturen stimuliert [134, 208]. Eine Reihe von Arbeiten [36, 37, 111, 112, 145, 157, 234, 259, 289, 290] hat sich

mit diesem grundlegenden Problem und einer Erweiterung der Theorie auf starke Kopplung beschäftigt. Die vollständig zeitabhängige Lösung der Rategleichungen (2.3) [289, 290], die allerdings nach wie vor elektronische Korrelationen vernachlässigt, zeigt bereits, dass die quasistatische Näherung bei tiefen Temperaturen nicht mehr gerechtfertigt ist, da dann die Niveaus dicht oberhalb des Grundzustands keinen stationären Zustand mehr erreichen. Dadurch verändert sich schon bei Verwendung der Hochtemperatur-Raten die Temperaturabhängigkeit von  $\nu$  im Bereich  $T < 10$  K [289]. Untersuchungen zu dichten Plasmen [36, 37, 145, 234], in denen Quanteneffekte eine Rolle spielen können, ergaben eine Erhöhung sowohl des Rekombinations- als auch des Ionisationskoeffizienten aufgrund einer durch Korrelationen verursachten Absenkung des Kontinuums. Andererseits prognostizieren Rechnungen zu klassischen Plasmen [31, 111, 112, 157, 259] eine Unterdrückung oder sogar eine Abnahme der Rate im mäßig bis stark gekoppelten Bereich. Die vorgeschlagenen Modifikationen der Temperaturabhängigkeit stimmen jedoch nicht überein und liefern teilweise widersprüchliche Ergebnisse, so dass die Frage nach der Temperaturabhängigkeit der Atombildung im ultrakalten Bereich nach wie vor nicht geklärt ist.

Ziel dieses Kapitel ist es, eine eindeutige Antwort auf diese Frage zu finden. Dazu wird in den nächsten Abschnitten ein Modell entwickelt, das elektronische Korrelationen auf mikroskopischer Ebene konsequent berücksichtigt und somit ohne Näherung die Rekombinationsdynamik im ultrakalten Bereich beschreibt.

## 2.2. Rekombination in stark gekoppelten Ein-Komponenten-Plasmen

Um die Auswirkung elektronischer Korrelationen auf den Rekombinationsprozess korrekt zu beschreiben, ist ein Modell nötig, das über den Ansatz isolierter Dreikörper-Stöße hinausgeht. Dazu wird in dieser Arbeit der Ansatz der üblichen CTMC-Simulationen [177] verallgemeinert und die elektronische Umgebung des Stoßes in den Rechnungen einbezogen. Die Verallgemeinerung geschieht mit Hilfe einer molekulardynamischen (MD) Simulation, die die Evolution einer Vielzahl von Teilchen durch numerische Integration der newtonschen Bewegungsgleichungen berechnet. Nach der Erläuterung des Modells und der Präparation des Anfangszustands im ersten Teil 2.2.1 dieses Abschnitts werden in 2.2.2 die Details des speziellen Algorithmus behandelt, der eine effiziente Simulation des Rekombinationsprozesses erlaubt. Der letzte Teil 2.2.3 behandelt schließlich die hier genutzten Verfahren zur effektiven Auswertung der Coulomb-Wechselwirkungen in einem periodisch fortgesetzten System.

### 2.2.1. Vielteilchen-Modell und Initialisierung der Simulation

Ionische Korrelationen haben nur eine geringe Auswirkung auf die Rekombination, wie etwa ein Absenken der Ionisationsenergie [253], so dass sie im hier verwendeten Modell vernachlässigt werden können. Der Rekombinationsprozess wird deshalb an-

hand eines einzelnen Ions untersucht, wodurch die Auswertung vereinfacht und der Rechenaufwand gering gehalten werden kann.

Um allein den Einfluss elektronischer Korrelationen auf die Rekombinationsdynamik zu untersuchen, muss jedoch in den Simulationen die Wechselwirkung zwischen einer großen Menge von Elektronen betrachtet werden. Dazu wird das Ion in die Mitte einer kubischen Simulationszelle gesetzt und von einem Ein-Komponenten-Plasma (*one-component-plasma*, OCP) [23, 43, 80, 114–116, 126, 246, 257, 288] aus  $N$  Elektronen umgeben, dessen homogene, positive Hintergrundladung für ein neutrales System sorgt und als Molekularfeldnäherung für die übrigen Ionen verstanden werden kann. Ein analoges quantenmechanisches Modell wurde bereits in [284] vorgestellt, um den Einfluss kollektiver Elektroneneffekte auf Wirkungsquerschnitte in dichten Plasmen zu untersuchen.

Es werden periodische Randbedingungen angeommen, um die Situation im Zentrum einer Plasmawolke zu modellieren. Die Größe der Einheitszelle muss so gewählt werden, dass im Zentrum (an der Position des Ions) Randeffekte keine Auswirkung auf die Rekombinationsdynamik haben. Dies ist dann erfüllt, wenn die halbe Kantenlänge  $L/2$  größer ist als die elektronische Debye-Länge  $\lambda_D = \sqrt{4\pi e^2 \rho_e / (k_B T)}$ , da die elektronische Wechselwirkung für noch größere Entfernungen durch andere Elektronen abgeschirmt ist. Mit der Definition des elektronischen Wigner-Seitz-Radius  $a$  gemäß

$$\frac{4}{3}\pi a^3 \rho_e = 1 \quad (2.22)$$

und der Elektronendichte  $\rho_e = N/L^3$  erhält man für die skalierte Kantenlänge

$$\frac{L}{a} = \left(\frac{4}{3}\pi N\right)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.23)$$

Es soll nun

$$\lambda_D/L = c < 0.5 \quad (2.24)$$

gelten, wobei die skalierte Debye-Länge durch  $\lambda_D/a = 1/\sqrt{3\Gamma}$  gegeben ist. Damit folgt für die benötigte Teilchenzahl

$$N = \frac{1}{4/3 \pi c^3 (3\Gamma)^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.25)$$

Die Elektronenzahl wurde in allen Simulationen auf  $N = 128$  gesetzt, wodurch für sämtliche in diesem Kapitel betrachteten  $\Gamma$  die Bedingung (2.24) erfüllt wird.

Die Rekombination soll hier für den idealisierten Fall von thermisch verteilten Elektronen analysiert werden, deren Temperatur lediglich durch die frei werdende Bindungsenergie eines rekombinierenden Elektrons beeinflusst wird. Zu Beginn der Simulation wird deshalb nur die gegenseitige Wechselwirkung der Elektronen berücksichtigt und das OCP durch Skalieren der Elektronen-Geschwindigkeiten auf ein vorgegebenes  $\Gamma$  equilibriert. Die MD-Simulation nutzt dabei den üblichen Geschwindigkeits-Verlet-Algorithmus, der im nächsten Teil noch ausführlicher erläutert werden wird (siehe Gleichung (2.35)).

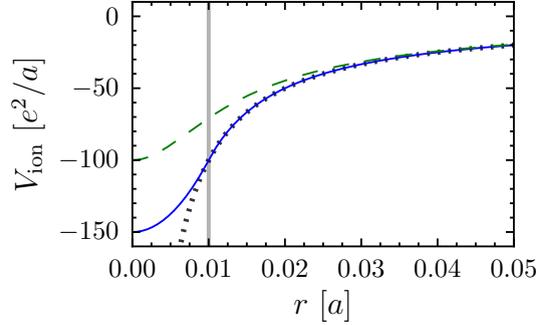


Abbildung 2.5.: Ionenpotential  $V_{\text{ion}}$  nach Gleichung (2.26) (blaue durchgezogene Linie) und nach Gleichung (2.27) [197] (grüne gestrichelte Linie) jeweils mit  $r_c = 0.01 a$  (senkrechte Linie) im Vergleich zum Coulomb-Potential (gepunktet).

Zur Untersuchung der Rekombination muss nun noch das Ion ins System eingebracht werden. Besondere Sorgfalt ist darauf zu verwenden, dass beim Hinzufügen des Ions keine schlagartige Änderung der Gesamtenergie verursacht wird, da sonst die kontrollierten Bedingungen zur Untersuchung der Rekombination im thermischen Gleichgewicht verloren gehen. Außerdem soll garantiert sein, dass das Ion zu Beginn der Simulation kein Elektron gebunden hat.

Diesen beiden Aspekte können wir Rechnung tragen, indem wir die Photoionisation eines Atoms simulieren. Gleichzeitig modellieren wir damit auch die im Experiment übliche Erzeugung des Plasmas. Dazu wird das Ion zusammen mit einem zusätzlichen Elektron ins Zentrum der Zelle gesetzt. Auf das Plasma wirkt es somit als neutrales Atom und lässt die Gesamtenergie zunächst unverändert. Durch die Initialisierung des zusätzlichen Elektrons mit einer kinetischen Überschussenergie von  $\frac{3}{2\Gamma} \frac{e^2}{a}$  stellen wir sicher, dass das Ion ungebunden ist, und beeinflussen dabei die Gesamtenergie des Systems letztendlich nur minimal.

Um die anfängliche Ionisation numerisch stabil zu realisieren, muss die Divergenz des attraktiven Coulomb-Potentials beseitigt werden. Dazu wird das ionische Potential für kleine Abstände durch ein harmonisches Potential ersetzt gemäß

$$V_{\text{ion}}(r) = \begin{cases} -\frac{e^2}{r} & r \geq r_c \\ -\frac{3e^2}{2r_c} \left(1 - \frac{r^2}{3r_c^2}\right) & r \leq r_c. \end{cases} \quad (2.26)$$

Der Einfluss des harmonischen „Soft-Core-Potentials“ (2.26) auf die Simulationsergebnisse wurde durch Variation von  $r_c$  überprüft. Bei  $r_c = 10^{-2} a$  ist eine Konvergenz der relevanten Ergebnisse erreicht, so dass für alle folgenden Ergebnisse dieser Abstand des Potentialübergangs genutzt wurde. Wie wir später sehen werden, skaliert auch die minimale Bindungsenergie zum Erreichen eines rekombinierten Zustands mit  $e^2/a$ , wodurch die Festlegung von  $r_c$  relativ zu  $a$  zustande kommt. Der Einfluss eines ähnlich modifizierten Coulomb-Potentials

$$\tilde{V}_{\text{ion}}(r) = -\frac{e^2}{\sqrt{r^2 + r_c^2}} \quad (2.27)$$

auf die Dynamik der freien Elektronen wurde kürzlich in [197] analysiert und im Bereich  $r_c = 0.01 a - 0.03 a$  für weitgehend vernachlässigbar befunden. Dieses Potential fand auch bei den Rekombinationsuntersuchungen in [151] mit  $r_c \approx 0.03 a$  Verwendung. Im Unterschied zu  $\tilde{V}_{\text{ion}}$  entspricht das hier verwendete Potential gemäß Gleichung (2.26) jedoch bis zum kritischen Abstand  $r_c$  exakt dem Coulomb-Potential (siehe Abbildung 2.5). Somit wird selbst für tief gebundene Zustände eine akkurate Beschreibung der Dynamik erreicht und die Präzision bisheriger Studien deutlich übertroffen.

Wegen des großen Masseunterschieds zwischen Ionen und Elektronen kann das Ion auf den Zeitskalen der Rekombination als unbeweglich angenommen werden und bleibt deshalb für die Dauer der Simulation im Zentrum der Zelle fixiert.

Um den Rekombinationsprozess präzise zu beschreiben und gleichzeitig den Rechenaufwand der Vielteilchen-Simulation möglichst gering zu halten, ist ein speziell an das Modell angepasster Algorithmus nötig, der nun ausführlich erklärt wird.

### 2.2.2. Propagation der Elektronen

Die numerische Behandlung der Elektronendynamik in dem oben beschriebenen Vielteilchen-Modell stellt eine besondere Herausforderung dar: Zur exakten Untersuchung des Rekombinationsprozesses ist eine hohe Genauigkeit erforderlich, die bei der großen Teilchenanzahl von  $N \approx 100$  Elektronen zu immensem Rechenaufwand führen kann.

Eine hohe zeitliche Auflösung der Dynamik ist erforderlich, da die durch das attraktive Ionenpotential  $V_{\text{ion}}$  verursachte Kraft auf ein Elektron sehr groß werden kann. Maximal beträgt sie nach Gleichung (2.26)  $F_{\text{max}}^{\text{ei}} = 1/r_c^2$  und übertrifft damit deutlich die typische Kraft zwischen zwei Elektronen  $F^{\text{ee}} \sim \Gamma^{-2}$ . Infolgedessen werden nahe am Ion gestreute und gebundene Elektronen durch  $V_{\text{ion}}$  wesentlich stärker beschleunigt, und die resultierenden Geschwindigkeiten der gebundenen Elektronen liegen um bis zu zwei Größenordnungen über den typischen Geschwindigkeiten der freien Elektronen. Diese wiederum halten sich zum Großteil in weiter Entfernung vom Ion auf, wo die Elektronendynamik durch  $F^{\text{ee}}$  bestimmt ist und auf der üblichen Zeitskala der inverse Plasmafrequenz  $\omega_p^{-1}$  abläuft.

Eine Behandlung aller Elektronen mit der für die Rekombination relevanten Präzision würde zu nicht realisierbarem Rechenaufwand führen. Allerdings ist diese hohe Präzision nur für die Dynamik der wenigen Teilchen nötig, die sich dicht beim Ion befinden und somit ausschlaggebend für die Rekombination sind. Eine akkurate Beschreibung des Großteils der freien Elektronen, die weit genug vom Ion entfernt sind, ist dagegen bereits mit wesentlich geringerem Aufwand erreichbar.

Für eine effiziente Simulation des Systems ist es deshalb sinnvoll, die Elektronen mit unterschiedlich großen Zeitschritten zu propagieren, die den erforderlichen Genauigkeiten Rechnung tragen. Zur Implementierung eines solchen Vielfach-Zeitschritt-Algorithmus ist es hilfreich, das numerische Integrationsschema ähnlich wie in quantenmechanischen Systemen in Form eines kompakten Propagators zu formulieren [52, 283]. Ein solcher Propagator ist zudem symplektisch [54], d. h. er erhält das Phasenraumvolumen des Systems und bietet damit besondere Stabili-

tät in der Energieerhaltung. Diese Eigenschaft ist für die hier erforderlichen langen Simulationszeiten und die benötigte Präzision essentiell.

Zur Herleitung des Propagators gehen wir von den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{\mathbf{r}} = \{\mathbf{r}, \mathcal{H}\} = \frac{\mathbf{p}}{m_e}, \quad (2.28a)$$

$$\dot{\mathbf{p}} = \{\mathbf{p}, \mathcal{H}\} = -\frac{dV}{d\mathbf{r}}, \quad (2.28b)$$

der  $N$  Elektronen mit den Orts- und Impulskoordinaten  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$  und  $\mathbf{p} = (\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$  aus. Für eine beliebige Größe  $A$  gilt mit den Poissonklammern

$$\{A, \mathcal{H}\} = \frac{\partial A}{\partial \mathbf{r}} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial A}{\partial \mathbf{p}} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{r}}, \quad (2.29)$$

wobei  $\mathcal{H}$  die Hamiltonfunktion des Systems und  $V$  das Potential der Teilchen ist. Mit der Phasenraumvariablen  $\mathbf{q} = (\mathbf{r}, \mathbf{p})$  lassen sich die Gleichungen (2.28) zusammenfassen zu

$$\dot{\mathbf{q}} = \{\mathbf{q}, \mathcal{H}\} = \mathcal{D}_{\mathcal{H}} \mathbf{q}. \quad (2.30)$$

Im letzten Schritt in Gleichung (2.30) wurde der zur Funktion  $\mathcal{F}$  gehörende Differentialoperator

$$\mathcal{D}_{\mathcal{F}} \mathbf{q} = \{\mathbf{q}, \mathcal{F}\} \quad (2.31)$$

eingeführt. Mit seiner Hilfe lässt sich Gleichung (2.30) formal lösen,

$$\mathbf{q}(\Delta t) = e^{\Delta t \mathcal{D}_{\mathcal{H}}} \mathbf{q}(0) = \mathcal{S}(\Delta t) \mathbf{q}(0), \quad (2.32)$$

und wir erhalten schließlich den Propagator

$$\mathcal{S}(\Delta t) = e^{\Delta t \mathcal{D}_{\mathcal{H}}}. \quad (2.33)$$

Die Formulierung der Propagation mit Hilfe von Differentialoperatoren gemäß Gleichung (2.33) ist insbesondere auch zur Darstellung komplizierter Propagationsschemata mit verschiedenen Zeitschritten und aufgespalteter Hamiltonfunktion geeignet.

Beispielsweise kann der Propagator durch Unterteilung der Hamiltonfunktion  $\mathcal{H} = K + V$  in kinetische Energie  $K$  und Potential  $V$  und bei Nutzung der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel [283] aufgespalten werden,

$$\mathcal{S}(\Delta t) = e^{\frac{\Delta t}{2} \mathcal{D}_V} e^{\Delta t \mathcal{D}_K} e^{\frac{\Delta t}{2} \mathcal{D}_V} + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (2.34)$$

Das Propagationsverfahren aus Gleichung (2.34) ist bei Vernachlässigung der Terme  $\mathcal{O}(\Delta t^3)$  als Geschwindigkeits-Verlet-Algorithmus [255] bekannt und lässt sich explizit schreiben als

$$\mathbf{p}(t + \Delta t/2) = \mathbf{p}(t) - \frac{d}{d\mathbf{r}} V(\mathbf{r}(t)) \frac{\Delta t}{2}, \quad (2.35a)$$

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{p}(t + \Delta t/2) \Delta t, \quad (2.35b)$$

$$\mathbf{p}(t + \Delta t) = \mathbf{p}(t) - \frac{d}{d\mathbf{r}} V(\mathbf{r}(t + \Delta t)) \frac{\Delta t}{2}. \quad (2.35c)$$

Für das hier betrachtete Vielteilchen-Modell wurde ein komplizierterer Propagator entwickelt, der auf dem Konzept eines reversiblen Referenzsystem-Propagators (r-RESPA) [240, 254, 262] basiert. Für einen solchen Propagator wird die Hamiltonfunktion in langsam und schnell veränderliche Teile aufgespalten und die jeweiligen Anteile mit unterschiedlich großen Zeitschritten propagiert. Die Aufspaltung erfolgt üblicherweise anhand verschiedener Kräfte im System oder verschiedener Teilchengruppen:

- Können die Kräfte im System in zwei Teile aufgespalten werden, die auf unterschiedlichen Zeitskalen wirken, so lässt sich der langsam variierende Anteil der Kräfte bei der Propagation mit einem größeren Zeitschritt berücksichtigen, während ein kleinerer Zeitschritt für die schnell fluktuierenden Kräfte nötig ist.
- Lassen sich die Teilchen im System in zwei Gruppen einordnen, deren Dynamik auf verschiedenen Zeitskalen abläuft (z. B. zwei Teilchensorten mit deutlichem Massenunterschied), so werden die schnellen Teilchen mit einem kleineren Zeitschritt propagiert als die langsamen.

Die oben diskutierten verschiedenen Zeitskalen in dem hier betrachteten System legen zunächst eine kräftebasierte RESPA-Aufspaltung nahe, da durch die attraktive Ion-Elektron-Wechselwirkung wesentlich größere Kräfte entstehen als durch die repulsive Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Weil die Bedingung  $F^{ee} \ll F_{\max}^{ei}$  jedoch nur für den Bruchteil der Elektronen gilt, die sich dicht beim Ion befinden, ist eine zusätzliche Aufspaltung auf Grundlage der Teilchenpositionen sinnvoll. Dazu werden Elektronen im Bereich langsamer Dynamik, in dem der Elektronenabstand vom Ion  $r_i > R_0 = a$  beträgt, und solche im Bereich schneller Dynamik, in dem  $r_i \leq R_0$  gilt, getrennt behandelt. Insgesamt wird die Hamiltonfunktion für die  $N$  Elektronen in langsam und schnell fluktuierende Anteile gemäß

$$\mathcal{H} = K^s + K^l + V^s + V^l + E_{\text{HG}} \quad (2.36)$$

aufgespalten.

Die kinetische und potentielle Energie der Teilchen im Bereich der schnellen Dynamik ( $r < R_0$ ) ist durch

$$\begin{aligned} K^s &= \sum_{\substack{i=0 \\ r_i < R_0}}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}, \\ V^s &= \sum_{\substack{j>i \\ r_i, r_j < R_0}}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{\substack{i=0 \\ r_i < R_0}}^N V_{\text{ion}}(r_i) \end{aligned} \quad (2.37)$$

gegeben. Da im Bereich schneller Dynamik im Laufe des Rekombinationsprozesses starke Dreikörperstöße zu erwarten sind, kann die typische Elektron-Elektron-Kraft in diesem Bereich ähnliche Größenordnungen erreichen wie die Elektron-Ion-Kraft. Deshalb sind die entsprechenden gegenseitigen Wechselwirkungen der Elektronen zusätzlich in  $V^s$  berücksichtigt.

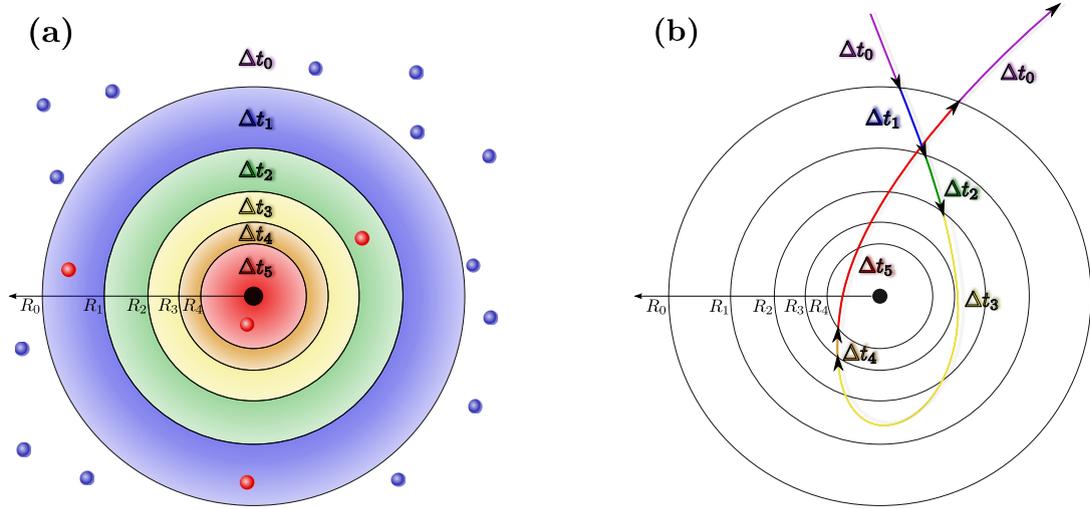


Abbildung 2.6.: Zweidimensionale Projektion des Zentrums der Simulationszelle. (a) Im Bereich schneller Dynamik ( $r < R_0$ ) werden alle Elektronen (rot) mit demselben reduzierten Zeitschritt  $\Delta t_n$  propagiert, der anhand des kleinsten Elektron-Ion-Abstands gemäß  $R_n < r_{\min} < R_{n+1}$  festgelegt wird (hier  $\Delta t_n = \Delta t_5$ ). Im Bereich langsamer Dynamik ( $r > R_0$ ) werden alle Elektronen (blau) mit dem globalen Zeitschritt  $\Delta t_0$  propagiert. (b) Die Zeitschrittanpassung für den Fall eines einzigen Elektrons im Bereich schneller Dynamik.

Analog werden die entsprechenden Terme der Teilchen im Bereich langsamer Dynamik ( $r > R_0$ ) umgeschrieben zu

$$\begin{aligned}
 K^1 &= \sum_{\substack{i=0 \\ r_i > R_0}}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}, \\
 V^1 &= \sum_{j>i}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_{\mathbf{L} \neq \mathbf{0}} \sum_{i,j}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j + \mathbf{L}|} + \\
 &+ \sum_{\mathbf{L}} \sum_{i=0}^N V_{\text{ion}}(|\mathbf{r}_i + \mathbf{L}|) - V^s.
 \end{aligned} \tag{2.38}$$

Die potentielle Energie  $V^1$  umfasst neben der Wechselwirkung der Elektronen in der Ursprungszelle auch die Wechselwirkung jedes Elektrons mit allen periodischen Bildern. Dieser Anteil wird in der Summe über  $\mathbf{L}$  erfasst, wobei über sämtliche Gittervektoren  $\mathbf{L}$  im periodisch fortgesetzten System summiert wird.

Der letzte Term  $E_{\text{HG}}$  in Gleichung (2.36) repräsentiert die Energie der Teilchen-Hintergrund-Wechselwirkung. Da er konstant ist (vgl. auch Madelung-Energie in Anhang A), spielt er bei der Propagation jedoch keine Rolle.

Die Elektronen im Bereich langsamer Dynamik werden mit dem festen Zeitschritt  $\Delta t_0$  propagiert, während im Bereich  $r < R_0$  zur Auflösung der schnelleren Dynamik mit einem kleineren Zeitschritt gerechnet wird. Der kleine Zeitschritt wird dabei

dynamisch an die auftretenden Elektron-Ion-Kräfte angepasst. Die größte Kraft übt das Ion auf das Elektron mit dem kleinsten Abstand  $r_{\min}$  aus, so dass die Dynamik dieses Teilchens in der Regel die feinste zeitliche Auflösung erfordert. Indem der Abstand  $r_{\min}$  zur Kontrolle des Zeitschritts für *alle* Elektronen innerhalb von  $r < R_0$  genutzt wird, garantiert man eine akkurate Propagation der Teilchen im Bereich schneller Dynamik.

Die Änderung des Zeitschritts erfolgt dabei durch eine iterative Reduktion mit sinkendem  $r_{\min}$ . Jedesmal, wenn sich  $r_{\min}$  um den Faktor  $\sqrt{2}$  verkleinert und damit die größte im System auftretende Elektron-Ion Kraft verdoppelt, wird der dynamische Zeitschritt halbiert. Für die praktische Umsetzung dieses Vorgehens unterteilen wir den Bereich schneller Dynamik in 13 konzentrische Kugelschalen mit den Radien  $R_n = 2^{-n/2}R_0$ ,  $n = 0, \dots, 13$  (siehe Abbildung 2.6). Der kleinste Radius entspricht damit nahezu dem kritischen Abstand des Potentialübergangs nach Gleichung (2.26),  $R_{13} \approx r_c$ , bei dem die größtmögliche Ionenkraft  $F_{\max}^{\text{ei}} = e^2/r_c^2$  auftritt. Jedesmal wenn  $r_{\min}$  unter  $R_n$  fällt, wird der Zeitschritt auf  $\Delta t_{n+1} = 2^{-(n+1)}\Delta t_0$  reduziert (siehe Abbildung 2.6).

Durch die dynamische Anpassung des Zeitschritts  $\Delta t_n$  wird die Symplektizität des Propagators verletzt. Um dennoch die gewünschte Stabilität der Integration zu gewährleisten und die Auswirkungen der Zeitschrittanpassung auf die Symplektizität so gering wie möglich zu halten, wird der Zeitschritt nur reduziert und nie erhöht, solange sich Elektronen im Bereich schneller Dynamik aufhalten. Dadurch verhindert man periodische Variationen von  $\Delta t_n$ , wie sie beispielsweise bei langgestreckten Elektronenorbits auftreten können, und unterbindet die damit verbundenen Sprünge in der Gesamtenergie des Systems. Erst wenn sämtliche Elektronen den Bereich schneller Dynamik verlassen haben, d. h.  $r_{\min} > R_0$  gilt, wird der variable Zeitschritt  $\Delta t_n$  wieder auf  $\Delta t_0$  zurückgesetzt (siehe Abbildung 2.6).

Der Propagator für die Elektronen im Bereich schneller Dynamik lässt sich somit ausdrücken als

$$\mathcal{S}^s(\Delta t_n) = \exp\left(\frac{\Delta t_n}{2}\mathcal{D}_{V^s}\right) \exp(\Delta t_n \mathcal{D}_{K^s}) \exp\left(\frac{\Delta t_n}{2}\mathcal{D}_{V^s}\right). \quad (2.39)$$

Für das gesamte System wird schließlich der Propagator

$$\mathcal{S}(\Delta t_0) = \exp\left(\frac{\Delta t_0}{2}\mathcal{D}_{V^1}\right) \exp(\Delta t_0 \mathcal{D}_{K^1}) \left(\mathcal{S}^s(\Delta t_n)\right)^{2^n} \exp\left(\frac{\Delta t_0}{2}\mathcal{D}_{V^1}\right) \quad (2.40)$$

genutzt.

Die numerische Integration des hier betrachteten Vielteilchenmodells wird erst durch die Anwendung des Propagators (2.40) mit ausreichender Genauigkeit realisierbar. Die getrennte Propagation der schnellen Elektronen in (2.39) erlaubt es, den Rekombinationsprozess mit höchster Präzision zu beschreiben. Dabei stellt die Anpassung des Zeitschritts sicher, dass der Rechenaufwand optimal auf die vorliegende Zeitskala der Elektronendynamik abgestimmt ist. Gleichzeitig wird dieser erhöhte Rechenaufwand nur für einen Bruchteil der Teilchen nötig. Die langsamen Elektronen werden in (2.40) hingegen wie in einer reinen OCP-Simulation behandelt, in der allein die Kopplungsstärke  $\Gamma$  für die Wahl des Zeitschritts  $\Delta t_0$  entscheidend ist.

Unter anderem deshalb stellt die Simulation kleiner Kopplungsstärken die größte Herausforderung dar. Zum einen steigt die typische Elektronenkraft gemäß  $F^{ee} \sim \Gamma^{-2}$ , so dass der Zeitschritt  $\Delta t_0$  aller Elektronen entsprechend klein gewählt werden muss. Zum anderen sinkt die Rekombinationsrate deutlich (siehe Gleichung (2.20)); dadurch sind lange Simulationszeiten bis zur Entstehung eines rekombinierten Atoms erforderlich.

Für die kleinste hier untersuchte Kopplungsstärke von  $\Gamma = 0.28$  wurde der Zeitschritt auf  $\Delta t_0 = 10^{-3} \omega_p^{-1}$  gesetzt. Dadurch konnte selbst bei den langen Simulationszeiten von bis zu  $\sim 10^4 \omega_p^{-1}$  pro Simulationslauf die Änderung der Gesamtenergie im Bereich von 0.01% gehalten werden. Für den Extremfall, bei dem diese Energieschwankung durch ein einzelnes Elektron verursacht wird, beträgt dessen Energieänderung also ca. 1%, so dass eine akkurate Beschreibung der Rekombination garantiert ist. Diese Genauigkeit wurde auch bei den anderen untersuchten Kopplungsstärken erreicht und ist nötig, um konvergierte Ergebnisse zu erzielen. Die Resultate werden durch Mittelung über ein Ensemble von ca.  $10^3$  Simulationsläufen pro  $\Gamma$  mit zufällig generierten Anfangsbedingungen berechnet.

Der Großteil des Rechenaufwands wird in den Simulationen durch die Auswertung der gegenseitigen Elektronen-Wechselwirkung verursacht und ist im Propagator (2.40) in den Schritten  $\exp\left(\frac{\Delta t_0}{2} \mathcal{D}_{V^1}\right)$  und  $\exp\left(\frac{\Delta t_n}{2} \mathcal{D}_{V^s}\right)$  enthalten. Die Verfahren zur effizienten Berechnung dieser Terme werden nun vorgestellt.

### 2.2.3. Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung

Die Aufspaltung des Systems in Bereiche und Teilchen mit verschiedenen dynamischen Zeitskalen ermöglicht bereits eine effiziente Propagation der Elektronen. Eine zusätzliche Geschwindigkeitssteigerung erzielen wir durch speziell auf diese Aufspaltung abgestimmte Methoden zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung.

Je nach Anzahl der Teilchen ist es sinnvoll, geeignete Näherungsverfahren einzusetzen, die diese Berechnung beschleunigen und gleichzeitig ausreichende Genauigkeit garantieren. Die Komplexität, sowohl solcher Näherungsverfahren als auch der direkten Auswertung aller paarweisen Elektronen-Kräfte, steigt jedoch zusätzlich in einem periodisch fortgesetzten System. An dieser Stelle soll nur eine kurze Erläuterung zu den in dieser Arbeit genutzten Methoden zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung gegeben werden. Für eine ausführlichere Darstellung sei auf den Anhang A verwiesen.

Im Bereich langsamer Dynamik befindet sich der Großteil der Elektronen  $N \sim 100$ . Eine paarweise Summation der Wechselwirkung zur Berechnung des rein elektronischen Anteils von  $V^1$  in Gleichung (2.38) ist aufgrund des damit verbundenen Rechenaufwands der Ordnung  $\mathcal{O}(N^2)$  bei Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen nicht praktikabel. Ideal geeignet für diese Aufgabe ist hingegen die „Fast Multipole Method“ (FMM) [46, 64, 65, 106]. Sie fasst mehrere Teilchen zu Gruppen zusammen und approximiert deren Wechselwirkung über Multipolentwicklungen. Zudem fügen sich periodische Randbedingungen nahtlos in das Konzept der FMM ein und bewirken nur minimale Steigerungen in den Rechenkosten [150]. Die FMM erlaubt damit eine Reduktion der Rechenkomplexität auf  $\mathcal{O}(N)$ .

Für die Berechnung der Kraft, die das Ion auf jedes Elektron ausübt, sowie für die gesamte Auswertung der Wechselwirkung im Bereich schneller Dynamik ( $V^s$  in Gleichung (2.37)) wird hingegen jeweils nur die Wechselwirkung zwischen zwei oder wenig mehr Teilchen benötigt. In diesem Fall wird die Kraft auf ein Teilchen durch Ewald-Summation [43, 79, 116, 246, 261] erhalten. Dabei wird die paarweise Wechselwirkung in Form des Ewald-Potentials [79] zur Implementierung der periodischen Randbedingungen über alle betrachteten Teilchen aufsummiert. Dieses Potential lässt sich in einen langreichweitigen, langsam variierenden und einen kurzreichweitigen, schnell fluktuierenden Anteil zerlegen, wodurch eine einfache Integration in das oben beschriebene Propagationsschema mit verschiedenen Zeitschritten (r-RESPA) ermöglicht wird [212, 254]. Da nur die Wechselwirkungen weniger Teilchen auf diese Weise berechnet werden, ist der resultierende Rechenaufwand  $\mathcal{O}(N^2)$  verkraftbar und immer noch deutlich geringer als bei Anwendung der FMM, deren Multipolzerlegung bei kleiner Teilchenzahl einen überproportionalen Anteil der Rechenzeit bedeutet.

## 2.3. Rekombinationsdynamik

Neben der Komplexität des Simulations-Algorithmus stellt die gründliche Auswertung der MD-Daten eine weitere Herausforderung dar. Ein analoges Vorgehen wie bei CTMC-Rechnungen ist nur eingeschränkt möglich, da die starken elektronischen Korrelationen zu zusätzlichen Komplikationen führen.

Die Methoden und Konzepte, mit deren Hilfe die Rekombinationsdynamik in dem oben beschriebenen Vielteilchenmodell analysiert wird, werden in diesem Abschnitt erläutert. Der erste Teil 2.3.1 beschäftigt sich mit der Identifikation gebundener Zustände. Zur Unterscheidung von schwach gebundenen und rekombinierten Elektronen wird in 2.3.2 das Konzept des kinetischen Flaschenhalses eingeführt. Die Bestimmung der Rekombinationsrate erfolgt schließlich in 2.3.3.

### 2.3.1. Dynamik der Rydberg-Zustände

In dem hier betrachteten Vielteilchen-Modell erweist sich die Identifikation gebundener Zustände deutlich aufwendiger als in typischen Drei-Körper-CTMC-Rechnungen. Bei letzteren werden isolierte Stöße simuliert, so dass am Ende des Stoßprozesses entweder beide Elektronen das Simulationsvolumen verlassen oder nur ein einzelnes. Im ersten Fall sind beide Elektronen frei, während im zweiten Fall das nahe beim Ion verbleibende gebunden ist. Der Bindungszustand lässt sich zudem leicht über die Bedingung an die Energie des verbleibenden Elektrons  $E = mv^2/2 - e^2/r < 0$  erschließen. Bei Berücksichtigung der benachbarten Elektronen in den hier durchgeführten Vielteilchen-MD-Rechnungen stellt sich jedoch heraus, dass bereits bei mittleren Kopplungsstärken mehrere Elektronen gleichzeitig eine negative Energie aufweisen. Da das einfach geladene Ion maximal ein Elektron binden kann, ist die Elektronenenergie zur Identifikation von Bindungszuständen demnach unzureichend. Der Grund für die zunehmende Anzahl an negativen Elektronenenergien bei steigendem Kopplungsparameter  $\Gamma$  liegt in den starken Teilchenkorrelationen und fluktuierenden

Ionisationsschwellen [195]. Die entsprechenden Elektronen können als schwach lokalisiert in den langsam fluktuierenden Potentialflächen der stark gekoppelten Teilchen angesehen werden [75].

Die Elektronenenergie ist jedoch nach wie vor ein wichtiger Anhaltspunkt zur Bestimmung von Bindungszuständen, da die Energie eines gebundenen Elektrons noch deutlich unter denen der schwach lokalisierten Elektronen liegen sollte. Deshalb wird im Verlauf der Simulation die niedrigste Elektronenenergie

$$E_{\min}(t) = \min_{i \in N} [E_i(t)] \quad (2.41)$$

aufgezeichnet. Die Energie des Elektrons  $i$  setzt sich dabei gemäß

$$E_i = K_i + V_{\text{ion}}(r_i) + V_e(r_i) + E_M \quad (2.42)$$

aus seiner kinetischen Energie  $K_i = mv_i^2/2$  sowie der Wechselwirkung mit dem Ion  $V_{\text{ion}}(r_i)$ , der Wechselwirkung mit allen anderen Elektronen einschließlich deren periodischen Bildladungen  $V_e(r_i)$  und der Wechselwirkung mit dem homogenen Hintergrund und den eigenen periodischen Bildladungen  $E_M$  (siehe Anhang A) zusammen. Das entsprechende Elektron, das zum Zeitpunkt  $t$  die niedrigste Energie im System aufweist, wird mit  $j_{\min}(t)$  bezeichnet.

Abbildung 2.7(a) zeigt eine typische Energietrajektorie von  $E_{\min}(t)$ . Obwohl die Simulation mit einem ungebundenen Zustand startet, ist  $E_{\min}$  bis auf wenige Fluktuationen von Anfang an negativ. Somit kann  $E_{\min} < 0$  nur als notwendiges Kriterium für einen Bindungszustand gelten, für eine eindeutige Bestimmung der Bindung bedarf es einer weiteren hinreichenden Bedingung. Im chemischen Bild des Atoms kann dieses zusätzliche Kriterium durch Integration des Rotationswinkels des Elektrons  $j_{\min}$  um das Ion gefunden werden [92]. Sobald ein Wechsel in  $j_{\min}$  erfolgt, beginnt die Integration wieder bei Null. Direkt vor dem nächsten Wechsel von  $j_{\min}$  erreicht der Rotationswinkel den Maximalwert  $\phi_{\max}(j_{\min})$ . Dieser beschreibt die Anzahl der Kernumrundungen des Elektrons und dient damit als Maß für die Lokalisierung des Elektrons am Ion. Zur Definition von Bindungszuständen wird nun ein kritischer Winkel  $\phi_c$  festgelegt, der die minimale Umrundungsanzahl vorgibt, die ein Elektron ausführen muss, um als gebunden betrachtet zu werden. Für  $\phi_{\max}(j_{\min}) > \phi_c$  gilt das Elektron  $j_{\min}$  als gebunden. Physikalisch sinnvolle Werte für den kritischen Winkel liegen im Bereich von  $\phi_c \sim \mathcal{O}(\pi)$ ; der exakte Wert hat nur qualitative Auswirkungen auf die Simulationsergebnisse und soll später noch detaillierter diskutiert werden.

Die Bindungsenergie  $E_B$  eines Rydberg-Atoms und die Dynamik der Rydberg-Zustände lassen sich mit Hilfe dieses Kriteriums aus der minimalen Energie  $E_{\min}$  gemäß

$$E_B(t) = \begin{cases} 0 & \phi_{\max}(j_{\min}(t)) < \phi_c \\ E_{\min}(t) & \phi_{\max}(j_{\min}(t)) \geq \phi_c, \end{cases} \quad (2.43)$$

ermitteln, wobei  $E_B = 0$  einem ungebundenen Zustand entspricht. Die schwarzen Anteile der Energietrajektorie in Abbildung 2.7 markieren diese Zeiträume ohne gebundenes Elektron, während in den farbigen Abschnitten ein gebundener Zustand vorliegt.

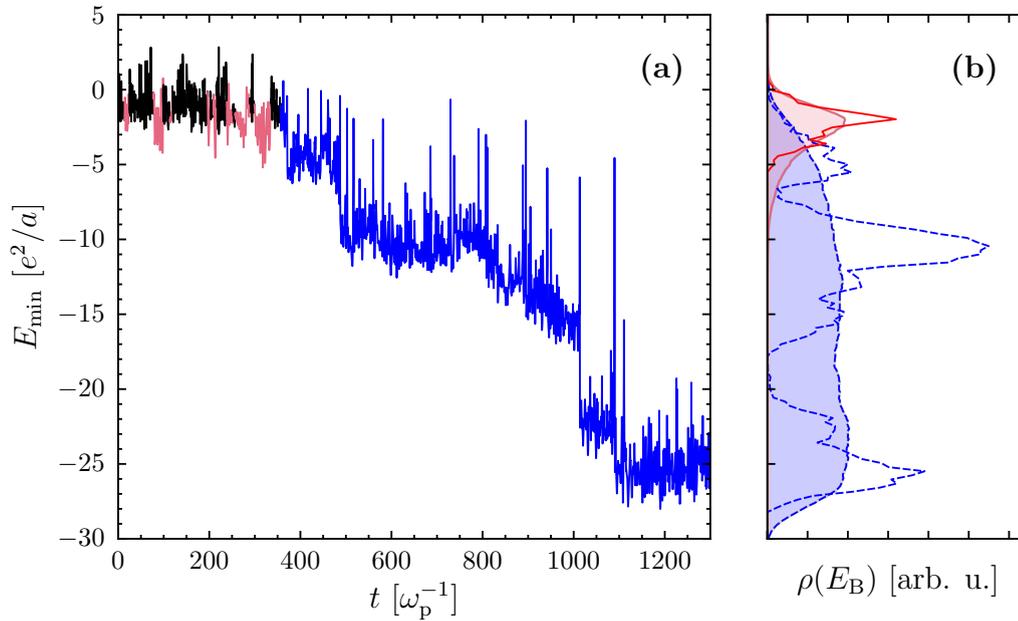
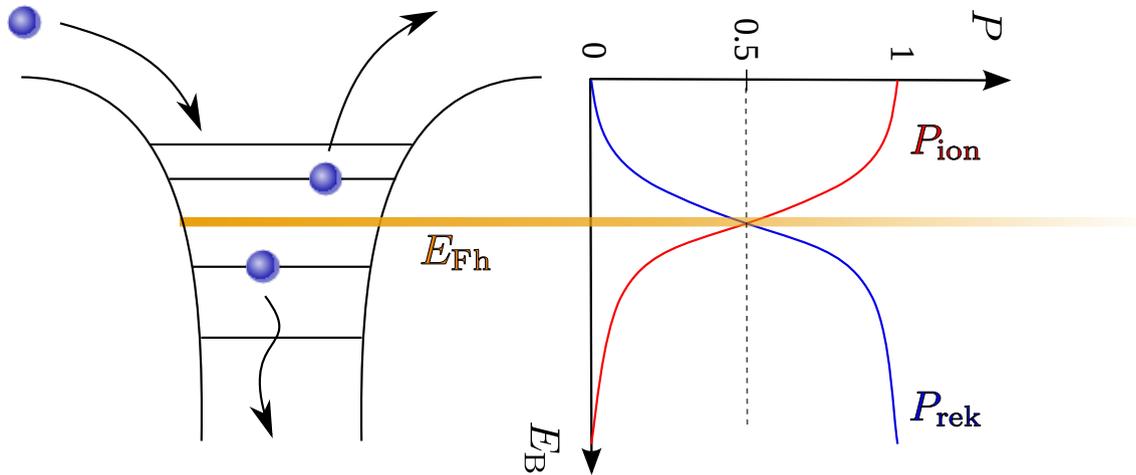


Abbildung 2.7.: (a) Typische Zeitentwicklung der minimalen Elektronenenergie  $E_{\min}$  für die Kopplungsstärke  $\Gamma = 1$ . Schwarze Abschnitte entsprechen ungebundenen Elektronen, rot markierte Teile entsprechen gebundenen Zuständen, die vor Erreichen der Energiesenke  $E_{\text{Senke}}$  wieder ionisiert werden und blaue Abschnitte entsprechen gebundenen Zuständen, die  $E_{\text{Senke}}$  erreichen. Zur Identifikation der gebundenen Zustände wurde  $\phi_c = 4\pi$  genutzt. (b) Energiedichten  $\varrho_{\text{ion}}$  (durchgezogen, rot) und  $\varrho_{\text{rek}}$  (gepunktet, blau) der Beispieltrajektorie aus (a) (Linien) und des Ensemble-Mittelwertes (schattiert).

Nachdem das Ion ein Elektron „eingefangen“ hat, kann es durch Stöße mit freien Elektronen sowohl zu Ab- als auch zur Anregung des Rydberg-Zustands kommen. Gelegentlich treten deutliche Sprünge in  $E_{\min}$  auf, in der Regel in Verbindung mit einem schmalen Peak, der nahezu positive Energien erreicht (siehe Abbildung 2.7). Diese Strukturen werden durch Stöße mit kleinem Stoßparameter verursacht, die häufig zu einem Austausch des gebundenen Elektrons  $j_{\min}$  führen [101].

Die Zustandsdynamik wird solange aufgezeichnet, bis  $E_{\min}$  eine gewisse Energiesenke  $E_{\text{Senke}}$  unterschreitet, die einem so tief gebundenen Zustand entspricht, dass eine Ionisation ausgeschlossen und das Elektron somit rekombiniert ist. Um dies zu garantieren, wurde für Simulationen mit  $\Gamma \geq 1$  die Senke auf  $E_{\text{Senke}}/(e^2/a) = -20$  gesetzt und für  $\Gamma < 1$  auf  $E_{\text{Senke}}/(e^2/a) = -50$  (vgl. Abbildung 2.9). Der Virial-Satz liefert als Abschätzung des typischen Abstands vom Ion bei einer Bindungsenergie von  $E_B/(e^2/a) = -50$  gerade den kritischen Radius  $r_c$  des Potentialübergangs in Gleichung (2.26). Somit hat das „Soft-Core-Potential“ keinen Einfluss auf die relevante Zustandsdynamik  $E_B > E_{\text{Senke}}$ .



**Abbildung 2.8.:** Schematische Darstellung des ionischen Potentialtopfs (links) mit verschiedenen Zuständen (horizontale Linien) der Bindungsenergie  $E_B$ . Für Elektronen (blaue Kugeln) oberhalb des kinetischen Flaschenhalses bei der Bindungsenergie  $E_{Fh}$  übersteigt die Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{ion}$  die Rekombinationswahrscheinlichkeit  $P_{rek}$ , während sich unterhalb von  $E_{Fh}$  das Verhältnis umkehrt.

Mit dieser Festlegung der Senke ist die Rekombination des Elektrons bei Abbruch des Simulationslaufes sichergestellt. Unklar ist jedoch, ob das Elektron eventuell schon vor Erreichen der Senke als rekombiniert betrachtet werden kann. Im folgenden Abschnitt wird deshalb ein Konzept vorgestellt, das sich dieser Frage widmet und eine klare Unterscheidung schwach gebundener von rekombinierten Elektronen erlaubt.

### 2.3.2. Kinetischer Flaschenhals

Konventionell wird die Rekombinationsrate  $\nu$  definiert als die Rate, mit der Grundzustandsatome im Plasma entstehen [22, 252, 289, 290]. Da ein solcher Zustand in einer klassischen Beschreibung nur schwer zugänglich ist, wird in dieser Arbeit der gleiche Ansatz wie in [177] gewählt und die Rate über den abwärtsgerichteten Energiefluss durch den so genannten kinetischen Flaschenhals abgeschätzt. Der kinetische Flaschenhals entspricht der speziellen Bindungsenergie, die schwach gebundene von stabilen atomaren Zuständen trennt. Sie liegt für die hier betrachteten Parameter weit oberhalb des Grundzustands, wodurch eine klassische Beschreibung möglich wird.

Das Konzept des kinetischen Flaschenhals ist in Abbildung 2.8 veranschaulicht. Ein gebundenes Elektron besitzt in Abhängigkeit von seiner Bindungsenergie unterschiedliche Wahrscheinlichkeiten für stoßinduzierte An- und Abregung. Daraus resultiert die kumulierte Wahrscheinlichkeit  $P_{ion}(E_B)$ , am Ende einer Reihe von sukzessiven Stößen mit freien Elektronen wieder ionisiert zu werden, und ebenso die Wahrscheinlichkeit, am Ende dieser Stoßfolge zu rekombinieren. In den MD-Simulationen entspricht diese Rekombinationswahrscheinlichkeit der Wahrscheinlich-

keit  $P_{\text{Senke}}(E_B) = 1 - P_{\text{ion}}(E_B)$  für ein Erreichen der Energiesenke  $E_{\text{Senke}}$ , da diese so tief gewählt wurde, dass  $P_{\text{ion}}(E_{\text{Senke}}) = 0$  gilt. Mit sinkender Bindungsenergie nimmt die Wahrscheinlichkeit einer Ionisation ab, während eine Rekombination immer wahrscheinlicher wird. Der kinetische Flaschenhals wird definiert als die Energie  $E_{\text{Fh}}$ , bei der beide Prozesse, Ionisation und Rekombination, gleich wahrscheinlich sind, d. h.

$$P_{\text{ion}}(E_B = E_{\text{Fh}}) = P_{\text{Senke}}(E_B = E_{\text{Fh}}) = \frac{1}{2}. \quad (2.44)$$

In der konventionellen Theorie (siehe Abschnitt 2.1) liefern CTMC-Rechnungen unter Berücksichtigung isolierter Drei-Körper-Stöße eine einfache lineare Abhängigkeit [177]

$$E_{\text{Fh}} \approx -3.83 \Gamma^{-1} \frac{e^2}{a} = -3.83 k_B T \quad (2.45)$$

des Flaschenhalses  $E_{\text{Fh}}$  von der Elektronentemperatur  $T$ . Gleichung (2.45) bringt direkt zum Ausdruck, dass die Energie der freien Elektronen, die ebenfalls linear mit der Temperatur ansteigt, ausschlaggebend für die Stabilität der hohen Rydberg-Zustände ist.

Da der Flaschenhals zur Unterscheidung von schwach gebundenen und rekombinierenden Elektronen dient und somit ein wichtiges Kriterium für Rekombination darstellt, soll zunächst die Gültigkeit von Gleichung (2.45) im stark gekoppelten Bereich untersucht werden. Mit Hilfe von Gleichung (2.44) kann  $E_{\text{Fh}}$  aus den MD-Simulationen bestimmt werden.

Um die dazu erforderliche Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{ion}}$  zu ermitteln, berechnen wir zunächst die Energiedichte der gebundenen Zustände

$$\varrho(\epsilon) = \left\langle \int_0^\tau \delta(E_B(t) - \epsilon) dt \right\rangle. \quad (2.46)$$

Hierbei bezeichnet  $\tau$  die Simulationszeit einer Monte-Carlo-Realisierung und  $\langle \dots \rangle$  den Mittelwert über das statistische Ensemble. Zur numerischen Umsetzung der  $\delta$ -Funktion in Gleichung (2.46) wird ein Histogramm der minimalen Energie aufgenommen (vgl. Abbildung 2.7) mit einer Einteilung des Energiespektrums in endliche Intervalle der Größe  $\Delta E = 0.03 e^2/a$ . Die Gesamtenergiedichte  $\varrho$  wird in zwei Anteile aufgespalten,  $\varrho_{\text{tot}}(E_B) = \varrho_{\text{ion}}(E_B) + \varrho_{\text{rek}}(E_B)$ , wobei  $\varrho_{\text{ion}}(E_B)$  nur die Energien gebundener Zustände enthält, die im Laufe der Simulation noch einmal ionisiert werden, und  $\varrho_{\text{rek}}(E_B)$  nur die Energien gebundener Zustände berücksichtigt, die ohne Ionisierung direkt die Energiesenke  $E_{\text{Senke}}$  erreichen (siehe Abbildung 2.7). Aus dem Verhältnis dieser Energiedichten lässt sich dann die Ionisationswahrscheinlichkeit

$$P_{\text{ion}}(E_B) = \frac{\varrho_{\text{ion}}(E_B)}{\varrho_{\text{tot}}(E_B)} \quad (2.47)$$

angeben. Sie ist exemplarisch für verschiedene Kopplungsparameter  $\Gamma$  in Abbildung 2.9 dargestellt.

Die Ionisationswahrscheinlichkeit kann auch in der Formulierung der Ratengleichungen (2.3) bestimmt werden. Dabei beschreibt die quasistatische Näherung aus

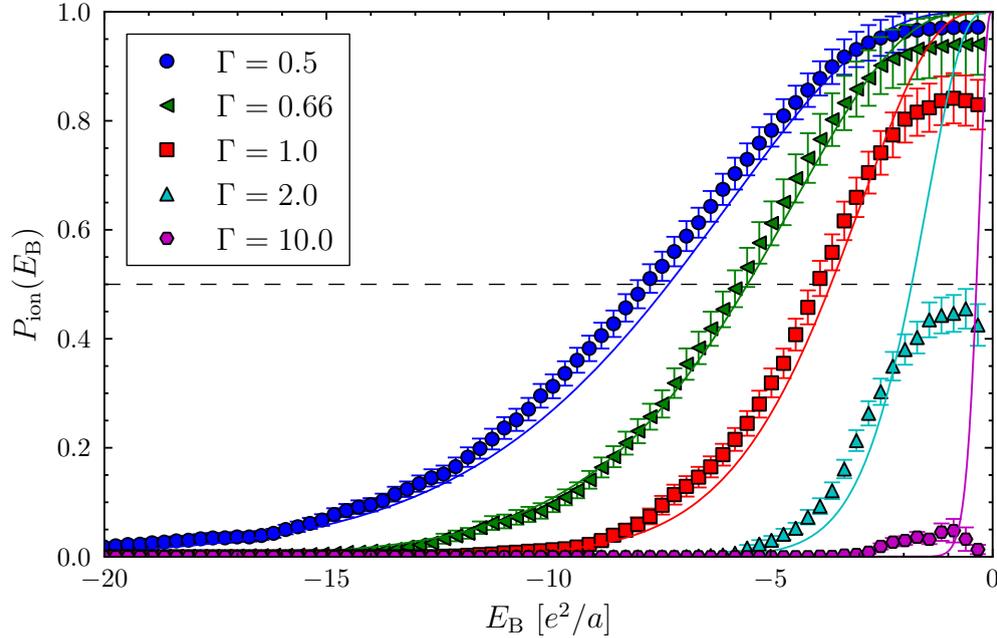


Abbildung 2.9.: Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{ion}}(E_B)$  für verschiedene Kopplungsstärken  $\Gamma$ . Die Symbole entsprechen MD-Ergebnissen für den kritischen Rotationswinkel  $\phi_c = 4\pi$ . Die Linien geben die Ionisationswahrscheinlichkeit für den Fall eines idealen Plasmas gemäß Gleichung (2.48) an.

Abschnitt 2.1 im schwach gekoppelten Regime  $\Gamma \lesssim 1$  exakt das Rekombinationszenario des hier betrachteten Vielteilchenmodells, da in beiden Fällen die Elektronendichte  $\rho_e$  als konstant angenommen wird. Für eine vorgegebene Bindungsenergie  $E_B = -\mathcal{R}/n^2$  erhalten wir unter Benutzung von Gleichung (2.12) die Ionisationswahrscheinlichkeit

$$P_{\text{ion}}(E_B) = 1 - P_{\text{rek}}(n). \quad (2.48)$$

Die gute Übereinstimmung der MD-Ergebnisse und Gleichung (2.48) für kleine  $\Gamma$  (siehe Abbildung 2.9) zeigt, dass das Vielteilchen-Modell die Rekombinationsdynamik im schwach gekoppelten Bereich treffend beschreibt. Hier kann der Flaschenhals mittels Gleichung (2.44) bestimmt werden und entspricht in Abbildung 2.9 den Schnittpunkten von  $P_{\text{ion}}$  und der horizontalen Linie bei  $1/2$ . Im Vergleich zur Ratenbeschreibung liefern die MD-Ergebnisse für größere  $\Gamma$  jedoch eine starke Unterdrückung der Ionisationswahrscheinlichkeit selbst bei schwacher Bindung, so dass im gesamten Energiespektrum  $P_{\text{ion}}(E_B) < 0.5$  gilt und der Flaschenhals somit verschwindet.

Die resultierende Temperaturabhängigkeit der Flaschenhalsenergie  $E_{\text{Fh}}$  ist in Abbildung 2.10(b) zu sehen. Bei schwacher Kopplung liefern die MD-Simulationen quantitative Übereinstimmung mit dem linearen Verhalten aus Gleichung (2.45). Jenseits von  $\Gamma \gtrsim 2$  springt  $E_{\text{Fh}}$  jedoch auf Null.

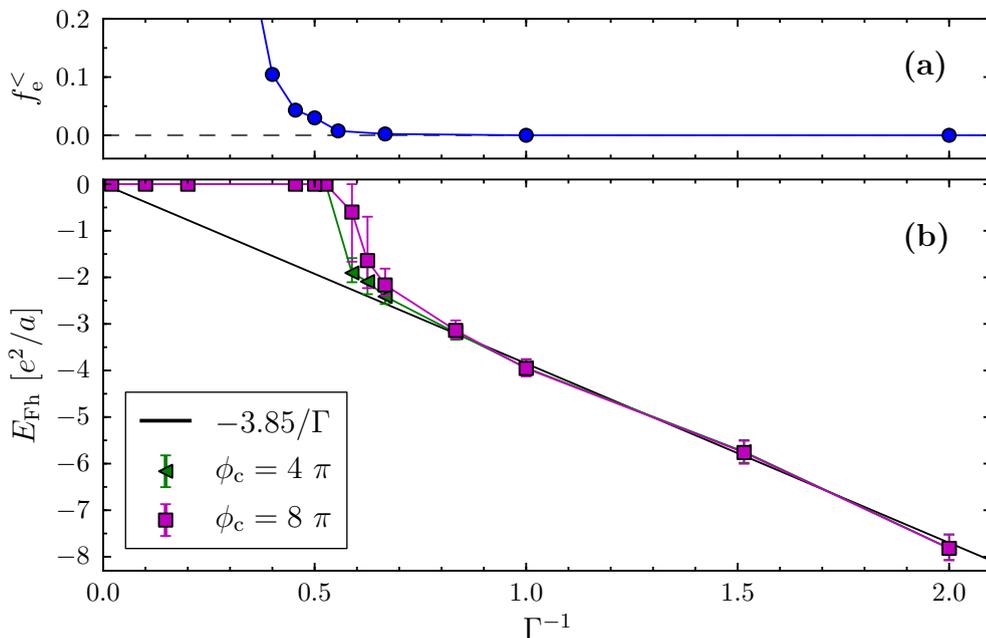


Abbildung 2.10.: (a) Anteil der freien Elektronen  $f_e^<$  mit Energie  $E < -4\Gamma e^2/a$ . (b) Energie des kinetischen Flaschenhalses  $E_{\text{Fh}}$  als Funktion der inversen Kopplungsstärke  $\Gamma^{-1}$  für zwei verschiedene Rotationswinkel  $\phi_c$  im Vergleich mit der konventionellen Skalierung gemäß Gleichung (2.45). Zur Bestimmung von  $E_{\text{Fh}}$  über Gleichung (2.44) wurde die Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{ion}}$  mit Hilfe der Energiedichten gemäß Gleichung (2.47) berechnet.

Im Gegensatz zu einem schwach gekoppelten Plasma, in dem ein Elektron erst den Flaschenhals passieren muss, um zu rekombinieren, bilden sich demnach bei großem  $\Gamma$  stabile Atome, sobald ein Bindungszustand vorhanden ist. Das Verschwinden des Flaschenhalses können wir verstehen, wenn wir den Anteil  $f_e^<$  der Plasma-Elektronen mit Gesamtenergie  $E_i < -4\Gamma^{-1} \frac{e^2}{a}$  in Abbildung 2.10(a) betrachten. Bei wachsendem  $\Gamma$  nimmt die Korrelationsenergie der Elektronen zu; folglich verringert sich die mittlere Elektronenenergie und es kommt zu einem starken Anstieg von  $f_e^<$  im Bereich von  $\Gamma \approx 2$ . Dadurch sinkt das Kontinuum und nähert sich der Größenordnung der Flaschenhalsenergie  $E_{\text{Fh}}$ . Somit hat schon ein beträchtlicher Teil der freien Elektronen Energien unterhalb von  $E_{\text{Fh}}$  gemäß Gleichung (2.45), wodurch das Konzept des kinetischen Flaschenhalses als Rekombinationskriterium unbrauchbar wird.

Der kritische Winkel  $\phi_c$  hat dabei nur geringe Auswirkung auf die Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{ion}}$  und die Flaschenhalsenergie  $E_{\text{Fh}}$ . Wie bereits in Abbildung 2.10(b) zu sehen, unterscheiden sich die beiden dargestellten Kurven für die zwei unterschiedlichen  $\phi_c$  nur geringfügig. Die deutlichste Abweichung zeigt sich im Bereich von  $\Gamma \approx 2$ , in dem der Flaschenhals verschwindet. Da jedoch dieser Sprung auch durch den Anteil der Elektronen unterhalb des Flaschenhalses  $f_e^<$  signalisiert wird, der *unabhängig*

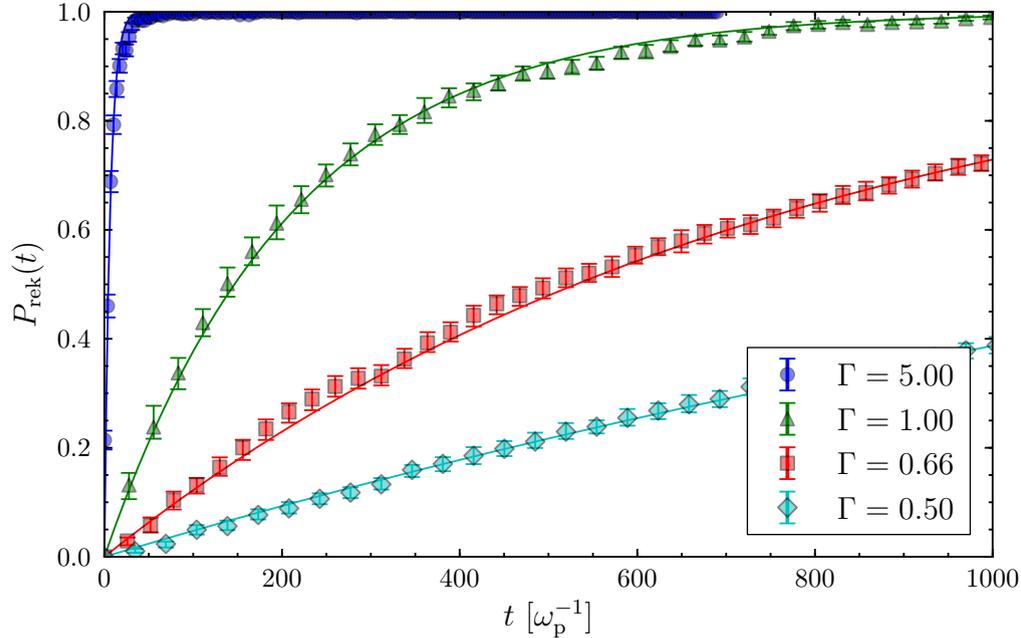


Abbildung 2.11.: Rekombinationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{rek}}(t)$  als Funktion der Zeit für verschiedene Kopplungsstärken  $\Gamma$  und  $\phi_c = 4\pi$ . Die Fits (Linien) mit dem exponentiellen Wachstumsgesetz gemäß Gleichung (2.49) beschreiben akkurat die Zeitentwicklung von  $P_{\text{rek}}(t)$  und erlauben die Extraktion der Rekombinationsrate  $\nu$ .

von  $\phi_c$  in diesem Bereich stark ansteigt, kann der kritische Winkel  $\phi_c$  nur geringe Auswirkungen auf das kritische  $\Gamma$  haben, bei dem der Flaschenhals verschwindet.

### 2.3.3. Rekombinationsrate

Mit den in den vorherigen Abschnitten bestimmten Rekombinationskriterien können nun in den aufgezeichneten Energietrajektorien (siehe Abbildung 2.7) die rekombinierten Zustände identifiziert werden. Dazu betrachten wir die Wahrscheinlichkeit  $P_{\text{rek}}(t)$ , einen Bindungszustand mit  $E_B < E_{\text{Fh}}$  vorzufinden. Diese zeitabhängige Rekombinationswahrscheinlichkeit ist in Abbildung 2.11 exemplarisch für einige  $\Gamma$  zu sehen.

Die quasistatische Näherung der konventionellen Theorie aus Abschnitt 2.1 lässt für kleine  $\Gamma$  ein exponentielles Relaxationsverhalten der Form

$$P_{\text{rek}}(t) = 1 - e^{-\nu t} \quad (2.49)$$

erwarten (vgl. Gleichung (2.8)). Die MD-Daten in Abbildung 2.11 zeigen jedoch auch bei großen  $\Gamma$  ein ähnliches Verhalten, so dass Gleichung (2.49) zur Extraktion der Rekombinationsrate  $\nu$  im gesamten betrachteten  $\Gamma$ -Bereich an die MD-Daten

gefittet wird. Die Rekombinationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{rek}}$  zeigt teilweise eine deutliche Abhängigkeit vom kritischen Winkel  $\phi_c$ , die in Abbildung 2.12(b) anhand der extrahierten Raten  $\nu$  für verschiedene Kopplungsstärken dargestellt ist.

Bei schwacher Kopplung liegt der Flaschenhals bei tiefen Bindungszuständen (vgl. Gleichung (2.45)), und eine Vielzahl von Stößen mit freien Elektronen ist nötig, um ein gebundenes Elektron in diese Region des atomaren Energiespektrums zu treiben. Dadurch hat das gebundene Elektron üblicherweise etliche Male das Ion umrundet, wenn es  $E_{\text{Fh}}$  erreicht, so dass die Rate unabhängig von  $\phi_c$  ist. Je stärker sich der Flaschenhals der Korrelationsenergie nähert, desto wichtiger wird jedoch das zusätzliche Winkel-Kriterium. Größere Rotationswinkel werden in der Regel erst bei tieferen Bindungsenergien erreicht, da die entsprechenden Bindungszustände immer stabiler werden. Im Bereich von  $\Gamma \approx 2$  kann ein Elektron also durchaus eine Energie unterhalb des Flaschenhalses haben, aber bei entsprechend groß gewähltem  $\phi_c$  ungebunden sein. Zum Erreichen des Bindungszustands sind dann längere Bindungszeiten nötig, was zu einer Abnahme der Rekombinationsrate mit steigendem  $\phi_c$  führt. Für  $\Gamma > 2$  ist diese Abhängigkeit in Abbildung 2.12(b) deutlich sichtbar.

Um die Rate bei verschiedenen Kopplungsstärken unabhängig von  $\phi_c$  zu vergleichen, wird die lineare Skalierung der MD-Daten in Abbildung 2.12(b) genutzt und die Rate auf  $\phi_c^{-1} \rightarrow 0$  extrapoliert. Dieser Grenzwert kommt einem dauerhaft am Ion lokalisierten Elektron und somit stabilen atomaren Zuständen gleich.

Zur Berechnung der Rekombinationsrate im Rahmen der Ratenbeschreibung wird Gleichung (2.10) herangezogen. Auch wenn sie die Rate der Rekombination in den Grundzustand angibt, ist der in Abbildung 2.12 dargestellte direkte Vergleich mit den MD-Ergebnissen der extrapolierten Rate für  $\Gamma \lesssim 1$  durchaus sinnvoll. Bei typischen Plasmadichten der Größenordnung  $\rho \approx 10^9 \text{cm}^{-3}$  und Temperaturen  $T > 10 \text{K}$  erreichen alle Zustandsdichten  $\rho_n$  mit  $n > 1$  in der Ratenbeschreibung rasch einen stationären Zustand [289]. Somit entspricht die Rate zur Bevölkung von Niveaus unterhalb des Flaschenhalses exakt der Rate zur Bevölkung des Grundzustands.

Im Bereich schwacher Kopplung stimmen die beiden Ansätze quantitativ überein und liefern die typische  $T^{-9/2}$ -Abhängigkeit [210]

$$\nu \approx 0.019 \omega_p \Gamma^{9/2} . \quad (2.50)$$

Erstaunlicherweise bestätigen die MD-Simulationen die Ergebnisse der CTMC-Berechnungen bis in den Bereich mäßiger Kopplung  $\Gamma \lesssim 0.3$ , der sich mit dem typischen Parameterregime in UKP-Experimenten [83, 224] deckt. Auch wenn die mittlere potentielle Energie hier bereits von der Größenordnung der mittleren kinetischen Energie der Elektronen ist, spielen Korrelationseffekte bei der Rekombination offenbar noch keine entscheidende Rolle.

Für starke Kopplung wird die Rate den MD-Simulationen zufolge jedoch um mehrere Größenordnungen unterdrückt und nähert sich einem konstanten Wert von  $\nu \approx 0.03 \omega_p$  mit wachsendem  $\Gamma$ . Damit wird das Problem der starken Divergenz  $\sim T^{-9/2}$  aus der konventionellen Ratenbeschreibung [177] gelöst. Auch die schwächeren Divergenzen der modifizierten Theorien in [31, 111, 112, 259] können hiermit ausgeschlossen werden ebenso wie eine Abnahme der Rekombinationsrate im stark gekoppelten Bereich [157]. Sowohl für die extrapolierte Rate als auch bereits für die

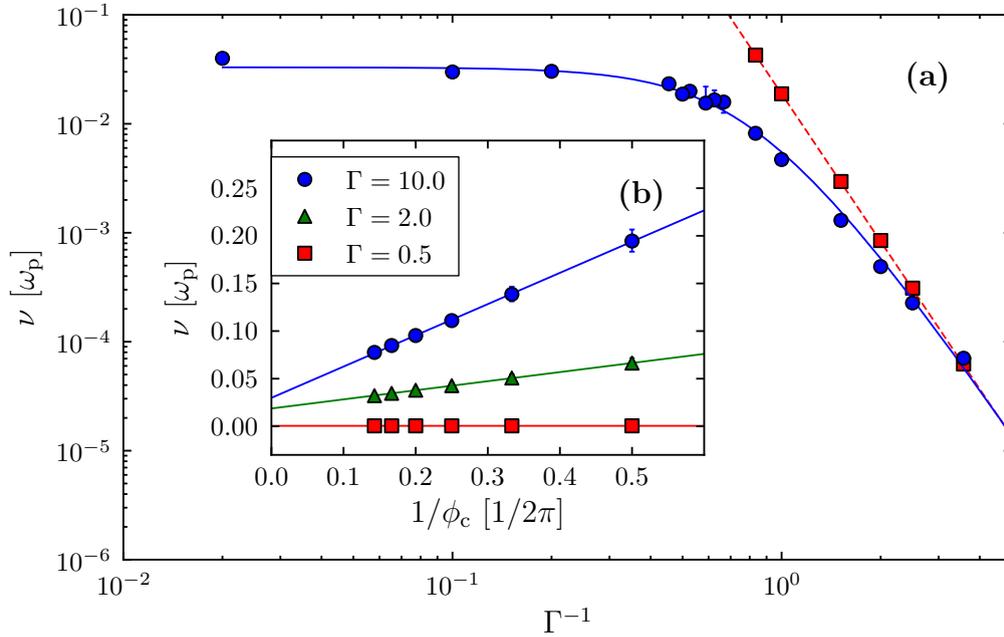


Abbildung 2.12.: (a) Extrapolierte Rekombinationsrate  $\nu$  als Funktion des inversen Kopplungsparameters  $\Gamma^{-1}$  gemäß MD-Simulationen ( $\circ$ ) und Ratengleichung ( $\square$ ). (b) MD-Ergebnisse (Symbole) zur Rekombinationsrate  $\nu$  als Funktion des inversen kritischen Winkels  $\phi_c^{-1}$  für verschiedene Kopplungsstärken  $\Gamma$ . Ein linearer Fit (Linien) dient zur Extrapolation der Rate auf  $\phi_c \rightarrow \infty$ .

mit  $\phi_c = 4\pi$  bestimmten Rate (vgl. Abbildung 2.12(b)) findet man mit  $\nu < \omega_p$  eine physikalisch sinnvolle Hierarchie der Zeitskalen. Somit wird auch die in Abbildung 2.4 skizzierte Widersprüchlichkeit der Dynamik der verschiedenen Elektronenprozesse in der konventionellen Theorie beseitigt. Die Berücksichtigung der elektronischen Korrelationen mit Hilfe des hier entwickelten Vielteilchen-Modells liefert demnach eine physikalisch sinnvolle Antwort auf die in Abschnitt 2.1 aufgeworfene Frage nach der Temperaturskalierung der Rekombinationsrate  $\nu$  im ultrakalten Bereich.

Die Sättigung der Rate im stark gekoppelten Bereich hat zur Folge, dass eine einmal erreichte hohe elektronische Kopplungsstärke nicht sofort durch Rekombinationsbedingtes Aufheizen der freien Elektronen wieder drastisch reduziert wird. Für  $\Gamma = 10$  ist die Rekombinationsrate beispielsweise um vier Größenordnungen geringer als durch die konventionelle Theorie mit Gleichung (2.50) prognostiziert, so dass die Zunahme von  $T$  entsprechend langsamer ausfällt.

Bei mäßigen Kopplungsstärken sind die MD-Resultate konsistent mit früheren MD-Simulationen von Zwei-Komponenten-Plasmen [151], die ebenfalls eine Reduktion der Rate um einen Faktor  $\sim 2$  für  $\Gamma = 0.6$  vorhersagen. Somit scheint das OCP-Modell eine geeignete Beschreibung der Rekombination in neutralen Plasmen zu liefern. Um diesen Zusammenhang näher zu untersuchen, wurden neben den ausführlichen

Rechnungen mit dem OCP-Modell aus Abschnitt 2.2 auch MD-Simulationen von Zwei-Komponenten-Plasmen durchgeführt. Diese Rechnungen und deren Ergebnisse werden im nächsten Abschnitt vorgestellt.

## 2.4. Rekombinationsdynamik im Zwei-Komponenten-Plasma

Das oben verwendete OCP-Modell ermöglicht die Untersuchung der Rekombination im Gleichgewicht bei beliebigen Kopplungsstärken  $\Gamma$ . In experimentell erzeugten UKP führt jedoch der anfängliche Nicht-Gleichgewichtszustand zu einem starken Korrelationsheizen und damit zu einer Limitierung der maximalen elektronischen Kopplungsstärke. Ziel dieses Abschnitts ist es deshalb, die Rekombination in einem Zwei-Komponenten-Plasma (*two component plasma*, TCP) unter Einfluss des Korrelationsheizens zu untersuchen und festzustellen, ob die im OCP-Modell erreichbaren hohen Kopplungsstärken und die damit verbundene Unterdrückung der Rekombinationsrate in einem TCP beobachtbar sind.

### 2.4.1. MD-Simulationen

Die aufwendige numerische Behandlung des OCP-Modells in den vorherigen Abschnitten hat bereits verdeutlicht, dass eine akkurate Modellierung der Rekombinationsdynamik überaus kompliziert ist. In einem Zwei-Komponenten-Plasma wird die Komplexität der Rechnung noch einmal merklich gesteigert. Zudem führt das Korrelationsheizen zu kleinen elektronischen Kopplungsstärken  $\Gamma$ , die eine besonders feine zeitliche Auflösung erfordern. Eine ähnlich detaillierte Untersuchung wie in den vorherigen Abschnitten ist somit offensichtlich nicht mehr mit vertretbarem numerischen Aufwand realisierbar. Trotzdem lassen sich mit einem vereinfachten Modell noch nützliche Ergebnisse zum Rekombinationsprozess gewinnen.

Analog zum OCP-Modell wird in den TCP-Rechnungen zu Beginn die Photoionisation von Atomen simuliert. Dazu werden  $N$  Atome, die jeweils aus einem Ion und einem Elektron bestehen, zufällig in einer kubischen Simulationszelle mit periodischen Randbedingungen angeordnet. Die anfängliche kinetische Überschussenergie pro Elektron von  $E_i = \frac{3}{2\Gamma_0} \frac{e^2}{a}$  legt die anfängliche effektive Kopplungsstärke  $\Gamma_0$  fest. Im Unterschied zu den OCP-Simulationen gibt  $\Gamma_0$  aber nicht die Kopplungsstärke für die gesamte Simulationsdauer an, da das Korrelationsheizen zu einer raschen Abnahme der Kopplungsstärke führt.

Eine akkurate Behandlung der Rekombinationsdynamik würde eine individuelle Zeitschrittanpassung für jedes Ion erfordern. Um diese zusätzliche Komplexität zu vermeiden, werden die Elektronen mittels des einfachen Geschwindigkeits-Verlet-Schemas (2.35) mit einem kleinen festen Zeitschritt  $\Delta t = 10^{-5} \omega_p^{-1}$  propagiert, während die Ionen für die Dauer der Simulation als unbeweglich angenommen werden. Diese Vereinfachung des Algorithmus führt jedoch dazu, dass die Dynamik tief gebundener Zustände nicht mehr mit ausreichender Genauigkeit wiedergegeben werden

kann. Deshalb wird in diesen Rechnungen nur die Kurzzeitdynamik  $\lesssim 100 \omega_p^{-1}$  betrachtet. Wegen der Temperaturzunahme durch das Korrelationsheizen entstehen in dieser Zeitspanne nur schwach gebundene Zustände, die mit dem kleinen konstanten Zeitschritt akkurat beschrieben werden. Zwar ist damit eine Bestimmung der Rekombinationsrate analog zum Vorgehen in den vorherigen Abschnitten nicht mehr möglich, dafür lassen sich jedoch Informationen über die Entwicklung der freien Elektronen gewinnen, die mit den Ergebnissen der Ratenbeschreibung verglichen werden können.

### 2.4.2. Ratengleichungen

Bei der Beschreibung der Rekombinationsdynamik mit Hilfe der Ratengleichungen (2.3) spielt das Korrelationsheizen ebenfalls eine wichtige Rolle, da die atomaren Übergangsraten (2.13) bis (2.16) von der Elektronentemperatur  $T$  abhängen. Um das Korrelationsheizen zu berücksichtigen, werden deshalb die Ratengleichungen (2.3) um die Gleichung

$$\frac{3}{2}k_B T(t)\rho_e(t) = \frac{3}{2}k_B T(0)\rho_e(0) + \sum_{n=1}^{n_{\max}} \rho_n(t) \frac{\mathcal{R}}{n^2} \quad (2.51)$$

zur Beschreibung der Energieerhaltung und Temperaturänderung erweitert. Außerdem soll die für ein realistisches TCP nötige Teilchenzahlerhaltung

$$\rho_e + \sum_{n=1}^{n_{\max}} \rho_n = \rho_{\text{tot}} = \text{const.} \quad (2.52)$$

angenommen werden, d. h. insbesondere  $\dot{\rho}_e \neq 0$ . Damit ist die quasistatische Näherung aus Abschnitt 2.1 nicht mehr anwendbar und eine vollständig zeitabhängige Lösung des mit Gleichung (2.51) erweiterten Gleichungssystems (2.3) wird erforderlich.

Bei dieser dynamischen Lösung der Gleichungen (2.3) kann wieder nur eine endliche Anzahl atomarer Zustände  $n \leq n_{\max}$  betrachtet werden. Eine Konvergenz der Ergebnisse wie in der quasistatischen Näherung kann in diesem Fall nicht erreicht werden, da nun die Elektronendichte  $\rho_e$  veränderlich ist. Je mehr Niveaus in die Rechnung einbezogen werden, desto schneller sinkt  $\rho_e$  zu Beginn der Rechnung durch Rekombination freier Elektronen in die angeregten Zustände  $n \leq n_{\max}$  mit der totalen Rekombinationsrate  $R_{\text{rek}}^{\text{tot}} = \sum_{n=1}^{n_{\max}} R_{\text{rek}}(n)$ . Da die Boltzmann-Verteilung (2.4) der angeregten Zustände die Möglichkeit einer Ionisierung des Atoms nicht beinhaltet und für große  $n$  divergiert, divergiert auch  $R_{\text{rek}}^{\text{tot}}$  sowie die Zustandssumme des Atoms für  $n_{\max} \rightarrow \infty$ . Um diese Divergenz zu verhindern, wird das atomare Energiespektrum üblicherweise am Minimum der Saha-Verteilung (2.4), dem so genannten Thomson-Niveau [258]

$$n_T = \sqrt{\frac{\mathcal{R}}{k_B T}}, \quad (2.53)$$

abgeschnitten (siehe Abbildung 2.3(a)). Seine Energie  $E_{n_T}$  entspricht gerade der mittleren Energie der freien Elektronen, wodurch die thermische Ionisierung der

Rydberg-Zustände berücksichtigt wird [111]. Die Anregung in Zustände  $n > n_T$  wird nun mit der Ionisierung zusammengefasst [45], so dass Übergänge von Niveaus unterhalb in Niveaus oberhalb von  $n_T$  mit den entsprechenden Raten  $R(n, m)$ ,  $n \leq n_T$ ,  $m > n_T$ , weiterhin möglich sind, der umgekehrte Prozess jedoch nicht.

Somit ergeben sich für die technische Behandlung der Ratengleichungen (2.3) zwei kritische Energieniveaus: Die Anzahl der gekoppelten Differentialgleichungen entspricht  $n_T + 1$  für die Anzahl der atomaren Niveaus bis zum Thomson-Niveau und für das Kontinuum. Das zweite Grenzniveau  $n_{\max} > n_T$  bestimmt die Anzahl der atomaren Energieniveaus oberhalb von  $n_T$ , die für Übergänge aus Zuständen unterhalb von  $n_T$  in Betracht gezogen werden. Indem  $n_{\max}$  hinreichend groß gewählt wird, erhält man konvergierte Ergebnisse.

Zu Beginn der Rechnung ist kein atomarer Zustand besetzt, d. h.  $\rho_n = 0$  für alle  $n$ , und die Dichte der freien Elektronen beträgt  $\rho_e = \rho_{\text{tot}}$ . Im Laufe der Zeit fließt nun Population von  $\rho_e$  in die Dichten der angeregten atomaren Zustände  $\rho_n$ . In jeder Iteration wird die nach Gleichung (2.51) herrschende Temperatur für die Berechnung der Raten gemäß Gleichungen (2.13) bis (2.16) genutzt. Außerdem muss permanent das obere Ende des atomaren Energiespektrums  $n_T$  angepasst werden. Dabei wird die Population, die bei sinkendem  $n_T$  in den Zuständen oberhalb von  $n_T$  zurückbleibt, dem Kontinuum zugeordnet.

### 2.4.3. Korrelationsheizen und Relaxation der Rydberg-Zustände

Da sich das System zu Beginn der Relaxation in einem Zustand weit entfernt vom Gleichgewicht befindet, kann streng genommen nur eine effektive Temperatur angegeben werden, die proportional zur kinetischen Energie der Elektronen ist. Insofern stellt Gleichung (2.51) bis zum Erreichen des Gleichgewichtszustands nur eine Näherung dar, da die Raten auf Grundlage dieser effektiven Temperatur berechnet werden.

In den MD-Simulationen steht man zu Beginn vor dem gleichen Problem, nur effektive Kopplungsstärken angeben zu können. Nachdem mit Hilfe des kritischen Winkels  $\phi_c$  freie und schwach gebundene Elektronen identifiziert wurden, wird zur Charakterisierung der Relaxationsphase der Kopplungsparameter  $\Gamma$  aus dem freien Anteil auf zwei verschiedene Arten berechnet, die über höhere Momente der elektronischen Geschwindigkeitsverteilung definiert sind:

$$\Gamma_1 = \frac{1}{\langle v^2 \rangle} (\omega_p a)^2 \quad (2.54a)$$

$$\Gamma_2 = \sqrt{\frac{2}{3(\langle v^4 \rangle - \langle v^2 \rangle^2)}} (\omega_p a)^2. \quad (2.54b)$$

Solange sich noch keine Temperatur eingestellt hat, gilt für die effektiven Kopplungsparameter  $\Gamma_1 \neq \Gamma_2$ . Sobald jedoch die Identität  $\Gamma_1 = \Gamma_2$  erreicht wird, ist das System im Gleichgewicht, und die Definitionen (2.54) entsprechen beide der Kopplungsstärke  $\Gamma$ .

Wie in den Abbildungen 2.13 und 2.14 zu sehen, nähern sich die beiden Definitionen von  $\Gamma$  auf einer Zeitskala von  $\sim \omega_p^{-1}$  an, so dass man für  $t > \omega_p^{-1}$  von einer Temperatur sprechen kann. Im selben Zeitraum führt das Korrelationsheizen [152, 178] zu einer deutlichen Temperaturzunahme. Nahezu unabhängig von der mittels  $\Gamma_0$  vorgegebenen Überschussenergie relaxiert der Kopplungsparameter auf einen Wert von  $\Gamma \approx 0.5$ . Dieses Ergebnis ist um den Faktor 2 kleiner als das in [152] gefundene, stimmt aber mit [259] und neueren MD-Simulationen [197] überein.

Auch wenn bereits bei  $\Gamma \approx 0.5$  die Ergebnisse des vorherigen Abschnitts ein leicht geändertes Rekombinationsverhalten voraussagen, wären höhere elektronische Kopplungsstärken wünschenswert, da in diesem Fall die Abweichungen von der traditionellen  $T^{-9/2}$ -Skalierung besonders offensichtlich würden. Um eine Verringerung des Korrelationsheizens zu erreichen und damit den Kopplungsparameter zu erhöhen, wurden deshalb verschiedene Gitterstrukturen als Ausgangskonfiguration der Atome oder Elektronen verwendet. So wurden beispielsweise die Atome auf die Gitterplätze eines *bcc*-Gitters gesetzt, das den Grundzustand eines Coulomb-Kristalls darstellt. Ebenso wurden Konfigurationen getestet, bei denen die Elektronen zu Beginn der Simulation jeweils in den Gitterlücken zwischen den Ionen angeordnet waren. Unabhängig von der Anfangskonfiguration und von der Überschussenergie  $\Gamma_0$  heizen sich die Elektronen jedoch stets auf  $\Gamma \approx 0.5$  auf. Dieser Wert verkörpert somit eine fundamentale Limitierung der elektronischen Kopplungsstärke im Zwei-Komponenten-Plasma.

Dadurch unterscheiden sich die Elektronen grundlegend von Ionen, deren Korrelationsheizen durch eine gitterartige Anordnung stark unterdrückt und deren Kopplungsstärke damit um Größenordnungen erhöht werden kann [95, 205] (siehe Abschnitt 4). Die Ursache für diese völlig unterschiedliche Temperaturzunahme der beiden Plasmaspezies liegt in ihrem großen Masseunterschied begründet. Beim Korrelationsheizen wandelt sich die potentielle Energie der paarweisen Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen in kinetische Energie der beiden Teilchen um. Dabei teilt sich die Energie entsprechend dem umgekehrten Masseverhältnis auf die zwei Teilchen auf. Das Korrelationsheizen aufgrund der Wechselwirkung mit der eigenen Spezies lässt sich somit durch Anordnung der Teilchen auf einem Gitter vollständig ausschalten. Die repulsive Wechselwirkung zwischen Teilchen der gleichen Spezies erhöht dabei noch die Stabilität einer solchen Konfiguration. Die attraktive Elektron-Ion-Wechselwirkung begünstigt jedoch Konfigurationen, in denen Elektronen und Ionen an derselben Position, d. h. rekombiniert sind; andere Konfigurationen sind instabil. Aufgrund des Ion-Elektron-Masseverhältnis von  $m_i/m_e \approx 10^5$  erhalten die Elektronen bei der Ausbildung der Elektron-Ion-Korrelationen den Großteil der entsprechenden Wechselwirkungsenergie und werden stark erhitzt. Die in [31, 157] kürzlich beschriebene Existenz metastabiler, stark gekoppelter elektronischer Zustände, in denen die Rekombination um Größenordnungen unterdrückt wird, ist somit ausgeschlossen.

Die MD-Ergebnisse der vorherigen Abschnitte lassen jedoch schon bei  $\Gamma \approx 0.5$  eine gegenüber den CTMC-Resultaten um den Faktor  $\sim 2$  reduzierte Rekombinationsrate  $\nu$  erwarten. Tatsächlich beobachtet man deutliche Unterschiede zwischen MD- und Ratenbeschreibung in der Entwicklung des Anteils freier Elektronen  $f_e$  (siehe Abbildungen 2.13 und 2.14). Im Gegensatz zu den OCP-Resultaten, die einzig

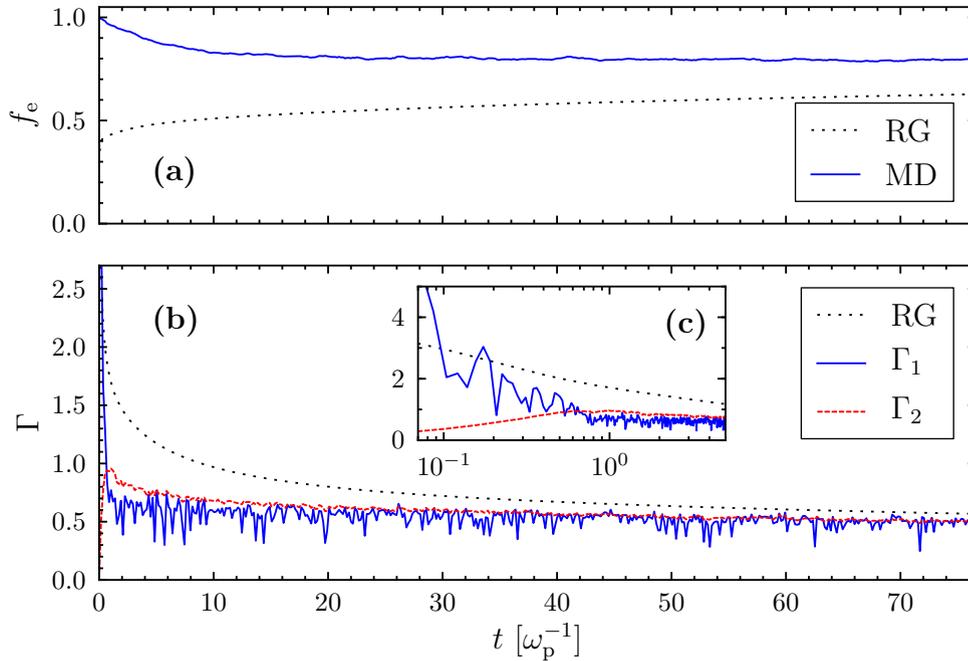


Abbildung 2.13.: Evolution der normierten Dichte freier Elektronen  $f_e(t) = \rho_e(t)/\rho_e(0)$  (a) und der elektronischen Kopplungsstärke  $\Gamma$  (b,c), berechnet mit MD-Simulationen unter Verwendung von  $\phi_c = 4\pi$  und Ratengleichungen (RG) für eine anfängliche Überschussenergie von  $\Gamma_0^{-1} = 1/50$ .

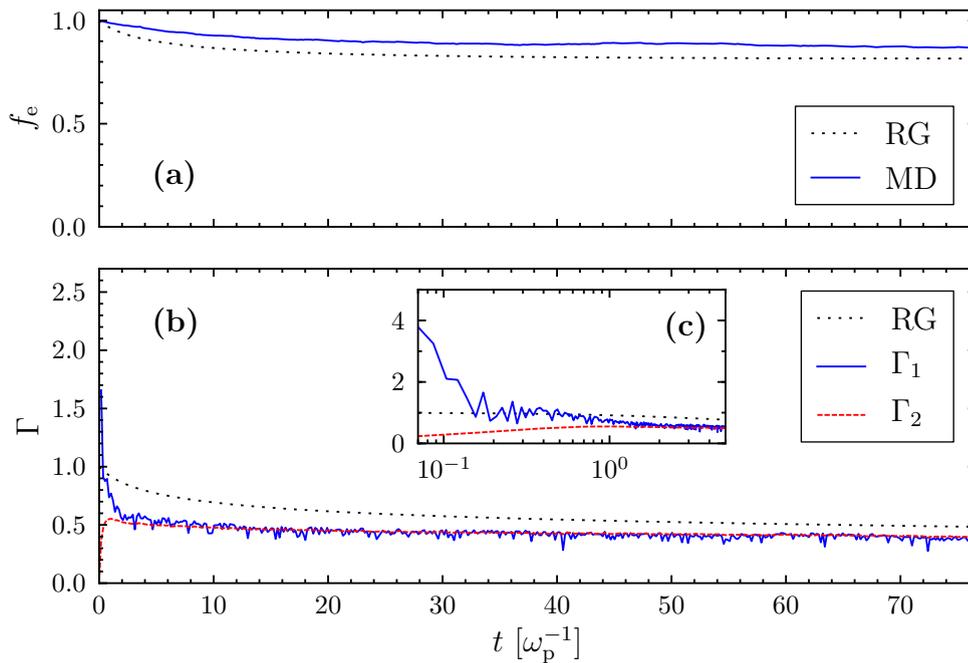


Abbildung 2.14.: Gleiche Darstellung wie in Abbildung 2.13, aber für  $\Gamma_0 = 1$ .

von der Gleichgewichtskopplungsstärke  $\Gamma$  abhängen, ergibt sich hier eine zusätzliche Abhängigkeit von der anfänglichen Überschussenergie  $\sim \Gamma_0^{-1}$ . Obwohl sowohl mit  $\Gamma_0 = 50$  als auch mit  $\Gamma_0 = 1$  die Kopplungsstärke nach  $\sim 50 \omega_p^{-1}$  auf  $\Gamma \approx 0.5$  relaxiert ist, unterscheidet sich die Anzahl schwach gebundener Rydberg-Atome deutlich, was auf längere Relaxationszeiten der Bindungszustände zurückgeführt werden kann. Bei einer Initialisierung mit tiefen Temperaturen ( $\Gamma_0 = 50$ ) kommt es in der Ratenbeschreibung aufgrund der starken Überschätzung der Übergangsraten im ultrakalten Bereich zu einer nahezu instantanen Bindung von mehr als 50% der Elektronen. Die damit verbundene Temperaturzunahme der verbleibenden freien Elektronen führt wieder zu einer Ionisation einiger schwach gebundener Zustände und damit schließlich zu einem Gleichgewichtswert von  $f_e \approx 0.65$ . In den MD-Simulationen zeigt die Evolution der Kopplungsstärke nur eine schwache Abhängigkeit vom kritischen Winkel  $\phi_c$ . Der Anteil freier Elektronen  $f_e$  nimmt bei wachsendem  $\phi_c$  nur geringfügig ab, zeigt aber qualitativ weiterhin das gleiche Verhalten. Die anhand der MD-Simulationen beobachteten Abweichungen in  $f_e$  von der bisherigen Beschreibung mittels Ratengleichung sollten bei Messungen auf kurzen Zeitskalen sichtbar sein.

Tatsächlich legen aktuelle Messungen von Fluoreszenzstrahlung solche Modifikationen nahe [26]. In diesen Experimenten wurde das zeitabhängige Fluoreszenzsignal  $S(t)$  von Übergängen zwischen tief liegenden Energieniveaus mit einer Auflösung von unter 100 ns aufgezeichnet. Bei hohen Temperaturen steigt das Signal  $S(t)$  proportional zu  $\rho_e^3$ , in Übereinstimmung mit dem Bild isolierter Drei-Körper-Kollisionen, für die

$$S(t) \sim \rho_e \nu t \propto \rho_e \omega_p \Gamma^{9/2} t \propto \rho_e^3 t \quad (2.55)$$

gilt. Für tiefere Temperaturen ändert sich die Skalierung zu  $S(t) \sim \rho_e^{2.2}$ , während Simulationen mit CTMC-Raten, basierend auf Drei-Körper-Stößen, eine Abhängigkeit gemäß  $\sim \rho_e^{1.8}$  vorhersagen [26]. Die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit zeigen bereits bei  $\Gamma \approx 1$  die geänderte Skalierung  $\nu \sim \omega_p \Gamma^3$  (siehe Abbildung 2.15) bzw.  $\rho \nu t \propto \rho_e^{2.5}$ . Das Fluoreszenzsignal wird jedoch auch durch die Temperaturzunahme aufgrund des Korrelationsheizens und der Bildung von Rydberg-Atomen beeinflusst [26], so dass dieser einfache Vergleich nur als qualitative Abschätzung gesehen werden sollte.

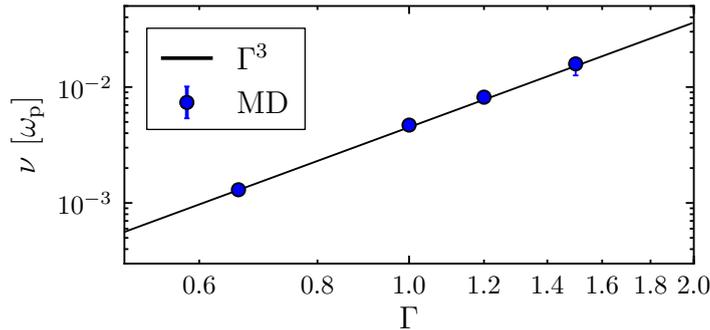


Abbildung 2.15.: Rekombinationsrate  $\nu$  aus Abbildung 2.12 für mittlere Kopplungsstärken  $\Gamma$ . In diesem Bereich skaliert die Rate mit  $\Gamma^3$  (Linie).

Die Ergebnisse dieses Kapitels haben bereits verdeutlicht, dass kollektive Effekte im Bereich starker Kopplung fundamentale Änderungen der mikroskopischen Teilchendynamik und der daraus resultierenden Relaxation makroskopischer Größen zur Folge haben. Dies gilt auf der kurzen Zeitskala der Elektronenbewegung ebenso wie auf der deutlich längeren Zeitskala der Ionendynamik. Im Unterschied zu den Elektronen, deren Kopplungsstärke in bisherigen Experimenten auf  $\Gamma \lesssim 0.2$  limitiert ist [142], können Ionen heutzutage bereits mit Kopplungsparametern knapp über  $\Gamma = 1$  erzeugt werden und bieten zudem deutliche bessere Perspektiven für eine weitere Steigerung der Kopplungsstärke [142, 205] (siehe auch Kapitel 4). Die Aussicht auf eine baldige experimentelle Realisierung stark korrelierter Ionen macht somit die theoretische Untersuchung rein ionischer Prozesse im Regime starker Kopplung besonders interessant. Zu diesen gehört auch die Relaxation der ionischen Geschwindigkeitsverteilung im thermischen Gleichgewicht, die im nächsten Kapitel untersucht wird.

# 3. Relaxation der ionischen Geschwindigkeitsverteilung

Im Allgemeinen lässt sich die Relaxation der Ionen aufgrund elastischer Stöße in einem Plasma in zwei Phasen einteilen: Nach der Erzeugung des Plasmas stellt sich zunächst ein thermisches Gleichgewicht ein. Dabei bilden sich auf der Zeitskala der inversen ionischen Plasmafrequenz<sup>1</sup>  $\omega_p^{-1}$  Korrelationen zwischen den Ionen aus. Dieser Prozess ist mit einer Relaxation der ionischen Zwei-Teilchen-Verteilungsfunktion auf ihren stationären Zustand verbunden. In UKP resultiert daraus ein starker Temperaturanstieg (Korrelationsheizen), während in heißen Plasmen die Temperaturzunahme gegenüber den ohnehin schon hohen Temperaturen vernachlässigt werden kann. Anschließend kommt es zur Relaxation der ionischen Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion, die auf einer wesentlich längeren Zeitskala abläuft.

Diese zweite Relaxationsphase spielt eine wichtige Rolle für die Evolution des Plasmas. Sie führt beispielsweise zu einer Temperaturequilibration in einem Mehr-Komponenten-Plasma mit verschiedenen Temperaturen oder zu einer Isotropisierung der Geschwindigkeiten in einem Ein-Komponenten-Plasma. Die typischen Zeitskalen dieser Prozesse bzw. die entsprechenden Relaxationsraten bestimmen eine Vielzahl von Transportkoeffizienten [39, 220, 247], darunter die elektrische und die thermische Leitfähigkeit [32, 33, 128, 159, 216, 248] sowie den Viskositätskoeffizienten [257]. Diese sind für viele technischen Anwendungen von Bedeutung, die ein Aufheizen und/oder Einschließen von Plasmen erfordern, wie z. B. die kontrollierte thermonukleare Fusion, Ionenstrahl-Triebwerke oder Oberflächenbehandlungen.

In schwach gekoppelten Plasmen ist die Relaxation der Ein-Teilchen-Verteilungsfunktion aufgrund elastischer Stöße seit langem intensiv untersucht worden und kann in vielen Fällen gut theoretisch beschrieben werden. Starke Korrelationen führen jedoch zu einem Zusammenbruch dieser Beschreibung, da sie - analog zur konventionellen Theorie der Rekombination (Kapitel 2) - kollektive Effekte vernachlässigt. Bislang besteht kein Konsens, wie die Theorie auf den Bereich starker Kopplung zu erweitern ist. Zudem sind experimentelle Daten zur Relaxationsrate in stark gekoppelten Plasmen bislang nicht verfügbar, so dass das Problem der Relaxation bei hohen Kopplungsgraden weiterhin ungeklärt bleibt.

Dieses Kapitel widmet sich dieser Problematik, indem die Relaxation der ionischen Geschwindigkeitsverteilung in UKP nach dem Korrelationsheizen untersucht wird. Die Dynamik der Verteilung wird durch elastische Ion-Ion-Kollisionen getrieben und unterscheidet sich damit signifikant von der bislang deutlich intensiver studierten Elektron-Ion-Equilibration. In enger Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. T.

---

<sup>1</sup>In diesem Kapitel beziehen sich sämtliche Parameter ohne Index auf die Ionen.

C. Killian konnten im Rahmen dieser Arbeit erstmals experimentell Relaxationsraten im stark gekoppelten Bereich bestimmt werden. Die theoretische Beschreibung der Relaxation für schwach gekoppelte Plasmen wird zunächst in Abschnitt 3.1 skizziert, und anschließend werden die Probleme bei der Erweiterung auf den stark gekoppelten Bereich thematisiert. Es folgt eine kurze Zusammenfassung der praktischen Umsetzung des Experiments zur Messung der Relaxation in UKP in Abschnitt 3.2 und dessen theoretische Beschreibung zur Durchführung von semiklassischen Simulationen in Abschnitt 3.3. Die Daten aus Experiment und Simulation können mit der gleichen nicht-markovschen Evolutionsgleichung beschrieben werden, die in Abschnitt 3.4 vorgestellt wird. Die resultierenden Raten werden in Abschnitt 3.5 diskutiert und die Ergebnisse aus Simulation und Experiment gegenübergestellt. Dabei wird vor allem der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Relaxationsrate sowie dem Relaxationsverhalten im stark gekoppelten Bereich besondere Aufmerksamkeit geschenkt. In Abschnitt 3.6 wird schließlich die Relaxationsrate im Rahmen der kinetischen Theorie auf verschiedenen Approximationsstufen für den schwach gekoppelten Bereich berechnet und mit den Simulationsergebnissen verglichen.

### 3.1. Landau-Spitzer-Theorie und ihre Grenzen

Aufgrund der langreichweitigen Coulomb-Wechselwirkung unterscheiden sich Relaxationsprozesse in Plasmen fundamental von den analogen Vorgängen in neutralen Gasen. Eine theoretische Behandlung mit Hilfe der Boltzmann-Gleichung [169], d. h. basierend auf isolierten kurzreichweitigen Stößen, ist deshalb unzureichend. Die entsprechenden Erweiterungen der Theorie auf ionisierte Gase wurde vor mehr als einem halben Jahrhundert von Landau [156] und Spitzer [247] entwickelt. Die sich ergebende Landau-Spitzer-Rate zur Beschreibung von Stoßprozessen in Plasmen wird heute noch häufig in der Plasmaphysik eingesetzt und findet darüber hinaus auch im astrophysikalischen Kontext der Dynamik von Sternhaufen [53] Anwendung. Wie im nächsten Teil dieses Abschnitts noch ausführlicher erläutert wird, basiert die Landau-Spitzer-Beschreibung auf der zentralen Annahme binärer Stöße und der Vernachlässigung von Kollisionen mit großem Streuwinkel. Diese liefert eine sehr gute Beschreibung im schwach gekoppelten Regime, verliert jedoch ihre Gültigkeit in stark gekoppelten Plasmen. In den letzten Jahren haben aber gerade diese Systeme sowohl experimentell als auch theoretisch besondere Aufmerksamkeit erfahren, vor allem im Zusammenhang mit so genannter „warmer dichter Materie“ [192]. Unter diesen Begriff fallen Plasmen mit Dichten in der Größenordnung von Festkörpern und Temperaturen im Bereich von einigen Elektronenvolt, wie sie im Inneren von Planeten [265] oder bei der Trägheitsfusion auftreten.

Bei Letzterer spielt vor allem die Thermalisierung von Elektronen und Ionen eine wichtige Rolle: Zur Untersuchung von Fusionsprozessen bei hohen Dichten werden in typischen Experimenten [171] kleine Materialproben, üblicherweise eine Mischung aus Deuterium und Tritium, mit intensiven Lasern bestrahlt. Die Laserenergie wird durch die äußeren Schichten der Probe absorbiert, die daraufhin explodieren und den Probenkern stark komprimieren und aufheizen. Durch die resultierenden extrem ho-

hen Dichten und Temperaturen kann es zu Fusionsreaktionen im Kern kommen. Die Laserenergie wird hauptsächlich von den Elektronen absorbiert, so dass die Energie erst an die Ionen übertragen werden muss, um die nötigen Iontemperaturen für eine Kernfusion zu erreichen. Dabei hängt die Effizienz der Laserabsorption auch von der Rate dieses Energieübertrags ab. Im Inneren der Probe können hingegen durch die schockartige Kompression zuerst die Ionen aufgeheizt werden. Die anschließende Equilibrierung mit den Elektronen beeinflusst die Dynamik der Schockwelle und die Ausbildung der Fusionsbedingungen. Der Energieübertrag zwischen Elektronen und Ionen bzw. die Equilibrierung der Elektronen- und Iontemperaturen ist für die Trägheitsfusion somit von besonderer Bedeutung und eine genaue Kenntnis der entsprechenden Relaxationsraten zur Optimierung der Fusionsbedingungen unerlässlich [132, 194, 231, 282]. Nicht zuletzt deshalb sind Elektron-Ion-Relaxationsprozesse in der Vergangenheit besonders intensiv theoretisch untersucht worden [42, 66, 71–73, 93, 96, 102, 117, 194, 235, 238, 269].

Darüber hinaus existiert auch ein grundlegendes Interesse an Relaxationsraten bei hohen Kopplungsgraden, unter anderem, um eine Vielzahl von Experimenten an dichten Plasmen interpretieren zu können [2, 51, 90, 98, 158, 221]. Bisherige Ansätze [16, 42, 72, 73, 93, 164, 235] zur Erweiterung der Landau-Spitzer-Theorie auf den stark gekoppelten Bereich liefern jedoch unterschiedliche und teils widersprüchliche Ergebnisse. Zur Überprüfung verschiedener Modelle ist teilweise eine indirekte Bestimmung der Raten über die Modellierung anderer Größen und den Vergleich mit experimentellen Daten möglich [2, 98]. Trotz rasanter Fortschritte der experimentellen Techniken zur Diagnose dichter Plasmen [90, 99, 100, 146, 147] erscheint eine direkte Messung (z. B. der Elektron-Ion-Thermalisierung [256]) nach wie vor schwierig, vor allem, weil die erwartete Relaxationszeit ( $t \sim \omega_p^{-1} \sim \rho^{-\frac{1}{2}}$ ) wegen der hohen Plasmadichten unterhalb des derzeitigen experimentellen Auflösungsvermögens liegt [235].

UKP hingegen haben sehr viel geringere Dichten. Die Relaxationsprozesse laufen auf wesentlich längeren Zeitskalen ab, die experimentell zugänglich sind. Sie bieten damit ideale Voraussetzungen zur experimentellen Untersuchung von Relaxationsraten im stark gekoppelten Bereich und können wichtige Hinweise für die Erweiterung der Landau-Spitzer-Theorie geben. Die verschiedenen bereits vorhandenen theoretischen Konzepte für den Bereich schwacher und starker Kopplung werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt.

### 3.1.1. Landau-Spitzer-Theorie

Die grundlegende theoretische Beschreibung von Relaxationsprozessen in schwach gekoppelten Plasmen geht auf Landau [156] und Spitzer [247] zurück. Landau leitete aus der Boltzmann-Gleichung eine kinetische Gleichung her, unter der Annahme, dass binäre Kollisionen mit großem Stoßparameter und kleinem Ablenkwinkel die relaxationsbestimmenden Prozesse seien. Diese Voraussetzung ist in schwach gekoppelten Coulomb-Systemen gegeben, da die Teilchen über große Entfernungen wechselwirken und somit der kumulative Effekt der Stöße mit großem Stoßparameter die Auswirkungen der wenigen Kollisionen bei kurzen Abständen deutlich überwiegt.

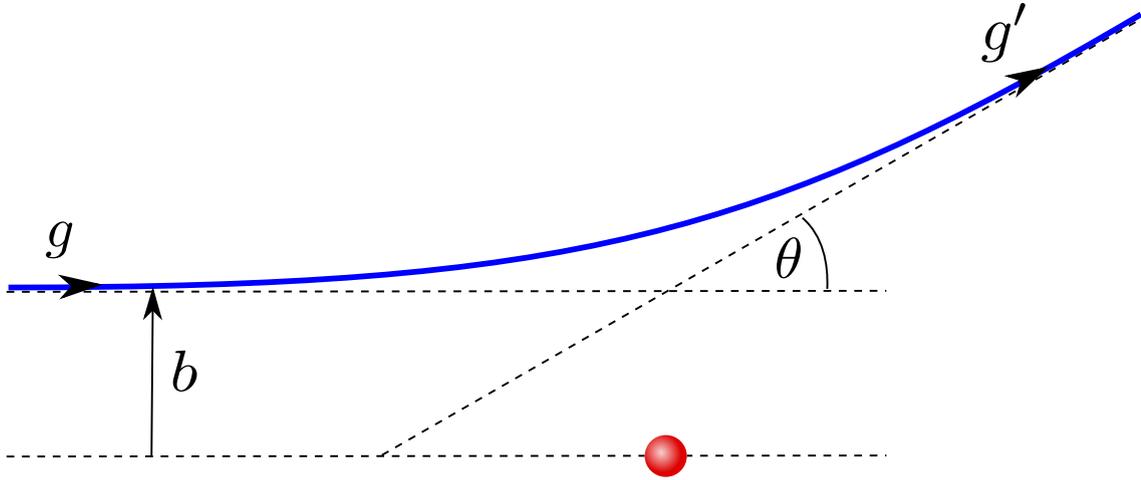


Abbildung 3.1.: Skizze einer Kollision zweier Teilchen mit Relativgeschwindigkeit  $g$  und Stoßparameter  $b$  im System des Massenschwerpunktes (roter Punkt).

Während die Landau-Gleichung in Abschnitt 3.6 explizit als Grenzfall einer allgemeineren kinetischen Theorie diskutiert wird, soll im Folgenden zur Herleitung der Relaxationsrate der Ansatz von Spitzer [247] genutzt werden. Dieser betrachtet den Fall eines „Testteilchens“ mit Masse  $m$ , das sich durch ein Ensemble anderer Teilchen, der „Feldteilchen“, mit Masse  $m_f$  bewegt. Durch sukzessive Stöße des Testteilchens mit vielen Feldteilchen wird dessen Geschwindigkeit beeinflusst. Zur Beschreibung des Stoßprozesses zwischen dem Test- und einem Feldteilchen betrachten wir die Kollision im System des Massenschwerpunktes beider Teilchen (siehe Abbildung 3.1). Die relevanten Größen sind dabei die reduzierte Masse  $\mu = m m_f / (m + m_f)$  und die Relativgeschwindigkeit  $\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_f$ , wobei  $\mathbf{v}$  und  $\mathbf{v}_f$  jeweils die Geschwindigkeit des Test- und Feldteilchens bezeichnen. Die Abhängigkeit des Streuwinkels  $\theta$  vom Stoßparameter  $b$  ist gegeben durch

$$\cot(\theta/2) = b\mu g^2/e^2. \quad (3.1)$$

Damit erhält man den differentiellen Wirkungsquerschnitt zur Streuung in den Raumwinkel  $d\Omega$  gemäß Rutherford zu

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{e^2}{2\mu g^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2. \quad (3.2)$$

Die Impulszunahme in Richtung von  $\mathbf{g}$  nach dem Stoß beträgt  $\Delta p = \mu g(1 - \cos\theta)$ , während die Impulsänderung senkrecht zu  $\mathbf{g}$  in einem isotropen Plasma im Mittel verschwindet. Durch Multiplikation von Gleichung (3.2) mit  $(1 - \cos\theta)$  und Integration über den Raumwinkel  $d\Omega$  erhält man somit den Wirkungsquerschnitt für Impulstransfer

$$\sigma = 4\pi \left( \frac{e^2}{\mu g^2} \right)^2 \ln \left( \frac{1}{\sin \theta_{\min}/2} \right). \quad (3.3)$$

Um eine Divergenz des Integrals zu verhindern, wurde hierbei ein noch nicht näher bestimmter minimaler Streuwinkel  $\theta_{\min} > 0$  eingeführt, der später konkretisiert wird.

Die mittlere Geschwindigkeitsänderung pro Zeiteinheit erhält man mit Hilfe von Gleichung (3.3) und einer Integration über die Geschwindigkeitsverteilung der Feldteilchen  $\mathcal{F}_f$  [39] gemäß

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Delta \mathbf{v} \rangle}{\Delta t} &= -\rho_f \frac{\mu}{m} \int d^3 v_f \mathcal{F}_f(\mathbf{v}_f) \mathbf{g} g \sigma \\ &= -\frac{4\pi e^4 \rho_f}{m\mu} \ln \left( \frac{1}{\sin \theta_{\min}/2} \right) \int d^3 v_f \mathcal{F}_f(\mathbf{v}_f) \frac{\mathbf{g}}{g^3} \\ &= \frac{4\pi e^4 \rho_f}{m^2} \ln \left( \frac{1}{\sin \theta_{\min}/2} \right) \frac{\partial h}{\partial \mathbf{v}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

In Gleichung (3.4) haben wir bereits eine Näherung eingeführt, indem wir den Logarithmus als konstant angenommen und vor das Integral gezogen haben. Strenggenommen hängt er über den minimalen Streuwinkel  $\theta_{\min}$  gemäß Gleichung (3.1) von  $v_f$  ab. Diese Abhängigkeit ist jedoch nur sehr schwach, da sie ausschließlich im Argument des Logarithmus auftritt. Im letzten Schritt von Gleichung (3.4) wurde zudem das Rosenbluth-Potential [230]

$$h(\mathbf{v}) = \frac{m}{\mu} \int d^3 v_f \frac{\mathcal{F}_f(\mathbf{v}_f)}{|\mathbf{v} - \mathbf{v}_f|} \quad (3.5)$$

eingeführt. Für thermische Feldteilchen mit der Maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung

$$\mathcal{F}_M(\mathbf{v}) = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\frac{mv^2}{2k_B T} \right) \quad (3.6)$$

lässt sich das Rosenbluth-Potential (3.5) leicht berechnen,

$$h(\mathbf{v}) = \sqrt{\frac{m_f}{2k_B T}} \frac{\phi(x)}{x}, \quad (3.7)$$

wobei  $x = \sqrt{m_f/(2k_B T)} v$  und die Gauß'sche Fehlerfunktion durch

$$\phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt e^{-t^2} \quad (3.8)$$

gegeben ist.

Als Stoßzeit  $t_s$  soll nun die Zeit definiert werden, die nötig ist, um ein Teilchen der Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  vollständig abzubremesen, d. h.  $\frac{\langle \Delta \mathbf{v} \rangle}{\Delta t} t_s = -\mathbf{v}$ . Mit den Gleichungen (3.4) und (3.7) erhält man die Stoßrate gemäß

$$\gamma_s(v) = t_s^{-1} = \frac{4\pi e^4 \rho_f}{k_B T} \frac{m_f + m}{v} G_{LS}(x) \ln \Lambda. \quad (3.9)$$

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Rate ist durch den Faktor

$$G_{LS}(x) = \frac{\phi(x) - x \phi'(x)}{2x^2} \quad (3.10)$$

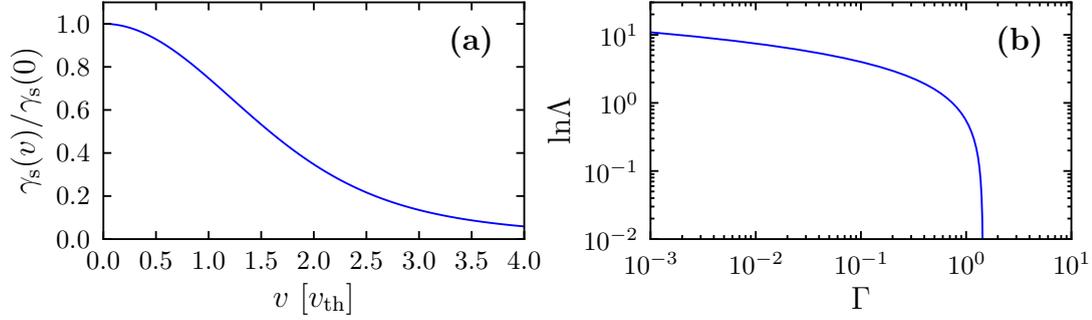


Abbildung 3.2.: (a) Landau-Spitzer-Stoßrate  $\gamma_s$  (3.9) als Funktion der Geschwindigkeit  $v$  des Testteilchens ( $v_{th} = \sqrt{3k_B T/m}$ ). (b) Coulomb-Logarithmus  $\ln \Lambda$  als Funktion der Kopplungsstärke  $\Gamma$  nach Landau-Spitzer (Gleichung (3.15)).

bestimmt und in Abbildung 3.2(a) veranschaulicht. Da der Stoßquerschnitt mit wachsender Geschwindigkeit abnimmt (vgl. Gleichung (3.3)), sinkt auch die Rate bei hohen  $v$ .

In Gleichung (3.9) wurde nun die untere Integrationsgrenze  $\theta_{min}$  des Streuwinkelintegrals festgelegt: Kleine Streuwinkel  $\theta$  entsprechen großen Stoßparametern  $b$ , d. h. die Divergenz des Integrals entsteht durch Kollisionen weit entfernter Teilchen, die wegen der Langreichweitigkeit des Coulomb-Potentials prinzipiell berücksichtigt werden müssen. Jenseits der Debye-Länge

$$\lambda_D = \frac{a}{\sqrt{3\Gamma}} \quad (3.11)$$

wird jedoch die Wechselwirkung durch benachbarte Teilchen abgeschirmt, so dass das Integral näherungsweise bei dem maximalen Stoßparameter  $b = \lambda_D$  abgeschnitten werden kann. Der entsprechende minimale Streuwinkel  $\theta_{min}$  ist damit durch Gleichung (3.1) festgelegt, und liefert den so genannten Coulomb-Logarithmus

$$\ln \Lambda = \ln \left( \frac{\lambda_D}{\lambda_L} \right). \quad (3.12)$$

Während  $\lambda_D$  die Rolle des maximalen Stoßparameters  $b_{max}$  im Argument des Coulomb-Logarithmus spielt, hat die Landaulänge

$$\lambda_L = \frac{e^2}{3k_B T} = a \frac{\Gamma}{3} \quad (3.13)$$

die Funktion des minimalen Stoßparameters  $b_{min}$ . Sie gibt den Abstand an, bei dem eine Streuung mit  $\theta = 90^\circ$  erfolgt und resultiert aus Gleichung (3.1), indem die thermische Geschwindigkeit für die stoßenden Teilchen angenommen wird,  $\mu g^2 = 3k_B T$ . In Abbildung 3.2(b) ist der Coulomb-Logarithmus nach Gleichung (3.12) als Funktion der Kopplungsstärke  $\Gamma$  dargestellt. Im schwach gekoppelten Bereich zeigt er nur eine schwache Abhängigkeit von  $\Gamma$ , während er bei  $\Gamma \approx 1$  divergiert. In

diesem Bereich bricht die Landau-Spitzer-Theorie zusammen, wie im Folgenden noch ausführlicher erläutert wird.

Analog zur Berechnung von  $\langle \Delta \mathbf{v} \rangle / \Delta t$  lassen sich auch die Elemente des Diffusionsensors  $\langle \Delta \mathbf{v} \Delta \mathbf{v} \rangle / \Delta t$  ermitteln. Mit Hilfe dieser beiden Terme bestimmte Spitzer [247] eine Reihe von Raten für verschiedene Relaxationsprozesse wie Energierelaxation zweier Teilchensorten mit unterschiedlichen Temperaturen sowie Dämpfung oder Isotropisierung von Geschwindigkeiten innerhalb eines Ensembles gleicher Teilchen. Diese Raten zeigen alle die gleiche Abhängigkeit von  $\ln \Lambda$  und verlieren daher ihre Gültigkeit für  $\Gamma \gtrsim 1$ .

Wie wir sehen konnten, beruht die Festlegung der Integrationsgrenzen auf  $\lambda_D$  und  $\lambda_L$  nicht auf einer rigorosen Herleitung, sondern wird lediglich aufgrund physikalischer Argumente getroffen. Sie ermöglicht damit analytische Ausdrücke für die Relaxationsraten im schwach gekoppelten Bereich, die aber aufgrund der Unsicherheit in der exakten Wahl von  $b_{\min}$  und  $b_{\max}$  nur als Näherung angesehen werden können. Neben der Wahl  $b_{\min} = \lambda_L$  von Landau [156] und Spitzer [247] findet man in späteren Arbeiten auch die Abschätzung der thermischen Geschwindigkeit mit  $\sim k_B T$  [66, 93, 102, 104], woraus  $b_{\min} = a \Gamma$  und ein Unterschied um einen Faktor 3 im Argument des Coulomb-Logarithmus resultiert. Zu einer Verallgemeinerung des Ausdrucks in (3.12) schreiben wir das Argument des Logarithmus in Anlehnung an [73]

$$\Lambda = C \sqrt{\frac{1}{3 \Gamma^3}} \quad (3.14)$$

und den verallgemeinerten Coulomb-Logarithmus entsprechend

$$\ln \Lambda = \ln C \sqrt{\frac{1}{3 \Gamma^3}}. \quad (3.15)$$

In der obigen Formulierung nach Spitzer (3.12) gilt  $C = 3$  [247], nach [66, 93, 102, 104]  $C = 1$ .

Eine rigorose Herleitung der Stoßrate ohne die künstliche Einführung von Integrationsgrenzen lässt sich durch Berücksichtigung kollektiver Effekte erreichen. Auf diese Weise konnte kürzlich mittels umfangreicher analytischer Rechnungen [41] unter Zuhilfenahme moderner Regularisierungstechniken der Wert  $C = 0.765$  aus älteren Arbeiten [137, 169] bestätigt werden. Dieser Wert wird ebenfalls in [66] durch numerische Lösung regularisierter Integrale, ähnlich zu dem unten in Abschnitt 3.6 vorgestellten Verfahren, gefunden. In Anbetracht der oben beschriebenen unterschiedlichen Wahl von  $b_{\min}$  als  $\lambda_L$  ( $C = 3$ ) oder  $\lambda_L/3$  ( $C = 1$ ) ordnen wir in Anlehnung an [66] den Faktor  $C$  im Folgenden der unteren Integrationsgrenze zu, d. h.  $b_{\min} = \lambda_L/C$ .

Vollständige analytische Ausdrücke für Relaxationsraten werden in [41] jedoch nur für Relaxationsprozesse zwischen Elektronen und Ionen bestimmt, indem das Massenverhältnis  $m_e/m_i$  vernachlässigt wird. In [42] werden Korrekturen aufgrund eines endlichen Massenverhältnisses berechnet, die eine deutliche Abhängigkeit des Coulomb-Logarithmus vom Massenverhältnis der relaxierenden Teilchen zeigen, jedoch noch weit vom Extremfall gleicher Massen entfernt sind. Somit ist also bereits im schwach gekoppelten Bereich für den hier betrachteten Fall der Equilibrierung

von Teilchen gleicher Masse die theoretische Beschreibung nicht eindeutig geklärt. Wie wir später in Abschnitt 3.6 sehen werden, lässt sich dieses Problem im Rahmen einer allgemeineren kinetischen Theorie behandeln.

Abgesehen von der Unsicherheit in der richtigen Wahl des Vorfaktors  $C$  liefert die Skalierung des Coulomb-Logarithmus in der Landau-Spitzer-Form (3.15) bei schwacher Kopplung eine gute Beschreibung der Ergebnisse von Experimenten an magnetisierten [7, 38, 63, 68, 180, 287] sowie unmagnetisierten [61] Plasmen und MD-Simulationen [73, 102]. Wie bereits erwähnt, verliert die Theorie jedoch bei starken Korrelationen ihre Gültigkeit und führt zu unphysikalischen Ergebnissen, wie besonders anhand von Gleichung (3.15) deutlich wird: In der ursprünglichen LS-Form mit  $C = 3$  wird für  $\Gamma \gtrsim 1.45$  das Argument im Coulomb-Logarithmus größer Eins, wodurch  $\ln \Lambda$  divergiert (siehe Abbildung 3.2(b)) und die Rate  $\gamma_s$  nach Gleichung (3.9) negativ wird.

Die Divergenz von  $\ln \Lambda$  lässt sich auf den Zusammenbruch der Debye-Hückel-Theorie [123, 124] für hohe Kopplungsstärken zurückführen. Bei wachsendem  $\Gamma$  nimmt die Debye-Länge ab, so dass Stöße mit kurzem Stoßparameter und großem Streuwinkel  $\theta$  zunehmend relevant werden. Die in der Landau-Spitzer-Theorie gemachte Annahme eines dominanten Beitrags von vielen schwachen Kollisionen mit kleinem  $\theta$  ist somit nicht mehr gerechtfertigt. Im Bereich von  $\Gamma \approx 1$  wird die Debye-Länge schließlich kleiner als der mittlere Teilchenabstand  $a$  und die Landau-Länge  $\lambda_L$ . Damit muss  $\lambda_D$  die Bedeutung der Abschirmlänge verlieren [113], da innerhalb von  $r \leq \lambda_D$  keine weiteren Teilchen vorhanden sind, die eine Abschirmung der Wechselwirkung verursachen könnten. Stattdessen ist in diesem Bereich die Abschirmlänge näherungsweise durch den Wigner-Seitz-Radius  $a$  gegeben [93, 159], wodurch sie nicht mehr von der Kopplungsstärke abhängt. Dieser Umstand wird in der Landau-Spitzer-Beschreibung nicht berücksichtigt, so dass wegen  $\lambda_L > \lambda_D$  für  $\Gamma \gtrsim 1$  der Coulomb-Logarithmus  $\ln \Lambda$  negativ wird und bei steigender Kopplungsstärke divergiert (vgl. Gleichung (3.12)).

### 3.1.2. Erweiterungen auf starke Kopplung

Zur Erweiterung der Landau-Spitzer-Theorie auf den stark gekoppelten Bereich sind verschiedene Ansätze gemacht worden [16, 72, 73, 93, 96, 117, 132, 159, 164, 235, 269]. In der Regel kommen dabei kinetische Theorien und numerische Rechnungen zum Einsatz, deren Ergebnisse sich durch einen effektiven Coulomb-Logarithmus, ähnlich zu Gleichung (3.15), beschreiben lassen [16, 72, 73, 93, 159].

Wie in Abschnitt 3.6 gezeigt wird, erhält man bei Berücksichtigung kollektiver Effekte einen modifizierten Coulomb-Logarithmus der Form [72]

$$\ln \Lambda_a = \ln \sqrt{1 + \Lambda^2}. \quad (3.16)$$

Gleichung (3.16) liefert für alle Kopplungsstärken positive Werte. Er beinhaltet jedoch noch nicht den Wechsel der Abschirmlänge von  $\lambda_D$  auf  $a$  beim Übergang von

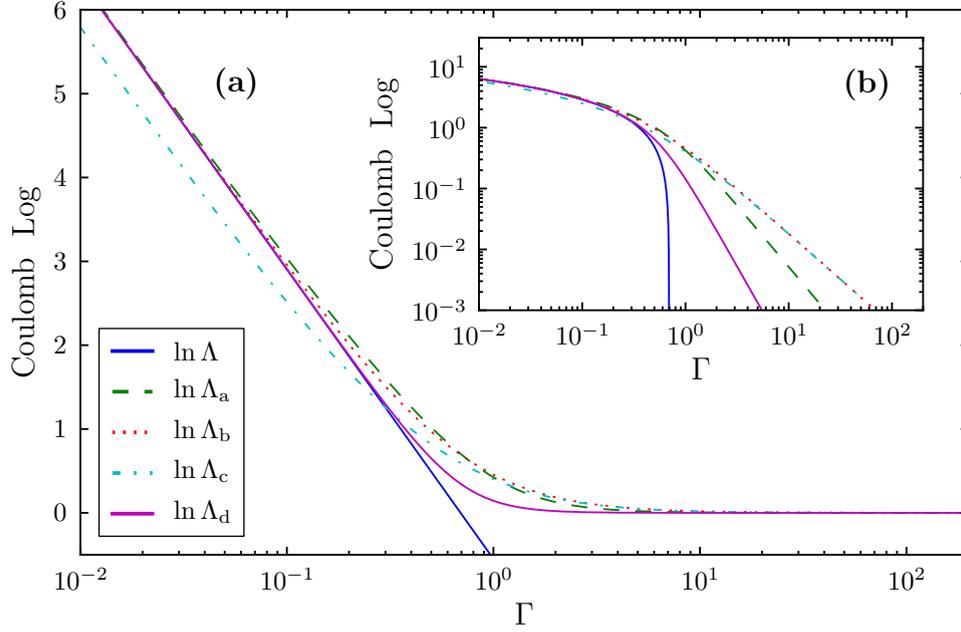


Abbildung 3.3.: (Effektiver) Coulomb-Logarithmus als Funktion der Kopplungsstärke  $\Gamma$  gemäß den Gleichungen (3.12), (3.16) und (3.18) bis (3.20).

schwacher zu starker Kopplung. Um diesem Aspekt gerecht zu werden, nehmen wir in Gleichung (3.16) eine Ersetzung gemäß

$$\Lambda = C \frac{\lambda_D}{\lambda_L} \quad \longrightarrow \quad C \frac{\sqrt{\lambda_D^2 + a^2}}{\lambda_L} = \sqrt{\Lambda^2 + \frac{C^2}{\Gamma}} \quad (3.17)$$

vor. Damit erhalten wir den effektiven Coulomb-Logarithmus

$$\ln \Lambda_b = \ln \sqrt{1 + \Lambda^2 + \frac{C^2}{\Gamma^2}}, \quad (3.18)$$

der die Abschirmlänge zwischen der Debye-Länge  $\lambda_D$  im schwach gekoppelten Bereich und dem Wigner-Seitz-Radius  $a$  bei starker Kopplung interpoliert [93].

Die Ergebnisse der MD-Simulationen aus [73], die, wie bereits oben diskutiert, im schwach gekoppelten Bereich den Wert  $C = 0.7$  in Gleichung (3.15) bestätigen, lassen sich bei sämtlichen untersuchten Kopplungsstärken, d. h. bis  $\Gamma \lesssim 10$ , durch

$$\ln \Lambda_c = \ln(1 + \Lambda) \quad (3.19)$$

sehr gut wiedergeben. Dieser Ausdruck wird ebenso durch die numerische Auswertung regularisierter Integrale in [66] im stark gekoppelten Bereich untermauert.

Eine weitere Form des effektiven Coulomb-Logarithmus

$$\ln \Lambda_d = e^{\frac{1}{\Lambda}} E_1(1/\Lambda) \quad (3.20)$$

wird in [16] aus den Streuquerschnitten für abgeschirmte Wechselwirkung hergeleitet, dessen Gültigkeit bis  $\Gamma \approx 5$  abgeschätzt wird. Hierbei ist die Integralexponentialfunktion

$$E_1 = \int_x^\infty dt \frac{e^{-t}}{t}. \quad (3.21)$$

Gleichung (3.20) weist gute Übereinstimmung mit den MD-Simulationen aus [73] auf.

Die modifizierten Ausdrücke für den Coulomb-Logarithmus sind in Abbildung 3.3 im Vergleich mit der Landau-Spitzer-Form (3.15) dargestellt. Während Letztere für  $\Gamma \gtrsim 1$  negativ wird, liefern die Gleichungen (3.16) und (3.18) bis (3.20) im stark gekoppelten Bereich positive Werte, jedoch keine übereinstimmende Vorhersage.

Die bisherigen Ansätze zur Erweiterung der Theorie auf den stark gekoppelten Bereich sind allerdings alle im Zusammenhang mit der Equilibrierung von Elektronen und Ionen entwickelt worden. Die Ergebnisse für die entsprechenden Relaxationsraten basieren somit auf dem sehr kleinen Massenverhältnis  $m_e/m_i$ . Für den hier betrachteten Fall der Relaxation von Teilchen gleicher Masse stellt sich deshalb nicht nur die Frage, welche der vorgeschlagenen Erweiterungen zutreffend ist, sondern auch, welche Rolle ein endliches Massenverhältnis spielt. Insofern wird ein direkter Vergleich der oben aufgeführten effektiven Coulomb-Logarithmen mit den im Folgenden erzielten Ergebnissen nur eingeschränkt, auf einer qualitativen Ebene, möglich sein.

Ausgangspunkt der Resultate dieser Arbeit ist das Pump-Probe-Verfahren zur Messung der ionischen Relaxation in UKP, das im nächsten Abschnitt zusammengefasst wird.

## 3.2. Optische Messung der Ionen-Relaxation

Nach der Erzeugung des ultrakalten Plasmas und dem anfänglichen raschen Korrelationszeiten befinden sich die Teilchen im Zentrum der Plasmawolke für die Dauer des Experiments in einem metastabilen Gleichgewichtszustand (siehe Kapitel 1). Somit ist die Geschwindigkeitsverteilung  $\mathcal{F}$  der Ionen stationär und kann als solche keine Informationen zur Relaxation liefern. Stattdessen könnten wir jedoch ein einzelnes Testion betrachten, das Brownsche Bewegung in diesem thermischen Plasma ausführt, und seine Relaxation ins Gleichgewicht studieren. Da die Beobachtung eines einzelnen Ions experimentell schwer realisierbar ist, verfolgen wir im Experiment eine größere Menge von speziell ausgewählten Ionen, deren Geschwindigkeiten anfangs keine Maxwell-Verteilung aufweisen [48]. Jedes einzelne Ion dieser Auswahl kann einerseits als Testteilchen aufgefasst werden, das eine Brownsche Bewegung vor dem Hintergrund thermisch verteilter Feldteilchen ausführt, und andererseits als Feldteilchen für alle anderen ausgewählten Ionen. Das Experiment realisiert damit also direkt das physikalische Bild, das der Landau-Spitzer-Theorie zugrunde liegt. Wir beobachten nun die Relaxation einer anfänglichen Nicht-Gleichgewichtsverteilung, die durch ein Plasma *im* Gleichgewicht *ins* Gleichgewicht getrieben wird. Daraus ergeben sich wohldefinierte Bedingungen für den Prozess, wie z. B. Stationarität der Relaxationsrate und die Existenz einer Temperatur.

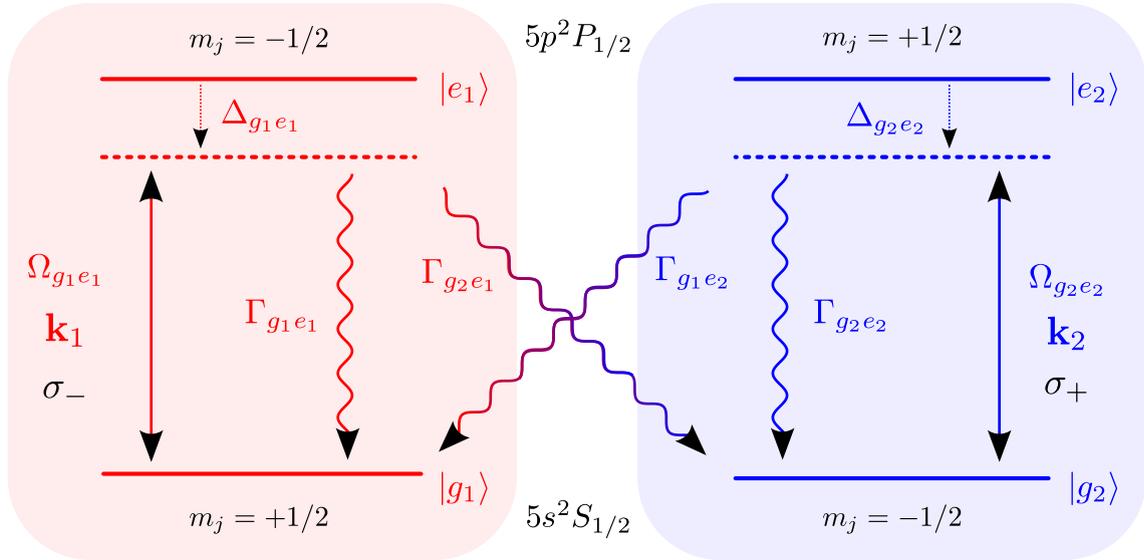


Abbildung 3.4.: Abstrahierte Darstellung des optischen Pumpprozesses im effektiven Vier-Niveau-System der Strontium-Ionen.

Die Auswahl und Markierung der zu beobachtenden Ionen erfolgt durch optische Manipulation der internen Ionenstruktur [251]. Im ersten Teil dieses Abschnitts wird die Realisierung des dazu nötigen optischen Pumpvorgangs näher beschrieben. Der zweite Teil erläutert die Messung der Geschwindigkeitsverteilung der markierten Ionen mit Hilfe von Fluoreszenzstrahlung.

### 3.2.1. Optische Manipulation der Geschwindigkeitsverteilung

Um die Plasma-Ionen geschwindigkeitsabhängig zu selektieren, zu markieren und zu verfolgen, wird ihre innere Struktur ausgenutzt. Strontium besitzt zwei Valenzelektronen, so dass nach der einfachen Ionisation zur Plasmaerzeugung noch ein weiteres Valenzelektron zur Anregung zur Verfügung steht. Da die Levelstruktur des einfach ionisierten Strontium ähnlich der des neutralen Atoms ist, können die Ionen mit dem gleichen Laser adressiert werden, der bereits zur Kühlung der Atome in der magneto-optischen Falle genutzt wurde. Die für das Experiment relevanten energetischen Zustände der Strontium-Ionen sind der Grundzustand  $5s^2 S_{1/2}$  sowie der angeregte Zustand  $5p^2 P_{1/2}$ , die beide bezüglich der Projektion des Elektronenspins zweifach entartet sind, d. h. es kann jeweils  $m_j = +1/2$  oder  $m_j = -1/2$  für die magnetische Spinquantenzahl  $m_j$  gelten (siehe Abbildung 3.4). Im Experiment werden zwei Laser mit entgegengesetzt zirkularer Polarisierung  $\sigma_-$  und  $\sigma_+$  verwendet, die eine Kopplung der Grundzustände mit  $m_j = \pm 1/2$  an die angeregten Zustände mit entgegengesetztem Spin  $m_j = \mp 1/2$  bewirken. Durch die gleichzeitige Anregung der beiden Grundzustände in die beiden angeregten Zustände entspricht die theoretische Beschreibung dieses Vier-Level-Systems im Wesentlichen der von zwei dissipativ gekoppelten Zwei-Level-Systemen. Zur Vereinfachung der Beschreibung wird das

Gesamtsystem deshalb in zwei Subsysteme  $\alpha = 1, 2$  unterteilt. Jedes System besteht jeweils aus dem Grundzustand  $|g_\alpha\rangle$  und dem angeregten Zustand  $|e_\alpha\rangle$ , die über den Laser mit Wellenvektor  $\mathbf{k}_\alpha$  gekoppelt sind. Der  $\sigma_-$ -Laser wird dem System  $\alpha = 1$ , der  $\sigma_+$ -Laser dem System  $\alpha = 2$  zugeordnet. Für die relevanten Zustände bietet sich daher die folgende Notation an:

$$\begin{aligned} 5s \ ^2S_{1/2}, m_j = +1/2 &\rightarrow |g_1\rangle, \\ 5p \ ^2P_{1/2}, m_j = -1/2 &\rightarrow |e_1\rangle, \\ 5s \ ^2S_{1/2}, m_j = -1/2 &\rightarrow |g_2\rangle, \\ 5p \ ^2P_{1/2}, m_j = +1/2 &\rightarrow |e_2\rangle. \end{aligned}$$

Der Anregungsprozess in diesem Vier-Niveau-System ist in Abbildung 3.4 schematisch skizziert. Ein Grundzustand wird im Folgenden mit  $|g_\alpha\rangle$  oder  $|g_\beta\rangle$  bezeichnet, wobei stets  $\alpha, \beta \in (1, 2), \alpha \neq \beta$  gelten soll, analog bei den angeregten Zuständen.

Zu Beginn des Experiments befindet sich jeweils die Hälfte der Ionen in einem der beiden Grundzustände  $|g_1\rangle$  und  $|g_2\rangle$ , deren Geschwindigkeiten separat maxwellverteilt sind (siehe Abbildung 3.5(b)). Für eine Pumpdauer von 100 ns regen die zwei entgegengesetzt propagierenden Laser die Ionen in die Zustände  $|e_1\rangle$  und  $|e_2\rangle$  an (siehe Abbildung 3.5(a)). Die Frequenz der beiden Laser  $\omega_{pp}$  besitzt eine leichte Verstimmung  $\Delta_{pp}/(2\pi) = (\omega_{pp} - \omega_{g_\alpha e_\alpha})/(2\pi) \approx -20$  MHz gegenüber der Resonanzfrequenz  $\omega_{g_\alpha e_\alpha}/(2\pi) = c/\lambda_{g_\alpha e_\alpha}$  des Übergangs  $|g_\alpha\rangle \leftrightarrow |e_\alpha\rangle$ . Hierbei bezeichnet  $c$  die Lichtgeschwindigkeit und  $\lambda_{g_\alpha e_\alpha} = 421.7$  nm die Wellenlänge des Übergangs. Die maximale Anregungswahrscheinlichkeit erhält man für die Ionen, deren Geschwindigkeiten durch die Doppler-Verschiebung diese Verstimmung gerade wieder aufheben. Wählt man das Koordinatensystem mit der  $z$ -Achse parallel zur Propagationsrichtung  $\mathbf{k}$  des  $\sigma_-$ -Laser, so werden demnach vorwiegend Ionen mit Geschwindigkeiten im Bereich von  $\pm v_z^{(0)} = \pm \Delta_{pp}/k$  angeregt.

Die angeregten Zustände zerfallen mit den Raten  $\Gamma_{e_\alpha}/(2\pi) = (\Gamma_{g_\alpha e_\alpha} + \Gamma_{g_\beta e_\alpha})/(2\pi) = 21$  MHz, die sich auf die beiden Grundzustände  $|g_\alpha\rangle, |g_\beta\rangle$  gemäß  $\Gamma_{g_\alpha e_\alpha} = \frac{2}{3}\Gamma_{e_\alpha}$ ,  $\Gamma_{g_\beta e_\alpha} = \frac{1}{3}\Gamma_{e_\alpha}$  aufspalten. Ein Teil der Ionen im Zustand  $|e_\alpha\rangle$  zerfällt somit nicht in den ursprünglichen Grundzustand  $|g_\alpha\rangle$ , sondern in den jeweils anderen Grundzustand  $|g_\beta\rangle$  (siehe Abbildung 3.4). Dadurch wird effektiv Population um  $-v_z^{(0)}$  von  $|g_1\rangle$  nach  $|g_2\rangle$  gepumpt und umgekehrt von  $|g_2\rangle$  nach  $|g_1\rangle$  im Bereich von  $v_z^{(0)}$  (siehe Abbildung 3.5(b)).

### 3.2.2. Fluoreszenzmessung

Die Population des Grundzustands  $|g_1\rangle$  wird über einen Probelaser mit  $\sigma_-$  Polarisierung gemessen. Zu einem vorgegebenem Zeitpunkt nach Ende des Pumpvorgangs regt dieser Laser die vorhandene Population in  $|g_1\rangle$  für einen Zeitraum von  $t \approx 50 - 100$  ns nach  $|e_1\rangle$  an. Um eine vollständig dreidimensional orts aufgelöste Messung zu realisieren, besitzt der Probelaser ein ellipsenförmiges Profil, das nur eine dünne Schicht der Plasmawolke bescheinigt. Die beim Zerfall des angeregten Zustands ausgesandte Fluoreszenzstrahlung wird senkrecht zu der angeregten Plasmaschicht mit einer CCD-Kamera aufgezeichnet (siehe Abbildung 3.5).

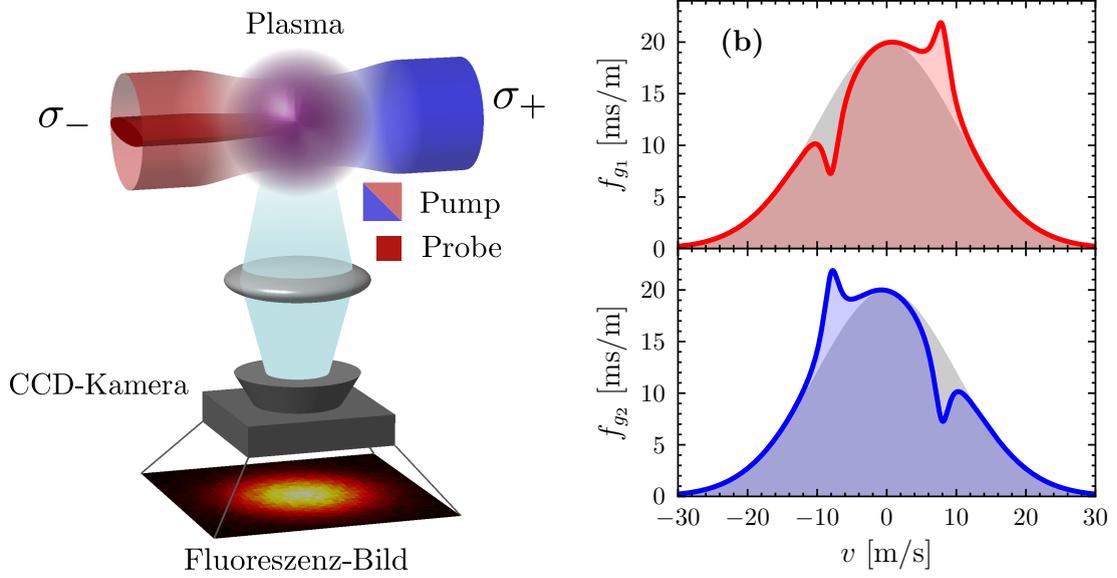


Abbildung 3.5.: (a) Aufbau des Experiments: Zwei entgegengesetzt propagierende Laserstrahlen mit zirkularer Polarisierung  $\sigma_{\pm}$  modifizieren geschwindigkeitsabhängig die interne Struktur der Strontium-Ionen. Nach dem optischen Pumpen wird die Relaxation der Geschwindigkeitsverteilung durch laserinduzierte Fluoreszenzstrahlung senkrecht zur  $z$ -Achse mit einer CCD-Kamera gemessen. (b) Schematische Darstellung der Geschwindigkeitsverteilungen der beiden Spinzustände vor (grau) und nach (farbig) dem optischen Pumpen. Die Resonanzgeschwindigkeit beträgt hier  $v_z^{(0)} = 8$  m/s.

Das gemessene Signal hängt neben der Anzahl der Ionen im Zustand  $|g_1\rangle$  auch von den Eigenschaften des Probelasers ab. Es entspricht der Faltung

$$S(\Delta_{\text{pr}}) \propto \int f_{g_1}(v_z) L(\Delta_{\text{pr}} - kv_z) dv_z \quad (3.22)$$

der Population  $f_{g_1}$  im Grundzustand  $|g_1\rangle$  mit dem Linienprofil des Probelasers

$$L(\Delta) \propto \frac{1}{1 + s_{0,\text{pr}} + (2\Delta/\Gamma_{\text{tot}})^2}. \quad (3.23)$$

Hierbei ist die Verstimmung des Probelasers mit Frequenz  $\omega_{\text{pr}}$  über  $\Delta_{\text{pr}} = \omega_{\text{pr}} - \omega_{g_{\alpha}e_{\alpha}}$  definiert. Aus der Intensität  $I_{\text{pr}} = 73$  mW/cm<sup>2</sup> des Probelasers und der Sättigungsintensität des Übergangs  $I_s = 57$  mW/cm<sup>2</sup> erhalten wir den Sättigungsparameter  $s_{0,\text{pr}} = I_{\text{pr}}/I_s$ . Die totale Linienbreite  $\Gamma_{\text{tot}} = \Gamma_{e_{\alpha}} + \Gamma_{\text{inst}}$  setzt sich aus der Zerfallsrate des angeregten Zustands  $\Gamma_{e_{\alpha}}$  und der instrumentellen Linienbreite  $\Gamma_{\text{inst}}/(2\pi) = 7$  MHz zusammen. Durch Variation von  $\Delta_{\text{pr}}$  ergibt sich ein Spektrum, das Informationen über die Geschwindigkeitsverteilung  $f_{g_1}$  der Ionen im Zustand  $|g_1\rangle$  liefert.

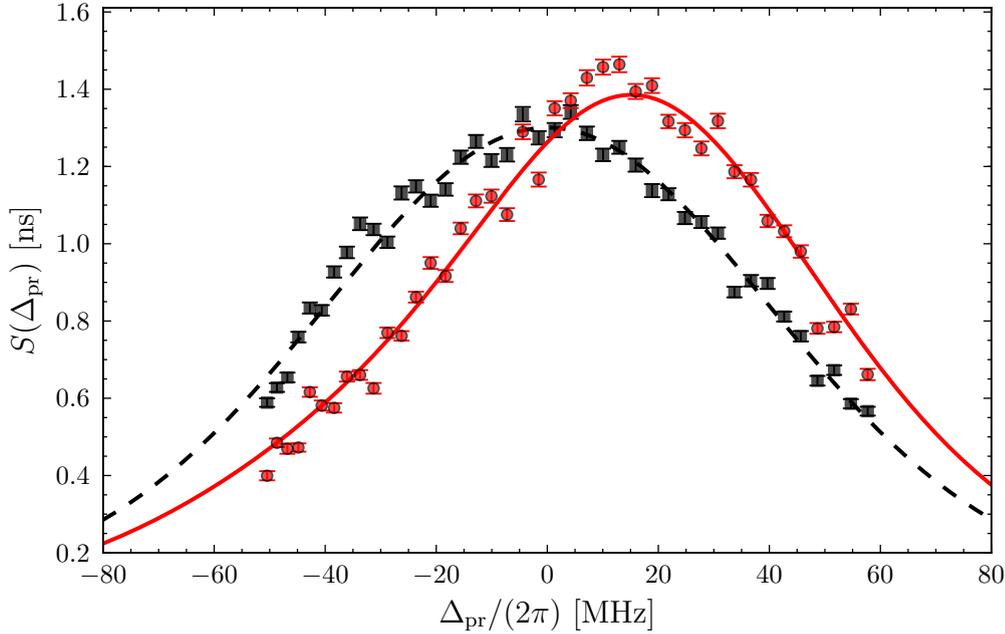


Abbildung 3.6.: Fluoreszenzsignal  $S$  als Funktion der Verstimmung  $\Delta_{\text{pr}}$  des Probelasers vor dem optischen Pumpen ( $\square$ ) und 145 ns nach dem optischen Pumpen ( $\circ$ ). Die eingezeichneten Fits (Linien) werden in Abschnitt 3.3.2 ausführlich diskutiert und dienen hier lediglich zur übersichtlicheren Darstellung. Die Plasmaparameter betragen  $\rho = 9.64 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 2.2 \text{ K}$  und  $\Gamma = 1.2$ .

Die im Folgenden analysierten Messungen wurden stets im Zentrum der Plasma-wolke durchgeführt, für das die Dichte als konstant angenommen werden kann, da die Expansionsgeschwindigkeit in dieser Region auf der Zeitskala des Experiments vernachlässigbar klein ist [142]. Abbildung 3.6 zeigt exemplarisch zwei Spektren, wobei nur in einem Fall das optische Pumpen vor der Messung durchgeführt wurde. Ein Fit der gemäß Gleichung (3.22) gefalteten eindimensionalen Maxwellverteilung

$$f_{\text{M}}^{(1D)}(v_z) = \sqrt{\frac{m_i}{2\pi k_{\text{B}}T}} \exp\left(-\frac{m_i v_z^2}{2k_{\text{B}}T}\right) \quad (3.24)$$

an das Spektrum ohne vorherige optische Modifikation liefert die Temperatur  $T$  der Plasma-Ionen der Masse  $m_i$ . Nach dem optischen Pumpen zeigen sich deutliche Abweichungen von der Gleichgewichtsverteilung, die besonders im Bereich der Pumpverstimmung  $\Delta_{\text{pr}} \approx \pm \Delta_{\text{pp}}$  ausgeprägt sind. Bei negativer Verstimmung  $\Delta_{\text{pr}}$  (d. h. negativer Geschwindigkeiten der  $|g_1\rangle$ -Ionen), findet man eine deutliche Reduktion des Fluoreszenzsignals, während für positive Verstimmung  $\Delta_{\text{pr}}$  (d. h. positive Geschwindigkeiten der  $|g_1\rangle$ -Ionen) die Signalstärke zunimmt.

Durch Messungen zu verschiedenen Zeiten nach dem optischen Pumpen erlaubt das Experiment somit ohne Störung des Gleichgewichts die Relaxation der Ionen im

Zustand  $|g_1\rangle$  zu beobachten. Die Extraktion der zugrundeliegenden Geschwindigkeitsverteilung aus den aufgezeichneten Spektren ist jedoch nicht ohne weiteres möglich, da experimentell nur eine begrenzte Frequenzbandbreite  $|\Delta_{\text{pr}}/(2\pi)| \lesssim 50$  MHz des Probelasers zur Verfügung steht (siehe Abbildung 3.6). Die Ursache dieser Limitierung liegt in der Verwendung des gleichen Lasers für Pump- und Probepuls mit fester Frequenz entsprechend  $\Delta_{\text{pp}}$ . Die Variation der Probeverstimmung  $\Delta_{\text{pr}}$  erfolgt durch optoakustische Modulatoren, die eine maximale Variation um ca. 50 MHz ermöglichen. In Anhang B wird gezeigt, dass die fehlende Information aus den Flügeln des Spektrums für eine akkurate Bestimmung der Geschwindigkeitsverteilung nicht vernachlässigt werden darf. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde deshalb ein geeignetes Analyseverfahren entwickelt, das allein anhand der zentralen Teile der Spektren präzise Ergebnisse liefert. Es basiert auf der theoretischen Beschreibung der laserinduzierten Anregungsdynamik, die im folgenden Abschnitt ausführlich erläutert wird.

### 3.3. Semiklassische Modellierung des Experiments

Während sich die Plasmadynamik mit Hilfe von klassischen MD-Rechnungen modellieren lässt (vgl. Kapitel 2), verlangt die theoretische Beschreibung des Pump- und Probevorgangs, der auf die innere Struktur der Strontium-Ionen wirkt, eine quantenmechanische Behandlung. Ausgehend von der allgemeinen Formulierung der Anregungsdynamik in atomaren Systemen wird das im Experiment relevante Energieniveau-Schema (Abbildung 3.4) in Abschnitt 3.3.1 diskutiert. Außerdem wird die Kopplung der internen Anregungsdynamik an die externe Plasmadynamik erläutert und ein Vergleich zwischen experimentellen und simulierten Fluoreszenzspektren gezogen. Im darauf folgenden Abschnitt 3.3.2 werden mit Hilfe weiterer Vereinfachungen der semiklassischen Theorie die ionischen Geschwindigkeitsverteilungen aus den experimentellen Fluoreszenzspektren rekonstruiert. Die extrahierten Geschwindigkeitsverteilungen erlauben es, die Relaxation anhand einer makroskopischen Größe - der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  der Ionen im Zustand  $|g_1\rangle$  - zu untersuchen, die ebenfalls mit den jeweiligen Simulationsergebnissen verglichen wird.

#### 3.3.1. Quantendynamik der Ionenanregung und klassische Plasmadynamik

##### Allgemeine Formulierung der Anregungsdynamik

Die Anregungsdynamik eines Ions in einem elektromagnetischen Feld lässt sich allgemein mit einer Mastergleichung [40]

$$i\hbar \dot{\hat{\rho}} = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}] + \hbar \hat{\mathcal{L}}[\hat{\rho}] \quad (3.25)$$

beschreiben. Der Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_W \quad (3.26)$$

besteht aus einem rein ionischen Anteil  $\hat{\mathcal{H}}_0$  und dem Term  $\hat{\mathcal{H}}_W$ , der die Wechselwirkung des Ions mit dem Lichtfeld beschreibt. Die Elemente der reduzierten Dichtematrix  $\hat{\rho}$  sind durch

$$\rho_{ij} = \langle i | \hat{\rho} | j \rangle \quad (3.27)$$

gegeben. Hierbei ist  $|i\rangle$  der Eigenzustand des ungestörten Ions mit Energie  $E_i$ ,

$$\hat{\mathcal{H}}_0 |i\rangle = E_i |i\rangle. \quad (3.28)$$

Die Wechselwirkung

$$\hat{\mathcal{H}}_W = -\hat{\mathbf{d}} \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) \quad (3.29)$$

kommt durch die Kopplung des elektromagnetischen Feldes  $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$  an das Dipolmoment  $\hat{\mathbf{d}} = -e\hat{\mathbf{r}}$  des Ions zustande, wobei  $\hat{\mathbf{r}}$  die Position des Valenzelektrons bezeichnet. Für ein klassisches Lichtfeld mit Amplitude  $\mathbf{E}$  und Frequenz  $\omega_{\text{Laser}}$  gilt bei Vernachlässigung der räumlichen Variation von  $\mathcal{E}$  (elektrische Dipolnäherung [183])

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) \approx \mathcal{E}(t) = \mathbf{E} \cos(\omega_{\text{Laser}} t). \quad (3.30)$$

Das Kopplungselement zwischen den Zuständen  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  für  $|i\rangle \neq |j\rangle$  ergibt sich zu

$$\langle i | \hat{\mathcal{H}}_W | j \rangle = -\frac{\hbar \Omega_{ij}}{2} \left( e^{i\omega_{\text{Laser}} t} + e^{-i\omega_{\text{Laser}} t} \right). \quad (3.31)$$

Die Rabi-Frequenz

$$\Omega_{ij} = \frac{\mathbf{d}_{ij} \cdot \mathbf{E}}{\hbar} \quad (3.32)$$

charakterisiert dabei die Kopplungsstärke des Übergangs, dessen Dipolmatrixelement

$$\mathbf{d}_{ij} = \langle i | \hat{\mathbf{d}} | j \rangle \quad (3.33)$$

beträgt.

Der Zerfall angeregter Energiezustände führt zu einer Dämpfung des Systems, die in der Mastergleichung (3.25) durch den Lindbladoperator

$$\hat{\mathcal{L}}[\hat{\rho}] = \sum_{i \neq j} \left( \hat{\mathbf{L}}_{ij} \hat{\rho} \hat{\mathbf{L}}_{ij}^\dagger - \frac{1}{2} \left[ \hat{\mathbf{L}}_{ij}^\dagger \hat{\mathbf{L}}_{ij} \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{\mathbf{L}}_{ij}^\dagger \hat{\mathbf{L}}_{ij} \right] \right) \quad (3.34)$$

mit

$$\hat{\mathbf{L}}_{ij} = \sqrt{\Gamma_{ij}} |i\rangle \langle j| \quad (3.35)$$

repräsentiert wird. Hierbei erhalten wir die Zerfallsrate

$$\Gamma_{ij} = \frac{8\pi^2 d_{ij}^2}{3\epsilon_0 \hbar \lambda_{ij}^3} \quad (3.36)$$

vom Zustand  $|j\rangle$  in den Zustand  $|i\rangle$  über die Wellenlänge  $\lambda_{ij}$  des entsprechenden Übergangs.

Im Folgenden werden die Ergebnisse einer konkreten Anwendung der obigen Gleichungen auf das Vier-Niveau-System dargestellt. Eine detailliertere Erläuterung der verschiedenen Rechnungen und Näherungen findet sich in Anhang D. Da das für das Experiment relevante effektive Vier-Niveau-System (Abbildung 3.4) im Wesentlichen aus zwei getrennten Zwei-Niveau-Systemen besteht, die nur über den Zerfall  $\hat{\mathcal{L}}$  gemäß Gleichung (3.34) der angeregten Zustände gekoppelt sind, soll zunächst die Anregungsdynamik für ein Zwei-Niveau-System genauer betrachtet werden.

### Anregungsdynamik im Zwei-Niveau-System

Die beiden möglichen Energiezustände des Valenzelektrons im Zwei-Niveau-System sind der Grundzustand  $|g\rangle$  und der angeregte Zustand  $|e\rangle$ . Unter Vernachlässigung rasch oszillierender Terme (rotating wave approximation [183]) sowie mit der Definition der Laserverstimmung  $\Delta_{ge} = \omega_{\text{Laser}} - \omega_{ge}$ , wobei  $\omega_{ge} = (E_e - E_g)/\hbar$  die Resonanzfrequenz des Systems ist, erhält man den zeitunabhängigen Hamiltonoperator des Zwei-Niveau-Systems

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega_{ge}}{2} \\ \frac{\Omega_{eg}}{2} & -\Delta_{ge} \end{pmatrix}. \quad (3.37)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (3.37) zusammen mit dem Lindbladoperator

$$\hat{\mathcal{L}} = \Gamma_{ge} \begin{pmatrix} \rho_{ee} & -\frac{\rho_{ge}}{2} \\ -\frac{\rho_{ge}}{2} & -\rho_{gg} \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

in die Mastergleichung (3.25) erhalten wir die so genannten optischen Bloch-Gleichungen des Zwei-Niveau-Systems

$$\dot{\rho}_{gg} = i\frac{\Omega_{ge}}{2}(\rho_{ge} - \rho_{eg}) + \Gamma_{ge}\rho_{ee}, \quad (3.39a)$$

$$\dot{\rho}_{ee} = -i\frac{\Omega_{ge}}{2}(\rho_{ge} - \rho_{eg}) - \Gamma_{ge}\rho_{ee}, \quad (3.39b)$$

$$\dot{\rho}_{ge} = i\frac{\Omega_{ge}}{2}(\rho_{ee} - \rho_{gg}) - i\Delta_{ge}\rho_{ge} - \frac{\Gamma_{ge}}{2}\rho_{ge}. \quad (3.39c)$$

Die Gleichungen (3.39a) und (3.39b) bestimmen jeweils die Evolution der Population im Grundzustand und im angeregten Zustand. Gleichung (3.39c) beschreibt die zeitliche Entwicklung der Kohärenz (mit  $\rho_{ge} = (\rho_{eg})^*$ ), deren Imaginär- und Realteil die Absorption und Dispersion des Dipolübergangs angibt.

### Anregungsdynamik im Vier-Niveau-System

Das für das Experiment relevante Vier-Niveau-System besteht aus den beiden Zwei-Niveau-Systemen  $\alpha = 1, 2$ , so dass die möglichen ionischen Eigenzustände nun durch

$$|i\rangle \in (|g_1\rangle, |g_2\rangle, |e_1\rangle, |e_2\rangle) \quad (3.40)$$

gegeben sind (vgl. Abbildung 3.4). Da die gegenseitige Kopplung der beiden Zwei-Niveau-Systeme nur über den Dämpfungsterm (3.34) erfolgt, ist die Ion-Feld-Wechselwirkung der beiden Systeme völlig unabhängig, so dass sich der Vier-Niveau-Hamiltonoperator aus zwei Blöcken zusammensetzt,

$$\hat{\mathcal{H}}^{(4)} = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{H}}_1^{(2)} & 0 \\ 0 & \hat{\mathcal{H}}_2^{(2)} \end{pmatrix}. \quad (3.41)$$

Hierbei entspricht  $\hat{\mathcal{H}}_\alpha^{(2)}$  dem Zwei-Niveau-Hamiltonoperator aus Gleichung (3.37), der die Dynamik im System  $\alpha$  bestimmt. Unter Berücksichtigung der zusätzlichen Zerfallskanäle im Lindblad-Operator  $\hat{\mathcal{L}}$  (3.34) (siehe Abbildung 3.4) erhält man mit dem Hamiltonoperator (3.41), eingesetzt in Gleichung (3.25), die optischen Bloch-Gleichungen des Vier-Niveau-Systems

$$\dot{\rho}_{g_\alpha g_\alpha} = i \frac{\Omega_{g_\alpha e_\alpha}}{2} (\rho_{g_\alpha e_\alpha} - \rho_{e_\alpha g_\alpha}) + \Gamma_{g_\alpha e_\alpha} \rho_{e_\alpha e_\alpha} + \Gamma_{g_\alpha e_\beta} \rho_{e_\beta e_\beta}, \quad (3.42a)$$

$$\dot{\rho}_{e_\alpha e_\alpha} = -i \frac{\Omega_{g_\alpha e_\alpha}}{2} (\rho_{g_\alpha e_\alpha} - \rho_{e_\alpha g_\alpha}) - \Gamma_{g_\alpha e_\alpha} \rho_{e_\alpha e_\alpha} - \Gamma_{g_\beta e_\alpha} \rho_{e_\alpha e_\alpha}, \quad (3.42b)$$

$$\dot{\rho}_{g_\alpha e_\alpha} = i \frac{\Omega_{g_\alpha e_\alpha}}{2} (\rho_{e_\alpha e_\alpha} - \rho_{g_\alpha g_\alpha}) - i \Delta_{g_\alpha e_\alpha} \rho_{g_\alpha e_\alpha} - \frac{\Gamma}{2} \rho_{g_\alpha e_\alpha}, \quad (3.42c)$$

$$\dot{\rho}_{g_\alpha g_\beta} = i \frac{\Omega_{g_\alpha e_\alpha}}{2} \rho_{e_\alpha g_\beta} - i \frac{\Omega_{g_\beta e_\beta}}{2} \rho_{g_\alpha e_\beta}, \quad (3.42d)$$

$$\dot{\rho}_{e_\alpha e_\beta} = i \frac{\Omega_{g_\alpha e_\alpha}}{2} \rho_{g_\alpha e_\beta} + i \frac{\Omega_{g_\beta e_\beta}}{2} \rho_{g_\beta e_\alpha} + i (\Delta_{g_\alpha e_\alpha} - \Delta_{g_\beta e_\beta}) \rho_{e_\alpha e_\beta} - \Gamma \rho_{e_\alpha e_\beta}, \quad (3.42e)$$

$$\dot{\rho}_{g_\alpha e_\beta} = i \frac{\Omega_{g_\alpha e_\alpha}}{2} \rho_{e_\alpha e_\beta} - i \frac{\Omega_{g_\beta e_\beta}}{2} \rho_{g_\alpha g_\beta} - i \Delta_{g_\beta e_\beta} \rho_{g_\alpha e_\beta} - \frac{\Gamma}{2} \rho_{g_\alpha e_\beta} \quad (3.42f)$$

mit  $\alpha, \beta \in (1, 2)$  und  $\alpha \neq \beta$ . Die Gleichungen (3.42a) - (3.42c) entsprechen im Wesentlichen den Gleichungen des Zwei-Niveau-Systems (3.39) bis auf die zusätzlichen Zerfallskanäle  $\Gamma_{g_\beta e_\alpha}, \Gamma_{g_\alpha e_\beta}$  durch das zweite System. Die zusätzlichen Kohärenzen in den Gleichungen (3.42d) - (3.42f) entstehen durch die dissipative Kopplung zwischen den beiden Zwei-Niveau-Systemen 1 und 2.

Der Einfluss einer endlichen Ionengeschwindigkeit auf den Pumpprozess und die Anregungsdynamik gemäß den optischen Bloch-Gleichungen (3.42) kommt durch den Doppler-Effekt zustande. Dieser führt dazu, dass ein Ion mit Geschwindigkeit  $\mathbf{v}$  die Frequenz  $\omega_{\text{Laser}} - \mathbf{k}_\alpha \mathbf{v}$  wahrnimmt. Für ein Koordinatensystem mit  $z$ -Achse in Richtung des  $\sigma_-$ -Lasers, der auf das System  $\alpha = 1$  wirkt, gilt mit den Wellenzahlen der beiden Laser  $k_1 = -k_2 = k > 0$  demnach

$$\Delta_{g_\alpha e_\alpha} = \Delta_{\text{pp}} - k_\alpha v_z. \quad (3.43)$$

Für lange Pumpzeiten lässt sich die Beschreibung in Form der optischen Bloch-Gleichungen (3.42) weiter vereinfachen und auf eine klassische Ratengleichung bringen [13]. Dazu nutzen wir aus, dass die Kohärenzen auf der Zeitskala  $\sim \Gamma_{g_\alpha e_\alpha}^{-1}$  (bzw.  $\Gamma_{g_\alpha e_\beta}^{-1}$ ) rasch ausdämpfen. Sie können somit näherungsweise adiabatisch eliminiert werden, indem wir von Beginn an einen stationären Zustand annehmen, d. h.  $\dot{\rho}_{\alpha\beta} = 0$  für  $\alpha \neq \beta$ . Damit reduziert sich das Gleichungssystem (3.42) auf ein System von vier Ratengleichungen,

$$\dot{f}_{g_\alpha}(v_z) = +R_{g_\alpha e_\alpha}(v_z)[f_{e_\alpha}(v_z) - f_{g_\alpha}(v_z)] + \Gamma_{g_\alpha e_\alpha} f_{e_\alpha}(v_z) + \Gamma_{g_\alpha e_\beta} f_{e_\beta}(v_z), \quad (3.44a)$$

$$\dot{f}_{e_\alpha}(v_z) = -R_{g_\alpha e_\alpha}(v_z)[f_{e_\alpha}(v_z) - f_{g_\alpha}(v_z)] - (\Gamma_{g_\alpha e_\alpha} + \Gamma_{g_\beta e_\alpha}) f_{e_\alpha}(v_z), \quad (3.44b)$$

mit der Pumprate

$$R_{g_\alpha e_\alpha}(v_z) = \frac{\Omega_{g_\alpha e_\alpha}^2 / \Gamma_{e_\alpha}}{1 + [2(\Delta_{\text{pp}} - k_\alpha v_z) / \Gamma_{e_\alpha}]^2}. \quad (3.45)$$

In Gleichung (3.44) wurde die Bezeichnung der Populationen  $\rho_{ii}$  im Zusammenhang mit der Einführung der Geschwindigkeitsabhängigkeit durch die Geschwindigkeitsverteilung der  $v_z$ -Komponente  $f_i$  der Ionen im Zustand  $|i\rangle$  ersetzt. Auch wenn die Raten-gleichungen (3.44) aufgrund der vorgenommenen Näherungen die Kurzzeitdynamik nicht korrekt wiedergeben, liefern sie doch für längere Zeiten den gleichen stationären Zustand wie die Bloch-Gleichungen (3.42). Zudem werden die Auswirkungen des optischen Pumpens auf die Geschwindigkeitsverteilungen in der Ratenbeschreibung besonders deutlich. Der Populationstransfer zwischen den beiden Grundzuständen erfolgt mit der Rate (3.45), die eine lorentzförmige Depopulation von  $f_{g_1}$  zentriert um  $v_0 = \Delta_{pp}/k$  und von  $f_{g_2}$  zentriert um  $v_0 = -\Delta_{pp}/k$  zur Folge hat. Da die Gesamtverteilung  $f(v_z) = f_M^{(1D)}(v_z) = f_{g_1}(v_z) + f_{g_2}(v_z)$  konstant bleibt, werden  $f_{g_1}$  bzw.  $f_{g_2}$  jeweils im Bereich von  $v_0 = -\Delta_{pp}/k$  bzw.  $v_0 = \Delta_{pp}/k$  eine entsprechende lorentzförmige Populationszunahme erfahren (siehe Abbildung 3.5(b)).

### Kopplung der internen Anregungsdynamik an die Ionenbewegung

Die Plasmadynamik wird mit Hilfe einer klassischen MD-Simulation beschrieben, analog zu Kapitel 2. Durch die große Temperaturdifferenz zwischen Elektronen und Ionen ( $T_e \gg T_i$ )<sup>2</sup> ist die Abschirmung der Ion-Ion-Wechselwirkung durch Elektronen gegenüber der Abschirmung durch Ionen vernachlässigbar und die Ionen können als OCP betrachtet werden. Die heißen Elektronen bilden dabei den homogen geladenen Hintergrund. Die Propagation des Systems aus  $N$  Ionen erfolgt mit dem Geschwindigkeits-Verlet-Algorithmus (2.35) [255], wobei die Ion-Ion-Wechselwirkungen vollständig mit der FMM [64, 65] berechnet werden. Um die interne Anregungsdynamik der Ionen an die externe Plasmadynamik zu koppeln, wird jedem Ion  $l$ ,  $1 \leq l \leq N$ , als zusätzliche Variable die reduzierte Dichtematrix des Vier-Niveau-Systems  $\hat{\rho}^{(l)}$  zugeordnet. Zu Beginn der Simulation befinden sich jeweils die Hälfte der Ionen in den Zuständen  $|g_1\rangle$  und  $|g_2\rangle$ , d. h. für jedes Ion gilt  $\rho_{g_1g_1}^{(l)} = \rho_{g_2g_2}^{(l)} = 1/2$ . Während der Pumpzeit von 100 ns werden die Bloch-Gleichungen (3.42) entlang der durch die MD bestimmten klassischen Trajektorien jedes einzelnen Ions gelöst [70]. Dabei bestimmt die aktuelle Geschwindigkeit  $\mathbf{v}^{(l)}$  des Ions  $l$  die Entwicklung seiner Dichtematrix  $\hat{\rho}^{(l)}$  über Gleichung (3.43). Nach Abschalten der Pumpelaser und dem raschen Zerfall der angeregten Zustände  $|e_\alpha\rangle$  wird die interne Struktur der Ionen während der Relaxation nicht mehr beeinflusst, d. h.  $\hat{\rho}^{(l)}$  bleibt konstant. Zur Berechnung physikalischer Größen der Ionen im Zustand  $|g_1\rangle$  wird über ein Ensemble von Simulationsläufen mit verschiedenen zufälligen Anfangsbedingungen gemittelt. Dabei wird jedes Ion mit der Wahrscheinlichkeit  $\rho_{g_1g_1}^{(l)}$  für eine Population des Zustands  $|g_1\rangle$  gewichtet.

Die Komplexität der Anregungsdynamik ist unabhängig von der Parameterwahl stets relativ gering. Der Rechenaufwand der Plasmadynamik steigt hingegen für kleine  $\Gamma$  stark an, da sowohl die Anzahl der Teilchen gemäß  $N \sim \lambda_D^3 \sim \Gamma^{-\frac{3}{2}}$  zunimmt (vgl. Gleichung (2.25)) als auch der Zeitschritt  $\Delta t \sim \lambda_L \sim \Gamma^2$  sehr klein gewählt werden

<sup>2</sup>In den Experimenten ist die anfängliche Elektronentemperatur durch die Überschussenergie der Laserionisation auf  $T_e \approx 105$  K festgelegt und steigt innerhalb weniger ns durch Korrelationsheizen und Rekombination weiter an. Die Ionentemperatur variiert im deutlich tieferen Bereich von  $T_i \approx 1 - 3$  K.

muss, um starke Stöße ausreichend aufzulösen. Aufgrund dieses überproportionalen Wachstums des Rechenaufwands stellt die Untersuchung des schwach gekoppelten Bereichs die größte Herausforderung dar. Durch umfangreiche Rechnungen konnte die Kopplungsstärke trotzdem bis auf  $\Gamma = 0.005$  reduziert werden. Dazu war die Simulation von  $N = 2048$  Ionen bei einem Zeitschritt von  $\Delta t = 5 \times 10^{-5} \omega_p^{-1}$  nötig. Für eine ausreichende Statistik betrug die gesamte Simulationszeit ca.  $5 \times 10^5 \omega_p^{-1}$ , so dass letztendlich  $10^{10}$  Zeitschritte durchgeführt wurden.

Da lediglich die Anregungsdynamik von der Plasmadynamik abhängt, aber nicht umgekehrt, lassen sich durch sequentielle Berechnung der externen und internen Prozesse effizient eine Vielzahl von verschiedenen Pumpszenarien auswerten. Dazu wird zunächst mittels MD-Simulationen die Plasmadynamik generiert und gespeichert, ohne die Anregungsdynamik zu berücksichtigen. Die interne Dynamik kann nachträglich für beliebige Pumpparameter auf Grundlage der einmal berechneten Phasenraumevolution abgeleitet werden.

### Vergleich der gemessenen und simulierten Spektren

Im Gegensatz zu den Simulationen liefert das Experiment nicht unmittelbar die Geschwindigkeitsverteilung der Ionen, sondern ein Spektrum  $S$  in Abhängigkeit der Probelaserverstimmung  $\Delta_{\text{pr}}$ . Für einen direkten Vergleich zwischen Simulation und Experiment werden deshalb aus den Simulationsdaten zur Geschwindigkeitsverteilung  $f_{g_1}(v_z)$  die jeweiligen Fluoreszenzspektren  $S(\Delta_{\text{pr}})$  berechnet. Dies geschieht durch eine Faltung von  $f_{g_1}$  mit dem Profil des Probelasers (Gleichungen (3.22) und (3.23)).

Abbildung 3.7 zeigt exemplarisch die Evolution der experimentell und numerisch bestimmten Spektren für verschiedene Plasmadichten  $\rho$  und Ionentemperaturen  $T$ . Für die optisch modifizierten Spektren bezeichnen die angegebenen Zeiten die Zeitspanne zwischen dem Ende des Pumpens und der Fluoreszenzmessung. Die Spektren ohne vorheriges Pumpen wurden jeweils zu entsprechenden Zeiten nach Plasmaherstellung aufgezeichnet. Aus der Breite dieser Gleichgewichts-Spektren lässt sich die Temperatur des Plasmas durch Anfitzen der gefalteten Maxwellverteilung (3.24) bestimmen. Somit findet man von (a) nach (c) gemäß der flacher und breiter werdenden Spektren eine Temperaturzunahme. Die geringe Evolution der Gleichgewichts-Spektren verdeutlicht außerdem, dass in der experimentell relevanten Zeitspanne die Temperatur als konstant angenommen werden kann.

Die Plasmadichte  $\rho$  nimmt ebenso wie die Temperatur von (a) nach (c) zu. Da die Zeitskala der Ionendynamik gemäß  $\sim \omega_p^{-1} \sim \sqrt{\rho}$  skaliert, sollte man in der Messreihe (a) die langsamste Relaxation der drei gezeigten Fälle beobachten. Allerdings ist im experimentellen Spektrum die durch das Pumpen verursachte Störung von Anfang an nicht so ausgeprägt wie in den Messreihen (b) und (c), so dass die typische Relaxationszeit nicht derart offensichtlich wird wie in den anderen beiden Fällen. Die Spektren der beiden Parametersätze (b) und (c), für die jeweils  $\Gamma = 1.2$  gilt, zeigen hingegen von Beginn an eine merkliche Abweichung von der Gleichgewichtsverteilung. Im Vergleich lässt sich gut beobachten, dass im Fall höherer Dichte (c) die Relaxation erwartungsgemäß schneller abläuft.

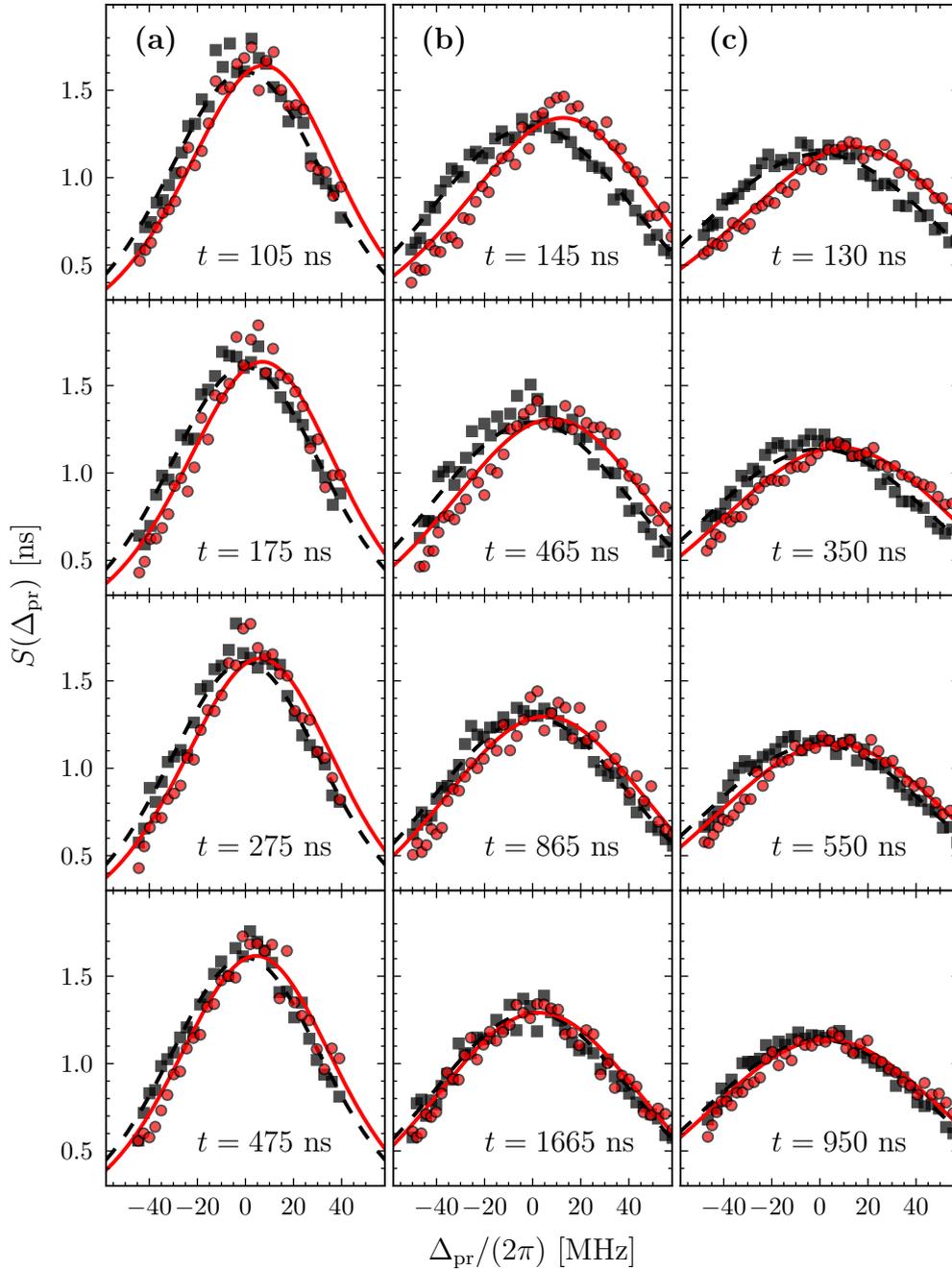


Abbildung 3.7.: Vergleich zwischen experimentellen (Symbole) und simulierten (Linien) Fluoreszenzspektren. Die durchgezogenen Linien bzw. roten Kreise zeigen die Geschwindigkeitsverteilung zu verschiedenen Zeiten nach dem optischen Pumpen. Die gestrichelte Linie bzw. schwarzen Quadrate stellen die ionischen Geschwindigkeitsverteilungen ohne optische Modifikation zum jeweils gleichen Zeitpunkt nach Plasmaherstellung dar. Die Plasmamparameter betragen in (a)  $\rho = 8.59 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 1.0 \text{ K}$  und  $\Gamma = 2.5$ , in (b)  $\rho = 9.64 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 2.2 \text{ K}$  und  $\Gamma = 1.2$ , und in (c)  $\rho = 3.13 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 3.3 \text{ K}$  und  $\Gamma = 1.2$ .

Abbildung 3.7 verdeutlicht außerdem, dass die Simulation nicht für alle Parametersätze eine quantitative Übereinstimmung mit dem Experiment wie im Fall (c) erreicht; qualitativ zeigt sie aber insgesamt dasselbe Verhalten wie die gemessenen Spektren. Abweichungen ergeben sich z. B. in der gesamten Messreihe (a) oder im Bereich negativer Verstimmung  $\Delta_{\text{pr}}$  in (b). Hieran erkennt man, dass eine genaue Kenntnis der experimentellen Parameter zur numerischen Modellierung der Messungen essentiell ist. Im Experiment lassen sich jedoch viele Größen nur abschätzen. So ist beispielsweise der zeitliche Verlauf sowohl des Pump- als auch des Probepulses nicht exakt bekannt und kann von Messung zu Messung geringfügig variieren. Dadurch lassen sich die Pulsdauer und die mittlere Amplitude für den in den Simulationen angenommenen Rechteckpuls nur schätzungsweise angeben. Zudem hat sich wegen der geringen Intensität  $I_{\text{pr}}$  des Probelasers für einen signifikanten Anteil der Pulsdauer von  $\sim 50 - 100$  ns noch kein stationärer Zustand in der Niveaudynamik eingestellt. Da jedoch Gleichung (3.23) zur Beschreibung des Probepulsprofils gerade einen solchen stationären Zustand voraussetzt, kann sie nur näherungsweise angewendet werden. Um diesem Umstand Rechnung zu tragen, wurde bereits der Sättigungsparameter  $s_{0,\text{pr}}$  durch eine effektive Größe ersetzt, die sowohl die Dynamik des Anregungsprozesses als auch die räumliche Variation der Laserintensität berücksichtigt.

In Anbetracht dieser experimentellen Unsicherheiten wird bereits eine bemerkenswerte qualitative Übereinstimmung erzielt. Entscheidend für die weitere Auswertung der Daten ist jedoch, dass der jeweilige Verlauf der Relaxation zwar von der konkreten Verteilung nach dem optischen Pumpen abhängt, die Relaxation an sich jedoch unabhängig vom Pumpprozess bleibt. Somit ist eine exakte Übereinstimmung der Geschwindigkeitsverteilungen in Simulation und Experiment am Ende des Pumppulses nicht erforderlich, um die aus der anschließenden Relaxationsphase extrahierten Raten zu vergleichen.

### 3.3.2. Relaxation der mittleren Ionen-Geschwindigkeit

Zur Bestimmung der Relaxationsrate soll im Folgenden eine makroskopische Größe betrachtet werden. Hierfür bietet sich insbesondere die mittlere Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  der Ionen im Zustand  $|g_1\rangle$  an, die von einem endlichen Wert unmittelbar nach dem Pumpen gegen Null relaxiert. Eine direkte Umrechnung der mittleren Verstimmung  $\langle \Delta_{\text{pr}} \rangle$  in die mittlere Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  liefert aufgrund der fehlenden Informationen aus den Flügeln der Spektren eine schlechte Abschätzung für  $\langle v_z \rangle$  (siehe Anhang B). Zur akkuraten Bestimmung der mittleren Geschwindigkeit soll deshalb zunächst die vollständige zugrundeliegende Geschwindigkeitsverteilung der Spektren ermittelt werden.

#### Extraktion der Geschwindigkeitsverteilung

Die Simulationen erlauben zwar eine Bestimmung der Spektren über den gesamten relevanten Frequenzbereich, können aber aufgrund der oben beschriebenen experimentellen Unsicherheiten und den daraus resultierenden leichten Abweichungen nicht als Ergänzung der experimentellen Spektren in den Flügeln herangezogen wer-

den. Somit ist ein Extraktionsverfahren nötig, das allein mit dem zentralen Teil des Spektrums auskommt.

Dazu bietet es sich an, eine geeignete Funktion an die vorhandenen Datenpunkte anzufitten. Der Fit liefert dann die fehlende Information der Flügel und erlaubt eine Bestimmung von  $\langle v_z \rangle$  unter Berücksichtigung des gesamten Spektrums. Wie in Anhang B gezeigt, kann die Qualität einer solchen Prozedur mit Hilfe der Simulationen präzise beurteilt werden.

In [48] wurde als Fitfunktion ein Voigt-Profil genutzt, dessen zugrundeliegende Maxwellverteilung um  $v_c = \langle v_z \rangle$  zentriert ist. Dieses Vorgehen erlaubt zwar näherungsweise die gepumpten Spektren zu beschreiben, entbehrt aber einer physikalischen Grundlage, da das optische Pumpen keine Verschiebung, sondern eine Störung der Maxwellverteilung verursacht. Bessere Ergebnisse lassen sich durch eine Funktion erzielen, die insbesondere den Einfluss des optischen Pumpens und stoßinduzierter Geschwindigkeitsänderungen auf die Geschwindigkeitsverteilung abbilden kann. Zu diesem Zweck wird auf Grundlage der in Abschnitt 3.3.1 vorgestellten theoretischen Beschreibung der Anregungsdynamik die Fitfunktion

$$f_{g_1}^{(\text{fit})}(v_z) = f_M(v_z) \frac{L(v_z^{\text{res}} - v) + \frac{1}{2}}{L(v_z^{\text{res}} + v) + L_-(v_z^{\text{res}} - v) + 1} \quad (3.46)$$

abgeleitet [49]. In Anhang B wird eine ausführliche Herleitung von Gleichung (3.46) durchgeführt und ihre Vorteile gegenüber anderen Ansätzen diskutiert. In Gleichung (3.46) beschreibt

$$L(v) = \frac{a}{1 + b v^2} \quad (3.47)$$

das lorentzförmige Profil des Pumpübergangs, und die Resonanzgeschwindigkeit ist durch  $v_z^{\text{res}} = \Delta_{\text{pp}}/k$  gegeben. Der Fitparameter  $a$  drückt das Verhältnis von Pump- zu Stoßrate aus. Ohne optisches Pumpen gilt  $a = L_{\pm} = 0$  und die Geschwindigkeitsverteilung behält ihre Maxwellsche Form,  $f_{g_1}^{(\text{fit})}(v_z) = \frac{1}{2} f_M$ . Für nicht vernachlässigbare Pumpraten beschreibt Gleichung (3.46) eine Maxwellverteilung, die im Bereich der Resonanzgeschwindigkeiten  $\pm v_{\text{res}}$  lorentzförmige Abweichungen besitzt, deren Breite über den Fitparameter  $b$  kontrolliert werden.

Die Funktion (3.46) wird mit dem Profil des Probelasers (3.23) gemäß Gleichung (3.22) gefaltet und über die Parameter  $a$  und  $b$  an die experimentellen Spektren gefittet. Abbildung 3.8 zeigt am Beispiel eines Parametersatzes die akkurate Beschreibung der aufgezeichneten Spektren in sämtlichen Relaxationsstadien sowie die entsprechenden extrahierten Geschwindigkeitsverteilungen.

### Mittlere Ionen-Geschwindigkeit in Experiment und Simulation

Mit Hilfe der rekonstruierten Geschwindigkeitsverteilungen kann die mittlere Geschwindigkeit gemäß

$$\langle v_z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv_z v_z f_{g_1}^{(\text{fit})}(v_z) \quad (3.48)$$

für jeden gemessenen Zeitpunkt berechnet werden. In Abbildung 3.9 werden die resultierenden Relaxationskurven von  $\langle v_z \rangle$  für drei Parametersätze mit den jeweiligen Simulationsergebnissen verglichen. Analog zum Vergleich der experimentellen

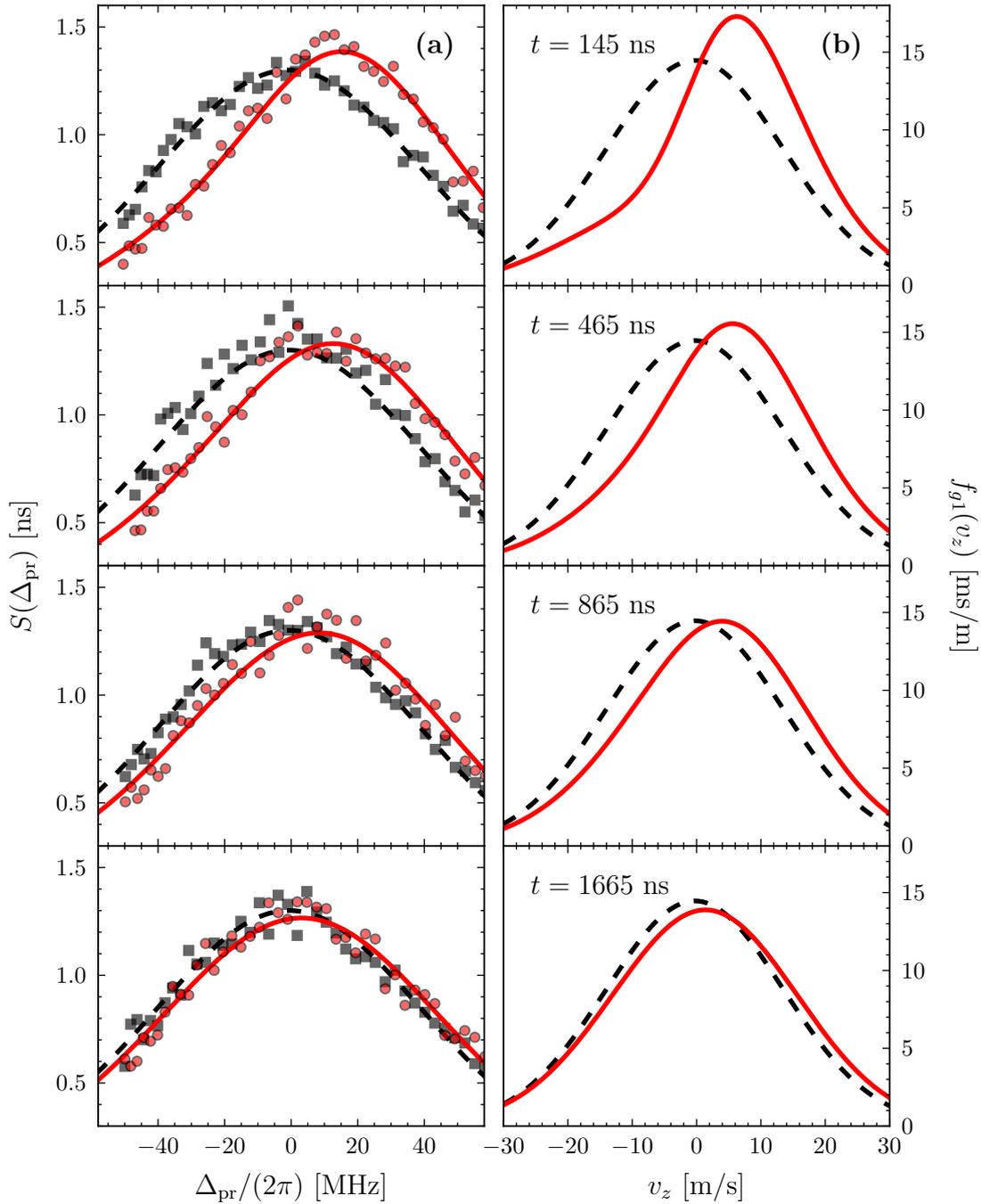


Abbildung 3.8.: Die Fits (Linien) der mit dem Profil des Probelasers (3.23) gefalteten Gleichung (3.46) an die experimentellen Fluoreszenzspektren (Symbole) in (a) erlauben es, die Geschwindigkeitsverteilung  $f_{g_1}$  der Ionen im Zustand  $|g_1\rangle$  zu rekonstruieren (b).

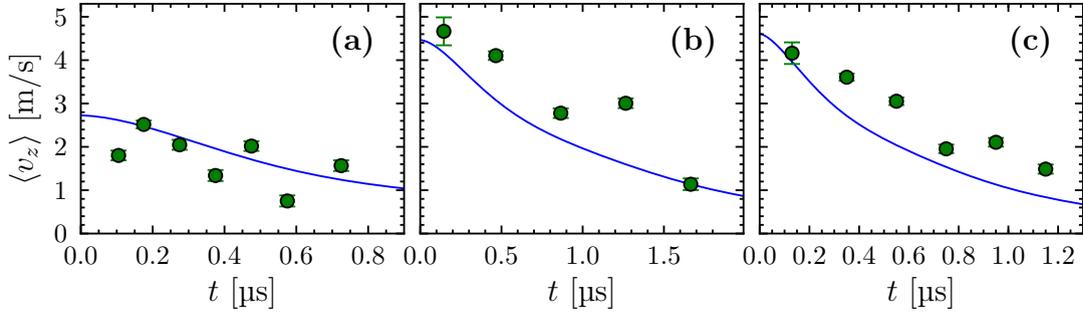


Abbildung 3.9.: Relaxation der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  im Experiment (Symbole) und in der Simulation (Linien). Die Plasmamaparameter sind wie in Abbildung 3.7 (a)  $\rho = 8.59 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 1.0 \text{ K}$  und  $\Gamma = 2.5$ , (b)  $\rho = 3.13 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 3.3 \text{ K}$  und  $\Gamma = 1.2$ , (c)  $\rho = 9.64 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 2.2 \text{ K}$  und  $\Gamma = 1.2$ .

und simulierten Spektren in Abbildung 3.7 findet man auch hier qualitativ dasselbe Verhalten, jedoch aus den oben genannten Gründen keine exakte quantitative Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment.

Im Gegensatz zum Experiment, bei dem die ersten Messungen der Geschwindigkeitsverteilung mehr als 100 ns nach dem optischen Pumpen erfolgen, ist in den Simulationen auch die Kurzzeitdynamik der Relaxation zugänglich. In diesem Bereich zeigt sich deutlich eine nicht-exponentielle Abnahme der mittleren Geschwindigkeit. Für größere Zeiten, beginnend bei den ersten experimentellen Messpunkten, beobachtet man schließlich wieder eine exponentielle Relaxation. Die retardierte Relaxation bei kurzen Zeiten ist auf nicht-markovsche Effekte durch starke Plasmakorrelationen zurückzuführen. Besonders deutlich zeigt sie sich in den simulierten Relaxationskurven für noch größere  $\Gamma$  in den folgenden Abschnitten.

### 3.4. Relaxationsdynamik

Die Analyse des Relaxationsprozesses anhand der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  ermöglicht eine präzise Bestimmung von Relaxationsraten. In diesem Abschnitt werden die dazu notwendigen Methoden für Simulation und Experiment vorgestellt.

Im Allgemeinen wird die Relaxationsrate eines Testteilchens von seiner Geschwindigkeit abhängen (vgl. Landau-Spitzer-Rate  $\gamma_s(v)$  in Gleichung (3.9)). Der erste Teil dieses Abschnitts diskutiert deshalb, inwieweit eine solche Geschwindigkeitsabhängigkeit aus den gemessenen und simulierten Daten extrahiert werden kann. In den folgenden Teilen wird der eigentliche Extraktionsprozess erläutert. Ausgehend von einer konventionellen markovschen Beschreibung der Relaxationsdynamik wird eine nicht-markovsche Beschreibung entwickelt, um zeitliche Korrelationen und die daraus resultierende retardierte Dämpfung von  $\langle v_z \rangle$  bei großen Kopplungsparametern  $\Gamma$  zu berücksichtigen.

### 3.4.1. Geschwindigkeitsabhängigkeit des Relaxationsprozesses

Da das optische Pumpen im Experiment die Geschwindigkeitsverteilung  $f_{g_1}$  in einem großen Geschwindigkeitsbereich beeinflusst (siehe Abbildung 3.8), tragen Ionen mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten zum Relaxationsverhalten der mittleren Geschwindigkeit bei. Eine geschwindigkeitsaufgelöste Bestimmung der Relaxationsrate anhand des experimentell bestimmten  $\langle v_z \rangle$  ist somit nicht möglich. In den Simulationen lässt sich hingegen der Beitrag von Ionen einer bestimmten Geschwindigkeit  $v_z^{(0)}$  zur Relaxation der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  isolieren, indem der Populationstransfer zwischen  $f_{g_1}$  und  $f_{g_2}$  auf einen schmalen Geschwindigkeitsbereich beschränkt wird. Dazu betrachten wir eine Ionenauswahl mit einer anfänglichen Geschwindigkeitsverteilung der Form

$$\mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t = 0) = f_M^{(1D)}(v_x) f_M^{(1D)}(v_y) f_{g_1}(v_z, t = 0), \quad (3.49a)$$

$$f_{g_1}(v_z, t = 0) = \frac{1}{2} f_M^{(1D)}(v_z) \left[ 1 + g(v_z + v_z^{(0)}, \sigma) - g(v_z - v_z^{(0)}, \sigma) \right]. \quad (3.49b)$$

Hierbei wird für die gaußförmigen Störungen

$$g(v, \sigma) = e^{-\frac{v^2}{2\sigma^2}} \quad (3.50)$$

eine geringe Breite  $\sigma \ll v_{\text{th}}$  gewählt. Somit entspricht Gleichung (3.49b) größtenteils der Maxwellverteilung (3.24) der Breite

$$\frac{v_{\text{th}}}{\sqrt{3}} = \sqrt{\frac{m_i}{k_B T}} \quad (3.51)$$

und weist nur um  $\pm v_z^{(0)}$  herum eine antisymmetrische Abweichung von  $f_M^{(1D)}$  auf. Abbildung 3.10 zeigt die Entwicklung der simulierten Geschwindigkeitsverteilung mit einer anfänglichen Ionenauswahl gemäß Gleichung (3.49b). In (b) ist deutlich zu sehen, dass die antisymmetrische Form der gaußschen Störung für  $t \leq 3\omega_p^{-1}$  näherungsweise um  $v_z^{(0)}$  lokalisiert bleibt.

Bei der Berechnung der mittleren Geschwindigkeit

$$\langle v_z(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dv_z v_z f_{g_1}(v_z, t) \quad (3.52)$$

liefert das Integral nur im Bereich von  $\pm v_z^{(0)}$  einen nicht verschwindenden Beitrag, da die anderen Bereiche der Verteilung  $f_{g_1}$  bereits im Gleichgewicht sind und sich gegenseitig wegheben. Durch die Lokalität der Störung ist die Relaxation von  $\langle v_z \rangle$  somit zu allen Zeiten allein durch die Geschwindigkeit  $v \approx v_z^{(0)}$  bestimmt.

In Abbildung 3.11 sind Relaxationskurven der mittleren Geschwindigkeit für verschiedene anfängliche Verteilungen gemäß Gleichung (3.49b) dargestellt. Bei schwacher Kopplung hängt die Rate der Relaxation sichtlich von der vorgegebenen Geschwindigkeit  $v_z^{(0)}$  ab, während bei hohem  $\Gamma$  die Evolution von  $\langle v_z \rangle$  für alle  $v_z^{(0)}$  nahezu den gleichen Verlauf nimmt. Hiermit deutet sich bereits an, dass eine Geschwindigkeitsabhängigkeit der Relaxationsrate für die im Experiment realisierten

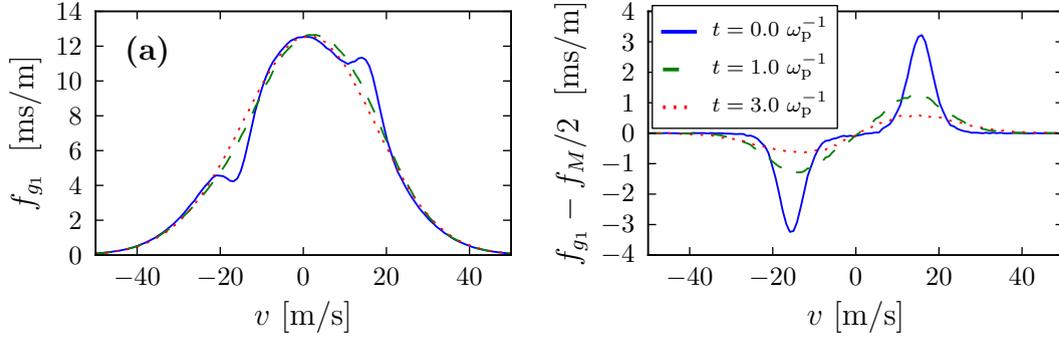


Abbildung 3.10.: Entwicklung der simulierten Geschwindigkeitsverteilung (a) und der Abweichung von der Maxwellverteilung (b) mit einer anfänglichen Verteilung gemäß Gleichung (3.49b) und  $\sigma = 0.05 v_{\text{th}}$ .

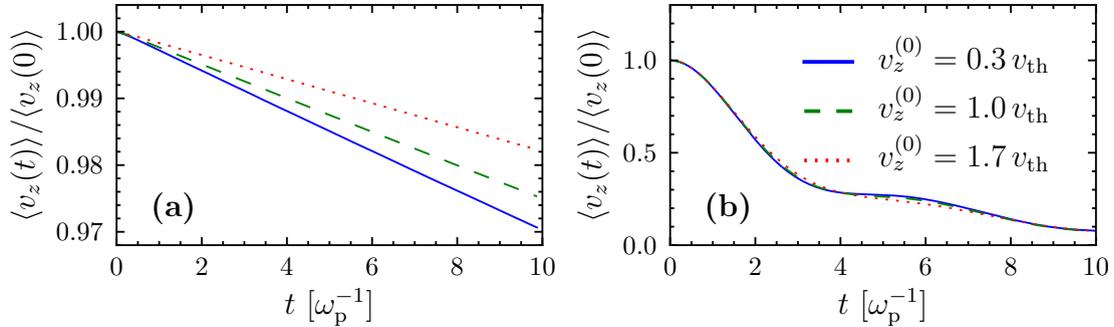


Abbildung 3.11.: Simulierte Relaxation der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  für  $\Gamma = 0.01$  (a) und  $\Gamma = 4.7$  (b) für eine anfängliche Verteilung der Ionen gemäß Gleichung (3.49b) mit  $\sigma = 0.05 v_{\text{th}}$  und verschiedene zentrale Geschwindigkeiten  $v_z^{(0)}$ .

Kopplungsstärken  $1 \lesssim \Gamma \lesssim 3$  keine Rolle spielt. Dieser Zusammenhang wird später noch eingehender beleuchtet. Darüber hinaus wird in den Simulationen bei hohen Kopplungsstärken  $\Gamma$  insbesondere die kollektive Ionendynamik deutlich. Die Dämpfung der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  setzt verzögert ein und zeigt bei größeren Zeiten leichte Oszillationen.

Die Geschwindigkeitsabhängigkeit der Relaxationsrate ist bisher weniger intensiv studiert worden. Eine detaillierte Untersuchung lässt sich mit Hilfe von Gleichung (3.49b) elegant realisieren. Die Entwicklung beliebiger Anfangsverteilungen mit verschiedenen  $v_z^{(0)}$  und  $\sigma$  kann aus der einmal berechneten und abgespeicherten Phasenraumevolution (siehe Abschnitt 3.3.1) effizient bestimmt werden. Zur systematischen Analyse der Geschwindigkeitsabhängigkeit wurde für alle simulierten Kopplungsparameter  $\Gamma$  eine Vielzahl von  $\langle v_z \rangle$ -Relaxationskurven mit unterschiedlichen  $v_z^{(0)}$  ermittelt. Dabei wurde die Breite der Störungen in Gleichung (3.49b) auf  $\sigma = 0.05 v_{\text{th}}$  gesetzt, da eine weitere Verringerung von  $\sigma$  keine geänderte Abhängigkeit von  $v_z^{(0)}$  ergab. Zur Beschreibung der beobachteten Dynamik von  $\langle v_z \rangle$  im

stark gekoppelten Bereich ist ein einfaches exponentielles Relaxationsgesetz nicht ausreichend. Ausgehend von der üblichen markovschen Beschreibung der Relaxation wird in den folgenden Abschnitten deshalb eine allgemeinere Evolutionsgleichung für  $\langle v_z \rangle$  abgeleitet, die bei beliebigen Kopplungsstärken anwendbar ist.

### 3.4.2. Markovsche Beschreibung

In schwach gekoppelten Plasmen sind die Voraussetzungen gegeben, die zur Herleitung der Landau-Spitzer-Rate in Abschnitt 3.1 nötig sind. Ein geladenes Testteilchen führt in einem solchen Plasma Brownsche Bewegung aus. Die Dauer eines Stoßes ist wesentlich kürzer als der zeitliche Abstand zwischen zwei aufeinander folgenden Stößen. Damit kann die Geschwindigkeitsänderung als instantan angesehen werden, so dass die Diffusion des Testteilchens ein Markov-Prozess ist. Stöße höherer Ordnung sind vernachlässigbar, und der kumulative Effekt von Stößen mit kleinem Streuwinkel überwiegt bei weitem die Auswirkung starker Kollisionen mit kleinem Stoßparameter (d. h.  $\rho\lambda_D^3 \gg 1$ ). Unter diesen Bedingungen gehorcht die Evolution der ionischen Geschwindigkeitsverteilung  $\mathcal{F}_{g_1}$  der Fokker-Planck-Gleichung [39, 222]

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{g_1}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v_i} \left( \gamma(v) v_i \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t) \right) + \frac{\partial}{\partial v_i} \frac{\partial}{\partial v_j} \left( D_{ij}(v) \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t) \right). \quad (3.53)$$

Hierbei sowie in den folgenden Rechnungen wird zur Notation die Einsteinsche Summenkonvention verwendet. In Gleichung (3.53) bewirkt die Relaxations- oder Stoßrate  $\gamma$  eine Dämpfung der Ionengeschwindigkeiten, woraus eine Kontraktion der Verteilung  $\mathcal{F}_{g_1}$  resultiert. Im thermischen Gleichgewicht wird diese Tendenz durch den Diffusionstensor  $D$  ausgeglichen, der die statistischen Fluktuationen der Geschwindigkeiten beschreibt und eine Ausdehnung von  $\mathcal{F}_{g_1}$  verursacht.

Durch Multiplikation der Fokker-Planck-Gleichung (3.53) mit  $v_z$  und Integration über  $\mathbf{v}$  erhalten wir die Evolutionsgleichung

$$\langle \dot{v}_z \rangle = - \int d\mathbf{v} \gamma(v) \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t). \quad (3.54)$$

Da im Experiment nur die  $z$ -Komponente der Ionengeschwindigkeit manipuliert und beobachtet wird und die transversalen Geschwindigkeitskomponenten  $\mathbf{v}_\perp = (v_x, v_y)$  ihre Gleichgewichtsverteilung behalten (siehe Gleichung (3.49a)), ergibt sich nach Integration über die transversalen Richtungen

$$\langle \dot{v}_z \rangle = - \int dv_z \gamma_z(v_z) v_z f_{g_1}(v_z, t), \quad (3.55)$$

wobei die transversal gemittelte Relaxationsrate definiert ist als

$$\gamma_z(v_z) = - \int d\mathbf{v}_\perp \gamma(v) f_M^{(1D)}(v_x) f_M^{(1D)}(v_y). \quad (3.56)$$

In den Simulationen können wir die anfängliche Verteilung  $f_{g_1}(v_z, 0)$  gemäß Gleichung (3.49b) mit kleinem  $\sigma \ll v_{\text{th}}$  wählen. Damit ist der Integrand in Gleichung (3.55) nahezu antisymmetrisch bis auf die von der Gleichgewichtsverteilung abweichenden

Bereiche um  $\pm v_z^{(0)}$ , die folglich den einzigen nicht-verschwindenden Beitrag zum Integral liefern. Dadurch können wir die Rate näherungsweise vor das Integral ziehen,

$$\langle \dot{v}_z \rangle \approx -\gamma_z(v_z^{(0)}) \int dv_z v_z f_{g_1}(v_z, t) = -\gamma_z(v_z^{(0)}) \langle v_z \rangle, \quad (3.57)$$

so dass wir nun explizit die Abhängigkeit von  $v_z^{(0)}$  erhalten. In schwach gekoppelten Plasmen ergibt sich demnach für eine Anfangsverteilung der Ionen gemäß Gleichung (3.49) mit  $\sigma \ll v_{\text{th}}$  eine exponentielle Relaxation von  $\langle v_z \rangle$  mit der Rate  $\gamma(v_z^{(0)})$ .

Zur Beschreibung der experimentellen Daten ist zunächst keine Vereinfachung wie in Gleichung (3.57) möglich, da im Experiment die Geschwindigkeitsverteilung  $f_{g_1}$  über große  $v$ -Bereiche von  $f_M$  abweicht (Größenordnung  $\sigma \approx v_{\text{th}}$ ). Anhand der Simulationen wird sich jedoch zeigen, dass für  $\Gamma > 1$  die Rate  $\gamma_z(v_z)$  als konstant approximiert werden kann. Mit dieser Voraussetzung  $\gamma_z(v_z) = \gamma_z = \text{const.}$  erhält man ebenso Gleichung (3.57).

### 3.4.3. Nicht-markovsche Beschreibung

Bei steigender Kopplungsstärke wird der markovsche Ansatz unzulänglich. Die Dauer eines Stoßprozesses erreicht die gleiche Größenordnung wie die typische Zeit zwischen zwei aufeinanderfolgenden Stößen, so dass nun zeitliche Korrelationen und die Vorgeschichte des Plasmas berücksichtigt werden müssen. Um ein solches System-Gedächtnis zu beschreiben, führen wir zunächst die alternative Form der Fokker-Planck-Gleichung ein,

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{g_1}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v_i} \left( D_{ij}(v) \frac{\partial}{\partial v_j} \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t) + F_{\text{pol}}(v) v_i \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t) \right). \quad (3.58)$$

Die Polarisations-Reibungskraft  $F_{\text{pol}}$  ist mit  $\gamma$  und  $D$  über

$$\gamma(v) v_i = -\frac{\partial}{\partial v_j} D_{ij} + F_{\text{pol}} v_i \quad (3.59)$$

verknüpft. In der Formulierung von Gleichung (3.59) wird die Stoßrate  $\gamma$  auf zwei verschiedene physikalische Prozesse zurückgeführt: Der Polarisationssterm  $F_{\text{pol}}$  drückt die Antwort der Feldteilchen auf ein Testteilchen aus, das das umgebende Plasma polarisiert. Die Ableitung des Diffusionskoeffizienten beinhaltet zufällige Fluktuationen im Plasma, die zu einer Dämpfung der Testteilchengeschwindigkeit führen.

Im nächsten Schritt gehen wir nun von der markovschen Fokker-Planck-Gleichung (3.58) zu einer nicht-markovschen kinetischen Gleichung [55, 135] über,

$$\frac{\partial \mathcal{F}_{g_1}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial v_i} \int_0^t dt' \left( D_{ij}(v, t') \frac{\partial}{\partial v_j} + F_{\text{pol}}(v, t') v_i \right) \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t - t'). \quad (3.60)$$

Die Entwicklung von  $\mathcal{F}_{g_1}$  zum Zeitpunkt  $t$  ist jetzt durch die Vergangenheit des Systems in Gestalt der zeitabhängigen Koeffizienten  $D(v, t')$  und  $F_{\text{pol}}(v, t')$  zu allen früheren Zeitpunkten  $t' \leq t$  bestimmt.

Die Evolution der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  ergibt sich aus Gleichung (3.60) analog zum Vorgehen im vorherigen Abschnitt. Mit der Definition der geschwindigkeitsabhängigen Gedächtnisfunktion

$$\mathcal{M}(v, t) v_z = D_{zj}(v, t) \frac{\partial}{\partial v_j} + F_{\text{pol}}(v, t) v_z \quad (3.61)$$

und der transversal gemittelten Gedächtnisfunktion

$$\mathcal{M}_z(v_z, t) = \int d\mathbf{v}_\perp \mathcal{M}(v, t) f_M^{(1D)}(v_x) f_M^{(1D)}(v_y) \quad (3.62)$$

erhält man die Evolutionsgleichung für die mittlere Geschwindigkeit im Fall starker Korrelationen

$$\langle \dot{v}_z(t) \rangle = - \int_0^t dt' \mathcal{M}_z(v_z^{(0)}, t') \langle v_z(t-t') \rangle. \quad (3.63)$$

Zur Herleitung von Gleichung (3.63) aus Gleichung (3.60) sind wir wieder davon ausgegangen, dass die anfängliche Geschwindigkeitsverteilung  $f_{g1}(v_z, 0)$  die Form (3.49b) mit schmalen Störungen  $\sigma \ll v_{\text{th}}$  besitzt oder die Gedächtnisfunktion (3.61) unabhängig von  $v$  ist. Gleichung (3.63) hat die Form einer verallgemeinerten Langevin-Gleichung [148], wobei die dynamische Variable durch  $v_z$  gegeben ist. Im Gegensatz zur markovschen Evolutionsgleichung (3.57) berücksichtigt sie nun durch die Gedächtnisfunktion  $\mathcal{M}_z$  die Auswirkungen der zeitlichen Plasmakorrelationen und trägt so der retardierten Relaxation Rechnung. Ein solcher Gedächtnisfunktionsformalismus kommt insbesondere bei der Beschreibung von Autokorrelationsfunktionen häufig zum Einsatz, um die Auswirkungen nicht-markovscher Effekte in stark korrelierten Systemen zu erfassen [28, 103, 113–115, 186, 187].

Auch wenn Gleichung (3.63) formal die vollständige Relaxation von  $\langle v_z \rangle$  beschreiben kann, gestaltet sich die Bestimmung einer geeigneten Gedächtnisfunktion, die sowohl die anfängliche Retardierung als auch die späteren Oszillationen der Dämpfung einfängt, als überaus schwierig. Da zudem ein Großteil der experimentellen Daten nur für kurze Zeiten  $t \lesssim 4\omega_p^{-1}$  vorliegen, konzentriert sich die folgende Analyse der Dämpfungskurven von  $\langle v_z \rangle$  auf das Kurzzeitverhalten der Relaxation.

In [114] wird gerade dieses Kurzzeitverhalten einer mit  $\langle v_z \rangle$  eng verknüpften Größe, der Geschwindigkeitsautokorrelationsfunktion  $\langle \mathbf{v}(t)\mathbf{v}(0) \rangle$ , untersucht. Deren Dynamik lässt sich akkurat durch eine gaußsche Gedächtnisfunktion beschreiben. In Anlehnung an [114] wählen auch wir deshalb eine solche gaußsche Form

$$\mathcal{M}_z(v_z^0, t) = \frac{2\gamma_z(v_z^0)}{\sqrt{2\pi\tau^2}} \exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right). \quad (3.64)$$

Die Gedächtniszeit

$$\tau\omega_p = a^{-2}\omega_p^{-6} \left(3\Gamma \langle |\dot{\mathbf{a}}|^2 \rangle - \frac{1}{3}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.65)$$

ist dabei durch die quadratisch gemittelte zeitliche Ableitung der Ionenbeschleunigung  $\langle |\dot{\mathbf{a}}|^2 \rangle$  bestimmt [163].

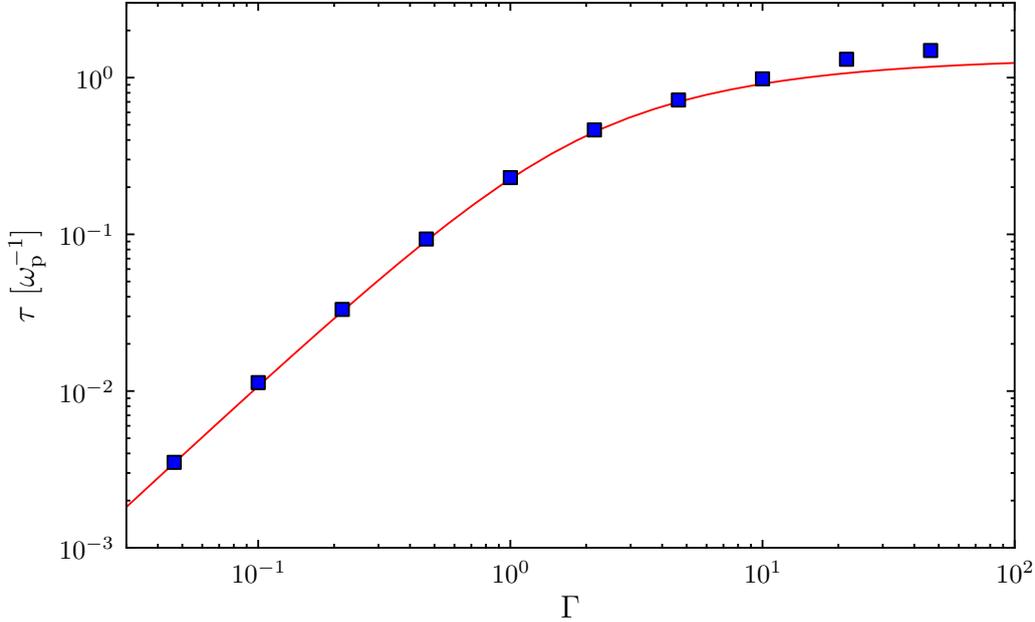


Abbildung 3.12.: Gedächtniszeit  $\tau$  nach Gleichung (3.64) als Funktion der Kopplungsstärke  $\Gamma$ . Die Datenpunkte ( $\square$ ) sind direkt aus den MD-Simulationen ermittelt, während die Linie der Interpolationsformel (3.66) entspricht.

Mit Hilfe von Gleichung (3.65) wird  $\tau$  direkt aus MD-Simulationen im thermischen Gleichgewicht bestimmt. Abbildung 3.12 zeigt den Vergleich des resultierenden  $\tau$  mit der in [114] angegebenen Interpolationsformel

$$\tau \omega_p = \frac{1}{2} \left( a_0 + \frac{a_1}{\sqrt{\Gamma}} + \frac{a_2}{\Gamma} + \frac{a_3}{\Gamma^{3/2}} + \frac{a_4}{\Gamma^2} + \frac{a_5}{\Gamma^3} \right)^{-1/2} \quad (3.66)$$

mit  $a_0 = 0.136$ ,  $a_1 = 0.174$ ,  $a_2 = 0.927$ ,  $a_3 = -0.097$ ,  $a_4 = 1.782$ ,  $a_5 = 1.988$ . Für große  $\Gamma$  wächst das numerisch bestimmte  $\tau$  etwas stärker als in Gleichung (3.66) angenommen und konvergiert folglich auf einen geringfügig höheren Wert von  $\tau \approx 2 \omega_p^{-1}$ . Im stark gekoppelten Bereich ist die Gedächtniszeit also nur noch sehr schwach von  $\Gamma$  abhängig, und  $\langle v_z \rangle$  ist zum Zeitpunkt  $t$  im Wesentlichen durch die Entwicklung des Systems in den beiden jeweils vorhergehenden Plasmaperioden  $\omega_p^{-1}$  bestimmt. Mit abnehmender Kopplungsstärke verkürzt sich die Gedächtniszeit des Systems und für  $\Gamma < 10$  bestätigen die Simulationsdaten Gleichung (3.66). Im Limes  $\Gamma \rightarrow 0$  verschwindet das Gedächtnis des Systems vollständig und die Relaxation erfolgt mittels isolierter binärer Stöße. Damit gilt für die Gedächtnis-Funktion (3.64)

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \mathcal{M}_z(v_z^{(0)}, t) = 2\gamma_z(v_z^{(0)})\delta(t) \quad (3.67)$$

und Gleichung (3.63) reduziert sich auf den markovschen Fall in Gleichung (3.57). Da die Zeitintegration in Gleichung (3.63) im Fall schwacher Kopplung nur über die

halbe  $\delta$ -Funktion von Gleichung (3.67) erfolgt, wurde der Vorfaktor der Gedächtnisfunktion (3.64) entsprechend mit dem Faktor 2 gewählt.

Insgesamt liefert der Formalismus der Gedächtnisfunktion mit der Wahl von  $\mathcal{M}_z$  gemäß Gleichung (3.64) also eine konsistente Beschreibung der Relaxation von  $\langle v_z \rangle$  auf kurzen Zeiten sowohl bei starker als auch bei schwacher Kopplung. Damit steht nun ein wohldefiniertes Modell zur Extraktion der Relaxationsrate  $\gamma_z(v_z)$  aus Experiment und Simulation zur Verfügung.

Durch Anfitzen der Gleichungen (3.63) und (3.64) an die experimentell und numerisch bestimmten Relaxationskurven im Bereich  $t \leq 4\omega_p^{-1}$  kann die Relaxationsrate  $\gamma_z$  bestimmt werden. Als Fitparameter dient dabei neben  $\gamma_z$  auch die anfängliche Geschwindigkeit  $\langle v_z(0) \rangle$ , die in den gemessenen Relaxationskurven nicht bekannt ist. In den Abbildungen 3.13 und 3.14 ist exemplarisch die simulierte und gemessene Evolution von  $\langle v_z \rangle$  zusammen mit den angefitzten Gleichungen (3.63) und (3.64) für verschiedene Kopplungsparameter  $\Gamma$  dargestellt. Anhand der simulierten Daten in Abbildung 3.13 werden die Auswirkungen starker Korrelationen besonders deutlich. Während für  $\Gamma = 0.1$  die mittlere Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  exponentiell abfällt, setzt bei höherer Kopplungsstärke die Relaxation verzögert ein und zeigt bei längeren Zeiten ausgeprägte Oszillationen. An dieser Stelle ist zu sehen, dass der oben vorgestellte Formalismus nicht genügt, um die kollektiven Ionenschwingungen bei langen Zeiten zu erfassen. Auf der hier relevanten Zeitskala von  $t \leq 4\omega_p^{-1}$  liefern die Fits jedoch eine hervorragende Beschreibung sowohl der experimentellen als auch numerischen Daten. Da im Experiment lediglich Kopplungsstärken von  $\Gamma \lesssim 3$  erreicht werden, sind mit der vorhandenen Zeitaufösung keine Oszillationen zu erkennen (siehe Abbildung 3.14(b)). Dadurch weist der Fit an die Kurzzeitdynamik von  $\langle v_z \rangle$  auch bei Zeiten  $t > 4\omega_p^{-1}$  noch eine gute Übereinstimmung mit den Daten auf. Die aus der Fitprozedur resultierenden Relaxationsraten  $\gamma_z$  werden im nächsten Abschnitt diskutiert.

## 3.5. Relaxationsrate

In diesem Abschnitt werden die experimentellen und numerischen Ergebnisse zur Relaxationsrate gegenübergestellt und in Beziehung zu vorhandenen Theorien gesetzt. Außerdem soll insbesondere der Verlauf des Relaxationsprozesses im stark gekoppelten Bereich geklärt werden.

Zunächst wird der mit steigendem  $\Gamma$  nachlassende Einfluss der Geschwindigkeit  $v_z$  auf die Rate verdeutlicht. Die im stark gekoppelten Bereich weitgehend geschwindigkeitsunabhängige Rate erlaubt die Extraktion von mittleren Relaxationsraten aus den experimentellen Daten, die im Anschluss vorgestellt werden.

### 3.5.1. Geschwindigkeitsabhängigkeit der Relaxationsrate

In den Experimenten ist wegen des optischen Pumpens auf einem breiten Geschwindigkeitsintervall zunächst unklar, welcher Geschwindigkeit  $v_z^{(0)}$  die mit den Gleichungen (3.63) und (3.64) extrahierte Rate zuzuordnen ist. Zur Lösung dieses Problems

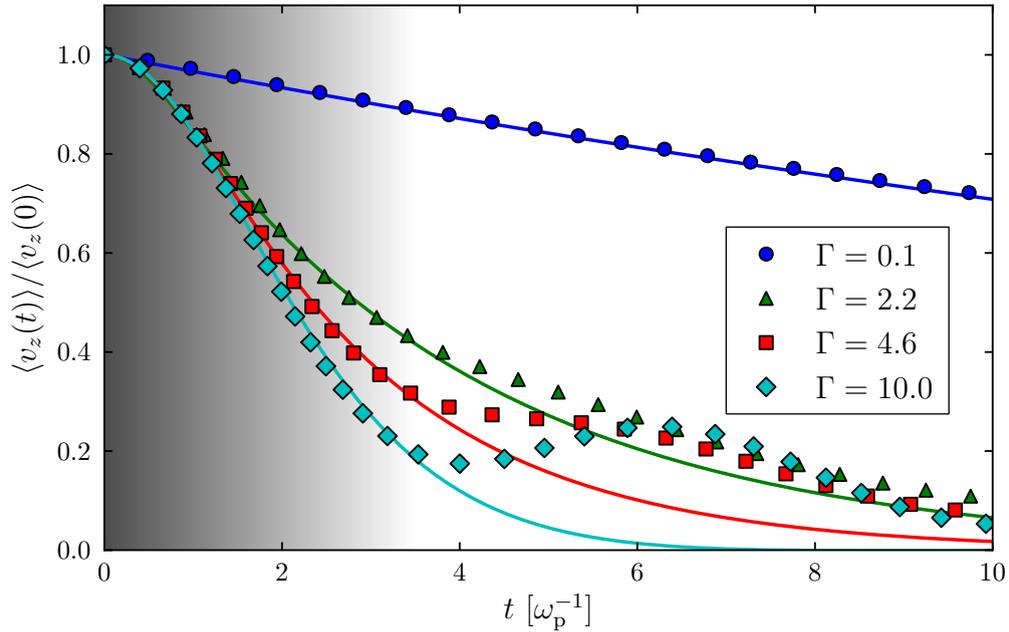


Abbildung 3.13.: Simulierte Relaxation der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  (Symbole) mit anfänglicher Geschwindigkeitsverteilung gemäß Gleichung (3.49b) und schmaler Störung  $\sigma = 0.1 v_{\text{th}}$ , zentriert um  $v_{\text{res}} = v_{\text{th}}$ . Die retardierte Relaxation wird im Bereich  $t < 4 \omega_p^{-1}$  (grau hinterlegt) für alle Kopplungsparameter  $\Gamma$  hervorragend durch die angefitzte nicht-markovsche Evolutionsgleichung (3.63) mit der gaußschen Gedächtnis-Funktion (3.64) beschrieben (Linien).

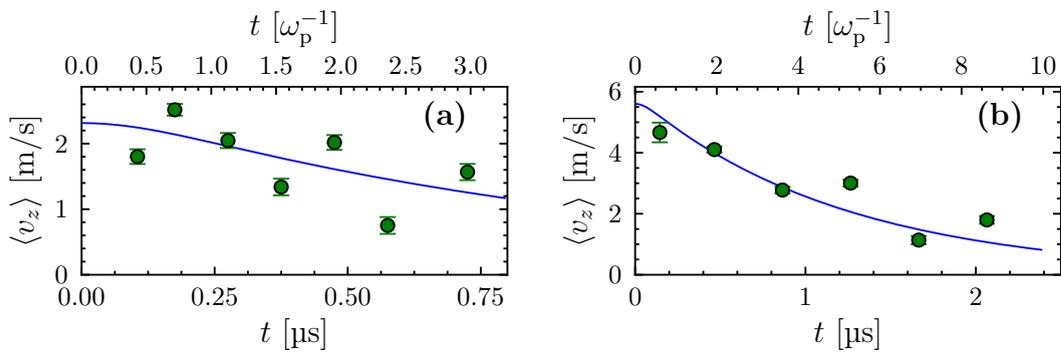


Abbildung 3.14.: Experimentelle Relaxationskurven von  $\langle v_z \rangle$  (Symbole) für die Parameter (a)  $\rho = 8.59 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 1.0 \text{ K}$  und  $\Gamma = 2.5$  sowie (b)  $\rho = 9.64 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ ,  $T = 2.2 \text{ K}$  und  $\Gamma = 1.2$ . Die Linien entsprechen der angefitzten Lösung der nicht-markovschen Evolutionsgleichung (3.63) mit der gaußschen Gedächtnis-Funktion (3.64).

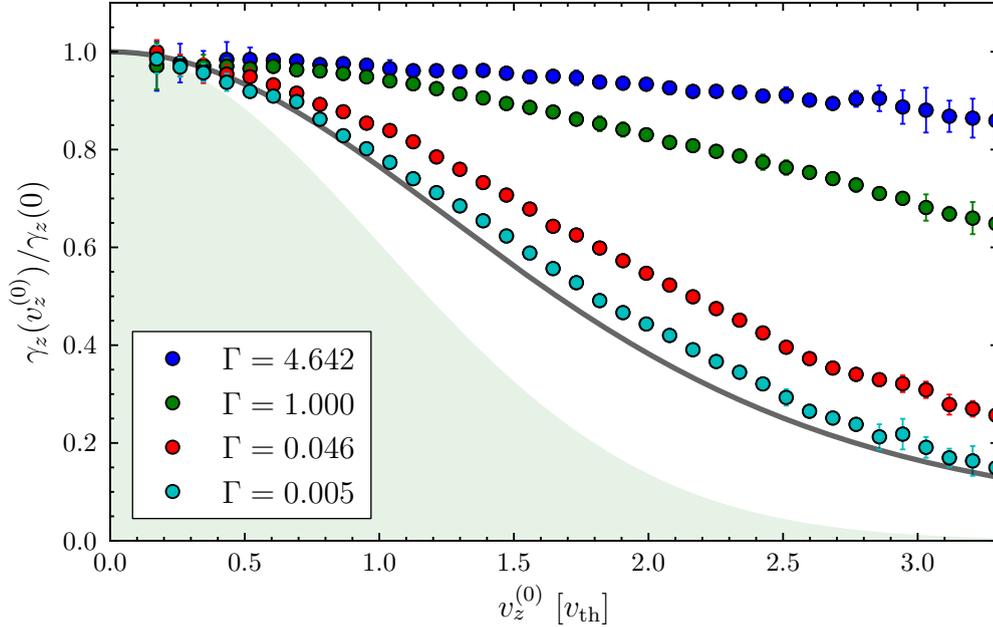


Abbildung 3.15.: Transversal gemittelte Relaxationsrate  $\gamma_z$  als Funktion der bei  $v_z^{(0)}$  lokalisierten Störung von  $f_{g1}$  für verschiedene Kopplungsstärken  $\Gamma$ , skaliert auf die Rate bei  $v_z^{(0)} = 0$ . Die gemäß Gleichung (3.56) transversal gemittelte Landau-Spitzer-Rate (3.9) (Linie) ist in der skalierten Auftragung unabhängig von  $\Gamma$ . Der relative Anteil von Ionen im Plasma mit Geschwindigkeit  $v_z^{(0)}$  ist durch die Maxwellverteilung bestimmt (schattiert).

dient eine Analyse der Geschwindigkeitsabhängigkeit von  $\gamma_z$  anhand der Simulationen mit der oben diskutierten Anfangsverteilung  $f_{g1}$  nach Gleichung (3.49b).

In den Abbildungen 3.15 und 3.16 sind die Simulationsergebnisse dargestellt. Trotz der umfangreichen Rechnungen weisen die Daten bei großen und kleinen  $v_z^{(0)}$  deutliche statistische Schwankungen auf. Im Fall großer  $v_z^{(0)}$  liegt die Ursache hierfür in der geringen Anzahl an Teilchen mit den entsprechenden Geschwindigkeiten. Durch einen Blick auf den relativen Anteil der Ionengeschwindigkeiten in Abbildung 3.15 können wir jedoch feststellen, dass die Unsicherheiten in den Daten erst bei Geschwindigkeiten auftreten, deren Anteil an der gesamten Verteilung ca. 100-mal kleiner ist als derjenige von Geschwindigkeiten im Bereich  $v \lesssim v_{th}$ . Dass selbst in diesem Bereich noch Relaxationsraten bestimmt werden können, verdeutlicht nochmals die hohe Statistik der hier durchgeführten Rechnungen. Bei kleinen Geschwindigkeiten sind zwar viele Ionen mit den betreffenden  $v_z^{(0)}$  vorhanden. Da jedoch in diesem Fall die mittlere Geschwindigkeit von Beginn an sehr klein ist, wirken sich Geschwindigkeitsfluktuationen, die unabhängig von  $\langle v_z \rangle$  stets von der gleichen Größenordnung sind, wesentlich stärker auf die Evolution von  $\langle v_z \rangle$  aus.

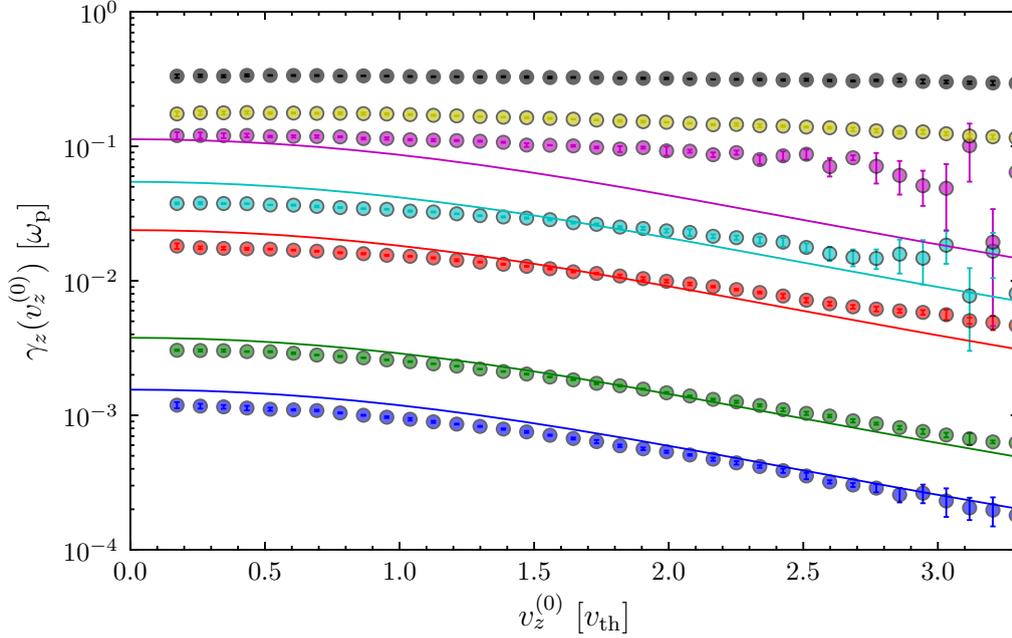


Abbildung 3.16.: Simulierte Relaxationsrate  $\gamma_z$  ( $\circ$ ) als Funktion von  $v_z^{(0)}$  für verschiedene Kopplungsstärken  $\Gamma$ . Die Kurven entsprechen von unten nach oben  $\Gamma = 0.005, 0.01, 0.046, 0.1, 0.464, 1, 4.642$ , wobei die Linien der gemäß Gleichung (3.56) transversal gemittelten Landau-Spitzer-Rate (3.9) entsprechen.

Die Landau-Spitzer-Rate (Gleichung (3.9)), transversal gemittelt gemäß Gleichung (3.56), ergibt erstaunlicherweise selbst bei der kleinsten simulierten Kopplungsstärke  $\Gamma = 0.005$  keine Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen. Sie zeigt eine stärkere Geschwindigkeitsabhängigkeit (Abbildung 3.15) und überschätzt zudem deutlich die Rate bei kleinen Geschwindigkeiten  $v_z^{(0)}$  (Abbildung 3.21). Mit steigendem  $\Gamma$  nehmen sowohl die qualitativen als auch quantitativen Abweichungen zu. Hieran zeigt sich noch einmal klar die Beschränkung der Landau-Spitzer-Theorie auf den schwach gekoppelten Bereich. Die offensichtlichen Abweichungen selbst bei niedrigen Kopplungsstärken  $\Gamma \lesssim 0.1$  deuten jedoch außerdem darauf hin, dass die in der Landau-Spitzer-Theorie vernachlässigten kollektiven Effekte auch im schwach gekoppelten Bereich noch eine Rolle für das Relaxationsverhalten spielen und eine genaue Beschreibung der Korrelationen nötig ist. In Abschnitt 3.6 wird mit Hilfe einer allgemeineren kinetischen Theorie gezeigt, dass eine verbesserte Übereinstimmung zwischen Simulation und Theorie durch Berücksichtigung dieser Effekte erzielt werden kann.

Besonders im qualitativen Vergleich (Abbildung 3.15) wird deutlich, dass der Einfluss der Ionengeschwindigkeit auf die Relaxationsrate mit steigender Kopplungsstärke sinkt. Für  $\Gamma \approx 5$  variiert die Rate im Bereich von  $v_z \leq 3v_{th}$  um weniger als 10%. Die Wahrscheinlichkeit im thermischen Gleichgewicht ein Ion mit  $v_z = 3v_{th}$  zu

Tabelle 3.1.: Dichte und Temperatur der Ionen in den verschiedenen Messreihen, die die in Abbildung 3.17 dargestellten Relaxationsraten ergeben.

$\rho \times 10^{-9} [\text{cm}^{-3}]$	$T [\text{K}]$	$\Gamma$
4.35	1.7	2.6
0.86	1.0	2.5
0.59	1.2	1.9
0.70	1.8	1.3
3.13	3.3	1.2
0.96	2.2	1.2

finden, ist dagegen ca. 100-mal kleiner als ein Ion mit  $v_z = 0$ , so dass die Rate im Wesentlichen für alle Ionen als konstant angesehen werden kann.

### 3.5.2. Mittlere Relaxationsrate

Die Unabhängigkeit der Rate von der Geschwindigkeit bei hohen Kopplungsstärken ermöglicht eine klare Einordnung der aus den experimentellen Daten extrahierten Raten, da die Messungen alle bei Kopplungsparametern  $\Gamma > 1$  durchgeführt wurden. Wir können demnach die experimentellen Relaxationskurven von  $\langle v_z \rangle$  näherungsweise als  $v_z^{(0)}$ -unabhängig betrachten und die extrahierten Werte als mittlere Relaxationsraten

$$\bar{\gamma} = \int d\mathbf{v} \gamma(v) f_M(v) \quad (3.68)$$

identifizieren. Zum Vergleich zwischen Experiment und Simulation wird aus den simulierten Daten zur geschwindigkeitsabhängigen Rate  $\gamma_z(v_z)$  ebenfalls die mittlere Rate gemäß

$$\bar{\gamma} = \int_0^\infty dv_z \gamma_z(v_z) f_M^{(1D)}(v_z) \quad (3.69)$$

berechnet.

Abbildung 3.17 zeigt die jeweiligen Resultate aus Experiment und Simulation zusammen mit der gemäß Gleichung (3.68) gemittelten Landau-Spitzer-Rate  $\gamma_s$  aus Gleichung (3.9),

$$\bar{\gamma}_s/\omega_p = 2 \sqrt{\frac{3\Gamma^3}{\pi}} \left( \sqrt{2} \sinh^{-1}(1) - 1 \right) \ln \Lambda. \quad (3.70)$$

Die Simulationsergebnisse erlauben eine Darstellung der Rate über einen weiten Bereich von Kopplungsstärken. Für kleine  $\Gamma$  zeigen sie dieselbe Skalierung wie die Landau-Spitzer-Vorhersage, liefern aber, wie nach der Analyse der Geschwindigkeitsabhängigkeit in Abbildung 3.16 zu erwarten, eine kleinere Relaxationsrate  $\bar{\gamma}$ . Jenseits der Gültigkeit der Landau-Spitzer-Theorie nähert sich die Rate bei steigender Kopplungsstärke der Plasmafrequenz  $\omega_p$  an.

Die experimentell bestimmten Raten weisen ebenfalls solch einen steigenden Trend auf und ergeben eine hervorragende Übereinstimmung mit den MD-Resultaten. Die

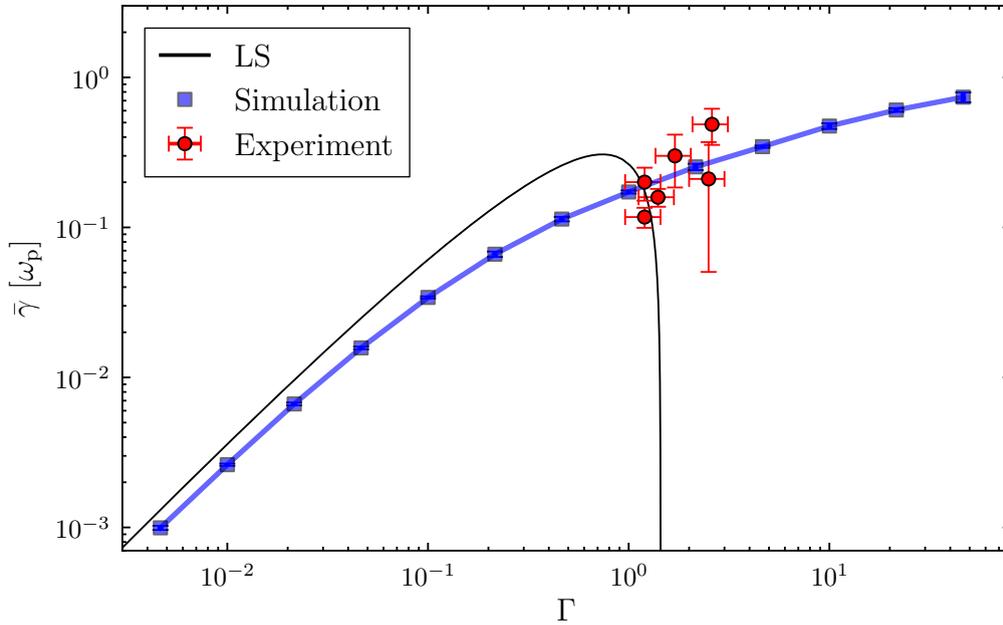


Abbildung 3.17.: Mittlere Relaxationsrate  $\bar{\gamma}$  als Funktion des Kopplungsparameters  $\Gamma$ . Die Linie (LS) entspricht Gleichung (3.95).

Messungen, die für unterschiedliche Dichten und Temperaturen, aber gleiche Kopplungsstärke  $\Gamma$  durchgeführt wurden (siehe Tabelle 3.1), liefern im Rahmen der Fehler die gleichen Werte. Das optische Pumpen betrifft jedoch je nach Plasmatemperatur unterschiedliche skalierte Geschwindigkeiten  $v/v_{\text{th}}$ . Diese Tatsache bestätigt noch einmal die geringe Rolle der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Relaxationsrate für Kopplungsstärken  $\Gamma > 1$  (vgl. auch Abbildung 3.15).

Wie bereits in Abschnitt 3.1 diskutiert, zielen die bisherigen Erweiterungen der Landau-Spitzer-Theorie für große  $\Gamma$  vorwiegend auf die Elektron-Ion-Thermalisierung ab. Ein direkter Vergleich der Ergebnisse der vorliegenden Arbeit mit den bisherigen Studien ist wegen des unterschiedlichen Massenverhältnisses der relaxierenden Teilchen demnach nicht möglich. An dieser Stelle wollen wir uns deshalb auf einen qualitativen Vergleich beschränken. Dazu greifen wir auf die Landau-Spitzer-Form

$$\bar{\gamma}/\omega_p = a \Gamma^{\frac{3}{2}} \ln \Lambda_{\text{eff}} \quad (3.71)$$

zurück, deren effektiver Coulomb-Logarithmus  $\ln \Lambda_{\text{eff}}$  im schwach gekoppelten Bereich durch Gleichung (3.15) gegeben ist. Zur Darstellung der Theorien für stark gekoppelte Plasmen wird  $\ln \Lambda_{\text{eff}}$  durch die Gleichungen (3.16) und (3.18) bis (3.20) ersetzt. Dabei nutzen wir für alle Varianten die Parameter  $a = 0.5$  und  $C = 0.3$ , die aus der kinetischen Theorie der Relaxation von Teilchen gleicher Massen im schwach gekoppelten Bereich folgen (siehe Abschnitt 3.6).

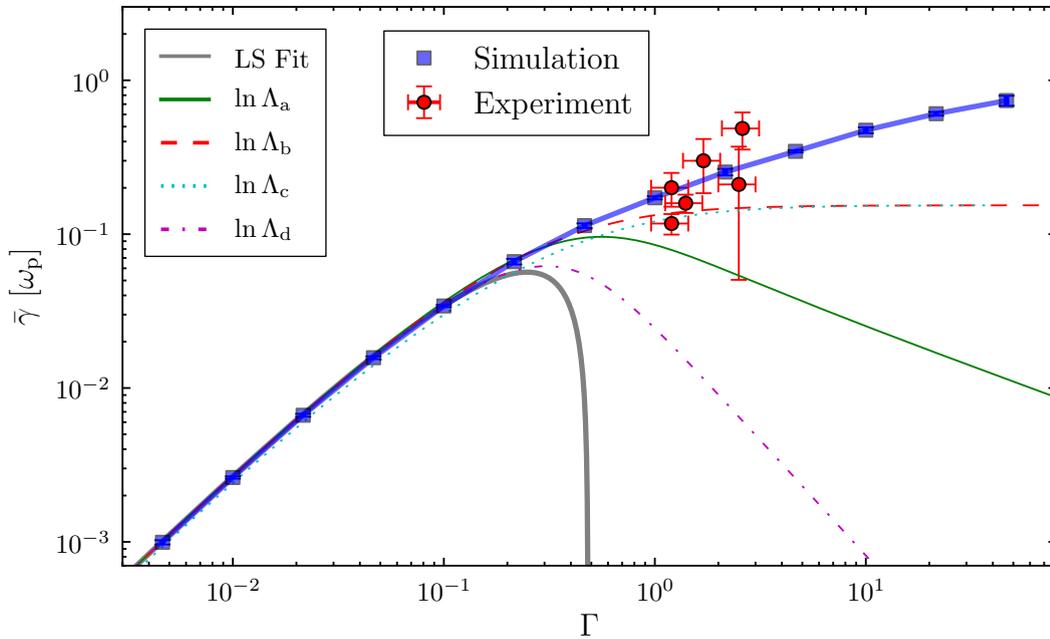


Abbildung 3.18.: Ergebnisse dieser Arbeit (Symbole) im Vergleich mit den Raten, die aus Gleichung (3.71) in Verbindung mit den effektiven Coulomb-Logarithmen (3.16) - (3.20) resultieren. Die graue Linie (LS Fit) entspricht dem ursprünglichen Coulomb-Logarithmus aus Gleichung (3.15).

Abbildung 3.18 zeigt die resultierenden Kurven im Vergleich mit den hier erzielten Ergebnissen. Die aus den Simulationen extrahierte Rate weist im Gegensatz zu allen Erweiterungen der Theorien im betrachteten Kopplungsbereich ein monotonen Wachstum auf. Anhand der simulierten Relaxationskurven von  $\langle v_z \rangle$  in Abbildung 3.13 wird jedoch deutlich, dass die in dieser Arbeit bestimmte Rate der Kurzzeitrelaxation im Bereich starker Kopplung größer ausfällt als eine Rate, die unter Berücksichtigung der Oszillationen von  $\langle v_z \rangle$  die Relaxation auf längeren Zeitskalen charakterisiert. Nach Abbildung 3.13 ist bei Berücksichtigung der Langzeitentwicklung von  $\langle v_z \rangle$  eine leicht wachsende oder konstante Relaxationsrate für große  $\Gamma$  zu erwarten, die am ehesten mit  $\ln \Lambda_c$  und  $\ln \Lambda_d$  vereinbar scheint. Die beste Übereinstimmung mit dem Experiment wird ebenfalls durch Coulomb-Logarithmus  $\Lambda_c$  und  $\Lambda_d$  erreicht.

In Abbildung 3.18 verdeutlicht sich nochmals die wichtige Rolle experimenteller Ergebnisse bei starker Kopplung. Die hier erzielten Resultate stellen die ersten, direkt aus Messung an nicht-idealen Plasmen extrahierten Raten dar und können somit bereits einen Hinweis auf den Verlauf des Relaxationsprozesses bei hohem  $\Gamma$  geben. Sie erlauben damit erstmals eine Beurteilung von verschiedenen theoretischen Beschreibungen des stark gekoppelten Regimes. Für weitere quantitative Aussagen und bessere Einschätzung theoretischer Vorhersagen sind jedoch insbesondere experimentelle Untersuchungen an Plasmen mit Kopplungsparametern  $\Gamma > 3$

dringend erforderlich. Mit dem oben beschriebenen Pump-Probe-Verfahren und der nicht-markovschen Beschreibung der Relaxationsdynamik wird eine solche Messung von Relaxationsraten prinzipiell auch bei höheren Kopplungsstärken ermöglicht. Um diese experimentell zu realisieren, könnte das in Kapitel 4 vorgestellte alternative Plasmaerzeugungsverfahren einen wichtigen Beitrag liefern, da es ionische Kopplungsstärken von mindestens  $\Gamma \approx 35$  ermöglicht.

Die hier ermittelten Ergebnisse stellen außerdem die erste detaillierte Studie zur Equilibrierung von Teilchen gleicher Masse im stark gekoppelten Bereich dar. Obgleich dieser Prozess von grundlegendem Interesse ist, waren bisherige Arbeiten vor allem auf die Elektron-Ion-Thermalisierung fokussiert, nicht zuletzt wegen der Relevanz dieses Prozesses für wichtige Anwendungen in dichten Plasmen. Erweiterung dieser Studien auf den Fall gleicher Massen können zukünftig durch einen quantitativen Vergleich mit Messungen an UKP direkt beurteilt werden.

Zudem zeigt sich, dass selbst im schwach gekoppelten Bereich Korrelationen die Relaxation noch signifikant beeinflussen. Somit ergeben sich auch hier weiterhin offene Fragen, die eine interessante Physik aufgrund kollektiver Effekte erwarten lassen. Wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden, bieten sich zur Klärung der Bedeutung von Korrelationen im Regime idealer Plasmen insbesondere analytische Verfahren an.

### 3.6. Kinetische Theorie der Relaxation

Im vorherigen Abschnitt wurde bereits deutlich, dass die Landau-Spitzer-Theorie selbst im schwach gekoppelten Bereich bei  $\Gamma = 0.005$  noch keine korrekte Beschreibung der Simulationsergebnisse liefern kann. Ursache dieser Abweichung ist die Vernachlässigung von Korrelationen bei der Herleitung der Stoßrate  $\gamma_s$  in Gleichung (3.9). Dieser Abschnitt widmet sich deshalb der Bestimmung der Relaxationsrate  $\gamma_z$  für den schwach gekoppelten Bereich auf der Grundlage einer komplexeren kinetischen Theorie. Ausgangspunkt ist dabei ein konvergentes Stoßintegral, das im Gegensatz zum Landau-Spitzer-Ansatz Kopplungseffekte berücksichtigt und dadurch ohne künstlich eingeführte Integrationsgrenzen auskommt. Im Unterschied zu den meisten bisherigen Untersuchungen wird das Stoßintegral nicht für Elektron-Ion-Stöße, sondern für Ion-Ion-Stöße bzw. ein Ein-Komponenten-Plasma ausgewertet. Zunächst erfolgt die Herleitung der Relaxationsrate  $\gamma(v)$  aus der kinetischen Gleichung. Da eine allgemeine Auswertung der resultierenden Gleichung für  $\gamma(v)$  überaus komplex ist, werden anschließend verschiedene Approximationsstufen für den schwach gekoppelten Bereich betrachtet und jeweils mit den Simulationsergebnissen verglichen. Zur Vereinfachung der Darstellung werden für die folgenden Rechnungen sämtliche Abstände  $r$  in Einheiten des Wigner-Seitz-Radius  $a$  und Zeiten in Einheiten der inversen Plasmafrequenz  $\omega_p^{-1}$  angegeben.

Zur Berücksichtigung der kollektiven Effekte wird die Entwicklung der Geschwindigkeitsverteilung  $\mathcal{F}_{g_1}$  durch eine Gleichung von Lenard-Balescu-Form [124, 126]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_{g_1}}{\partial t} = & \frac{1}{12} \sum_{\alpha=g_1, g_2} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} k_i \frac{\partial}{\partial v_i} \frac{V(k)^2 [1 - G(k)]}{|\varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{v})|^2} \\ & \times \int d^3 v' \delta(\mathbf{k}(\mathbf{v} - \mathbf{v}')) k_j \left( \frac{\partial}{\partial v_j} - \frac{\partial}{\partial v'_j} \right) \mathcal{F}_\alpha(\mathbf{v}', t) \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t) \end{aligned} \quad (3.72)$$

beschrieben. Die Herleitung dieser konvergenten kinetischen Gleichung ist in Anhang C im Rahmen des Klimontovich-Formalismus [144] skizziert.  $V(k)$  repräsentiert in Gleichung (3.72) die Fouriertransformation des Wechselwirkungspotentials. Das  $\mathbf{k}$ -Integral in Gleichung (3.72) entspricht in der Landau-Spitzer-Formulierung der Integration über den Stoßparameter. Eine Divergenz bei kleinen  $k$  (bzw. großen Stoßparametern) wird durch die dielektrische Funktion  $\varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{v})$  verhindert, die die Abschirmung der Ion-Ion-Wechselwirkung auf größeren Entfernungen durch benachbarte Teilchen berücksichtigt. Im Unterschied zur gewöhnlichen Lenard-Balescu-Gleichung [17, 160] besitzt Gleichung (3.72) einen Faktor mit der lokalen Feldkorrektur  $G(k)$  [124]. Diese trägt den selbst bei schwacher Kopplung vorhandenen Ionenkorrelationen auf kurzen Abständen Rechnung und unterbindet eine Divergenz bei großen  $k$  (bzw. kleinen Stoßparametern). Die Feldkorrektur ist über

$$[1 - G(k)] = \frac{k^2}{k_D^2} \left( \frac{1}{S(k)} - 1 \right) \quad (3.73)$$

mit dem Strukturfaktor verknüpft [124], wobei  $k_D = 1/\lambda_D = \sqrt{3}\Gamma$  die inverse Debye-Länge bezeichnet. Der Strukturfaktor kann mit Hilfe der Zwei-Teilchen-Korrelationsfunktion  $g(r)$  über

$$S(\mathbf{k}) = 1 + \int d^3 r (g(\mathbf{r}) - 1) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3.74)$$

berechnet werden [124]. Eine genauere Diskussion dieser Terme zur Berücksichtigung von kollektiven Effekten erfolgt später bei der konkreten Auswertung.

In Gleichung (3.72) wird auf der rechten Seite über sämtliche Plasmaspezies  $\alpha$  summiert, die die Dynamik der Verteilung  $\mathcal{F}_{g_1}$  beeinflussen. Im Experiment sind dies einerseits die Ionen im Grundzustand  $|g_2\rangle$  und andererseits auch die Ionen des beobachteten Grundzustands  $|g_1\rangle$  selbst. Da das gesamte Plasma im Gleichgewicht ist und für die Summe der beiden Spezies stets  $\mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t) + \mathcal{F}_{g_2}(\mathbf{v}, t) = \mathcal{F}_M(\mathbf{v})$  mit

$$\mathcal{F}_M(\mathbf{v}) = \left( \frac{3}{2\pi} \Gamma \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left( -\frac{3}{2} \Gamma v^2 \right) \quad (3.75)$$

gilt, können wir die Summe in Gleichung (3.72) direkt ausführen und erhalten

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_{g_1}}{\partial t} = & \frac{1}{12} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} k_i \frac{\partial}{\partial v_i} \frac{V(k)^2 [1 - G(k)]}{|\varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{v})|^2} \\ & \times \int d^3 v' \delta(\mathbf{k}(\mathbf{v} - \mathbf{v}')) k_j \left( \frac{\partial}{\partial v_j} - \frac{\partial}{\partial v'_j} \right) \mathcal{F}_M(\mathbf{v}') \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}, t). \end{aligned} \quad (3.76)$$

Diese Gleichung ist im Gegensatz zu Gleichung (3.72) linear in  $\mathcal{F}_{g_1}$ . Sie verdeutlicht nochmals, dass die Relaxation von  $\mathcal{F}_{g_1}$  durch ein thermisches Plasma getrieben wird. Da in Gleichung (3.76) nur zeitunabhängige Größen die Entwicklung von  $\mathcal{F}_{g_1}$  beeinflussen, wird letztendlich auch eine stationäre Relaxationsrate resultieren.

Um mit Hilfe der kinetischen Gleichung (3.76) die Relaxationsrate  $\gamma$  zu bestimmen, stellen wir zunächst fest, dass Gleichung (3.76) vom Typ einer Fokker-Planck-Gleichung (3.58) ist. Der Diffusionstensor ist dabei durch

$$D_{ij}(v) = \frac{1}{12} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_i k_j \int d^3v' \frac{V(k)^2 [1 - G(k)]}{|\varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{v})|^2} \delta(\mathbf{k}(\mathbf{v} - \mathbf{v}')) \mathcal{F}_M(\mathbf{v}') \quad (3.77)$$

gegeben und der Polarisationsreibungsterm durch

$$F_{\text{pol}} v_i = -\frac{1}{12} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k_i k_j \int d^3v' \frac{V(k)^2 [1 - G(k)]}{|\varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{v})|^2} \delta(\mathbf{k}(\mathbf{v} - \mathbf{v}')) \frac{\partial}{\partial v'_j} \mathcal{F}_M(\mathbf{v}'). \quad (3.78)$$

Mit Gleichung (3.75), eingesetzt in Gleichung (3.78), findet man die Relation

$$F_{\text{pol}}(v) v_i = 3\Gamma D_{ij}(v) v_j \quad (3.79)$$

und mit Gleichung (3.59) folgt für die Relaxationsrate

$$\gamma(v) v_i = -\frac{\partial}{\partial v_j} D_{ij}(v) + 3\Gamma D_{ij}(v) v_j. \quad (3.80)$$

Zur Berechnung von  $\gamma$  im thermischen Gleichgewicht muss also ein Integral der Form (3.77) gelöst werden. Durch Einsetzen der Maxwellverteilung (3.75) in Gleichung (3.77) und Ausnutzen der Deltafunktion lässt sich das  $\mathbf{v}'$ -Integral leicht lösen,

$$\left(\frac{3\Gamma}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int d^3v' \delta(\mathbf{k}(\mathbf{v} - \mathbf{v}')) e^{-\frac{3}{2}\Gamma(v')^2} = \sqrt{\frac{3\Gamma}{2\pi}} \frac{1}{k} e^{-\frac{3}{2}\Gamma(\hat{\mathbf{k}}\mathbf{v})^2}, \quad (3.81)$$

wobei  $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ . Der Diffusionstensor (3.77) vereinfacht sich damit auf

$$D_{ij}(v) = \frac{1}{12} \sqrt{\frac{3\Gamma}{2\pi}} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k \hat{k}_i \hat{k}_j \frac{V(k)^2 [1 - G(k)]}{|\varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{v})|^2} e^{-\frac{3}{2}\Gamma(\hat{\mathbf{k}}\mathbf{v})^2}. \quad (3.82)$$

Die in Gleichung (3.80) benötigte Ableitung des Diffusionstensors nach den Geschwindigkeitskomponenten erhalten wir durch Anwenden der Produktregel

$$\frac{\partial}{\partial v_j} D_{ij}(v) = (\mathcal{D}_{ij} - D_{ij}) 3\Gamma v_j. \quad (3.83)$$

Der Tensor  $\mathcal{D}$  berücksichtigt hierbei die Terme mit der Ableitung der dielektrischen Funktion nach der Geschwindigkeitskomponente parallel zu  $\mathbf{k}$ , d. h.  $v_k = \hat{\mathbf{k}}\mathbf{v}$ ,

$$\mathcal{D}_{ij} = \frac{1}{12} \sqrt{\frac{1}{3\Gamma 2\pi}} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} k \frac{\hat{k}_i \hat{k}_j}{v_k} V(k)^2 [1 - G(k)] e^{-\frac{3}{2}\Gamma v_k^2} \frac{\partial}{\partial v_k} \frac{1}{|\varepsilon(k, k v_k)|^2}. \quad (3.84)$$

Zur Lösung des  $\mathbf{k}$ -Integrals in  $D$  und  $\mathcal{D}$  wird ein Koordinatensystem mit der  $z$ -Achse in Richtung von  $\mathbf{v}$  gewählt. In diesem Koordinatensystem gilt  $v_k = v \cos \theta = v\xi$ , wobei  $\theta$  den Winkel zwischen  $\mathbf{k}$  und  $\mathbf{v}$  bezeichnet, und die Tensoren  $D$  und  $\mathcal{D}$  sind diagonal. Damit ergibt sich aus Gleichungen (3.80) und (3.83), dass nur die  $zz$ -Komponenten der Tensoren für die Berechnung der Relaxationsrate relevant sind. Zur Lösung der entsprechenden  $\mathbf{k}$ -Integrale werden Kugelkoordinaten eingeführt. Mit

$$\int_0^{2\pi} d\phi \hat{k}_z \hat{k}_z = 2\pi \xi^2 \quad (3.85)$$

sowie der mit der thermischen Geschwindigkeit  $v_{\text{th}} = 1/\sqrt{3\Gamma}$  skalierten Geschwindigkeit  $\tilde{v} = v/v_{\text{th}}$  und deren Anteil in  $\mathbf{k}$ -Richtung  $\tilde{v}_k = \tilde{v}\xi$  ergibt sich

$$D_{zz}(v) = \frac{1}{12(2\pi)^2} \sqrt{\frac{3\Gamma}{2\pi}} \frac{1}{\tilde{v}^3} \int_0^\infty dk k^3 V(k)^2 [1 - G(k)] \int_{-\tilde{v}}^{\tilde{v}} d\tilde{v}_k \frac{e^{-\frac{1}{2}\tilde{v}_k^2} \tilde{v}_k^2}{|\varepsilon(k, k\tilde{v}_k v_{\text{th}})|^2} \quad (3.86)$$

und mit Hilfe partieller Integration

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{zz} &= \frac{1}{12(2\pi)^2} \sqrt{\frac{3\Gamma}{2\pi}} \frac{1}{\tilde{v}^3} \int_0^\infty dk k^3 V(k)^2 [1 - G(k)] \\ &\quad \times \left[ \frac{2\tilde{v} e^{-\frac{1}{2}\tilde{v}^2}}{|\varepsilon(k, kv)|^2} - \int_{-\tilde{v}}^{\tilde{v}} d\tilde{v}_k \frac{e^{-\frac{1}{2}\tilde{v}_k^2}}{|\varepsilon(k, k\tilde{v}_k v_{\text{th}})|^2} \right] + D_{zz}. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Insgesamt erhält man also für die Ableitung des relevanten Diffusionskoeffizienten

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial v_z} D_{zz}(v) &= \frac{v_z}{12(2\pi)^{\frac{5}{2}}} \left( \frac{\sqrt{3\Gamma}}{\tilde{v}} \right)^3 \int_0^\infty dk k^3 V(k)^2 [1 - G(k)] \\ &\quad \times \left[ \frac{2\tilde{v} e^{-\frac{1}{2}(\tilde{v})^2}}{|\varepsilon(k, kv)|^2} - \int_{-\tilde{v}}^{\tilde{v}} d\tilde{v}_k \frac{e^{-\frac{1}{2}\tilde{v}_k^2}}{|\varepsilon(k, k\tilde{v}_k v_{\text{th}})|^2} \right] \end{aligned} \quad (3.88)$$

und mit den Gleichungen (3.80), (3.86) und (3.88) für die Relaxationsrate

$$\begin{aligned} \gamma(v) &= \frac{1}{12(2\pi)^{\frac{5}{2}}} \left( \frac{\sqrt{3\Gamma}}{\tilde{v}} \right)^3 \int_0^\infty dk k^3 V(k)^2 [1 - G(k)] \\ &\quad \times \left[ -\frac{2\tilde{v} e^{-\frac{1}{2}\tilde{v}^2}}{|\varepsilon(k, kv)|^2} + \int_{-\tilde{v}}^{\tilde{v}} d\tilde{v}_k \frac{e^{-\frac{1}{2}\tilde{v}_k^2} (1 + \tilde{v}_k^2)}{|\varepsilon(k, k\tilde{v}_k v_{\text{th}})|^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Formal lässt sich die Relaxationsrate über Gleichung (3.89) für beliebige Kopplungsstärken ausrechnen. Im Allgemeinen ist es jedoch schwierig, bei großem  $\Gamma$  die korrekten Ausdrücke für  $G(k)$  und  $\varepsilon(k, \omega)$  zu finden.

In der weiteren Auswertung von Gleichung (3.89) sollen deshalb verschiedene Näherungen betrachtet werden. Zunächst wird der einfachste Fall diskutiert, der auf den bekannten Landau-Spitzer-Ausdruck (3.9) führt. Anschließend werden kollektive Effekte für ein schwach gekoppeltes System im Gleichgewicht durch schrittweise Berücksichtigung der Terme  $\varepsilon(k, \mathbf{kv})$  und  $G(k)$  implementiert.

Für die folgenden Berechnungen setzen wir die Fouriertransformierte des Coulomb-Potentials

$$V(k) = \frac{4\pi}{k^2} \quad (3.90)$$

in Gleichung (3.89) ein. Die Konvergenz des  $k$ -Integrals in Gleichung (3.89) wird demnach durch den Integranden

$$I(\mathbf{k}) \sim \frac{1 - G(k)}{k |\varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{v})|^2} \quad (3.91)$$

bestimmt und im Folgenden näher diskutiert.

### 3.6.1. Landau-Näherung

Bei Vernachlässigung kollektiver Effekte, d. h.  $\varepsilon(k, \omega) = 1$  und  $G(k) = 0$ , vereinfacht sich die kinetische Gleichung (3.76) auf die Landau-Gleichung [156, 167]

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_{g_1}}{\partial t} = & \frac{1}{12} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} k_i \frac{\partial}{\partial v_i} V(k)^2 \\ & \times \int d^3 v' \delta(\mathbf{k}(\mathbf{v} - \mathbf{v}')) k_j \left( \frac{\partial}{\partial v_j} - \frac{\partial}{\partial v'_j} \right) \mathcal{F}_M(\mathbf{v}') \mathcal{F}_{g_1}(\mathbf{v}). \end{aligned} \quad (3.92)$$

Ohne die Kopplung der  $v'$ - und  $k$ -Abhängigkeit in der dielektrischen Funktion lassen sich die Integrale zur Berechnung der Relaxationsrate in Gleichung (3.89) getrennt ausführen. Für den  $k$ -Integranden  $I(k) \sim 1/k$  ergibt sich eine Divergenz für  $k \rightarrow 0$  (siehe Abbildung 3.20(a)) und damit auch für das gesamte  $k$ -Integral. Letzteres divergiert ebenso bei großen  $k$  logarithmisch. Wie in Abschnitt 3.1 erläutert, werden in der Landau-Spitzer-Theorie zur Verhinderung dieser Divergenzen die Integrationsgrenzen  $k_L = \lambda_L^{-1}$  und  $k_D$  festgelegt. Damit erhalten wir die Rate aus Gleichung (3.9) in skalierten Einheiten zu

$$\gamma(v) = \sqrt{6\Gamma^3} \frac{G_{LS}(\sqrt{3\Gamma/2} v)}{\sqrt{3\Gamma/2} v} \ln \Lambda \quad (3.93)$$

mit der in Gleichung (3.10) definierten Funktion  $G_{LS}$ . Der Coulomb-Logarithmus beträgt  $\ln \Lambda = \ln \left( \frac{k_L}{k_D} \right) = \ln \sqrt{\frac{3}{\Gamma^3}}$ .

Die transversal gemittelte Rate  $\gamma_z$  lässt sich leicht durch numerische Integration von Gleichung (3.93) gemäß Gleichung (3.56) berechnen. Im Grenzfall verschwindender longitudinaler Geschwindigkeit ist eine direkte analytische Auswertung möglich,

$$\lim_{v_z \rightarrow 0} \gamma_z(v_z) = \sqrt{\frac{3\Gamma^3}{2\pi}} (4 - \pi) \ln \Lambda. \quad (3.94)$$

Für die mittlere Rate ergibt sich schließlich

$$\bar{\gamma} = 2 \sqrt{\frac{3\Gamma^3}{\pi}} \left( \sqrt{2} \sinh^{-1}(1) - 1 \right) \ln \Lambda. \quad (3.95)$$

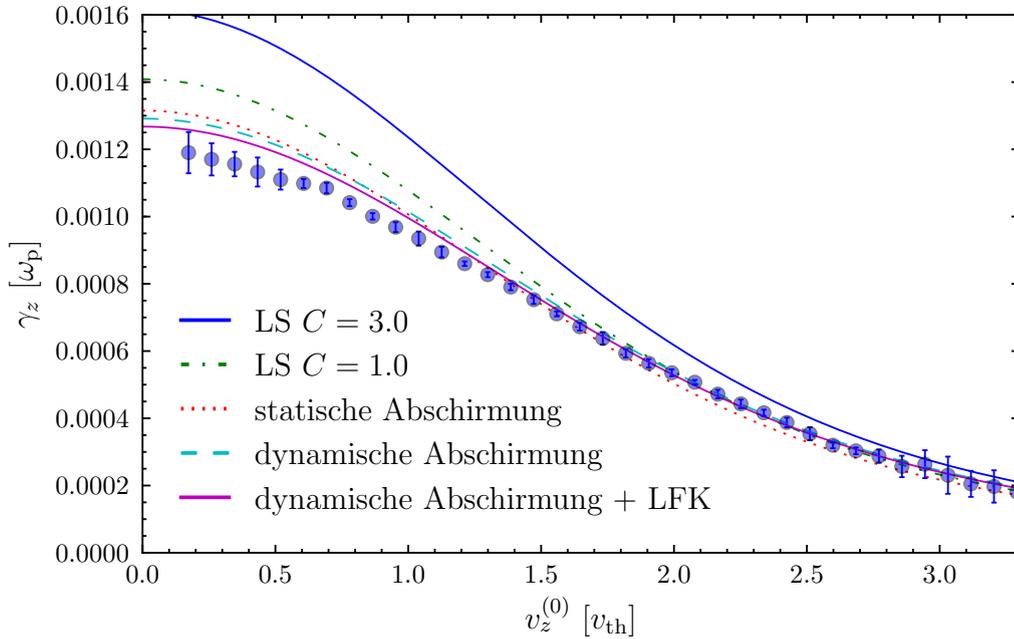


Abbildung 3.19.: Vergleich der transversal gemittelten Relaxationsrate  $\gamma_z$  zwischen MD-Simulation (o) und kinetischer Theorie (Linien) für  $\Gamma = 0.005$ . Die theoretischen Vorhersagen kommen durch die Berechnung der Rate mit Gleichung (3.89) auf verschiedenen Approximationsstufen kollektiver Effekte zustande: Landau-Spitzer-Näherung (LS, Gleichung 3.93)); statische Abschirmung (Gleichung (3.98)); dynamische Abschirmung:  $\varepsilon(k, \omega)$  gemäß Gleichung (3.100),  $G(k) = 0$ ; dynamische Abschirmung  $\varepsilon(k, \omega)$  mit lokaler Feldkorrektur (LFK)  $G(k)$  gemäß den Gleichungen (3.73), (3.74), (3.103) und (3.105).

In Abbildung 3.19 sehen wir die geschwindigkeitsabhängige Landau-Spitzer-Rate  $\gamma_z$  nach Gleichung (3.93) im Vergleich mit den MD-Resultaten für die kleinste simulierte Kopplungsstärke  $\Gamma = 0.005$ . Die Landau-Spitzer-Theorie ist in zwei Varianten dargestellt, wobei das Argument des Coulomb-Logarithmus in Gleichung (3.93) wieder durch Gleichung (3.14) gegeben ist. Wie bereits aus Abbildung 3.16 bekannt, überschätzt die Landau-Näherung in ihrer ursprünglichen Form ( $C = 3$ ) die Relaxationsrate deutlich, und auch die um den Faktor 3 kleinere Variante ( $C = 1$ ) kann keine gute Übereinstimmung mit den MD-Ergebnissen bieten. Für eine Verbesserung der theoretischen Beschreibung müssen Korrelationseffekte in die Rechnungen einbezogen werden.

### 3.6.2. Korrelationen bei schwacher Kopplung

Die Berücksichtigung kollektiver Effekte erfolgt häufig durch numerische Verfahren. So wird beispielsweise in [66] die Korrelationsfunktion  $g(r)$  mit Hilfe der so genannten

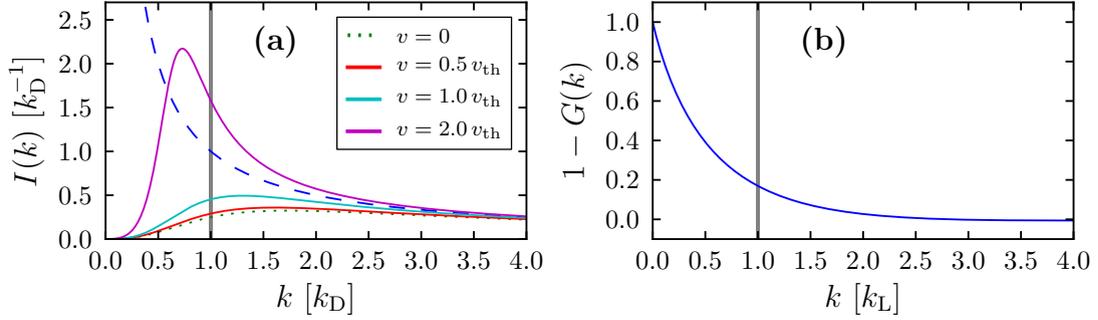


Abbildung 3.20.: (a) Darstellung des Integranden  $I(k)$  des  $k$ -Integrals aus Gleichung (3.89) an der unteren Integrationsgrenze. Für die Landau-Näherung gilt  $I(k) = 1/k$  (gestrichelt), für statische Abschirmung  $I(k) = 1/(k |\varepsilon(k)|^2)$  (gepunktet) und für dynamische Abschirmung  $I(k) = 1/(k |\varepsilon(k, kv)|^2)$  (durchgezogen). (b) Lokale Feldkorrektur  $G(k)$  gemäß den Gleichungen (3.73), (3.74) und (3.103). Die senkrechten Linien markieren jeweils die Integrationsgrenzen  $k_D$  bzw.  $k_L$  der Landau-Näherung. Durch die jeweilige Skalierung von  $k$  sind die Kurven im schwach gekoppelten Bereich unabhängig von  $\Gamma$ .

„Hypernetted-Chain“-Näherung [123] berechnet. In diesem Abschnitt wird hingegen versucht, so weit wie möglich analytisch vorzugehen. Dazu wird auf die Debye-Hückel-Theorie [123, 124] zurückgegriffen, die im schwach gekoppelten Bereich analytische Ausdrücke für die Dielektrizitätsfunktion  $\varepsilon(k, \omega)$  und die Korrelationsfunktion  $g(r)$  liefert.

Der erste Schritt zur Verbesserung der Landau-Näherung besteht in der Beachtung kollektiver Effekte durch die statische dielektrische Funktion [124]

$$\varepsilon(k, \omega) = \varepsilon(k) = 1 + \frac{k_D^2}{k^2}. \quad (3.96)$$

Gleichung (3.96) drückt die Abschirmung der Wechselwirkung eines statischen, d. h. unbewegten Testteilchens durch andere Plasmateilchen aus. Abbildung 3.20(a) veranschaulicht die Auswirkung der dielektrischen Funktion auf die Konvergenz des  $k$ -Integrals in Gleichung (3.89) bei kleinem  $k$ . Bei Berücksichtigung der Abschirmung gilt aufgrund der stärkeren Divergenz von  $|\varepsilon(k)|^2$  gegenüber  $1/k$  für den Integranden

$$\lim_{k \rightarrow 0} I(k) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{k |\varepsilon(k)|^2} = 0. \quad (3.97)$$

Zur Konvergenz des  $k$ -Integrals ist somit keine künstlich eingeführte untere Integrationsgrenze nötig.

Gleichung (3.96) eingesetzt in Gleichung (3.89) liefert bei Vernachlässigung der lokalen Feldkorrektur ( $G(k) = 0$ ) die Rate bei statischer Abschirmung

$$\gamma(v) = \sqrt{6\Gamma^3} \frac{G_{LS}(\sqrt{3\Gamma/2v})}{\sqrt{3\Gamma/2v}} \left( -\frac{1}{2} \frac{\Lambda^2}{1 + \Lambda^2} + \ln(\sqrt{1 + \Lambda^2}) \right) \quad (3.98)$$

und die entsprechende mittlere Rate

$$\bar{\gamma} = 2\sqrt{\frac{3\Gamma^3}{\pi}} \left( \sqrt{2} \sinh^{-1}(1) - 1 \right) \left( -\frac{1}{2} \frac{\Lambda^2}{1 + \Lambda^2} + \ln(\sqrt{1 + \Lambda^2}) \right). \quad (3.99)$$

Das  $k$ -Integral wurde am oberen Ende wieder bei  $b_{\min} = k_L/C$  abgeschnitten. In Gleichung (3.99) finden wir den effektiven Coulomb-Logarithmus  $\ln(\sqrt{1 + \Lambda^2})$  aus Gleichung (3.16) wieder, der in verschiedenen Arbeiten [72, 93, 159] als Ansatz zur Erweiterung der Landau-Spitzer-Theorie auf starke Kopplung genutzt wurde.

Die Berücksichtigung der statischen Abschirmung ergibt bereits eine bessere Übereinstimmung mit den MD-Ergebnissen im Vergleich zur Landau-Näherung (siehe Abbildung 3.19). Sowohl bei großen als auch bei kleinen Geschwindigkeiten  $v_z^{(0)}$  zeigen sich jedoch nach wie vor noch Abweichungen, die unter anderem durch die Vernachlässigung der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Abschirmung zustande kommen.

Im nächsten Schritt soll deshalb eine dynamische Abschirmung der Wechselwirkung berücksichtigt werden. Für die dielektrische Funktion gilt dann [124]

$$\varepsilon(k, \omega) = 1 + \frac{k_D^2}{k^2} W\left(\sqrt{3\Gamma} \frac{\omega}{k}\right), \quad (3.100)$$

wobei die  $W$ -Funktion mit dem Dawson-Integral

$$F_D(x) = e^{-x^2} \int_0^x dy e^{y^2} \quad (3.101)$$

über

$$W(z) = 1 - z\sqrt{2}F_D\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right) + i\sqrt{\frac{\pi}{2}}z e^{-\frac{z^2}{2}} \quad (3.102)$$

verknüpft ist. In Abbildung 3.20(a) ist zu sehen, dass mit der dynamischen Abschirmung das  $k$ -Integral insbesondere für hohe Geschwindigkeiten und kleine  $k$  einen signifikanten Beitrag liefert, der bei Vernachlässigung der Geschwindigkeitsabhängigkeit deutlich kleiner ausfällt. Durch die zusätzliche Geschwindigkeitsabhängigkeit von  $\varepsilon(k, \mathbf{k}\mathbf{v})$  verkompliziert sich Gleichung (3.89) erheblich, so dass an dieser Stelle eine numerische Berechnung vorgenommen wurde. Die Rate unter Berücksichtigung der dynamischen Abschirmung bringt eine geringfügige Verbesserung gegenüber der statischen Abschirmung (siehe Abbildung 3.19) und ergibt vor allem bei großen  $v_z^{(0)}$  hervorragende Übereinstimmung mit den MD-Ergebnissen.

Die letzte Stufe zur Berücksichtigung kollektiver Effekte, die hier vorgenommen werden soll, besteht in der Implementierung der lokalen Feldkorrektur  $G(k)$ . Sie wird über die Gleichungen (3.73) und (3.74) mit der Zwei-Teilchen-Korrelationsfunktion für den Limes  $\Gamma \ll 1$  [124, 198]

$$g(r) = \exp\left(-\frac{\Gamma}{r} e^{-k_D r}\right) \quad (3.103)$$

berechnet. Diese Form der Korrelationsfunktion entspricht einer nicht-linearen Debye-Hückel-Theorie und beinhaltet im Limes großer Abstände  $r$  den Ausdruck

$$\lim_{r \rightarrow \infty} g(r) = 1 - \frac{\Gamma}{r} e^{-k_D r} \quad (3.104)$$

der üblichen Debye-Hückel-Theorie [23]. Im Gegensatz zu dieser zeigt sie jedoch bei kleinen Abständen keine Divergenz, sondern den physikalisch sinnvollen Grenzwert  $\lim_{r \rightarrow 0} g(r) = 0$ .

Die resultierende Korrektur des Potentials  $1 - G(k)$  ist in Abbildung 3.20(b) dargestellt. Sie fällt kontinuierlich von Eins auf Null und verhindert damit die logarithmische Divergenz des Integrals  $I(k)$  bei großen  $k$ . Somit wird nun auch die obere künstlich eingeführte Integrationsgrenze  $k_L$  überflüssig.

Die lokale Feldkorrektur regularisiert nicht nur das  $k$ -Integral, sondern renormiert auch die dielektrische Funktion [124] gemäß

$$\varepsilon(k, \omega) = 1 + \frac{k_D^2}{k^2} [1 - G(k)] W \left( \sqrt{3\Gamma} \frac{\omega}{k} \right). \quad (3.105)$$

Unter Verwendung der Gleichungen (3.73), (3.74), (3.101) bis (3.103) und (3.105) wird die Rate  $\gamma$  nach Gleichung (3.89) wieder durch numerische Integration bestimmt. Damit resultiert wiederum eine verbesserte Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen gegenüber der dynamischen Näherung (siehe Abbildung 3.19). Bei kleinen  $v_z^{(0)}$  zeigen sich jedoch weiterhin Abweichungen zwischen Theorie und Simulation. Diese können durch die Vernachlässigung dynamischer Effekte in  $G(k)$  verursacht werden. Um die bereits erreichte sehr gute Beschreibung der Simulationsergebnisse weiter zu verbessern, wäre an dieser Stelle demnach die Herleitung einer kinetischen Gleichung analog zu Gleichung (3.72) unter Einbeziehung der dynamischen lokalen Feldkorrektur  $G(k, \omega)$  [124] denkbar.

Zusammenfassend zeigt Abbildung 3.21 Simulationsergebnisse zur Geschwindigkeitsabhängigkeit der Rate für verschiedene Kopplungsstärken  $\Gamma$  im Vergleich mit der theoretischen Beschreibung bei vollständiger Berücksichtigung kollektiver Effekte in Form von  $\varepsilon(k, \omega)$  und  $G(k)$ . Für kleine Kopplungsstärken zeigt die Theorie eine hervorragende Übereinstimmung mit den numerischen Daten. Mit wachsendem  $\Gamma$  verlieren die zugrundeliegenden Ausdrücke für  $\varepsilon(k, \omega)$  und  $G(k)$  in Gleichungen (3.103) und (3.105) ihre Gültigkeit, und die Theorie ist nicht in der Lage, die sich ändernde Geschwindigkeitsabhängigkeit der Rate wiederzugeben. Überraschenderweise liefert sie jedoch die richtige Größenordnung von  $\gamma_z$  selbst noch bei mäßigen Kopplungsstärken  $\Gamma \lesssim 1$ , ganz im Gegensatz zur Landau-Spitzer-Rate (siehe Abbildung 3.16).

Aus den geschwindigkeitsabhängigen Raten auf den verschiedenen Näherungsstufen lassen sich wieder über Gleichung (3.68) mittlere Raten berechnen, um die Abhängigkeit von  $\Gamma$  zu verdeutlichen. Allerdings sind die feinen Unterschiede zwischen den verschiedenen Näherungsstufen anhand von  $\bar{\gamma}$  bei doppelt logarithmischer Auftragung wie in Abbildung 3.18 nicht zu erkennen. Hierfür bietet sich deshalb vielmehr die Darstellung des effektiven Coulomb-Logarithmus an, den man nach

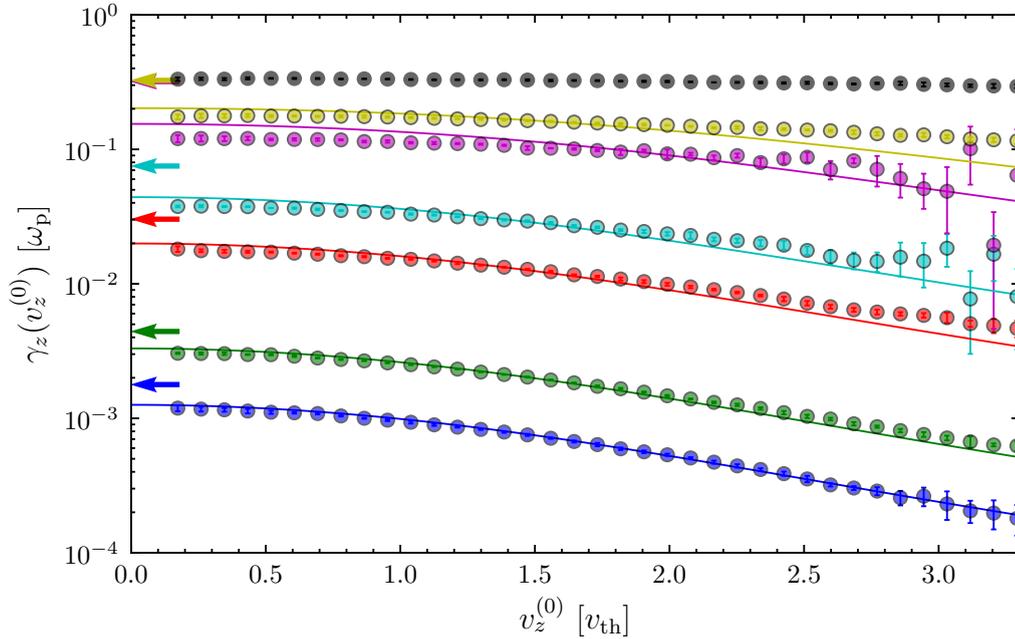


Abbildung 3.21.: Transversal gemittelte Relaxationsrate  $\gamma_z$  als Funktion der bei  $v_z^{(0)}$  lokalisierten Störung von  $f_{g1}$  für verschiedene Kopplungsstärken  $\Gamma$ . Die Kurven entsprechen von unten nach oben  $\Gamma = 0.005, 0.01, 0.046, 0.1, 0.464, 1, 4.642$ , wobei die Linien die Lösungen der kinetischen Theorie in Gleichung (3.89) für den Fall schwacher Kopplung repräsentieren und die Symbole die Simulationsergebnisse wiedergeben. Die Pfeile auf der  $y$ -Achse markieren jeweils den entsprechenden Grenzwert von  $\gamma_z$  für  $v_z^{(0)} \rightarrow 0$  in der Landau-Näherung (Gleichung (3.94)).

Gleichung (3.71) durch Division der mittleren Rate  $\bar{\gamma}$  mit  $\Gamma^{3/2}$  erhält. In Abbildung 3.22 ist zu sehen, dass die unterschiedliche Geschwindigkeitsabhängigkeit der verschiedenen Näherungen durch die Mittelung weitgehend ausgeglichen wird, so dass nahezu jeweils der gleiche Coulomb-Logarithmus resultiert. Bei schwacher Kopplung weisen alle Ergebnisse die gleiche Skalierung wie die Landau-Spitzer-Theorie auf. Erst durch Berücksichtigung kollektiver Effekte wird jedoch die unphysikalische Divergenz für  $\Gamma \gtrsim 1$  behoben und  $\ln \Lambda$  konvergiert für große  $\Gamma$  gegen Null. Bei der mittleren Rate  $\bar{\gamma}_z$  führt die Beachtung statischer Abschirmung bereits zu einer guten Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen bei schwacher Kopplung. Die beste Beschreibung der Simulationsdaten wird jedoch erwartungsgemäß von den vollen kinetischen Rechnungen unter Berücksichtigung dynamischer Abschirmung und lokaler Feldkorrektur erreicht. Dabei fällt auf, dass die Übereinstimmung mit steigender Kopplungsstärke bis  $\Gamma \approx 1$  sogar noch zuzunehmen scheint, obwohl die kinetische Theorie in diesem Bereich bereits ihre Gültigkeit verliert. Anhand von Abbildung 3.21 lässt sich jedoch erkennen, dass Abweichungen zwischen Simulation und kinetischer Theorie bereits bei deutlich niedrigerem  $\Gamma$  auftreten und die Mit-

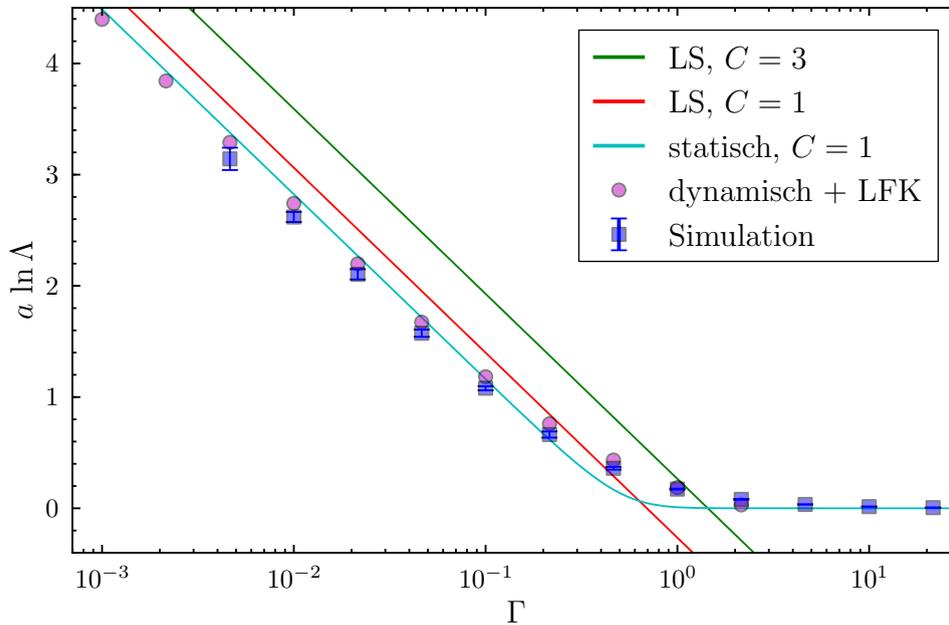


Abbildung 3.22.: Coulomb-Logarithmus  $\ln \Lambda$  als Funktion der Kopplungsstärke  $\Gamma$  in der Landau-Spitzer-Theorie (LS) nach Gleichung (3.15), bei statischer Abschirmung nach Gleichung (3.98) und bei dynamischer Abschirmung mit lokaler Feldkorrektur (LFK).

teilung über die Geschwindigkeit für die vermeintliche Übereinstimmung bei  $\Gamma \approx 1$  verantwortlich ist. Um anhand eines Vergleichs mit der Simulation die Kopplungsstärke abzuschätzen, bei der die kinetische Theorie zusammenbricht, ist folglich eine geschwindigkeitsaufgelöste Untersuchung der Relaxation erforderlich.

Ein Fit von Gleichung (3.71) mit dem effektiven Coulomb-Logarithmus für den schwach gekoppelten Bereich nach Gleichung (3.15) an die Ergebnisse der vollen Rechnung unter Berücksichtigung dynamischer Abschirmung und lokaler Feldkorrektur liefert die Fitparameter  $a = 0.5$  und  $C = 0.3$ , die in Abschnitt 3.5.2 zum Vergleich der in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse mit verschiedenen effektiven Coulomb-Logarithmen genutzt wurden.

Insgesamt konnten wir in diesem Abschnitt sehen, dass auch bei geringen Kopplungsstärken Korrelationen noch einen signifikanten Einfluss auf die Relaxationsrate haben. Hierbei spielen insbesondere dynamische Eigenschaften des Plasmas eine Rolle, deren Vernachlässigung, wie in der Landau-Spitzer-Theorie, nur eine approximative Beschreibung der Dynamik erlaubt. Als besonders vorteilhaft erweist sich an der Untersuchung von Relaxationsprozessen bei schwacher Kopplung, dass weitgehend analytische Methoden eingesetzt werden können. Damit stellt das Regime idealer Plasmen ein optimales Erprobungsfeld für die Berücksichtigung von Korrelationseffekten in kinetischen Theorien dar.

Um experimentell auch niedrigere Kopplungsstärken zu erforschen, wäre eine Erhöhung der Iontemperatur durch Laserheizen denkbar. Dies würde zudem eine experimentelle Bestimmung der Geschwindigkeitsabhängigkeit ermöglichen: Bei den bisher realisierten Kopplungsstärken  $\Gamma \approx 1 - 3$  liegt die Breite  $\sigma$  des Populationstransfers zwischen den beiden Grundzuständen  $|g_1\rangle$  und  $|g_2\rangle$  im Bereich der thermischen Geschwindigkeit,  $\sigma \approx v_{\text{th}}$ . Da mit steigender Temperatur die Geschwindigkeitsverteilung immer breiter wird, der Bereich des Populationstransfers jedoch unabhängig von der Temperatur und nur durch die Lasereigenschaften bestimmt ist, wird relativ gesehen der modifizierte Anteil der Geschwindigkeitsverteilung immer geringer, d. h.  $\sigma \ll v_{\text{th}}$ . Eine Variation der Pumpverstimmungen  $\Delta_{\text{pp}}$  erlaubt verschiedene Bereiche der Geschwindigkeitsverteilung zu modifizieren und anschließend die unterschiedliche Relaxationsdynamik zu messen.

Ebenso wichtig wie eine Erhöhung der Iontemperatur ist auch die Erzeugung deutlich kälterer Ionen, um weiter in den stark gekoppelten Bereich vorzustoßen und an die Ergebnisse aus Abschnitt 3.5 anzuknüpfen. Hierzu kann das im nächsten Kapitel vorgestellte neue Herstellungsverfahren für UKP einen wichtigen Beitrag leisten, da es zu einer erheblichen Steigerung der ionischen Kopplungsstärke führt.

## 4. Erzeugung stark gekoppelter Ionen

Bei der Diskussion von Relaxionsprozessen im vorherigen Kapitel wurde bereits deutlich, dass experimentelle Ergebnisse zur Plasmadynamik im stark gekoppelten Bereich von großer Bedeutung für die Beurteilung der vorhandenen Theorien sein können. Darüber hinaus existiert generell ein großes Interesse an der Untersuchung grundlegender Eigenschaften stark gekoppelter Coulomb-Systeme. Mit den derzeit üblichen Methoden zur UKP-Herstellung ist jedoch die Kopplungsstärke sowohl der Elektronen als auch der Ionen auf den schwach bis mäßig gekoppelten Bereich ( $\Gamma_e \lesssim 0.2$ ,  $\Gamma_i \lesssim 3$ ) beschränkt. Zur Überwindung dieser Grenze wird in diesem Kapitel ein neues Verfahren zur Plasmaerzeugung vorgeschlagen, das mit Hilfe von Rydberg-Atomen Korrelationen im atomaren Gas noch vor der Ionisierung der Atome einführt. Auf diese Weise kann mit geringem zusätzlichem Aufwand die ionische Korrelationsstärke<sup>1</sup>  $\Gamma$  um mindestens eine Größenordnung gesteigert werden.

Nach einer genaueren Erläuterung der Probleme bei der derzeit üblichen Methode zur UKP-Erzeugung in Abschnitt 4.1 wird in Abschnitt 4.2 der Grundgedanke des neuen Schemas skizziert, wobei die speziellen Eigenschaften von Rydberg-Atomen besonders hervorgehoben werden. In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Schritte zur Umsetzung des neuen Verfahrens und die jeweilige theoretische Beschreibung diskutiert: Abschnitt 4.3 beschäftigt sich mit der Erzeugung des korrelierten Rydberg-Systems, in Abschnitt 4.4 wird die Ionisierung der Atome behandelt, und in Abschnitt 4.5 wird die anschließende Plasmarelaxation beschrieben. Im letzten Abschnitt 4.6 werden schließlich verschiedene Varianten des neuen Anregungsschemas verglichen und die Kontrolle der Kopplungsstärke  $\Gamma$  diskutiert.

### 4.1. Konventionelle Erzeugung ultrakalter Plasmen

Die übliche kontrollierte Plasmaherstellung wurde bereits in Abschnitt 1.1 zusammengefasst. Die für uns hier relevante Phase dieses Prozesses ist die Relaxation der Ladungen unmittelbar nach der Photoionisation der kalten Atome. Während dieser Relaxation kommt es zu einem starken Temperaturanstieg, dem so genannten "Korrelationsheizen" oder auch "unordnungsinduzierten" Heizen (*disorder induced heating*, DIH) [95, 142, 178, 191, 207]. Der Grund für das Aufheizen liegt in der durch die Ionisation verursachten plötzlichen Änderung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen. Da die Grundzustandsatome vor der Ionisierung nur vernachlässigbare

---

<sup>1</sup>Wenn nicht explizit anders angegeben, beziehen sich in diesem Kapitel wiederum alle Parameter auf die Ionen

Wechselwirkungen aufweisen, bestehen keinerlei räumliche Korrelationen im atomaren Gas. Dementsprechend sind die Ionen und Elektronen direkt nach der Ionisation zunächst in einem völlig ungeordneten Zustand. Das schlagartige Einsetzen der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den geladenen Teilchen führt nun aber zu einer Ausbildung von Korrelationen. Die Ladungen werden im attraktiven oder repulsiven Potential ihrer benachbarten Teilchen beschleunigt, wodurch es zu einer Umwandlung von potentieller Energie  $E_{\text{pot}}$  in kinetische Energie  $E_{\text{kin}}$  kommt [94, 95, 191]. Die Gesamtenergie des Plasmas  $E = E_{\text{kin}} + E_{\text{pot}}$  bleibt dabei erhalten, so dass sich die Energiebilanz vor und nach dem Korrelationsheizen auf

$$\begin{aligned} t = 0 \quad (\text{vor DIH}) : & \quad E_{\text{pot}} = 0, & \quad E_{\text{kin}} = E, \\ t > \omega_p^{-1} \quad (\text{nach DIH}) : & \quad E_{\text{pot}} = -E_k, & \quad E_{\text{kin}} = E + E_k \end{aligned}$$

beläuft. Die Korrelationsenergie  $E_k > 0$  repräsentiert hierbei die potentielle Energie, die das System aufgrund der Ausbildung räumlicher Korrelationen gewinnt.

Während des Aufheizens ist das System in einem Nicht-Gleichgewichtszustand, so dass die Temperatur in dieser Phase nur als effektive Größe proportional zur kinetischen Energie der Teilchen definiert werden kann. Die Entwicklung der effektiven Ionentemperatur in Abbildung 4.1 veranschaulicht das Korrelationsheizen. Innerhalb einer inversen ionischen Plasmafrequenz  $\omega_p^{-1} \approx 1 \mu\text{s}$  steigt die Temperatur auf  $T \approx 1 \text{ K}$  und limitiert damit die erreichbaren ionischen Korrelationen auf  $\Gamma \lesssim 3$ . Neben dem typischen Verlauf des DIH zeigt Abbildung 4.1 exemplarisch auch die hervorragende Übereinstimmung der theoretischen Beschreibung mit experimentellen Daten. Das ionische Korrelationsheizen ist in vielen Experimenten gemessen [25, 70, 139, 142, 207, 243] und durch zahlreiche theoretische Arbeiten [94, 95, 142, 178, 191, 193, 207] untersucht worden. Wegen der deutlich schnelleren Elektronendynamik auf der Zeitskala der inversen elektronischen Plasmafrequenz  $\omega_{p,e}^{-1} = \sqrt{m_e/m_i} \omega_p^{-1}$  sind Messungen des elektronischen Korrelationsheizens schwieriger und experimentelle Daten bisher nicht verfügbar. Numerische Untersuchungen zeigen jedoch einen analogen Verlauf zum ionischen Korrelationsheizen auf der kürzeren Zeitskala von  $\omega_{p,e}^{-1}$  [151, 152, 178].

In einigen Experimenten konnte auch ohne kontrollierte Laserionisation eine spontane Plasmabildung aus einem Gas hoch angeregter Rydberg-Atome oder Moleküle beobachtet werden [165, 188, 189, 227, 267, 273]. Der Ionisationsprozess wird in diesen Systemen durch Schwarzkörperstrahlung und Stöße der (angeregten) Atome gezündet (*Penning-Ionisation*) und anschließend lawinenartig durch Elektron-Rydberg-Kollisionen fortgesetzt [202]. Die Dynamik ist bei dieser Plasmaentstehung wesentlich komplizierter und weniger intensiv untersucht. Nach wie vor wird aber durch das plötzliche „Einschalten“ der starken Coulomb-Wechselwirkung das Plasma in einem Zustand außerhalb des Gleichgewichts erzeugt. Wegen der Unsicherheiten und der erschwerten Kontrolle des Ionisationsvorgangs kommt dieses Verfahren experimentell seltener zum Einsatz.

In den letzten Jahren sind verschiedene Vorschläge gemacht worden, um die Korrelationen zu erhöhen und die Limitierung auf schwach und mäßig gekoppelte Plasmen zu überwinden. Prinzipiell lassen sich diese Ansätze in zwei Kategorien einteilen:

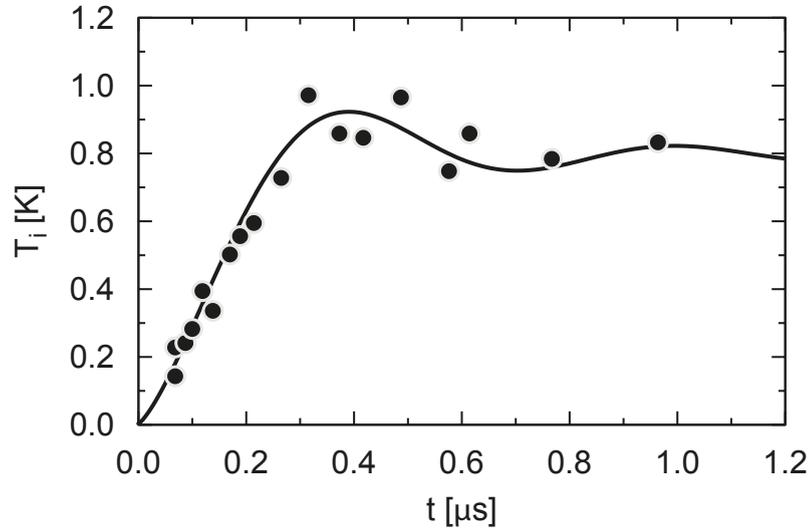


Abbildung 4.1.: Entwicklung der effektiven Iontemperatur  $T$  im Anschluss an die Photoionisation. Der Prozess des DIH wird erfolgreich durch Hybrid-MD-Rechnungen (Linie) beschrieben, die ausgezeichnete Übereinstimmung mit den experimentellen Daten (Symbole) aufweisen, aus [207].

- Bei Anwendung des üblichen Verfahrens zur Plasmaherstellung kann durch eine zusätzliche Kühlung der Teilchen während oder nach dem Relaxationsheizen der starken Temperaturzunahme entgegengewirkt werden.
- Ein alternatives Erzeugungsschema verhindert oder reduziert das Korrelationsheizen von vornherein, indem bereits vor der Ionisation ein gewisser Grad an "Ordnung" im atomaren Gas erzeugt wird [142]. Dadurch wird die Energiebilanz (4.1) dahingehend modifiziert, dass bei  $t = 0$  bereits  $E_{\text{pot}} = E_{\text{k}}(0) < 0$  gilt. Dadurch wird bei der vollständigen Ausbildung der Korrelationen nur noch der geringere Teil  $E_{\text{k}} - E_{\text{k}}(0)$  in kinetische Energie umgewandelt.

In beiden Kategorien bieten sich deutlich bessere Perspektiven zur Steigerung der ionischen Kopplungsstärke, wie im Folgenden erläutert werden soll.

Ein Vorschlag aus der ersten Kategorie zur Steigerung der ionischen Korrelationen nutzt zusätzliche Laserkühlung der Plasmaionen und sagt damit das Erreichen kristallartiger Ionenstrukturen vorher [138, 203]. Ein großer Vorteil dieses Verfahrens liegt in seinem geringen technischen Aufwand, da bei Einsatz geeigneter Atomsorten die Laser der magneto-optischen Falle auch direkt für die Kühlung der Ionen genutzt werden können. Als problematisch gestalten sich hierbei allerdings die durch das Korrelationsheizen und die Plasmaexpansion verursachten relativ hohen ionischen Geschwindigkeiten, die die Ionen aufgrund des Doppler-Effekts aus dem Absorptionsbereich der Kühlungslaser treiben.

Eine Kühlung der Elektronen lässt sich durch eine Beimischung von Rydberg-Atomen erreichen [266]. Inelastische Stöße zwischen Elektronen und Rydberg-Atomen, die eine An- bzw. Abregung oder Ionisation letzterer zur Folge haben, führen zu

einem Austausch der entsprechenden Bindungsenergie und der kinetischen Energie der freien Elektronen (siehe Kapitel 2). Eine numerische Analyse [201] zeigt, dass eine Kühlung nur bei Nutzung hoch angeregter Rydberg-Atome mit Hauptquantenzahl  $n \gtrsim n_{\text{Fh}}$  erfolgt. Diese Zustände liegen oberhalb des kinetischen Flaschenhalses der Bindungsenergie  $E_{\text{Fh}} = -\mathcal{R}/n_{\text{Fh}}^2$ , wodurch eine Ionisierung wahrscheinlicher als eine Rekombination ist (siehe Abschnitt 2.3.2). Die zur Überwindung der Ionisationsschwelle nötige Energie wird den freien Elektronen entzogen und senkt somit deren Temperatur. Rydberg-Zustände mit  $n < n_{\text{Fh}}$  sind bereits so stark gebunden, dass eine direkte Ionisation durch freie Elektronen äußerst unwahrscheinlich ist und eine Kollision in der Regel zur Abregung des Atoms und damit sogar zu einer zusätzlichen Erhitzung der Elektronen führt. Eine deutliche Kühlung scheint jedoch nur mit einem großen Atom-Ionenanzahl-Verhältnis für kurze Zeiten möglich, die unterhalb des experimentellen Auflösungsvermögens liegen [201].

Die Kühlung der Elektronen über zusätzliche Rydberg-Atome stellt bislang den einzig existierenden Vorschlag zur Steigerung der elektronischen Kopplungsstärke dar. In Abschnitt 2.4 wurde bereits bei der theoretischen Analyse eines Zwei-Komponenten-Plasmas gezeigt, dass ein Ansatz aus der zweiten Kategorie, der eine Verringerung des Korrelationsheizens durch geordnete Anfangszustände anstrebt, das starke Aufheizen der Elektronen nicht verhindern kann. Dies ist dem ungleichen Massenverhältnis zwischen Elektronen und Ionen geschuldet, das eine nahezu vollständige Übertragung der Korrelationsenergie aus der Elektron-Ion-Wechselwirkung auf die kinetische Energie der Elektronen zur Folge hat. Um das Aufheizen zu verringern, wäre demnach eine Anfangskonfiguration nahe an oder mit der maximalen Korrelationsenergie nötig. Durch den attraktiven Charakter der Elektron-Ion-Wechselwirkung entspricht eine solche Konstellation jedoch rekombinierten Atomen und ist damit kein stabiler Plasmazustand. Insgesamt resultiert daraus eine Limitierung der elektronischen Kopplungsstärke auf  $\Gamma_e \lesssim 0.5$ .

Die Ionen sind hingegen nur dem Korrelationsheizen durch die Ion-Ion-Wechselwirkung ausgesetzt, dessen repulsiver Charakter stabile Plasmazustände erlaubt. Somit ist die Einführung räumlicher Korrelationen zwischen den Atomen vor der Ionisierung ein vielversprechender Ansatz zur Steigerung der ionischen Kopplungsstärke. Da die Wechselwirkung zwischen den Grundzustandsatomen sehr gering ausfällt, bedarf es zur Induzierung der Korrelationen allerdings komplexerer Herstellungsprozesse.

In [191] wird zu diesem Zweck die Verwendung fermionischer Atome vorgeschlagen. Aufgrund der Pauli-Blockade können diese Atome unterhalb der Fermi-Temperatur keine dicht benachbarten Positionen einnehmen. Für typische UKP-Dichten wären dazu jedoch extrem tiefe Atom-Temperaturen im Bereich von  $T \lesssim 10 \mu\text{K}$  nötig, die nur mit deutlich höherem experimentellen Aufwand [69] erreicht werden können als die in UKP-Experimenten üblichen  $T \sim \text{mK}$ . Um die Fermi-Temperatur auf diese Größenordnung zu erhöhen, wäre zwar eine Vergrößerung der Dichte denkbar. Dabei stößt man jedoch schnell an die Kapazitätsgrenzen von üblichen Atomfallen. Zudem führen hohe Dichten zu kürzeren dynamischen Zeitskalen und verringern so den Vorteil der langsamen, experimentell zugänglichen Dynamik in UKP.

Ein ähnlicher Ansatz zur Verhinderung dicht benachbarter Ionenpaare wird in [95] verfolgt. Korrelationen im atomaren System werden durch die Anregung der Atome in

einen Rydberg-Zustand erzeugt. Die anschließend einsetzende Penning-Ionisation soll dabei dicht benachbarte Rydberg-Paare verhindern, so dass der minimale Abstand der verbleibenden Rydberg-Atome auf mindestens das Zweifache des entsprechenden Rydberg-Radius limitiert wird. Eine Ionisation dieser korrelierten Rydberg-Atome könnte dann zu einem Plasma mit höherer Kopplungsstärke führen. Bei diesem Verfahren muss man jedoch mit einer ähnlich unkontrollierten Plasmaentstehung rechnen wie bei der oben beschriebenen spontanen Evolution eines Rydberg-Gases in ein UKP. Die durch Penning-Ionisation erzeugten Elektronen lösen eine lawinenartige Ionisation der restlichen Rydberg-Atome aus. Um die Korrelationsstärke zu steigern, müssten diese unkorreliert erzeugten Ladungen rasch aus dem System extrahiert werden, wodurch sich weitere technische Schwierigkeiten ergeben. Selbst wenn die Kontrolle dieser Prozesse gelänge, so ist die resultierende Korrelationslänge mit  $\sim 1 \mu\text{m}$  relativ gering. Eine besonders effektive Steigerung der Kopplungsstärke im Plasma wird man nur erzielen, wenn die im atomaren Gas induzierte Korrelationslänge von der gleichen Größenordnung ist wie der mittlere Ion-Ion-Abstand. Dazu wären bei dieser Herstellungsvariante wiederum hohe Dichten im Bereich von  $\rho \approx 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  nötig, die schwer realisierbar sind und zu einer schnelleren Dynamik führen.

Eine extreme Verstärkung der Korrelationen kann durch Anordnen der Atome in einem optischen Gitter erreicht werden [95, 205]. Die Konfiguration mit der geringsten potentiellen Energie der anschließend erzeugten Ionen ist dabei die *bcc*-Struktur [43]. Die Größe der optischen Gitter wird jedoch durch die Breite der Laserprofile und durch die Intensität der erzeugenden Laser beschränkt, so dass die typische Zahl der Gitterplätze weit unter der für ein Plasma erforderlichen Anzahl an Ionen liegt.

Die bisherigen Konzepte zur Überwindung der limitierten Kopplungsstärke weisen also verschiedene Defizite auf und bedürfen aufwendiger Techniken. Dementsprechend ist bis heute noch keines dieser Verfahren experimentell umgesetzt worden und die Suche nach einer geeigneten Alternative zur Erzeugung stark gekoppelter UKP - dem „heiligen Gral“ der ultrakalten Plasmaphysik [142] - geht weiter.

In diesem Kapitel wird deshalb eine Variante zur Reduzierung des ionischen DIH vorgestellt, die im Gegensatz zu anderen Vorschlägen nur einen geringen zusätzlichen experimentellen Aufwand erfordert und auf bewährten Techniken basiert. Ausgangspunkt zur Plasmaherstellung ist wie in [95] die Anregung der Grundzustandsatome in einen Rydberg-Zustand. Die dazu nötige selektive Rydberg-Anregung wird seit Jahren in diversen Experimenten praktiziert (z. B. [5, 89, 120, 211]). Korrelationen entstehen jedoch nicht durch die reine Größe der Rydberg-Atome [95], sondern durch ihre starke Wechselwirkung, die zu der so genannten Rydberg-Blockade führt. Auswirkungen dieser Blockade sind in zahlreichen Experimenten gemessen worden [87, 120, 168, 244, 260, 264, 268]; die resultierende Korrelationslänge von einigen  $\mu\text{m}$  ist zum einen deutlich größer als bei den oben beschriebenen Vorschlägen und liegt zum anderen im Bereich des interionischen Abstands in typischen UKP-Experimenten. Eine detailliertere Darstellung der Grundzüge dieses neuen Erzeugungsschemas erfolgt im nächsten Abschnitt.

## 4.2. Plasmaerzeugung aus einem Ensemble korrelierter Rydberg-Atome

Die in diesem Kapitel vorgeschlagene Reduzierung des Korrelationsheizens basiert auf der kontrollierten Anregung des atomaren Ensembles in einen Rydberg-Zustand noch vor der Ionisation zur Plasmaherstellung. Da die besonderen Eigenschaften der Rydberg-Atome hierbei ausschlaggebend für die Ausbildung der nötigen Korrelationen sind, sollen sie zunächst im Folgenden zusammengefasst werden.

Als Rydberg-Atome werden hoch angeregte Atome mit Energiequantenzahlen  $n$  im Bereich von  $n \gtrsim 40$  bezeichnet [89]. Einer der offensichtlichsten Unterschiede zu Grundzustandsatomen liegt in ihrer enormen Größe. Die Ausdehnung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Valenzelektrons skaliert gemäß  $\langle r \rangle \sim n^2$ . Ein Atom im Zustand  $n = 100$  erreicht mit  $r \approx 500$  nm also bereits mesoskopische Größenskalen. Die Lebensdauer verhält sich wie  $\tau \sim n^3$ , weshalb wir bei  $n = 100$  mit  $\tau \approx 1.5$  ms Zeitskalen erhalten, die experimentell ohne Schwierigkeiten aufgelöst werden können. Aufgrund der schwachen Bindung des hoch angeregten Valenzelektrons sind Rydberg-Atome leicht durch statische Felder beeinfluss- und ionisierbar. Die weite Entfernung des Valenzelektrons vom ionischen Kern führt außerdem zu einem starken Dipolmoment  $p_{\text{ryd}}$ , das gemäß  $p_{\text{ryd}} \sim n^2$  skaliert. Für viele Anwendungen spielt die daraus resultierende starke Wechselwirkung zwischen Rydberg-Atomen die zentrale Rolle. Bei kurzen interatomaren Abständen  $R$  besitzt die Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung einen Dipol-Dipol-Charakter und skaliert gemäß  $V_{\text{dd}} \sim R^{-3}$ . Jenseits eines zustandsabhängigen kritischen Abstands  $R_c$  nimmt die Wechselwirkung Van-der-Waals-Charakter an, wodurch sich die Abstandsabhängigkeit auf  $V_{\text{vdw}} \sim R^{-6}$  ändert [232]. Die Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung ist präzise einstellbar und lässt sich um mehrere Größenordnungen variieren, da sie von der Hauptquantenzahl wie  $V_{\text{dd}} \sim n^4$  bzw.  $V_{\text{vdw}} \sim n^{11}$  abhängt [89]. Im Vergleich zu Grundzustandsatomen erhöht sich damit die Wechselwirkung um mehr als zwölf Größenordnungen (siehe Abbildung 4.2).

Eine Vielzahl von experimentellen und theoretischen Arbeiten hat in jüngster Vergangenheit die Erzeugung und Kontrolle von korrelierten Rydberg-Systemen intensiv untersucht und zu einer Vielfalt an grundlegenden Erkenntnissen und Einsatzmöglichkeiten geführt. Der Fokus geht dabei weit über die reine Atomphysik hinaus und erstreckt sich von der Untersuchung von Anregungstransport in Molekülen [12, 15, 281] über Anwendungen in der Quanteninformation [232, 277] und Quantenoptik [14, 211, 239, 241] bis hin zur Simulation quantenmechanischer Spinmodelle [162, 274, 276] und Erzeugung exotischer Materiezustände [58, 97, 121].

Im Zusammenhang mit der in diesem Kapitel verfolgten Induzierung von räumlichen Korrelationen im atomaren Gas ist neben der langen Lebensdauer vor allem die starke Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung von Interesse. Sie bewirkt bei der Laseranregung eines Ensembles von Grundzustandsatomen in einen Rydberg-Zustand einen Blockade-Effekt, der gewöhnlich als Rydberg-(Dipol)blockade bezeichnet wird [173]. Dabei verschiebt die starke Wechselwirkung eines bereits angeregten Rydberg-Atoms die Energieniveaus dicht benachbarter Grundzustandsatome, so dass sich diese nicht

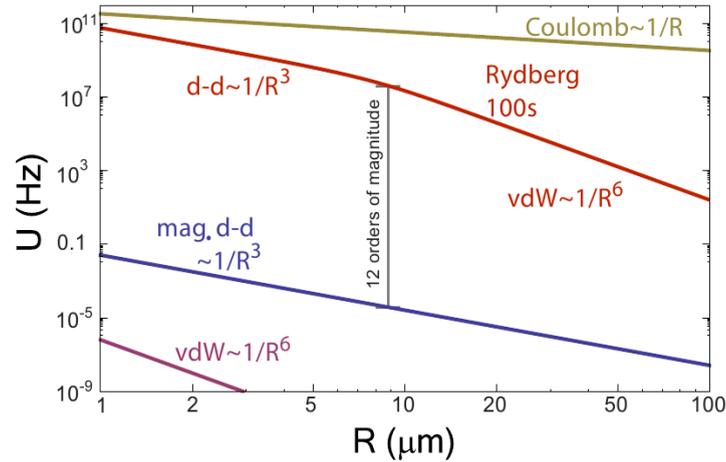


Abbildung 4.2.: Vergleich der abstandsabhängigen Wechselwirkungen von Grundzustandsatomen, von Rydberg-Atomen im Zustand 100s und von Ionen, aus [232].

mehr in Resonanz mit dem Anregungslaser befinden - der Rydberg-Zustand dieser Atome ist blockiert. Mit wachsender Distanz vom Rydberg-Atom nimmt die Wechselwirkung jedoch ab. Grundzustandsatome, die weiter entfernt sind als der Blockaderadius  $r_{\text{block}}$ , befinden sich dann wieder in Resonanz mit dem Laser und können angeregt werden. Für die in dieser Arbeit betrachteten Parameter liegt der Blockaderadius im Bereich einiger  $\mu\text{m}$ .

Der Blockadeffekt wurde erstmals im Jahr 2001 theoretisch vorhergesagt [173] und 2004 experimentell beobachtet [244, 260]. Seitdem sind in vielen anderen Experimenten die Auswirkungen der Blockade gemessen worden, sowohl für große Ensemble von Atomen [120, 168, 268] als auch für einzelne Atompaare, die in dicht benachbarten Fallen gefangen wurden [87, 264]. Ein Überblick zum Stand der aktuellen Forschung findet sich in [60, 200, 232].

Als Beispiel für die experimentelle Beobachtung der Blockade sind in Abbildung 4.3 Ergebnisse eines der ersten beiden Experimente [244] aus dem Jahr 2004 dargestellt. In diesem Experiment wurde die Rydberg-Dichte gemessen, die man bei Laseranregung eines atomaren Ensembles der Dichte  $\rho_{\text{at}}$  erhält. Ohne Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung würde man dabei eine lineare Zunahme der Rydberg-Dichte  $\rho_{\text{ryd}}$  mit steigender Dichte der Grundzustandsatome  $\rho_{\text{at}}$  erwarten. Für kleine Dichten  $\rho_{\text{at}}$  lässt sich ein solcher Zusammenhang zumindest für den Rydberg-Zustand 62s in Abbildung 4.3 erkennen. Mit wachsendem  $\rho_{\text{at}}$  kommt es jedoch zu einer Sättigung der erzeugten Rydberg-Dichte  $\rho_{\text{ryd}}$ . Diese wird durch die Dipol-Blockade verursacht, die die maximale Rydberg-Dichte  $\rho_{\text{ryd}}^{\text{max}}$  limitiert und zu einer Skalierung der Form  $\rho_{\text{ryd}}^{\text{max}} \sim r_{\text{block}}^{-3}$  führt. Da der Blockaderadius  $r_{\text{block}}$  mit steigendem Rydberg-Zustand  $n$  wächst (siehe Abschnitt 4.3), sättigt die Kurve bei Anregung des 82s-Zustands rascher und man erhält weniger Rydberg-Atome als im Fall der Anregung in den 62s-Zustand.

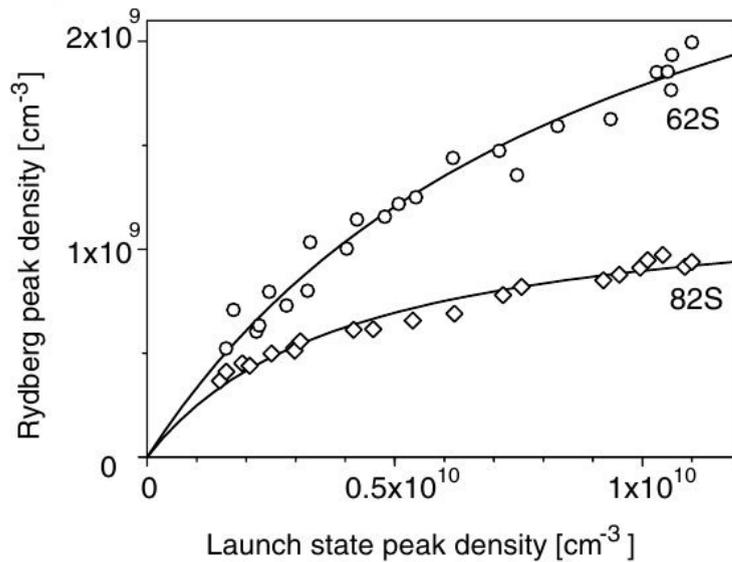


Abbildung 4.3.: Rydbergdichte als Funktion der Atomdichte für Anregung in die Rydberg-Zustände  $62s$  und  $82s$ , aus [244].

Die grundlegende Idee des hier vorgeschlagenen neuen Herstellungsverfahrens ist nun, diesen Blockadeeffekt zur Induzierung räumlicher Korrelationen im atomaren Gas auszunutzen. Anstelle einer direkten Ionisation der Grundzustandsatome wird zunächst ein Rydberg-Zustand angeregt. Dabei verhindert die Rydberg-Blockade die Erzeugung dicht benachbarter Rydberg-Atome und damit auch eine unkontrollierte Penning-Ionisation unmittelbar nach der Anregung. Penning-Prozesse treten erst auf längeren Zeitskalen auf, wenn die Rydberg-Atome eine Entfernung von  $\sim r_{\text{block}}$  zurückgelegt haben, und spielen bei den hier betrachteten tiefen Temperaturen und kurzen Zeitskalen keine Rolle. Die so entstandenen Korrelationen werden nun an das Plasma weitergegeben, indem mittels Mikrowellenionisation lediglich die Rydberg-Atome ionisiert werden. Da wegen der Blockade nur ein Bruchteil der Atome in den Rydberg-Zustand angeregt und ionisiert wird, sind bei diesem Verfahren atomare Dichten im Bereich von  $\rho_{\text{at}} = 10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  nötig, um die üblichen UKP-Dichten von  $\rho = 10^8 - 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  zu erzeugen. Die von der Ionisation unberührten Grundzustandsatome haben aufgrund ihrer geringen Wechselwirkung keinen Einfluss auf die nun einsetzende Plasmadynamik. Im Laufe der Relaxation werden sich die korreliert erzeugten Ionen wesentlich geringer aufheizen als bei der konventionellen Plasmaherstellung aus einem völlig ungeordneten atomaren System.

In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Schritte dieses neuen Ionisationsverfahrens eingehend diskutiert: In Abschnitt 4.3 wird zunächst erläutert, wie mit Hilfe der Rydberg-Blockade ein korreliertes atomares Ensemble präpariert werden kann. Im Abschnitt 4.4 folgt die Beschreibung der Mikrowellenionisation, die mit Hilfe eines *Monte-Carlo-samplings* klassischer Trajektorien simuliert wird. Anschließend wird im Abschnitt 4.5 die Relaxation der Plasmaionen nach der Mikrowellenionisation

on mit Hilfe von molekulardynamischen Rechnungen verfolgt, um die realisierbaren Kopplungsstärken dieses neuen Ionisationsverfahren zu ermitteln.

### 4.3. Rydberg-Rydberg-Korrelationen im atomaren Gas

Die Anregungsdynamik eines Vielteilchensystems unter Beachtung der starken Rydberg-Rydberg-Wechselwirkungen ist in den letzten Jahren mit verschiedenen Verfahren theoretisch untersucht worden. Molekularfeld-Theorien [260, 275] erlauben zwar eine einfache Beschreibung des Systems und die Bestimmung des Rydberg-Anteils im Gas, liefern aber keine Information über räumliche Korrelationen zwischen den Rydberg-Atomen. In dieser Hinsicht sind quantenmechanische Ansätze [226, 275] überlegen, die die einzelnen Atome und ihre Korrelationen durch direkte Propagation der zugrundeliegenden Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung vollständig mit einbeziehen. Zur Bestimmung einer Konfiguration von Rydberg-Atomen, auf deren Basis ein ultrakaltes Plasma erzeugt werden kann, sind sie jedoch ungeeignet, weil durch die exponentiell ansteigende Größe des Hilbert-Raums die berechenbare Teilchenzahl auf  $N \lesssim 100$  limitiert bleibt. Letztendlich wird jedoch nur ein Bruchteil von  $\sim 10^{-4} - 10^{-1}$  der Grundzustandsatome angeregt und steht somit für die Plasmaherstellung zur Verfügung. Um die für die MD-Simulationen benötigte Anzahl von  $N_{\text{ion}} \sim 100$  Ionen zu erzeugen, müssen deshalb Systeme mit einer entsprechend höheren Anzahl von bis zu  $\sim 10^6$  Grundzustandsatomen betrachtet werden.

Zu diesem Zweck bietet sich besonders die in [13, 15] entwickelte Methode an, da sie es ermöglicht, Systeme mit großen Teilchenzahlen unter vollständiger Berücksichtigung der Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung mittels klassischer Monte-Carlo-Simulationen zu analysieren. Im Folgenden werden die wesentlichen Punkte dieser Beschreibung wiedergegeben. Ausgehend von der Anregungsdynamik eines einzelnen Atoms wird die korrelierte Anregungsdynamik des Vielteilchensystems skizziert.

#### 4.3.1. Anregung eines Rydberg-Zustands im Drei-Niveau-System

Die Anregung eines Atoms vom Grund- in den Rydberg-Zustand erfolgt üblicherweise über einen Zwei-Stufen-Prozess [120, 168, 244] wie in Abbildung 4.4 veranschaulicht. Ein Pumplaser regt das Atom vom Grundzustand  $|g\rangle$  in den Zwischenzustand  $|m\rangle$  an, von wo aus es durch einen zweiten Laserpuls in den Rydberg-Zustand  $|r\rangle$  gebracht wird. Die Kopplungsstärken der Übergänge sind durch die Rabi-Frequenzen  $\Omega$  (für  $|g\rangle \leftrightarrow |m\rangle$ ) und  $\omega$  (für  $|m\rangle \leftrightarrow |r\rangle$ ) gegeben. Der obere Übergang kann sowohl resonant als auch mit einer endlichen Verstimmung  $\Delta$  getrieben werden. Die Zerfallsrate des Zwischenzustands  $|m\rangle$  beträgt  $\Gamma_{\text{gm}}$ , während der Zerfall aus dem Rydberg-Zustand vernachlässigt werden kann, da die Lebensdauer  $\tau$  der hier betrachteten Rydberg-Zustände  $n > 40$  mit  $\tau \gtrsim 100 \mu\text{s}$  deutlich über den relevanten Anregungszeiten  $t_{\text{ryd}} \leq 3 \mu\text{s}$  liegt.

Die Beschreibung der Quantendynamik in diesem System läuft analog zu der Behandlung des Vier-Niveau-Systems in Abschnitt 3.3 ab und ist detailliert in Anhang D

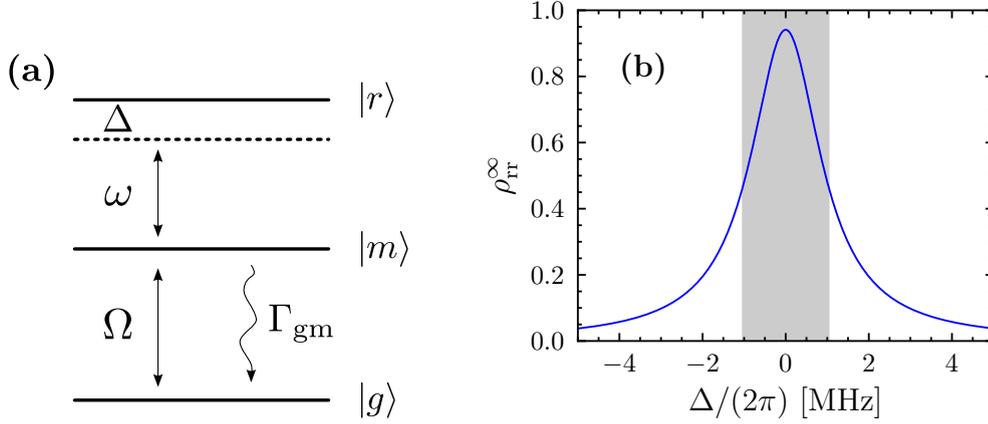


Abbildung 4.4.: (a) Schematische Darstellung des zweistufigen Rydberg-Anregungsprozesses. (b) Wahrscheinlichkeit der Besetzung des Rydberg-Zustands  $\rho_{rr}^\infty$  im stationären Zustand als Funktion der Laserverstimmung  $\Delta$  für  $\Omega/(2\pi) = 4$  MHz,  $\omega/(2\pi) = 1$  MHz und  $\Gamma_{gm}/(2\pi) = 6.1$  MHz. Der grau unterlegte Bereich entspricht der Halbwertsbreite von  $\rho_{rr}^\infty$  und wird zur Abschätzung der Breite der Rydberg-Linie  $\Delta\nu$  verwendet.

erläutert. Ähnlich wie in Abschnitt 3.3 kann die quantenmechanische Beschreibung der Laseranregung in diesem Drei-Niveau-System in sehr guter Näherung auf ein System klassischer Ratengleichungen vereinfacht werden [13, 15]. Zudem erfolgt eine Reduktion auf ein effektives Zwei-Niveau-System, wobei die Zustände  $|g\rangle$  und  $|m\rangle$  zu einem effektiven Grundzustand  $|g\rangle_{\text{eff}}$  zusammengefasst werden. Die An- und Abregungsrate des Rydberg-Zustands  $|r\rangle$  ist dann gegeben durch

$$\gamma_{\uparrow} = \frac{2\Gamma_{gm}(\omega\Omega)^2(\Omega^2 + \omega^2)}{a_0 + a_2\Delta^2 + a_4\Delta^4}, \quad (4.1a)$$

$$\gamma_{\downarrow} = \gamma_{\uparrow} \left( \frac{1 - \rho_{rr}^\infty}{\rho_{rr}^\infty} \right) \quad (4.1b)$$

mit den Koeffizienten

$$a_0 = (\Omega^2 + \omega^2) [(\omega^2 - 2\Omega^2)^2 + 2\Gamma_{gm}^2(\Omega^2 + \omega^2)], \quad (4.2a)$$

$$a_2 = 8(\Gamma_{gg}^4 - 4\Omega^4) + 4\omega^2(\Gamma_{gm}^2 + 4\Omega^2) + 8\omega^4, \quad (4.2b)$$

$$a_4 = 32(\Gamma_{gm}^2 + 2\Omega^2) \quad (4.2c)$$

und der Population des Rydberg-Niveaus im stationären Zustand

$$\rho_{rr}^\infty = \frac{\Omega^2(\Omega^2 + \omega^2)}{(\Omega^2 + \omega^2)^2 + 4\Delta^2(\Gamma_{gm}^2 + 2\Omega^2)}. \quad (4.3)$$

Die Abhängigkeit der Rydberg-Population  $\rho_{rr}^\infty$  von der Verstimmung des Rydberg-Lasers ist in Abbildung 4.4(b) für die in dieser Arbeit verwendeten Parameter darge-

stellt. Sie besitzt ein lorentzförmiges Profil mit maximaler Besetzungswahrscheinlichkeit bei resonanter Anregung ( $\Delta = 0$ ). Mit diesen Parametern wird der stationäre Zustand nach ca. 5  $\mu\text{s}$  erreicht. Für kürzere Zeiten ist die Population des Rydberg-Niveaus durch

$$\rho_{\text{rr}}(t) = \rho_{\text{rr}}^{\infty} \left( 1 - \exp\left(-\frac{\gamma_{\uparrow}}{\rho_{\text{rr}}^{\infty}} t\right) \right) \quad (4.4)$$

gegeben. Das Profil von  $\rho_{\text{rr}}(t)$  entspricht dabei qualitativ dem von  $\rho_{\text{rr}}^{\infty}$  und weist nur eine leichte Verbreiterung auf.

### 4.3.2. Korrelierte Vielteilchen-Anregungsdynamik

Um die korrelierte Anregungsdynamik für ein System aus  $N$  Atomen unter Berücksichtigung der Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung zu erhalten, muss die quantenmechanische Beschreibung um einen Rydberg-Rydberg-Wechselwirkungsterm ergänzt werden. Hierbei stellt sich heraus [13], dass die Wechselwirkung lediglich als lokale Verstimmung in Verbindung mit der Laserverstimmung für den Rydberg-Zustand auftritt. Die Ratengleichungen und auch die An- und Abregungsrate für das korrelierte Vielteilchen-System haben somit dieselbe Form wie die entsprechenden Gleichungen (4.1) und (4.3) aus der Einteilchen-Beschreibung. Jedem Atom  $i$ ,  $1 \leq i \leq N$ , wird lediglich eine individuelle lokale Verstimmung zugeordnet, die sich aus der Laserverstimmung  $\Delta$  und den induzierten Dipolverschiebungen durch benachbarte Rydberg-Atome ergibt:

$$\Delta_i = \Delta + \sum_{j \neq i} \sigma_j U(r_{ij}). \quad (4.5)$$

Hierbei gilt

$$\sigma_i = \begin{cases} 1 & \text{falls } i \text{ im Rydberg-Zustand} \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases} \quad (4.6)$$

und  $U(r_{ij})$  bezeichnet das Wechselwirkungs-Potential zwischen Atom  $i$  und  $j$  mit Abstand  $r_{ij}$ . Dieses ist in zahlreichen Arbeiten [34, 166, 218, 245, 250, 272] für verschiedene chemische Elemente und Rydberg-Zustände mittels störungstheoretischer Rechnung bestimmt worden. Abhängig vom angeregten Rydberg-Zustand kann das Potential  $U_{ij}$  repulsiv oder attraktiv sein. Um die mit einer attraktiven Wechselwirkung verbundene stoßinduzierte Ionisation der Rydberg-Atome zu vermeiden, wird für alle folgenden Rechnungen die Anregung von Alkali-Atomen in einen  $s$ -Zustand betrachtet. Für diese Situation besitzt das Potential zwischen zwei Rydberg-Atomen mit Abstand  $r$  einen repulsiven Van-der-Waals-Charakter der Form

$$U(r) = -\frac{C_6(n)}{r^6}, \quad (4.7)$$

wobei  $C_6$  der Van-der-Waals-Koeffizient ist. Mögliche Ionisationseffekte durch Populationstransfer in Rydberg-Zustände mit attraktivem Potential [5, 6, 166] werden erst für Zeiten  $t > 4 \mu\text{s}$  wichtig und spielen auf den hier betrachteten Zeitskalen  $t \leq 3 \mu\text{s}$  somit keine Rolle.

Ebenso wie in [13] werden die folgenden Rechnungen für Rubidium-Atome durchgeführt, da dieses Element experimentell häufig zum Einsatz kommt. Zur Berechnung des Van-der-Waals-Koeffizienten  $C_6$  von  $s$ -Zuständen in Rubidium wird der in [245] gegebene Ausdruck

$$C_6(n)/\hbar = n^{11} (c_0 + c_1 n + c_2 n^2) \quad (4.8)$$

mit den Koeffizienten  $c_0 = 1.086 \times 10^{-14} \text{ MHz } \mu\text{m}^6$ ,  $c_1 = -7.704 \times 10^{-16} \text{ MHz } \mu\text{m}^6$  und  $c_2 = 3.073 \times 10^{-18} \text{ MHz } \mu\text{m}^6$  genutzt. Der untere Pumpübergang wird üblicherweise zwischen den Zuständen  $5s^2S_{1/2}$  und  $5p^2P_{3/2}$  getrieben, wobei der Zerfall des mittleren Zustands  $\Gamma_{\text{gm}}/(2\pi) = 6.1 \text{ MHz}$  beträgt. Für sämtliche in diesem Kapitel vorgestellten Rechnungen werden die Rabifrequenzen auf  $\Omega/(2\pi) = 4 \text{ MHz}$  und  $\omega/(2\pi) = 1 \text{ MHz}$  festgelegt. Ihr Einfluss auf die erreichbaren Korrelationen wird am Ende dieses Kapitels in Abschnitt 4.6 diskutiert.

Mit Hilfe der verstimmungsabhängigen Besetzungswahrscheinlichkeit  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  gemäß Gleichung (4.3), der lokalen Verstimmung gemäß Gleichung (4.5) und der Wechselwirkung zwischen zwei Rydberg-Atomen gemäß Gleichung (4.7) können wir das blockierte Volumen rund um ein Rydberg-Atom abschätzen. Dazu gehen wir davon aus, dass eine Rydberg-Anregung nur dann erfolgen kann, wenn die lokale Verstimmung des betrachteten Atoms innerhalb der Rydberg-Linie  $\Delta\nu$  liegt. Im stationären Zustand veranschlagen wir  $\Delta\nu$  dabei mit der Halbwertsbreite der Rydberg-Population  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  gemäß Gleichung (4.3) als Funktion der Verstimmung  $\Delta$  (grau unterlegter Bereich in Abbildung 4.4(b)). In der Nähe eines Rydberg-Atoms treibt die lokale Verstimmung die benachbarten Atome aus dem Bereich der Linienbreite  $\Delta\nu$  und blockiert damit den Rydberg-Zustand für diese Atome. Die Wechselwirkung nimmt jedoch mit steigendem Abstand  $r$  ab. Jenseits des Abstands  $r_{\text{block}}$ , bei dem die Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung gerade der halben Linienbreite entspricht,

$$\frac{C_6(n)}{r_{\text{block}}^6} = \frac{\Delta\nu}{2} \hbar, \quad (4.9)$$

ist die lokale Verstimmung so stark gefallen, dass die Anregung wieder im Bereich von  $\Delta\nu$  erfolgt und somit möglich wird. Mit der Definition (4.9) des Blockaderadius über die abgeschätzte Linienbreite  $\Delta\nu$  wird deutlich, dass  $r_{\text{block}}$  keine scharf definierte Größe ist, sondern lediglich den Bereich angibt, in dem die Anregungswahrscheinlichkeit  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  deutlich steigt.

Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 4.5 veranschaulicht, die die Auswirkungen der Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung auf die korrelierte Anregungsdynamik eines Zwei-Teilchen-Systems zeigt. Dargestellt ist die lokale Verstimmung  $\Delta_2$  sowie die stationäre Population des Rydberg-Zustands  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  des zweiten Atoms gemäß den Gleichungen (4.3) und (4.5) als Funktion des Abstands  $r_{12}$  vom ersten, bereits in den Rydberg-Zustand angeregten Atom ( $\sigma_1 = 1$ ). Die Abstandsabhängigkeit für  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  kommt zustande, indem in Gleichung (4.3)  $\Delta$  durch  $\Delta_2$  gemäß Gleichung (4.5) ersetzt wird. Für große Abstände ist die Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung vernachlässigbar klein und  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  hängt allein vom Betrag der Laserverstimmung  $|\Delta|$  ab (siehe Gleichung (4.3)). Im resonanten Fall ist hier die Anregungswahrscheinlichkeit deutlich höher als für ein endliches  $\Delta$ . Bei kleineren Abständen tritt im Bereich

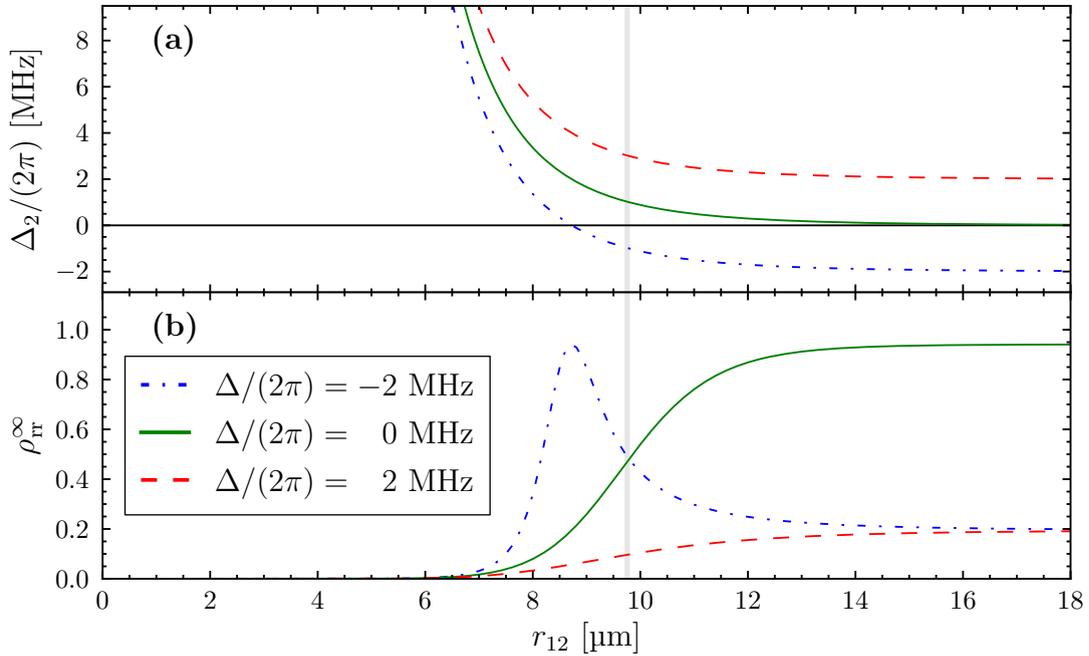


Abbildung 4.5.: Laseranregung im Zwei-Teilchen-System: (a) Lokale Verstimmung  $\Delta_2$  nach Gleichung (4.5) und (b) Population des Rydberg-Zustands im stationären Zustand  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  gemäß Gleichung (4.3) von Atom 2 als Funktion des Abstandes  $r_{12}$  vom bereits angeregten Atom 1. Es wird der Rydberg-Zustand  $n = 70$  mit verschiedenen Laserverstimmungen  $\Delta$  adressiert.

des gemäß Gleichung (4.9) abgeschätzten Blockaderadius  $r_{\text{block}}$  (graue senkrechte Linie) der Einfluss der Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung deutlich hervor. Er führt zu einer Divergenz der lokalen Verstimmung und verhindert damit eine Population des Rydberg-Zustands. Während  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  im resonanten Fall (durchgezogene Linie) rasch von knapp 1 auf 0 fällt, erhält man für negative Laserverstimmung (Punkt-Strich-Linie) vor dem Verschwinden bei kleinen Abständen zunächst noch eine erhöhte Wahrscheinlichkeit im Bereich um  $r_m \approx 9 \mu\text{m}$ , da an dieser Stelle die rydberginduzierte Energieniveaushiftung die Laserverstimmung gerade aufwiegt und somit resonant angeregt wird, d. h.  $\Delta(r_m) = 0$ . Eine positive Laserverstimmung (gestrichelte Linie) bewirkt eine verminderte Anregungswahrscheinlichkeit für alle Abstände, da in diesem Fall eine rydberginduzierte lokale Verstimmung den Rydberg-Zustand lediglich noch weiter aus der Resonanz treibt.

### 4.3.3. Monte-Carlo-Simulation der Vielteilchen-Anregungsdynamik

Die Vereinfachung der quantenmechanischen Beschreibung in Form von klassischen Ratengleichungen mit den Raten (4.1) sowie das Konzept der lokalen Verstimmung

mung  $\Delta_i$  in Gleichung (4.5) ermöglichen es, die komplexe korrelierte Vielteilchen-Anregungsdynamik für Teilchenzahlen  $N \sim 10^6$  mit Hilfe eines klassischen Monte-Carlo-Algorithmus zu simulieren. Dazu wird zunächst eine zufällige Atomverteilung mit vorgegebener Dichte erzeugt. Die Anzahl der Grundzustands-Atome in der Simulation wird je nach vorgegebenen Parametern zwischen  $N_g \approx 5 \times 10^3 - 10^6$  gewählt, so dass die zu erwartende Anzahl an Rydberg-Atomen nach der Laseranregung bei  $N_r \approx 10^3$  liegt. Die Kantenlänge  $L$  der kubischen Simulationszelle ist dann über die Dichte und  $N_g$  festgelegt. Die hohe Zahl der Grundzustandsatome  $N_g$  garantiert bei den hier betrachteten Dichten  $\rho_{\text{at}}$ , dass die Reichweite der Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung deutlich kleiner als die Zellenlänge ist,  $r_{\text{block}} \ll L$ . Somit können periodische Randbedingungen angenommen werden, um ungewünschte Randeffekte zu vermeiden. Jedem Atom wird eine Zustandsvariable  $\sigma_i$  gemäß Gleichung (4.6) und eine lokale Verstimmung gemäß Gleichung (4.5) zugeordnet. Die Laseranregung wird nun durch eine zeitliche Propagation des Systems in einer Reihe von Monte-Carlo-Schritten simuliert. In einem Schritt wird dazu für jedes Atom je nach aktuellem Anregungszustand die Anregungs- oder die Abregungswahrscheinlichkeit  $P_{\uparrow/\downarrow} = \gamma_{\uparrow/\downarrow} \Delta t$  für ein kleines Zeitintervall  $\Delta t$  berechnet und mit einer Zufallszahl  $z \in [0, 1]$  verglichen. Ist  $z < P_{\uparrow/\downarrow}$ , wird die An- bzw. Abregung durchgeführt und die lokale Verstimmung  $\Delta_i$  gemäß Gleichung (4.5) für alle Atome neu berechnet, andernfalls bleibt das Atom in seinem bisherigen Zustand. Der Zeitschritt  $\Delta t$  muss dabei so klein gewählt werden, dass maximal ein Atom pro Monte-Carlo-Schritt seinen Zustand ändert. Es werden so viele Monte-Carlo-Schritte durchgeführt, bis die vorgegebene Pumpdauer  $t_{\text{ryd}}$  erreicht ist. Physikalische Größen wie Rydberg-Dichte und Rydberg-Rydberg-Korrelationsfunktion lassen sich aus Mittelwerten über viele solcher Monte-Carlo-Läufe bestimmen.

Für die höchste in dieser Arbeit betrachteten Dichte von  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  und die längste Anregungsdauer von  $t_{\text{ryd}} = 3 \text{ }\mu\text{s}$  legen die Atome bei einer Temperatur von  $T \sim 100 \text{ }\mu\text{K}$  im Mittel weniger als den interatomaren Abstand  $\sim \rho_{\text{at}}^{-1/3}$  zurück. Wie sich herausstellt, werden optimale Korrelationen bei hohen Dichten bereits durch kürzere Pulsdauern im Bereich von  $t_{\text{ryd}} \approx 0.1 \text{ }\mu\text{s}$  erzielt (siehe Abschnitt 4.6), so dass für diese Fälle die mittlere Weglänge der Atome sogar unter 5% des interatomaren Abstands bleibt. In den Simulationen der Rydberg-Anregung kann deshalb die Bewegung der Atome vernachlässigt und das System als so genanntes "eingefrorenes Rydberg-Gas" [190] betrachtet werden.

In Abbildung 4.6 sind exemplarische Resultate der Monte-Carlo-Vielteilchensimulation zusammengefasst. In (a) sehen wir, dass der Anteil an Rydberg-Atomen  $f_{\text{ryd}}$  im ultrakalten Gas zu Beginn der Laseranregung linear wächst. Durch die Rydberg-Blockade sinkt jedoch mit zunehmender Pulsdauer die Anzahl der Atome, die in Resonanz mit dem Anregungslaser stehen, so dass nach einer gewissen Zeit nahezu keine weiteren Atome mehr angeregt werden können und der Rydberg-Anteil auf einen konstanten Wert konvergiert. Diese Sättigung des Systems mit Rydberg-Atomen war bereits in den experimentellen Ergebnissen in Abbildung 4.3 zu beobachten.

Der Blockade-Effekt wird auch besonders in der Zwei-Teilchen-Korrelationsfunktion  $g(r)$  deutlich, die in Abbildung 4.6(b) dargestellt ist. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit an, zwei Rydberg-Atome im Abstand  $r$  vorzufinden. Wie aus der Analyse

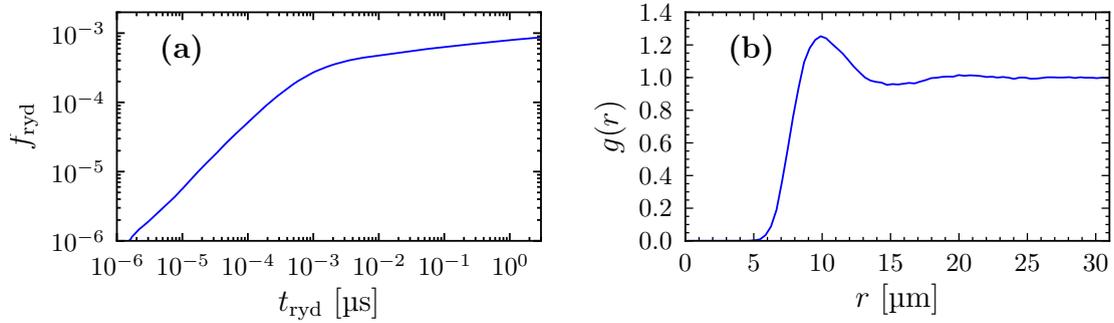


Abbildung 4.6.: (a) Anteil der Rydberg-Atome  $f_{\text{ryd}}$  im ultrakalten Gas als Funktion der Pumpdauer  $t_{\text{ryd}}$  und (b) Zwei-Teilchen-Korrelationsfunktion  $g(r)$  als Funktion des Abstands  $r$  zwischen zwei Rydberg-Atomen nach  $t_{\text{ryd}} = 3 \mu\text{s}$  für  $n = 70$ ,  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ .

von  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  erwartet (siehe Abbildung 4.5), ist die Anregung in der direkten Umgebung jedes Rydberg-Atoms komplett unterdrückt. Erst im Abstand des Blockaderadius, bei  $r \gtrsim 9 \mu\text{m}$ , steigt  $g(r)$  steil an und wird nach einem Maximum mit anschließenden leichten Oszillationen für größere Abstände konstant. Die erhöhte Wahrscheinlichkeit, Rydberg-Atome im Abstand  $\sim r_{\text{block}}$  anzutreffen, resultiert aus der Sättigung des Systems mit Rydberg-Atomen nach der Pumpdauer von  $t_{\text{ryd}} = 3 \mu\text{s}$ . Auf großen Längenskalen  $r \gg r_{\text{block}}$  signalisiert der konstante Wert von  $g(r)$ , dass keine diskreten Abstände zwischen den Atomen ausgezeichnet sind und somit keine Korrelationen mehr zwischen den Rydberg-Atomen bestehen; dies ist auf die beschränkte Reichweite der Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung zurückzuführen.

Eine ausführliche Diskussion der Ergebnisse der simulierten Rydberg-Anregung erfolgt zusammen mit den erreichbaren ionischen Kopplungsstärken  $\Gamma$  in Abschnitt 4.6. In den folgenden Abschnitten 4.4 und 4.5 sollen zunächst noch die Verfahren zur Ionisierung der Rydberg-Atome und zur Simulation der anschließenden Plasmarelaxation erläutert werden.

## 4.4. Ionisation der Rydberg-Atome

Nachdem im vorherigen Abschnitt gezeigt wurde, wie durch die Anregung von Rydberg-Atomen räumliche Korrelationen im atomaren Gas erzeugt werden können, soll nun die Ionisierung dieser Rydberg-Atome mit Hilfe eines elektromagnetischen Feldes näher betrachtet werden. Hierbei nutzt man die hohe Empfindlichkeit der Rydberg-Atome gegenüber elektrischen Feldern aus. Die kritische, zur Ionisation notwendige Feldstärke  $F_c$  skaliert mit der Hauptquantenzahl  $n$  wie  $F_c \sim n^{-4}$ . Dieser Zusammenhang ermöglicht es, die Feldstärke so einzustellen, dass die Rydberg-Atome ionisiert werden, die Grundzustandsatome jedoch nur eine vernachlässigbar kleine Störung erfahren.

Zur Herstellung eines stark korrelierten UKP ist ein hoher Ionisationsgrad  $f_{\text{ion}}$  des Rydberg-Systems allein nicht ausreichend. Daneben erfordert die Stabilität des Plasmas niedrige Elektronentemperaturen im Bereich von  $T_e \lesssim 100$  K. Sind die Elektronen zu heiß, so reicht das durch die Ionen aufgebaute Potential nicht aus, um den Großteil der Elektronen in der Plasmawolke zu fangen, wodurch das Plasma seinen neutralen Charakter verliert und rasch dissoziiert. Außerdem sollte unmittelbar nach der Ionisation der mittlere Abstand zwischen Elektron und Ion  $\langle r \rangle$  kleiner als der Blockaderadius  $r_{\text{block}}$  und damit auch kleiner als der Abstand zum nächsten Rydberg-Atom bzw. Ion sein, um eine direkte Rekombination sowie eine zu starke Dissoziation des Plasmas zu verhindern. Ziel dieses Abschnitts ist es, ein Verfahren zu finden, dass diese drei Kriterien,

- $f_{\text{ion}} \approx 1$ ,
- $T_e \lesssim 100$  K,
- $\langle r \rangle < r_{\text{block}}$

erfüllt.

Zu den typischen Ionisationsmethoden von Rydberg-Atomen zählt der Einsatz von Mikrowellen. Seit den 70er Jahren des letzten Jahrhunderts ist die Wechselwirkung von Rydberg-Atomen mit Mikrowellenfeldern intensiv untersucht worden [30, 47, 107, 130, 131, 161, 228], insbesondere auch deshalb, weil diese Systeme ein Musterbeispiel für chaotische Quantendynamik darstellen [44]. In der Regel ist das Atom dabei einigen hundert Perioden einer Mikrowelle mit Frequenzen im Bereich  $\omega \approx 10$  GHz ausgesetzt und wird durch einen Multi-Photonen-Prozess ionisiert. Für einen solchen Prozess wurde eingehend die Korrespondenz der klassischen und quantenmechanischen Beschreibung analysiert [130]. Solange die Mikrowellenfrequenz  $\omega_{\text{mw}}$  die Umlauffrequenz  $\omega_e$  des Elektrons auf seiner klassischen Bahn um den Atomkern nicht wesentlich übersteigt, liefern klassische Beschreibung und Quantenmechanik in guter Näherung dieselben Ergebnisse und exzellente Übereinstimmung mit Experimenten [44, 130, 161]. Die Energien der resultierenden freien Elektronen sind jedoch schwer kontrollierbar und in der Regel deutlich zu hoch für ein UKP. Außerdem kann während der Dauer des Ionisationsprozesses von  $\sim 100$  ns bereits ein Teil der Korrelationen durch die thermische Bewegung der Atome wieder verloren gehen.

Fortschritte in der experimentellen Technik erlauben seit einigen Jahren auch die Ionisierung hoch angeregter Atome mit ultra-kurzen elektromagnetischen Pulsen. Die Wechselwirkung von Rydberg-Systemen mit diesen so genannten Half-Cycle-Pulsen (HCP) wurde in zahlreichen Experimenten und theoretischen Arbeiten (z. B. [24, 133, 213, 219, 223, 278, 285]) studiert. HCP sind nahezu unipolare Pulse im ps-Bereich, deren Amplitude im Wesentlichen ein starkes Extremum aufweist, gefolgt von einem längeren, deutlich niedrigeren „Schwanz“ entgegengesetzter Polarisierung [278]. Sie werden mit Hilfe eines photoleitenden Halbleiters wie Gallium-Arsenid erzeugt [77, 133]. Ein kurzer Laserpuls bringt den Halbleiter in den leitenden Zustand, und die durch eine anliegende Spannung plötzlich beschleunigten Elektronen senden den HCP aus. Da die Pulsdauer eines HCP wesentlich kürzer ist als die

Periode des klassischen Elektronenorbits, kann er in der theoretischen Beschreibung als instantaner Impulsübertrag betrachtet und die resultierende Elektronen-Dynamik klassisch behandelt werden. Bisherige Arbeiten konzentrierten sich gewöhnlich auf die Effizienz der Ionisierung und enthalten wenig Informationen über die resultierenden Elektronenenergien. Hinweise auf eine Eignung von HCP zur Plasmaherstellung wurden durch Messung und Berechnung der Geschwindigkeitsverteilung der freien Elektronen in [278] gefunden, die elektronische Energien im Bereich einiger Kelvin ergaben.

In diesem Abschnitt soll anhand eines einfachen atomaren Modells und klassischer Monte-Carlo-Rechnungen die Plasmaerzeugung mittels Mikrowellenionisation demonstriert werden. Um die oben genannten Anforderungen zur Erzeugung eines UKP zu erfüllen, wird dabei neben dem Ionisierungsgrad vor allem der Temperatur der freien Elektronen sowie dem mittleren Abstand zwischen Elektron und Ion unmittelbar nach der Ionisation besondere Beachtung geschenkt.

#### 4.4.1. Atomares Modell

Zur Vereinfachung der Notation werden in diesem Abschnitt atomare Einheiten verwendet. Das hier betrachtete Modell bildet einen Kompromiss zwischen HCP- und Mikrowellenionisation. Das elektromagnetische Feld hat die Form einer Mikrowelle gemäß

$$F(t) = F_{\max} \cos(\omega_{\text{mw}} t + \phi) \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{\sigma^2}\right). \quad (4.10)$$

Hierbei bezeichnet  $F_{\max}$  die maximale Amplitude,  $\omega_{\text{mw}}$  die Frequenz und  $\phi$  die Phase der Mikrowelle. Das An- und Ausschalten der Mikrowelle wird durch die  $e$ -Funktion der Breite  $\sigma$  zentriert um den Zeitpunkt  $t_0$  beschrieben, die das Mikrowellenfeld auf eine Periode beschränken und somit näherungsweise die Form eines HCP nachahmen kann. Für die folgende Untersuchung werden die Parameter auf  $t_0 = T_{\text{mw}}/2$ ,  $\sigma = T_{\text{mw}}/5$  festgelegt, so dass die Mikrowelle nicht mehr als eine Periode  $T_{\text{mw}}$  auf das Atom wirkt. In Abbildung 4.7 ist der zeitliche Verlauf der Amplitude eines solchen Pulses beispielhaft für den Fall  $2\pi/\omega_{\text{mw}} = T_{\text{mw}} = 100$  ps und verschiedene Phasen  $\phi$  skizziert. Auch wenn hier  $T_{\text{mw}}$  größer als die Elektronenperiode  $2\pi\omega_e^{-1}$  gewählt wird, kann wegen der Festlegung der Mikrowellenfrequenz auf  $\omega_{\text{mw}} < \omega_e$  die Ionisation näherungsweise klassisch beschrieben werden.

Das Atom wird in dieser klassischen Beschreibung durch die Hamilton-Funktion

$$\mathcal{H}_{\text{at}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}|} \quad (4.11)$$

für ein Elektron am Ort  $\mathbf{r}$  mit Impuls  $\mathbf{p}$  im Feld des räumlich fixen ionischen Kerns repräsentiert. Die resultierende Bewegung des Elektrons bei fester vorgegebener Bindungsenergie  $\mathcal{H}_{\text{at}} = E_n = -\frac{1}{2n^2}$  im Anregungszustand mit Hauptquantenzahl  $n$  läuft auf Kepler-Ellipsen ab. Die Umlaufperiode des Elektrons sowie die Länge der großen Halbachse  $h_a$  ist bei fester Energie für alle Keplerellipsen gleich. Die maximale Entfernung zwischen Elektron und Ion hängt jedoch von der jeweiligen

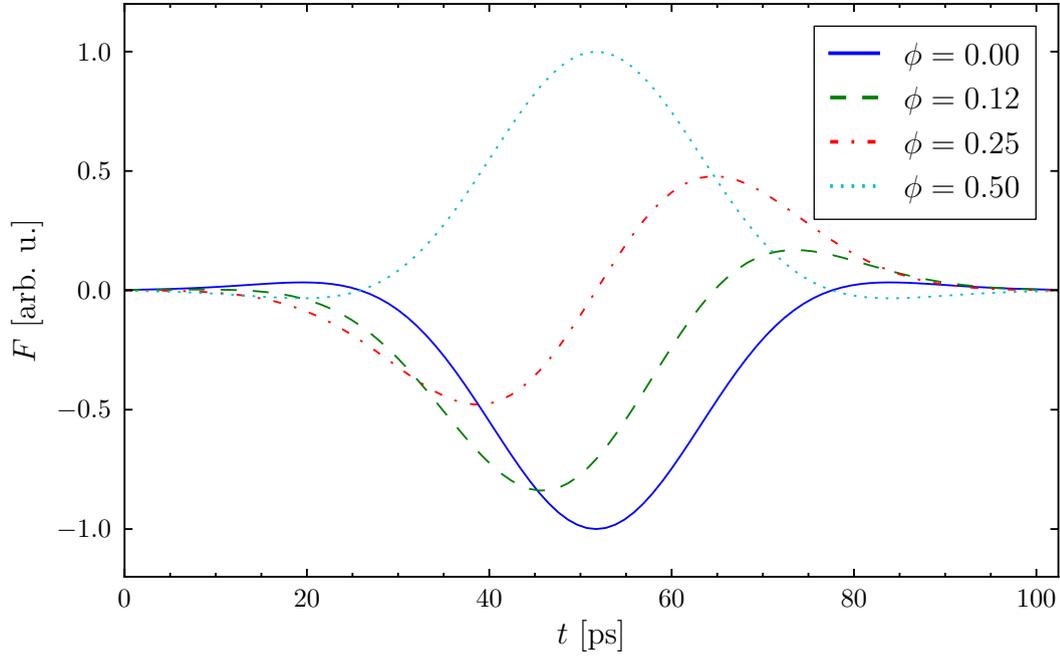


Abbildung 4.7.: Zeitabhängigkeit der Mikrowellenamplitude gemäß Gleichung (4.10) mit den Parametern  $T_{\text{mw}} = 100$  ps,  $t_0 = T_{\text{mw}}/2$ ,  $\sigma = T_{\text{mw}}/5$  und verschiedenen Phasenverschiebungen  $\phi$  (in Einheiten von  $2\pi$ ).

Form der Keplerellipse ab, da das Ion im Brennpunkt der Ellipse sitzt. Für den Extremfall  $l = 0$  entspricht die Elektronenbahn einer Geraden mit Umkehrpunkten beim Ion und bei der maximalen Entfernung  $2h_a$  vom Ion. Die kleine Halbachse  $h_b$  der Keplerellipse variiert zwischen  $h_b = 0$  (Gerade) und  $h_b = h_a$  (Kreis). Die Form der Ellipse wird mit Hilfe der Exzentrizität  $\epsilon = \frac{\sqrt{h_a^2 - h_b^2}}{h_a}$  beschrieben.

Die Bewegung des Elektrons auf einem solchen Kepler-Orbit wird nun gestört durch das Anschalten des elektromagnetischen Feldes nach Gleichung (4.10). Die vollständige Hamiltonfunktion des Rydberg-Atoms im Feld setzt sich aus Gleichungen (4.10) und (4.11) zusammen,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{at}} + zF(t), \quad (4.12)$$

wobei hier eine Polarisierung der Mikrowelle in  $z$ -Richtung angenommen wurde.

Die Invarianz der Elektronen-Dynamik unter der Transformation [1, 44]

$$\mathcal{H}' = \lambda \mathcal{H}, \quad (4.13a)$$

$$r' = \lambda^{-1} r, \quad (4.13b)$$

$$p' = \sqrt{\lambda} p, \quad (4.13c)$$

$$t' = \lambda^{-3/2} t, \quad (4.13d)$$

$$\omega' = \lambda^{3/2} \omega, \quad (4.13e)$$

$$F' = \lambda^2 F \quad (4.13f)$$

ermöglicht es, den Ionisationsprozess für sämtliche Anregungszustände  $n$  durch die Analyse einer einzigen Energie zu erhalten. Mit der naheliegenden Wahl

$$\lambda = -\frac{1}{2E_n} = n^2 \quad (4.14)$$

erhalten wir die Hamilton-Funktion der gestrichenen Größen zu

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{2} = \frac{\mathbf{p}'^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}'|} + z' F'_{\max} \cos(\omega'_{\text{mw}} t' + \phi) \exp\left(-\frac{(t' - t'_0)^2}{\sigma'^2}\right). \quad (4.15)$$

Im ungestörten System  $\mathcal{H}'_{\text{at}}$  (vgl. Gleichung (4.11)) wird damit die große Halbachse auf  $h_a = 1$ , die Kepler-Periode auf  $T = 2\pi$  und die Umlauffrequenz auf  $\omega = 1$  festgelegt.

Die Abhängigkeit des Ionisationsverhaltens vom Rydberg-Niveau  $n$  ist also durch die Transformationen (4.13) gegeben. Die ursprüngliche Dichte  $\rho_{\text{at}}$  der Grundzustandsatome hat nur geringe Konsequenzen für den Ionisationsprozess, da der Abstand der Rydberg-Atome durch  $r_{\text{block}}$  nach unten begrenzt ist. Indem die An- und Abschaltphase der Mikrowelle bereits über  $t_0$  und  $\sigma$  definiert wurde, bleiben als freie Parameter die Größen  $F_{\max}$ ,  $\omega$ ,  $\phi$  aus Gleichung (4.10). Im Folgenden soll mit Hilfe von Monte-Carlo-Rechnungen gezeigt werden, dass es Parameterbereiche gibt, in denen die Ionisierung aller Rydberg-Atome mit resultierenden Elektronentemperaturen  $T_e \lesssim 100$  K möglich ist.

#### 4.4.2. Monte-Carlo-Simulation klassischer Trajektorien

Zur Analyse der Elektronendynamik unter Einfluß der Mikrowelle wird in dieser Arbeit das weit verbreitete Simulationsverfahren des Monte-Carlo-samplings von klassischen Trajektorien (classical trajectory Monte-Carlo, CTMC) [1, 136, 199] angewandt. Diese Methode wurde bereits in Kapitel 2 im Zusammenhang mit der Bestimmung von stoßinduzierten atomaren Übergangsraten diskutiert. Physikalische Messgrößen werden aus einem Ensemble von unabhängigen Elektronenbahnen mit verschiedenen Anfangsbedingungen ermittelt, die durch numerische Integration der newtonschen Bewegungsgleichungen berechnet werden. Als Integrationsmethode findet hier das Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung Verwendung.

Die Anfangsbedingungen für ein Elektron mit Energie  $E_1 = -1/2$  gewinnen wir aus einer klassischen mikrokanonischen Verteilung

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \delta(E_1 - H_{\text{at}}). \quad (4.16)$$

Diese Verteilung lässt sich erzeugen, indem die folgenden Parameter auf den zugehörigen Intervallen gleich verteilt generiert werden [1]:

$$\beta = 1 - \epsilon^2 \in (0, 1), \quad (4.17a)$$

$$\alpha \in (0, 2\pi), \quad (4.17b)$$

$$\psi \in (0, 2\pi), \quad (4.17c)$$

$$\mu = \cos \theta \in (-1, 1), \quad (4.17d)$$

$$\gamma \in (0, 2\pi). \quad (4.17e)$$

Das Elektron wird zunächst auf einer in der  $xy$ -Ebene gelegenen Kepler-Ellipse mit Exzentrizität  $\epsilon$  am Perihel platziert. Mit der vorgegebenen Energie des Rydberg-Zustands  $E_1 = 1/2$  und der mit  $\lambda$  skalierten Gleichung (4.11) sind damit die Phasenraumkoordinaten  $\{\mathbf{r}'_0, \mathbf{v}'_0\}$  bestimmt. Um nun zu einer Anfangsbedingung aus dem mikrokanonischen Ensemble (4.16) zu gelangen, wird zunächst die Zeittranslation  $U(\frac{\alpha}{2\pi}T)$  durchgeführt. Dabei wird durch Lösen der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für  $H'_{\text{at}}$  das Elektron für eine Dauer von  $\frac{\alpha}{2\pi}T$  entlang des Kepler-Orbits propagiert. Anschließend wird der Orbit noch um die Winkel  $\psi$ ,  $\theta$  und  $\gamma$  um jeweils die  $z$ -,  $y$ -, und wieder die  $z$ -Achse gedreht. Fasst man diese Drehoperationen in der Drehmatrix  $R(\psi, \theta, \gamma)$  zusammen, so lässt sich die Bestimmung der Anfangsbedingungen formal schreiben als

$$\{\mathbf{r}', \mathbf{v}'\} = R(\psi, \theta, \gamma) U(\frac{\alpha}{2\pi}T) \{\mathbf{r}'_0, \mathbf{v}'_0\}. \quad (4.18)$$

Da die Laseranregung Rydberg-Atome in  $ns$ -Zuständen erzeugt (siehe Abschnitt 4.3), müssten die Anfangsbedingungen der Trajektorien prinzipiell eine entsprechend klassische Verteilung aufweisen. Es zeigt sich jedoch, dass eine Beschränkung des Drehimpulses auf  $l < l_m$  in den Anfangsbedingungen für verschiedene Werte von  $l_m$  keinen signifikanten Einfluss auf die hier betrachteten Größen hat, so dass für sämtliche Rechnungen die Anfangsbedingungen aus der mikrokanonischen Verteilung gemäß Gleichungen (4.16) bis (4.18) erzeugt wurden.

Ausgehend von  $\{\mathbf{r}', \mathbf{v}'\}$  wird nun die Zeitentwicklung der Elektronenbahn durch numerische Integration der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen des vollständigen Systems (4.15) bestimmt.

Zur Auswertung der Simulationen werden aus jeweils  $N_{\text{Tra}} = 1000$  Trajektorien pro Parametersatz die drei folgenden Größen berechnet:

- der Anteil an ionisierten Atomen

$$f_{\text{ion}} = \frac{1}{N_{\text{Tra}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Tra}}} \Theta(E_i^f), \quad (4.19)$$

wobei  $\Theta$  die Stufenfunktion ist und  $E_i^f$  die Energie des Elektrons  $i$  nach Ausschalten der Mikrowelle,

- die effektive Elektronentemperatur der freien Elektronen

$$T_{\text{eff}} = \frac{m_e \langle v_{\text{frei}}^2 \rangle}{3k_B}, \quad (4.20)$$

wobei die quadratisch gemittelte Geschwindigkeit aus den Geschwindigkeiten  $v_i^f$  nach Ausschalten der Mikrowelle gemäß

$$\langle v_{\text{frei}}^2 \rangle = \frac{1}{f_{\text{ion}} N_{\text{Tra}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Tra}}} (v_i^f)^2 \Theta(E_i^f) \quad (4.21)$$

berechnet wird,

- der mittlere Elektron-Ion-Abstand der ionisierten Elektron-Ion-Paare

$$\langle r \rangle = \frac{1}{f_{\text{ion}} N_{\text{Tra}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{Tra}}} r_i^f \Theta(E_i^f), \quad (4.22)$$

wobei  $r_i^f$  die Position des Elektrons  $i$  unmittelbar nach Ausschalten der Mikrowelle bezeichnet.

Diese Größen sind in Abbildung 4.8 am Beispiel der Ionisierung von Rydberg-Atomen im Zustand  $n = 70$  mit einer Mikrowellenfrequenz  $\omega_{\text{mw}}/(2\pi) = 10$  GHz abgebildet. Für eine Phase im Bereich  $\phi \approx 0$  oder  $\phi \approx \pi$  zeichnet sich der Puls im Wesentlichen durch ein einziges starkes Extremum aus (siehe Abbildung 4.7) und die Ionisation ist dementsprechend bereits für kleine Amplituden  $F_{\text{max}}$  recht effektiv. Die Elektronen erreichen gleichzeitig jedoch sehr hohe Geschwindigkeiten und somit auch zu hohe Temperaturen. Vielversprechender erweist sich der Parameterbereich um  $\phi \approx \pi/2$ , bei dem die Mikrowelle zwei entgegengesetzte, nahezu gleich starke Extrema besitzt (siehe Abbildung 4.7). Für eine Amplitude von  $F_{\text{max}}/e = 643$  V/cm werden nahezu 100% der Rydberg-Atome ionisiert, während die Elektronentemperatur die im Experiment üblichen  $T_e \approx 100$  K nicht überschreitet und die mittlere Distanz zwischen Elektron und Ion  $\langle r \rangle$  unterhalb des Blockaderadius von  $r_{\text{block}} \sim 10$   $\mu\text{m}$  und damit auch unterhalb des mittleren Ion-Ion-Abstands bleibt. Bei dieser Parameterwahl führt das erste Extremum zur Ionisation aller Rydberg-Atome, während das zweite entgegengesetzt polarisierte Maximum eine zu starke Beschleunigung der nun freien Elektronen verhindert und diese wieder abbremst. Ein ähnlicher Effekt wurde bei der Verwendung von HCP gefunden [278], wobei hier der langgezogene „Schwanz“ am Ende des Pulses ein Abbremsen der Elektronen bewirkt.

Simulationen bei anderen Mikrowellenfrequenzen  $\omega_{\text{mw}}$  ergeben, dass die optimalen Ionisationsbedingungen für die Erzeugung eines UKP nur im Bereich von  $\omega_{\text{mw}}/(2\pi) \approx 10$  GHz erreicht werden. Kleinere Frequenzen  $\omega_{\text{mw}}/(2\pi) < 10$  GHz erlauben zwar schon bei sehr geringen Amplituden  $F_{\text{max}}$  einen Ionisationsgrad von  $f_{\text{ion}} = 1$ , führen in der Regel aber zu höheren kinetischen Energien der Elektronen. Kürzere Pulse  $T_{\text{mw}}$  bzw. höhere Frequenzen  $\omega_{\text{mw}}/(2\pi) > 10$  GHz halten das Elektron dicht beim Ion und die effektive Temperatur mit  $T_{\text{eff}} \lesssim 100$  K im gewünschten Bereich, können dafür aber keine 100%ige Ionisation des Rydberg-Systems garantieren.

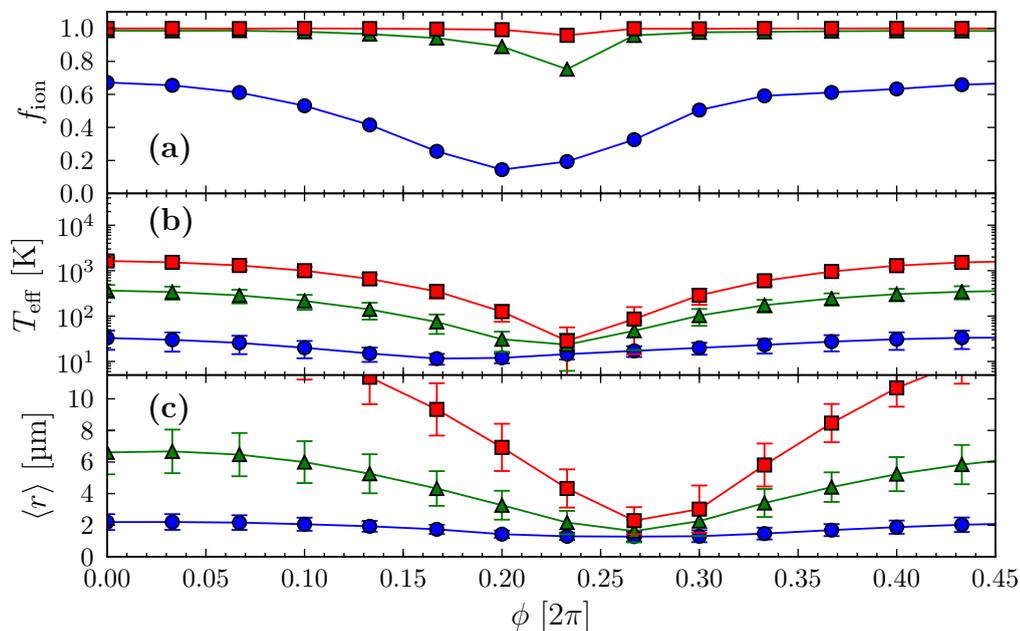


Abbildung 4.8.: Abhängigkeit des Ionisationsprozesses von Rydberg-Atomen im Zustand  $n = 70$  von der Mikrowellenphase  $\phi$ . Für einen Puls der Dauer  $T_{\text{mw}} = 100$  ps und für die Amplituden  $F_{\text{max}}/e = 107$  V/cm ( $\circ$ ),  $F_{\text{max}}/e = 321$  V/cm ( $\triangle$ ) und  $F_{\text{max}}/e = 643$  V/cm ( $\square$ ) ist der Anteil ionisierter Rydberg-Atome  $f_{\text{ion}}$  (a), die mittlere effektive Temperatur  $T_{\text{eff}}$  der freien Elektronen (b) und der mittlere Abstand  $\langle r \rangle$  der freien Elektronen vom jeweiligen Ion (c) unmittelbar nach Ende des Mikrowellenpulses dargestellt.

Für einen Rydberg-Zustand  $n' \neq 70$  lassen sich mit Hilfe der Skalierungen (4.13) Parameterbereiche finden, die für  $n'$  das gleiche Ionisationsverhalten generieren wie das für  $n = 70$  in Abbildung 4.8 gezeigte. Da sowohl  $\langle r \rangle$  als auch  $r_{\text{block}}$  mit  $n^2$  skalieren, bleibt auch für  $n'$  die Relation  $\langle r \rangle < r_{\text{block}}$  erhalten.

Insgesamt zeigen die Berechnungen, dass eine vollständige Ionisierung des Rydberg-Systems bei niedrigen Elektronentemperaturen und kleinen Elektron-Ion-Abständen realisierbar ist. Somit können alle zu Beginn dieses Abschnitts definierten Anforderungen an das Ionisationsverfahren erfüllt werden. Daraus ergibt sich die Perspektive, die rydberginduzierten Korrelationen im atomaren Gas vollständig an das Plasma weiterzugeben und deutlich höhere Kopplungsstärken zu erzielen. Unmittelbar nach der Ionisation setzt die Plasmaevolution ein, die im nächsten Abschnitt beschrieben wird.

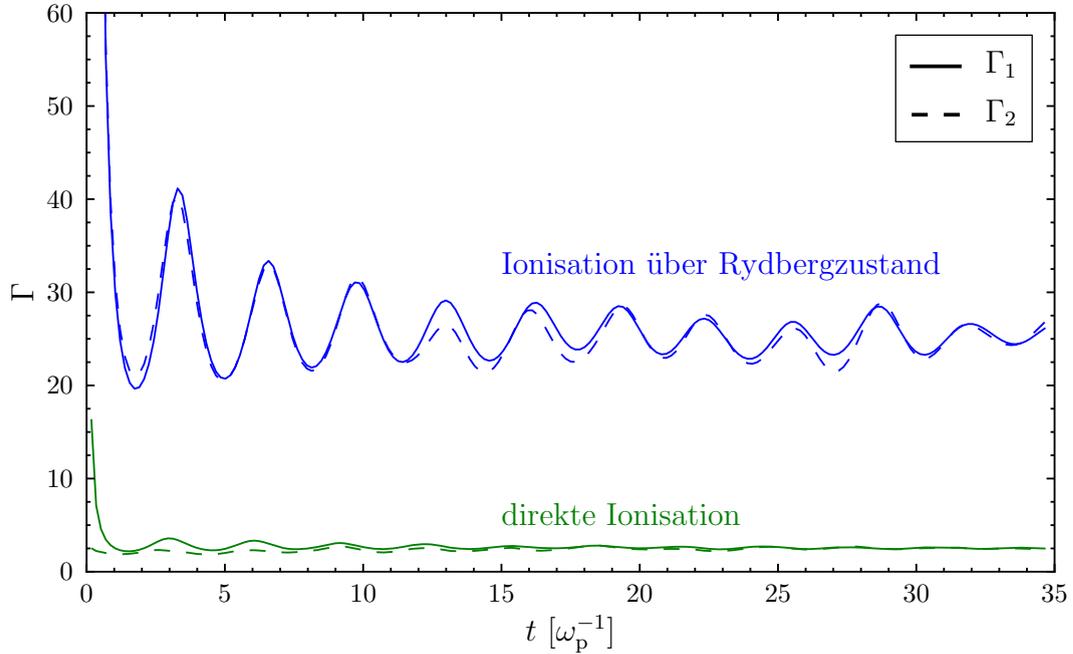


Abbildung 4.9.: Ionen-Relaxation unmittelbar nach Erzeugung des Plasmas für den Fall der direkten Ionisation und für ein vorkorreliertes Gas mit einer Dichte von  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ , das für eine Dauer von  $t_{\text{ryd}} = 0.1 \text{ }\mu\text{s}$  in den Zustand  $n = 70$  angeregt wurde. Der effektive Kopplungsparameter  $\Gamma$  ist auf zwei Arten gemäß Gleichungen (4.23) berechnet worden.

## 4.5. Relaxation korrelierter Ionen

Der entscheidende Schritt zur Beurteilung des neuen UKP-Herstellungsverfahrens besteht in der Untersuchung der Plasmarelaxation im Anschluß an die Ionisation, um die Auswirkung der induzierten Korrelationen auf die Kopplungsstärke  $\Gamma$  zu ermessen. Wie in Kapitel 3 werden hierfür die Ionen als OCP aufgefasst und MD-Rechnungen zur Simulation der Plasmadynamik in einer Einheitszelle mit periodischen Randbedingungen durchgeführt. Als Ausgangskonfiguration für eine einzelne MD-Simulation wird eine mit Hilfe der Vielteilchen-Monte-Carlo-Simulation (siehe Abschnitt 4.3) bestimmte Rydberg-Atomverteilung gewählt. Die Rydberg-Atome werden durch Ionen ersetzt, die in der Regel zunächst keine Geschwindigkeit besitzen. Durch die gegenseitige Coulomb-Wechselwirkung werden die Ionen beschleunigt und relaxieren innerhalb einer Plasmaperiode  $\omega_p^{-1}$  auf einen Zustand nahe am Gleichgewicht.

Abbildung 4.9 zeigt typische Relaxationskurven für verschiedene Anregungs- und Ionisationsverfahren. Da sich zu Beginn der Simulation noch keine Temperatur ein-

gestellt hat, wurde wie in Abschnitt 2.4 der Kopplungsparameter über die zwei Varianten

$$\Gamma_1 = \frac{1}{\langle v^2 \rangle} (\omega_p a)^2, \quad (4.23a)$$

$$\Gamma_2 = \sqrt{\frac{2}{3(\langle v^4 \rangle - \langle v^2 \rangle^2)}} (\omega_p a)^2 \quad (4.23b)$$

berechnet. Zunächst sind  $\Gamma_1$  und  $\Gamma_2$  als effektive Kopplungsparameter zu betrachten, die sich proportional zum Verhältnis aus potentieller und kinetischer Energie des Systems verhalten. Sobald der Gleichgewichtszustand erreicht ist, gilt  $\Gamma_1 = \Gamma_2$ .

Sind die Ionen zu Beginn der Simulation zufällig verteilt, wie es üblicherweise bei direkter Ionisation des atomaren Gases der Fall ist, so beobachtet man das typische rasche Aufheizen des Plasmas und den damit verbundenen Korrelationsverlust nach ca. einer Plasmaperiode  $\omega_p^{-1}$ . Das Korrelationsheizen verringert sich merklich für ein Plasma, das mit dem oben beschriebenen Verfahren erzeugt und vorkorreliert wurde. Anhand der ausgeprägten Oszillationen wird hier der kollektive Charakter der Ionendynamik besonders deutlich, dessen Zeitskala durch  $\omega_p^{-1}$  gegeben ist: Die Maxima in  $\Gamma$  erscheinen bei Zeiten  $t_{\max} \omega_p = n\pi$ , die Minima entsprechend versetzt bei  $t_{\min} \omega_p = n\pi/2$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Dieser periodische Austausch zwischen kinetischer und potentieller Energie dämpft nur langsam aus und ist selbst nach einer Relaxationsdauer von  $t = 35 \omega_p^{-1}$  noch nicht verschwunden. Im Gegensatz zu dem aus einem unkorrelierten atomaren Ensemble erzeugten Plasma, das zu diesem Zeitpunkt schon vollständig thermalisiert ist, findet man für den hier gewählten korrelierten Fall noch leicht verschiedene  $\Gamma_1$  und  $\Gamma_2$ . Nach der vollständigen Relaxation der Ionen wird ein Kopplungsparameter von  $\Gamma \approx 30$  erzielt, eine Steigerung um eine Größenordnung im Vergleich zur konventionellen Plasmaerzeugung.

Im Allgemeinen wird die realisierbare Kopplungsstärke maßgeblich durch die Parameterwahl bei der Rydberg-Anregung kontrolliert. Dieser Zusammenhang wird im nächsten Abschnitt anhand einiger Größen näher beleuchtet.

## 4.6. Kontrolle der Kopplungsstärke

Um die Abhängigkeit der erreichbaren Korrelationen im atomaren Gas und der Kopplungsstärke  $\Gamma$  im Plasma von den spezifischen Parametern des Anregungsschemas zu untersuchen, wurden Simulationen für eine Vielzahl von Kombinationen der Atomdichte  $\rho_{\text{at}}$ , des Rydberg-Zustands  $n$ , der Laserverstimmung  $\Delta$  und der Rydberg-Anregungsdauer  $t_{\text{ryd}}$  durchgeführt. In den MD-Simulationen wurde dabei für jeden Parametersatz die Plasmadynamik über eine Zeitspanne von  $t_{\text{relax}} \approx 35 \omega_p^{-1}$  verfolgt (vgl. Abbildung 4.9). Die jeweils erreichbare Kopplungsstärke wird anhand des Mittelwerts über die zehn letzten Plasmaperioden  $\omega_p^{-1}$  dieser Evolution berechnet. Im Gegensatz zur Rydberg-Rydberg-Korrelationsfunktion (vgl. Abbildung 4.6), die lediglich eine qualitative Abschätzung der Korrelationen erlaubt, ermöglichen diese Werte eine quantitative Bestimmung der Kopplungsstärke  $\Gamma$  und liefern eine präzise Vergleichsgröße. In den folgenden Abschnitten wird der Einfluss einzelner

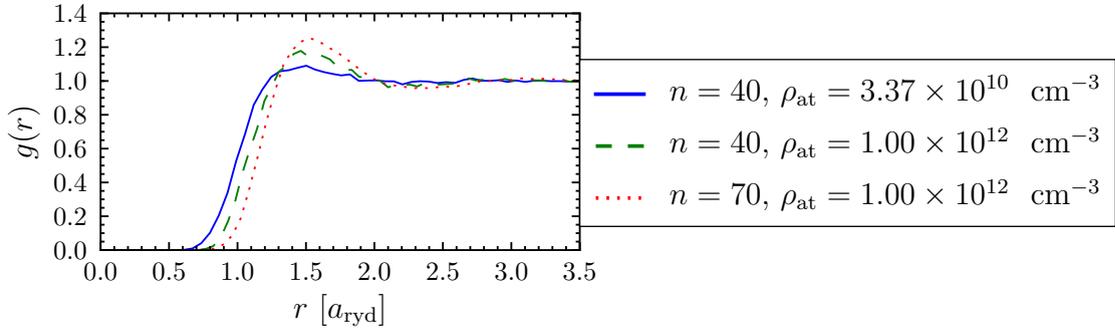


Abbildung 4.10.: Die Korrelationsfunktion  $g(r)$  zeigt mit zunehmender Dichte  $\rho_{\text{at}}$  und steigendem Rydberg-Level  $n$  ein ausgeprägteres Maximum bei  $r/a_{\text{ryd}} \approx 1.5$ . Um Systeme mit verschiedenen Dichten  $\rho_{\text{at}}$  zu vergleichen, ist die Ortskoordinate  $r$  in Einheiten des mittleren Rydberg-Rydberg-Abstands  $a_{\text{ryd}} = (4\pi\rho_{\text{ryd}}/3)^{-\frac{1}{3}}$  gegeben.

Parameter sowohl auf die Form der Korrelationsfunktion als auch auf die erreichte Kopplungsstärke eingehend diskutiert.

#### 4.6.1. Rydberg-Zustand und Dichte der Grundzustandsatome

Die Rydberg-Rydberg-Korrelationsfunktion in Abbildung 4.10 zeigt mit wachsender Dichte  $\rho_{\text{at}}$  und steigendem Rydberg-Level  $n$  eine Zunahme des blockierten Volumens rund um jedes Rydberg-Atom und ein ausgeprägteres Maximum knapp oberhalb des mittleren Rydberg-Rydberg-Abstands  $a_{\text{ryd}} = (4\pi\rho_{\text{ryd}}/3)^{-\frac{1}{3}}$ , wobei  $\rho_{\text{ryd}} = f_{\text{ryd}}\rho_{\text{at}}$  die Dichte der Rydberg-Atome bezeichnet. Die immer deutlicheren Oszillationen von  $g(r)$  jenseits des ersten Maximums weisen außerdem darauf hin, dass die Wahrscheinlichkeit steigt, auch auf größeren Längenskalen Rydberg-Atome mit wohldefinierten Abständen vorzufinden.

Abbildung 4.11 zeigt ein entsprechendes Verhalten der Plasmakopplung. Je stärker die Atompositionen korreliert sind, desto höher das resultierende  $\Gamma$ . Für große Dichten und hohe Rydberg-Zustände wird der Gewinn an Kopplungsstärke jedoch geringer und  $\Gamma$  konvergiert auf einen Grenzwert.

Die gleichartige Abhängigkeit von Dichte und Rydberg-Zustand lässt sich auf dieselbe physikalische Ursache zurückführen. Dies verdeutlicht uns Abbildung 4.12, die  $\Gamma$  als Funktion des Verhältnisses aus der Dichte der Grundzustandsatome und der Rydberg-Dichte,  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$ , für eine Vielzahl von Parameterkombinationen ( $\rho_{\text{at}}, n$ ) zeigt. Mit dieser Skalierung von  $\rho_{\text{at}}$  fallen sämtliche bereits in den Abbildungen 4.11 gezeigten Datenpunkte bei fester Pumpzeit  $t_{\text{ryd}}$  auf eine universelle Kurve. Das angeregte Rydberg-Niveau  $n$  spielt bei dieser Auftragung eine Rolle, da für die Rydberg-Dichte  $\rho_{\text{ryd}} \sim r_{\text{block}}^{-3} \sim n^{-6}$  gilt (vgl. Gleichungen (4.8) und (4.9)). Darüber hinaus ist in Abbildung 4.12 bereits der deutliche Einfluss von  $t_{\text{ryd}}$  zu sehen, der im nächsten Abschnitt eingehender beleuchtet werden soll.

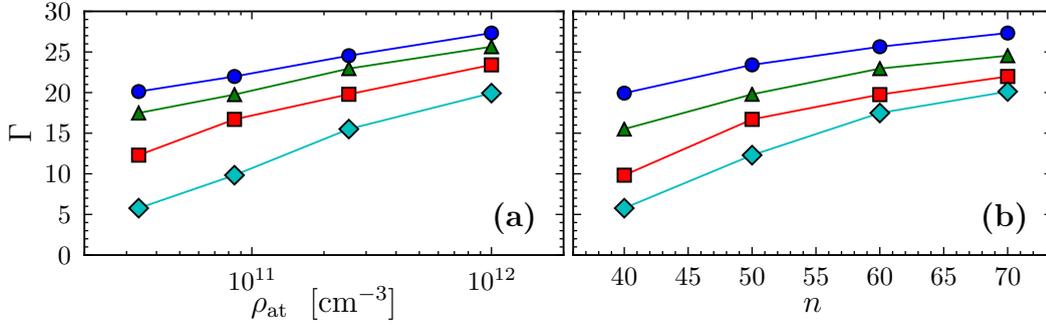


Abbildung 4.11.: (a) Kopplungsparameter  $\Gamma$  als Funktion der Dichte der Grundzustandsatome  $\rho_{\text{at}}$  für  $n = 40$  ( $\diamond$ ),  $n = 50$  ( $\square$ ),  $n = 60$  ( $\triangle$ ) und  $n = 70$  ( $\circ$ ). (b)  $\Gamma$  als Funktion des angeregten Rydberg-Zustands  $n$  für  $\rho_{\text{at}} = 3.37 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  ( $\diamond$ ),  $\rho_{\text{at}} = 8.46 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  ( $\square$ ),  $\rho_{\text{at}} = 2.54 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  ( $\triangle$ ),  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  ( $\circ$ ). Die Rydberg-Anregungsdauer beträgt  $t_{\text{ryd}} = 0.3 \mu\text{s}$ .

Das Verhältnis  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  kann als mittlere Anzahl von blockierten Grundzustandsatomen pro Rydberg-Atom betrachtet werden. Die in Abbildung 4.12 beobachtete Steigerung der Korrelationen bei Erhöhung dieser Blockadezahl lässt sich anschaulich mit einem Phasenraumargument erklären: Der minimale Abstand zwischen zwei Rydberg-Atomen ist durch  $r_{\text{block}}$  vorgegeben (siehe Abbildung 4.5). Nach oben gibt es prinzipiell keine Beschränkung. Bei einer Sättigung des Systems kommt jedoch der typische Abstand direkter benachbarter Rydberg-Atome in den Bereich von  $r_{\text{block}}$ . Maximale Korrelationen erzielt man, wenn die Abstände zwischen benachbarten Rydberg-Atomen möglichst ähnlich sind, d. h. in diesem Fall immer  $r_{\text{block}}$  betragen. Ist aber beispielsweise die Dichte  $\rho_{\text{at}}$  zu gering, so steht nicht immer ein Grundzustandsatom im Abstand  $r_{\text{block}}$  von einem bereits erzeugten Rydberg-Atom zur Anregung zur Verfügung; das nächste Rydberg-Atom kann erst in einer größeren Entfernung als der Blockaderadius erzeugt werden. Dadurch fluktuiert der typische Rydberg-Rydberg-Abstand stärker, wodurch nur schwächere Korrelationen erreicht werden. Den gleichen Effekt erhalten wir auch bei der Wahl eines kleinen Rydberg-Zustands. Da der Blockaderadius mit  $n$  abnimmt, sinkt dadurch das relevante Phasenraumvolumen und somit auch die Wahrscheinlichkeit, ein Atom im Abstand  $r_{\text{block}}$  anzutreffen gemäß  $\sim r_{\text{block}}^2$ .

Die entscheidende Größe zur Kontrolle der Kopplungsstärke stellt also die Anzahl der Atome in der Entfernung  $r_{\text{block}}$  von einem bereits angeregten Rydberg-Atom dar. Diese Anzahl ist wiederum direkt proportional zur Anzahl der blockierten Grundzustandsatome pro Rydberg-Atom  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$ , wodurch die universelle Skalierung in Abbildung 4.12 zustande kommt. Die Sättigung bei hohen  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  tritt ein, da ab einer gewissen Blockadezahl immer ausreichend Grundzustandsatome im Abstand von  $r_{\text{block}}$  zur Verfügung stehen und somit die Wahrscheinlichkeit einer Rydberg-Anregung im Abstand des Blockaderadius nicht mehr signifikant gesteigert werden kann. Die Beschränkung der Kopplungsstärke auf  $\Gamma \lesssim 30$  resultiert dann nur noch

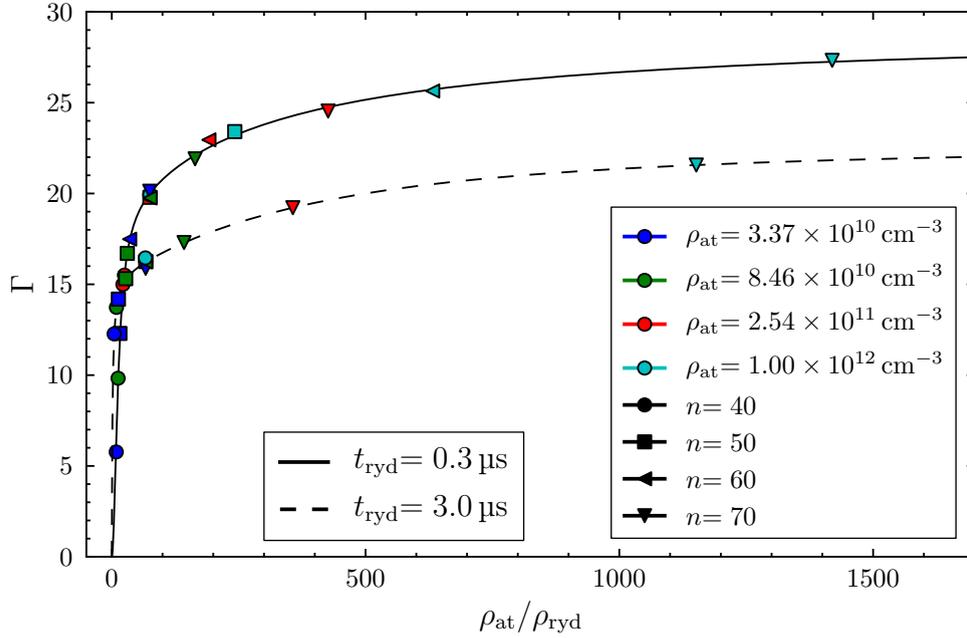


Abbildung 4.12.: Kopplungsparameter  $\Gamma$  als Funktion der blockierten Grundzustandsatome pro Rydberg-Atom  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  für zwei verschiedene Pumpzeiten  $t_{\text{ryd}}$  und eine Vielzahl an Dichte-Zustands-Kombinationen  $(\rho_{\text{at}}, n)$ .

aus der limitierten Reichweite der durch die Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung induzierten Korrelationen.

Die Anzahl der blockierten Atome  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  können wir bereits vor der Rydberg-Anregung mit der Definition des Blockaderadius in Gleichung (4.9) abschätzen auf

$$N_{\text{block}} = \frac{4}{3}\pi r_{\text{block}}^3 \rho_{\text{at}} = \frac{4}{3}\pi \sqrt{\frac{C_6(n)}{\hbar \Delta\nu/2}} \rho_{\text{at}}. \quad (4.24)$$

Auf der rechten Seite von Gleichung (4.24) zeigt sich explizit die Abhängigkeit der Blockadezahl  $N_{\text{block}}$  von  $\rho_{\text{at}}$  und  $n$ . Bei einer Erhöhung einer der Parameter wächst  $N_{\text{block}}$ , wodurch auch die Wahrscheinlichkeit Rydberg-Atome im Abstand  $r_{\text{block}}$  vorzufinden und anzuregen steigt. Daraus ergeben sich schließlich stärkere Korrelationen.

Bei Anregung des Rydberg-Niveaus  $n' \neq n$  erhält man nach Gleichung (4.24) bei fester Linienbreite  $\Delta\nu$  die gleiche Anzahl an blockierten Atomen  $N_{\text{block}}$  für die atomare Dichte

$$\rho'_{\text{at}} = \sqrt{C_6(n)/C_6(n')} \rho_{\text{at}}. \quad (4.25)$$

Somit sollte man für die Dichte-Zustands-Kombinationen  $(\rho_{\text{at}}, n)$  und  $(\rho'_{\text{at}}, n')$ , die Gleichung (4.25) erfüllen, den gleichen Grad an Korrelationen im System induzieren. Diese universelle Abhängigkeit von der Blockadezahl bestätigt sich in Abbildung 4.12 anhand der Parameterkombinationen  $(\rho_{\text{at}}, n) = (10^{12} \text{ cm}^{-3}, 40)$ ,  $(2.54 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3},$

50),  $(8.46 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}, 60)$ ,  $(3.37 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}, 70)$ . Sie genügen alle paarweise Gleichung (4.25) und ergeben jeweils  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}} \approx 80$  sowie die gleiche Kopplungsstärke  $\Gamma$  bei fester Pumpzeit.

In Abbildung 4.13 können wir erkennen, dass Gleichung (4.24) über weite Parameterbereiche eine erstaunlich gute Abschätzung des tatsächlich erreichten Blockadeanteils  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  liefert. Im Wesentlichen ergibt sich eine lineare Skalierung zwischen  $N_{\text{block}}$  und  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  und eine Übereinstimmung der Größenordnungen. Wie bereits schon in Abbildung 4.13 zu sehen, finden wir für die vier Parameterkombinationen, die jeweils  $N_{\text{block}} \approx 80$  ergeben, bei fester Pumpzeit die gleiche Anzahl an tatsächlich blockierten Grundzustandsatomen. Mit der Pumpzeit nimmt auch die prognostizierte Anzahl blockierter Atome  $N_{\text{block}}$  zu, da nach Gleichung (4.4) die Breite der Rydberg-Linie abnimmt, wodurch der Blockaderadius  $r_{\text{block}}$  steigt. Bei kleinen  $N_{\text{block}}$  und kurzen Pumpzeiten kommt es zu einer Abweichung von der linearen Abhängigkeit. In diesen Fällen ist aufgrund der geringen Anzahl von Grundzustandsatomen im Abstand  $r_{\text{block}}$  die Wahrscheinlichkeit einer Anregung bei  $r_{\text{block}}$  relativ gering, so dass lange Pumpzeiten nötig werden, um eine Sättigung an Rydberg-Atomen zu erreichen. Solange das System jedoch ungesättigt ist, liegt  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  deutlich über der Abschätzung  $N_{\text{block}}$ . Für lange Anregungsdauern oder große  $N_{\text{block}}$  fällt der tatsächlich erreichte Blockadeanteil  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  hingegen etwas geringer aus als gemäß Gleichung (4.24) veranschlagt, was auf eine leichte Überschätzung von  $r_{\text{block}}$  schließen lässt. Es sei jedoch noch einmal darauf hingewiesen, dass die Anregungswahrscheinlichkeit  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  eine kontinuierliche Funktion des Abstands ist und der Blockaderadius lediglich den Bereich angibt, in dem  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  stark zunimmt (siehe Abbildung 4.5). Bei langen Anregungszeiten oder großen  $N_{\text{block}}$  werden auch Rydberg-Rydberg-Abstände unterhalb des Blockaderadius immer wahrscheinlicher, woraus diese Überschätzung resultiert.

Durch den weitgehend linearen Zusammenhang zwischen  $N_{\text{block}}$  und  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  erhält man ebenso eine universelle Skalierung von  $\Gamma$  mit  $N_{\text{block}}$ . Diese Abhängigkeit lässt umgekehrt bei gegebenem  $\Gamma$  Rückschlüsse auf die erzielten Rydberg-Korrelationen zu. Die Zwei-Teilchen-Korrelationsfunktion  $g(r)$  ermöglicht zwar bereits eine qualitative Abbildung der Rydberg-Rydberg-Korrelationen im atomaren Gas, ist experimentell aber nur schwer zugänglich. Die im Experiment hingegen einfach zu messende Kopplungsstärke im Plasma reflektiert direkt die Korrelationen aus dem Rydberg-System und bietet somit auch eine hervorragende Alternative, Anregungsprozesse mit unterschiedlichen Laserparametern und Atomdichten quantitativ zu analysieren.

Insgesamt zeigen die Ergebnisse dieses Abschnitts, dass die Korrelationen sowohl durch hohe Dichten  $\rho_{\text{at}}$  als auch hohe Rydberg-Zustände  $n$  gesteigert werden können. Der Einfluss der beiden Parameter lässt sich auf die Anzahl der blockierten Grundzustandsatome pro Rydberg-Atom  $\rho_{\text{at}}/\rho_{\text{ryd}}$  bzw.  $N_{\text{block}}$  zurückführen, wobei  $\Gamma$  eine universelle Skalierung mit der Blockadezahl  $N_{\text{block}}$  aufweist. Die Kopplungsstärke wächst mit der Blockadezahl, so dass die maximale Kopplung von  $\Gamma \approx 28$  bei  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ,  $n = 70$  und  $t_{\text{ryd}} = 0.3 \mu\text{s}$  erreicht wird. Für große  $N_{\text{block}}$  fällt die Steigerung der Korrelationen jedoch nur noch sehr gering aus und die Kopplungsstärke konvergiert auf einen Wert von  $\Gamma \approx 30$ . Für andere Pumpzeiten findet man qualitativ die gleiche Abhängigkeit, wobei die realisierbaren Korrelationen durchaus

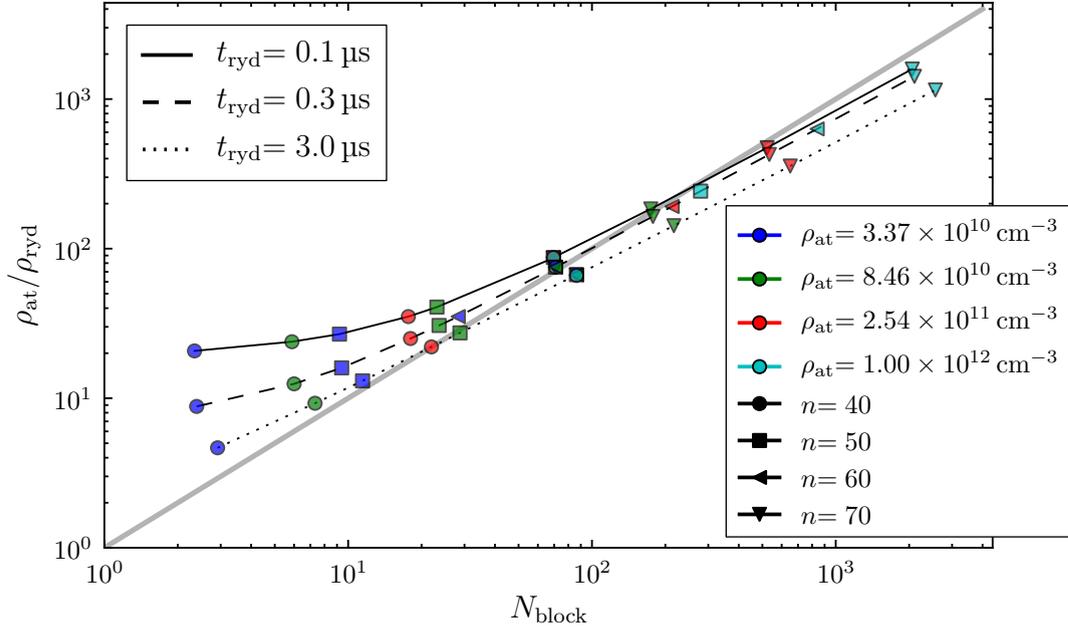


Abbildung 4.13.: Anzahl der blockierten Grundzustandsatome  $\rho_{at}/\rho_{ryd}$  als Funktion der abgeschätzten Blockadezahl  $N_{block}$  nach Gleichung (4.24) für verschiedene Parameterkombinationen  $(\rho_{at}, n)$  und Anregungsdauern  $t_{ryd}$ . Die graue Linie stellt die Ursprungsgerade dar.

deutlich variieren können. Dieser Zusammenhang wird im nächsten Abschnitt näher untersucht.

#### 4.6.2. Dauer der Rydberg-Anregung

Der Einfluss der Anregungsdauer auf die erreichbaren Rydberg-Rydberg-Korrelationen ist in der zeitlichen Entwicklung der Korrelationsfunktion zu beobachten, dargestellt in Abbildung 4.14 anhand der Kombinationen  $n = 40$ ,  $\rho_{at} = 3.37 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  und  $n = 70$ ,  $\rho_{at} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ . Im ersten Fall finden sich aufgrund der kleinen Dichte und des niedrigen Rydberg-Zustands (kleines  $N_{block}$ ) wenig Atome im Abstand  $r_{block}$  von einem bereits angeregten Rydberg-Atom. Dementsprechend ist ein langer Anregungspuls erforderlich, um die im Rahmen der Parameter optimalen Korrelationen einzustellen, so dass die Korrelationsfunktion innerhalb  $t_{ryd} \leq 3 \mu\text{s}$  noch eine deutliche Evolution zeigt. Im zweiten Fall liegt wegen des großen  $N_{block}$  die Wahrscheinlichkeit zur Erzeugung von Rydberg-Atomen mit Abstand  $\sim r_{block}$  deutlich höher, wodurch wir schon nach  $t_{ryd} = 0.1 \mu\text{s}$  keine wesentliche Dynamik der Korrelationsfunktion mehr beobachten können.

Der Kopplungsparameter  $\Gamma$  zeigt erneut ein Verhalten, das der anhand von  $g(r)$  beobachteten Zunahme der atomaren Korrelationen entspricht, siehe Abbildung 4.15.

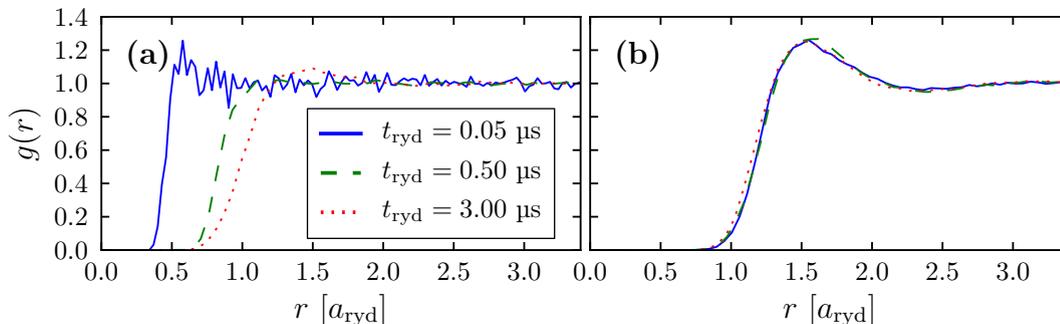


Abbildung 4.14.: Korrelationsfunktion  $g(r)$  für  $n = 40$ ,  $\rho_{\text{at}} = 3.37 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  (a) und für  $n = 70$ ,  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  (b) nach verschiedenen Rydberg-Anregungsdauern  $t_{\text{ryd}}$ .

Für kleine Dichten  $\rho_{\text{at}}$  und/oder niedrige Rydberg-Zustände  $n$  ist ein Puls von  $t_{\text{ryd}} > 3 \mu\text{s}$  nötig, um im Rahmen dieser Parameter maximale Kopplung zu erzeugen. Mit zunehmender Dichte und/oder steigendem Rydberg-Zustand verkürzt sich die optimale Pulsdauer und die Korrelationen nehmen bei längeren Anregungszeiten sogar wieder ab. Der Grund hierfür liegt in der mit der Pumpzeit wachsenden Wahrscheinlichkeit, auch kleinere Rydberg-Rydberg-Abstände als  $r_{\text{block}}$  zu realisieren. Dadurch erhält man wiederum eine stärkere Streuung der typischen Abstände benachbarter Rydberg-Atome und folglich geringere Korrelationen. Dieser Verlauf deutet sich in der Korrelationsfunktion (Abbildung 4.14(b)) an, die eine geringfügige Verkleinerung des blockierten Volumens aufweist. Zur Einstellung maximaler Korrelationen muss die Pulsdauer demnach so abgestimmt werden, dass einerseits eine ausreichende Zahl an Rydberg-Atomen erzeugt wird und das atomare Gas nahezu gesättigt ist, andererseits aber die Anregungen bei Abständen  $r < r_{\text{block}}$  noch keine Rolle spielen und das blockierte Volumen um jedes Rydberg-Atom möglichst groß bleibt.

Im Vergleich der Abbildungen 4.14 und 4.15 zeigen sich nochmals deutlich die Vorteile der Korrelationsmessung mittels Kopplungsparameter  $\Gamma$ : Während die Korrelationsfunktion als solche nur eine qualitative Bewertung erlaubt und für Fälle wie in Abbildung 4.14(b) kaum Anhaltspunkte zur Unterscheidung verschiedener Anregungsszenarien bietet, ermöglicht  $\Gamma$  auch hier noch eine klare Beurteilung des Korrelationsgrades.

Für die Parameterkombinationen  $n = 40$ ,  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  und  $n = 70$ ,  $\rho_{\text{at}} = 3.37 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ , deren Kurven in Abbildung 4.15 nahezu identisches Verhalten zeigen, finden wir mit der Abschätzung (4.9) die gleiche Anzahl blockierter Grundzustandsatome  $N_{\text{block}}$ . Auch wenn die realisierbare Kopplungsstärke nicht-monoton von der Anregungsdauer abhängt, bleibt für eine vorgegebene Anregungsdauer  $t_{\text{ryd}}$  demnach die universelle Abhängigkeit von  $N_{\text{block}}$  bestehen (vgl. Abbildung 4.12).

Für die bisher vorgestellten Ergebnisse besaßen die Ionen zu Beginn der MD-Simulationen jeweils keine kinetische Energie. Wie wir in Abbildung 4.16 sehen können, zeigt eine Initialisierung der Ionen mit einer endlichen Geschwindigkeit, ent-

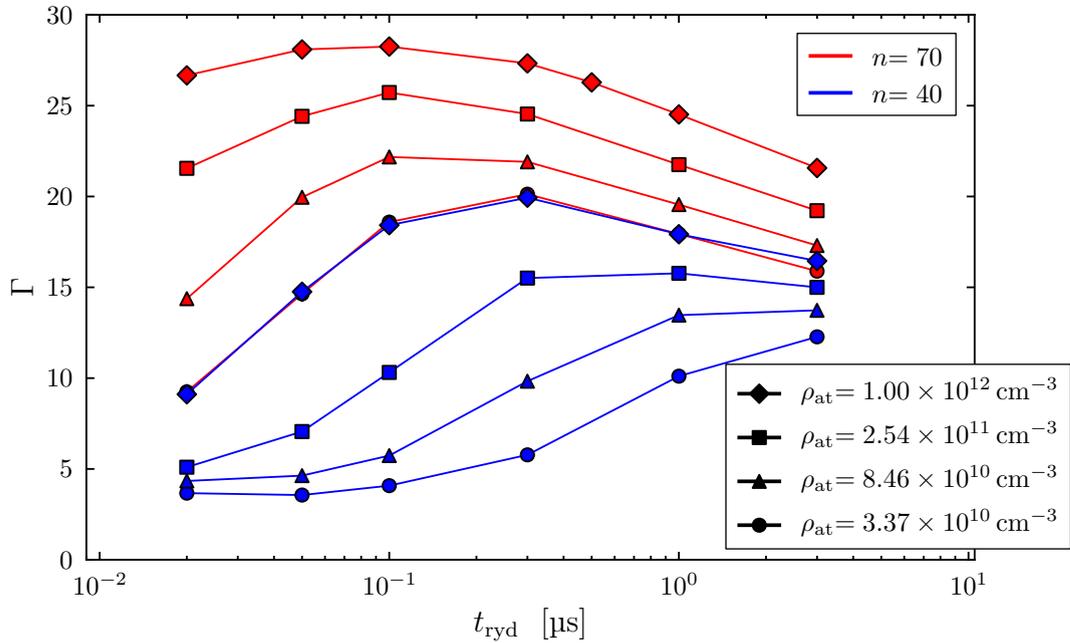


Abbildung 4.15.: Kopplungsparameter  $\Gamma$  als Funktion der Rydberg-Anregungsdauer  $t_{\text{ryd}}$ .

sprechend einer Temperatur von einigen mK bei typischen Plasmadichten im Bereich  $\rho \sim 10^8 - 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ , erst mit zunehmender Pulsdauer einen geringen Einfluss auf die resultierende Kopplungsstärke  $\Gamma$ . Wie bereits in [197] am Fall der unkorrelierten Plasmaerzeugung beobachtet, ist die anfängliche Iontemperatur gegenüber dem immer noch vorhandenen Korrelationsheizern vernachlässigbar klein, so dass in allen anderen Rechnungen zu Beginn der Simulation die Ionen mit  $v = 0$  initialisiert wurden.

Die Ergebnisse des letzten Abschnitts legten die Wahl eines großen  $N_{\text{block}}$  nahe, um maximale Korrelationen im Gas zu induzieren. Hier zeigt sich nun, dass sich aus einem großen  $N_{\text{block}}$  weitere Vorteile ergeben: Zum einen ist die optimale Anregungsdauer sehr kurz ( $t_{\text{ryd}} \lesssim 0.1 \text{ } \mu\text{s}$ ), wodurch die thermische Bewegung der Atome und somit auch ein eventueller Korrelationsverlust während des Pulses minimiert wird. Zum anderen fällt die Abhängigkeit der Kopplungsstärke von  $t_{\text{ryd}}$  bei hohem  $N_{\text{block}}$  wesentlich schwächer aus, so dass sich hier eine größere Toleranz bei der experimentellen Umsetzung ergibt. Die höchste Kopplungsstärke von  $\Gamma \approx 29$  gewinnen wir für  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ,  $n = 70$  und  $t_{\text{ryd}} \approx 0.1 \text{ } \mu\text{s}$ .

### 4.6.3. Laserverstimmung

In den vorherigen Abschnitten wurde die Laseranregung immer resonant, d. h. mit  $\Delta = 0$ , durchgeführt. Die Auswirkungen einer endlichen Verstimmung  $\Delta$  des Pump-

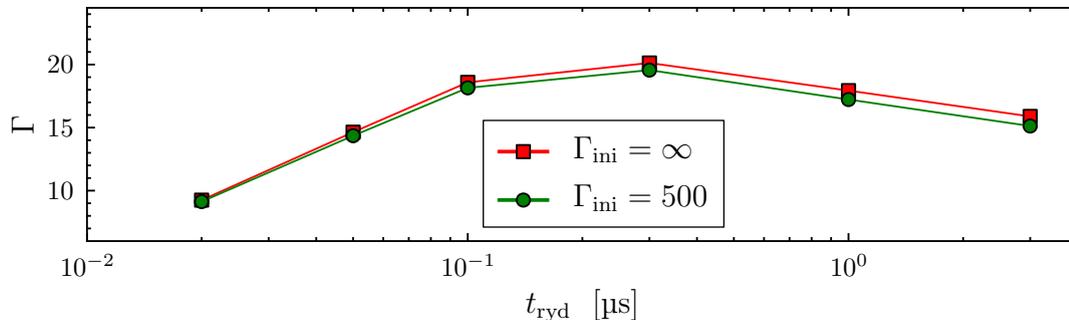


Abbildung 4.16.: Kopplungsparameter  $\Gamma$  als Funktion der Anregungsdauer  $t_{\text{ryd}}$  für  $\rho_{\text{at}} = 3.37 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ,  $n = 40$  und verschiedene anfängliche Iontemperaturen. Werden sämtliche Ionen mit der Geschwindigkeit  $v = 0$  initialisiert ( $\square$ ), so ergibt sich ein nur unwesentlich höheres  $\Gamma$  als im Fall einer endlichen Iontemperatur ( $\Gamma = 500$ ) bei Beginn der Simulation ( $\circ$ ).

pulses auf die realisierbare Kopplungsstärke  $\Gamma$  sind in Abbildung 4.17 zusammengefasst. Wir beobachten eine starke Abhängigkeit des Korrelationsgrades und bei negativen Verstimmungen teilweise auch enorme Steigerungen von  $\Gamma$  gegenüber der resonanten Anregung. So erreichen wir beispielsweise für das Rydberg-Niveau  $n = 40$  bei  $\Delta/(2\pi) \approx -4 \text{ MHz}$  mit  $\Gamma \approx 28$  nahezu eine Verdopplung der Kopplungsstärke. Bei höheren Zuständen  $n > 40$  fällt die Zunahme der Korrelationen etwas geringer aus, liegt aber für alle gezeigten Parameter immer noch im Bereich von  $\gtrsim 20\%$ . Die Kopplungsstärke nimmt bei zu kleinem  $\Delta$  jedoch wieder ab. Ebenso findet man bei positiver Laserverstimmung eine Unterdrückung der Korrelationen.

Diese Abhängigkeit der Kopplungsstärke von der Laserverstimmung lässt sich anschaulich mit Hilfe der abstandsabhängigen Anregungswahrscheinlichkeit  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  erklären. In Anlehnung an Abbildung 4.5 zeigt Abbildung 4.18  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  für verschiedene Laserverstimmungen in einem Zwei-Teilchen-System. Bei resonanter Anregung bleibt die Wahrscheinlichkeit, ein weiteres Rydberg-Atom jenseits des blockierten Volumens  $r > r_{\text{block}}$  zu erzeugen, konstant. Wie bereits oben diskutiert, ist eine Sättigung des Systems nötig, um den typischen Abstand benachbarter Rydberg-Atome in den Bereich von  $r_{\text{block}}$  zu bringen. Eine negative Laserverstimmung  $\Delta$  kann dieses Verhalten ändern und schon direkt bei Beginn der Rydberg-Anregung eine selektive Anregung mit wohldefinierten Rydberg-Rydberg-Abständen erzielen. Wir erhalten im Abstand, bei dem die lokale Verstimmung  $\Delta_i$  gerade die Laserverstimmung  $\Delta$  aufhebt, die maximale Anregungswahrscheinlichkeit (siehe Abbildungen 4.18 und 4.5). Nur in diesem Bereich erfolgt eine resonante Anregung, und für größere Abstände fällt  $\rho_{\text{rr}}^\infty$  zunächst ab. Jenseits des Blockaderadius,  $r > r_{\text{block}}$ , im Bereich vernachlässigbarer Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung, ergibt sich wieder eine konstante Anregungswahrscheinlichkeit, die aufgrund der endlichen Laserverstimmung nun aber kleiner ausfällt als für  $\Delta = 0$ .

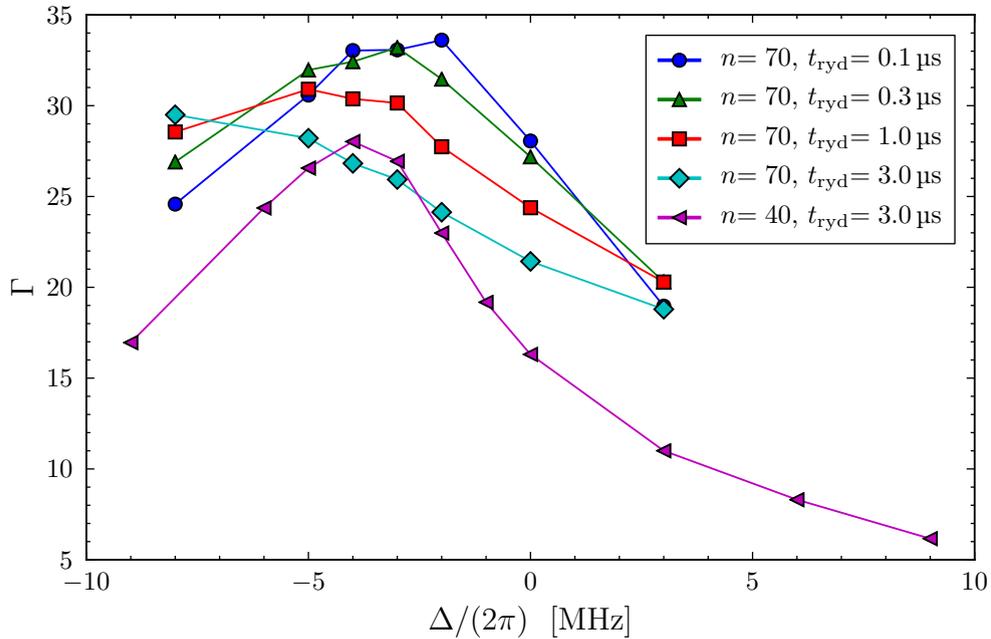


Abbildung 4.17.: Kopplungsparameter  $\Gamma$  als Funktion der Laserverstimmung  $\Delta$  für  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ,  $t_{\text{ryd}} = 3 \mu\text{s}$  und verschiedene  $n$ .

Die zusätzliche Abstandsselektion durch den Peak in  $\rho_{\text{rr}}^{\infty}$  führt bei abnehmendem  $\Delta$  zunächst zu einer Verstärkung der Korrelationen. Wie wir in Abbildung 4.18 sehen, rückt der Peak bei sinkendem  $\Delta$  nicht nur zu kleineren Abständen, sondern wird auch schmaler. Somit wird zunächst die Selektion weiter verstärkt, da die wahrscheinlichen Abstände auf einen kleineren Bereich eingegrenzt werden. Wird der Peak jedoch so schmal, dass bei der vorgegebenen Dichte  $\rho_{\text{at}}$  nicht mehr ausreichend Grundzustandsatome im Bereich des Peaks zu finden sind, nimmt  $\Gamma$  wieder ab. Anhand der Kurven für  $n = 70$  und verschiedene Anregungszeiten  $t_{\text{ryd}}$  wird deutlich, dass durch eine Verlängerung der Pumpzeit ein ähnlicher Effekt wie durch eine Erhöhung der Dichte erzielt wird. Mit zunehmendem  $t_{\text{ryd}}$  wandert das Maximum der Kurven zu kleineren Verstimmungen, da die längeren Anregungszeiten nun die Anregungswahrscheinlichkeit insgesamt erhöhen und somit auch eine effiziente Abstandsselektion mit geringeren Peakbreiten erlauben.

Für große Abstände ist in der Anregungswahrscheinlichkeit  $\rho_{\text{rr}}^{\infty}$  lediglich der Betrag von  $\Delta$  ausschlaggebend, so dass man bei positiver Verstimmung das gleiche  $\rho_{\text{rr}}^{\infty}$  erhält wie mit  $\Delta < 0$  (siehe Abbildung 4.18). Auf kurzen Entfernungen verstärkt eine positive Laserverstimmung aber die lokale Verstimmung, so dass bei allen Abständen eine verringerte Anregungswahrscheinlichkeit herrscht. Hier ließe sich zunächst vermuten, dass der daraus resultierende ungesättigte Zustand des Systems für die verringerten Korrelationen verantwortlich ist. Die Kurven für  $n = 70$  zeigen jedoch bei unterschiedlichen Anregungsdauern keine deutliche Zunahme von  $\Gamma$ . Bei positiver

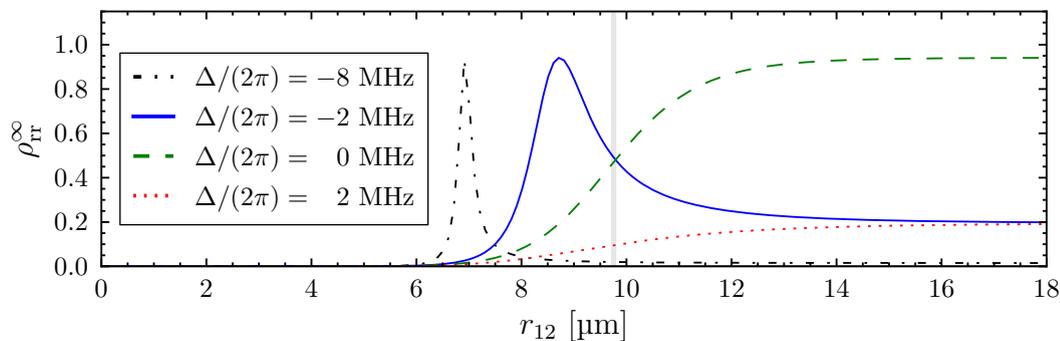


Abbildung 4.18.: Population  $\rho_{tr}^\infty$  im Zwei-Teilchen-System: Besetzungswahrscheinlichkeit des Rydberg-Niveaus von Atom 2 als Funktion des Abstands  $r_{12}$  vom bereits angeregten Atom 1 für verschiedene Verstimmungen  $\Delta$  des Pumplasers. Die graue senkrechte Linie markiert den Blockaderadius  $r_{block}$  nach Gleichung (4.9) bei resonanter Anregung ( $\Delta = 0$ ).

Laserverstimmung kann selbst eine verlängerte Anregungsdauer und eine Sättigung des Systems nicht zum gleichen  $\Gamma$  der resonanten Anregung führen, da der Anstieg von  $\rho_{tr}^\infty$  für  $\Delta > 0$  im Bereich des Blockaderadius wesentlich flacher ausfällt. Somit ist der Blockaderadius noch unschärfer bestimmt, wodurch die Entfernungen benachbarter Rydberg-Atome stärker variieren und schwächere Korrelationen resultieren.

Die obige Diskussion der Auswirkungen von  $\Delta$  auf die Korrelationen gilt für den Fall einer repulsiven Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung. Im Allgemeinen muss man zur zusätzlichen Abstandsselektion das Vorzeichen von  $\Delta$  so wählen, dass es der durch die Rydberg-Rydberg-Wechselwirkung induzierten lokalen Verstimmung entgegenwirkt. Für eine attraktive Wechselwirkung bestehen also qualitativ genau die gleichen Abhängigkeiten bei einer Umkehrung des Vorzeichens von  $\Delta$ .

Wie wir in diesem Abschnitt sehen konnten, stellt die Laserverstimmung eine der wichtigsten Größen zur Maximierung der Kopplungsstärke dar. Durch die zusätzliche Abstandsselektion bei negativen  $\Delta$  lässt sich eine deutliche Steigerung der Korrelationen bewirken. Besonders stark fällt sie bei kleinen  $N_{block}$  und langen Anregungszeiten aus. Die höchste Kopplungsstärke von  $\Gamma \approx 35$  erhalten wir für  $n = 70$ ,  $\rho_{at} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ,  $t_{ryd} = 0.1 \mu\text{s}$  und  $\Delta/(2\pi) \approx -2$  MHz.

#### 4.6.4. Anteil ionisierter Rydberg-Atome

In Abschnitt 4.4 wurde gezeigt, dass der Mikrowellenpuls bei geschickter Parameterwahl ohne übermäßiges Aufheizen der Elektronen sämtliche Rydberg-Atome ionisiert. Der Fall einer unvollständigen Ionisierung des Rydberg-Systems, z. B. durch einen nicht optimal eingestellten Mikrowellenpuls oder ein gänzlich anderes Ionisationsverfahren, ist in Abbildung 4.19 beispielhaft anhand einer Rydberg-Anregung auf  $n = 70$  bei der atomaren Dichte  $\rho_{at} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  veranschaulicht. Zur Variation des

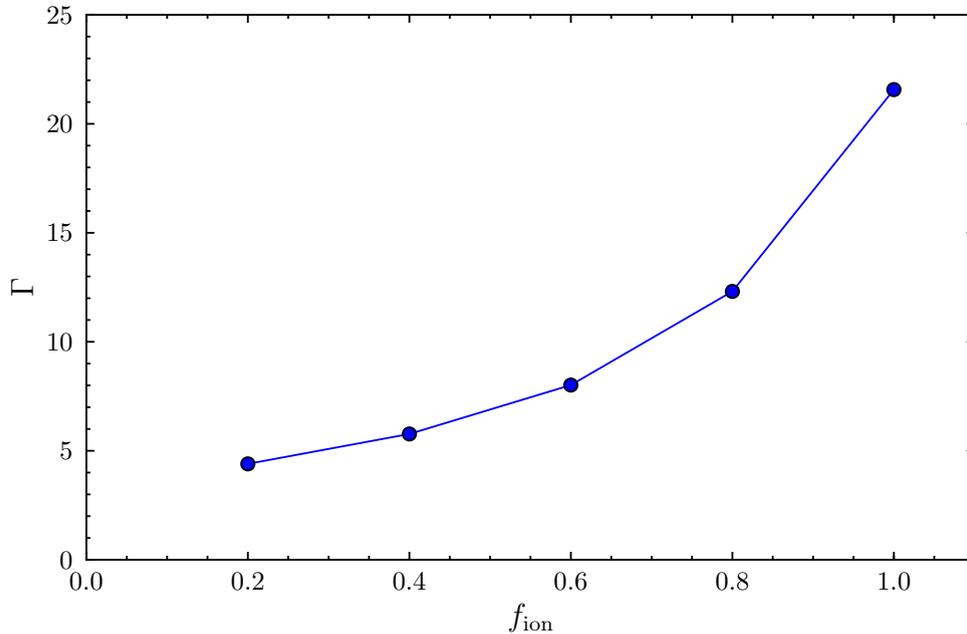


Abbildung 4.19.: Kopplungsstärke  $\Gamma$  als Funktion des Anteils ionisierter Rydberg-Atome  $f_{\text{ion}}$  für  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ ,  $n = 70$  und  $t_{\text{ryd}} = 3 \mu\text{s}$ .

Ionisationsgrad  $f_{\text{ion}}$  wurde die Relaxation mit einem zufällig ausgewählten Anteil der Rydberg-Atome simuliert. Die erreichbare Kopplungsstärke halbiert sich zwar bereits bei  $f_{\text{ion}} \approx 0.8$  im Vergleich zur 100%igen Ionisierung, bleibt aber bis zu einem Ionisationsgrad von  $f_{\text{ion}} \approx 0.4$  noch immer mindestens doppelt so groß wie bei der konventionellen Plasmaherstellung.

Hier zeigt sich somit ein weiterer Vorteil des neuen Herstellungsverfahrens: eine große Toleranz gegenüber der Effizienz der Ionisationsmethode. Selbst wenn bei einer experimentellen Umsetzung nur geringe Ionisationsgrade erreicht werden sollten, ergeben sich noch immer vielversprechende Perspektiven zur signifikanten Steigerung der Plasmakorrelationen.

## 4.7. Maximierung der Kopplungsstärke

Wie wir in den vorangegangenen Abschnitten sehen konnte, hängt die Kopplungsstärke von zahlreichen Parametern des neuen Erzeugungsschemas ab. Diese lassen sich mit den aktuellen experimentellen Techniken in hohem Maße kontrollieren. Verschiedene Rydberg-Zustände können präzise adressiert und die Laserverstimmungen sowie die Rabi-Frequenzen über weite Bereiche eingestellt werden. Zudem ermöglichen konventionelle magneto-optische Atomfallen die nötigen atomaren Dichten von bis zu  $\rho_{\text{at}} \approx 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  zu erreichen. Zur Maximierung der Kopplungsstärke ist nun eine sorgfältige Abstimmung der verschiedenen Parameter erforderlich.

Entscheidend für die Einstellung hoher Korrelationen ist die Erzeugung von Rydberg-Atomen in wohldefinierten Abständen. Bei einer resonanten oder positiv verstimmtten Laseranregung ( $\Delta > 0$ ) wird lediglich ein minimaler Rydberg-Rydberg-Abstand,  $r_{\text{block}}$ , vorgegeben; größere Abstände sind zunächst alle gleich wahrscheinlich (siehe Abbildung 4.18). Der Blockaderadius wird erst bei ausreichender Anregungszeit  $t_{\text{ryd}}$  durch eine Sättigung des Systems zum typischen Abstand benachbarter Rydberg-Atome. Durch die fehlende obere Schranke in der abstandsabhängigen Anregungswahrscheinlichkeit  $\rho_{\text{rr}}^{\infty}$  kommt es jedoch selbst bei einer Sättigung des Systems zu größeren Variationen in den Rydberg-Rydberg-Abständen.

In dieser Hinsicht bietet die Anregung mit einer negativen Verstimmung den entscheidenden Vorteil, dass aufgrund des Maximums in  $\rho_{\text{rr}}^{\infty}$  (siehe Abbildung 4.18) von Beginn an die wahrscheinlichen Rydberg-Rydberg-Abstände auf einen schmalen Bereich um die Position des Maximums  $r_{\text{m}}$  beschränkt bleiben. Wegen der geringeren Streuung der Entfernungen benachbarter Rydberg-Atome resultieren daraus höhere Korrelationen als bei der Anregung mit  $\Delta \geq 0$ . Ein ähnlicher Effekt sollte sich auch durch Variation der Rabifrequenzen  $\Omega$  und  $\omega$  erzielen lassen. Sie erlauben neben der Justierung der Zeitskala des Anregungsprozesses ebenfalls eine Kontrolle der abstandsabhängigen Anregungswahrscheinlichkeit, ähnlich wie im Fall einer negativen Laserverstimmung. Dies wird möglich, da man für  $\Omega \gg \omega$  und den hier betrachteten Pumpzeiten  $t_{\text{ryd}} \lesssim 3 \mu\text{s}$  eine Unterdrückung der Anregungswahrscheinlichkeit für einen resonanten Laserpuls und dafür eine Doppelpeakstruktur (*Autler-Townes-Splitting*) mit Maxima bei  $\pm\Delta_0$  erhalten [15] kann. Die resonante Anregung befördert folglich die Erzeugung von Rydberg-Atomen im Abstand  $r_0$ , bei dem für die lokale Verstimmung  $\Delta_i(r_0) = \Delta_0$  gilt.

Um mit einer solchen abstandsselektiven Anregung die Wahrscheinlichkeit zur Erzeugung von Rydberg-Atomen im Bereich des Maximums von  $\rho_{\text{rr}}^{\infty}$  zu steigern, ist einerseits eine Vergrößerung der Anzahl von Grundzustandsatomen im Abstand dieses Maximums und andererseits auch eine Verlängerung der Anregungszeit  $t_{\text{ryd}}$  möglich. Die Anzahl der Grundzustandsatome in dieser Entfernung kann mit der Anzahl blockierter Grundzustandsatome pro Rydberg-Atom  $N_{\text{block}}$  quantifiziert werden. Sowohl eine Erhöhung der Dichte  $\rho_{\text{at}}$  als auch des Rydberg-Niveaus  $n$  erhöht  $N_{\text{block}}$  und führt somit zu Korrelationssteigerungen. Durch längere Pumpdauern  $t_{\text{ryd}}$  wird zunächst ebenfalls die Anregung von Atomen im Bereich des Maximums wahrscheinlicher, und Korrelationen nehmen zu. Da jedoch ab einer gewissen Anregungsdauer die entsprechend dem gegebenen  $N_{\text{block}}$  maximale Anzahl an Atomen mit dem Abstand  $r_{\text{m}}$  erzeugt wurde, steigt für längere Zeiten die Wahrscheinlichkeit zur Erzeugung von größeren und kleineren Rydberg-Rydberg-Abständen überproportional an, woraus wiederum ein Korrelationsverlust folgt. Somit muss die Pumpdauer genau auf die vorhandene Blockadezahl  $N_{\text{block}}$  eingestellt werden, um optimale Korrelationen zu gewährleisten.

Mit der Wahl des Zustands  $n = 70$ , einer Dichte von  $\rho_{\text{at}} = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$  und bei vollständiger Ionisierung des Rydberg-Systems erreicht man für eine Anregungszeit von  $t_{\text{ryd}} \approx 0.1 \mu\text{s}$  bereits einen Kopplungsparameter von  $\Gamma \approx 30$ . Die maximale Kopplungsstärke von  $\Gamma \approx 35$  konnte bei zusätzlicher Nutzung einer negativen Laserstimmung zur stärkeren Selektion der Rydberg-Rydberg-Abstände erzielt werden.

---

Somit erlaubt das vorgeschlagene Verfahren, die Korrelationen gegenüber der konventionellen Plasmaherstellung um mindestens eine Größenordnung zu erhöhen.



## 5. Zusammenfassung und Ausblick

Das zentrale Anliegen der vorliegenden Arbeit war es, die Auswirkungen von Korrelationen auf Relaxationsprozesse in ultrakalten Plasmen zu klären. Aufgrund ihrer extrem tiefen Temperaturen eignen sich diese Systeme ganz besonders für eine solche Analyse, da sie selbst bei sehr geringen Dichten starke Kopplungen realisieren und somit gestatten, diverse Relaxationsprozesse zeitaufgelöst zu beobachten. Wenngleich sich ultrakalte Plasmen rein klassisch behandeln lassen, steht ihre theoretische Beschreibung dennoch einigen Herausforderungen gegenüber, die hier im Rahmen von aufwendigen numerischen Vielteilchensimulationen angegangen wurden. Dies erlaubte, bisherige Ansätze zur Beschreibung verschiedener Relaxationsprozesse nahezu näherungsfrei auf den Bereich starker Kopplungen zu erweitern, wobei zugleich eine mögliche experimentelle Verifizierung der getroffenen Vorhersagen eine wichtige Rolle spielte. Besonders Letztere erforderte eine Konfluenz von Konzepten sowohl aus der Optik als auch aus der Atom- und Plasmaphysik, woraus der interdisziplinäre Charakter der derzeitigen Erforschung ultrakalter Plasmen ersichtlich wurde.

**Kapitel 2** widmete sich der Frage, wie Atome in einem Plasma bei sehr tiefen Temperaturen entstehen – ein Prozess, der für UKP besonders relevant ist, da er die Lebensdauer und die elektronischen Kopplungsstärken des Plasmas entscheidend bestimmt. Wie in Abschnitt 2.1 erläutert, wird diese Frage seit geraumer Zeit diskutiert [111, 112, 157, 259, 289, 290], vor allem, weil etablierte Raten für Dreikörperrekombination eine enorme Temperaturabhängigkeit  $T_e^{-9/2}$  aufweisen. Diese liefern für hohe Temperaturen eine hervorragende Beschreibung, führen jedoch zu unphysikalischen Vorhersagen im ultrakalten Bereich. In der Tat galt dieses Problem als zentrale Motivation früher UKP-Experimente [140, 141], konnte jedoch bisher nicht gelöst werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde dazu der für atomare Prozesse übliche Ansatz von isolierten Stößen aufgegeben und eine möglichst näherungsfreie Beschreibung mittels aufwendiger Vielteilchensimulationen entwickelt. Um die Rekombination von anderen Relaxationsprozessen zu isolieren, wurde zunächst ein OCP-Modell für ein einzelnes in ein Elektronenplasma eingebettetes Ion betrachtet. Durch eine detaillierte Analyse der einzelnen Teilchentrajektorien konnte dabei das chemische Bild, d. h. die Trennung von gebundenen und freien Elektronen, sowie das Konzept des kinetischen Flaschenhalses auf den Bereich stark gekoppelter klassischer Plasmen erweitert werden. Hierbei zeigte sich, dass Letzterer in der durch Elektron-Elektron-Korrelationen abgesenkten Ionisationsschwelle verschwindet, was die Rekombinationsdynamik von stark gekoppelten Plasmen grundlegend ändert. Insbesondere konnte gezeigt werden, dass die Rekombinationsrate bei tiefen Temperaturen keine Divergenz aufweist, sondern stattdessen auf einen konstanten Wert unterhalb der elektronischen Plasmafrequenz konvergiert. Um einen direkten Kontakt zu zukünftigen UKP-Experimenten herzustellen, wurde der OCP-Ansatz

anschließend auf ein Zwei-Komponenten-Plasma erweitert. Hierbei zeigte sich, dass derzeit erreichbare elektronische Kopplungsstärken auf  $\Gamma \lesssim 0.5$  limitiert bleiben.

Die Aussicht auf einen experimentellen Nachweis von Korrelationseffekten wird durch diese Rechnungen dennoch nahegelegt. Interessanterweise scheinen bereits frühere Experimente an ultrakalten Kalzium-Plasmen [70] Hinweise für ein solches Verhalten zu geben. Hierbei konnte das Zeitverhalten der Fluoreszenzstrahlung von tief liegenden Übergängen in der Frühphase der Plasmarelaxation gemessen werden, was indirekten Aufschluss über die Rekombinationskaskade gibt. In [70] wurden die Messungen im Rahmen von herkömmlichen Ratengleichungen (vgl. Abschnitt 2.1) modelliert. Erwartungsgemäß liefert dieser Ansatz im schwach gekoppelten Bereich eine gute Beschreibung, zeigt aber auch messbare Diskrepanzen mit sinkender Elektronentemperatur. Die hier vorgestellten Simulationen, gekoppelt mit einer quantenmechanischen Beschreibung tiefliegender Strahlungsübergänge in Zweielektronen-Atomen, liefern einen vielversprechenden Ansatz, um dieser Frage nachzugehen. Derartige Rechnungen erscheinen realisierbar und könnten somit wichtige Hinweise zur Beobachtung des Tieftemperaturverhaltens von Rekombinationsprozessen in UKP-Experimenten geben.

**In Kapitel 3** wurde die Relaxation der ionischen Geschwindigkeitsverteilung und dabei die Rolle von räumlichen und zeitlichen Korrelationen untersucht. Diese Frage ist unter anderem auch für dichte Plasmen von Bedeutung, deren Dynamik in aktuellen Experimenten stark durch solche Relaxationsprozesse bestimmt wird. Die Landau-Spitzer-Theorie, die eine zentrale Rolle bei der Beschreibung der Relaxationsdynamik idealer Plasmen spielt, verliert wiederum im stark gekoppelten Regime ihre Gültigkeit. In der Vergangenheit wurden deshalb verschiedene Erweiterungen vor allem in Bezug auf dichte Plasmen vorgeschlagen, für die direkte experimentelle Tests jedoch äußerst schwierig bleiben. In enger Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. T. C. Killian konnte nun im Rahmen dieser Arbeit erstmalig das Relaxationsverhalten im stark gekoppelten Regime mit Hilfe von ultrakalten Plasmen zeitaufgelöst gemessen werden. Das Grundprinzip der Experimente beruht auf der Lasermanipulation interner ionischer Zustände, für die wir eine quanten-klassische Vielteilchenbeschreibung entwickeln konnten. Diese ermöglichte es unter anderem, die Relaxationsdynamik aus den experimentellen Daten zu bestimmen. Ein wichtiger Schritt war hierbei die Einführung eines einfachen nicht-markovschen Relaxationsmodells, das es schließlich gestattete, die Relaxationsraten aus den numerischen Simulationen und experimentellen Messungen zu extrahieren. Hierbei zeigte sich eine gute Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment, aber auch eine signifikante Abweichung von einigen früheren Arbeiten, die in der Zukunft noch näher untersucht werden müssen.

Anknüpfungspunkte ergeben sich sowohl aus theoretischer als auch aus experimenteller Sicht. Da sich bisherige theoretische Arbeiten nahezu ausschließlich auf Temperaturrelaxation zwischen Elektronen und Ionen in dichten Plasmen konzentrierten, war nur ein indirekter Vergleich mit den hier präsentierten Ergebnissen möglich. Derzeit diskutierte Verallgemeinerungen auf endliche Massenverhältnisse waren bisher nur störungstheoretisch [42] möglich. Hierfür bieten wiederum MD-Simulationen im Gleichgewicht einen vielversprechenden Ansatz, der zudem die in Abschnitt 3.6

gefundenen Abweichungen im schwach gekoppelten Regime erklären könnte. Dies würde letztlich auch direkte Vergleiche zu Elektron-Ion-Prozessen ermöglichen (vgl. Abschnitt 3.5.2), so dass UKP-Experimente auch einen Beitrag zu aktuellen Fragen in Bezug auf dichte Plasmen leisten könnten. Desweiteren wurde der Geschwindigkeitsabhängigkeit der Relaxationsrate in der Literatur bisher wenig Aufmerksamkeit gewidmet. Das hier aufgedeckte Verschwinden derselbigen hat jedoch interessante Konsequenzen und führt z. B. dazu, dass sämtliche Relaxationsprozesse (für Geschwindigkeiten, Temperatur, etc.) durch eine einzige universelle Rate beschrieben werden können. Der Grund für dieses Verhalten ist bisher nicht gut verstanden und könnte im Rahmen der hier betrachteten Lenard-Balescu-Gleichung, zusammen mit akkuraten Beschreibungen lokaler Feldkorrekturen für stark gekoppelte Plasmen, geklärt werden.

Aus experimenteller Sicht eröffnet das hier vorgestellte Pump-Probe-Verfahren vielversprechende Perspektiven für die Untersuchungen der dynamischen Eigenschaften ultrakalter Plasmen. So zeigen unsere Rechnungen z. B. einen direkten Zusammenhang zwischen der optisch induzierten Geschwindigkeitsdynamik und den Geschwindigkeitsautokorrelationen im Plasmagleichgewicht. Eine weitere Untersuchung würde einen direkten Zugang zu Diffusions- und Transportkoeffizienten eröffnen, welche sich in Zukunft auch durch räumlich aufgelöstes optisches Pumpen untersuchen lassen werden. Derzeit wird zudem an einer Verbesserung der momentanen Zeitauflösung gearbeitet, was zukünftige Untersuchungen von nicht-markovschen Effekten möglich machen wird. Stark eingeschränkt werden diese Studien jedoch durch das ionische Korrelationsheizen, das die realisierbaren Kopplungsparameter bisher auf einen recht engen Bereich beschränkt. Eine Erweiterung in den schwach gekoppelten und insbesondere stark gekoppelten Bereich wäre daher ohne Zweifel ein wichtiger Schritt nicht nur für die hier vorgestellten Untersuchungen.

Dies gab die Motivation für die Arbeiten in **Kapitel 4**, in dem ein neuartiges Schema zur Plasmaerzeugung vorgestellt wurde, das zu einer deutlichen Steigerung der ionischen Kopplungsstärke  $\Gamma$  führt. Dieses Verfahren basiert auf der Unterdrückung des Korrelationsheizens unter Ausnutzung starker Korrelationen, die sich durch Laseranregung eines ultrakalten Rydberggases erzeugen lassen [13, 60, 209, 232, 244, 260]. Letztere wurde hier im Rahmen von semiklassischen Monte-Carlo-Simulationen beschrieben, die eine voll korrelierte Behandlung der Vielteilchenanregungsdynamik von einigen  $10^5$  Atomen ermöglichte. Eine detaillierte Analyse der anschließenden zustandsselektiven Ionisation der Rydberg-Atome und der darauffolgenden Relaxation des so erzeugten Plasmas zeigte, dass sich der Kopplungsgrad auf diese Weise in der Tat erheblich steigern lässt. Aus der Rydberg-Anregung ergeben sich eine Reihe von Kontrollparametern, deren Einfluss in dieser Arbeit detailliert untersucht wurde, um die erreichbaren Kopplungsparameter zu optimieren. Damit eröffnet die hier vorgestellte Methode die Erschließung eines neuen Parameterregimes für das Studium ultrakalter Plasmen, mit einem nur minimalen Mehraufwand, der in vielen derzeitigen Experimenten direkt realisierbar ist. Darüberhinaus wird auch die korrelierte Anregungsdynamik von ultrakalten Rydberg-Gasen intensiv untersucht, wobei direkte Messungen der erzeugten Strukturen derzeit noch eine große Herausforderung darstellen. Das hier entwickelte Verfahren bietet in diesem Zusammenhang einen

vielversprechenden Ansatz zur Diagnose ultrakalter korrelierter Atomgase mittels Plasmen.

Zukünftige Arbeiten werden vor allem eine weitere Steigerung der derzeit realisierbaren Kopplungsparameter anstreben. Als besonders lohnenswert erscheint hierbei die Verwendung von stehenden Wellen zur Anregung der korrelierten Rydberg-Atome. Wählt man die Periode des so erzeugten optischen Gitters vergleichbar mit dem Blockaderadius der wechselwirkenden Rydberg-Atome, sollte dabei eine erhebliche Steigerung der erreichbaren Kopplungsparameter zu erwarten sein. Für dreidimensionale Gitterstrukturen [196] könnte dies unter Umständen sogar zu Coulomb-Kopplungsparametern im Bereich der Kristallisationsschwelle von  $\Gamma \approx 174$  führen. Im Zuge der anschließenden Plasmaexpansion kühlen sich die Ionen weiter ab [207], was die interessante Frage aufwirft, ob ein so erzeugtes frei expandierendes Plasma sogar spontan kristallisieren kann.

Als Alternative zur Erzeugung starker Korrelationen wurde in der Vergangenheit Laserkühlung der Ionen vorgeschlagen [203], was in der Folgezeit zu einigen Experimenten mit Erdalkaliatomen geführt hat. Eine hinreichend effiziente Kühlung konnte bisher jedoch nicht erreicht werden, da das anfängliche Korrelationsheizen die Ionengeschwindigkeiten über die Dopplergeschwindigkeit hebt und die entsprechenden Kühlraten damit stark absenkt. Eine Kombination beider Verfahren, die in derzeitigen Experimenten mit Strontium- [50, 243] und Kalzium-Atomen [25, 70] machbar wäre, würde dieses Problem auf elegante Weise lösen. Um diese vielversprechende Erweiterung zu untersuchen und die anschließende Plasmadynamik besser zu verstehen, erscheinen eingangs erwähnte Hybrid-MD Rechnungen, die sowohl die Rydberg-Anregung als auch die Laserkühlung und Plasmaexpansion in vollem Umfang beschreiben können, äußerst interessant.

An einer experimentellen Umsetzung der hier entwickelten Methode wird derzeit intensiv gearbeitet (Prof. T.C. Killian). Im Gegensatz zu dem in dieser Arbeit untersuchten Ionisationsverfahrens wollen wir dabei ein kontrolliert erzeugtes Plasma nutzen, das nach der Anregung des atomaren Gases die Rydberg-Atome über Elektronenstoßprozesse ionisiert. Hierbei ist eine hinreichend große Anzahl an freien Elektronen nötig, um eine effiziente Ionisation zu gewährleisten. Andererseits sollte eine zu große Anzahl an zufällig erzeugten Plasmateilchen zu einer Verringerung der erreichbaren Kopplungsstärken führen. Um diese sensitive Balance näher zu untersuchen, bieten sich wiederum Hybrid-MD-Simulationen an, in denen MD-Simulationen der Ionendynamik mit einer ratenbasierten Beschreibung der schnellen Ionisations- und Rekombinationsdynamik der Elektronen kombiniert wird. Ziel dabei ist es, den Einfluss des sekundären Plasmas besser zu verstehen und somit optimale Vorgehensweisen für die geplanten Experimente zu finden. Lassen sich hierbei in der Tat geeignete Bedingungen finden, so stellt dies einen wichtigen Schritt auf dem Weg zur ersten Erzeugung von neutralen Plasmakristallen dar.

# Anhang



# A. Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung in periodischen Systemen

In den MD-Simulationen dieser Arbeit stellt die Auswertung der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ladungen den Schritt mit dem größten Rechenaufwand dar. Da zudem stets periodische Randbedingungen angenommen werden, ist bei den betrachteten Teilchenmengen und erforderlichen Genauigkeiten eine direkte Summation über alle Teilchen mit vertretbarem Aufwand nicht realisierbar. In diesem Abschnitt werden deshalb die verwendeten Verfahren zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung in periodischen Vielteilchensystemen vorgestellt.

Die Energie eines periodisch fortgesetzten Systems aus  $N$  Punktladungen im Volumen  $V = L^3$  beträgt

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N q_i \phi(\mathbf{r}_i), \quad (\text{A.1})$$

wobei das Potential der Punktladung  $q_i$  am Ort  $\mathbf{r}_i$  gegeben ist durch

$$\phi(\mathbf{r}_i) = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{j=1}^N \prime \frac{q_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}L|}. \quad (\text{A.2})$$

Der Gittervektor  $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ ,  $n_\alpha \in \mathbb{Z}$ ,  $\alpha \in x, y, z$ , läuft über sämtliche periodischen Bilder der Ursprungszelle; der Strich an der Summe über  $j$  bedeutet, dass der Term  $j = i$  für den Fall  $\mathbf{n} = \mathbf{0}$  ausgelassen wird. Zur Berechnung der Energie ist Gleichung (A.1) jedoch nicht praktikabel, da die Summe in Gleichung (A.2) nur bedingt konvergent ist. Ein für die numerische Auswertung erforderlicher Abbruch der Summe nach einer endlichen Anzahl von Termen liefert dadurch nur eine schlechte Näherung für die potentielle Energie.

Verschiedene Verfahren und Näherungen erlauben es jedoch, die potentielle Energie gemäß (A.1) ohne explizite Ausführung der vollständigen Summation in Gleichung (A.2) mit hoher Präzision zu bestimmen. Im Folgenden werden die beiden in dieser Arbeit verwendeten Methoden zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung eingehender erläutert.

## A.1. Ewald-Summation

Ewald fand bereits 1921 [79] im Zusammenhang mit der Berechnung von Gittersummen in Kristallen eine Möglichkeit zur Ausführung der bedingt konvergenten

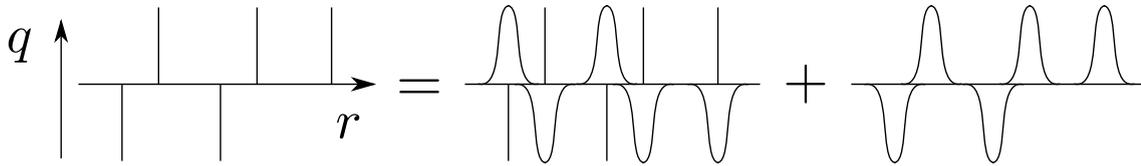


Abbildung A.1.: Schematische Darstellung der Ewald-Zerlegung: Das System der Punktladungen wird in ein System mit gaußförmig abgeschirmten Punktladungen und ein System aus entgegengesetzt geladenen ausgedehnten Ladungsverteilungen unterteilt.

Summe in Gleichung (A.2), indem er sie in zwei absolut konvergierende Anteile aufspaltete. Heutzutage ist die nach ihm benannte Ewald-Summation ein weit verbreitetes Verfahren zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung in periodischen Systemen, vor allem im Zusammenhang mit MD-Simulationen [261], und gehört zu den Standardthemen klassischer Fachbücher [84, 236]. Zunächst soll eine physikalische Motivation für das Auftrennen der Summe gegeben werden, bevor sich eine genauere mathematische Betrachtung anschließt.

Die Aufspaltung der Summe erfolgt im Wesentlichen in einen kurz- und einen langreichweitigen Anteil,  $U_{KW}$  bzw.  $U_{LW}$ , gemäß

$$U = U_{KW} + U_{LW} + U_S. \quad (A.3)$$

Der Term  $U_S$  repräsentiert die Selbstenergie, die für jedes Teilchen gleich groß und somit unabhängig von den Teilchenpositionen ist. Die physikalische Interpretation der Ewald-Zerlegung in Gleichung (A.3) ist schematisch in Abbildung A.1 dargestellt.

Im kurzreichweitigen Teil der Summe  $U_{KW}$  werden die Punktladungen jeweils mit einer entgegengesetzt gleich großen ausgedehnten Ladungsdichte umgeben. Eine solchermaßen abgeschirmte Punktladung wirkt aus großer Entfernung als neutrales Teilchen. Somit muss nur das Nahfeld jedes Teilchens berücksichtigt werden, um Konvergenz von  $U_{KW}$  zu erhalten, da die Wechselwirkung auf großen Distanzen abgeschirmt ist. Der langreichweitige Teil  $U_{LW}$  beinhaltet die Wechselwirkung der ausgeschmierten Ladungsverteilungen untereinander und korrigiert damit den kurzreichweitigen Teil  $U_{KW}$ , um in der Summe wieder das System aus Punktladungen zu beschreiben. Eine rasche Konvergenz von  $U_{LW}$  wird durch die Berechnung im Fourier-Raum realisiert.

Üblicherweise werden für die Abschirmung der Punktladungen gaußförmige Ladungsdichten

$$\rho_G(r) = q \left( \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \right)^3 e^{-(\alpha r)^2} \quad (A.4)$$

mit Ladung  $q$  und Breite  $\alpha$  gewählt. Mit Hilfe der Poisson-Gleichung

$$-\Delta\phi(\mathbf{r}) = 4\pi \rho(\mathbf{r}) \quad (A.5)$$

und unter Ausnutzung der Kugelsymmetrie von Gleichung (A.4) gewinnen wir das Potential der gaußförmigen Ladungsverteilung

$$\phi_G(r) = \frac{q}{r} \operatorname{erf}(\alpha r) \quad (\text{A.6})$$

mit der *Gaußschen Fehlerfunktion*

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (\text{A.7})$$

Das Potential einer Punktladung  $q_i$ , die von einer entgegengesetzt gleich großen Ladungsverteilung  $\rho$  nach Gleichung (A.10) umgeben ist, beträgt somit

$$\phi_{\text{KW}} = \frac{q_i}{r} - \frac{q_i}{r} \operatorname{erf}(\alpha r) = \frac{q_i}{r} \operatorname{erfc}(\alpha r). \quad (\text{A.8})$$

Hierbei ist  $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$  die komplementäre Fehlerfunktion. Insgesamt ergibt sich für den kurzreichweitigen Anteil

$$U_{\text{KW}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{j \neq i}^N \frac{q_i q_j}{r_{ij, \mathbf{n}}} \operatorname{erfc}(\alpha r_{ij, \mathbf{n}}) \quad (\text{A.9})$$

mit  $r_{ij, \mathbf{n}} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j + \mathbf{n}L|$ .

Der langreichweitige Anteil  $U_{\text{LW}}$  beinhaltet die Wechselwirkung der gaußförmigen Ladungsverteilungen untereinander. Die gesamte Abschirmladung beträgt

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} \sum_{j=1}^N \rho_G(|\mathbf{r} - (\mathbf{r}_j + \mathbf{n}L)|), \quad (\text{A.10})$$

wobei die  $N$  Ladungsdichten der Form (A.4) jeweils um die Positionen  $\mathbf{r}_j$  der Punktladungen  $q_j$  zentriert sind. Das entsprechende Potential wird nun durch Lösen der Poisson-Gleichung im Fourierraum

$$k^2 \tilde{\phi}(\mathbf{k}) = 4\pi \tilde{\rho}(\mathbf{k}) \quad (\text{A.11})$$

und anschließende Rücktransformation gewonnen. Hierbei bezeichnet  $\mathbf{k}$  den Gittervektor des reziproken Gitters. Die dazu benötigte Fouriertransformation der Ladungsdichte ergibt sich aus

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\mathbf{k}) &= \int_V d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{j=1}^N \rho_G(|\mathbf{r} - (\mathbf{r}_j + \mathbf{n}L)|) \\ &= \int d\mathbf{r} \sum_{j=1}^N \rho_G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|) \\ &= \sum_{j=1}^N q_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} e^{-\frac{k^2}{4\alpha^2}}. \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Insgesamt erhält man für den langreichweitigen Anteil

$$U_{\text{LW}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \neq 0} \sum_{i,j=1}^N \frac{4\pi q_i q_j}{V k^2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-\frac{k^2}{4\alpha^2}}. \quad (\text{A.13})$$

$U_{\text{LW}}$  enthält für  $i = j$  Beiträge, die durch Wechselwirkung der künstlich eingeführten Gegenladungen mit sich selbst entstehen. Zur Korrektur dieser unphysikalischen Terme wird der Selbstwechselwirkungsanteil  $U_{\text{S}}$  in Gleichung (A.3) addiert, der mit

$$\phi_{\text{G}}(0) = 2q \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \quad (\text{A.14})$$

insgesamt

$$U_{\text{S}} = -\frac{1}{2} \sum_i^N q_i \phi_{\text{G}}(0) = -\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^N q_i^2 \quad (\text{A.15})$$

beträgt.

Da sowohl die Summe des kurzreichweitigen Anteils in Gleichung (A.9) als auch die des langreichweitigen Beitrags in Gleichung (A.13) rasch konvergieren, können sie nach einer endlichen Anzahl von Termen abgebrochen werden. Die Konvergenz der Ewald-Summation wird letztendlich durch drei Parameter bestimmt:  $n_{\text{max}}$ ,  $k_{\text{max}}$  und  $\alpha$ . Dabei beschränkt  $n_{\text{max}}$  die Anzahl der Summanden in der direkten Summe (A.9), indem nur Terme mit  $|\mathbf{n}| < n_{\text{max}}$  berücksichtigt werden. Analog bestimmt  $k_{\text{max}}$  die Anzahl der Terme in der reziproken Summe (A.13). Der Parameter  $\alpha$  kontrolliert das Verhältnis der Konvergenzrate zwischen der direkten und der reziproken Summe.

In dieser Arbeit wird die Ewald-Summation in Kapitel 2 zur Berechnung der Wechselwirkung jedes Elektrons mit dem zentralen Ion und im Bereich schneller Dynamik für die Wechselwirkung der Elektronen untereinander genutzt. Dazu muss die oben vorgestellte Summation noch auf den Fall eines Ein-Komponenten-Plasmas erweitert werden. Zur Berücksichtigung der homogenen Hintergrundladung wird die Gesamtenergie (A.3) um einen weiteren konstanten Term ergänzt [43, 80, 116, 246],

$$U_{\text{H}} = -\frac{1}{2} \frac{\pi}{\alpha^2} \left( \sum_{i=1}^N q_i \right)^2. \quad (\text{A.16})$$

Für die praktische Umsetzung in den MD-Simulationen des Ein-Komponenten-Plasmas wird das Coulomb-Potential durch das effektive Ewald-Potential in der Form [43]

$$\phi(r) = \phi^{(1)}(r) + \phi^{(2)}(r) \quad (\text{A.17})$$

ersetzt. Der erste Teil umfasst nur die Wechselwirkung in der Ursprungszelle,

$$\phi^{(1)}(r) = \frac{1}{r} \operatorname{erfc}(\alpha r) - \frac{\pi}{\alpha^2}, \quad (\text{A.18})$$

und der zweite Teil die Summe über periodische Bildladungen,

$$\phi^{(2)}(r) = \sum_{\mathbf{n} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{|\mathbf{r} + \mathbf{n}L|} \operatorname{erfc}(\alpha|\mathbf{r} + \mathbf{n}L|) + \sum_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \frac{1}{V k^2} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{-\frac{k^2}{4\alpha^2}}. \quad (\text{A.19})$$

Die Gesamtenergie erhalten wir schließlich über

$$U = \sum_{i<j}^N q_i q_j \phi(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \frac{1}{2} E_M \sum_{i=1}^N q_i^2. \quad (\text{A.20})$$

Hierbei berücksichtigt die Madelung-Energie  $E_M$  [176] die Wechselwirkung eines Teilchens  $i$  mit all seinen Bildladungen und der homogen verteilten Hintergrundladung der Größe  $-q_i$ . Sie ergibt sich aus

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left( \phi^{(1)} - \frac{1}{r} + \phi^{(2)} \right) = E_M, \quad (\text{A.21})$$

wobei der Term  $1/r$  subtrahiert werden muss, um die Selbstwechselwirkung jedes Teilchens und damit eine unphysikalische Divergenz in der Ursprungszelle zu verhindern. Der Beitrag von  $\phi^{(1)}$  lässt sich mit Gleichung (A.14) bestimmen, und zusammen mit einer numerischen Auswertung von  $U^{(2)}$  gilt für das einfach kubische Gitter

$$E_M = -\frac{2.83797479}{L/a} \frac{e^2}{a}. \quad (\text{A.22})$$

Trotz der verbesserten Konvergenz gegenüber einer direkten Summation wie in Gleichung (A.2) stellt die Ewald-Summation noch immer hohe Anforderungen an die Rechenkapazitäten. Neben der Ausführung von Fouriertransformationen ist hier vor allem die Skalierung der Rechenzeit mit  $N^2$  der entscheidende Faktor. Deshalb sind eine Vielzahl von Optimierungsverfahren zur Beschleunigung der Ewald-Summation entwickelt worden [78, 81, 261]. Einfache Methoden nutzen abgeschnittene Wechselwirkung oder eine tabellarische Vorberechnung des Potentials auf einem Gitter. Komplexere Ansätze approximieren das Ewald-Potential (A.17) durch weniger rechenintensive Polynome [116, 261]. Da in der vorliegenden Arbeit jedoch nur für wenige Teilchen die Wechselwirkung mittels Ewald-Summation berechnet wurde, konnten bereits akzeptable Rechenzeiten erreicht werden, indem die Fourier-Summe in Gleichung (A.19) durch reziprokes Vorberechnen der  $e$ -Funktion sowie Ausnutzen der Symmetrie des Fourierraumes effizient implementiert wurde. Eine weitere Geschwindigkeitssteigerung wurde durch geschickte Aufspaltung der Ewald-Berechnung in dem Elektronen-Propagator (2.40) mit verschiedenen Zeitschritten (r-RESPA) erzielt [212, 254]. Dabei werden lediglich die kurzreichweitigen, schnell fluktuierenden Beiträge des Ewald-Potentials bei der Propagation mit dem variablen Zeitschritt  $\Delta t_n$  ausgewertet, während die langreichweitigen, langsam variierenden Anteile erst bei der Propagation mit dem globalen Zeitschritt  $\Delta t_0$  berücksichtigt werden.

Der Vorteil der Ewald-Summation liegt in der direkten Berechnung paarweiser Wechselwirkung. Sie kann für wenige ausgewählte Teilchen ausgeführt werden, ohne Rechenzeit auf eine geometrische Unterteilung des Gesamtsystems zu verwenden, wie es bei komplizierteren hierarchischen Algorithmen (*Tree-Codes*) der Fall ist. Für große Teilchenzahlen existieren jedoch effizientere Methoden als die Ewald-Summation, wie z. B. die im Folgenden beschriebene *Fast Multipole Method*.

## A.2. Fast Multipole Method (FMM)

Eines der bedeutendsten Verfahren zur Berechnung der Coulomb-Wechselwirkung in Vielteilchen-Systemen ist die „Fast Multipole Method“ (FMM). Sie wurde 1987 von Greengard und Rokhlin [106] entwickelt und im Jahr 2000 von der Fachzeitschrift „Computing in Science & Engineering“ neben anderen bekannten numerischen Verfahren, wie z. B. dem Metropolis Algorithmus oder der „Fast Fourier Transformation“, zu den 10 wichtigsten Algorithmen des 20. Jahrhunderts gewählt [74].

Die FMM stellt die konsequente Weiterentwicklung der seit Mitte der achtziger Jahre des letzten Jahrhunderts aufkommenden „Tree-Codes“ [10, 21] dar. Im Gegensatz zu einem gewöhnlichen Treecode, dessen Rechenkomplexität in der Regel von der Ordnung  $O(N \log N)$  ist, skaliert die Rechenzeit der FMM jedoch linear mit der Teilchenzahl  $N$ . Der Rechenaufwand wird drastisch reduziert, indem nur die Wechselwirkungen nah benachbarter Teilchen exakt berechnet werden. Der Einfluss weiter entfernter Teilchen wird kollektiv über eine Multipolentwicklung berücksichtigt. Im Folgenden soll das Prinzip dieses Verfahrens kurz zusammengefasst werden.

Der Algorithmus zerlegt zunächst das kubische Simulationsvolumen in einen hierarchischen Baum aus einfachen kubischen Zellen (siehe Abbildung A.2). Die komplette Simulationszelle repräsentiert dabei die nullte Stufe dieser Hierarchie. Diese wird auf der ersten Stufe in acht gleich große Zellen unterteilt. In der nächsten Stufe werden die acht Zellen wiederum jeweils in acht kleinere Zellen aufgeteilt. Dieser Prozess wird bis zum Erreichen einer gewissen Stufe  $p$  fortgesetzt. Im Folgenden durchläuft der Algorithmus die Hierarchie einmal von der feinsten bis zur größten Stufe, d. h. von den Blättern des Baumes bis zur Wurzel, und anschließend nochmals in umgekehrter Richtung.

Beim ersten Durchlauf wird ausgehend von den Blättern auf jeder Stufe eine Multipolentwicklung jeder Zelle bezüglich ihres jeweiligen Zentrums bestimmt. Dazu werden einmal die Multipolentwicklungen aller Zellen auf der feinsten Stufe  $p$  auf Grundlage der jeweils vorhandenen Teilchen pro Zelle berechnet. Mit Hilfe von einfachen Transformationsregeln lassen sich die Multipolentwicklungen von jeweils acht Zellen zusammenfassen und auf eine Multipolentwicklung ihrer Ursprungszelle auf der nächst höheren Stufe transformieren [237]. Diese Transformationen werden so lange durchgeführt, bis die erste Stufe der Hierarchie erreicht ist. Insgesamt hat man nun für jede Zelle auf jeder Stufe eine Multipolentwicklung der von der Zelle beinhaltenden Teilchen vorliegen.

Zur Berechnung der Wechselwirkungen wird im Folgenden der Baum nun noch einmal in umgekehrter Richtung durchlaufen. Auf jeder Stufe wird für die Teilchen jeder Zelle die Wechselwirkung mit Teilchen aus anderen Zellen derselben Stufe mit Hilfe der vorliegenden Multipolentwicklung berechnet. Dabei werden allerdings die der betrachteten Zelle direkt benachbarten Zellen ( $3 \times 3 \times 3 - 1 = 26$  Zellen) ausgelassen (siehe Abbildung A.2). Für diese ausgelassenen Zellen ist eine Bestimmung der Wechselwirkung über Multipolentwicklungen unzureichend, da Teilchen an den Zellwänden benachbarter Zellen einen sehr kleinen Abstand voneinander haben können, so dass ihre Wechselwirkung einer genaueren Berechnung bedarf. Diese Berechnung wird deshalb auf die nächst feinere Stufe des Baums verlegt, für die nun derselbe Prozess

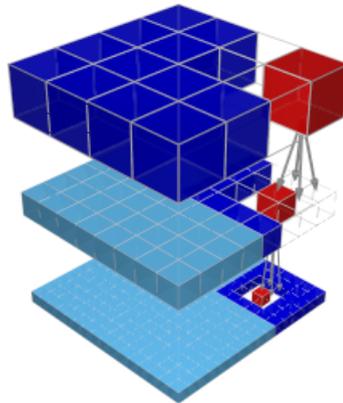


Abbildung A.2.: Schematische Darstellung der Zerlegung des Simulationsvolumens in kubische Zellen, aus [64]. Die Berechnung der Wechselwirkung der Teilchen in der roten Zelle mit Teilchen im restlichen System erfolgt auf der jeweiligen Stufe für die dunkelblauen Zellen über Multipolentwicklungen. Die ausgelassenen Zellen sind zu dicht benachbart und werden auf der nächst feineren Stufe behandelt, während die Teilchen in hellblauen Zellen bereits auf einer höheren Stufe berücksichtigt wurden.

wie auf der höheren Stufe durchgeführt wird. Dabei werden jedoch nur die Zellen berücksichtigt, deren Ursprungszellen auf der übergeordneten Stufe ausgelassen wurden (siehe Abbildung A.2). Auf der Stufe  $p$  wird schließlich die Wechselwirkung zwischen Teilchen direkt benachbarter Zellen und innerhalb einer Zelle durch direkte Summation bestimmt. Die Genauigkeit des Verfahrens ist zum einen über die Anzahl der Terme in der Multipolentwicklung und zum anderen über die Anzahl der Stufen  $p$  in der hierarchischen Zerlegung des Simulationsvolumens kontrollierbar.

Die FMM lässt sich mit geringem Aufwand auf ein System mit periodischen Randbedingungen erweitern [150]. Eine Möglichkeit dazu besteht in der Kombination der FMM mit der Ewald-Summation aus dem vorherigen Abschnitt [3, 237]. Ein alternativer Ansatz erweitert die hierarchische Struktur der Ursprungszelle auf das periodisch fortgesetzte System. Der Durchlauf des Baums wird folglich nicht auf der ersten Stufe beendet, und es werden weitere Transformationen, nun unter Berücksichtigung der Bildzellen, durchgeführt [155]. Bei Erreichen einer gewissen Systemgröße wird die Hierarchie schließlich abgeschnitten. Auch wenn dabei letztendlich nur eine endliche Anzahl an Bildzellen berücksichtigt wird, ist das betrachtete System doch groß genug, um im Rahmen der Maschinengenauigkeit exakte Ergebnisse für das unendliche System zu liefern.

Für die vorliegende Arbeit wurde eine Implementierung der FMM von Ivo Kabadshov und Holger Dachsel [64] genutzt. Sie ist hochgradig optimiert und erlaubt eine genaue Fehlerkontrolle [65].



## B. Analyse der Fluoreszenzspektren

In diesem Abschnitt soll die in Abschnitt 3.3.2 dargelegte Problematik der Extraktion von  $\langle v_z \rangle$  aus den gemessenen Fluoreszenzspektren eingehend diskutiert werden. Dabei werden verschiedene Methoden vorgestellt, die allein mit den Informationen aus dem zentralen Teil des Spektrums die mittlere Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  bestimmen und schließlich die im Kapitel 3 benutzte Fitformel (3.46) abgeleitet [49]. Um die Qualität der verschiedenen Extraktionsprozesses zu beurteilen, erweisen sich die Simulationen als überaus nützlich, da hier die exakte mittlere Geschwindigkeit bekannt ist und mit der aus dem zentralen Teil der simulierten Spektren ermittelten Geschwindigkeit verglichen werden kann.

### Direkte Umrechnung von $\langle \Delta \rangle$ in $\langle v_z \rangle$

Lägen die experimentellen Messungen über die vollständige relevante Frequenzbandbreite vor, so ließe sich die direkte Beziehung zwischen mittlerer Verstimmung  $\langle \Delta_{\text{pr}} \rangle$  und mittlerer Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  gemäß

$$\langle \Delta_{\text{pr}} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \Delta_{\text{pr}} S(\Delta_{\text{pr}}) d\Delta_{\text{pr}}}{\int_{-\infty}^{\infty} S(\Delta_{\text{pr}}) d\Delta_{\text{pr}}} = k \langle v_z \rangle \quad (\text{B.1})$$

anwenden. Für den begrenzten Frequenzbereich  $(-\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}, \Delta_{\text{pr}}^{\text{max}})$  erhält man mit Hilfe einer Taylorentwicklung des Integranden in Gleichung (B.1) um  $v = 0$

$$\langle \Delta_{\text{pr}} \rangle_{\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}} = \frac{\int_{-\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}}^{\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}} \Delta_{\text{pr}} S(\Delta_{\text{pr}}) d\Delta_{\text{pr}}}{\int_{-\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}}^{\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}} S(\Delta_{\text{pr}}) d\Delta_{\text{pr}}} \approx \kappa(\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}) \langle v_z \rangle, \quad (\text{B.2})$$

wobei die Proportionalitätskonstante gegeben ist durch

$$\kappa(\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}) = k \left( 1 - \frac{2 \Delta_{\text{pr}}^{\text{max}} / \Gamma_{e_\alpha}}{\left( 1 + \left( 2 \Delta_{\text{pr}}^{\text{max}} / \Gamma_{e_\alpha} \right)^2 \right) \arctan \left( 2 \Delta_{\text{pr}}^{\text{max}} / \Gamma_{e_\alpha} \right)} \right). \quad (\text{B.3})$$

Im Grenzfall

$$\lim_{\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}} \rightarrow \infty} \kappa(\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}) = k \quad (\text{B.4})$$

findet man wieder Gleichung (B.1). Dieses asymptotische Verhalten wird in Abbildung B.1 bestätigt, die eine gute Übereinstimmung von  $\langle v_z^{\text{ex}} \rangle$  und  $\langle v_z \rangle$  für große

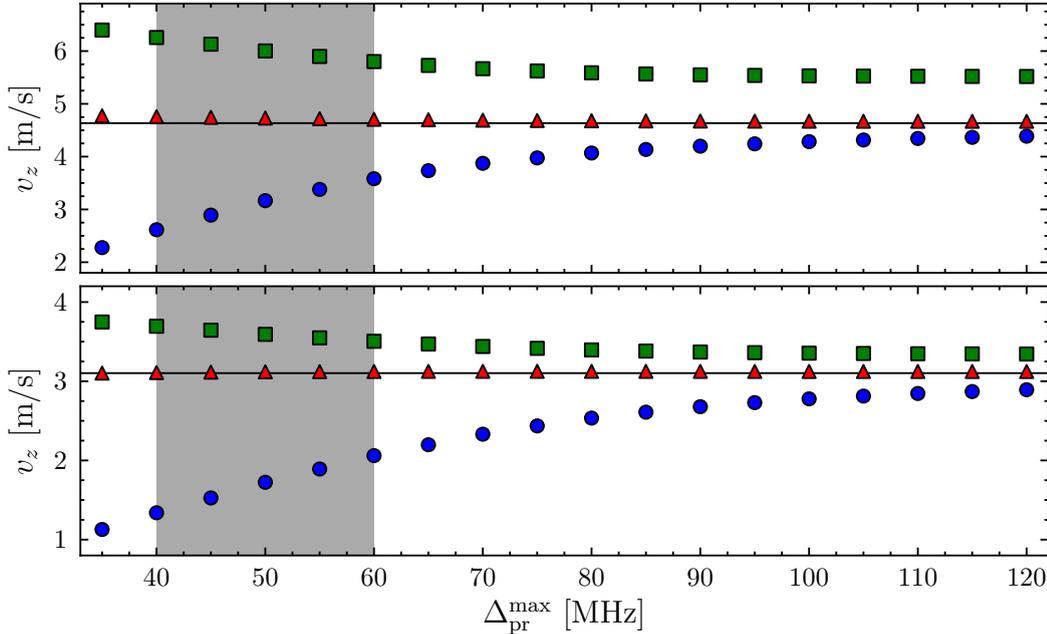


Abbildung B.1.: Vergleich verschiedener Methoden zur Bestimmung der mittleren Geschwindigkeit  $\langle v_z \rangle$  direkt nach dem Pumpen (oben) und 500 ns später (unten) aus einem im Intervall  $(-\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}, \Delta_{\text{pr}}^{\text{max}})$  numerisch bestimmten Spektrum für die Plasmaparameter  $T = 2.2$  K und  $\rho = 9.64 \times 10^8 \text{ cm}^{-3}$ . Die direkte Umrechnung der mittleren Verstimmung nach Gleichung (B.2) (o) und  $v_z^c$  aus dem Fit der verschobenen Maxwellverteilung (B.6) ( $\square$ ) verfehlen im Bereich der experimentellen Frequenzbandbreite (grau hinterlegt) die exakte mittlere Geschwindigkeit (Linie) deutlich. Der Fit nach Gleichung (3.46) ( $\Delta$ ) liefert hingegen bereits bei kleinen  $\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}$  eine hervorragende Übereinstimmung.

$\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}$  zeigt. Im experimentell vorliegenden Frequenzbereich (grau unterlegt) liefert Gleichung (B.2) erwartungsgemäß jedoch während des gesamten Relaxationsprozesses nur eine schlechte Abschätzung von  $\langle v_z \rangle$ , da Information aus einem bedeutenden Anteil des Spektrums ignoriert wird.

Um eine bessere Abschätzung von  $\langle v_z \rangle$  zu erhalten, sollte deshalb ein Extraktionsverfahren angewandt werden, das durch eine Rekonstruktion dieser fehlenden Anteile das gesamte Spektrum berücksichtigt. Dazu lässt sich eine geeignete Funktion an den gemessenen zentralen Bereich des Spektrums anfitzen, die dann einen analytischen Ausdruck für die Geschwindigkeitsverteilung  $f^{(\text{fit})}(v_z^{(0)})$  liefert und somit die Berechnung der mittleren Geschwindigkeit über

$$\langle v_z \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} v_z^{(0)} f^{(\text{fit})}(v_z^{(0)}) dv_z^{(0)} \quad (\text{B.5})$$

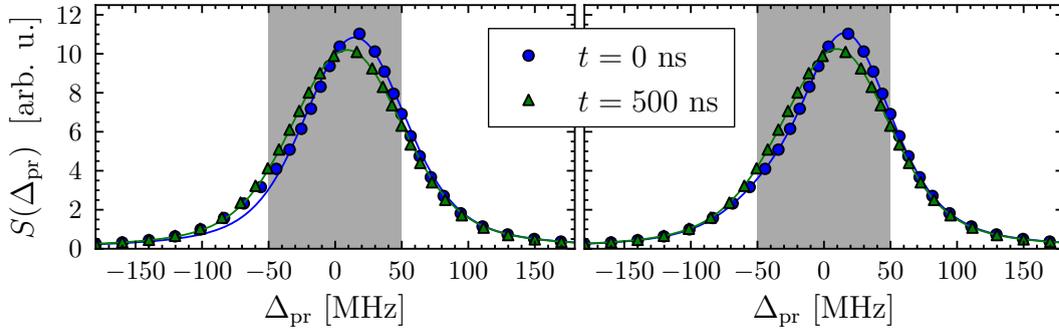


Abbildung B.2.: Simulierte Fluoreszenzspektren direkt nach dem optischen Pumpen ( $\circ$ ) und 500 ns später ( $\triangle$ ). Im grau unterlegten Bereich wurde rechts die verschobene Maxwellverteilung (B.6) und links Gleichung (3.46) an die simulierten Spektren gefittet (Linien).

erlaubt.

### Maxwell-Näherung

Eine einfache Abschätzung erhält man mit der Annahme, dass die Geschwindigkeitsverteilung auch nach dem Pumpen noch eine Maxwellform besitzt [48], die nun allerdings um  $v_z = v_z^c$  zentriert ist, d. h.

$$f_M^{(\text{fit})}(v_z, v_z^c) = \sqrt{\frac{1}{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(v_z - v_z^c)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (\text{B.6})$$

Abbildung B.2 zeigt beispielhaft einen Fit der mit dem Profil des Probelasers (3.23) gefalteten Gleichung (B.6) an den zentralen Teil (grau unterlegt) des simulierten Spektrums, wobei  $v_z^c$  und die Breite der Verteilung  $\sigma$  als Fitparameter dienen. Während die Übereinstimmung zwischen Fit und Daten im gemessenen Bereich ( $-50, 50$ ) MHz zufriedenstellend erscheint, sind direkt nach dem Pumpen im Bereich der Flügel deutliche Diskrepanzen zu erkennen. Folglich ergibt direkt nach dem Pumpen die mit  $v_z^c$  abgeschätzte mittlere Geschwindigkeit kein wesentlich besseres Ergebnis als Gleichung (B.2), siehe Abbildung B.1. Erwartungsgemäß steigt mit zunehmender Relaxation die Übereinstimmung zwischen Fit und Daten, da das Spektrum sich der Gleichgewichtsverteilung nähert (siehe Abbildung B.2). Die Unterschiede zwischen der mittleren Geschwindigkeit  $v_z^c$  und  $\langle v_z \rangle$  sind dementsprechend geringer als direkt nach dem Pumpen, aber dennoch deutlich sichtbar. Für große  $\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}}$  konvergiert  $v_z^c$  nicht gegen  $\langle v_z \rangle$ , da Gleichung (B.6) nicht in der Lage ist, die spezielle Form der modifizierten Geschwindigkeitsverteilung zu beschreiben.

### Berücksichtigung physikalischer Prozesse

Ein verbesserter Fit lässt sich erzielen, indem man die Auswirkungen des optischen Pumpens und der stoßinduzierten Relaxation in der Fitformel berücksichtigt. Ein naheliegender Ansatz sind dazu die Ratengleichungen (3.44) des Vier-Niveau-Systems,

die bereits den Effekt des Laserpumpens beinhalten. Unter Annahme eines stationären Zustands für die angeregten Niveaus, d. h.  $\dot{f}_e(v) = 0$ , erhält man zwei gekoppelte Ratengleichungen für die beiden Grundzustände  $g_1$  und  $g_2$ ,

$$\dot{f}_{g_1}(v_z) = R_{\leftarrow}(v_z) f_{g_2}(v_z) - R_{\rightarrow}(v_z) f_{g_1}(v_z), \quad (\text{B.7a})$$

$$\dot{f}_{g_2}(v_z) = R_{\rightarrow}(v_z) f_{g_1}(v_z) - R_{\leftarrow}(v_z) f_{g_2}(v_z). \quad (\text{B.7b})$$

Die Pumpraten, mit denen ein Populationsaustausch zwischen den beiden Grundzuständen erfolgt, sind gegeben durch

$$R_{\rightarrow}(v_z) = \frac{R_{g_2e_2}(v_z) \Gamma_{g_1e_2}}{\Gamma_{e_2} + R_{g_2e_2}(v_z)}, \quad (\text{B.8a})$$

$$R_{\leftarrow}(v_z) = \frac{R_{g_1e_1}(v_z) \Gamma_{g_2e_1}}{\Gamma_{e_1} + R_{g_1e_1}(v_z)}. \quad (\text{B.8b})$$

Die beiden Gleichungen (B.7) werden nun um einen Krook-Term [29] zur Berücksichtigung der stoßinduzierten Geschwindigkeitsänderungen erweitert,

$$\dot{f}_{g_1}(v_z) = R_{\leftarrow}(v_z) f_{g_2}(v_z) - R_{\rightarrow}(v_z) f_{g_1}(v_z) - \gamma \left[ f_{g_1}(v_z) - \frac{1}{2} f_M(v_z) \right], \quad (\text{B.9a})$$

$$\dot{f}_{g_2}(v_z) = R_{\rightarrow}(v_z) f_{g_1}(v_z) - R_{\leftarrow}(v_z) f_{g_2}(v_z) - \gamma \left[ f_{g_2}(v_z) - \frac{1}{2} f_M(v_z) \right]. \quad (\text{B.9b})$$

Hierbei ist  $\gamma$  die effektive Stoßrate, die die Relaxation der modifizierten Grundzustandsverteilungen auf die Maxwellverteilung  $f_M(v_z) = f_M^{(\text{fit})}(v_z, 0) = f_{g_1}(v_z) + f_{g_2}(v_z)$  charakterisiert.

Im stationären Zustand des Zwei-Niveau-Systems (B.9), d. h. für  $\dot{f}_{g_\alpha} = 0$ , erhält man für die Population des relevanten Grundzustands

$$\begin{aligned} f_{g_1}(v_z) &= f_M(v_z) \frac{R_{\leftarrow}(v_z) + \frac{1}{2}\gamma}{R_{\rightarrow}(v_z) + R_{\leftarrow}(v_z) + \gamma} \\ &= f_M(v_z) \frac{L_-(v_z) + \frac{1}{2}}{L_+(v_z) + L_-(v_z)}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Die Lorentz-Funktion

$$L_{\pm}(v_z) = \frac{a_{\pm}}{1 + b_{\pm} (v_z^{\text{res}} \pm v)^2} \quad (\text{B.11})$$

ist durch die Parameter

$$a_- = \frac{1}{\gamma} \frac{\Gamma_{g_2e_1} \Omega_{g_1e_1}}{\Gamma_{e_1}^2 + \Omega_{g_1e_1}^2}, \quad (\text{B.12a})$$

$$a_+ = \frac{1}{\gamma} \frac{\Gamma_{g_1e_2} \Omega_{g_2e_2}}{\Gamma_{e_2}^2 + \Omega_{g_2e_2}^2}, \quad (\text{B.12b})$$

$$b_- = \frac{4k^2}{\Gamma_{e_1}^2 + \Omega_{g_1e_1}^2}, \quad (\text{B.12c})$$

$$b_+ = \frac{4k^2}{\Gamma_{e_2}^2 + \Omega_{g_2e_2}^2}, \quad (\text{B.12d})$$

und die Resonanzgeschwindigkeit  $v_z^{\text{res}} = \Delta_{\text{pr}}/k$  bestimmt. Ohne optisches Pumpen gilt  $a_{\pm} = L_{\pm} = 0$  und die Geschwindigkeitsverteilung behält ihre maxwellsche Form,  $f_{g1}(v_z) = \frac{1}{2}f_M$ . Für nicht vernachlässigbare Pumpraten beschreibt Gleichung (3.46) eine Maxwellverteilung, die im Bereich der Resonanzgeschwindigkeiten  $\pm v_{\text{res}}$  lorentzförmige Abweichungen besitzt. Die Breite dieser asymmetrischen Deformationen werden von den Parametern  $b_{\pm}$  bestimmt, während  $a_{\pm}$  das Verhältnis von Pump- zu Stoßrate ausdrückt.

In der Regel wird für die experimentellen Pumpzeiten der stationäre Zustand nicht erreicht. Dennoch erlaubt Gleichung (3.46) die Form der gemessenen Spektren zu beschreiben, indem die experimentellen Parameter  $a_{\pm}, b_{\pm}$  durch Fitparameter ersetzt werden. Da die durch das Pumpen erzeugte Störung während der Relaxation lokal um die Resonanzgeschwindigkeit  $v_z^{\text{res}}$  beschränkt bleibt (vgl. Abbildung 3.10), wird diese direkt aus den experimentellen Parametern bestimmt und nicht gefittet. Zur weiteren Vereinfachung der Fitformel machen wir uns zu Nutze, dass die Pumpparameter der beiden antiparallel ausgerichteten Laser nahezu gleich sind. Dadurch reduziert sich die Anzahl der Fitparameter auf zwei, nämlich  $a_+ = a_- = a$  und  $b_+ = b_- = b$ .

Abbildung B.2 zeigt beispielhaft die exzellente Übereinstimmung der simulierten Spektren und der im zentralen Bereich angefitten, mit Gleichung (3.23) gefalteten analytischen Fitformel (B.10). Im Gegensatz zu der verschobenen Maxwellverteilung (B.6) ist Gleichung (B.10) in der Lage, in sämtlichen Relaxationsstadien auch die Flügel des Spektrums exakt wiederzugeben. Dementsprechend stimmt die mit dieser Methode extrahierte mittlere Geschwindigkeit hervorragend mit der exakten mittleren Geschwindigkeit überein, siehe Abbildung B.1. Hier zeigt sich darüber hinaus, dass bereits Frequenzbandbreiten mit  $\Delta_{\text{pr}}^{\text{max}} \approx 30$  MHz, also deutlich kleiner als die experimentell verfügbaren Bereiche, ausreichen, um  $\langle v_z \rangle$  akkurat zu ermitteln.

Die Fitformel (B.10) liefert somit von den hier vorgestellten Extraktionsmethoden offensichtlich die besten Ergebnisse. Sie erlaubt prinzipiell eine präzise Bestimmung von  $\langle v_z \rangle$  aus einem unvollständigen Fluoreszenzspektrum. Die Genauigkeit der extrahierten mittleren Geschwindigkeit wird demnach nur durch die Genauigkeit der experimentellen Daten bestimmt. Die teilweise deutlichen Schwankungen in den gemessenen Spektren führen letztendlich auch zu der Streuung der Datenpunkte in den Relaxationskurven von  $\langle v_z \rangle$  (siehe Abschnitt 3.4).



## C. Kinetische Theorie der Plasmadynamik

In diesem Abschnitt soll Gleichung (3.72) aus Kapitel 3 hergeleitet werden. Um die kinetische Beschreibung auf der Grundlage von mikroskopischen Fluktuationen und Korrelationen im Plasma zu entwickeln, wird hierzu die Klimontovich-Formulierung [124, 144] genutzt. Wir gehen dabei vom Fall eines idealen Plasmas aus, für das die zeitliche Retardierung der Verteilungsfunktionen vernachlässigt werden kann.

Ausgangspunkt ist die Klimontovich-Dichte

$$N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=0}^N \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_i(t)] \delta[\mathbf{p} - \mathbf{p}_i(t)], \quad (\text{C.1})$$

die den Phasenraum des Ein-Komponenten-Plasmas aus  $N$  Teilchen der Masse  $m$  mit Positionen  $\mathbf{r}_i$  und Impulsen  $\mathbf{p}_i$ ,  $1 < i < N$  beschreibt. Die Evolution der Klimontovich-Dichte ist durch die Klimontovich-Gleichung gegeben:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \frac{\partial N}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (\text{C.2})$$

Es gilt  $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$  und die Kraft  $\mathbf{F}$  setzt sich aus einer externen Kraft  $\mathbf{F}_{\text{ext}}$  und den mikroskopischen elektrischen und magnetischen Feldern,  $\mathbf{E}$  und  $\mathbf{B}$ , zusammen,

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{\text{ext}} + e \mathbf{E} + \frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}. \quad (\text{C.3})$$

Hierbei ist  $c$  die Lichtgeschwindigkeit und  $e$  die Elementarladung.

Um von dieser mikroskopischen Darstellung zu der kinetischen Beschreibung von Gleichung (3.72) zu gelangen, wird im Folgenden jede Größe ( $A$ ) durch ihren Mittelwert ( $\langle A \rangle$ ) und die Schwankung um diesen Mittelwert ( $\delta A = A - \langle A \rangle$ ) ausgedrückt. Mit den entsprechenden Definitionen

$$\langle N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle = \mathcal{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad (\text{C.4})$$

$$\delta N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - \langle N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \rangle, \quad (\text{C.5})$$

$$\delta \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) - \langle \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (\text{C.6})$$

wobei  $\mathcal{F}$  die Verteilungsfunktion des Plasmas mit der Normierung auf die Ortsraum-dichte  $\rho(\mathbf{r}, t)$  gemäß

$$\int d\mathbf{p} \mathcal{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (\text{C.7})$$

ist, erhält man durch eine Mittelung von Gleichung (C.2) die kinetische Gleichung

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{r}} + \langle \mathbf{F} \rangle \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \langle \delta N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \delta \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (\text{C.8})$$

In Kapitel 3 geht man von einem homogenen Plasma aus, auf das keine äußeren Kräfte wirken, so dass sich Gleichung (C.8) vereinfacht auf

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \langle \delta N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) \delta \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \rangle = I(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t). \quad (\text{C.9})$$

Der restliche Teil dieses Abschnitts beschäftigt sich mit der Berechnung des Stoßintegrals  $I(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  auf der rechten Seite von Gleichung (C.9).

Ein Großteil der Berechnungen wird dabei im Fourier-Raum durchgeführt. Dazu erweist es sich als hilfreich, die spektrale Darstellung

$$\langle A B^*(\mathbf{k}, \omega) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \delta A(\mathbf{r}', t') \delta B(\mathbf{r}' + \mathbf{r}, t' + t) \rangle e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \quad (\text{C.10})$$

der Korrelationsfunktion  $\langle \delta A(\mathbf{r}', t') \delta B(\mathbf{r}' + \mathbf{r}, t' + t) \rangle$  zwischen den Fluktuationen der Größen  $A$  und  $B$  einzuführen. Damit lässt sich das Stoßintegral umformen zu

$$\begin{aligned} I(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) &= - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \langle N \mathbf{F}^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle \\ &= - \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \Re \langle N \mathbf{F}^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle \\ &= e \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \Im \langle N \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

Für die letzte Identität wurde die Fouriertransformierte der Kraft im Coulomb-Plasma

$$\delta \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) = e \delta \mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega) = -i e \mathbf{k} \delta \phi(\mathbf{k}, \omega) \quad (\text{C.12})$$

genutzt.

Die Berechnung des Stoßintegrals über Gleichung (C.11) macht eine Auswertung der Spektralfunktion  $\langle N \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle$  nötig. Dazu werden im Folgenden zunächst die Dichtefluktuationen  $\delta N$  und anschließend die Potentialfluktuationen  $\delta \phi$  näher betrachtet. Mit den daraus resultierenden Ergebnissen kann schließlich die Spektralfunktion berechnet und das vollständige Stoßintegral in der Lenard-Balescu-Form von Gleichung (3.72) erhalten werden.

### Dichtefluktuationen

Analog zu Gleichung (C.8) ergibt sich auch eine Klimontovich-Gleichung für die Fluktuationen

$$\frac{\partial \delta N}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta N}{\partial \mathbf{r}} + \langle \mathbf{F} \rangle \frac{\partial \delta N}{\partial \mathbf{p}} = -\delta \mathbf{F} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}} - \delta \mathbf{F} \frac{\partial \delta N}{\partial \mathbf{p}} + \left\langle \delta \mathbf{F} \frac{\partial \delta N}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle, \quad (\text{C.13})$$

bzw. in Abwesenheit externer Kräfte ( $\langle \mathbf{F} \rangle = 0$ )

$$\frac{\partial \delta N}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta N}{\partial \mathbf{r}} = -\delta \mathbf{F} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}} - \delta \mathbf{F} \frac{\partial \delta N}{\partial \mathbf{p}} + \left\langle \delta \mathbf{F} \frac{\partial \delta N}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle. \quad (\text{C.14})$$

Die Fluktuationen der Dichte  $\delta N$  lassen sich aufspalten in einen spontanen Anteil  $\delta N^{(0)}$ , der Lösung der homogenen Gleichung

$$\frac{\partial \delta N^{(0)}}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial \delta N^{(0)}}{\partial \mathbf{r}} = 0 \quad (\text{C.15})$$

ist, und einen durch die Terme auf der rechten Seite von Gleichung (C.14) induzierten Anteil  $\delta N^{(s)}$ , der eine spezielle Lösung von Gleichung (C.14) darstellt.

Die spontanen Dichtefluktuationen entstehen ohne Einfluss der Wechselwirkungen und Einwirkung auf das System. Sie lassen sich demnach als Funktion der ungestörten Trajektorien  $X^{(0)}(t)$  in Abwesenheit von induzierten Feldern ausdrücken

$$\delta N^{(0)}(X, t) = \sum_j \delta \left( X - X_j^{(0)}(t) \right) - \left\langle \sum_j \delta \left( X - X_j^{(0)}(t) \right) \right\rangle, \quad (\text{C.16})$$

wobei die  $X = (\mathbf{r}, \mathbf{p})$  die Phasenraumvariablen zusammenfasst.

Für die weitere Analyse ist es hilfreich, mit Fouriertransformierten zu arbeiten, die über folgende Gleichungen definiert sind:

$$\delta N(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta N(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (\text{C.17a})$$

$$\mathcal{F}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathcal{F}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (\text{C.17b})$$

$$\delta \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (\text{C.17c})$$

Die Fouriertransformierte der spontanen Fluktuationen beträgt damit

$$\delta N^{(0)}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) = 2\pi \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \sum_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_j} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}_j). \quad (\text{C.18})$$

Durch die Fouriertransformation von Gleichung (C.14) erhält man eine Gleichung zur Bestimmung der induzierten Fluktuationen  $\delta N^{(s)}$ ,

$$\begin{aligned} -i(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\nu) \delta N^{(s)}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) = \\ -\delta \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathbf{p}} - \delta \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) \frac{\partial \delta N^{(s)}}{\partial \mathbf{p}} + \left\langle \delta \mathbf{F}(\mathbf{k}, \omega) \frac{\partial \delta N^{(s)}}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.19})$$

Der infinitesimale Parameter  $\nu$  ist an dieser Stelle nötig, um die retardierte Reaktion des Systems auf die Fluktuationen zu sichern. Zu einem späteren Zeitpunkt wird dann der Limes  $\nu \rightarrow 0$  betrachtet werden.

In der Näherung der zufälligen Phase (*random-phase-approximation*) [124] geht man von schwachen Fluktuationen aus und vernachlässigt die beiden letzten Terme auf der rechten Seite von Gleichung (C.19), die nicht-lineare Kopplungen der Fluktuationen  $\delta \mathbf{F}$  und  $\delta N$  beinhalten, und erhält unter Ausnutzung von Gleichung (C.12)

$$\delta N^{(s)}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) = -e \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \frac{\delta \phi(\mathbf{k}, \omega)}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\nu}. \quad (\text{C.20})$$

Die mikroskopischen Korrelationen zwischen den Dichtefluktuationen führen jedoch zu einem effektiven Potential, das vom reinen Coulomb-Potential abweicht. Dieser Unterschied wird von der lokalen Feldkorrektur  $G(k, \omega)$  gemessen [127]. Die Frequenzabhängigkeit kann im schwach gekoppelten Bereich vernachlässigt und der statische Wert  $G(k) = G(k, \omega = 0)$  genutzt werden [124]. Für eine korrekte Beschreibung der Kopplungseffekte muss nun das Coulomb-Potential mit  $G(k)$  renormiert werden, so dass sich als vollständiger Ausdruck für den induzierten Anteil der Dichtefluktuationen

$$\delta N^{(s)}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) = -e \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \frac{\delta \phi(\mathbf{k}, \omega)}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\nu} [1 - G(k)] \quad (\text{C.21})$$

ergibt.

Mit der Zerlegung der Fluktuationen in spontane und induzierte Anteile sind die Dichteanteile der Spektralfunktion in Gleichung (C.11) durch die Gleichungen (C.18) und (C.21) gegeben. Für eine vollständige Auswertung der Spektralfunktion werden nun noch die Potentialfluktuationen  $\delta\phi$  benötigt.

### Potentialfluktuationen

Die Fluktuationen des Potentials sind durch die Poisson-Gleichung

$$\Delta \delta \phi(\mathbf{r}, t) = -4\pi e \delta n(\mathbf{r}, t) \quad (\text{C.22})$$

mit

$$\delta n(\mathbf{k}, \omega) = \int d\mathbf{p} \delta N(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \quad (\text{C.23})$$

bestimmt. Im Fourierraum ergibt sich

$$\begin{aligned} \delta \phi(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{4\pi e}{k^2} \delta n(\mathbf{k}, \omega) \\ &= \frac{v(k)}{e} \delta n^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) - v(k) \int d\mathbf{p} \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \frac{\delta \phi(\mathbf{k}, \omega)}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\nu} [1 - G(k)] \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

mit der Fouriertransformierten des Coulomb-Potentials

$$v(k) = -\frac{4\pi e^2}{k^2}. \quad (\text{C.25})$$

Durch Umstellen von Gleichung (C.24) erhält man die Potentialfluktuationen zu

$$\delta \phi(\mathbf{k}, \omega) = \frac{v(k)}{e} \frac{\delta n^{(0)}(\mathbf{k}, \omega)}{\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)} \quad (\text{C.26})$$

mit der dielektrischen Funktion

$$\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega) = 1 + v(k) \int d\mathbf{p} \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \frac{1}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\nu} [1 - G(k)]. \quad (\text{C.27})$$

### Auswertung der Spektralfunktion $\mathfrak{S} \langle N \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle$

Zunächst wird die Spektralfunktion aus Gleichung (C.11) in die beiden Dichteanteile aufgespalten,

$$\mathfrak{S} \langle N \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle = \mathfrak{S} \langle N^{(0)} \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle + \mathfrak{S} \langle N^{(s)} \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle. \quad (\text{C.28})$$

Durch Einsetzen von Gleichungen (C.18) und (C.26) ergibt sich für den ersten Summanden in Gleichung (C.28)

$$\begin{aligned} \Im \langle N^{(0)} \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle &= \Im \frac{v(k)}{e} \frac{\langle N^{(0)} n^{(0)*}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle}{\tilde{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, \omega)} \\ &= \Im \frac{v(k)}{e} \frac{\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)}{|\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)|^2} \int d\mathbf{p}' \langle N^{(0)} N^{(0)*}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}, \mathbf{p}') \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

Die Spektralfunktion auf der rechten Seite von Gleichung (C.29) kann durch Einsetzen der spontanen Fluktuationen aus Gleichung (C.18) in die Definition der spektralen Darstellung (C.10) berechnet werden,

$$\langle N^{(0)} N^{(0)*}(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}, \mathbf{p}') \rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \mathcal{F}(\mathbf{p}), \quad (\text{C.30})$$

so dass

$$\Im \langle N^{(0)} \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle = \Im \frac{v(k)}{e} \frac{\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)}{|\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)|^2} \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \mathcal{F}(\mathbf{p}) \quad (\text{C.31})$$

folgt. Mit der Relation

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{\nu}{\xi^2(x) + \nu^2} = \pi \delta(\xi(x)) \quad (\text{C.32})$$

erhält man für die dielektrische Funktion aus Gleichung (C.27)

$$\begin{aligned} \Im \tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega) &= -v(k) [1 - G(k)] \int d\mathbf{p}' \frac{\nu}{(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}')^2 + \nu^2} \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p}')}{\partial \mathbf{p}'} \\ &\xrightarrow{\nu \rightarrow 0} -\pi v(k) [1 - G(k)] \int d\mathbf{p}' \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p}')}{\partial \mathbf{p}'} \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}') \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

und für den ersten Summanden schließlich

$$\begin{aligned} &\lim_{\nu \rightarrow 0} \Im \langle N^{(0)} \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle \\ &= -\pi \frac{v^2(k) [1 - G(k)]}{e |\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)|^2} \int d\mathbf{p}' \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}') \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p}')}{\partial \mathbf{p}'} \mathcal{F}(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (\text{C.34})$$

Für den zweiten Summanden in Gleichung (C.28) setzt man zuerst die induzierten Fluktuationen aus Gleichung (C.21) ein und dann für die Potentialfluktuationen Gleichung (C.26),

$$\begin{aligned} &\Im \langle N^{(s)} \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle \\ &= -e \mathbf{k} [1 - G(k)] \Im \left\langle \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \frac{\delta \phi(\mathbf{k}, \omega)}{\omega - \mathbf{k}\mathbf{v} + i\nu} \delta \phi^*(\mathbf{k}, \omega) \right\rangle \\ &= \frac{v^2(k) [1 - G(k)]}{e |\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)|^2} \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \left\langle \frac{\nu}{(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v})^2 + \nu^2} \delta n^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) \delta n^{(0)*}(\mathbf{k}, \omega) \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.35})$$

Nun lässt man wieder  $\nu$  gegen Null gehen, setzt die über  $\mathbf{p}$  und  $\mathbf{p}'$  integrierte Gleichung (C.30) ein und erhält schließlich

$$\begin{aligned} & \lim_{\nu \rightarrow 0} \Im \langle N^{(s)} \phi^*(\mathbf{k}, \omega; \mathbf{p}) \rangle \\ &= \pi \frac{v^2(k) [1 - G(k)]}{e |\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)|^2} \int d\mathbf{p}' \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}') \mathbf{k} \frac{\partial \mathcal{F}(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}} \mathcal{F}(\mathbf{p}'). \end{aligned} \quad (\text{C.36})$$

Das vollständige Stoßintegral ergibt sich nun, indem man die beiden Summanden in der Form (C.34) und (C.36) in Gleichung (C.28) einsetzt und diese wiederum in Gleichung (C.11):

$$\begin{aligned} I(x, t) &= e \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left( \pi \frac{v^2(k) [1 - G(k)]}{e |\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \omega)|^2} \right. \\ &\quad \left. \int d\mathbf{p}' \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}) \delta(\omega - \mathbf{k}\mathbf{v}') \mathbf{k} \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \right) \mathcal{F}(\mathbf{p}) \mathcal{F}(\mathbf{p}') \right) \\ &= \pi \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \left[ \frac{v^2(k) [1 - G(k)]}{|\tilde{\varepsilon}(\mathbf{k}, \mathbf{k}\mathbf{v})|^2} \right. \\ &\quad \left. \int d\mathbf{p}' \delta(\mathbf{k}\mathbf{v} - \mathbf{k}\mathbf{v}') \mathbf{k} \left( \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'} \right) \mathcal{F}(\mathbf{p}) \mathcal{F}(\mathbf{p}') \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.37})$$

Durch eine Skalierung der Länge mit dem Wigner-Seitz-Radius  $a$  und der Zeit mit der inversen Plasmafrequenz  $\omega_p^{-1}$  erhalten wir aus Gleichung (C.37) schließlich Gleichung (3.72).

# D. Quantendynamik der Rydberganregung

In diesem Abschnitt soll die atomare Anregungsdynamik aus Abschnitt 4.3 und die Vereinfachung der quantenmechanischen Darstellung auf eine klassische Rategleichung ausführlicher diskutiert werden. Ein analoges Vorgehen kommt auch bei der theoretischen Beschreibung des optischen Pumpens in Kapitel 3 zum Einsatz. Die hierfür relevante Behandlung eines Zwei-Niveau-Systems lässt sich aus der folgenden Beschreibung durch Vernachlässigung des Rydberg-Zustands gewinnen. Um eine bessere Übersicht zu gewährleisten, werden hier teilweise die bereits in Kapitel 3 genutzten Gleichungen wiederholt.

In Abbildung D.1 sind die relevanten Zustände des Drei-Niveau-Systems schematisch dargestellt. Ein Pumplaser regt das Atom aus dem Grundzustand  $|g\rangle$  in den Zwischenzustand  $|m\rangle$  an, von wo aus es durch den Anregungslaser in den Rydberg-Zustand  $|r\rangle$  gebracht wird.

Allgemein wird die Dynamik in diesem Drei-Niveau-System durch die quantenoptische Mastergleichung

$$i\hbar\dot{\hat{\rho}} = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}] + \hbar\hat{\mathcal{L}}[\hat{\rho}] \quad (\text{D.1})$$

für die reduzierte Dichtematrix  $\hat{\rho}$  beschrieben, deren Elemente durch

$$\rho_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{\rho} | \beta \rangle \quad (\text{D.2})$$

gegeben sind, wobei  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \in (|g\rangle, |m\rangle, |r\rangle)$  ein Eigenzustand des Atoms mit Energie  $E_i = \hbar\omega_i$  ist. Die Eigenzustände werden in Form der Einheitsvektoren

$$|g\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |m\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |r\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{D.3})$$

dargestellt.

## Atom-Licht-Wechselwirkung

Der Hamiltonoperator in Gleichung (D.1) lässt sich aufspalten

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_W(t) \quad (\text{D.4})$$

in den rein atomaren Anteil  $\hat{\mathcal{H}}_0$  und den Anteil  $\hat{\mathcal{H}}_W$ , der die Wechselwirkung des Atoms mit den Lichtfeldern beschreibt. Der erste Teil beinhaltet lediglich die Energien der drei Zustände,

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \begin{pmatrix} E_g & 0 & 0 \\ 0 & E_m & 0 \\ 0 & 0 & E_r \end{pmatrix}. \quad (\text{D.5})$$

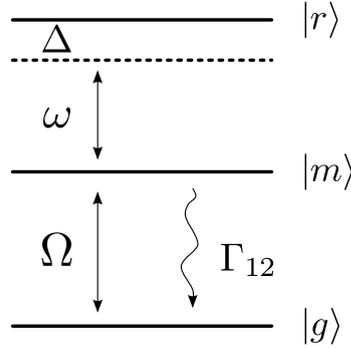


Abbildung D.1.: Schematische Darstellung des zweistufigen Anregungsprozesses im Drei-Niveau-System.

Die Wechselwirkung der Laser mit dem Atom kommt durch die Kopplung des Pump- und Anregungslasers mit Amplitude  $\mathcal{E}_{\text{pp}}$  bzw.  $\mathcal{E}_a$  an das atomare Dipolmoment  $\hat{\mathbf{d}}$  zustande,

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{W}} = -\hat{\mathbf{d}} (\mathcal{E}_a + \mathcal{E}_{\text{pp}}). \quad (\text{D.6})$$

Unter der Annahme, dass optische Übergänge nur zwischen dem Grund- und Zwischenzustand sowie zwischen dem Zwischen- und Rydberg-Zustand möglich sind, können wir den Dipoloperator des Drei-Niveau-Systems schreiben als

$$\hat{\mathbf{d}} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{d}_{\text{gm}} & 0 \\ \mathbf{d}_{\text{mg}} & 0 & \mathbf{d}_{\text{mr}} \\ 0 & \mathbf{d}_{\text{rm}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.7})$$

Die Elemente des Dipoloperators sind durch

$$\mathbf{d}_{\alpha\beta} = \langle \alpha | -e\hat{\mathbf{r}} | \beta \rangle \quad (\text{D.8})$$

und den Ortsoperator  $\hat{\mathbf{r}}$  des Valenzelektrons gegeben.

Da die räumliche Ausdehnung des Rydberg-Atoms wesentlich kleiner als die Wellenlänge der Laserstrahlung ist, kann die Laseramplitude im Bereich des Atoms zu einem gegebenen Zeitpunkt als konstant angenommen und somit die Ortsabhängigkeit in  $\mathcal{E}_{\text{pp}}(\mathbf{r}, t)$  und  $\mathcal{E}_a(\mathbf{r}, t)$  vernachlässigt werden (*elektrische Dipolnäherung* [183]). Die als klassische Lichtfelder angenommenen Laser lassen sich somit schreiben als

$$\mathcal{E}_{\text{pp}}(t) = \mathbf{E}_{\text{pp}} \cos(\omega_{\text{pp}}t), \quad (\text{D.9a})$$

$$\mathcal{E}_a(t) = \mathbf{E}_a \cos(\omega_a t), \quad (\text{D.9b})$$

wobei  $\mathbf{E}_x$  und  $\omega_x$ ,  $x \in (\text{a}, \text{pp})$ , die Extremalamplitude bzw. Frequenz der beiden Laser bezeichnen. Durch Einsetzen von Gleichung (D.5) und (D.6) in Gleichung (D.4) erhalten wir insgesamt für den Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} E_g & V_{\text{gm}} & 0 \\ V_{\text{mg}} & E_m & V_{\text{mr}} \\ 0 & V_{\text{rm}} & E_r \end{pmatrix}. \quad (\text{D.10})$$

Die Wechselwirkungsterme sind durch

$$\begin{aligned} V_{\alpha\beta}(t) &= -\mathbf{d}_{\alpha\beta} (\mathcal{E}_a(t) + \mathcal{E}_{pp}(t)) \\ &= -\mathbf{d}_{\alpha\beta} \left( \frac{\mathbf{E}_a}{2} (e^{-i\omega_a t} + e^{i\omega_a t}) + \frac{\mathbf{E}_{pp}}{2} (e^{-i\omega_{pp} t} + e^{i\omega_{pp} t}) \right) \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

gegeben.

Zur Auswertung der Mastergleichung (D.1) soll zunächst der Lindbladoperator  $\hat{\mathcal{L}}$  vernachlässigt werden, so dass wir die folgenden Bewegungsgleichung für die Elemente der Dichtematrix erhalten,

$$\dot{\rho}_{gg} = -\frac{i}{\hbar} (V_{gm}\rho_{mg} - V_{mg}\rho_{gm}) \quad (\text{D.12a})$$

$$\dot{\rho}_{mm} = -\frac{i}{\hbar} (V_{mg}\rho_{gm} - V_{gm}\rho_{mg}) - \frac{i}{\hbar} (V_{mr}\rho_{rm} - V_{rm}\rho_{mr}) \quad (\text{D.12b})$$

$$\dot{\rho}_{rr} = -\frac{i}{\hbar} (V_{rm}\rho_{mr} - V_{mr}\rho_{rm}) \quad (\text{D.12c})$$

$$\dot{\rho}_{gm} = -\frac{i}{\hbar} ((E_g - E_m)\rho_{gm} + V_{gm}(\rho_{mm} - \rho_{gg}) - V_{rm}\rho_{gr}) \quad (\text{D.12d})$$

$$\dot{\rho}_{gr} = -\frac{i}{\hbar} ((E_g - E_r)\rho_{gr} + V_{gm}\rho_{mr} - V_{mr}\rho_{gm}) \quad (\text{D.12e})$$

$$\dot{\rho}_{mr} = -\frac{i}{\hbar} ((E_m - E_r)\rho_{mr} + V_{mr}(\rho_{rr} - \rho_{mm})) + V_{mg}\rho_{gr} \quad (\text{D.12f})$$

$$\rho_{\alpha\beta} = (\rho_{\beta\alpha})^* \quad \text{für } \alpha, \beta \in (g, m, r). \quad (\text{D.12g})$$

Die Gleichungen (D.12) werden auch als *optische Bloch-Gleichungen* bezeichnet. Die Diagonalelemente der Dichtematrix  $\hat{\rho}$ , deren Evolution durch die Gleichungen (D.12a) bis (D.12c) gegeben ist, repräsentieren die Wahrscheinlichkeit, das Atom in einem der Zustände  $|g\rangle$ ,  $|m\rangle$  oder  $|r\rangle$  vorzufinden. Die Real- und Imaginärteile der Nichtdiagonalelemente (*Kohärenzen*) beschreiben die Dispersion und Absorption der entsprechenden Dipolübergänge.

### Rotating Wave Approximation

Die Terme  $V_{\alpha\beta}$  in den Gleichungen (D.12) enthalten Anteile, die mit der Frequenz der Laser  $\omega_a$  und  $\omega_{pp}$  rotieren. Um diese Zeitabhängigkeit zu vereinfachen, begeben wir uns in ein mitrotierendes Koordinatensystem (*rotating frame*). Dazu führen wir die langsamen Variablen

$$\tilde{\rho}_{\alpha\alpha} = \rho_{\alpha\alpha} \quad \text{für } \alpha \in (g, m, r), \quad (\text{D.13a})$$

$$\tilde{\rho}_{gm} = \rho_{gm} e^{-i\omega_{pp} t}, \quad (\text{D.13b})$$

$$\tilde{\rho}_{mr} = \rho_{mr} e^{-i\omega_a t}, \quad (\text{D.13c})$$

$$\tilde{\rho}_{gr} = \rho_{gr} e^{-i(\omega_{pp} - \omega_a) t} \quad (\text{D.13d})$$

ein.

Die Evolution dieser Variablen erhalten wir durch Ableiten der Gleichungen (D.13) und Einsetzen der Gleichungen (D.12). Die Rechnung für die nicht-diagonal Elemente soll hier explizit am Beispiel von  $\tilde{\rho}_{\text{gm}}$  demonstriert werden:

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{\rho}}_{\text{gm}} &= \dot{\rho}_{\text{gm}} e^{-i\omega_{\text{pp}}t} - i\omega_{\text{pp}}\rho_{\text{gm}} e^{-i\omega_{\text{pp}}t} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left( (E_{\text{g}} - E_{\text{m}} + \hbar\omega_{\text{pp}})\tilde{\rho}_{\text{gm}} + V_{\text{gm}}(\rho_{\text{mm}} - \rho_{\text{gg}})e^{-i\omega_{\text{pp}}t} - V_{\text{rm}}\tilde{\rho}_{\text{gr}}e^{-i\omega_{\text{a}}t} \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \left( V_{\text{gm}}(\rho_{\text{mm}} - \rho_{\text{gg}})e^{-i\omega_{\text{pp}}t} - V_{\text{rm}}\tilde{\rho}_{\text{gr}}e^{-i\omega_{\text{a}}t} \right).\end{aligned}\quad (\text{D.14})$$

In Gleichung (D.14) haben wir im letzten Schritt angenommen, dass der Pumplaser den Übergang  $|g\rangle \leftrightarrow |m\rangle$  resonant treibt, d. h. dass

$$\omega_{\text{m}} = \omega_{\text{g}} + \omega_{\text{pp}} \quad (\text{D.15})$$

gilt (siehe Abbildung D.1). Die beiden letzten Summanden in Gleichung (D.14) können außerdem umgeschrieben werden, indem man jeweils den Wechselwirkungsterm  $V_{\alpha\beta}$  mit der  $e$ -Funktion zusammenfasst,

$$\begin{aligned}V_{\text{gm}}e^{-i\omega_{\text{pp}}t} &= -\mathbf{d}_{\text{gm}} \left( \frac{\mathbf{E}_{\text{a}}}{2}(e^{i(-\omega_{\text{a}}-\omega_{\text{pp}})t} + e^{-i(-\omega_{\text{a}}+\omega_{\text{pp}})t}) + \frac{\mathbf{E}_{\text{pp}}}{2}(e^{-2i\omega_{\text{pp}}t} + 1) \right) \\ &\approx -\frac{\hbar\Omega}{2},\end{aligned}\quad (\text{D.16a})$$

$$\begin{aligned}V_{\text{rm}}e^{-i\omega_{\text{a}}t} &= -\mathbf{d}_{\text{rm}} \left( \frac{\mathbf{E}_{\text{a}}}{2}(e^{-2i\omega_{\text{a}}t} + 1) + \frac{\mathbf{E}_{\text{pp}}}{2}(e^{-i(\omega_{\text{pp}}+\omega_{\text{a}})t} + e^{i(\omega_{\text{pp}}-\omega_{\text{a}})t}) \right) \\ &\approx -\frac{\hbar\omega}{2}.\end{aligned}\quad (\text{D.16b})$$

In den Gleichungen (D.16) haben wir jeweils die Näherung der rotierenden Phase (*rotating wave approximation* [183]) angewandt. Dabei vernachlässigt man die rasch rotierenden Terme  $\sim e^{i\omega_{\alpha}t}$ , da sie im Mittel nur einen verschwindenden Beitrag liefern. Außerdem haben wir in den Gleichungen (D.16) die Rabi-Frequenzen

$$\Omega = \frac{\mathbf{d}_{\text{gm}}\mathbf{E}_{\text{pp}}}{\hbar}, \quad (\text{D.17a})$$

$$\omega = \frac{\mathbf{d}_{\text{rm}}\mathbf{E}_{\text{a}}}{\hbar} \quad (\text{D.17b})$$

eingeführt, die die Kopplungsstärke der Lichtfelder an das Atom repräsentieren.

Bei der Berechnung von  $\tilde{\rho}_{\text{gr}}$  und  $\tilde{\rho}_{\text{mr}}$  geht man analog vor. Hierbei berücksichtigen wir allerdings, dass der Anregungslaser den Übergang  $|m\rangle \leftrightarrow |r\rangle$  mit einer endlichen Verstimmung von der resonanten Anregung treibt (siehe Abbildung D.1),

$$\Delta = \omega_{\text{r}} - \omega_{\text{m}} - \omega_{\text{a}}. \quad (\text{D.18})$$

Insgesamt erhalten wir damit für die langsamen Variablen  $\tilde{\rho}_{\alpha\beta}$  den Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega}{2} & 0 \\ \frac{\Omega}{2} & 0 & \frac{\omega}{2} \\ 0 & \frac{\omega}{2} & -\Delta \end{pmatrix}. \quad (\text{D.19})$$

Zur Vereinfachung der Schreibweise ersetzen wir die Notation der langsamen Variablen durch die ursprünglichen Variablen, d. h.  $\tilde{\rho}_{\alpha\beta} \rightarrow \rho_{\alpha\beta}$ . Die Bloch-Gleichungen (D.12) vereinfachen sich damit auf

$$\dot{\rho}_{\text{gg}} = i\frac{\Omega}{2}(\rho_{\text{gm}} - \rho_{\text{mg}}) \quad (\text{D.20a})$$

$$\dot{\rho}_{\text{mm}} = -i\frac{\Omega}{2}(\rho_{\text{gm}} - \rho_{\text{mg}}) + i\frac{\omega}{2}(\rho_{\text{mr}} - \rho_{\text{rm}}) \quad (\text{D.20b})$$

$$\dot{\rho}_{\text{rr}} = -i\frac{\omega}{2}(\rho_{\text{mr}} - \rho_{\text{rm}}), \quad (\text{D.20c})$$

$$\dot{\rho}_{\text{gm}} = -i\frac{\Omega}{2}(\rho_{\text{mm}} - \rho_{\text{gg}}) + i\frac{\omega}{2}\rho_{\text{gr}} \quad (\text{D.20d})$$

$$\dot{\rho}_{\text{mr}} = -i\Delta\rho_{\text{mr}} - i\frac{\omega}{2}(\rho_{\text{rr}} - \rho_{\text{mm}}) - i\frac{\Omega}{2}\rho_{\text{gr}} \quad (\text{D.20e})$$

$$\dot{\rho}_{\text{gr}} = -i\Delta\rho_{\text{gr}} - i\frac{\Omega}{2}\rho_{\text{mr}} + i\frac{\omega}{2}\rho_{\text{gm}}. \quad (\text{D.20f})$$

### Spontaner Zerfall angeregter Zustände

Der Lindbladoperator  $\hat{\mathcal{L}}$  repräsentiert die Dämpfung des Systems durch Zerfall angeregter Energiezustände. Allgemein ist er definiert als [170]

$$\hat{\mathcal{L}} = \sum_{\alpha \neq \beta} \left( \hat{\mathbf{L}}_{\alpha\beta} \hat{\rho} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha\beta}^\dagger - \frac{1}{2} \left[ \hat{\mathbf{L}}_{\alpha\beta}^\dagger \hat{\mathbf{L}}_{\alpha\beta} \hat{\rho} + \hat{\rho} \hat{\mathbf{L}}_{\alpha\beta}^\dagger \hat{\mathbf{L}}_{\alpha\beta} \right] \right) \quad (\text{D.21})$$

mit

$$\hat{\mathbf{L}}_{\alpha\beta} = \sqrt{\Gamma_{\alpha\beta}} |\alpha\rangle \langle \beta|. \quad (\text{D.22})$$

Die Zerfallsrate

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \frac{8\pi^2 \mathbf{d}_{\alpha\beta}^2}{3\epsilon_0 \hbar \lambda_{\alpha\beta}^3}, \quad (\text{D.23})$$

vom Zustand  $|\beta\rangle$  in den Zustand  $|\alpha\rangle$  ist bestimmt durch das Dipolmoment  $\mathbf{d}_{\alpha\beta}$  gemäß Gleichung (D.8), die Wellenlänge  $\lambda_{\alpha\beta}(\omega_\beta - \omega_\alpha) = 2\pi c$  des entsprechenden Übergangs sowie die Dielektrizitätskonstante  $\epsilon_0$  und die Lichtgeschwindigkeit  $c$ .

Da der Rydberg-Zustand besonders langlebig ist, kann sein Zerfall gegenüber der Pumpdauer vernachlässigt werden. Der Zwischenzustand ist jedoch wesentlich kurzlebiger und sein Zerfall  $\Gamma_{\text{gm}}$  liefert im hier betrachteten Drei-Niveau-System den einzigen Beitrag zum Lindbladoperator (D.21). Mit den beiden entsprechenden Operatoren

$$\hat{\mathbf{L}}_{\text{gm}} = \sqrt{\Gamma_{\text{gm}}} |g\rangle \langle m| \quad \hat{\mathbf{L}}_{\text{gm}}^\dagger = \sqrt{\Gamma_{\text{gm}}} |m\rangle \langle g| \quad (\text{D.24})$$

erhalten wir für den Zerfall

$$\hat{\mathcal{L}} = \Gamma_{\text{gm}} \begin{pmatrix} \rho_{\text{mm}} & -\rho_{\text{gm}}/2 & 0 \\ -\rho_{\text{mg}}/2 & -\rho_{\text{mm}} & -\rho_{\text{mr}}/2 \\ 0 & -\rho_{\text{rm}}/2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{D.25})$$

Unter Berücksichtigung dieses Lindbladoperators (D.25) und des Hamiltonoperators (D.19) in der Mastergleichung (D.1) erweitern sich die optischen Bloch-Gleichungen (D.20) des Drei-Niveau-Systems auf

$$\dot{\rho}_{gg} = i\frac{\Omega}{2}(\rho_{gm} - \rho_{mg}) + \Gamma_{gm}\rho_{mm}, \quad (\text{D.26a})$$

$$\dot{\rho}_{mm} = -i\frac{\Omega}{2}(\rho_{gm} - \rho_{mg}) + i\frac{\omega}{2}(\rho_{mr} - \rho_{rm}) - \Gamma_{gm}\rho_{mm}, \quad (\text{D.26b})$$

$$\dot{\rho}_{rr} = -i\frac{\omega}{2}(\rho_{mr} - \rho_{rm}), \quad (\text{D.26c})$$

$$\dot{\rho}_{gm} = -i\frac{\Omega}{2}(\rho_{mm} - \rho_{gg}) + i\frac{\omega}{2}\rho_{gr} - \frac{\Gamma_{gm}}{2}\rho_{gm}, \quad (\text{D.26d})$$

$$\dot{\rho}_{mr} = -i\Delta\rho_{mr} - i\frac{\omega}{2}(\rho_{rr} - \rho_{mm}) - i\frac{\Omega}{2}\rho_{gr} - \frac{\Gamma_{gm}}{2}\rho_{mr}, \quad (\text{D.26e})$$

$$\dot{\rho}_{gr} = -i\Delta\rho_{gr} - i\frac{\Omega}{2}\rho_{mr} + i\frac{\omega}{2}\rho_{gm} \quad (\text{D.26f})$$

$$\rho_{\alpha\beta} = (\rho_{\beta\alpha})^* \quad \text{für } \alpha \neq \beta. \quad (\text{D.26g})$$

### Abbildung der Quantendynamik auf eine klassische Ratengleichung

Aufgrund der großen Unterschiede der Übergangsmatrixelemente wird der untere Übergang wesentlich stärker getrieben als der obere, so dass  $\omega \ll \Omega$  und  $\omega \ll \Gamma_{gm}$  gilt. Dadurch dämpfen die Rabioszillationen und die Kohärenzen auf einer Zeitskala ( $\sim \Gamma_{gm}^{-1}$ ) aus, in der der Rydberg-Zustand kaum populiert wird. Der Zwischenzustand erreicht rasch ( $\sim \Omega^{-1}$ ) einen quasi-stationären Zustand und kann durch seine starke Kopplung adiabatisch dem langsameren Rydberg-Übergang folgen. Die Kohärenzen sind damit allein durch die Werte der Populationen bestimmt und können deshalb adiabatisch eliminiert werden, d.h.

$$\dot{\rho}_{\alpha\beta} = 0 \quad \text{für } \alpha \neq \beta. \quad (\text{D.27})$$

Unter dieser Voraussetzung vereinfachen sich die Gleichungen (D.26) auf ein System von Ratengleichungen. Unter Ausnutzung der Wahrscheinlichkeitserhaltung

$$\sum_{\alpha} \rho_{\alpha\alpha} = 1 \quad (\text{D.28})$$

erhält man mit der Bedingung (D.27) aus den Bloch-Gleichungen (D.26) die beiden gekoppelten Differentialgleichungen

$$\dot{\rho}_{mm} = q_1 \rho_{mm} + q_2 \rho_{rr} + q_3 \quad (\text{D.29a})$$

$$\dot{\rho}_{rr} = q_4 \rho_{mm} + q_5 \rho_{rr} + q_6, \quad (\text{D.29b})$$

wobei die Koeffizienten  $q_k$ ,  $k = 1 \dots 6$ , von  $\omega$ ,  $\Omega$ ,  $\Delta$  und  $\Gamma_{gm}$  abhängen.

Da der Pumpübergang quasi-stationär ist, gilt außerdem

$$\dot{\rho}_{mm} - \dot{\rho}_{gg} = 2\dot{\rho}_{mm} + \dot{\rho}_{rr} = 0. \quad (\text{D.30})$$

Mit den Gleichungen (D.29) und (D.30) lässt sich eine einfache lineare Differentialgleichung für die Evolution der Rydberg-Population finden,

$$\dot{\rho}_{\text{rr}} = -\frac{\gamma_{\uparrow}}{\rho_{\text{rr}}^{\infty}}\rho_{\text{rr}} + \gamma_{\uparrow}. \quad (\text{D.31})$$

Die Anregungsrate des Rydberg-Zustands ist hierbei gegeben durch

$$\gamma_{\uparrow} = \frac{2\Gamma_{\text{gm}}(\omega\Omega)^2(\Omega^2 + \omega^2)}{a_0 + a_2\Delta^2 + a_4\Delta^4} \quad (\text{D.32})$$

mit den Koeffizienten

$$a_0 = (\Omega^2 + \omega^2) [(\omega^2 - 2\Omega^2)^2 + 2\Gamma_{\text{gm}}^2(\Omega^2 + \omega^2)], \quad (\text{D.33a})$$

$$a_2 = 8(\Gamma_{\text{gm}}^4 - 4\Omega_{\text{gm}}^4) + 4\omega^2(\Gamma_{\text{gm}}^2 + 4\Omega^2) + 8\omega^4, \quad (\text{D.33b})$$

$$a_4 = 32(\Gamma_{\text{gm}}^2 + 2\Omega^2) \quad (\text{D.33c})$$

und der Population des Rydberg-Niveaus im stationären Zustand

$$\rho_{\text{rr}}^{\infty} = \frac{\Omega^2(\Omega^2 + \omega^2)}{(\Omega^2 + \omega^2)^2 + 4\Delta^2(\Gamma_{\text{gm}}^2 + 2\Omega^2)}. \quad (\text{D.34})$$

Die Lösung von Gleichung (D.30) liefert die zeitabhängige Besetzungswahrscheinlichkeit des Rydberg-Niveaus,

$$\rho_{\text{rr}}(t) = \rho_{\text{rr}}^{\infty} \left( 1 - \exp\left(-\frac{\gamma_{\uparrow}}{\rho_{\text{rr}}^{\infty}}t\right) \right). \quad (\text{D.35})$$

Durch die Einführung eines effektiven Grundzustands

$$\rho_{\text{gg}}^{\text{eff}} = 1 - \rho_{\text{rr}} \quad (\text{D.36})$$

können wir Gleichung (D.31) umformulieren in die Rategleichung eines effektiven Zwei-Niveau-Systems,

$$\dot{\rho}_{\text{rr}} = \gamma_{\uparrow}\rho_{\text{gg}}^{\text{eff}} + \gamma_{\downarrow}\rho_{\text{rr}}. \quad (\text{D.37})$$

Dabei ist die Abregungsrate gegeben durch

$$\gamma_{\downarrow} = \gamma_{\uparrow} \left( \frac{1 - \rho_{\text{rr}}^{\infty}}{\rho_{\text{rr}}^{\infty}} \right). \quad (\text{D.38})$$

Mit den beiden Raten  $\gamma_{\uparrow}$  und  $\gamma_{\downarrow}$  lässt sich nun die An- und Abregung von Rydberg-Atomen in Abhängigkeit der Systemparameter  $\omega$ ,  $\Omega$ ,  $\Delta$  und  $\Gamma_{\text{gm}}$  beschreiben. In einem Vielteilchensystem wird in den beiden Raten für das Atom  $i$  der Term  $\Delta$  durch die Summe der Laserverstimmung und der wechselwirkungsinduzierten lokalen Verstimmung  $\Delta_i$  gemäß Gleichung (4.5) bestimmt.



# Literaturverzeichnis

- [1] R. Abrines und I. C. Percival, *Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons*, Proc. Phys. Soc. **88**, 861 (1966).
- [2] M. Agranat, N. Andreev, S. Ashitkov, M. Veisman, P. Levashov, A. Ovchinnikov, D. Sitnikov, V. Fortov und K. Khishchenko, *Determination of the transport and optical properties of a nonideal solid-density plasma produced by femtosecond laser pulses*, JETP Lett. **85**, 271 (2007).
- [3] T. Amisaki, *Precise and efficient Ewald summation for periodic fast multipole method*, J. Comput. Chem. **21**, 1075 (2000).
- [4] M. Amoretti, C. Amsler, G. Bonomi, A. Bouchta *et al.*, *Production and detection of cold antihydrogen atoms*, Nature **419**, 456 (2002).
- [5] T. Amthor, M. Reetz-Lamour, S. Westermann, J. Denskat und M. Weidemüller, *Mechanical Effect of van der Waals Interactions Observed in Real Time in an Ultracold Rydberg Gas*, Phys. Rev. Lett. **98**, 023004 (2007).
- [6] T. Amthor, M. Reetz-Lamour, C. Giese und M. Weidemüller, *Modeling many-particle mechanical effects of an interacting Rydberg gas*, Phys. Rev. A **76**, 054702 (2007).
- [7] F. Anderegg, X.-P. Huang, C. F. Driscoll, E. M. Hollmann, T. M. O’Neil und D. H. E. Dubin, *Test Particle Transport due to Long Range Interactions*, Phys. Rev. Lett. **78**, 2128 (1997).
- [8] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell, *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor*, Science **269**, 198 (1995).
- [9] J. R. Anglin und W. Ketterle, *Bose-Einstein condensation of atomic gases*, Nature **416**, 211 (2002).
- [10] A. W. Appel, *An Efficient Program for Many-Body Simulation*, SISC **6**, 85 (1985).
- [11] A. Aspect, E. Arimondo, R. Kaiser, N. Vansteenkiste und C. Cohen-Tannoudji, *Laser Cooling below the One-Photon Recoil Energy by Velocity-Selective Coherent Population Trapping*, Phys. Rev. Lett. **61**, 826 (1988).
- [12] C. Ates, A. Eisfeld und J. M. Rost, *Motion of Rydberg atoms induced by resonant dipole-dipole interactions*, New J. Phys. **10**, 045030 (2008).

- [13] C. Ates, T. Pohl, T. Pattard und J. M. Rost, *Many-body theory of excitation dynamics in an ultracold Rydberg gas*, Phys. Rev. A **76**, 013413 (2007).
- [14] C. Ates, S. Sevinçli und T. Pohl, *Electromagnetically induced transparency in strongly interacting Rydberg gases*, Phys. Rev. A **83**, 041802 (2011).
- [15] C. Ates, *Anregungsdynamik ultrakalter Rydberggase*, Dissertation, TU Dresden (2009).
- [16] S. D. Baalrud, *Transport coefficients in strongly coupled plasmas*, Phys. Plasmas **19**, 030701 (2012).
- [17] R. Balescu, *Irreversible Processes in Ionized Gases*, Phys. Fluids **3**, 52 (1960).
- [18] G. Bannasch und T. Pohl, *Rydberg-atom formation in strongly correlated ultracold plasmas*, Phys. Rev. A **84**, 052710 (2011).
- [19] M. Baranov, *Theoretical progress in many-body physics with ultracold dipolar gases*, Physics Reports **464**, 71 (2008).
- [20] J. S. Bardi, *Landmarks: Laser Cooling of Atoms*, Phys. Rev. Focus **21**, 11 (2008).
- [21] J. Barnes und P. Hut, *A hierarchical  $O(N \log N)$  force-calculation algorithm*, Nature **324**, 446 (1986).
- [22] D. R. Bates, A. E. Kingston und R. W. P. McWhirter, *Recombination Between Electrons and Atomic Ions. I. Optically Thin Plasmas*, Proc. R. Soc. Lond. A. **267**, 297 (1962).
- [23] M. Baus und J.-P. Hansen, *Statistical mechanics of simple coulomb systems*, Phys. Rep. **59**, 1 (1980).
- [24] T. J. Bensity, G. Haefliger und R. R. Jones, *Ionization of Na Rydberg Atoms by Subpicosecond Quarter-Cycle Circularly Polarized Pulses*, Phys. Rev. Lett. **79**, 2018 (1997).
- [25] S. D. Bergeson, A. Denning, M. Lyon und F. Robicheaux, *Density and temperature scaling of disorder-induced heating in ultracold plasmas*, Phys. Rev. A **83**, 023409 (2011).
- [26] S. D. Bergeson und F. Robicheaux, *Recombination Fluorescence in Ultracold Neutral Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **101**, 073202 (2008).
- [27] S. D. Bergeson und R. L. Spencer, *Neutral-plasma oscillations at zero temperature*, Phys. Rev. E **67**, 026414 (2003).
- [28] B. J. Berne, J. P. Boon und S. A. Rice, *On the Calculation of Autocorrelation Functions of Dynamical Variables*, The Journal of Chemical Physics **45**, 1086 (1966).

- [29] P. L. Bhatnagar, E. P. Gross und M. Krook, *A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems*, Phys. Rev. **94**, 511 (1954).
- [30] R. Blümel und U. Smilansky, *Microwave ionization of highly excited hydrogen atoms*, Z. Phys. D. Atom. Mol. Cl. **6**, 83 (1987).
- [31] A. Bobrov, S. Bronin, B. Zelener, B. Zelener, E. Manykin und D. Khikhlikha, *Collisional recombination coefficient in an ultracold plasma: Calculation by the molecular dynamics method*, J. Exp. Theor. Phys. **112**, 527 (2011).
- [32] D. B. Boercker, F. J. Rogers und H. E. DeWitt, *Electron collision frequency in plasmas*, Phys. Rev. A **25**, 1623 (1982).
- [33] D. B. Boercker, *Kinetic theory of electrical conductivity in plasmas*, Phys. Rev. A **23**, 1969 (1981).
- [34] C. Boisseau, I. Simbotin und R. Côté, *Macrodimers: Ultralong Range Rydberg Molecules*, Phys. Rev. Lett. **88**, 133004 (2002).
- [35] M. Bonitz, C. Henning und D. Block, *Complex plasmas: a laboratory for strong correlations*, Rep. Prog. Phys. **73**, 066501 (2010).
- [36] T. Bornath, T. Ohde und M. Schlanges, *Reaction rates for dense nonideal alkali plasmas*, Physica A **211**, 344 (1994).
- [37] T. Bornath und M. Schlanges, *Ionization and recombination of excited atomic states in a dense nonideal hydrogen plasma*, Physica A **196**, 427 (1993).
- [38] J. Bowles, R. McWilliams und N. Rynn, *Direct measurement of velocity-space transport in a fully ionized plasma*, Phys. Rev. Lett. **68**, 1144 (1992).
- [39] T. Boyd und J. Sanderson, *The Physics of Plasmas*, Cambridge University Press (2003).
- [40] H. Breuer und F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems*, Oxford University Press, USA (2002).
- [41] L. S. Brown, D. L. Preston und R. L. S. Jr., *Charged particle motion in a highly ionized plasma*, Phys. Rep. **410**, 237 (2005).
- [42] L. S. Brown und R. L. Singleton, *Temperature equilibration in a fully ionized plasma: Electron-ion mass ratio effects*, Phys. Rev. E **79**, 066407 (2009).
- [43] S. G. Brush, H. L. Sahlin und E. Teller, *Monte Carlo Study of a One-Component Plasma. I*, J. Chem. Phys. **45**, 2102 (1966).
- [44] A. Buchleitner, *Atomes de rydberg en champs micro-onde: regularite et chaos*, Dissertation, ENS Paris (1993).

- [45] A. Burgess und H. Summers, *Recombination and Level Populations of Ions .1. Hydrogen and Hydrogenic Ions*, Mon. Not. R. Astron. Soc. **174**, 345 (1976).
- [46] J. Carrier, L. Greengard und V. Rokhlin, *A Fast Adaptive Multipole Algorithm for Particle Simulations*, Siam J. Sci. Comput. **9**, 669 (1988).
- [47] G. Casati, B. V. Chirikov, D. L. Shepelyansky und I. Guarneri, *Relevance of classical chaos in quantum mechanics: The hydrogen atom in a monochromatic field*, Phys. Rep. **154**, 77 (1987).
- [48] J. Castro, *Collective effects in Ultracold Neutral Plasmas*, Dissertation, Rice University (2011).
- [49] J. Castro, G. Bannasch, P. McQuillen, T. Pohl und T. C. Killian, *Creating non-Maxwellian velocity distributions in ultracold plasmas*, Aip Conf. Proc. **1421**, 31 (2012).
- [50] J. Castro, P. McQuillen und T. C. Killian, *Ion Acoustic Waves in Ultracold Neutral Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **105**, 065004 (2010).
- [51] P. Celliers, A. Ng, G. Xu und A. Forsman, *Thermal equilibration in a shock wave*, Phys. Rev. Lett. **68**, 2305 (1992).
- [52] J. E. Chambers und M. A. Murison, *Pseudo-High-Order Symplectic Integrators*, Astron. J. **119**, 425 (2000).
- [53] S. Chandrasekhar, *Principles of stellar dynamics*, Astrophysical monographs, Dover Publications (1942).
- [54] P. J. Channell und C. Scovel, *Symplectic integration of Hamiltonian systems*, Nonlinearity **3**, 231 (1990).
- [55] P.-H. Chavanis, *Hamiltonian and Brownian systems with long-range interactions: IV. General kinetic equations from the quasilinear theory*, Physica A **387**, 1504 (2008).
- [56] Y. C. Chen, C. E. Simien, S. Laha, P. Gupta, Y. N. Martinez, P. G. Mickelson, S. B. Nagel und T. C. Killian, *Electron Screening and Kinetic-Energy Oscillations in a Strongly Coupled Plasma*, Phys. Rev. Lett. **93**, 265003 (2004).
- [57] S. Chu, L. Hollberg, J. E. Bjorkholm, A. Cable und A. Ashkin, *Three-dimensional viscous confinement and cooling of atoms by resonance radiation pressure*, Phys. Rev. Lett. **55**, 48 (1985).
- [58] F. Cinti, P. Jain, M. Boninsegni, A. Micheli, P. Zoller und G. Pupillo, *Super-solid Droplet Crystal in a Dipole-Blockaded Gas*, Phys. Rev. Lett. **105**, 135301 (2010).
- [59] B. J. Claessens, S. B. van der Geer, G. Taban, E. J. D. Vredenbregt und O. J. Luiten, *Ultracold Electron Source*, Phys. Rev. Lett. **95**, 164801 (2005).

- [60] D. Comparat und P. Pillet, *Dipole blockade in a cold Rydberg atomic sample*, J. Opt. Soc. Am. B **27**, A208 (2010).
- [61] D. M. Cox, H. H. Brown, I. Klavan und B. Bederson, *Energy loss of a low-energy ion beam in passage through an equilibrium cesium plasma*, Phys. Rev. A **10**, 1409 (1974).
- [62] E. A. Cummings, J. E. Daily, D. S. Durfee und S. D. Bergeson, *Fluorescence Measurements Of Expanding Strongly Coupled Neutral Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **95**, 235001 (2005).
- [63] J. J. Curry, F. Skiff, M. Sarfaty und T. N. Good, *Measurement of Fokker-Planck Diffusion with Laser-Induced Fluorescence*, Phys. Rev. Lett. **74**, 1767 (1995).
- [64] H. Dachsels und I. Kabadshow, [www.fz-juelich.de/jsc/fmm](http://www.fz-juelich.de/jsc/fmm).
- [65] H. Dachsels, *An error-controlled fast multipole method*, J. Chem. Phys. **132**, 119901 (2010).
- [66] J. Daligault und G. Dimonte, *Correlation effects on the temperature-relaxation rates in dense plasmas*, Phys. Rev. E **79**, 056403 (2009).
- [67] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
- [68] S. L. Davis, V. Arunasalam, R. J. Hawryluk, M. Okabayashi, G. L. Schmidt, J. A. Schmidt und S. Suckewer, *Energy loss rates of energetic ions injected into the FM-1 spherator*, Phys. Fluids **20**, 1571 (1977).
- [69] B. DeMarco und D. S. Jin, *Onset of Fermi Degeneracy in a Trapped Atomic Gas*, Science **285**, 1703 (1999).
- [70] A. Denning, S. D. Bergeson und F. Robicheaux, *Measurement and simulation of laser-induced fluorescence from nonequilibrium ultracold neutral plasmas*, Phys. Rev. A **80**, 033415 (2009).
- [71] M. W. C. Dharma-wardana, *Quantum Corrections and Bound-State Effects in the Energy Relaxation of Hot Dense Hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **101**, 035002 (2008).
- [72] M. W. C. Dharma-wardana und F. Perrot, *Energy relaxation and the quasiequation of state of a dense two-temperature nonequilibrium plasma*, Phys. Rev. E **58**, 3705 (1998).
- [73] G. Dimonte und J. Daligault, *Molecular-Dynamics Simulations of Electron-Ion Temperature Relaxation in a Classical Coulomb Plasma*, Phys. Rev. Lett. **101**, 135001 (2008).

- [74] J. Dongarra und F. Sullivan, *Guest Editors' Introduction: The Top 10 Algorithms*, *Comput. Sci. Eng.* **2**, 22 (2000).
- [75] Z. Donkó, G. J. Kalman und K. I. Golden, *Caging of Particles in One-Component Plasmas*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 225001 (2002).
- [76] D. H. E. Dubin und T. M. O'Neil, *Trapped nonneutral plasmas, liquids, and crystals (the thermal equilibrium states)*, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 87 (1999).
- [77] F. B. Dunning, J. J. Mestayer, C. O. Reinhold, S. Yoshida und J. Burgdörfer, *Engineering atomic Rydberg states with pulsed electric fields*, *J. Phys. B* **42**, 022001 (2009).
- [78] K. Esselink, *A comparison of algorithms for long-range interactions*, *Comput. Phys. Commun.* **87**, 375 (1995).
- [79] P. P. Ewald, *Die Berechnung optischer und elektrostatischer Gitterpotentiale*, *Ann. Phys* **369**, 253 (1921).
- [80] R. T. Farouki und S. Hamaguchi, *Thermal energy of the crystalline one-component plasma from dynamical simulations*, *Phys. Rev. E* **47**, 4330 (1993).
- [81] D. Fincham, *Optimisation of the Ewald Sum for Large Systems*, *Mol. Simul.* **13**, 1 (1994).
- [82] R. S. Fletcher, X. L. Zhang und S. L. Rolston, *Observation of Collective Modes of Ultracold Plasmas*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 105003 (2006).
- [83] R. S. Fletcher, X. L. Zhang und S. L. Rolston, *Using Three-Body Recombination to Extract Electron Temperatures of Ultracold Plasmas*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 145001 (2007).
- [84] D. Frenkel und B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*, *Computational Science*, Academic Press (2002).
- [85] G. Gabrielse, *Atoms made entirely of antimatter: Two methods produce slow antihydrogen*, *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.* **50**, 155 (2005).
- [86] G. Gabrielse, N. S. Bowden, P. Oxley, A. Speck *et al.*, *Background-Free Observation of Cold Antihydrogen with Field-Ionization Analysis of Its States*, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 213401 (2002).
- [87] A. Gaetan, Y. Miroshnychenko, T. Wilk, A. Chotia, M. Viteau, D. Comparat, P. Pillet, A. Browaeys und P. Grangier, *Observation of collective excitation of two individual atoms in the Rydberg blockade regime*, *Nat Phys* **5**, 115 (2009).
- [88] T. F. Gallagher, P. Pillet, M. P. Robinson, B. Laburthe-Tolra und M. W. Noel, *Back and forth between Rydberg atoms and ultracold plasmas*, *J. Opt. Soc. Am. B* **20**, 1091 (2003).

- [89] T. Gallagher, *Rydberg Atoms*, Cambridge Monographs on Atomic, Molecular And Chemical Physics, Cambridge University Press (2005).
- [90] E. García Saiz, G. Gregori, D. O. Gericke, J. Vorberger *et al.*, *Probing warm dense lithium by inelastic X-ray scattering*, Nat Phys **4**, 940 (2008).
- [91] C. S. Gee, L. C. Percival, J. G. Lodge und D. Richards, *Theoretical rates for electron excitation of highly-excited atoms*, Mon. Not. R. Astron. Soc. **175**, 209 (1976).
- [92] I. Georgescu, U. Saalman und J. M. Rost, *Clusters under strong vuv pulses: A quantum-classical hybrid description incorporating plasma effects*, Phys. Rev. A **76**, 043203 (2007).
- [93] D. O. Gericke, M. S. Murillo und M. Schlanges, *Dense plasma temperature equilibration in the binary collision approximation*, Phys. Rev. E **65**, 036418 (2002).
- [94] D. O. Gericke, M. S. Murillo, D. Semkat, M. Bonitz und D. Kremp, *Relaxation of strongly coupled Coulomb systems after rapid changes of the interaction potential*, J. Phys. A **36**, 6087 (2003).
- [95] D. Gericke und M. Murillo, *Disorder-induced heating of ultracold plasmas*, Contrib. Plasm. Phys. **43**, 298 (2003).
- [96] D. Gericke, M. Murillo und M. Schlanges, *Nonideality effects on temperature relaxation*, Laser Part. Beams **20**, 543 (2002).
- [97] P. Giscard und D. Jaksch, *Tunable Supersolids of Rydberg Excitations Described by Quantum Evolutions on Graphs*, ArXiv e-prints (2011).
- [98] S. H. Glenzer, O. L. Landen, P. Neumayer, R. W. Lee *et al.*, *Observations of Plasmons in Warm Dense Matter*, Phys. Rev. Lett. **98**, 065002 (2007).
- [99] S. Glenzer, H. Lee, P. Davis, T. Döppner *et al.*, *Dense plasma X-ray scattering: Methods and applications*, High Energy Density Physics **6**, 1 (2010).
- [100] S. H. Glenzer und R. Redmer, *X-ray Thomson scattering in high energy density plasmas*, Rev. Mod. Phys. **81**, 1625 (2009).
- [101] M. E. Glinsky und T. M. O’Neil, *Guiding center atoms: Three-body recombination in a strongly magnetized plasma*, Phys. Fluids B **3**, 1279 (1991).
- [102] J. N. Glosli, F. R. Graziani, R. M. More, M. S. Murillo, F. H. Streitz, M. P. Surh, L. X. Benedict, S. Hau-Riege, A. B. Langdon und R. A. London, *Molecular dynamics simulations of temperature equilibration in dense hydrogen*, Phys. Rev. E **78**, 025401 (2008).
- [103] H. Gould und G. F. Mazenko, *Coupling of Single-Particle and Collective Motions in a One-Component Plasma*, Phys. Rev. Lett. **35**, 1455 (1975).

- [104] H. A. Gould und H. E. DeWitt, *Convergent Kinetic Equation for a Classical Plasma*, Phys. Rev. **155**, 68 (1967).
- [105] P. L. Gould, S. M. Farooqi, S. Krishnan, J. Stanojevic, D. Tong, Y. Zhang, J. Ensher, A. Estrin, C.-H. Cheng und E. Eyler, *Ultracold Rydberg Gases and Plasmas*, S. 270–279, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA (2005).
- [106] L. Greengard und V. Rokhlin, *A fast algorithm for particle simulations*, J. Comput. Phys. **73**, 325 (1987).
- [107] J. A. Griffiths und D. Farrelly, *Ionization of Rydberg atoms by circularly and elliptically polarized microwave fields*, Phys. Rev. A **45**, R2678 (1992).
- [108] M. Gryziński, *Classical Theory of Electronic and Ionic Inelastic Collisions*, Phys. Rev. **115**, 374 (1959).
- [109] M. Gryziński, *Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions*, Phys. Rev. **138**, A336 (1965).
- [110] P. Gupta, S. Laha, C. E. Simien, H. Gao, J. Castro, T. C. Killian und T. Pohl, *Electron-Temperature Evolution in Expanding Ultracold Neutral Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **99**, 075005 (2007).
- [111] Y. Hahn, *Plasma density effects on the three-body recombination rate coefficients*, Phys. Lett. A **231**, 82 (1997).
- [112] Y. Hahn, *Relaxation of cold plasmas and threshold lowering effect*, Phys. Rev. E **64**, 046409 (2001).
- [113] J. P. Hansen und I. R. McDonald, *Microscopic simulation of a strongly coupled hydrogen plasma*, Phys. Rev. A **23**, 2041 (1981).
- [114] J. P. Hansen, I. R. McDonald und E. L. Pollock, *Statistical mechanics of dense ionized matter. III. Dynamical properties of the classical one-component plasma*, Phys. Rev. A **11**, 1025 (1975).
- [115] J. P. Hansen, E. L. Pollock und I. R. McDonald, *Velocity Autocorrelation Function and Dynamical Structure Factor of the Classical One-Component Plasma*, Phys. Rev. Lett. **32**, 277 (1974).
- [116] J. P. Hansen, *Statistical Mechanics of Dense Ionized Matter. I. Equilibrium Properties of the Classical One-Component Plasma*, Phys. Rev. A **8**, 3096 (1973).
- [117] J. Hansen und I. McDonald, *Thermal relaxation in a strongly coupled two-temperature plasma*, Phys. Lett. A **97**, 42 (1983).
- [118] J. L. Hanssen, J. J. McClelland, E. A. Dakin und M. Jacka, *Laser-cooled atoms as a focused ion-beam source*, Phys. Rev. A **74**, 063416 (2006).

- [119] G. Hechenblaikner, O. M. Maragò, E. Hodby, J. Arlt, S. Hopkins und C. J. Foot, *Observation of Harmonic Generation and Nonlinear Coupling in the Collective Dynamics of a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **85**, 692 (2000).
- [120] R. Heidemann, U. Raitzsch, V. Bendkowsky, B. Butscher, R. Löw, L. Santos und T. Pfau, *Evidence for Coherent Collective Rydberg Excitation in the Strong Blockade Regime*, Phys. Rev. Lett. **99**, 163601 (2007).
- [121] N. Henkel, R. Nath und T. Pohl, *Three-Dimensional Roton Excitations and Supersolid Formation in Rydberg-Excited Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **104**, 195302 (2010).
- [122] E. Hinnov und J. G. Hirschberg, *Electron-Ion Recombination in Dense Plasmas*, Phys. Rev. **125**, 795 (1962).
- [123] S. Ichimaru, *Plasma Physics: An Introduction to Statistical Physics of Charged Particles*, Lecture Notes and Supplements in Physics, Benjamin/Cummings Publishing Company (1986).
- [124] S. Ichimaru, *Statistical Plasma Physics: Basic principles*, Frontiers in Physics, Westview Press (2004).
- [125] S. Ichimaru, *Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids*, Rev. Mod. Phys. **54**, 1017 (1982).
- [126] S. Ichimaru, H. Iyetomi und S. Tanaka, *Statistical physics of dense plasmas: Thermodynamics, transport coefficients and dynamic correlations*, Phys. Rep. **149**, 91 (1987).
- [127] S. Ichimaru, S. Mitake, S. Tanaka und X.-Z. Yan, *Theory of interparticle correlations in dense, high-temperature plasmas. I. General formalism*, Phys. Rev. A **32**, 1768 (1985).
- [128] S. Ichimaru und S. Tanaka, *Theory of interparticle correlations in dense, high-temperature plasmas. V. Electric and thermal conductivities*, Phys. Rev. A **32**, 1790 (1985).
- [129] W. M. Itano, J. J. Bollinger, J. N. Tan, B. Jelenković, X.-P. Huang und D. J. Wineland, *Bragg Diffraction from Crystallized Ion Plasmas*, Science **279**, pp. 686 (1998).
- [130] R. V. Jensen, S. M. Susskind und M. M. Sanders, *Chaotic ionization of highly excited hydrogen atoms: Comparison of classical and quantum theory with experiment*, Phys. Rep. **201**, 1 (1991).
- [131] R. V. Jensen, *Quantum chaos*, Nature **355**, 311 (1992).
- [132] B. Jeon, M. Foster, J. Colgan, G. Csanak, J. D. Kress, L. A. Collins und N. Grønbech-Jensen, *Energy relaxation rates in dense hydrogen plasmas*, Phys. Rev. E **78**, 036403 (2008).

- [133] R. R. Jones, D. You und P. H. Bucksbaum, *Ionization of Rydberg atoms by sub-picosecond half-cycle electromagnetic pulses*, Phys. Rev. Lett. **70**, 1236 (1993).
- [134] S. Jonsell, D. P. van der Werf, M. Charlton und F. Robicheaux, *Simulation of the formation of antihydrogen in a nested Penning trap: effect of positron density*, J. Phys. B **42**, 215002 (2009).
- [135] H. Kandrup, *Generalized Landau Equation for a System with a Self-Consistent Mean Field - Derivation from an N-Particle Liouville Equation*, Astrophys. J. **244**, 316 (1981).
- [136] M. Karplus, R. N. Porter und R. D. Sharma, *Exchange Reactions with Activation Energy. I. Simple Barrier Potential for (H, H<sub>2</sub>)*, The Journal of Chemical Physics **43**, 3259 (1965).
- [137] T. Kihara und O. Aono, *Unified Theory of Relaxations in Plasmas, I. Basic Theorem*, J. Phys. Soc. Jpn. **18**, 837 (1963).
- [138] T. C. Killian, V. S. Ashoka, P. Gupta, S. Laha, S. B. Nagel, C. E. Simien, S. Kulin, S. L. Rolston und S. D. Bergeson, *Ultracold neutral plasmas: recent experiments and new prospects*, J. Phys. A **36**, 6077 (2003).
- [139] T. C. Killian, Y. C. Chen, P. Gupta, S. Laha, Y. N. Martinez, P. G. Mickelson, S. B. Nagel, A. D. Saenz und C. E. Simien, *Absorption imaging and spectroscopy of ultracold neutral plasmas*, J. Phys. B **38**, S351 (2005).
- [140] T. C. Killian, S. Kulin, S. D. Bergeson, L. A. Orozco, C. Orzel und S. L. Rolston, *Creation of an Ultracold Neutral Plasma*, Phys. Rev. Lett. **83**, 4776 (1999).
- [141] T. C. Killian, M. J. Lim, S. Kulin, R. Dumke, S. D. Bergeson und S. L. Rolston, *Formation of Rydberg Atoms in an Expanding Ultracold Neutral Plasma*, Phys. Rev. Lett. **86**, 3759 (2001).
- [142] T. C. Killian, T. Pattard, T. Pohl und J. M. Rost, *Ultracold neutral plasmas*, Phys. Rep. **449**, 77 (2007).
- [143] K. Kim, M.-S. Chang, S. Korenblit, R. Islam, E. E. Edwards, J. K. Freericks, G.-D. Lin, L.-M. Duan und C. Monroe, *Quantum simulation of frustrated Ising spins with trapped ions*, Nature **465**, 590 (2010).
- [144] I. Klimontovich, *Kinetic theory of nonideal gases and nonideal plasmas*, International series in natural philosophy, Pergamon Press (1982).
- [145] D. Kremp, T. Bornath, M. Bonitz, W. D. Kraeft und M. Schlanges, *Quantum kinetic equations for nonideal plasmas: Bound states and ionization kinetics*, Phys. Plasmas **7**, 59 (2000).
- [146] A. L. Kritcher, P. Neumayer, C. R. D. Brown, P. Davis *et al.*, *Measurements of Ionic Structure in Shock Compressed Lithium Hydride from Ultrafast X-Ray Thomson Scattering*, Phys. Rev. Lett. **103**, 245004 (2009).

- [147] A. L. Kritcher, P. Neumayer, J. Castor, T. Döppner *et al.*, *Ultrafast X-ray Thomson Scattering of Shock-Compressed Matter*, *Science* **322**, 69 (2008).
- [148] R. Kubo, M. Toda und N. Hashitsume, *Statistical physics II: nonequilibrium statistical mechanics*, Springer series in solid-state sciences, Springer (1991).
- [149] S. Kulin, T. C. Killian, S. D. Bergeson und S. L. Rolston, *Plasma Oscillations and Expansion of an Ultracold Neutral Plasma*, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 318 (2000).
- [150] J. Kurzak und B. M. Pettitt, *Fast multipole methods for particle dynamics.*, *Mol. Simulat.* **32**, 775 (2006).
- [151] S. G. Kuzmin und T. M. O’Neil, *Numerical simulation of ultracold plasmas*, *Phys. Plasmas* **9**, 3743 (2002).
- [152] S. G. Kuzmin und T. M. O’Neil, *Numerical Simulation of Ultracold Plasmas: How Rapid Intrinsic Heating Limits the Development of Correlation*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 065003 (2002).
- [153] S. Laha, P. Gupta, C. E. Simien, H. Gao, J. Castro, T. Pohl und T. C. Killian, *Experimental Realization of an Exact Solution to the Vlasov Equations for an Expanding Plasma*, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 155001 (2007).
- [154] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein und T. Pfau, *The physics of dipolar bosonic quantum gases*, *Reports on Progress in Physics* **72**, 126401 (2009).
- [155] C. G. Lambert, T. A. Darden und J. A. B. Jr., *A Multipole-Based Algorithm for Efficient Calculation of Forces and Potentials in Macroscopic Periodic Assemblies of Particles*, *J. Comput. Phys.* **126**, 274 (1996).
- [156] L. Landau, *Die kinetische Gleichung für den Fall Coulombscher Wechselwirkung*, *Phys. Z. Sowjetunion* **10**, 154 (1936).
- [157] A. V. Lankin und G. E. Norman, *Collisional recombination in strongly coupled plasmas*, *J. Phys. A* **42**, 214042 (2009).
- [158] H. J. Lee, P. Neumayer, J. Castor, T. Döppner *et al.*, *X-Ray Thomson-Scattering Measurements of Density and Temperature in Shock-Compressed Beryllium*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 115001 (2009).
- [159] Y. T. Lee und R. M. More, *An electron conductivity model for dense plasmas*, *Phys. Fluids* **27**, 1273 (1984).
- [160] A. Lenard, *On Bogoliubov’s kinetic equation for a spatially homogeneous plasma*, *Ann. Phys* **10**, 390 (1960).
- [161] J. G. Leopold und I. C. Percival, *Ionisation of highly excited atoms by electric fields. III. Microwave ionisation and excitation*, *J. Phys. B* **12**, 709 (1979).

- [162] I. Lesanovsky, *Many-Body Spin Interactions and the Ground State of a Dense Rydberg Lattice Gas*, Phys. Rev. Lett. **106**, 025301 (2011).
- [163] D. Levesque und L. Verlet, *Computer "Experiments" on Classical Fluids. III. Time-Dependent Self-Correlation Functions*, Phys. Rev. A **2**, 2514 (1970).
- [164] C.-K. Li und R. D. Petraso, *Fokker-Planck equation for moderately coupled plasmas*, Phys. Rev. Lett. **70**, 3063 (1993).
- [165] W. Li, M. W. Noel, M. P. Robinson, P. J. Tanner, T. F. Gallagher, D. Comparat, B. Laburthe Tolra, N. Vanhaecke, T. Vogt, N. Zahzam, P. Pillet und D. A. Tate, *Evolution dynamics of a dense frozen Rydberg gas to plasma*, Phys. Rev. A **70**, 042713 (2004).
- [166] W. Li, P. J. Tanner und T. F. Gallagher, *Dipole-Dipole Excitation and Ionization in an Ultracold Gas of Rydberg Atoms*, Phys. Rev. Lett. **94**, 173001 (2005).
- [167] R. Liboff, *Kinetic theory: classical, quantum, and relativistic descriptions*, A Wiley Interscience publication, J. Wiley (1998).
- [168] T. C. Liebisch, A. Reinhard, P. R. Berman und G. Raithel, *Atom Counting Statistics in Ensembles of Interacting Rydberg Atoms*, Phys. Rev. Lett. **95**, 253002 (2005).
- [169] E. Lifshitz und L. Pitaevskii, *Physical kinetics*, Course of theoretical physics, Butterworth-Heinemann (1981).
- [170] G. Lindblad, *On the generators of quantum dynamical semigroups*, Comm. Math. Phys. **48**, 119 (1976).
- [171] J. D. Lindl, P. Amendt, R. L. Berger, S. G. Glendinning, S. H. Glenzer, S. W. Haan, R. L. Kauffman, O. L. Landen und L. J. Suter, *The physics basis for ignition using indirect-drive targets on the National Ignition Facility*, Physics of Plasmas **11**, 339 (2004).
- [172] R. Löw, H. Weimer, J. Nipper, J. B. Balewski, B. Butscher, H. P. Büchler und T. Pfau, *An experimental and theoretical guide to strongly interacting Rydberg gases*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **45**, 113001 (2012).
- [173] M. D. Lukin, M. Fleischhauer, R. Cote, L. M. Duan, D. Jaksch, J. I. Cirac und P. Zoller, *Dipole Blockade and Quantum Information Processing in Mesoscopic Atomic Ensembles*, Phys. Rev. Lett. **87**, 037901 (2001).
- [174] A. Lyubonko, T. Pohl und J.-M. Rost, *Collective energy absorption of ultracold plasmas through electronic edge-modes*, New Journal of Physics **14**, 053039 (2012).

- [175] P. Maddaloni, M. Modugno, C. Fort, F. Minardi und M. Inguscio, *Collective Oscillations of Two Colliding Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **85**, 2413 (2000).
- [176] E. Madelung, *The electric field in systems of regularly arranged point charges*, Phys. Z. **19**, 524 (1918).
- [177] P. Mansbach und J. Keck, *Monte Carlo Trajectory Calculations of Atomic Excitation and Ionization by Thermal Electrons*, Phys. Rev. **181**, 275 (1969).
- [178] S. Mazevet, L. A. Collins und J. D. Kress, *Evolution of Ultracold Neutral Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **88**, 055001 (2002).
- [179] A. J. McCulloch, D. V. Sheludko, S. D. Saliba, S. C. Bell, M. Junker, K. A. Nugent und R. E. Scholten, *Arbitrarily shaped high-coherence electron bunches from cold atoms*, Nat Phys **7**, 785 (2011).
- [180] R. McWilliams und M. Okubo, *The transport of test ions in a quiet plasma*, Phys. Fluids **30**, 2849 (1987).
- [181] J. T. Mendonça, J. Loureiro und H. Terças, *Waves in Rydberg plasmas*, J. Plasma Phys. **75**, 713 (2009).
- [182] J. T. Mendonça und P. K. Shukla, *Ion-acoustic waves in a nonstationary ultra-cold neutral plasma*, Phys. Plasmas **18**, 042101 (2011).
- [183] H. Metcalf und P. Van Der Straten, *Laser Cooling and Trapping*, Graduate Texts in Contemporary Physics, Springer (1999).
- [184] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend und W. Ketterle, *Collective Excitations of a Bose-Einstein Condensate in a Magnetic Trap*, Phys. Rev. Lett. **77**, 988 (1996).
- [185] T. B. Mitchell, J. J. Bollinger, D. H. E. Dubin, X.-P. Huang, W. M. Itano und R. H. Baughman, *Direct Observations of Structural Phase Transitions in Planar Crystallized Ion Plasmas*, Science **282**, 1290 (1998).
- [186] J. P. Mithen, J. Daligault, B. J. B. Crowley und G. Gregori, *Density fluctuations in the Yukawa one-component plasma: An accurate model for the dynamical structure factor*, Phys. Rev. E **84**, 046401 (2011).
- [187] J. P. Mithen, J. Daligault und G. Gregori, *Comparative merits of the memory function and dynamic local-field correction of the classical one-component plasma*, Phys. Rev. E **85**, 056407 (2012).
- [188] J. P. Morrison, C. J. Rennick und E. R. Grant, *Very slow expansion of an ultracold plasma formed in a seeded supersonic molecular beam of NO*, Phys. Rev. A **79**, 062706 (2009).

- [189] J. P. Morrison, C. J. Rennick, J. S. Keller und E. R. Grant, *Evolution from a Molecular Rydberg Gas to an Ultracold Plasma in a Seeded Supersonic Expansion of NO*, Phys. Rev. Lett. **101**, 205005 (2008).
- [190] I. Mourachko, D. Comparat, F. de Tomasi, A. Fioretti, P. Nosbaum, V. M. Akulin und P. Pillet, *Many-Body Effects in a Frozen Rydberg Gas*, Phys. Rev. Lett. **80**, 253 (1998).
- [191] M. S. Murillo, *Using Fermi Statistics to Create Strongly Coupled Ion Plasmas in Atom Traps*, Phys. Rev. Lett. **87**, 115003 (2001).
- [192] M. S. Murillo, *Strongly coupled plasma physics and high energy-density matter*, Phys. Plasmas **11**, 2964 (2004).
- [193] M. S. Murillo, *Ultrafast Dynamics of Strongly Coupled Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **96**, 165001 (2006).
- [194] M. S. Murillo und M. W. C. Dharma-wardana, *Temperature Relaxation in Hot Dense Hydrogen*, Phys. Rev. Lett. **100**, 205005 (2008).
- [195] M. S. Murillo und J. C. Weisheit, *Dense plasmas, screened interactions, and atomic ionization*, Phys. Rep. **302**, 1 (1998).
- [196] K. D. Nelson, X. Li und D. S. Weiss, *Imaging single atoms in a three-dimensional array*, Nat Phys **3**, 556 (2007).
- [197] K. Niffenegger, K. A. Gilmore und F. Robicheaux, *Early time properties of ultracold neutral plasmas*, J. Phys. B **44**, 145701 (2011).
- [198] T. O'Neil und N. Rostoker, *Triplet Correlation for a Plasma*, Phys. Fluids **8**, 1109 (1965).
- [199] I. Percival und D. Richards, *The Theory of Collisions between Charged Particles and Highly Excited Atoms*, Adv. Atom. Mol. Phys. **11**, 1 (1976).
- [200] T. Pohl, C. S. Adams und H. R. Sadepour, *Cold Rydberg gases and ultracold plasmas*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **44**, 180201 (2011).
- [201] T. Pohl, D. Comparat, N. Zahzam, T. Vogt, P. Pillet und T. Pattard, *Use of Rydberg atoms to control electron temperatures in ultracold plasmas*, Eur. Phys. J. D **40**, 45 (2006).
- [202] T. Pohl, T. Pattard und J. M. Rost, *Plasma formation from ultracold Rydberg gases*, Phys. Rev. A **68**, 010703 (2003).
- [203] T. Pohl, T. Pattard und J. M. Rost, *Coulomb Crystallization in Expanding Laser-Cooled Neutral Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **92**, 155003 (2004).

- [204] T. Pohl, T. Pattard und J. M. Rost, *Kinetic modeling and molecular dynamics simulation of ultracold neutral plasmas including ionic correlations*, Phys. Rev. A **70**, 033416 (2004).
- [205] T. Pohl, T. Pattard und J. M. Rost, *On the possibility of 'correlation cooling' of ultracold neutral plasmas*, J. Phys. B **37**, L183 (2004).
- [206] T. Pohl, T. Pattard und J. M. Rost, *Influence of electron-ion collisions on Coulomb crystallization of ultracold neutral plasmas*, Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics **38**, S343 (2005).
- [207] T. Pohl, T. Pattard und J. M. Rost, *Relaxation to Nonequilibrium in Expanding Ultracold Neutral Plasmas*, Phys. Rev. Lett. **94**, 205003 (2005).
- [208] T. Pohl, H. R. Sadeghpour und G. Gabrielse, *New Interpretations of Measured Antihydrogen Velocities and Field Ionization Spectra*, Phys. Rev. Lett. **97**, 143401 (2006).
- [209] T. Pohl, H. Sadeghpour und P. Schmelcher, *Cold and ultracold Rydberg atoms in strong magnetic fields*, Phys. Rep. **484**, 181 (2009).
- [210] T. Pohl, D. Vrinceanu und H. R. Sadeghpour, *Rydberg Atom Formation in Ultracold Plasmas: Small Energy Transfer with Large Consequences*, Phys. Rev. Lett. **100**, 223201 (2008).
- [211] J. D. Pritchard, D. Maxwell, A. Gauguet, K. J. Weatherill, M. P. A. Jones und C. S. Adams, *Cooperative Atom-Light Interaction in a Blockaded Rydberg Ensemble*, Phys. Rev. Lett. **105**, 193603 (2010).
- [212] P. Procacci und M. Marchi, *Taming the Ewald sum in molecular dynamics simulations of solvated proteins via a multiple time step algorithm*, J. Chem. Phys. **104**, 3003 (1996).
- [213] C. Raman, C. W. S. Conover, C. I. Sukenik und P. H. Bucksbaum, *Ionization of Rydberg Wave Packets by Subpicosecond, Half-Cycle Electromagnetic Pulses*, Phys. Rev. Lett. **76**, 2436 (1996).
- [214] R. Redmer und G. Röpke, *Progress in the Theory of Dense Strongly Coupled Plasmas*, Contributions to Plasma Physics **50**, 970 (2010).
- [215] R. Redmer, *Physical properties of dense, low-temperature plasmas*, Phys. Rep. **282**, 35 (1997).
- [216] R. Redmer, *Electrical conductivity of dense metal plasmas*, Phys. Rev. E **59**, 1073 (1999).
- [217] M. P. Reijnders, P. A. van Kruisbergen, G. Taban, S. B. van der Geer, P. H. A. Mutsaers, E. J. D. Vredenburg und O. J. Luiten, *Low-Energy-Spread Ion Bunches from a Trapped Atomic Gas*, Phys. Rev. Lett. **102**, 034802 (2009).

- [218] A. Reinhard, T. C. Liebisch, B. Knuffman und G. Raithel, *Level shifts of rubidium Rydberg states due to binary interactions*, Phys. Rev. A **75**, 032712 (2007).
- [219] C. O. Reinhold, M. Melles, H. Shao und J. Burgdörfer, *Ionization of Rydberg atoms by half-cycle pulses*, J. Phys. B-at. Mol. Opt. **26**, L659 (1993).
- [220] H. Reinholz, R. Redmer und S. Nagel, *Thermodynamic and transport properties of dense hydrogen plasmas*, Phys. Rev. E **52**, 5368 (1995).
- [221] D. Riley, N. C. Woolsey, D. McSherry, I. Weaver, A. Djaoui und E. Nardi, *X-Ray Diffraction from a Dense Plasma*, Phys. Rev. Lett. **84**, 1704 (2000).
- [222] H. Risken, *The Fokker-Planck Equation*, Springer Berlin / Heidelberg (1996).
- [223] F. Robicheaux, *Pulsed field ionization of Rydberg atoms*, Phys. Rev. A **56**, R3358 (1997).
- [224] F. Robicheaux und J. D. Hanson, *Simulation of the Expansion of an Ultracold Neutral Plasma*, Phys. Rev. Lett. **88**, 055002 (2002).
- [225] F. Robicheaux und J. D. Hanson, *Simulated expansion of an ultra-cold, neutral plasma*, Phys. Plasmas **10**, 2217 (2003).
- [226] F. Robicheaux und J. V. Hernández, *Many-body wave function in a dipole blockade configuration*, Phys. Rev. A **72**, 063403 (2005).
- [227] M. P. Robinson, B. L. Tolra, M. W. Noel, T. F. Gallagher und P. Pillet, *Spontaneous Evolution of Rydberg Atoms into an Ultracold Plasma*, Phys. Rev. Lett. **85**, 4466 (2000).
- [228] G. N. Rockwell, V. F. Hoffman, T. Clausen und R. Blümel, *Realistic three-dimensional computations of microwave-ionization curves of hydrogen Rydberg atoms*, Phys. Rev. A **65**, 025401 (2002).
- [229] M. Rosenberg und P. K. Shukla, *Instabilities in strongly coupled ultracold neutral plasmas*, Phys. Scripta **83**, 015503 (2011).
- [230] M. N. Rosenbluth, W. M. MacDonald und D. L. Judd, *Fokker-Planck Equation for an Inverse-Square Force*, Phys. Rev. **107**, 1 (1957).
- [231] J. R. Rygg, J. A. Frenje, C. K. Li, F. H. Séguin, R. D. Petrasso, D. D. Meyerhofer und C. Stoeckl, *Electron-ion thermal equilibration after spherical shock collapse*, Phys. Rev. E **80**, 026403 (2009).
- [232] M. Saffman, T. G. Walker und K. Mølmer, *Quantum information with Rydberg atoms*, Rev. Mod. Phys. **82**, 2313 (2010).
- [233] M. Saha, *Ionization in the solar chromosphere.*, Philos. Mag. **40**, 472 (1920).

- [234] M. Schlanges und T. Bornath, *Ionization and recombination coefficients for a dense nonideal hydrogen plasma: effects of screening and degeneracy*, Physica A **192**, 262 (1993).
- [235] M. Schlanges, T. Bornath, J. Vorberger und D. Gericke, *Energy Relaxation Study for Warm Dense Matter Experiments*, Contrib. Plasm. Phys. **50**, 64 (2010).
- [236] T. Schlick, *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide*, Interdisciplinary Applied Mathematics, Springer (2010).
- [237] K. E. Schmidt und M. A. Lee, *Implementing the fast multipole method in three dimensions*, J. Stat. Phys. **63**, 1223 (1991).
- [238] D. Semkat, R. Redmer und T. Bornath, *Collisional absorption in aluminum*, Phys. Rev. E **73**, 066406 (2006).
- [239] S. Sevinçli, N. Henkel, C. Ates und T. Pohl, *Nonlocal Nonlinear Optics in Cold Rydberg Gases*, Phys. Rev. Lett. **107**, 153001 (2011).
- [240] J. C. Sexton und D. H. Weingarten, *Hamiltonian evolution for the hybrid Monte Carlo algorithm*, Nucl. Phys. B **380**, 665 (1992).
- [241] E. Shahmoon, G. Kurizki, M. Fleischhauer und D. Petrosyan, *Strongly interacting photons in hollow-core waveguides*, Phys. Rev. A **83**, 033806 (2011).
- [242] P. Shukla, *Properties of electrostatic waves in ultracold neutral plasmas*, Phys. Lett. A **374**, 3656 (2010).
- [243] C. E. Simien, Y. C. Chen, P. Gupta, S. Laha, Y. N. Martinez, P. G. Mickelson, S. B. Nagel und T. C. Killian, *Using Absorption Imaging to Study Ion Dynamics in an Ultracold Neutral Plasma*, Phys. Rev. Lett. **92**, 143001 (2004).
- [244] K. Singer, M. Reetz-Lamour, T. Amthor, L. G. Marcassa und M. Weidemüller, *Suppression of Excitation and Spectral Broadening Induced by Interactions in a Cold Gas of Rydberg Atoms*, Phys. Rev. Lett. **93**, 163001 (2004).
- [245] K. Singer, J. Stanojevic, M. Weidemüller und R. Côté, *Long-range interactions between alkali Rydberg atom pairs correlated to the  $ns$ - $ns$ ,  $np$ - $np$  and  $nd$ - $nd$  asymptotes*, J. Phys. B **38**, S295ci (2005).
- [246] W. L. Slattery, G. D. Doolen und H. E. DeWitt, *Improved equation of state for the classical one-component plasma*, Phys. Rev. A **21**, 2087 (1980).
- [247] L. Spitzer, *Physics of Fully Ionized Gases*, Dover Publications (1990).
- [248] L. Spitzer und R. Härm, *Transport Phenomena in a Completely Ionized Gas*, Phys. Rev. **89**, 977 (1953).

- [249] D. M. Stamper-Kurn, M. R. Andrews, A. P. Chikkatur, S. Inouye, H.-J. Miesner, J. Stenger und W. Ketterle, *Optical Confinement of a Bose-Einstein Condensate*, Phys. Rev. Lett. **80**, 2027 (1998).
- [250] J. Stanojevic, R. Côté, D. Tong, E. E. Eyler und P. L. Gould, *Long-range potentials and  $(n-1)d + ns$  molecular resonances in an ultracold Rydberg gas*, Phys. Rev. A **78**, 052709 (2008).
- [251] R. Stern, D. Hill und N. Rynn, *Direct ion-transport measurement by optical tagging*, Phys. Lett. A **93**, 127 (1983).
- [252] J. Stevefelt, J. Boulmer und J. F. Delpech, *Collisional-radiative recombination in cold plasmas*, Phys. Rev. A **12**, 1246 (1975).
- [253] J. C. Stewart und K. D. Pyatt, Jr., *Lowering of Ionization Potentials in Plasmas*, Astrophys. J. **144**, 1203 (1966).
- [254] S. J. Stuart, R. Zhou und B. J. Berne, *Molecular dynamics with multiple time scales: The selection of efficient reference system propagators*, J. Chem. Phys. **105**, 1426 (1996).
- [255] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens und K. R. Wilson, *A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters*, J. Chem. Phys. **76**, 637 (1982).
- [256] J. M. Taccetti, R. P. Shurter, J. P. Roberts, J. F. Benage, B. Graden, B. Haberle, M. S. Murillo, B. Vigil und F. J. Wysocki, *An experiment to measure the electron-ion thermal equilibration rate in a strongly coupled plasma*, J. Phys. A **39**, 4347 (2006).
- [257] S. Tanaka und S. Ichimaru, *Theory of interparticle correlations in dense, high-temperature plasmas. VIII. Shear viscosity*, Phys. Rev. A **34**, 4163 (1986).
- [258] J. Thomson, *Recombination of gaseous ions, the chemical combination of gases, and monomolecular reactions*, Philos. Mag. **47**, 337 (1924).
- [259] A. Tkachev und S. Yakovlenko, *Anomalous slowdown of relaxation in an ultracold plasma*, JETP Lett. **73**, 66 (2001).
- [260] D. Tong, S. M. Farooqi, J. Stanojevic, S. Krishnan, Y. P. Zhang, R. Côté, E. E. Eyler und P. L. Gould, *Local Blockade of Rydberg Excitation in an Ultracold Gas*, Phys. Rev. Lett. **93**, 063001 (2004).
- [261] A. Y. Toukmaji und J. A. Board, *Ewald summation techniques in perspective: a survey*, Comput. Phys. Commun. **95**, 73 (1996).
- [262] M. Tuckerman, B. J. Berne und G. J. Martyna, *Reversible multiple time scale molecular dynamics*, J. Chem. Phys. **97**, 1990 (1992).

- [263] K. A. Twedt und S. L. Rolston, *Electron evaporation from an ultracold plasma in a uniform electric field*, Phys. Plasmas **17**, 082101 (2010).
- [264] E. Urban, T. A. Johnson, T. Henage, L. Isenhower, D. D. Yavuz, T. G. Walker und M. Saffman, *Observation of Rydberg blockade between two atoms*, Nat Phys **5**, 110 (2009).
- [265] H. M. van Horn, *Dense Astrophysical Plasmas*, Science **252**, 384 (1991).
- [266] N. Vanhaecke, D. Comparat, D. A. Tate und P. Pillet, *Ionization of Rydberg atoms embedded in an ultracold plasma*, Phys. Rev. A **71**, 013416 (2005).
- [267] G. Vitrant, J. M. Raimond, M. Gross und S. Haroche, *Rydberg to plasma evolution in a dense gas of very excited atoms*, J. Phys. B **15**, L49 (1982).
- [268] T. Vogt, M. Viteau, J. Zhao, A. Chotia, D. Comparat und P. Pillet, *Dipole Blockade at Förster Resonances in High Resolution Laser Excitation of Rydberg States of Cesium Atoms*, Phys. Rev. Lett. **97**, 083003 (2006).
- [269] J. Vorberger, D. O. Gericke, T. Bornath und M. Schlanges, *Energy relaxation in dense, strongly coupled two-temperature plasmas*, Phys. Rev. E **81**, 046404 (2010).
- [270] L. Vriens und T. F. M. Bosen, *Differential cross sections for ionization of the hydrogen atom by fast charged particles in the binary-encounter theory and bethe theory*, J. Phys. B **1**, 1123 (1968).
- [271] L. Vriens und A. H. M. Smeets, *Cross-section and rate formulas for electron-impact ionization, excitation, deexcitation, and total depopulation of excited atoms*, Phys. Rev. A **22**, 940 (1980).
- [272] T. G. Walker und M. Saffman, *Consequences of Zeeman degeneracy for the van der Waals blockade between Rydberg atoms*, Phys. Rev. A **77**, 032723 (2008).
- [273] A. Walz-Flannigan, J. R. Guest, J.-H. Choi und G. Raithel, *Cold-Rydberg-gas dynamics*, Phys. Rev. A **69**, 063405 (2004).
- [274] H. Weimer, M. Müller, H. Büchler und I. Lesanovsky, *Digital quantum simulation with Rydberg atoms*, Quantum Inf. Process. **10**, 885 (2011).
- [275] H. Weimer, R. Löw, T. Pfau und H. P. Büchler, *Quantum Critical Behavior in Strongly Interacting Rydberg Gases*, Phys. Rev. Lett. **101**, 250601 (2008).
- [276] H. Weimer, M. Müller, I. Lesanovsky, P. Zoller und H. P. Büchler, *A Rydberg quantum simulator*, Nat Phys **6**, 382 (2010).
- [277] H. Weimer, N. Y. Yao, C. R. Laumann und M. D. Lukin, *Long-Range Quantum Gates using Dipolar Crystals*, Phys. Rev. Lett. **108**, 100501 (2012).

- [278] A. Wetzels, A. Gürtler, L. D. Noordam, F. Robicheaux, C. Dinu, H. G. Müller, M. J. J. Vrakking und W. J. van der Zande, *Rydberg State Ionization by Half-Cycle-Pulse Excitation: Strong Kicks Create Slow Electrons*, Phys. Rev. Lett. **89**, 273003 (2002).
- [279] E. Wigner, *On the Interaction of Electrons in Metals*, Phys. Rev. **46**, 1002 (1934).
- [280] D. J. Wineland, R. E. Drullinger und F. L. Walls, *Radiation-Pressure Cooling of Bound Resonant Absorbers*, Phys. Rev. Lett. **40**, 1639 (1978).
- [281] S. Wüster, C. Ates, A. Eisfeld und J. M. Rost, *Excitation transport through Rydberg dressing*, New J. Phys. **13**, 073044 (2011).
- [282] B. Xu und S. X. Hu, *Effects of electron-ion temperature equilibration on inertial confinement fusion implosions*, Phys. Rev. E **84**, 016408 (2011).
- [283] H. Yoshida, *Construction of higher order symplectic integrators*, Phys. Lett. A **150**, 262 (1990).
- [284] E. Zaremba, J. H. Rose, L. M. Sander und H. B. Shore, *Self-consistent screening of a proton in jellium*, J. Phys. F **7**, 1763 (1977).
- [285] X. Zhang und R. R. Jones, *Half-cycle pulse ionization of Ba<sup>+</sup> Rydberg ions*, Phys. Rev. A **73**, 035401 (2006).
- [286] X. L. Zhang, R. S. Fletcher und S. L. Rolston, *Observation of an Ultracold Plasma Instability*, Phys. Rev. Lett. **101**, 195002 (2008).
- [287] L. Zhao, W. W. Heidbrink, H. Boehmer, R. McWilliams, D. Leneman und S. Vincena, *Measurements of classical transport of fast ions*, Phys. Plasmas **12**, 052108 (2005).
- [288] G. Zwicknagel, *Molecular Dynamics Simulations of the Dynamics of Correlations and Relaxation in an OCP*, Contrib. Plasm. Phys. **39**, 155 (1999).
- [289] B. Zygelman, *Recombination of antiprotons with positrons at low temperatures*, J. Phys. B **36**, L31 (2003).
- [290] B. Zygelman, *Recombination and cascade of Rydberg antihydrogen*, J. Phys. B **38**, S387 (2005).

## Danksagung

Mein Dank gilt zunächst Prof. Jan-Michael Rost, in dessen Abteilung ich in den letzten Jahren stets die besten Voraussetzungen vorfand, um diese Arbeit anzufertigen.

Ganz besonders bedanke ich mich bei Thomas Pohl für die intensive und hervorragende Betreuung, den Enthusiasmus und die Energie bei der Lösung physikalischer Probleme, für die zahlreichen Anmerkungen und Hilfestellungen beim Schreiben dieser Arbeit und nicht zuletzt auch für die vielen ausgezeichneten Ratschläge am Kickertisch.

Ich danke Prof. Thomas C. Killian und Jose Castro für die interessanten Diskussionen und die intensive Zusammenarbeit auf dem Weg in das stark gekoppelte Regime.

Weiterhin danke ich Prof. Ulf Saalman, Jörg Götte und Alexander Eisfeld für hilfreiche Hinweise zur Verbesserung des Manuskripts.

Ich bedanke mich ebenfalls bei den „Vergangenen“ aus der Kaffeerunde: Cenap Ates, Alexander Croy, Christian Gnodtke, Jan Roden . . . sowie bei der ehemaligen und aktuellen Kickermannschaft: Fabio Cinti, Laura Gil, Nils Henkel, Alexander Kästner, Christian Köhler, Fabian Maucher, Sebastian Möbius, Rick Mukherjee, Rejish Nath, Gerhard Ritschel, Sevilay Sevinçli, Sebastian Wüster und allen anderen für die vielen erteilten Lektionen.

Mein größter Dank geht an Constanze für ihre stets geduldige und allumfassende Unterstützung.



## **Versicherung**

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die Arbeit wurde am Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme in der Abteilung „Endliche Systeme“ angefertigt und von Prof. Dr. Jan-Michael Rost betreut. Ich erkenne die Promotionsordnung der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden vom 23.02.2011 an.

---

Georg Bannasch

