

# Möglichkeiten und Grenzen einer 2D-Magneto-optischen Falle mit optischer Anregung zur Ultrapurenalyse seltener Kryptonisotope

Dissertation  
zur Erlangung des Doktorgrades  
an der Fakultät für Mathematik, Informatik und  
Naturwissenschaften  
Fachbereich Physik  
der Universität Hamburg

vorgelegt von  
CARSTEN SIEVEKE

Hamburg  
2021

Gutachter der Dissertation:	Prof. Dr. Klaus Sengstock Prof. Dr. Gerald Kirchner
Zusammensetzung der Prüfungskommission:	Prof. Dr. Klaus Sengstock Prof. Dr. Gerald Kirchner Prof. Dr. Robin Santra Prof. Dr. Caren Hagner Prof. Dr. Götz Neuneck
Vorsitzender der Prüfungskommission:	Prof. Dr. Robin Santra
Datum der Disputation:	01. September 2022
Vorsitzender Fach-Promotionsausschuss Physik:	Prof. Dr. Wolfgang Hansen
Leiter des Fachbereichs Physik:	Prof. Dr. Günter H. W. Sigl
Dekan der Fakultät MIN:	Prof. Dr. Heinrich Graener

## Eidesstattliche Versicherung / Declaration on oath

Hiermit versichere ich an Eides statt, die vorliegende Dissertationsschrift selbst verfasst und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel und Quellen benutzt zu haben.

Hamburg, den 07.12.2021

Unterschrift des Doktoranden

URN:  
urn:nbn:de:gbv:18-ediss-111635

# Zusammenfassung

Krypton-85 ist ein seltenes Radionuklid, das nahezu ausschließlich durch Kernspaltung entsteht und im Wesentlichen bei der nuklearen Wiederaufarbeitung in die Atmosphäre gelangt. Mit seiner relativ kurzen Halbwertszeit von 10,8 Jahren bildet es so einen idealen Tracer zum Nachweis verdeckter Separation von Plutonium, die auf völkerrechtlich oder vertraglich verbotene nukleare Aktivitäten hinweisen könnte. Darüber hinaus eröffnet der bekannte zeitliche Verlauf der atmosphärischen Konzentration von Kr-85 Anwendungen in den Umweltwissenschaften wie Grundwasserdatierung und die Verfolgung des Verlaufs von Grundwasserleitern.

Das Carl Friedrich von Weizsäcker-Zentrum für Naturwissenschaft und Friedensforschung (ZNF) der Universität Hamburg entwickelt ein System zur Konzentrationsmessung seltener Krypton-Isotope in Luftproben mittels Atom Trap Trace Analysis (ATTA). Im Gegensatz zu ähnlichen Projekten verfolgt das ZNF-System einen vollständig optischen Ansatz, der eine Kreuzkontamination der Proben vermeidet und auf einen höheren Probendurchsatz abzielt.

In dieser Arbeit wird der aktuelle ATTA-Aufbau, bestehend aus einer 2D/3D magnetooptischen Falle (MOT), hinsichtlich seines Potenzials für reale Messungen von Krypton-85 evaluiert. Dazu wurde ein mathematisches Modell für die Erzeugung metastabiler Kr-Atome und für den Einfangprozess entwickelt, einschließlich einer Monte-Carlo-Simulation zur Berechnung des resultierenden Atomflusses, der von der 2D-MOT unter verschiedenen Bedingungen produziert wird.



# Abstract

Krypton-85 is a rare radionuclide which is nearly exclusively produced by nuclear fission and released into the atmosphere mainly during nuclear reprocessing. With its relatively short half-life of 10,8 years it forms a suitable tracer for the detection of clandestine plutonium separation, which could indicate nuclear activities prohibited by international law or treaties. Furthermore, its well-known atmospheric concentration over the time opens up applications in environment sciences like groundwater dating and aquifer tracking.

The Carl Friedrich von Weizsäcker-Centre for Science and Peace Research (ZNF) at the University of Hamburg is developing a system for concentration measurement of rare Krypton isotopes in air samples using Atom Trap Trace Analysis technique (ATTA). In contrast to similar projects, the ZNF system employs a full-optical approach, avoiding sample cross-contamination and aiming at a higher sample throughput.

In this work, the current ATTA setup, consisting of a 2D/3D magneto-optical trap (MOT) combination, is evaluated with regard to its potential for real-life measurements of Krypton-85. For this purpose, a mathematical model for the production of metastable Kr-atoms and for the trapping process was developed, including a monte-carlo simulation for calculation of the resulting atom flux produced by the 2D-MOT under various conditions.





# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>13</b>
<b>2. Theorie der Magnetooptischen Falle</b>	<b>15</b>
2.1. Zwei-Niveau-System und Spontankraft . . . . .	15
2.2. Dopplerkühlung und optische Melasse . . . . .	18
2.3. Sättigung bei mehreren Lichtfeldern . . . . .	19
2.4. Zeeman-Effekt und MOT-Prinzip . . . . .	20
2.5. Dreidimensionale magnetooptische Falle . . . . .	24
2.6. Zweidimensionale magnetooptische Falle (2D-MOT) und 2D <sup>+</sup> -MOT	26
2.7. Verlustprozesse und Ladeverhalten . . . . .	27
2.8. Vergleichende Konzentrationsmessung von Isotopen . . . . .	28
<b>3. Die atomaren Eigenschaften von Krypton</b>	<b>31</b>
3.1. Metastabiler Zustand und Kühlübergang . . . . .	31
3.2. Anregungsübergänge . . . . .	32
3.3. Isotopenverschiebung und Hyperfeinstruktur . . . . .	33
3.3.1. Kühlübergang . . . . .	35
3.3.2. Anregungsübergänge . . . . .	35
3.4. Destruktive Übergänge („Quenching“) . . . . .	37
<b>4. Aufbau des ATTA-Systems am ZNF</b>	<b>41</b>
4.1. Überblick . . . . .	41
4.2. 3D-MOT . . . . .	41
4.3. 2D-MOT . . . . .	42
4.4. Optische Anregung . . . . .	43
4.5. Vakuumsystem . . . . .	43
4.6. Detektion . . . . .	47
4.6.1. Optik . . . . .	47
4.6.2. Sensoren . . . . .	48
4.7. Lasersystem . . . . .	52
4.7.1. 3D-Kühlstrahlen . . . . .	53

## Inhaltsverzeichnis

4.7.2.	2D-Kühlstrahlen . . . . .	54
4.7.3.	Push- und Bremsstrahlen . . . . .	54
4.7.4.	Rückpumper . . . . .	56
4.7.5.	819 nm-Anregung . . . . .	56
<b>5.</b>	<b>Effizienz des ATTA-Systems</b>	<b>57</b>
5.1.	Parameter und Messverfahren . . . . .	57
5.2.	Kalibrierung mit Ladekurve und Einzelatomdetektion . . . . .	59
5.2.1.	Ladekurve . . . . .	59
5.2.2.	Messung von Einzelatomen . . . . .	63
5.3.	Messungen mit Variation von Parametern . . . . .	65
5.3.1.	Variation der 819 nm-Anregungsleistung . . . . .	65
5.3.2.	Variation des Feldgradienten . . . . .	66
5.3.3.	Variation des 2D-MOT-Kammerdrucks . . . . .	66
5.4.	Bedeutung der Ergebnisse für das ATTA-Konzept . . . . .	69
<b>6.</b>	<b>Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik</b>	<b>71</b>
6.1.	Geometrie der Kammer . . . . .	72
6.2.	Abrasterung über Anregungszonen . . . . .	72
6.3.	Erzeugung der Testteilchen . . . . .	73
6.4.	Lichtfelder . . . . .	74
6.4.1.	Kühlstrahlen und 819 nm-Laser . . . . .	74
6.4.2.	VUV-Lampen . . . . .	76
6.5.	Berechnung der Trajektorien . . . . .	82
6.6.	Berechnung der Anregung . . . . .	83
6.7.	Datenspeicherung und Auswertung . . . . .	86
6.7.1.	Berechnung des metastabilen Kr-Flusses . . . . .	87
6.7.2.	Berechnung der Stoßverluste . . . . .	88
<b>7.</b>	<b>Ergebnisse der Simulation</b>	<b>91</b>
7.1.	Konfiguration mit 8 Lampen . . . . .	91
7.1.1.	Vergleich mit Messungen: Variation von 819 nm-Leistung, Magnetfeld und Druck . . . . .	91
7.1.2.	Strahlungsgleichgewicht der Kühlstrahlpaare . . . . .	97
7.1.3.	Optimierung des Systems . . . . .	106
7.1.4.	Optimiertes System mit Push- und Bremsstrahlen . . . . .	109
7.2.	Konfiguration mit zwei Lampen . . . . .	118
7.2.1.	Verteilung der Quellregionen . . . . .	118

7.2.2. Pushstrahl . . . . .	119
<b>8. Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>125</b>
<b>Literatur</b>	<b>129</b>
<b>A. Script für Monte-Carlo-Simulation</b>	<b>135</b>

## *Inhaltsverzeichnis*

# 1. Einleitung

Seit dem Test des ersten nuklearen Sprengkörpers im Jahr 1945 und den kurz darauffolgenden verheerenden Einsätzen von Kernwaffen gegen Japan hat sich die Anzahl Nuklearwaffen besitzender Staaten kontinuierlich erhöht. Zuletzt war es Nordkorea, das diese Fähigkeit in einer Reihe von Tests der Weltöffentlichkeit demonstriert hatte, und es herrscht Ungewissheit über die nuklearen Ambitionen des Iran.

Um die unkontrollierte Proliferation von Nuklearwaffen zu unterbinden, trat im Jahr 1970 der Vertrag über die Nichtweiterverbreitung von Kernwaffen (NVV) in Kraft, der in völkerrechtlich verbindlicher Form ein Regelwerk zur Eindämmung der weltweiten Nuklearrüstung beinhaltet. Das NVV-Zusatzprotokoll von 1997 erteilt der mit der Verifikation des Vertrags beauftragten Internationalen Atomenergie-Agentur (IAEA) umfangreiche Befugnisse zur Überwachung von Nukleareinrichtungen der Signatarstaaten, einschließlich angekündigter Inspektionen der Anlagen vor Ort.

Trotz dieser weitreichenden Kontrollmechanismen existiert bisher keine Möglichkeit, potenziell vertragsverletzende Aktivitäten in nicht bei der IAEA deklarierten Einrichtungen zu entdecken. Insbesondere die Abtrennung von Plutonium aus bestrahlten Brennelementen oder Uran-Targets kann prinzipiell in kleineren, als zivile Fabriken getarnten Wiederaufarbeitungsanlagen geschehen. Auch in deklarierten Einrichtungen kann eine im kleineren Maßstab durchgeführte Wiederaufarbeitung vor einer Inspektion relativ schnell heruntergefahren werden.

Für die Herstellung von Plutonium in größeren Mengen ist das derzeit einzige praktikable Verfahren die Bestrahlung von Uran-238 mit Neutronen, die in einem Kernreaktor erzeugt werden. Unabhängig davon, ob das Plutonium aus den Brennelementen selbst gewonnen werden soll oder separate U-238-Targets verwendet werden, induzieren die Neutronen auch Spaltungen von Urankernen oder von bereits erbrütetem Plutonium, so dass sich im Material Spaltprodukte anreichern. Eines der relativ häufigen Spaltprodukte ist das Kryptonisotop Kr-85. Als chemisch inertes Edelgas lässt sich Krypton mit Filteranlagen nur schwer zurückhalten und entweicht bei der Wiederaufarbeitung zwecks Pu-Separation in die Atmosphäre. Mit einer Halbwertszeit von 10,8 Jahren ist Kr-85 langlebig genug, um die Zerfalls-

## 1. Einleitung

verluste während der Abklingzeit zwischen Entnahme aus dem Reaktor und Wiederaufarbeitung gering zu halten. Gleichwohl zerfällt es ausreichend schnell, um den atmosphärischen Untergrund durch die Emissionen ziviler Anlagen im Laufe der Zeit nicht zu stark ansteigen zu lassen, so dass eine lokale Konzentrationserhöhung durch eine kleine Anlage sich noch signifikant vom Untergrund abhebt. Diese Eigenschaften machen Kr-85 zu einem geeigneten Indikator für die Aufdeckung nuklearer Wiederaufarbeitungsaktivitäten [WAM11].

Die atmosphärische Konzentration von Kr-85 beträgt zur Zeit etwa  $1,5 \text{ Bq/m}^3$  mit steigender Tendenz. Für eine Konzentrationsmessung nach konventioneller Methode per  $\beta$ -Zerfallszählung werden Luftproben mit Volumina in der Größenordnung von  $10 \text{ m}^3$  benötigt, was den Einsatz zu Verifikationszwecken nur eingeschränkt praktikabel macht.

Das laseroptische Verfahren der *Atom Trap Trace Analysis* (ATTA) bietet eine erheblich sensitivere Methode zur Messung von Konzentrationsverhältnissen seltener Isotope und erlaubt Probengrößen von nur wenigen  $\mu\text{l}$  Krypton, entsprechend dem Inhalt einer Luftprobe von wenigen Litern. Es existieren bereits mehrere ATTA-Projekte zur Ultrapurenanalyse von Krypton, die jedoch, bedingt durch die Erzeugung metastabiler Kr-Atome mittels Radiofrequenzanregung, nach jeder Messung eine zeitaufwändige Spülprozedur mit Xenon-Plasma erfordern, um Kreuzkontamination der Proben zwischen aufeinanderfolgenden Messungen auszuschließen [Jia+12].

Am Carl Friedrich von Weizsäcker-Zentrum für Naturwissenschaft und Friedensforschung der Universität Hamburg (ZNF) wurde ein rein optisch arbeitendes ATTA-System entwickelt, das diese Beschränkungen umgeht und damit einen höheren Probendurchsatz ermöglichen soll.

Das Experiment des ZNF konnte diese Erwartung bisher nicht erfüllen, da sich die Effizienz als um einige Größenordnungen zu niedrig erwies, um seltene Isotope in akzeptabler Messzeit nachweisen zu können. In dieser Arbeit wird das ATTA-System des ZNF evaluiert und mithilfe eines Monte-Carlo-Simulationsmodells analysiert, ob das Konzept eines ATTA-Systems mit einer Kombination aus einer zweidimensionalen und einer dreidimensionalen magnetooptischen Falle grundsätzlich das Potenzial für die Anwendung zur Kr-85-Spurenanalyse besitzt.

## 2. Theorie der Magnetooptischen Falle

Die Atom Trap Trace Analysis ist ein quantenoptisches Verfahren zur Bestimmung von äußerst geringen Konzentrationen seltener Isotope – insbesondere Isotope von Edelgasen – in einer Probe. Sie basiert auf dem isotopenselektiven Einfang einzelner Atome in einer magneto-optischen Falle (*magneto-optical trap*, MOT) und deren Nachweis mittels Detektion von Fluoreszenzphotonen. In den folgenden Abschnitten werden die theoretischen Grundlagen einer MOT und deren Eigenschaften diskutiert.

### 2.1. Zwei-Niveau-System und Spontankraft

Eine magnetooptische Falle nutzt den zeitlich gemittelten Impulsübertrag bei der zyklischen Absorption und spontaner Emission resonanter Photonen beim Übergang zwischen den Energieniveaus eines atomaren Zwei-Niveau-Systems zur Ausübung einer geschwindigkeits- und ortsabhängigen Kraft auf die zu manipulierenden Atome. Die Abhängigkeit der Kraft von Ort und Geschwindigkeit ist so gestaltet, dass sowohl eine Bremswirkung (Verschiebung der mittleren Geschwindigkeit hin zu niedrigeren Werten) als auch eine Kühlung (Reduktion der Breite der Geschwindigkeitsverteilung) und schließlich ein Einfang (Einschränkung im Ortsraum) stattfindet. Um die benötigten Photonen mit ausreichender Intensität, kleiner Bandbreite und definierter Polarisierung zu erzeugen, werden in der Regel schmalbandige Dioden- oder andere Festkörperlaser mit einer Bandbreite von wenigen 100 kHz verwendet.

Der Impulsübertrag eines Photons  $\hbar\vec{k}$  mit einer Energie von wenigen eV bewirkt bei Atomen mit großer Massenzahl nur eine kleine Änderung der Geschwindigkeit – im Fall von Kr-85 mit einer Photonenwellenlänge von 811 nm etwa  $1\text{ cm/s}$  –, so dass für eine signifikante Wirkung viele Absorptions-Emissions-Zyklen innerhalb kurzer Zeit durchlaufen werden müssen. Die beiden atomaren Zustände, zwischen denen der Übergang stattfindet, sollten daher im Idealfall keine weiteren Zerfalls-

## 2. Theorie der Magnetooptischen Falle

oder Anregungskanäle besitzen, die den Zyklus durch Übergang in einen nicht an die Kühlphotonen koppelnden „Dunkelzustand“ unterbrechen können. Ein solches reines Zwei-Niveau-System existiert in realen Atomen nicht, da die Erhaltung des Drehimpulses bei optischen Übergängen eine Aufspaltung mindestens eines der Niveaus in Unterniveaus mit verschiedenen  $m$ -Quantenzahlen bedingt. In vielen Fällen verhält sich ein Atom aber wie ein Quasi-Zwei-Niveau-System, in dem Dunkelzustände nicht oder nur selten besetzt werden, oder es kann mittels Einsatz eines oder mehrerer Rückpump Laser (vgl. Kap. 4.7.4) ein solches präpariert werden, bei dem der Übergang in Dunkelzustände stark unterdrückt oder innerhalb kurzer Zeit rückgängig gemacht wird.

Die Zeitentwicklung eines Zwei-Niveau-Systems mit der Übergangsenergie  $\Delta E = \hbar\omega_0 = hc/\lambda$  in einem monochromatischen, kohärenten Lichtfeld der Intensität  $I$  mit Kreisfrequenz  $\omega_L$  kann mittels eines semiklassischen Modells, in dem das Atom quantenmechanisch, die elektromagnetische Welle klassisch behandelt wird, durch die optischen Bloch-Gleichungen beschrieben werden [MV99, S. 25 ff.]. Die Lösung der Bloch-Gleichungen zeigt eine gedämpfte Oszillation der Populationen der beiden Zustände mit der sogenannten Rabi-Frequenz und konvergiert für  $t \rightarrow \infty$  gegen stationäre Werte. Die stationäre Lösung für die Besetzungswahrscheinlichkeit  $\rho_{ee}$  des angeregten Niveaus lautet

$$\rho_{ee} = \frac{s_0/2}{1 + s_0 + 4(\delta/\gamma)^2} \quad (2.1)$$

mit der natürlichen Linienbreite des Übergangs  $\gamma$ , der Verstimmung des Lasers gegenüber der Resonanzfrequenz  $\delta = \omega_L - \omega_0$  und  $s_0 = I/I_s$  als resonantem Sättigungsparameter.  $I_s$  bezeichnet die Sättigungsintensität

$$I_s = \frac{\pi hc\gamma}{3\lambda^3}. \quad (2.2)$$

Bei  $s_0 = 1$  bzw.  $I = I_s$  ist das obere Niveau mit einer Wahrscheinlichkeit von  $1/4$  besetzt. Mit weiter steigender Intensität konvergiert die Besetzung gegen den Grenzwert von  $1/2$  für  $I \gg I_s$ . Die Abhängigkeit von der Verstimmung  $\delta$  folgt bei  $s_0 \ll 1$  einem Lorentz-Profil mit der Halbwertsbreite  $\gamma$ . Mit steigender Intensität wird das Linienprofil flacher, wodurch die Halbwertsbreite gemäß

$$\gamma'(s_0) = \gamma\sqrt{1 + s_0} \quad (2.3)$$

wächst. Dieser Effekt wird als Leistungs- oder Sättigungsverbreiterung bezeichnet.



## 2.1. Zwei-Niveau-System und Spontankraft

Die natürliche Linienbreite  $\gamma$  steht in Relation zum Einstein-Koeffizienten der spontanen Emission  $A_{ki}$  des Übergangs und den Lebensdauern  $\tau_{k,i}$  der beteiligten Zustände. Im allgemeinen Fall eines Mehrniveau-Atoms gilt für ein Niveau  $k$

$$\frac{1}{\tau_k} = \sum_i A_{ki}, \quad (2.4)$$

wobei über alle möglichen Zerfallszweige  $i$  summiert wird. Die Linienbreite eines Übergangs zwischen zwei Niveaus  $k$  und  $i$  ist

$$\gamma = \frac{1}{\tau_k} + \frac{1}{\tau_i} \quad (2.5)$$

und die Rate der spontanen Zerfälle

$$R_{\text{sp}} = A_{ki} \cdot \rho_k. \quad (2.6)$$

Da in einem Zwei-Niveau-System per Definition nur ein einziger Zerfallskanal des oberen Zustands existiert und der untere Zustand stabil ist, reduzieren sich 2.4 und 2.5 in diesem Fall auf

$$\gamma = \frac{1}{\tau_k} = A_{ki}. \quad (2.7)$$

Die spontanen Zerfälle können als Streuung von Photonen aus der elektromagnetischen Welle betrachtet werden, und mit 2.1, 2.6 und 2.7 kann die spontane Streurrate

$$\Gamma = \gamma \rho_{ee} = \frac{\gamma}{2} \cdot \frac{s_0}{1 + s_0 + 4(\delta/\gamma)^2} \quad (2.8)$$

des Zwei-Niveau-Systems definiert werden.

Mit jedem Absorptionsprozess wird ein Impuls  $\hbar \vec{k}$  auf das Atom übertragen, wobei der Wellenvektor  $\vec{k}$  des Lasers im relevanten Bereich der Verstimmung als konstant mit  $|\vec{k}| = c/\omega_0$  betrachtet werden kann. Folgt auf die Absorption eines Photons eine aus demselben Strahl stimulierte Emission, sind die Impulsüberträge der beiden Photonen auf das Atom entgegengesetzt gerichtet und heben sich auf. Die Summe der Impulsüberträge von spontan emittierten Photonen ist im zeitlichen Mittel aufgrund der Isotropie der spontanen Emission ebenfalls Null. Die resultierende Kraft auf das Atom wird also ausschließlich durch die Impulse der absorbierten Photonen gebildet, denen eine spontane Emission folgt. Sie ist damit proportional zur spontanen Streurrate und wird als Spontankraft bezeichnet:

$$\vec{F}_{\text{sp}} = \hbar \vec{k} \Gamma = \frac{\hbar \vec{k} \gamma}{2} \cdot \frac{s_0}{1 + s_0 + 4(\delta/\gamma)^2} \quad (2.9)$$

## 2.2. Dopplerkühlung und optische Melasse

Die Spontankraft kann in zwei gegenläufigen, gegenüber der Resonanz des atomaren Übergangs rotverstimmten Strahlen ( $\delta < 0$ ) in Verbindung mit dem Dopplereffekt zur Erzeugung einer geschwindigkeitsproportionalen Bremskraft genutzt werden.

Betrachtet man zunächst nur einen einzelnen Strahl und ein Atom mit der Geschwindigkeit  $\vec{v}$  relativ zur Lichtquelle, wird die Spontankraft aufgrund der Dopplerverschiebung  $-\vec{k}\vec{v}$  von der Geschwindigkeit abhängig:

$$\vec{F}_{\text{sp}}(\vec{k}, \vec{v}) = \frac{\hbar\vec{k}\gamma}{2} \cdot \frac{s_0}{1 + s_0 + 4 \left[ (\delta - \vec{k}\vec{v})/\gamma \right]^2} \quad (2.10)$$

Befindet sich das Atom in einem Lichtfeld aus zwei auf derselben Strahlachse entgegengesetzt gerichteten Strahlen  $\vec{k}$  und  $-\vec{k}$  mit gleicher Sättigung und Verstimmung, kann die resultierende Kraft im Fall geringer Sättigung durch Addition der Einzelkräfte bestimmt werden:

$$\vec{F} = \vec{F}_{\text{sp}}(\vec{k}, \vec{v}) + \vec{F}_{\text{sp}}(-\vec{k}, \vec{v}) \quad (2.11)$$

Ist  $\delta < 0$ , d. h. das eingestrahelte Licht ist gegenüber dem Übergang rotverstimmt, wirkt die Kraft entgegen der Geschwindigkeitskomponente entlang der Strahlachse, und man erhält eine Bremswirkung und eine Kühlung in einer Raumdimension. Für kleine Geschwindigkeiten  $kv < \delta$  gilt näherungsweise

$$\frac{dF}{dv} = -8\hbar k^2 \frac{\delta}{\gamma} \cdot \frac{s_0}{\left[ 1 + s_0 + 4(\delta/\gamma)^2 \right]^2} \equiv -\beta, \quad (2.12)$$

und  $\vec{F}$  kann als eine geschwindigkeitsproportionale Reibungskraft

$$\vec{F} = -\beta\vec{v} \quad (2.13)$$

mit der Dämpfungskonstanten  $\beta$  beschrieben werden, analog zur Reibung in einer viskosen Flüssigkeit. Eine Anordnung zur Dopplerkühlung wird daher auch als optische Melasse („optischer Honig“) bezeichnet. Abbildung 2.1 zeigt die Bremskraft in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit bei verschiedenen Verstimmungen.

Die per Dopplerkühlung erreichbare minimale mittlere Geschwindigkeit wird durch die Heizwirkung der isotrop emittierten spontanen Photonen auf die Dopplergeschwindigkeit

$$v_D = \sqrt{\frac{\hbar\gamma}{2m}} \quad (2.14)$$

### 2.3. Sättigung bei mehreren Lichtfeldern

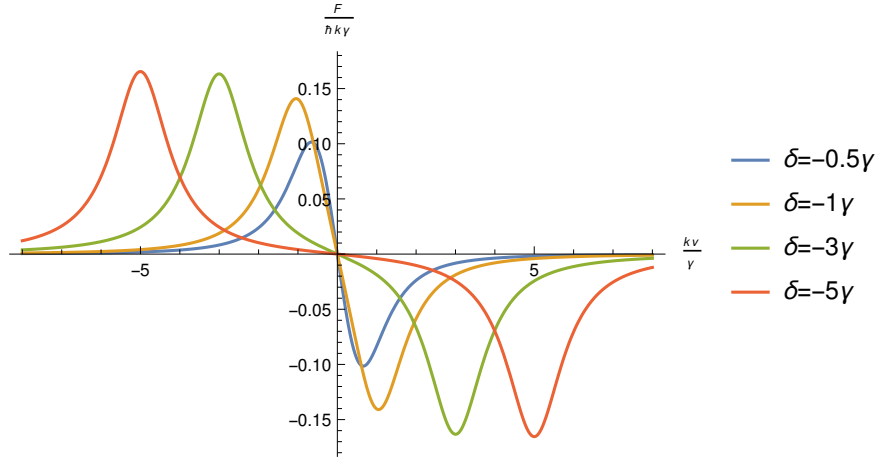


Abbildung 2.1.: Bremskraft in einer optischen Melasse in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit bei verschiedenen Verstimmungen  $\delta$  mit Sättigung  $s_0 = 1$

limitiert. Der entsprechenden mittleren kinetischen Energie lässt sich die damit korrespondierende Dopplertemperatur

$$T_D = \frac{\hbar\gamma}{2k_B} . \quad (2.15)$$

als untere Grenze der durch Dopplerkühlung erreichbaren Temperatur zuordnen.

### 2.3. Sättigung bei mehreren Lichtfeldern

Die einfache Addition der Einzelkräfte mehrerer Kühlstrahlen bildet eine gute Näherung für den Fall geringer Sättigung und dient in der Literatur – so z. B. in [MV99, Kap. 7.2] – vielfach als Basis zur Beschreibung der Dopplerkühlung und von darauf aufbauenden Techniken wie der magnetooptischen Falle. In der Praxis wird jedoch oft im Bereich höherer Sättigung gearbeitet, wo die stimulierten Emissionsprozesse an Einfluss gewinnen. Die Streukräfte der Einzelstrahlen können dann nicht mehr als unabhängig voneinander betrachtet werden, da alle Strahlen zur Sättigung des Übergangs beitragen und auch Wechselwirkungen zwischen den Strahlen stattfinden wie z. B. Absorption aus Strahl 1 gefolgt von stimulierter Emission durch Strahl 2. Die resultierende Kraft kann dann nicht mehr durch einfache Superposition berechnet werden. Für eine vollständige Behandlung dieser Effekte wäre die Lösung der optischen Bloch-Gleichungen mit den überlagerten Feldern

## 2. Theorie der Magnetooptischen Falle

aller Strahlen erforderlich, was einen erheblichen zusätzlichen Rechenaufwand zur Folge hätte und für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen nicht praktikabel wäre.

In der Literatur (z. B. [AR97]) wird diesem Problem oft begegnet, indem der resonante Sättigungsterm  $s_0$  im Nenner von (2.10) bei  $N$  Strahlen durch  $N \cdot s_0$  ersetzt wird. Damit wird jedoch der Einfluss auf die Sättigung überschätzt, da im Allgemeinen nicht alle Strahlen in Resonanz sind, so dass diese Lösung nicht zufriedenstellend erscheint. Daher wird in dieser Arbeit eine in [Woh+01] beschriebene Näherung verwendet, bei der jedem Einzelstrahl ein partieller nichtresonanter Sättigungsparameter zugeordnet wird.

Gleichung (2.10) der Spontankraft eines einzelnen Strahls lässt sich umformen zu

$$\vec{F} = \frac{\hbar \vec{k} \gamma}{2} \cdot \frac{s(\vec{v})}{1 + s(\vec{v})} \quad (2.16)$$

mit dem nichtresonanten Sättigungsparameter

$$s(\vec{v}) = s_0 \cdot \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + 4(\delta - \vec{k} \vec{v})^2} \quad (2.17)$$

Bei mehreren Strahlen ergibt sich die resultierende Kraft durch Summierung über die Sättigungsparameter im Nenner und über die Einzelkräfte:

$$\vec{F} = \sum_i \frac{\hbar \vec{k}_i \gamma}{2} \cdot \frac{s_i(\vec{v})}{1 + \sum_j s_j(\vec{v})} \quad (2.18)$$

Mit dieser Methode tragen alle Strahlen abhängig von ihren aktuellen Resonanzbedingungen zur Sättigung des Übergangs bei und die berechnete Streukraft dürfte näher am realen Wert liegen. Es handelt sich aber nach wie vor um eine Näherung, die einige Effekte wie z. B. Wechselwirkungen zwischen den Strahlen außer Acht lässt.

## 2.4. Zeeman-Effekt und MOT-Prinzip

Mittels einer optischen Melasse ist es möglich, Atome auf Temperaturen in der Größenordnung von 0,1 mK zu kühlen. Ein Einfang findet jedoch nicht statt, da der Ort, an dem die minimale Geschwindigkeit erreicht wird, von der Anfangsgeschwindigkeit abhängt und ein Driften aus dem Kühlbereich nicht verhindert wird. Zudem nimmt die Effizienz der Kühlung – wie in Abbildung 2.1 zu erkennen –

außerhalb eines relativ schmalen Geschwindigkeitsbereichs  $|kv| \approx |\delta \pm \gamma|$  deutlich ab. Um eine ausreichend starke und weitgehend konstante Bremskraft zu erhalten, muss das Licht während des Bremsvorgangs ständig im Bereich der Resonanz des Übergangs gehalten werden. Dies ist z. B. durch eine sägezahnförmige Modulation der Verstimmung möglich („Chirp-Cooling“), hat aber den Nachteil einer geringen Effizienz und ermöglicht keine kontinuierliche Kühlung. Unter Ausnutzung des Zeeman-Effekts kann durch ein externes Magnetfeld sowohl eine kontinuierliche Anpassung der Resonanzfrequenz des Übergangs an die veränderliche Dopplerverschiebung während des Abbremsvorgangs als auch eine ortsabhängige Kraft für den Einfang etabliert werden.

Ein Magnetfeld  $\vec{B}$  bewirkt die Aufhebung der Entartung der atomaren Zustände bezüglich der Richtungsquantelung des Drehimpulses. Im allgemeinen Fall eines Atoms mit Hyperfeinstruktur (Kernspin  $I \neq 0$ ) erfolgt die Aufspaltung eines Zustands mit Gesamtdrehimpuls  $F$  in  $2F + 1$  äquidistante Unterniveaus im Abstand

$$\Delta E = \mu_B g_F m_F B \quad (2.19)$$

mit dem Bohrschen Magneton  $\mu_B$ , dem Landé-Faktor  $g_F$  des Zustands und der magnetischen Quantenzahl  $m_F$ , die Werte im Bereich  $[-F, F]$  annehmen kann. Die Übergangsenergie zwischen zwei Zuständen  $\langle F_1, m_{F1} \rangle$  und  $\langle F_2, m_{F2} \rangle$  ist demnach um

$$\Delta E_{12} = (g_{F2} m_{F2} - g_{F1} m_{F1}) \mu_B B \quad (2.20)$$

gegenüber dem feldfreien System verschoben. Setzt man für einen gegebenen Übergang  $\mu' = (g_{F2} m_{F2} - g_{F1} m_{F1}) \mu_B / \hbar$ , lässt sich die Verschiebung der Resonanzfrequenz des Übergangs schreiben als:

$$\Delta \omega_{12} = \mu' B \quad (2.21)$$

Für Atome mit  $I = 0$  wird die Zeeman-Aufspaltung analog aus den entsprechenden Werten des Drehimpulses der Hülle  $J$ ,  $m_J$  und  $g_J$  berechnet.

Da  $m$  die Projektion des Drehimpulses auf die Bezugsachse darstellt, gelten für Dipolübergänge zwischen Zeeman-aufgespaltenen Niveaus orientierungsabhängige Auswahlregeln für die Polarisation, um den Erhaltungssatz des Drehimpulses unter Einbeziehung des Photonenspins von  $\pm 1$  nicht zu verletzen. Im Bezugssystem des Atoms (Quantisierungsachse liegt in Richtung des Magnetfelds  $\vec{B}$ ) koppeln Übergänge mit  $\Delta m = \pm 1$  an  $\sigma^\pm$ -Polarisation und mit  $\Delta m = 0$  an  $\pi$ -Polarisation. Bei parallel zum Feld einfallendem Licht entspricht dies rechts- bzw. linkszirkular polarisiertem Licht mit Photonenspin  $\pm 1$  für  $\Delta m = \pm 1$ , während der  $\pi$ -Übergang in

## 2. Theorie der Magnetooptischen Falle

$\Delta m$	Typ	Polarisation bei $\vec{k} \parallel \vec{B}$	Polarisation bei $\vec{k} \perp \vec{B}$
+1	$\sigma^+$	rechtszirkular	linear $\perp \vec{B}$
0	$\pi$		linear $\parallel \vec{B}$
-1	$\sigma^-$	linkszirkular	linear $\perp \vec{B}$

Tabelle 2.1.: Orientierungsabhängige Kopplung von polarisiertem Licht an ein Atom im Magnetfeld

dieser Richtung nicht wechselwirkt. Transversal zum Feld ist bei Emissionsprozessen eine lineare Polarisation mit einer von  $\Delta m$  abhängigen Orientierung relativ zu  $\vec{B}$  zu beobachten. Absorption findet jedoch auch bei zirkularer Polarisation statt, da linear polarisiertes Licht eine Superposition der beiden zirkularen Zustände darstellt. Tabelle 2.1 gibt einen Überblick über die Kopplung verschieden orientierter und polarisierter Lichtfelder an ein Atom im Magnetfeld.

Die Polarisationsselektivität des Zeeman-Effekts wird in einer magnetooptischen Falle ausgenutzt, um die benötigte Rückstellkraft zu erzeugen. Im eindimensionalen Modell beträgt die Spontankraft auf ein Zwei-Niveau-System in einem ortsabhängigen Magnetfeld  $B(x)$  mit zirkularer polarisiertem Licht

$$\vec{F}^{\sigma\pm} = \frac{\hbar\vec{k}\gamma}{2} \cdot \frac{s_0}{1 + s_0 + 4 \left[ \left( \delta - \vec{k}\vec{v} \pm \mu' B(x) \right) / \gamma \right]^2}. \quad (2.22)$$

Abhängig von der Polarisation koppelt das Licht entweder an den energetisch angehobenen ( $\Delta m = +1$ ) oder abgesenkten ( $\Delta m = -1$ ) Übergang, woraus sich die verschiedenen Vorzeichen des Zeeman-Terms ergeben.

Bei zwei gegenläufigen, entgegengesetzt zirkular polarisierten Strahlen kann die Kraft – zunächst wieder in der Näherung für geringe Sättigung – analog zur Melasse durch Überlagerung der Einzelkräfte berechnet werden. Unter Annahme eines in der Umgebung von  $x = 0$  konstanten Feldgradienten  $B' = dB/dx$  lautet die resultierende Kraft

$$\vec{F} = \frac{\hbar\vec{k}\gamma}{2} \cdot \left[ \frac{s_0}{1 + s_0 + 4 \left( \frac{\delta - \vec{k}\vec{v} + \mu' B' x}{\gamma} \right)^2} - \frac{s_0}{1 + s_0 + 4 \left( \frac{\delta + \vec{k}\vec{v} - \mu' B' x}{\gamma} \right)^2} \right]. \quad (2.23)$$

Der in positiver  $x$ -Richtung propagierende Strahl koppelt an den  $\sigma^+$ -Übergang, dessen Energie in negativer  $x$ -Richtung abfällt. Beim entgegengesetzt gerichteten

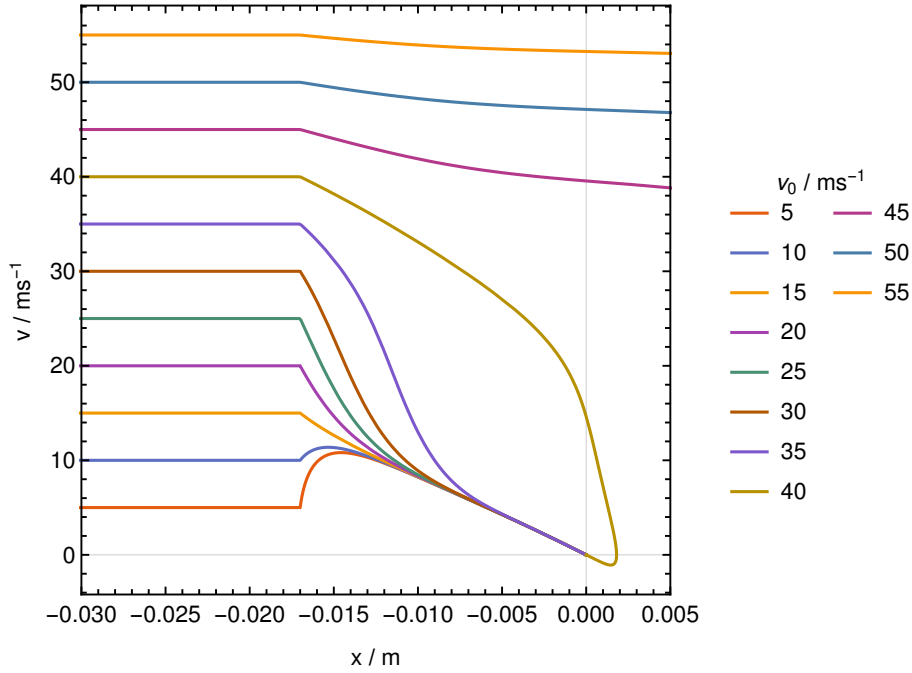


Abbildung 2.2.: Einfangtrajektorien einer eindimensionalen MOT in Phasenraumdarstellung bei verschiedenen Anfangsgeschwindigkeiten

Strahl verhält es sich umgekehrt. Bei einer Verstimmung  $\delta < 0$  ist ein langsames Atom immer näher an der Resonanz mit dem Strahl, der Kraft in Richtung des Fallenzentrums ausübt. Ein schnelles Atom, das sich auf die Falle zubewegt, erfährt bei der Annäherung eine kontinuierlich kleiner werdende effektive Verstimmung, so dass es über einen größeren Geschwindigkeitsbereich resonant bleibt als bei einer reinen Melasse. Auf diese Weise können Atome wirksam abgebremst, gefangen und gehalten werden. In Abbildung 2.2 wird der Einfangvorgang in einer eindimensionalen MOT bei verschiedenen Geschwindigkeiten anhand von Phasenraumtrajektorien illustriert.

Für kleine Geschwindigkeiten und geringe Entfernungen vom Fallenzentrum kann die Kraft linearisiert werden mit

$$\frac{dF}{dx} = -8\hbar k \mu' B' \frac{\delta}{\gamma} \cdot \frac{s_0}{[1 + s_0 + 4(\delta/\gamma)^2]^2} \equiv -\kappa, \quad (2.24)$$

und zusammen mit Gl. 2.13 erhält man die Beziehung

$$\vec{F} = -\beta\vec{v} - \kappa\vec{x}, \quad (2.25)$$

## 2. Theorie der Magnetooptischen Falle

die der Kraft in einem klassischen harmonischen Oszillator mit Federkonstante  $\kappa$  und linearer Dämpfung  $\beta$  entspricht. Unter der Annahme, dass die mittlere Geschwindigkeit der gefangenen Atome die Dopplergeschwindigkeit ist, ergibt sich aus der Äquivalenz von mittlerer potentieller und mittlerer kinetischer Energie des Oszillators die mittlere Amplitude

$$\bar{x} = v_D \sqrt{\frac{m}{\kappa}} = \sqrt{\frac{\hbar \gamma}{2\kappa}}, \quad (2.26)$$

die ein Maß für die räumliche Ausdehnung der Verteilung der gefangenen Atome darstellt.

## 2.5. Dreidimensionale magnetooptische Falle

Für eine magnetooptische Falle in drei Raumdimensionen werden drei orthogonale Strahlenpaare mit  $\sigma^\pm$ -Polarisation mit einem sphärischen Quadrupol-Magnetfeld kombiniert, das in allen Raumrichtungen im Zentralbereich einen betragsmäßig annähernd konstanten Gradienten besitzt. Meist wird zur Erzeugung des Feldes ein Anti-Helmholtz-Spulenpaar verwendet. Die magnetische Flussdichte im der Umgebung des Zentrums lässt sich in linearer Näherung durch

$$\vec{B} = B' \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ -2z \end{pmatrix} = B' \cdot \vec{r} \quad (2.27)$$

ausdrücken. In Richtung der Symmetrieachse der Spulen  $z$  ist der Gradient doppelt so groß wie in der Normalenebene und besitzt ein entgegengesetztes Vorzeichen. Die Helizität des Strahlenpaares auf der  $z$ -Achse muss daher ebenfalls entgegengesetzt zu den beiden anderen Strahlenpaaren sein. Flussdichte und Gradient des Feldes sind proportional zum Spulenstrom.

Für die Berechnung der Kräfte in einer MOT wird hier ebenfalls die oben beschriebene Methode der partiellen Sättigungen verwendet. Unter Einbeziehung des Zeeman-Effekts mit einem Magnetfeld parallel zu  $\vec{k}$  wird Gleichung (2.17) zu:

$$s^{\sigma^\pm}(\vec{r}, \vec{v}) = s_0 \cdot \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + 4 \left( \delta - \vec{k} \cdot \vec{v} \pm \mu' B(\vec{r}) \right)^2} \quad (2.28)$$

Wegen  $\vec{B} \parallel \vec{k}$  treten hier nur die beiden möglichen  $\sigma$ -Polarisationszustände mit unterschiedlichen Vorzeichen des Zeeman-Terms auf.



## 2.5. Dreidimensionale magnetooptische Falle

Im Fall eines beliebig orientierten Magnetfelds müssen die Polarisation relativ zum Feld und die Kopplung des Lichts an die Übergänge mit verschiedenen  $\Delta m$  berücksichtigt werden, und man erhält je Strahl drei Sättigungsparameter für  $\Delta m = -1, 0, 1$ :

$$s_{\Delta m}(\vec{r}, \vec{v}) = s_{0, \Delta m} \cdot \frac{\gamma^2}{\gamma^2 + 4 \left( \delta - \vec{k}\vec{v} + \Delta m \mu' B(\vec{r}) \right)^2} \quad (2.29)$$

Die  $s_{0, \Delta m} = I_{\Delta m} / I_S$  beinhalten die unterschiedlichen Polarisationsanteile des Lichts bezogen auf die Richtung des Magnetfelds. Die Berechnung der resultierenden Kraft mehrerer Strahlen erfolgt wie in (2.18), jedoch wird auch über die  $\Delta m$  summiert:

$$\vec{F} = \sum_i \frac{\hbar \vec{k}_i \gamma}{2} \cdot \frac{\sum_{\Delta m} s_{i, \Delta m}(\vec{v})}{1 + \sum_{j, \Delta m} s_{j, \Delta m}(\vec{v})} \quad (2.30)$$

### Maximale Einfanggeschwindigkeit

Der Einfang eines Teilchens beginnt in dem Moment, an dem es erstmalig in Resonanz mit dem seiner Bewegungsrichtung entgegenlaufenden Strahl tritt. Dies ist der Fall, wenn

$$\delta - \vec{k}\vec{v} + \mu' B' x = 0. \quad (2.31)$$

Die maximale Einfanggeschwindigkeit beträgt demnach

$$v_c = \frac{\delta + \mu' B' x_{max}}{k}, \quad (2.32)$$

wobei für  $x_{max}$  der Radius der Kühlstrahlen einzusetzen ist. Dies gilt allerdings nur unter der Voraussetzung, dass die Verzögerungsstrecke – in diesem Fall  $x_{max}$  – lang genug ist, um das Atom mit der erreichbaren Spontankraft auf  $v = 0$  abzubremesen. Unter der Annahme, dass sich das Atom während des gesamten Bremsvorgangs nahe der Resonanz mit dem entgegenlaufenden Strahl befindet und der maximalen Streurate unterliegt, führt dies zu der Bedingung

$$v_c \leq \sqrt{x_{max} \cdot \frac{\hbar k \gamma}{2m} \cdot \frac{s_0}{1 + s_0}} \quad (2.33)$$

als obere Grenze der Einfanggeschwindigkeit, unabhängig von Verstimmung und Magnetfeld.

## 2.6. Zweidimensionale magnetooptische Falle (2D-MOT) und 2D<sup>+</sup>-MOT

Eine Variante der MOT in zwei Raumdimensionen lässt sich durch Überlagerung der Felder zweier um 90° gegeneinander gedrehter und von Strom in entgegengesetzter Richtung durchflossener Spulenpaare erzeugen. Auf der Symmetrieachse ( $z$ -Achse) neutralisieren sich die Felder der Spulenpaare, so dass in  $z$ -Richtung kein Feldgradient auftritt. Es entsteht ein zylindrisches Quadrupolfeld, das in Kombination mit zwei Laserstrahlpaaren in der  $(x, y)$ -Ebene eine Kühlung in zwei Raumdimensionen und eine Konzentration der Atome auf der  $z$ -Achse bewirkt. Da in  $z$ -Richtung keine Kräfte auf die gefangenen Atome wirken, bilden sie einen Atomstrahl mit ihrer ursprünglichen Geschwindigkeitsverteilung auf der  $z$ -Achse – sowohl in positiver als auch in negativer Richtung. Atome mit einer zu großen  $z$ -Geschwindigkeitskomponente können aufgrund ihrer entsprechend kurzen Verweildauer in den Kühlstrahlen nicht gefangen und in der Strahl überführt werden. Eine 2D-MOT stellt daher eine Quelle für langsame, hochkollimierte Atome dar.

Um einerseits den  $z$ -Geschwindigkeitsbereich der einfangbaren Atome zu vergrößern und andererseits den Atomstrahl in eine Richtung zu konzentrieren, kann eine 2D-MOT durch Hinzufügen zweier gegenläufiger Laserstrahlen auf der  $z$ -Achse zu einer 2D<sup>+</sup>-MOT erweitert werden. Die beiden zusätzlichen Strahlen bilden dann eine eindimensionale Melasse in  $z$ -Richtung. Der Strahl, der in die gewünschte Richtung des Atomstrahls propagiert, wird als Pushstrahl, der entgegengesetzte als Retarder- oder Bremsstrahl bezeichnet. Durch unterschiedliche Verstimmungen oder Intensitäten ist die Konfiguration einer „sich bewegenden“ Melasse möglich, in der die Atome kräftefrei sind, wenn sie sich mit einer bestimmten Geschwindigkeit in die gewünschte Richtung bewegen.

Der Bremsstrahl wird üblicherweise durch einen Spiegel in den Atomstrahl hinein reflektiert, der in der Mitte mit einer kleinen Bohrung versehen ist, durch die die Atome die MOT verlassen. Die Bohrung sorgt gleichzeitig dafür, dass der Bremsstrahl nahe der Achse abgeschattet wird, so dass bereits gefangene Atome durch den Pushstrahl in Richtung des Ausgangs beschleunigt werden. Eine 2D<sup>+</sup>-MOT kann den erreichbaren Atomfluss im Vergleich zur reinen 2D-MOT um etwa eine Größenordnung erhöhen [Die+98].

## 2.7. Verlustprozesse und Ladeverhalten

Die mittlere Aufenthaltsdauer eines in einer MOT gefangenen Atoms wird durch die Häufigkeit von Stößen mit Teilchen des in der Kammer vorhandenen Hintergrundgases und von „kalten“ Stößen zwischen gefangenen Atomen bestimmt. Die Wahrscheinlichkeit für Stöße mit Restgasteilchen ist proportional zur Teilchenzahl in der MOT, während die kalten Kollisionen proportional zum Quadrat der Dichte der gefangenen Atome sind. Solange die Dichte klein genug ist, dass die Strahlungsfelder nicht wesentlich durch Streuung an den gefangenen Atomen beeinflusst werden, bleibt das MOT-Volumen nach Gl. (2.26) unabhängig von der Teilchenzahl konstant. Unter Annahme einer konstanten Laderate  $L$  kann die Zeitentwicklung der Teilchenzahl  $N$  innerhalb dieses Regimes konstanten Volumens durch die folgende Differentialgleichung beschrieben werden [Che+10]:

$$\frac{dN}{dt} = L - aN - bN^2 \quad (2.34)$$

Der lineare Verlustkoeffizient  $a$  setzt sich aus der Dichte  $n_b$  und der mittleren Geschwindigkeit  $\bar{v}_b$  des Hintergrundgases sowie dem Stoßwirkungsquerschnitt  $\sigma$  zusammen:

$$a = \sigma \cdot n_b \cdot \bar{v}_b \quad (2.35)$$

Der quadratische Verlustparameter  $b$  wird durch den Stoßquerschnitt, die mittlere Geschwindigkeit der gefangenen Atome  $\bar{v}_{mot}$  und das MOT-Volumen  $V$  definiert:

$$b = \frac{\sigma \cdot \sqrt{2} \cdot \bar{v}_{mot}}{V} \quad (2.36)$$

Der Faktor  $\sqrt{2}$  entsteht durch die Berechnung der hier maßgeblichen mittleren Differenzgeschwindigkeit, wenn sich die Stoßpartner mit gleicher mittlerer Geschwindigkeit in beliebige Richtungen bewegen. In (2.35) dagegen ist  $\bar{v}_b$  sehr viel größer als die Geschwindigkeit der gefangenen Atome, so dass die Differenzgeschwindigkeit mit  $\bar{v}_b$  gleichgesetzt werden kann.

Die Lösung von (2.34) mit der Anfangsbedingung  $N(0) = 0$  lautet

$$N(t) = 2L \cdot \frac{1 - e^{-st}}{a \cdot (1 - e^{-st}) + s \cdot (1 + e^{-st})} \quad (2.37)$$

mit

$$s = \sqrt{a^2 + 4bL}. \quad (2.38)$$

## 2. Theorie der Magnetooptischen Falle

Im stationären Zustand bei  $t \rightarrow \infty$  lässt sich die Laderate aus der Anzahl gefangener Atome durch

$$L = aN + bN^2 \quad (2.39)$$

bestimmen.

Bei großen Teilchenzahlen werden die obigen Beziehungen zunehmend ungenauer. Die Photonenstreuung in den äußeren Bereichen der MOT sorgt mit zunehmender Teilchendichte für eine Abnahme der Lichtintensität im Zentrum, wodurch sich die Rückstellkraft verringert und das Volumen der MOT wächst. Zusätzlich wirken gestreute und von anderen gefangenen Atomen reabsorbierte Photonen repulsiv und limitieren die Dichte der MOT. Die Dichte konvergiert dann gegen einen Maximalwert, während das Volumen bei zunehmender Teilchenzahl wächst. Auch die Fluoreszenz steigt aufgrund der verringerten Lichtintensität im inneren Bereich nicht mehr linear mit der Atomzahl. Letztlich ergibt sich ein komplexer, nur bei genauer Kenntnis der Dichteverteilung in der MOT berechenbarer Zusammenhang zwischen messbarer Fluoreszenz, Atomzahl und Laderate.

## 2.8. Vergleichende Konzentrationsmessung von Isotopen

Die eigentliche Bestimmung der Konzentration eines Isotops in der Probe erfolgt durch Detektion der Fluoreszenz der gefangenen Atome und Vergleich der MOT-Laderate der gesuchten Spezies mit der Laderate eines Isotops, dessen Konzentration in der Probe bekannt und probenübergreifend konstant ist. Da die Laderaten  $L_i$  proportional zu den Konzentrationen  $K_i$  sind, gilt für eine unbekannte Konzentration  $K_1$

$$K_1 = K_2 \cdot \frac{L_1}{L_2} \cdot \frac{c_2}{c_1}. \quad (2.40)$$

Die Faktoren  $c_i$  repräsentieren die – bedingt durch die unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften etwas verschiedenen – Anregungs- und Einfangeffizienzen der beiden Isotope. In der Praxis müssen die Effizienzen nicht explizit bekannt sein; stattdessen wird der Quotient  $c_2/c_1$  durch einen Kalibrierfaktor ersetzt, der durch Messungen an einer Probe mit bekanntem Isotopenverhältnis bestimmt wird.

Bei seltenen Isotopen ist die Laderate klein genug, dass sich in der Regel nur wenige Atome gleichzeitig in der MOT befinden und durch die beim Einfang und Verlassen der MOT auftretenden Sprünge in der Fluoreszenz direkt identifiziert werden können. Der im vorherigen Abschnitt beschriebene nichtlineare und von teilweise volatilen Parametern wie dem MOT-Volumen abhängige Zusammenhang

## 2.8. Vergleichende Konzentrationsmessung von Isotopen

zwischen Laderate und Fluoreszenz bei einer Vielatom-MOT entfällt damit, und die Bestimmung der Laderaten reduziert sich auf das Zählen der Einfangereignisse über einen definierten Zeitraum.

Für Kr-85 kommt als Referenzisotop insbesondere das langlebige Kr-81 mit einer Halbwertszeit von 229 000 Jahren in Frage. Kr-81 entsteht nahezu ausschließlich durch Reaktionen anderer Kr-Isotope mit Partikeln der kosmischen Strahlung. In Verbindung mit der langen Lebensdauer führt dies zu einer räumlich und zeitlich homogenen Verteilung in der Atmosphäre mit einer relativen Häufigkeit von  $5,2 \pm 0,6 \cdot 10^{-13}$  [IAE13]. Das atmosphärische Konzentrationsverhältnis  $^{85}\text{Kr}/^{81}\text{Kr}$  beträgt ca. 46 und erlaubt den Einfang beider Isotope im Einzelatom-Regime der MOT.

Die statistische Genauigkeit der Messung wird dabei durch die absolute Anzahl  $Z_i$  der im Messzeitraum gezählten Atome bestimmt, wobei die Streuung der Zählraten einer Poisson-Statistik folgt mit

$$\Delta Z_i = \sqrt{Z_i}. \quad (2.41)$$

Der relative statistische Fehler der gemessenen unbekanntes Konzentration  $K_1$  beträgt damit (bei Kalibrierfaktoren  $c_1 \simeq c_2$ )

$$\frac{\Delta K_1}{K_1} = \frac{\Delta Z_1}{K_1} \cdot \frac{\partial K_1}{\partial Z_1} + \frac{\Delta Z_2}{K_1} \cdot \frac{\partial K_1}{\partial Z_2} \quad (2.42)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{Z_1}} + \frac{1}{\sqrt{Z_2}}. \quad (2.43)$$

Für eine statistische Genauigkeit von 10 % müssen im Messzeitraum ca. 6 000 Kr-85 und 130 Kr-81 gefangen werden. Bei einer angestrebten Messzeit von maximal 6 Stunden entspricht dies einer Kr-85-Laderate von etwa  $0,3 \text{ s}^{-1}$ . Übertragen auf das häufigste Isotop Kr-84, das bisher für die meisten charakterisierenden Messungen am Experiment verwendet wurde, muss die Anlage in der Lage sein, eine Laderate von ca.  $5 \cdot 10^9$  Kr-84/s zu erzeugen.

Um eine kürzere Messzeit zu erreichen oder die Anforderungen an die Laderate zu senken, kann auch ein häufigeres Isotop als Referenz verwendet werden. Hierfür ist das stabile Kr-83 mit einer relativen Häufigkeit von 11,5 % und einem identischen Kernspin wie Kr-85 besonders geeignet. Die Laderate liegt dabei zwar um Größenordnungen höher als durch Einzelatomzählung erfasst werden kann, jedoch können die oben beschriebenen Einschränkungen bei der Bestimmung der Laderate einer Vielatom-MOT durch gezieltes Abregen der gefangenen Atome beim Einfang („Quenching“, vgl. Kapitel 3.4) und Detektion der dabei emittierten Photonen umgangen werden [Jia+12]. Die Quenchphotonen können unabhängig von

## 2. Theorie der Magnetooptischen Falle

der Dichte durch die gefangenen Atome nicht absorbiert werden, und ihre Emissionsrate ist identisch mit der Laderate. Die statistische Genauigkeit wird bei dieser Methode durch die Kr-85-Zählrate dominiert, und für eine 10%-Toleranz werden nur noch 100 Kr-85-Atome benötigt. Die geforderte äquivalente Kr-84-Laderate für eine Messzeit von einigen Stunden reduziert sich so auf nur noch  $10^8$  Atome/s.

# 3. Die atomaren Eigenschaften von Krypton

Als Edelgas besitzt Krypton im Grundzustand eine voll besetzte äußere Schale mit der Konfiguration  $4p^6 \ ^1S_0$ . In einfach angeregten Zuständen ist das Außenelektron relativ schwach an das Rumpfatom gebunden, vergleichbar mit dem Leuchtelektron in Alkalimetallen. Innerhalb des Rumpfatoms (hier indiziert mit 1) herrscht LS-Kopplung der Drehimpulse zum Drehimpuls des Rumpfes  $\vec{J}_1 = \vec{L}_1 + \vec{S}_1$ . Der Bahndrehimpuls des angeregten Elektrons (Index 2) koppelt mit  $\vec{J}_1$  zu  $\vec{K} = \vec{J}_1 + \vec{L}_2$ , und mit dem Spin ergibt sich schließlich der Gesamtdrehimpuls  $\vec{J} = \vec{K} + \vec{S}_2$ . Dieses Kopplungsschema des Außenelektrons an den Rumpf wird daher als  $J_1L_2$ -Kopplung bezeichnet.

Eine zweckmäßige Form der Bezeichnung einfach angeregter Zustände bei kombinierter LS- und  $J_1L_2$ -Kopplung ist die *Racah*-Notation nach dem Schema

$$\left( {}^{2S_1+1}L_{1J_1} \right) nl [K]_J \tag{3.1}$$

mit der Hauptquantenzahl  $n$  und Bahndrehimpulsquantenzahl  $l = L_2$  des angeregten Elektrons. Lässt man Anregungen aus inneren Schalen außer Acht, hat das Rumpfatom stets die Konfiguration  $4p^5$  und kann nur die Zustände  ${}^2P_{1/2}$  oder  ${}^2P_{3/2}$  annehmen. Oft wird daher eine verkürzte Racah-Notation der Form  $nl [K]_J$  für  $J_1 = 3/2$  und  $nl' [K]_J$  für  $J_1 = 1/2$  verwendet.

## 3.1. Metastabiler Zustand und Kühlübergang

Im Grundzustand besitzt der energetisch niedrigste erlaubte Dipolübergang  $4p^6 \leftrightarrow 5s [3/2]_1$  eine Übergangswellenlänge von 123,6 nm. Diese Wellenlänge liegt im sogenannten Vakuum-Ultraviolett-Bereich (VUV), in dem – wie die Bezeichnung schon impliziert – die meisten Werkstoffe und Ausbreitungsmedien einschließlich Luft intransparent sind. Obwohl in den letzten Jahren bereits verschiedene Ansätze zur Erzeugung von kohärenter VUV-Strahlung mittels Frequenzvervielfachung oder mit Freie-Elektronen-Lasern erforscht wurden, sind geeignete und praktisch

### 3. Die atomaren Eigenschaften von Krypton

einsetzbare Lichtquellen und optische Elemente, die für eine Nutzung dieses Übergangs als Kühlübergang benötigt würden, derzeit nicht verfügbar.

Krypton besitzt jedoch den langlebigen metastabilen Zustand  $5s [3/2]_2$  mit einer Lebensdauer von ca. 39 s [KS93] sowie den Zustand  $5p [5/2]_3$ , der optisch ausschließlich in den metastabilen Zustand zerfällt. Mit diesen beiden Niveaus steht ein quasi-geschlossenes Zwei-Niveau-System zur Verfügung, das als Kühlübergang dienen kann. Die Wellenlänge des Kühlübergangs beträgt  $\lambda = 811,290 \text{ nm}$  [A K+20], die natürliche Linienbreite  $\gamma = 2\pi \cdot 5,56 \text{ MHz}$  [SM01] und die Sättigungsintensität  $I_{\text{sat}} = 1,36 \text{ mW/cm}^2$ . Die Landé-Faktoren für die Zeeman-Aufspaltung des Grund- und angeregten Zustands des Kühlübergangs von Kr-84 lauten nach [Sal07]:

$$\begin{aligned}g_{J,g} &= 1,501, m_{J,g} = 2 \\g_{J,e} &= 1,336, m_{J,e} = 3\end{aligned}$$

## 3.2. Anregungsübergänge

Der Transfer von Kr-Atomen vom Grundzustand in den metastabilen Zustand  $5s [3/2]_2$  kann auf verschiedenen Wegen erfolgen. Eine gängige und auch für ATTA-Anwendungen genutzte Variante [ZP10; Jia+12] ist die Erzeugung eines Plasmas in einem Kr-Atomstrahl in einem elektromagnetischen Wechselfeld im Radiofrequenz- oder Mikrowellenbereich. Innerhalb des Plasmas werden durch Stöße mit beschleunigten Elektronen prinzipiell alle energetisch möglichen Kr-Anregungszustände einschließlich Ionisierung besetzt. Aufgrund der langen Lebensdauer des  $5s [3/2]_2$ -Zustands und eines gewissen Pumpeffekts durch die Zerfälle höherer Anregungen in den metastabilen Zustand – beispielsweise zerfallen drei der sechs  $5p$ -Niveaus bevorzugt in  $5s [3/2]_2$  [Dzi+00] – ist mit der Elektronenstoßanregung eine recht hohe Anregungseffizienz in der Größenordnung  $10^{-3}$  erreichbar [Che+01].

Gerade im Bereich analytischer Anwendungen bringt die Elektronenstoßanregung jedoch eine gravierende Einschränkung mit sich. Durch die im Plasma herrschenden elektrischen Felder können Kr-Ionen genug kinetische Energie aufnehmen, um bei Kollision mit den Kammerwänden in das Wandmaterial implantiert zu werden. In darauf folgenden Messungen wird das implantierte Krypton durch weitere Ionenstöße teilweise wieder extrahiert und kontaminiert die aktuelle Probe. Zur Minimierung dieser Kreuzkontamination müssen zwischen den Messungen zeitaufwändige Spülvorgänge mit z. B. Xenon-Plasma durchgeführt werden, während derer das implantierte Krypton durch  $\text{Xe}^+$ -Stöße freigesetzt und teilweise durch – die Messungen nicht beeinflussendes – Xenon ersetzt wird. Ein typischer Zyklus aus Messung und Spülung einer Kr-ATTA-Anlage kann dadurch – abhängig von



### 3.3. Isotopenverschiebung und Hyperfeinstruktur

Probengröße, Konzentration der gesuchten Isotope und maximal akzeptabler Kontamination – etwa zwei Tage dauern, während die eigentliche Messung nur wenige Stunden in Anspruch nimmt [Jia+12]. Das ATTA-Projekt am ZNF verfolgt daher als wesentliches Ziel die Etablierung eines ATTA-Systems mit rein optischer Anregung.

Die Ursache der Metastabilität des  $5s [3/2]_2$ -Niveaus liegt in der Drehimpulsdifferenz von  $\Delta J = 2$  gegenüber dem einzigen energetisch niedrigeren Niveau, dem Grundzustand, die einen elektrischen Dipolübergang nach den Auswahlregeln für den Drehimpuls verbietet. Zudem besitzen beide Zustände unterschiedliche Parität, so dass an einer optischen Anregung aus dem Grundzustand insgesamt drei Photonen beteiligt sein müssen. Daher kann eine effiziente optische Anregung in den metastabilen Zustand nur über einen spontanen Zerfall aus einem höheren  $5p$ -Niveau stattfinden, dessen Verzweungsverhältnisse den gewünschten Zerfallskanal möglichst stark bevorzugen. Es existieren zwei  $5p$ -Niveaus mit einem günstigen Verzweungsverhältnis (vg. [Dzi+00]), die beide durch eine resonante Zwei-Photon-Anregung – jeweils durch Absorption eines 123,6 nm-Photons als erste Anregungsstufe in den Zustand  $5s [3/2]_1$  – erreicht werden können:

1.  $5p [1/2]_1$  durch Absorption von 975 nm, zerfällt mit einer Wahrscheinlichkeit von 87 % unter Emission von 893 nm zu  $5s [3/2]_2$
2.  $5p [3/2]_2$  durch Absorption von 819 nm, zerfällt mit einer Wahrscheinlichkeit von 74 % unter Emission von 760 nm zu  $5s [3/2]_2$

Für das ATTA-Experiment am ZNF wird die zweite Variante verwendet. Das vollständige Anregungsschema ist durch

$$4p^6 + \gamma_{123,6 \text{ nm}} \longrightarrow 5s [3/2]_1 \quad (3.2)$$

$$5s [3/2]_1 + \gamma_{819 \text{ nm}} \longrightarrow 5p [3/2]_2 \quad (3.3)$$

$$5p [3/2]_2 \longrightarrow 5s [3/2]_2 + \gamma_{760 \text{ nm}} \quad (3.4)$$

gegeben und wurde bereits in anderen Experimenten zur optischen Erzeugung von metastabilem Krypton genutzt [YYD02][Din+07]. In Abbildung 3.1 ist das Schema mit den beteiligten Niveaus skizziert.

### 3.3. Isotopenverschiebung und Hyperfeinstruktur

Die Differenzierbarkeit der verschiedenen Isotope in einer magnetooptischen Falle beruht auf einer masse- volumen- und kernspinabhängigen Verschiebung der

### 3. Die atomaren Eigenschaften von Krypton

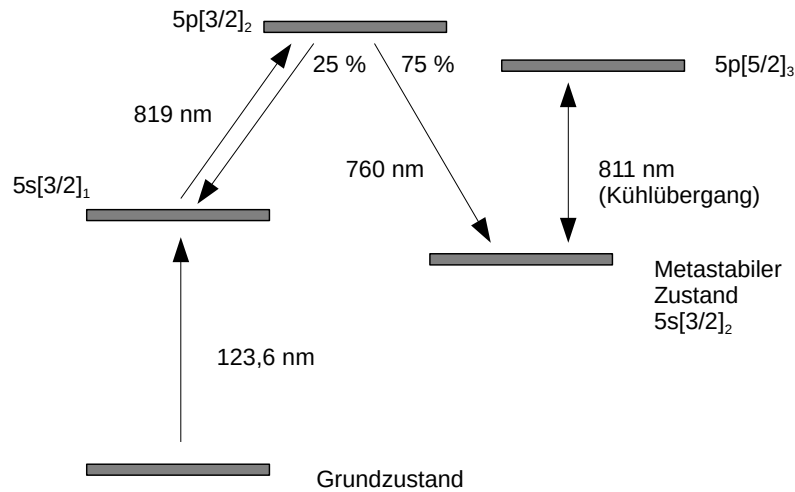


Abbildung 3.1.: Anregungsschema zur Erzeugung des metastabilen Zustands

	$\Delta\nu$ (MHz)		
	Kr-80	Kr-82	Kr-86
811 nm-Kühlübergang	-140	-64	67
819 nm-Anregungsübergang	-212	-102	104

Tabelle 3.1.: Übergangsfrequenzen der häufigsten geradzahigen Isotope mit Differenzfrequenzen  $\Delta\nu$  zur Übergangsfrequenz von Kr-84 [KNM05]

Übergangsenergien, die wesentlich größer ist als die Linienbreite der Übergänge. Isotope mit gerader Massenzahl besitzen einen Kernspin  $I = 0$ ; bei ihnen wirken folglich nur der Masseneffekt und der Volumeneffekt. Die Kernmasse wirkt sich über die reduzierte Masse des Schwerpunktsystems aus Elektron und Rumpfatom auf die kinetische Energie des Systems aus, analog zu einem klassischen gebundenen Zweikörpersystem. Der Volumeneffekt resultiert aus einer unterschiedlichen Ladungsverteilung im Kern und damit einer Veränderung des Coulomb-Potentials innerhalb und nahe des Kerns. Beide Effekte bewirken eine steigende Übergangsenergie mit wachsender Kernmasse. Die Übergangsfrequenzen für die häufigsten geradzahigen Isotope relativ zum Kr-84-Übergang sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst.

Bei ungerader Massenzahl koppelt der Hüllendrehimpuls  $J$  mit dem Kernspin  $I \neq 0$ , was zu einer Aufspaltung in  $2(I + J - |I - J|) + 1$  Hyperfeinniveaus mit Gesamtdrehimpuls  $F$  von  $|I - J|$  bis  $I + J$  führt. Die Kernspins der relevanten Kr-Isotope mit ungeraden Massenzahlen betragen  $7/2$  für Kr-81 und  $9/2$  für Kr-83 und Kr-85.

### 3.3.1. Kühlübergang

Der metastabile Zustand spaltet sich demnach in 5 und das obere Kühlniveau in 7 Zustände mit 15 möglichen Übergängen auf. Der Kühlübergang sollte dem Ideal eines geschlossenen Zweiniveau-Systems möglichst nahe kommen, insbesondere sollte das obere Niveau nur einen einzigen Zerfallskanal besitzen. Diese Bedingung ist für die Niveaus mit den höchsten Drehimpulsen – hier  $13/2 \leftrightarrow 15/2$  für die Isotope Kr-83/85 – erfüllt. Durch den Kühllaser werden jedoch mit einer nicht vernachlässigbaren Wahrscheinlichkeit auch die benachbarten Übergänge mit  $\Delta F = 0$  und  $\Delta F = -1$  angeregt, die wiederum auch in das  $10/2$ - oder  $9/2$ -Hyperfeinniveau des metastabilen Zustands zerfallen können. Bezüglich des Kühllasers sind dies Dunkelzustände, aus denen heraus keine weitere Kühlung möglich ist. Es sind daher außerdem zwei Rückpumpplaser erforderlich, die die Übergänge  $11/2 \rightarrow 13/2$  und  $9/2 \rightarrow 11/2$  anregen und die Dunkelzustände im Zusammenspiel mit den darauf folgenden Zerfällen nach  $F = 13/2$  zurückpumpen.

Prinzipiell besitzt das obere Kühlniveau auch im Hyperfeinzustand mit dem niedrigsten Drehimpuls nur einen Zerfallskanal, so dass der Übergang  $5/2 \leftrightarrow 3/2$  ebenfalls zur Kühlung verwendet werden könnte. Die Übergangsfrequenzen zwischen den Niveaus mit niedrigen  $F$ -Werten liegen jedoch wesentlich enger zusammen, so dass die Wahrscheinlichkeit für das Pumpen in einen Dunkelzustand hier signifikant höher wäre und letztlich eine Tendenz zum Pumpen in den Zustand  $F = 13/2$  bestünde. Der Übergang  $13/2 \leftrightarrow 15/2$  (bzw.  $11/2 \leftrightarrow 13/2$  für Kr-81) stellt daher die einzig sinnvolle Wahl für den Kühlübergang dar. In Tabelle 3.2 ist die Hyperfeinstruktur des 811-nm-Übergangs mit einer Erläuterung der für das ATTA-Experiment relevanten Übergänge zusammengestellt.

### 3.3.2. Anregungsübergänge

Das 123,6-nm-Anregungsniveau  $5s [3/2]_1$  spaltet sich in 3 und das durch 819 nm angeregte  $5p [3/2]_2$ -Niveau in 5 Unterniveaus auf. Die 123,6-nm-Anregung erfolgt mit einer breitbandigen Quelle, so dass eine Besetzung aller Hyperfeinzustände des  $5s [3/2]_1$ -Niveaus zu erwarten ist. Bei der darauf folgenden 819-nm-Anregung werden die Zustände mit den größten Drehimpulswerten verwendet, d. h.  $9/2 \rightarrow 11/2$  bei Kr-81 und  $11/2 \rightarrow 13/2$  bei Kr-83 und Kr-85, um nach dem anschließenden Zerfall via 760-nm-Emission mit möglichst wenigen Rückpumpprozessen das  $F = 13/2$ -Niveau des metastabilen Zustands zu erreichen. Die Hyperfeinstruktur des 819-nm-Übergangs ist in Tabelle 3.3 dargestellt.

Für eine zukünftige Effizienzsteigerung der optischen Anregung könnten zusätz-

### 3. Die atomaren Eigenschaften von Krypton

Kr-81			Kr-83			Kr-85		
$F$	$F'$	$\Delta\nu$ (MHz)	$F$	$F'$	$\Delta\nu$ (MHz)	$F$	$F'$	$\Delta\nu$ (MHz)
11/2	13/2	<b>656</b>	13/2	15/2	<b>783</b>	13/2	15/2	<b>870</b>
11/2	11/2	1967 (d)	13/2	13/2	1744 (d)	13/2	13/2	1986 (d)
11/2	9/2	2739 (d)	13/2	11/2	2466 (d)	13/2	11/2	2766 (d)
9/2	11/2	-309 (r)	11/2	13/2	-87 (r)	11/2	13/2	-77 (r)
9/2	9/2	463	11/2	11/2	635	11/2	11/2	703
9/2	7/2	866	11/2	9/2	1166	11/2	9/2	1226
7/2	9/2	-800 (r)	9/2	11/2	-706 (r)	9/2	11/2	-688 (r)
7/2	7/2	-397	9/2	9/2	-176	9/2	9/2	-164
7/2	5/2	-227	9/2	7/2	203	9/2	7/2	171
5/2	7/2	-1008	7/2	9/2	-1132	7/2	9/2	-1060
5/2	5/2	-837	7/2	7/2	-753	7/2	7/2	-724
5/2	3/2	-792	7/2	5/2	-492	7/2	5/2	-521
3/2	5/2	-1074	5/2	7/2	-1408	5/2	7/2	-1270
3/2	3/2	-1029	5/2	5/2	-1147	5/2	5/2	-1067
3/2	1/2	-1032	5/2	3/2	-979	5/2	3/2	-953

Tabelle 3.2.: **Hyperfeinstruktur des 811 nm-Übergangs**

Enthalten sind die Gesamtdrehimpulse  $F$ ,  $F'$  des unteren und oberen Niveaus und die Differenzfrequenzen  $\Delta\nu$  zur Übergangsfrequenz von Kr-84 [LL95]. Der Kühlübergang ist hervorgehoben, die vom Kühllaser peripher gepumpten Übergänge, die zum Zerfall in Dunkelzustände führen können, mit (d) und die von den Rückpumpplasern verwendeten Übergänge mit (r) gekennzeichnet.

### 3.4. Destruktive Übergänge („Quenching“)

Kr-81			Kr-83			Kr-85		
$F$	$F'$	$\Delta\nu$ (MHz)	$F$	$F'$	$\Delta\nu$ (MHz)	$F$	$F'$	$\Delta\nu$ (MHz)
9/2	11/2	<b>-69</b>	11/2	13/2	<b>-275</b>	11/2	13/2	<b>-309</b>
9/2	9/2	776	11/2	11/2	476	11/2	11/2	503
9/2	7/2	1352	11/2	9/2	1072	11/2	9/2	1122
7/2	9/2	-347 (*)	9/2	11/2	-518 (*)	9/2	11/2	-577 (*)
7/2	7/2	229	9/2	9/2		9/2	9/2	42
7/2	5/2	605	9/2	7/2	538	9/2	7/2	502
5/2	7/2	-118 (*)	7/2	9/2	-518 (*)	7/2	9/2	-502 (*)
5/2	5/2	258	7/2	7/2		7/2	7/2	-42
5/2	3/2	487	7/2	5/2	281	7/2	5/2	287

Tabelle 3.3.: **Hyperfeinstruktur des 819 nm-Anregungsübergangs**

Angegeben sind die Gesamtdrehimpulse  $F$ ,  $F'$  des unteren und oberen Niveaus und die Differenzfrequenzen  $\Delta\nu$  zur Übergangsfrequenz von Kr-84 (Werte für Kr-83 aus [KNM05], Kr-81 und Kr-85 aus [Dae11]). Der aktuell für den Anregungslaser verwendete Übergang ist hervorgehoben. Die optionalen zusätzlichen Anregungspfade sind durch (\*) markiert.

lich auch die beiden derzeit von der 819 nm-Anregung nicht erfassten Hyperfeinzustände des  $5s [3/2]_1$ -Niveaus durch weitere 819 nm-Laser mit den benötigten Frequenzen für den jeweiligen Übergang mit  $\Delta F = 1$  in den metastabilen Zustand transferiert werden. Aufgrund der dann möglichen 760 nm-Zerfälle in den  $F = 7/2$ - (Kr-83/85) bzw.  $F = 5/2$ -Zustand (Kr-81) wäre ebenfalls ein weiterer Rückpumplaser für den Übergang  $7/2 \rightarrow 9/2$  bzw.  $5/2 \rightarrow 7/2$  erforderlich.

Die prinzipielle Realisierbarkeit dieser zusätzlichen Anregungspfade – und damit auch die vermutete Besetzung zumindest eines weiteren F-Zustands des  $5s [3/2]_1$ -Niveaus – konnte durch Einstellung des 819 nm-Lasers auf  $-518$  MHz, womit sowohl der  $9/2 \rightarrow 11/2$ - als auch der  $7/2 \rightarrow 9/2$ -Übergang von Kr-83 angeregt werden, bereits erfolgreich am ATTA-System nachgewiesen werden.

### 3.4. Destruktive Übergänge („Quenching“)

Prinzipiell ist – mit Ausnahme des 811 nm-Übergangs – die Anregung jedes erlaubten optischen Übergangs vom metastabilen Zustand aus in der Lage, metastabile Atome über ein Zwischenniveau und anschließenden Zerfall nach  $5s [3/2]_1$

### 3. Die atomaren Eigenschaften von Krypton

Quench-Übergang			Zerfallszweig			Interimsniveau
$\lambda$ (nm)	$F_{ki}$	$A_{ki}$ ( $10^6 \text{ s}^{-1}$ )	$\lambda$ (nm)	$F_{ki}$	$A_{ki}$ ( $10^6 \text{ s}^{-1}$ )	
760,15	0,743	27,32	819,01	0,248	8,94	$5p[3/2]_2$
769,45	0,127	4,27	829,81	0,868	29,31	$5p[3/2]_1$
810,44	0,288	8,96	877,68	0,709	22,17	$5p[5/2]_2$
892,87	0,873	22,89	975,18	0,120	3,13	$5p[1/2]_1$

Tabelle 3.4.: **Quench-Übergänge und -Pfade**

Angegeben sind Wellenlängen, Verzweigungsverhältnisse  $F_{ki}$ , Übergangswahrscheinlichkeiten  $A_{ki}$  sowie das Zwischenniveau, über das der Prozess abläuft. Die Übergänge bei 769 nm und 810 nm besitzen Verzweigungsverhältnisse, die Quenching besonders begünstigen. Auch über die als Anregungspfad verwendeten 819 nm- und 760 nm-Übergänge kann in umgekehrter Richtung Abregung stattfinden. Die Werte wurden (unter Auslassung der Fehlerangaben) aus [Dzi+00] entnommen.

mit darauffolgender 123 nm-Emission wieder in den Grundzustand zu transferieren. Im angelsächsischen Sprachraum werden – auch nicht-optische – Vorgänge, bei denen vorher präparierte Zustände zerstört werden, als Quenching („Löschen“) bezeichnet. In dieser Arbeit wird der Begriff auch in seiner eingedeutschten Form „quenchen“ verwendet.

Der Anregung eines Quench-Übergangs kann auch ein Zerfall zurück in den metastabilen Zustand folgen, so dass neben der Anregungswahrscheinlichkeit des Übergangs auch das Verzweigungsverhältnis der Zerfallskanäle des angeregten Zustands maßgeblich die Wahrscheinlichkeit für einen destruktiven Prozess bestimmt. In Tabelle 3.4 sind die wichtigsten Quench-Übergänge und deren Eigenschaften aufgeführt. Eine Skizze der beteiligten Niveaus und Übergänge ist exemplarisch für die Pfade über 760 nm- und 810 nm-Photonen in Abbildung 3.2 dargestellt.

### 3.4. Destruktive Übergänge („Quenching“)

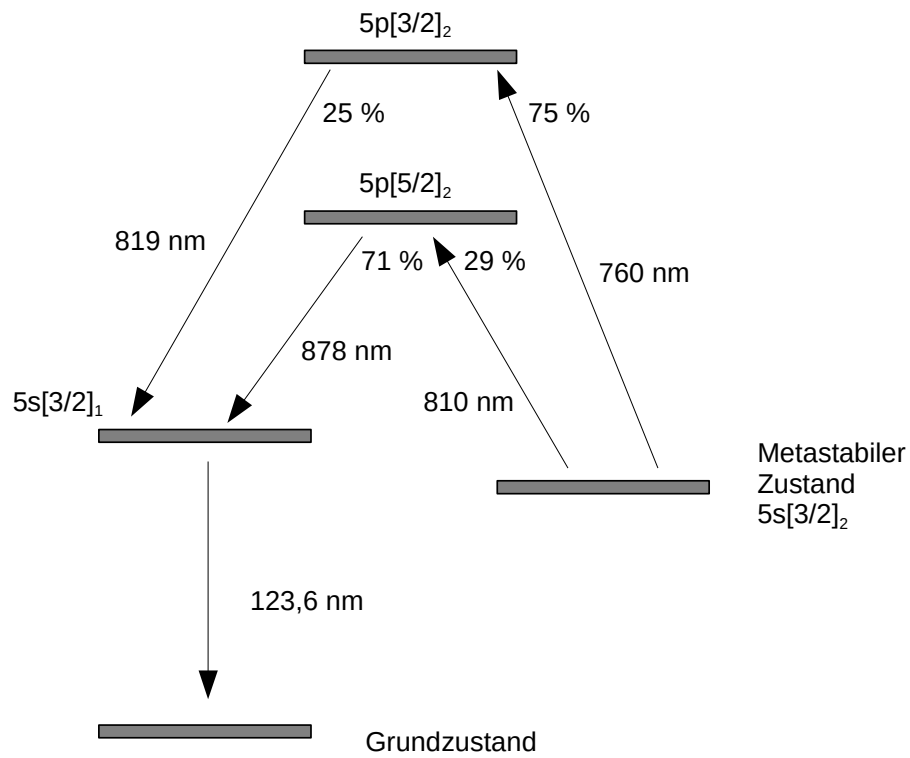


Abbildung 3.2.: Schema für das Quenching des metastabilen Zustands durch 760 nm- oder 810 nm-Photonen

### 3. Die atomaren Eigenschaften von Krypton



# 4. Aufbau des ATTA-Systems am ZNF

## 4.1. Überblick

Das am ZNF entwickelte ATTA-System kombiniert die rein optische Erzeugung von metastabilen Kr-Atomen mit deren Einfang in einer 2D- oder 2D<sup>+</sup>-MOT, die einen Kr\*-Strahl zum Laden einer 3D-MOT erzeugt. Die 2D-MOT-Kühlstrahlen enthalten die zum Kühlen erforderlichen Frequenzen für Kr-85 und für das Referenzisotop Kr-81, während die 3D-MOT mit einigen KHz alternierend auf die beiden Isotope abgestimmt wird, so dass eine simultane Detektion beider Isotope ermöglicht wird. Die Detektion erfolgt über die Fluoreszenz der in der 3D-MOT gefangenen Atome.

Die einzelnen Komponenten der Anlage werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

## 4.2. 3D-MOT

Das Magnetfeld der 3D-MOT entsteht durch ein Anti-Helmholtz-Spulenpaar mit einem effektiven, d. h. auf eine idealisierte Spule mit verschwindendem Wicklungsquerschnitt bezogenen Radius von 30 mm und einem effektiven Abstand von ca. 115 mm. Die Spulen bestehen aus je 395 Windungen auf einem wassergekühlten Kupferkörper. Der berechnete Feldgradient im Zentralbereich der 3D-MOT-Kammer in Abhängigkeit vom Spulenstrom beträgt ca.  $70 \text{ mT A}^{-1} \text{ m}^{-1}$  in Richtung der Spulenachse (z-Richtung) und ca.  $32 \text{ mT A}^{-1} \text{ m}^{-1}$  in x- und y-Richtung [Dae11].

Für die Formung der 3D-Kühlstrahlen stehen Optiken in drei verschiedenen Konfigurationen zur Verfügung. Die ursprünglich entwickelte Optik erzeugt Strahlen mit einem  $1/e^2$ -Radius von 13,5 mm. Zwecks Reduktion des von den Kühlstrahlen ausgehenden Streulichts in der 3D-Kammer bei gleichzeitiger Erhöhung der Intensität im Zentralbereich der MOT wurde in [Woe16] eine Optik mit einem Strahl-

#### 4. Aufbau des ATTA-Systems am ZNF

radius von 2,2 mm entwickelt, der durch ein optional aufschraubbares Teleskop auf 3,8 mm aufgeweitet werden kann. Die Strahlradien können in allen Konfigurationen – auf Kosten vermehrt auftretender Beugungseffekte – mittels einer Irisblende reduziert werden.

### 4.3. 2D-MOT

Das Magnetfeld der 2D-MOT wird durch vier rechteckige Spulen mit je 405 Windungen und den effektiven Abmessungen ( $B \times H$ ) von 69 mm  $\times$  209 mm und einem um etwa  $\pm 15$  mm variierbaren effektiven Abstand zum 2D-MOT-Zentrum von ca. 145 mm erzeugt. Der berechnete Feldgradient im Kühlbereich beträgt ca.  $13 \text{ mT A}^{-1} \text{ m}^{-1}$  [Dae11]. Ebenso wie bei den 3D-Spulen erfolgt die Wärmeabfuhr über eine Wasserkühlung der kupfernen Spulenkörper.

Die 2D-Kühlstrahlen werden nach Auskopplung aus der Faser auf einen Radius von 10,7 mm aufgeweitet und durch ein Zylinderlinsen-Teleskop mit einem Vergrößerungsfaktor von etwa 3 zu einem elliptischen Querschnitt mit einer vertikal stehenden langen Halbachse von ca. 32 mm umgeformt. Die entgegen gerichteten Strahlen werden im Gegensatz zur 3D-MOT durch Rückreflexion erzeugt. Hierzu durchläuft der hinlaufende Strahl nach Passieren der Kammer ein zweites, identisches Zylinderteleskop, bevor er – hier wieder mit rundem Querschnitt – mittels  $\lambda/4$ -Verzögerungsplättchen linear polarisiert und von einem  $0^\circ$ -Spiegel zurückreflektiert wird. Bei der erneuten Passage des Verzögerungsplättchens erhält der zurücklaufende Strahl wieder seine ursprüngliche Polarisierung.

In  $2D^+$ -MOT-Konfiguration wird der Push-Strahl wahlweise direkt aus dem Faserauskoppler mit einem Radius von ca. 1 mm oder mit einer Aufweitungsoptik und einem Radius von ca. 6,5 mm zentral von oben in die Kammer eingestrahlt. Der Bremsstrahl wird in Form zweier Teilstrahlen mit einem Radius von 6,5 mm horizontal von zwei gegenüberliegenden Seiten eingestrahlt. Die obere Hälfte jedes Teilstrahls wird vor Eintritt in die Kammer durch eine Klinge blockiert, während die unteren Hälften von zwei mit der Oberkante unmittelbar an die Öffnung der differentiellen Pumpstrecke grenzenden Spiegeln um  $90^\circ$  nach oben in den 2D-Kühlbereich reflektiert werden. Dabei werden die beiden halbkreisförmigen Strahlen zu einem annähernd runden Querschnitt vereinigt, allerdings infolge der für die Pumpstrecke nötigen Aussparungen in den Spiegeln mit einer zentralen Abschattung von etwa 1 mm bis 2 mm Durchmesser.

## 4.4. Optische Anregung

Die für die optische Erzeugung des metastabilen Zustands benötigten 123,6 nm-VUV-Photonen werden durch von M. Kohler zu diesem Zweck entwickelte, mikrowellengetriebene Krypton-Plasmalampen erzeugt [Koh11]. Leuchtgas und Proben-gas sind über ein  $\text{MgF}_2$ -Fenster UHV-dicht getrennt. Im Vergleich zu kommerziell erhältlichen Krypton-VUV-Lampen und anderen experimentellen Designs zeichnet sich diese Entwicklung insbesondere durch um ein Vielfaches längere Standzeiten aus, die einen praktikablen Einsatz im regelmäßigen ATTA-Messbetrieb überhaupt erst ermöglichen [Dae+11]. Zudem sorgt die Verwendung eines Laufwellengenerators zur Einkopplung der Mikrowellen für eine Verteilung des Plasmas bis dicht vor das Austrittsfenster und minimiert dadurch die Selbstabsorption durch das Leuchtgas [CD48]. Als Betriebsgas wird Krypton der Reinheit 4.7 verwendet, das beim Befüllen zusätzlich durch einen Gasreiniger SAES PS2-GC50 geleitet wird. Die Lampen werden in der Regel mit einem Kr-Druck von 2 mbar und einer eingespeisten Mikrowellenleistung zwischen 11 W und 16 W pro Lampe betrieben. Findet kein Messbetrieb statt, wird das Lampensystem auf einen Restdruck von ca.  $10^{-9}$  mbar evakuiert.

Es wurden zwei Konfigurationen der Lampenanordnung entwickelt. In der ersten Variante sind acht dieser Lampen in einer quadratischen Anordnung in einem Raster von 25 mm im Deckel der 2D-MOT Kammer montiert, so dass eine möglichst homogene Ausleuchtung des Raumes um den Kühlbereich der 2D-MOT herum erfolgt. Senkrecht zu den Lichtkegeln der VUV-Lampen durchläuft der auf einen elliptischen Querschnitt mit Radien von ca. 5 mm und 12,5 mm aufgeweitete Strahl des 819 nm-Lasers (vgl. Kap. 4.7.5) mittels eines Prismensystems 24 mal die 2D-MOT Kammer und deckt damit etwa den selben Raumbereich ab wie die VUV-Lampen.

In der zweiten Konfiguration sind zwei um  $45^\circ$  gegen den Kammerdeckel geneigte Lampen so angeordnet, dass sich deren Lichtkegel zentral im oberen Bereich der Kühlregion schneiden, um möglichst nah an der 2D-MOT eine möglichst hohe Produktionsrate metastabiler Atome zu erreichen. Abbildung 6.3 in Kapitel 6.4 stellt die Anordnung von Lampen und Anregungsstrahlen in beiden Konfigurationen anschaulich dar.

## 4.5. Vakuumsystem

Das Vakuumsystem des ATTA-Aufbaus muss während des Messbetriebs einen definierten Probengasdruck in der 2D-MOT-Kammer und einen möglichst geringen

#### 4. Aufbau des ATTA-Systems am ZNF

Druck in der 3D-MOT-Kammer aufrechterhalten. Zudem soll das Probengas während der Messung durch das System zirkulieren, um eine Abreicherung der zu messenden Isotope in der 2D-Kammer zu vermeiden. Zwischen den Messvorgängen muss das gesamte System in kurzer Zeit evakuiert werden können, um einen hohen Probendurchsatz ohne Kontamination durch Restgas der vorherigen Messung zu gewährleisten. Im evakuierten Zustand liegt der Druck im Ultrahochvakuum-Bereich (UHV).

Das Vakuumsystem besteht aus drei Teilsystemen, in denen im Messbetrieb unterschiedliche Drücke herrschen. Zu Beginn der Messung wird das Probengas über eine Vierfach-Ventilkombination und ein Feindosierventil in das Reservoirsystem geleitet. Dort besteht die Möglichkeit, die Probe mittels eines Quadrupol-Massenspektrometers (QMS) auf eventuelle Verunreinigungen zu untersuchen. Kritisch sind insbesondere  $O_2$  aufgrund seiner starken VUV-Absorption sowie  $H_2O$  und Kohlenwasserstoffe, die unter Einwirkung von VUV-Strahlung eine beschleunigte Degeneration der  $MgF_2$ -Fenster bewirken können. Das Reservoirsystem wird über eine Turbopumpe Pfeiffer HiPace 300 mit Vorpumpe HiPace 10 und Membranpumpe MVP 160-3 in die Raumatmosfera evakuiert. Über das Vierfach-Ventil können die Verbindungen zum Probenbehälter und zum Feindosierventil ebenfalls direkt mit der Turbopumpe verbunden und unabhängig vom Reservoir evakuiert werden.

Über ein weiteres Feindosierventil ist das Reservoir mit den zwei Gaszuführungen der 2D-MOT-Kammer verbunden. Deren Auslassöffnungen sind so angeordnet, dass der Gasstrom auf den 2D-Kühlbereich gerichtet ist und dabei zwei der acht Lampenkegel passiert. Eine magnetgelagerte Turbopumpe Pfeiffer TMU 200 MP ist eingangsseitig direkt an die Kammer angeflanscht und pumpt wahlweise zurück in das Reservoir (Zirkulationsbetrieb, Abbildung 4.2b) oder zum Vierfach-Ventil. Letzteres ermöglicht es, entweder die 2D-Kammer direkt über den Evakuierungspumpenstrang zu leeren, oder die Probe zwecks Archivierung oder späterer Vergleichsmessungen zurück in den Probenbehälter zu transferieren.

Die 2D-MOT-Kammer ist mit der 3D-MOT-Kammer über eine sich stufenweise öffnende differentielle Pumpstrecke verbunden. Der Durchmesser beträgt 1 mm bis 16 mm in 6 Stufen über eine Gesamtlänge von 60 mm [Dae11]. Die Aufrechterhaltung der Gaszirkulation und die Evakuierung der 3D-Kammer erfolgen über eine weitere magnetgelagerte Turbopumpe gleichen Typs, deren Ausgang in die 2D-MOT-Kammer geführt ist und auf die Einlassöffnung der 2D-Turbopumpe gerichtet ist. Durch diese kaskadierte Anordnung wird sichergestellt, dass das Gas aus der 3D-Kammer über das Reservoir zirkulieren kann, ohne dass das Vakuum in der 3D-Kammer durch den Reservoirdruck limitiert wird, wie es bei direktem Pumpen

## 4.5. Vakuumsystem

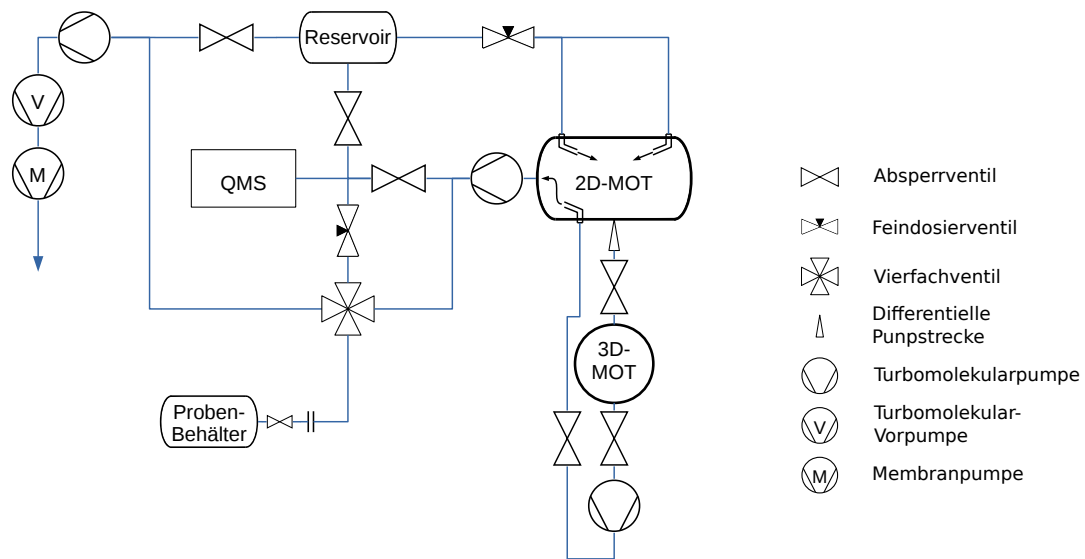


Abbildung 4.1.: Vakuumsystem des ATTA-Aufbaus. Zur besseren Übersicht sind Titan-Sublimationspumpen und Drucksonden nicht dargestellt.

in das Reservoir der Fall wäre. Die 3D-Kammer kann sowohl von der 2D-Kammer als auch von der Pumpe mittels zweier Schieberventile abgetrennt werden.

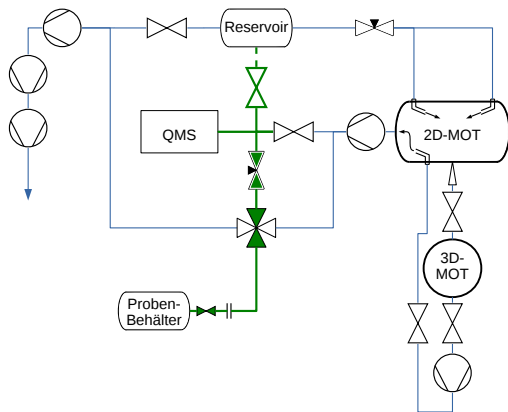
In jedem der drei Vakuum-Subsysteme ist eine Titan-Sublimationspumpe installiert, die in das System diffundierende reaktive Bestandteile der Außenluft und von den Kammerwänden desorbierende Verunreinigungen bindet. Während des Messbetriebs dient sie ferner der Reinigung der Probe von Resten reaktiver Gase. In der folgenden Tabelle sind typische Druckwerte nach einer etwa halbstündigen Evakuierung aufgeführt:

Bereich	Druck (mbar)
Reservoir	$8 \cdot 10^{-9}$
2D-MOT	$3 \cdot 10^{-9}$
3D-MOT	$2 \cdot 10^{-10}$

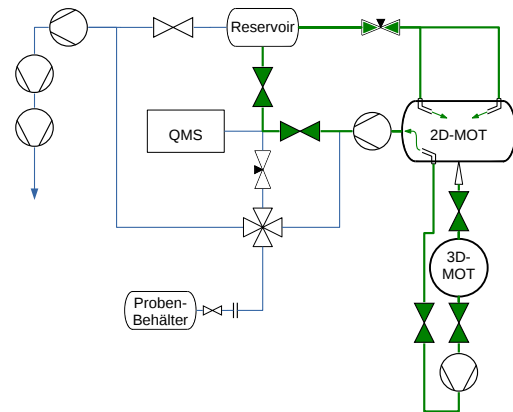
Die Druckmessung erfolgt im Hoch- und Ultrahochvakuumbereich von  $10^{-3}$  mbar bis  $10^{-11}$  mbar mittels Kaltkathoden-Vakuummeter des Typs Pfeiffer IKR 270. Im Reservoirsystem deckt eine zusätzliche Pirani-Drucksonde TPR 281 den Niedervakuumbereich bis  $5 \cdot 10^{-4}$  mbar ab.

Abbildung 4.1 zeigt einen Überblick über die wesentlichen Komponenten des Vakuumsystems. In Abbildung 4.2 sind die Gasflüsse in den verschiedenen Betriebsmodi skizziert.

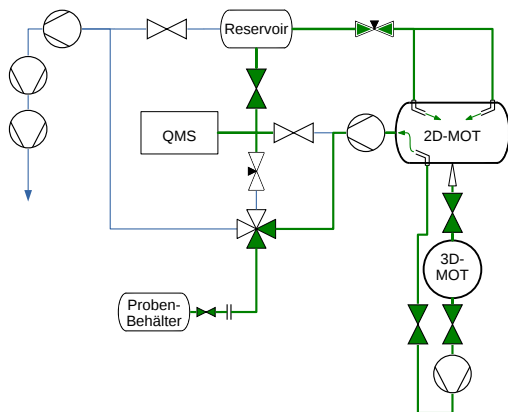
#### 4. Aufbau des ATTA-Systems am ZNF



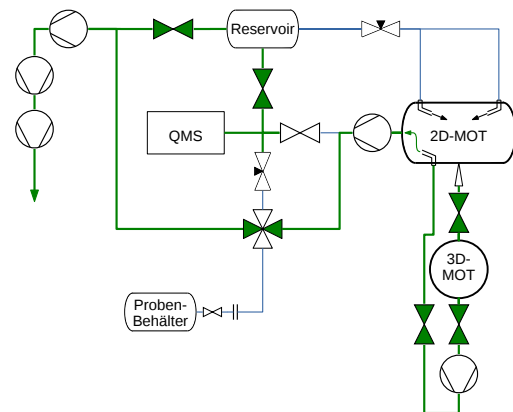
(a) Befüllen mit Probegas: Nach Prüfung eines kleinen Teils des Probenvolumens auf Verunreinigungen mittels QMS (Arbeitsdruck ca.  $10^{-6}$  mbar) wird die Probe in das Reservoir geleitet.



(b) Zirkulation der Probe während der Messung: Das Probegas fließt kontinuierlich vom Reservoir in die 2D-MOT-Kammer und wird wieder in das Reservoir zurückgepumpt. Der Ausgang der 3D-MOT-Turbopumpe führt nicht direkt zum Reservoir, sondern zu einer in der 2D-MOT liegenden, auf die Ansaugöffnung der Pumpe gerichteten Düse.



(c) Rückführung der Probe in den Behälter: Die mit Probegas gefüllten Bereiche werden über die 2D-MOT-Kammer entleert und in den Probenbehälter gepumpt.



(d) Evakuieren

Abbildung 4.2.: Betriebsarten des Vakuumsystems. Gasflüsse und geöffnete Ventile sind grün markiert.

## 4.6. Detektion

Die Streurrate eines in der 3D-MOT gefangenen Atoms liegt – abhängig von Intensität und Verstimmung der Kühlstrahlen – in der Größenordnung von  $10^6$  bis  $10^7$  Photonen/s. Diese werden isotrop abgestrahlt, können aber nur in einem begrenzten Raumwinkel von einer Optik erfasst und auf einen Sensor abgebildet werden. Gleichzeitig entsteht durch Streuung der Kühlstrahlen an den Kammerfenstern und anschließender Reflexion an den Kammerwänden ein nicht unerheblicher Photonenuntergrund. Das Detektionssystem muss daher vor allem eine gute Unterdrückung der Untergrundphotonen bei möglichst hoher Abbildungseffizienz der Fluoreszenzphotonen gewährleisten. Die verwendeten Sensoren müssen einen breiten Dynamikbereich von der Fluoreszenz einzelner Atome bis zum Signal einer großen MOT häufiger Isotope abdecken.

### 4.6.1. Optik

Die von Daerr [Dae11] und Herrmann [Her09] entwickelte Detektionsoptik ist dreiteilig aufgebaut. Zunächst wird das Fluoreszenzlicht durch ein ohne zusätzliches UHV-Fenster vakuumdicht an die 3D-MOT-Kammer montiertes, aus vier Linsen bestehendes Objektiv kollimiert. Die Brennweite des gesamten Objektivs beträgt 49,7 mm. Die erste Linse besitzt eine wirksame Apertur von  $D = 19,7$  mm und hat einen Abstand von  $r = 44,6$  mm zum Zentrum der Kammer. Mit dieser Geometrie kann ein Anteil von

$$\eta_{\text{Optik}} = \frac{(D/2)^2}{4r^2} = 0,012 \quad (4.1)$$

des vom Kammerzentrum ausgehenden Lichts erfasst werden.

Hinter dem Objektiv folgt ein aus zwei Achromaten gleicher Brennweite ( $f = 75$  mm) im Abstand  $2f$  und einer zentral dazwischen liegenden Irisblende aufgebauter Raumfilter. Licht, das von einem außerhalb der optischen Achse der Detektionsoptik liegenden Punkt ausgeht, wird in der Irisebene auf einen ebenfalls neben der Achse liegenden Punkt fokussiert und abhängig von der Blendenöffnung abgeschattet. Achsenzentral, aber nicht vom Zentrum der Kammer emittiertes Licht wird vor oder hinter der Blende fokussiert und dadurch unterdrückt.

Das nach dem Raumfilter wieder kollimierte Licht wird schließlich von einer Asphäre mit  $f = 20$  mm auf die aktive Fläche des Sensors fokussiert. Damit besitzt die gesamte Detektionsoptik eine Vergrößerung von 0,4.

Zwischen Raumfilter und Fokussier-Asphäre befindet sich ein Tubus zur Aufnahme eines oder mehrerer optischer Filter, um andere Wellenlängen als die der

#### 4. Aufbau des ATTA-Systems am ZNF

Fluoreszenzphotonen wie Raumbeleuchtung etc. vom Sensor fernzuhalten.

In der 3D-MOT-Kammer ist auf der dem Objektiv gegenüberliegenden Seite eine geschwärzte Platte platziert, um Reflexionen von Untergrundphotonen in Richtung des Objektivs zu reduzieren.

Das Detektionssystem ist über einen Wellbalg mit der 3D-MOT-Kammer verbunden, so dass Abstand und Winkel an die tatsächliche Position der MOT adaptiert werden können.

#### 4.6.2. Sensoren

Aufgrund des geforderten extremen Dynamikumfangs werden je nach Einsatzzweck verschiedene Sensoren verwendet:

##### Einzelphotonendetektor

Zur Messung der seltenen Isotope Kr-85 und Kr-81, bei der sich nur einzelne oder wenige Atome gleichzeitig in der Falle befinden, dient ein auf einer Avalanche-Photodiode basiertes Einzelphotonen-Detektormodul des Typs Perkin-Elmer (mittlerweile „Excelitas“) SPCM-AQRH-13. Die aktive Sensorfläche des Moduls hat einen Durchmesser von  $180\ \mu\text{m}$ , so dass mit dem Abbildungsmaßstab der Detektionsoptik von 0,4 ein Bereich von  $450\ \mu\text{m}$  Durchmesser in der MOT-Kammer erfasst wird. Die Quanteneffizienz  $\eta$  beträgt ca. 0,6 bei 811 nm. Das Modul erzeugt für jedes detektierte Photon einen TTL-Impuls mit einer konstanten Impulsdauer von 17 ns. Nach einem Detektionsereignis kann für  $T = 29\ \text{ns}$  kein weiteres Photon detektiert werden. Diese Totzeit führt zu einer Sättigung der Zählrate  $Z$ , die bei einem Photonenfluss  $\Phi$  durch

$$Z = \frac{\eta \cdot \Phi}{1 + \eta \cdot \Phi \cdot T} \quad (4.2)$$

beschrieben wird. Der tatsächliche auf den Sensor einfallende Photonenfluss ist demnach durch

$$\Phi = \frac{1}{\eta} \cdot \frac{Z}{1 - ZT} \quad (4.3)$$

gegeben. Infolge der Sättigung ist der Einzelphotonen-Zähler nur für Photonenflüsse bis etwa  $10^8\ \text{s}^{-1}$  einsetzbar, was – abhängig von Intensität und Verstimmung der Kühlstrahlen und ggf. in die Optik eingesetzter Filter – einer auf den Sensor abgebildeten Fluoreszenz von einigen 100 bis wenigen 1000 gefangenen Kr-Atomen entspricht.



### Photodiode mit Lock-In-Verstärker

Die Fluoreszenzmessung einer Vielatom-MOT erfolgte mittels Lock-In-Technik. Dabei wird die Messgröße mit einer definierten Frequenz moduliert und das gemessene Signal durch einen Verstärker mit hoher Frequenzselektivität verstärkt und durch Multiplikation mit einer Rechteckfunktion gleicher Frequenz phasensynchron integriert. Dadurch wird das gesamte Frequenzspektrum außerhalb eines schmalen Bereichs um die Lock-In-Frequenz stark unterdrückt, so dass mit dieser Methode auch extrem schwache Signale gemessen werden können, die von um mehrere Größenordnungen stärkeren Stör- und Rauschsignalen überlagert sind. Ein ggf. vorhandener konstanter Untergrund wird ebenfalls eliminiert. Gegenüber der Modulationsfrequenz phasenverschobene Anteile werden abhängig vom Phasenwinkel  $\phi$  abgeschwächt. Der Verlauf der Abschwächung über  $\phi$  ist kurvenformabhängig, führt jedoch immer zu einer Auslöschung bei  $\phi = 90^\circ$  und  $\phi = 270^\circ$  und zu einer Invertierung bei  $\phi = 180^\circ$ .

Die Modulation der MOT-Fluoreszenz erfolgt durch periodisches Umschalten der 3D-Kühlstrahl-AOMs (vgl. Kap. 4.7.1), wodurch die Kühlstrahlen zwischen der auf das Fangen des gewählten Isotops abgestimmten und einer um einige 100 MHz rotverschobenen, zum Kühlen wirkungslosen Frequenz wechseln. Im Idealfall ist die Kühlstrahlleistung in beiden Phasen gleich, so dass das Hintergrundlicht konstant bleibt, während die Fluoreszenz der gefangenen Atome synchron mit der Schaltfrequenz ein- und ausgeschaltet wird. Der Lock-In-Verstärker integriert das Eingangssignal während der Kühlphase mit positivem und während der inaktiven Phase mit negativem Vorzeichen und bildet den zeitlichen Mittelwert über viele Perioden mit einer einstellbaren Zeitkonstante  $\tau_L$ . Das Ausgangssignal des Verstärkers wird dann ausschließlich durch den Mittelwert des Fluoreszenzsignals gebildet, der dessen halber Amplitude entspricht, sowie den innerhalb der Verstärkungsbandbreite  $1/\tau_L$  um die Lock-In-Frequenz liegenden Anteil des Rauschspektrums. In der Praxis ist die Leistung der Kühlstrahlen in den beiden Phasen jedoch nicht exakt auszubalancieren und zudem kleinen Fluktuationen unterworfen, so dass ein schwacher, auf einer Zeitskala von einigen Sekunden leicht variierender Untergrund verbleibt.

Bei der Rückrechnung des Ausgangssignals auf die MOT-Fluoreszenz ist zu beachten, dass durch den intermittierenden MOT-Betrieb nicht nur der Mittelwert der Fluoreszenz pro gefangenen Atom halbiert wird, sondern auch die mittlere Laderate und damit – sofern sich die MOT im Bereich näherungsweise linearer Abhängigkeit zwischen Atomzahl und Laderate befindet – ein Korrekturfaktor 4 erforderlich ist, wenn Rückschlüsse auf das System im Dauerbetrieb gezogen wer-

#### 4. Aufbau des ATTA-Systems am ZNF

den sollen.

Als Lock-In-Verstärker kommt der Typ Femto LIA-MVD-200-S zum Einsatz und als Sensor eine Photodiode des Typs Osram BPX 61 mit  $50 \text{ M}\Omega$ -Transimpedanzverstärker. Die Photodiode besitzt im Vergleich zum Einzelphotonen-Detektor eine große aktive Fläche von  $7 \text{ mm}^2$ , um die Optimierung von Kühlstrahl- und Magnetfeldposition anhand der MOT-Fluoreszenz von einer nur groben Vorjustierung ausgehend zu ermöglichen. Die Empfindlichkeit  $S_{pd}$  beträgt ca.  $0,6 \text{ A/W}$  bei  $811 \text{ nm}$ . Mit der Transimpedanz  $R_T = 50 \text{ M}\Omega$  lässt sich der Konversionsfaktor der Photodiode

$$C_{pd} = \frac{U_{pd}}{\phi_{pd}} = S_{pd} \frac{hc}{\lambda} \cdot R_T = 7,3 \cdot 10^{-12} \text{ Vs} \quad (4.4)$$

als Quotient von Ausgangsspannung  $U_{pd}$  und Photonenfluss  $\phi_{pd}$  auf der aktiven Fläche der Photodiode angeben.

Die 3 dB-Grenzfrequenz der Kombination aus Photodiode und Transimpedanzverstärker liegt bei etwa  $3,1 \text{ kHz}$ , entsprechend einer Zeitkonstanten von  $\tau_{pd} \simeq 50 \text{ }\mu\text{s}$ . Der Lock-In-Verstärker arbeitet mit Frequenzen zwischen  $50 \text{ Hz}$  und  $120 \text{ kHz}$ . Die Schaltfrequenz ist hoch genug zu wählen, um die Verluste gefangener Atome während der nicht gekühlten Phase gering zu halten, und gleichzeitig niedrig genug, um das Signal durch die limitierte Bandbreite der Photodiode nicht übermäßig zu dämpfen.

Bei einem als ideale Rechteckfunktion angenommenen Verlauf der Fluoreszenz erzeugt die Bandbreitenbegrenzung der Photodiode an den Sprungstellen einen exponentiellen Abfall und Anstieg des Ausgangssignals mit der Zeitkonstanten  $\tau_{pd}$ . Bei einer Lock-In-Frequenz  $f$  führt dies bei der Integration im Lock-In-Verstärker zu einer Abschwächung des Signals um den Faktor

$$\eta_L = 1 - \left( 4f \int_0^{1/(2f)} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{pd}}\right) dt \right) \quad (4.5)$$

$$\simeq 1 - 4f\tau_{pd} \quad \text{für } f \ll \frac{1}{\tau_{pd}} \quad (4.6)$$

gegenüber einem nicht bandbreitenlimitierten Rechteck. Für  $f < 250 \text{ Hz}$  wird das integrierte Signal um weniger als  $5\%$  reduziert. Während aller in dieser Arbeit diskutierten Lock-In-Messungen wurde eine Schaltfrequenz von  $130 \text{ Hz}$  verwendet; die bandbreitenbedingte Dämpfung des Signals ist also vernachlässigbar.

Bei periodischem MOT-Betrieb sind Verluste gefangener Atome während der inaktiven Phase möglichst zu minimieren. Relevant sind vorwiegend zwei Effekte:

- Thermischer Drift: Bei Dopplertemperatur besitzen gefangene Kr-Atome eine mittlere Geschwindigkeit von 11,5 cm/s. Sollen Atome mit Geschwindigkeiten bis  $2 \cdot v_{\text{Doppler}}$  sicher gehalten werden, darf die Schaltfrequenz bei einem Kühlstrahlradius  $R$  nicht niedriger als  $2 \cdot v_{\text{Doppler}}/R$  werden.
- Gravitation: Um ein Herausfallen der Atome zu vermeiden, ist die untere Grenze der Schaltfrequenz  $\sqrt{2g/R}$ .

Bei den verwendeten Kühlstrahlradien im Bereich von 2 mm bis 13,5 mm liegt die untere Grenze der Schaltfrequenz zwischen 115 Hz für  $R = 2$  mm und etwa 40 Hz für den großen Strahl.

### CMOS-Kamera

Als Alternative zur Lock-In-Messung wurde zu einem späteren Zeitpunkt eine CMOS-Kamera des Typs Basler acA1300-60gmNIR installiert. Neben dem Vorteil einer bildlichen Darstellung von Position und Form der MOT, die eine erhebliche Vereinfachung der Justierung bedeutet, erlaubt die Kamera einen unterbrechungsfreien Betrieb der MOT und eliminiert damit einen Faktor, der das beobachtete Ladeverhalten verfälscht.

## 4.7. Lasersystem

Das Lasersystem ist im Hinblick auf folgende Zielsetzungen konzipiert worden:

- Simultane Messung von Kr-85 und Kr-81
- Möglichkeit der nicht-simultanen Messung beliebiger anderer Kr-Isotope
- Robustheit gegenüber Störungen der Laserstabilisierung, d. h. im Fall eines vorübergehend nicht mit korrekter Verstimmung arbeitenden Lasers sollen bei der simultanen Messung nach Möglichkeit beide Isotope nicht messbar sein, so dass das gemessene Konzentrationsverhältnis nicht verfälscht wird.

Bei allen eingesetzten Lasern handelt es sich um gitterstabilisierte Diodenlaser in Littrow-Konfiguration. Bei den 811 nm-Lasern für den Kühlübergang und die Rückpumpübergänge kommen 100 mW-Single-Mode-Laserdioden des Typs Thorlabs L820P100 zum Einsatz. Eine Ausnahme bildet die Erzeugung der Kühlstrahlen für die 2D-MOT; hierfür wird die 200 mW-Variante L820P200 verwendet. Für den 819 nm-Anregungsübergang findet derzeit noch der mittlerweile nicht mehr produzierte Typ Sanyo DL-8142-201 mit maximal 150 mW Ausgangsleistung Verwendung. Zukünftig werden diese sukzessive ebenfalls durch eines der oben genannten Thorlabs-Modelle ersetzt werden. Die Emissionsbandbreite der Laser beträgt maximal 500 kHz FWHM und liegt damit deutlich unterhalb der Linienbreite der atomaren Übergänge von 5,56 MHz (811 nm) bzw. 38 MHz (819 nm).

Die für die Kühlstrahlen und die optische Anregung benötigten hohen Leistungen werden durch Trapezverstärker (*Tapered Amplifier, TA*) des Typs Eagleyard EYP-TPA-0808-01000-4006 mit einer maximalen Ausgangsleistung von 1 W bei einer Seed-Leistung von ca. 50 mW erzeugt.

Die Stabilisierung der Laser auf die benötigten Wellenlängen erfolgt durch eine Master-Slave-Anordnung. Jeweils ein Master-Laser wird mittels Frequenzmodulationsspektroskopie [Bjo80] auf den 811 nm-Kühlübergang und auf den 819 nm-Anregungsübergang von Kr-84 stabilisiert und dient als Referenz für die Slave-Laser. Im 811 nm-Bereich fungieren zwei Slave-Laser als Quellen für die Kühlstrahlen der 2D- und 3D-MOT sowie zwei weitere für die beiden Rückpumpübergänge. Die 819 nm-Anregung verwendet je einen Slave-Laser für die beiden simultan zu messenden Isotope. Die Slave-Laser können mittels Schwebungsstabilisierung [SLK98] auf eine Differenzfrequenz im Bereich von etwa  $\pm 30$  bis  $\pm 800$  MHz zum zugeordneten Master und damit zum entsprechenden Übergang von Kr-84 stabilisiert werden.

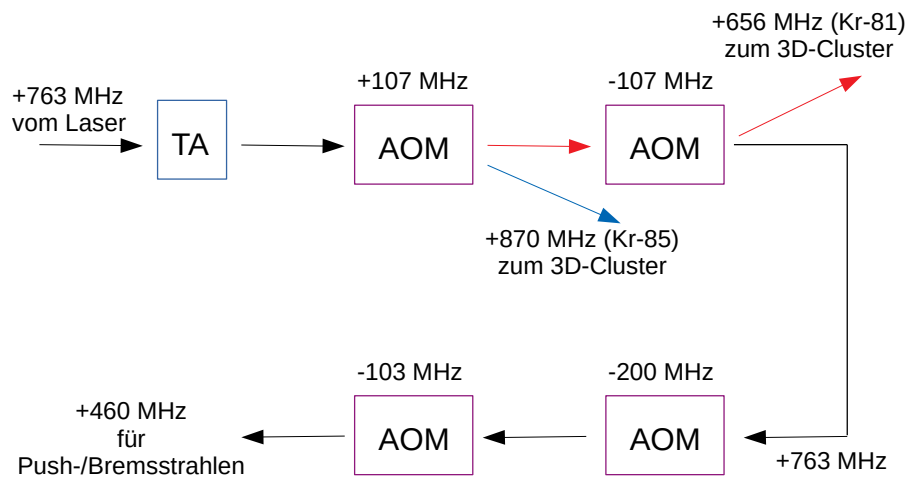


Abbildung 4.3.: Lasersystem für die Erzeugung der Kühlfrequenzen der 3D-MOT

Die AOMs werden alternierend geschaltet, so dass quasi-simultan Kr-85 (blau) und Kr-81 (rot) gefangen und detektiert werden. Der ungebeugte Strahl versorgt über zwei weitere AOMs das Push- und Bremsstrahlensystem.

#### 4.7.1. 3D-Kühlstrahlen

Der Strahl des 3D-Kühl lasers gelangt nach Verstärkung durch einen TA auf zwei hintereinander angeordnete, entgegengesetzt beugende und alternierend geschaltete akustooptische Modulatoren (AOMs) mit einer Modulationsfrequenz von 107 MHz, so dass abwechselnd ein relativ zum Laser um 107 MHz rotverschobener und ein um dieselbe Frequenz blauverschobener Strahl erzeugt wird. Mit den Frequenzen der Kühlübergänge von +870 MHz (Kr-85) und +656 MHz (Kr-81) relativ zu Kr-84 (siehe Tab. 3.2) ergeben sich die benötigten Kühlfrequenzen für die beiden Isotope bei einer Stabilisierung des Lasers auf +763 MHz zuzüglich der Verstimmung der 3D-MOT. Bei Lock-In-Betrieb für die Messung häufiger Isotope (Kap. 4.6.2) sorgen diese beiden AOMs für die Modulation des Fluoreszenzsignals. Die ungebeugten Strahlen der AOMs werden mittels zweier weiterer AOMs auf +460 MHz verschoben und versorgen das System für die Push- und Bremsstrahlen. Eine Skizze des Aufbaus ist in Abbildung 4.3 dargestellt.

Die von den AOMs gebeugten und frequenzverschobenen Strahlen werden getrennt über zwei Fasern zu einem Strahlteiler-Cluster des Typs Schäfer & Kirchhoff „Multicube“ geführt, dort miteinander und mit den über eine weitere Faser zugeführten Rückpumpfrequenzen (siehe 4.7.4) überlagert und auf die Fasern zu

#### 4. Aufbau des ATTA-Systems am ZNF

den sechs Kühlstrahl-Teleskopen der 3D-MOT verteilt.

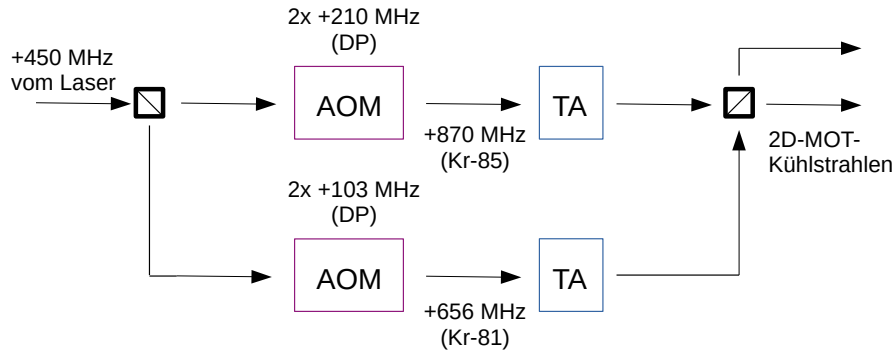
##### 4.7.2. 2D-Kühlstrahlen

Der Ausgangsstrahl des 2D-Kühl lasers wird in zwei Teilstrahlen für Kr-85 und Kr-81 aufgeteilt und die beiden Teilstrahlen mittels doppelt durchlaufener AOMs (*Double-Pass*-Konfiguration) auf die Kühlübergänge der beiden Isotope verschoben. Mit jeweils einem TA werden sie anschließend auf das erforderliche Leistungsniveau angehoben und die Ausgangsstrahlen der TAs wieder überlagert und auf die beiden Kühlstrahlen aufgeteilt. Der Aufbau ist in Abbildung 4.4a skizziert.

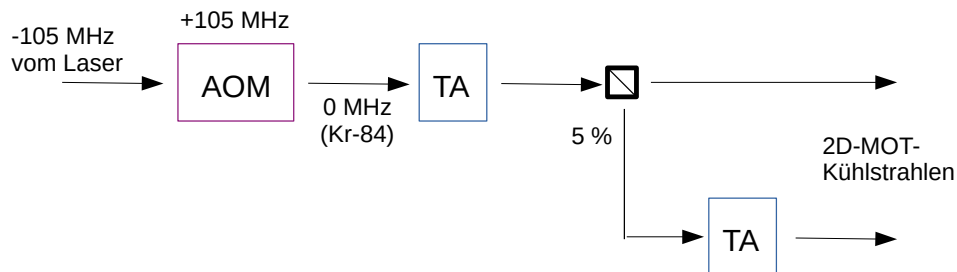
In der Praxis konnten mit diesem Aufbau aufgrund der Aufteilung der verfügbaren Leistung auf die Frequenzen für zwei Isotope und der relativ hohen Verluste in den *Double-Pass*-AOMs nur Kühlleistungen von ca. 200 mW pro Strahl und Isotop erzielt werden. Da bisher noch keine Simultanmessungen von Kr-85 und Kr-81 durchgeführt wurden, wurde der Aufbau zur Vermeidung dieser Leistungsbeschränkung auf die Erzeugung einer einzigen Kühlfrequenz reduziert. Hierzu wird der Strahl des 2D-Kühl lasers über einen nur einmal durchlaufenen AOM um +105 MHz verschoben und auf den Eingang des ersten TA geführt, der die Leistung für einen Kühlstrahl bereitstellt. Der zweite TA erhält seine Seed-Leistung aus einem abgezweigten Teilstrahl von TA Nr. 1 und versorgt den zweiten Kühlstrahl. Der AOM vor dem ersten TA ermöglicht trotz des unteren Frequenzlimits der Schwebungsstabilisierung von ca. 30 MHz die Einstellung auf Frequenzen nahe des Master-Lasers und damit des Kühlübergangs von Kr-84. Mit diesem Aufbau sind Kühlleistungen von ca. 500 mW pro Strahl erreichbar. Eine Skizze dieser Variante wird in Abbildung 4.4b gezeigt.

##### 4.7.3. Push- und Bremsstrahlen

Prinzipiell kann eine  $2D^+$ -MOT mit gleicher Verstimmung von Push-, Brems- und Kühlstrahlen arbeiten [Die+98]. Um die Verstimmung der Push- und Bremsstrahlen zwecks Optimierung und Kalibrierung dennoch individuell und unabhängig variieren zu können, werden sie auf die gleiche Weise wie die 2D-Kühlstrahlen mittels zweier *Double-Pass*-AOMs erzeugt. Da dort nur geringe Leistungen benötigt werden, entfallen die TAs, und die Eingangsleistung wird nicht durch einen separaten Laser, sondern durch die ungenutzte 0. Beugungsordnung der 3D-AOMs bereitgestellt.



(a) Konfiguration für die Simultanmessung von Kr-85 und Kr-81



(b) Konfiguration für die Messung eines Isotops mit erhöhter Kühlstrahlleistung

#### Abbildung 4.4.: Lasersystem für die Erzeugung der Kühlstrahlen der 2D-MOT

Für die Simultanmessung zweier Isotope (a) werden die Kühlfrequenzen durch zwei Double-Pass-AOMs erzeugt, nach der Verstärkung überlagert und auf die beiden Kühlstrahlen aufgeteilt. Die gleiche Anordnung wird auch für die Push- und Bremsstrahlen verwendet, wobei dort jedoch die TAs entfallen und der 450 MHz-Eingangsstrahl vom System der 3D-MOT (Abb. 4.3) stammt.

Für die Messung nur eines Isotops kann mittels Aufbau (b) die Leistung der Kühlstrahlen erhöht werden, indem jeder Kühlstrahl durch einen separaten TA versorgt wird.

#### 4.7.4. Rückpumper

Für jeden der beiden Rückpumpübergänge (vgl. Tab. 3.2) ist ein separater Laser vorhanden, der bei Kr-85/Kr-81-Simultanmessung die Frequenzen für beide Isotope erzeugt. Die Laser selbst werden auf die Rückpumpfrequenzen von Kr-85 ( $-77$  und  $-688$  MHz) stabilisiert. Die Frequenzen für Kr-81 ( $-309$  und  $-800$  MHz) werden daraus durch Verschiebung per AOMs gewonnen. Die gebeugten und ungebeugten Strahlen beider AOMs werden zu einem gemeinsamen Rückpumpstrahl überlagert, wieder in zwei Teilstrahlen aufgespalten und mit den Kühlstrahlen der 2D- und 3D-MOT überlagert. Bei nicht-simultaner Messung von Kr-83 werden die Laser auf die Kr-83-Rückpumpfrequenzen stabilisiert und die AOMs bleiben inaktiv.

#### 4.7.5. 819 nm-Anregung

Im Gegensatz zu den Kühl- und RückpumpLasern werden für die Anregung durch 819 nm für Kr-85 und Kr-81 kein gemeinsamer, sondern zwei separate Laser verwendet. Die beiden Strahlen der 819 nm-Laser werden über Fasern zu zwei nahe der 2D-MOT-Kammer montierten TAs geführt. Die Ausgangsstrahlen der TAs werden anschließend überlagert, zu einem elliptischen Profil mit Halbachsen von ca. 5 mm und 12,5 mm aufgeweitet und in das Prismensystem zur Ausleuchtung des Anregungsbereichs der 2D-MOT geleitet (siehe auch Kap. 6.4). Da die TA-Strahlen in dieser Anordnung keine Fasern passieren müssen, steht hier nahezu die gesamte Ausgangsleistung der TAs zur Verfügung. Um die Stabilisierung auch auf den Übergang von Kr-84 zu ermöglichen, wird der vom 819 nm-Master-Laser kommende Strahl für die Schwebungsstabilisierung mittels AOM um  $+200$  MHz verschoben.



## 5. Effizienz des ATTA-Systems

Mit dem in Kap. 4 beschriebenen Aufbau ist es gelungen, erstmalig ein rein optisch arbeitendes ATTA-System für Krypton in Betrieb zu nehmen und die Funktionsfähigkeit dieses Konzepts zu demonstrieren.

In diesem Kapitel werden verschiedene, mit variierten Parametern durchgeführten Messungen vorgestellt und analysiert. Den Schwerpunkt bilden Fluoreszenzmessungen einer Kr-84-Vielatom-MOT mit dem Fokus auf der Bestimmung solcher Charakteristika der Anlage, die einen unmittelbaren Einfluss auf die Gesamteffizienz haben, d. h. auf die bei gegebener Isotopenkonzentration erzielbare Laderate der 3D-MOT, die entscheidend ist für die praktische Einsetzbarkeit zur Messung seltener Isotope innerhalb akzeptabler Messzeiten. Ferner wurden – unter reduziertem Krypton-Partialdruck und gezielter Absenkung der Anregungseffizienz – einzelne Kr-84-Atome gefangen.

Die Einzelatom-Messungen dienten zunächst der Überprüfung der grundsätzlichen Eignung des Detektionssystems für den Einzelatom-Nachweis und der Bestimmung des Signal-Rauschverhältnisses. Daneben konnte mit Hilfe der gemessenen Fluoreszenz pro Atom eine zumindest grobe Kalibrierung der Vielatom-Messungen auf die Atomzahl erfolgen.

Die Messungen waren bereits Bestandteil einer Veröffentlichung unter Mitwirkung des Autors dieser Arbeit [Koh+14], dienten zum damaligen Zeitpunkt aber vorrangig dem „*Proof of Principle*“ eines Krypton-ATTA-Systems mit vollständig optischer Anregung. Hier sollen die Ergebnisse nun quantitativ ausgewertet werden.

### 5.1. Parameter und Messverfahren

Als Probengas wurde kommerziell erhältlich Krypton der Reinheit 4.0 verwendet. Die VUV-Lampen wurden mit Krypton 4.7 unter einem Arbeitsdruck von  $2,05 \pm 0,05$  mbar betrieben. Drei der acht vorhandenen Lampen waren zum Zeitpunkt der Messungen nicht betriebsbereit, so dass jeweils fünf Lampen aktiv waren.

Für den Anregungslaser wurde das Prismensystem mit  $8 \times 3$  Strahlen verwen-

## 5. Effizienz des ATTA-Systems

	Senkrecht	Parallel
Magnetfeldgradient (mT/cm)	0,8	1,75
Spulenstrom (A)	2,5	
Verstimmung	$-1,5 \gamma$	
Kühlstrahlleistung (mW)	20	20
Kühlstrahlradius (mm)	13,5	

Tabelle 5.1.: **Konfiguration der 3D-MOT**

In der Tabelle sind die wichtigsten Betriebsparameter der 3D-MOT zusammengefasst. Dieser Parametersatz wurde durch Optimierung auf ein maximales Fluoreszenzsignal ermittelt und für alle Messungen beibehalten. „Senkrecht“ und „Parallel“ ist bezogen auf die Symmetrieachse des Feldspulenpaares. Der Strahlradius ist durch den Intensitätsabfall auf  $1/e^2$  definiert.

det. Es ist allerdings zu einem späteren Zeitpunkt festgestellt worden, dass die Strahlradien nicht die vorgesehenen Abmessungen von  $12,5 \text{ mm} \times 5 \text{ mm}$  besaßen, sondern mit ca.  $3,9 \text{ mm} \times 1,6 \text{ mm}$  erheblich kleiner ausfielen. Die Anregungs- und Kühllaser wurden auf die entsprechenden Übergänge von Kr-84 abgestimmt.

Die Parameter der 3D-MOT wurden vorab auf maximale MOT-Fluoreszenz optimiert und für alle Messungen beibehalten. In Tabelle 5.1 sind die Werte zusammengefasst.

Für die ersten Fluoreszenzmessungen einer Vielatom-MOT wurde die in Kap. 4.6.2 beschriebene Photodiode mit Lock-In-Verstärker verwendet. Die hier diskutierten Messungen wurden mit einem Verstärkungsfaktor von  $a = 1\,000$  und einer Integrations-Zeitkonstanten von 300 ms durchgeführt. Die Lock-In-Frequenz betrug  $f_L = 130 \text{ Hz}$ . In der Detektionsoptik waren zwei 810 nm-Bandpassfilter Thorlabs FB810-10 mit einer Transmission von  $\eta_F = 0,55$  je Filter bei 811 nm eingesetzt. Ein weiterer Filter des selben Typs war direkt vor der Photodiode montiert. Mit dem Konversionsfaktor der Photodiode  $C_{pd} = 7,3 \cdot 10^{-12} \text{ Vs}$  aus Gl. (4.4) und der Abbildungseffizienz der Detektionsoptik (Kap. 4.6.1) kann der Photonenfluss der MOT-Fluoreszenz  $\phi$  aus der Ausgangsspannung des Lock-In-Verstärkers  $U$  berech-

## 5.2. Kalibrierung mit Ladekurve und Einzelatomdetektion

net werden:

$$\phi(U) = 2 \cdot \frac{\phi_{pd}}{\eta_{\text{Optik}} \cdot \eta_F^3 \cdot a} \quad (5.1)$$

$$= 2 \cdot \frac{U}{C_{pd}} \cdot \frac{1}{\eta_{\text{Optik}} \cdot \eta_F^3 \cdot a} \quad (5.2)$$

$$= U \cdot 1,4 \cdot 10^{11} \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1} \quad (5.3)$$

Der Faktor 2 korrigiert die durch die Mittelung über die aktive und die inaktive Fluoreszenzphase beim Lock-In-Verfahren bedingte Halbierung des Signals. Die Anzahl der gefangenen Atome  $N$  ergibt sich schließlich aus der Fluoreszenz und der Streurrate  $\Gamma$ :

$$N(U) = \frac{\phi(U)}{\Gamma} \quad (5.4)$$

Da die gefangenen Atome langsam sind und deren Abstand vom Fallenzentrum gering bleibt, kann zur Bestimmung der Streurrate  $v = 0 \text{ ms}^{-1}$  und  $B = 0 \text{ T}$  angenommen werden. Die Streurrate hängt dann nur von den bekannten Parametern Verstimmung  $\delta$  und Intensität  $I$  der Kühlstrahlen ab. Für einen Kühlstrahl mit gauß'schem Intensitätsprofil, einem  $1/e^2$ -Radius  $R$  und der Leistung  $P$  ist die Intensität im Zentrum

$$I_0 = \frac{2P}{\pi R^2}. \quad (5.5)$$

Die für die Streurrate maßgebliche Intensität ist die Summe der zentralen Intensitäten der sechs Kühlstrahlen  $I = 6 I_0$ . Mit den Parametern in Tabelle 5.1 ergeben sich eine Gesamtintensität von  $I = 30 I_{\text{sat}}$  und eine Streurrate von  $\Gamma = 1,3 \cdot 10^7 \text{ s}^{-1}$ . Nach (5.1) und (5.4) entspricht das gemessene Fluoreszenzsignal in dieser Konfiguration etwa 11 000 gefangenen Atomen pro Volt.

## 5.2. Kalibrierung mit Ladekurve und Einzelatomdetektion

### 5.2.1. Ladekurve

Zur Beurteilung der Effizienz des Systems ist nicht die stationäre Anzahl der in der 3D-MOT gefangenen Atome, sondern der von der 2D-MOT generierte Atomfluss relevant, der sich in der Laderate der 3D-MOT manifestiert. Daher ist eine Kalibrierung des stationären Fluoreszenzsignals auf die Laderate erforderlich.

## 5. Effizienz des ATTA-Systems

Magnetfeldgradient (mT/cm)	0,7
Spulenstrom (A)	5
Verstimmung	$-2,5 \gamma$
Kühlstrahlleistung (mW)	250
819 nm-Leistung (W)	1,4
Kr-Druck (mbar)	$5 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 5.2.: **Standardkonfiguration der 2D-MOT**

Die hier zusammengestellten Betriebsparameter der 2D-MOT wurden, sofern nicht explizit andere Einstellungen angegeben sind, für alle hier diskutierten Messungen verwendet.

Hierzu wurde der Zeitverlauf der 3D-MOT-Fluoreszenz nach dem Einschalten des Magnetfelds mit einer Abtastrate von 100 Hz aufgezeichnet. Die Betriebsparameter der 2D-MOT sind in Tabelle 5.2 aufgeführt und gelten, falls nicht ausdrücklich anders angegeben, für alle in dieser Arbeit diskutierten Messungen.

Die Messwerte der Photodiodenspannung wurden nach Gl. (4.4) unter Einbeziehung des Lock-In-Verstärkungsfaktors auf den Photonenfluss auf der aktiven Fläche der Photodiode skaliert. Anschließend wurde Gleichung (2.37) mit den Verlustparametern  $a$  für Stöße mit dem Restgas in der Kammer und  $b$  für Stöße zwischen gefangenen Atomen auf die Messwerte gefittet. Die Fitfunktion wurde außerdem um den Einschaltzeitpunkt  $t_0$  verschoben und um einen konstanten Untergrund  $\phi_0$  ergänzt, so dass insgesamt fünf Fitparameter  $a$ ,  $b$ ,  $t_0$ ,  $\phi_0$  und  $L_\phi$  (die auf den Photonenfluss normierte Laderate) berechnet wurden. Um die Verfälschung aufgrund der Verzögerung durch die Integrationszeit des Lock-In-Verstärkers zu reduzieren, wurden die Datenpunkte in der Umgebung des Einschaltzeitpunkts im Intervall  $[t_0 - 0,5 \text{ s}, t_0 + 1,5 \text{ s}]$  vom Fit ausgenommen.

Die Messdaten und die gefittete Ladefunktion sind in Abbildung 5.1 und die berechneten Parameter in Tabelle 5.3 dargestellt.

Mit Hilfe der Parameter  $a$  und  $b$  kann nun mit Gleichung (2.39) eine Kalibrierungsfunktion für die Bestimmung der Laderate aus der MOT-Fluoreszenz im stationären, geladenen Zustand gebildet werden:

$$L_\phi = a\phi_{pd} + b\phi_{pd}^2 \quad (5.6)$$

Da  $a$  proportional zum Druck des Hintergrundgases in der 3D-Kammer ist und dieser wiederum annähernd linear vom 2D-Druck abhängt, muss ein Korrekturfaktor  $p/p_0$  mit  $p_0 = 5 \cdot 10^{-6}$  mbar für den 2D-Druck eingefügt werden. Benötigt wird

## 5.2. Kalibrierung mit Ladekurve und Einzelatomdetektion

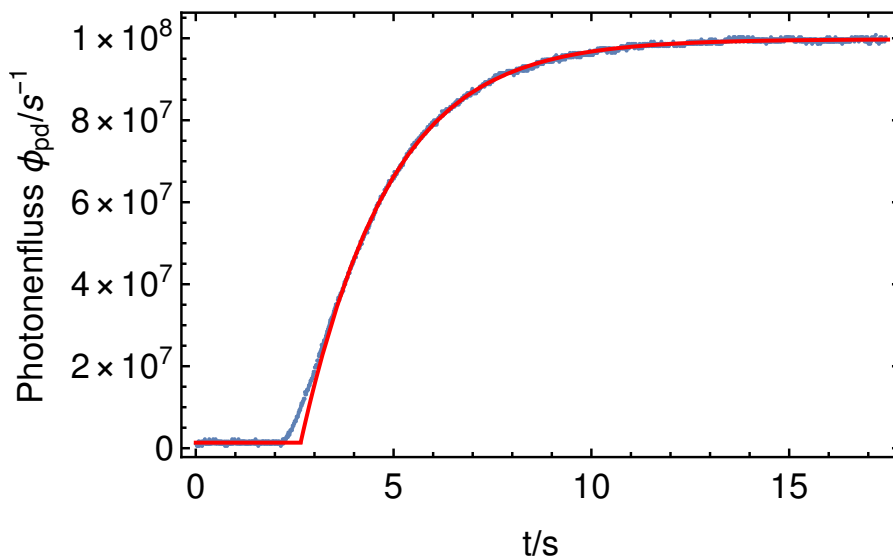


Abbildung 5.1.: **Ladekurve nach dem Einschalten der 3D-MOT**

Der gemessene Fluss der Fluoreszenzphotonen ist blau dargestellt. Die rote Kurve zeigt den Fit auf die Lösung der Differentialgleichung für das Laden einer MOT (Gl. 2.37). Der Bereich um den Einschaltzeitpunkt wurde vom Fit ausgespart, um den Einfluss der Einschaltverzögerung durch die Integrationszeit des Lock-In-Verstärkers zu reduzieren. Die berechnete Laderate beträgt je nach Kalibriermethode des Detektionssystems zwischen 6 600 und 31 000 Atomen/s.

Linearer Verlustkoeffizient $a$ ( $\text{s}^{-1}$ )	$0,390 \pm 0,001$
Quadratischer Verlustkoeffizient $b$	$5,07 \cdot 10^{-10} \pm 1,1 \cdot 10^{-11}$
Einschaltzeit $t_0$ (s)	$2,65 \pm 0,002$
Untergrund $\phi_0$ ( $\text{s}^{-1}$ )	$1,35 \cdot 10^6 \pm 5 \cdot 10^{-9}$
Normierte Laderate $L_\phi$ ( $\text{s}^{-2}$ )	$4,32 \cdot 10^7 \pm 1 \cdot 10^{-9}$

Tabelle 5.3.: **Berechnete Parameter aus der Ladekurve**

Die Tabelle zeigt die aus der in Abbildung 5.1 dargestellten Ladekurve durch Anpassung an die Ladefunktion berechneten Fitparameter. Da die Messwerte auf den Photonenfluss und nicht die Anzahl der gefangenen Atome normiert sind, besitzt der Parameter  $L_\phi$  die Einheit  $\text{s}^{-2}$  statt  $\text{s}^{-1}$  und  $b$  keine Einheit statt  $\text{s}^{-1}$ .

## 5. Effizienz des ATTA-Systems

schließlich noch ein Skalierungsfaktor  $K$  zur Umrechnung von  $L_\phi$  in die tatsächliche Laderate  $L$  in Atomen/s.  $K$  ist identisch mit dem Quotient aus der Anzahl gefangener Atome und dem auf die Photodiode projizierten Photonenfluss, der sich aus den Gleichungen (5.1) und (5.4) ergibt. Da die Normierung der Messwerte auf den Photonenfluss  $\phi_{pd}$  den Lock-In-Verstärkungsfaktor bereits enthält, ist

$$K = \frac{2}{\eta_{\text{Optik}} \cdot \eta_F^3 \cdot \Gamma} \quad (5.7)$$

$$= 7,7 \cdot 10^{-5} \text{ s}. \quad (5.8)$$

Da die MOT im Lock-In-Betrieb nur während der halben verfügbaren Zeit geladen wird, ist zur Bestimmung der Laderate im kontinuierlichen Betrieb, respektive des Atomflusses der 2D-MOT, ein weiterer Faktor 2 erforderlich. Die Kalibrierfunktion für die Laderate lautet damit:

$$L(\phi_{pd}) = 2K \cdot \left( \frac{p}{p_0} a \phi_{pd} + b \phi_{pd}^2 \right) \quad (5.9)$$

Für die gemessene Ladekurve ergeben sich damit eine Laderate von 6 600 Atomen/s und eine maximale Anzahl von 15 000 Atomen in der maximal geladenen MOT.

Bezüglich der ermittelten Verlustkoeffizienten  $a$  und  $b$  ist anzumerken, dass die darin enthaltenen Stoßquerschnitte (vgl. Kapitel 2.7) in diesem Fall verschiedene Werte annehmen. Der Stoßquerschnitt zwischen gefangenen metastabilen  $\text{Kr}^*$ -Atomen und den  $\text{Kr}$ -Atomen des Hintergrundgases wird durch die kurzreichweitige Van der Waals-Wechselwirkung bestimmt, die gemäß einer  $1/r^6$ -Charakteristik mit der Entfernung abfällt. Bei den internen Stößen zwischen  $\text{Kr}^*$ -Atomen befinden sich jedoch beide Stoßpartner in einem resonanten Lichtfeld, wodurch eine Dipol-Dipol-Wechselwirkung mit einem  $1/r^3$ -Potenzial der Form

$$\frac{|d|^2}{4\pi\epsilon_0 r^3} \quad (5.10)$$

und einer erheblich größeren Reichweite induziert wird [SCF92]. Hierbei ist  $d$  das Dipol-Matrixelement des Übergangs.

In MOT-Systemen, die mit Atomen im Grundzustand arbeiten, werden die Stoßquerschnitte durch dieses Potenzial bestimmt und erreichen z. B. bei Rubidium Werte in der Größenordnung von  $100 \text{ nm}^2$  [CRU06][Die+98], während der Van der Waals-Querschnitt zwei Größenordnungen darunter liegt. Bei einer Krypton-MOT sind nur die metastabilen Atome mit den Kühlstrahlen resonant, nicht aber das

## 5.2. Kalibrierung mit Ladekurve und Einzelatomdetektion

fast ausschließlich aus Grundzustandsatomen bestehende Hintergrundgas, so dass der resonante induzierte Prozess nur bei den internen Stößen auftritt.

Für eine Berechnung der Stoßquerschnitte sind die aus der Messung gewonnenen Verlustkoeffizienten allerdings nicht geeignet, da sich dort die Effekte von 2D- und 3D-MOT mischen. Bestenfalls könnte eine Art effektiver Stoßquerschnitt angegeben werden, der aber keine physikalische Bedeutung hat.

### 5.2.2. Messung von Einzelatomen

Bisher wurde zur Bestimmung des Skalierungsfaktors  $K$  auf theoretische Werte für die Abbildungseffizienz der Detektionsoptik und für die Streurrate zurückgegriffen.  $K$  kann jedoch auch durch Einzelatommessungen kalibriert werden, bei denen die Fluoreszenz diskrete Werte annimmt und die Atomzahl direkt abzählbar ist.

Abbildung 5.2 zeigt eine mit dem Einzelphotonendetektor durchgeführte Messung der Fluoreszenz einzelner gefangener Kr84-Atome und ein Histogramm der Verteilung der Photonenzählrate. Die Zählrate beträgt  $Z = 5\,100$  Photonen/s für jedes gefangene Atom. Die Halbwertsbreite des Untergrundrauschens (FWHM) liegt bei 1 650 Photonen/s, womit noch eine zuverlässige Diskriminierung der Zustände möglich ist. Es konnten bis zu fünf gleichzeitig in der Falle befindlichen Atome aufgelöst werden.

Der Atomfluss aus der 2D-MOT wurde für diese Messung durch Druckverminderung und Reduktion der Anregungsleistung stark reduziert. Die anderen Betriebsparameter entsprachen jenen bei der Aufnahme der Ladekurve.

Im Gegensatz zur Photodiode besitzt der Einzelphotonendetektor keinen separaten Filter vor der sensitiven Fläche, so dass hier nur die beiden Filter in der Abbildungsoptik wirksam sind. Um aus der gemessenen Zählrate pro Atom einen kalibrierten Faktor  $K$  für die Photodiode zu berechnen, muss daher noch durch die Transmission des Filters dividiert werden:

$$K = \frac{1}{Z \cdot \eta_F} \quad (5.11)$$

$$= 3,6 \cdot 10^{-4} \text{ s} \quad (5.12)$$

Mit diesem Wert von  $K$  erhält man für die Ladekurve eine Laderate von 31 000 Atomen/s und eine Anzahl von maximal 70 000 gefangenen Atomen.

Für die relativ große Diskrepanz – ein Faktor 4,7 – zwischen dem theoretischen und dem durch Einzelatommessung ermittelten Kalibrierwert können mehrere Effekte verantwortlich sein:

## 5. Effizienz des ATTA-Systems

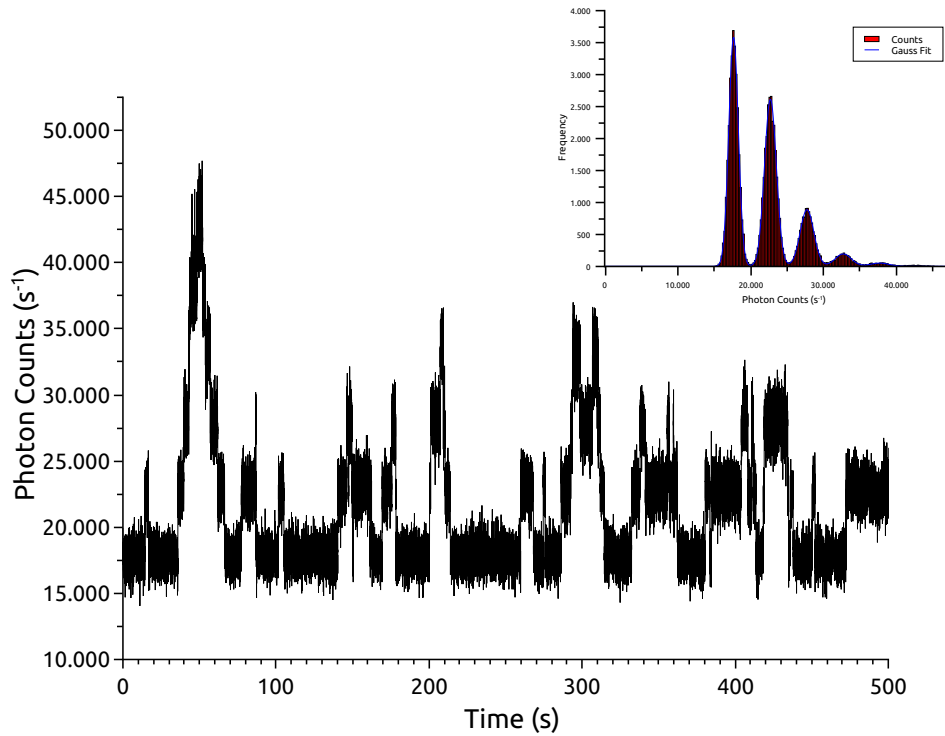


Abbildung 5.2.: **MOT-Fluoreszenz beim Fangen einzelner Kr84-Atome**

Für diese Messung wurde die Einfangrate durch Reduktion des Kr-Drucks in der 2D-MOT-Kammer und der Leistung des 819 nm-Anregungslasers stark herabgesetzt. Die am Einzelphotonendetektor gemessene Fluoreszenz beträgt 5 100 Photonen/s pro Atom. Im oben rechts eingesetzten Histogramm ist der diskrete Charakter der Zählratenverteilung gut zu erkennen. Der Hauptpeak bei  $17\,500\text{ s}^{-1}$  repräsentiert das Hintergrundlicht, die weiteren Peaks Zustände mit ein bis vier gefangenen Atomen.



- Die Photodiode selbst und der Transimpedanzverstärker waren nicht kalibriert
- Die aktive Fläche des Einzelphotonendetektors ist erheblich kleiner als die der Photodiode, so dass die MOT möglicherweise nicht vollständig auf dem Sensor abgebildet wurde
- Eventuelle Staubpartikel auf der Detektionsoptik können aufgrund der unterschiedlichen Sensorgröße verschieden starke Auswirkungen auf die beiden Sensoren haben

Für die im nächsten Abschnitt vorgestellten Messungen wurde für die Berechnung von Atomzahl und Fluss der aus der Einzelatommessung abgeleitete Kalibrierfaktor verwendet.

## 5.3. Messungen mit Variation von Parametern

Bei den folgenden Messungen wurde die Fluoreszenz der gefangenen Atome in der maximal geladenen 3D-MOT gemessen. Sobald sich das Fluoreszenzsignal nach dem Einschalten des Magnetfelds auf einem stationären Wert stabilisiert hatte, wurden für jeden Messpunkt 2046 Werte mit einem Speicheroszilloskop Hameg HM-507 bei einer Abtastrate von 400 Hz aufgenommen und anschließend gemittelt. Die Berechnung des Flusses erfolgte nach der in Abschnitt 5.2 vorgestellten Methode mit den aus der Ladekurve ermittelten Verlustkoeffizienten.

### 5.3.1. Variation der 819 nm-Anregungsleistung

Abbildung 5.3 zeigt eine Messung von Kr-84 unter Variation der Leistung des 819 nm-Lasers. Die Einstellung der 2D-MOT entsprach Tabelle 5.2, jedoch betrug der Druck in der 2D-MOT  $6,2 \cdot 10^{-6}$  mbar. Da die 819 nm-TAs nur eine maximale Leistung von 1 W besitzen, wurde für höhere Leistungen der zweite TA dazugeschaltet.

Bei der maximalen Anregungsleistung von 1,5 W lag die Laderate, die als identisch mit dem von der 2D-MOT generierten Atomfluss angenommen wird, bei knapp 40 000 Kr-84/s. Die Kurve zeigt den typischen Verlauf einer Sättigungskurve mit einer leicht erhöhten Steigung ab  $P_{819} = 1$  W, die sich durch eine nicht exakte Überlagerung der beiden TA-Strahlen erklären lässt, so dass mit dem zweiten TA zusätzliche Raumbereiche mit geringerer Sättigung abgedeckt werden.

## 5. Effizienz des ATTA-Systems

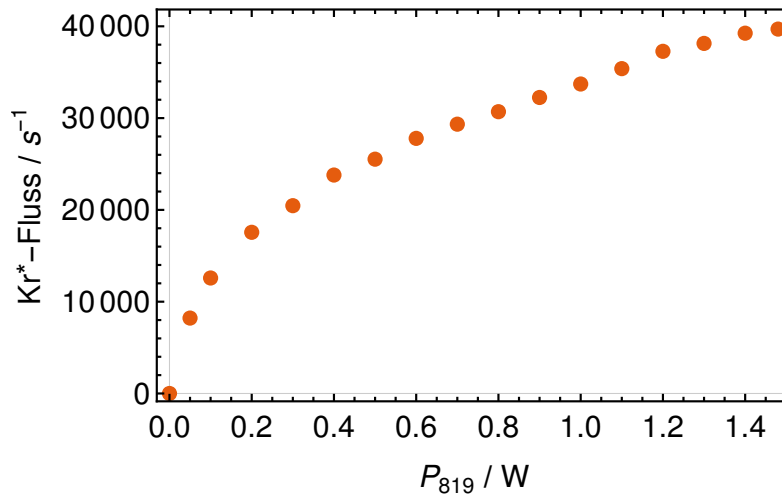


Abbildung 5.3.: **Kr-84-Fluss bei Variation der 819 nm-Leistung**

Das leichte Anwachsen der Steigung ab 1 W Anregungsleistung resultiert aus dem Zuschalten des zweiten TAs, dessen Strahl nicht exakt mit dem Strahl des anderen TAs überlagert war.

### 5.3.2. Variation des Feldgradienten

Bei der nächsten Messung wurde der Magnetfeldgradient in einem Bereich von 0 bis etwa 1 mT/cm, entsprechend einem Spulenstrom bis 7,5 A, variiert. Der 2D-MOT-Druck lag wieder bei  $6,2 \cdot 10^{-6}$  mbar. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.4 dargestellt.

Das Magnetfelddesign der 2D-MOT war eigentlich für den Betrieb mit einem Gradienten von 1,45 mT/cm bei einem Spulenstrom von 11,2 A ausgelegt. Dieser konnte jedoch aufgrund von zu gering dimensionierter Kühlkapazität der Spulenkörper nicht erreicht werden, ohne die Integrität der Wicklungen zu gefährden.

Unter dieser Einschränkung konnte ein Fluss von ca. 50 000 Atomen/s erreicht werden.

### 5.3.3. Variation des 2D-MOT-Kammerdrucks

Bei der dritten, in Abbildung 5.5 gezeigten Messung, wurde der Kr-Druck in der 2D-MOT-Kammer variiert. Die 819 nm-Anregungsleistung betrug 1,4 W. Zusammen mit dem Fluss wird auch die Anzahl der Atome in der MOT dargestellt.

Hier ist deutlich der Einfluss des Hintergrunddrucks der 3D-MOT auf die Lebensdauer der gefangenen Atome erkennbar, denn die Atomzahl erreicht ihr Maximum bereits bei  $8 \cdot 10^{-6}$  mbar, während der Fluss aus der 2D-MOT bis  $2 \cdot 10^{-5}$  mbar

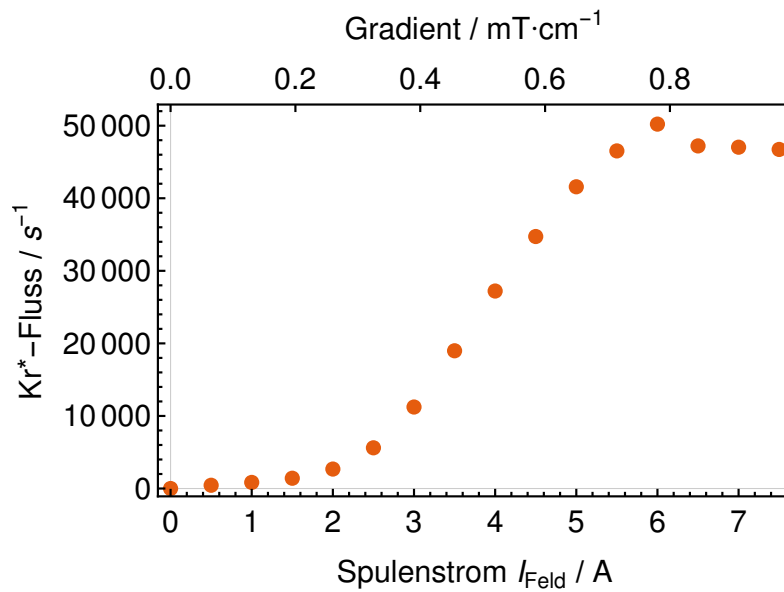


Abbildung 5.4.: **Kr-84-Fluss bei Variation des Magnetfeldgradienten**

Bei der gezeigten Messung wurde der Spulenstrom der 2D-MOT im Bereich von 0 bis 7,5 A durchfahren. Der Abfall ab 6,5 A und das folgende Plateau sind vermutlich auf Instabilitäten der VUV-Lampen zurückzuführen und konnten in späteren – allerdings undokumentierten – Versuchen nicht reproduziert werden. Dennoch zeichnet sich ab etwa 5 A der Beginn einer Sättigung des Flusses ab.

## 5. Effizienz des ATTA-Systems

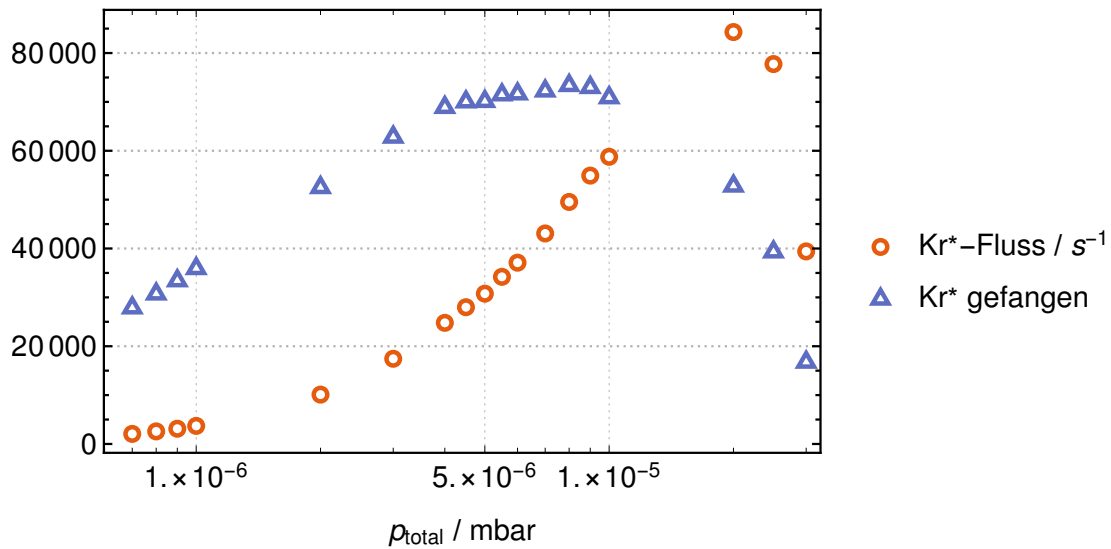


Abbildung 5.5.: **Kr-84-Fluss und gefangene Atome bei Variation des Drucks in der 2D-MOT-Kammer**

Beim Durchfahren des Kr-Drucks in der 2D-MOT-Kammer liegt das Maximum des Atomflusses bei ca.  $2 \cdot 10^{-5}$  mbar. Dort entspricht die mittlere freie Weglänge für langsame Atome etwa dem zurückzulegenden Weg durch den Kühlbereich der 2D-MOT. Die Anzahl der gefangenen Atome fällt schon bei deutlich geringerem Druck ab, da der Druck in der 3D-MOT an den 2D-Druck gekoppelt ist und die Lebensdauer der Atome in der MOT begrenzt.

#### 5.4. Bedeutung der Ergebnisse für das ATTA-Konzept

weiter ansteigt. Das Maximum des Flusses mit etwa 84 000 Atomen/s ist erreicht, sobald die mit steigendem Druck in der 2D-MOT geringer werdende mittlere freie Weglänge die Größenordnung des in der Kammer zurückzulegenden Weges von der Anregung bis zur differentiellen Pumpstrecke erreicht. Der Stoßquerschnitt für elastische Stöße von Kr/Kr\* beträgt  $\sigma_e \approx 0,42 \text{ nm}^2$  und für inelastische Stöße mit Austausch des metastabilen Zustands, die aufgrund der im Allgemeinen niedrigeren Geschwindigkeit eines fangbaren Kr\* im Vergleich zum Stoßpartner ebenfalls einen Verlustprozess darstellen,  $\sigma_m \approx 0,75 \text{ nm}^2$  [YYD02]. Die mittlere Stoßzeit bei einem Druck  $p$  und der mittleren thermischen Geschwindigkeit  $v_{th}$  beträgt für ein Atom mit  $v \ll v_{th}$

$$\bar{t} = \frac{k_B T}{(\sigma_e + \sigma_m) \cdot p \cdot v_{th}}. \quad (5.13)$$

Bei  $2 \cdot 10^{-5}$  mbar und 293 K beträgt die mittlere Stoßzeit etwa 4 ms, was für ein langsames Atom mit  $v \approx 20 \text{ m/s}$  einer Wegstrecke von 8 cm entspricht und damit recht genau in der Größenordnung der 2D-MOT-Abmessungen liegt.

### 5.4. Bedeutung der Ergebnisse für das ATTA-Konzept

Die geringe Laderate von weniger als 100 000 Kr-84-Atomen pro Sekunde liegt um Größenordnungen niedriger als es für eine in angemessener Zeit durchführbare Konzentrationsmessung der seltenen Isotope erforderlich wäre. Auch bei Extrapolation auf optimale Parameter ( $I_{Feld} = 7,5 \text{ A}$ ,  $p = 2 \cdot 10^{-5}$  mbar) ist ein Fluss von unter 200 000/s zu erwarten. Für eine noch akzeptable statistische Unsicherheit von 10 % müssten bei Kr-85-Konzentrationsmessungen mindestens 100 Atome gefangen werden. Setzt man eine maximale Messdauer von 10 Stunden an, benötigt man eine Kr-85-Laderate von etwa  $3 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ , was bei angenommener isotopenunabhängiger Effizienz der Anlage einer Kr-84-Laderate in der Größenordnung von  $10^8 \text{ s}^{-1}$  entspräche.

Angesichts dieser immensen Diskrepanz zwischen Zielsetzung und Ergebnis stellt sich die Frage, ob die geringe Effizienz des Systems das Resultat einer einzelnen oder auch mehrerer insuffizienter Komponenten ist, ob die Teilsysteme unzureichend aufeinander abgestimmt sind oder ob das Konzept, auf dem das System basiert, grundsätzlich überdacht werden muss.

Da der Aufbau in seiner bisherigen Form keinerlei Diagnosemöglichkeiten der einzelnen Schritte von der optischen Anregung bis zur Detektion bot, war eine substantielle Analyse der Ursachen nicht unmittelbar möglich. Insbesondere war

## 5. Effizienz des ATTA-Systems

weder die Effizienz der Anregung bekannt noch der geometrische Bereich, in dem einerseits signifikante Anregung stattfindet und aus dem heraus gleichzeitig genug Atome gefangen werden können. Ebenso unbekannt war der Einfluss des Quenching der metastabilen Atome, das von den VUV-Lampen ausgeht. Um ein tieferes Verständnis für diese Prozesse zu gewinnen, wurde ein mathematisches Modell entwickelt, das den Prozess der optischen Anregung einschließlich Quenching und des Einfangs in der 2D-MOT bei Variation der relevanten Parameter quantitativ simulieren kann. Dieses Modell und dessen praktische Realisierung wird im folgenden Kapitel vorgestellt.

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

Zur Berechnung der Anregungs- und Einfangdynamik der Kr-Atome in der 2D-MOT wurde eine Monte-Carlo-Simulation entwickelt, die den Aufbau des ATTA-Experiments nachbildet und es erlaubt, die relevanten Parameter der 2D-MOT und der Anregung beliebig zu variieren und für verschiedene mögliche Konfigurationen der Anlage den erreichbaren Fluss von metastabilen Atomen zu ermitteln. Durch eine Aufteilung des Kammervolumens der 2D-MOT in einzelne Rasterelemente kann zudem ermittelt werden, aus welchen Regionen der Kammer die Atome bevorzugt gefangen werden.

Bei einer Monte-Carlo-Simulation wird eine Anzahl von Testteilchen mit zufälligen Startparametern generiert, die anschließend ein mathematisches Modell des zu simulierenden Prozesses durchlaufen. Jedes Teilchen repräsentiert dabei eine Klasse realer Teilchen mit ähnlichen Anfangsbedingungen. Bei einer genügend großen Anzahl von Testteilchen wird der Raum der möglichen Anfangsbedingungen ausreichend abgedeckt, so dass das Ergebnis der Simulation auf die realen Verhältnisse übertragen werden kann.

In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Aspekte und Komponenten der Simulation diskutiert. Diese umfassen die Punkte:

- Modellierung der Kammergeometrie
- Prinzip der Abrasterung des Modellraums mit Anregungsregionen
- Erzeugung der Testteilchen
- Modellierung der Lichtfelder von Lasern und Lampen
- Simulation der Trajektorien in der 2D-MOT

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

- Simulation der Anregung in den metastabilen Zustand und der abregenden Prozesse
- Auswertung der Simulationsdaten

Realisiert wurden die Berechnungen in `Mathematica 11.3`, wobei intensiv von der Möglichkeit paralleler Berechnungen Gebrauch gemacht wurde. Das verwendete Script für die Simulation befindet sich im Anhang.

### 6.1. Geometrie der Kammer

Der geometrische Bereich der Simulation umfasst einen Kubus mit einer Kantenlänge von 10 cm, wobei die  $z$ -Koordinate die Vertikale darstellt und die  $y$ -Achse parallel zum Lichtfeld des 819 nm-Anregungslasers verläuft. Die obere Deckfläche befindet sich bei  $z = 0$  und bildet die Unterkante des Deckels der Vakuumkammer, so dass die  $z$ -Koordinate im gesamten Simulationsbereich negativ ist.

Der Eingang zur differentiellen Pumpstrecke liegt bei  $z = -8,5$  cm. Bei der Pumpstrecke selbst wird nur die erste Stufe in Form eines Zylinders mit einem Durchmesser von 1 mm und einer Höhe von 6 mm berücksichtigt, da die Durchmesser der folgenden Stufen sich schrittweise so erweitern, dass sie den Durchgang eines Teilchens, das die erste Stufe ohne Wandberührung passiert hat, nicht behindern.

### 6.2. Abrasterung über Anregungszonen

Im ATTA-Aufbau befindet sich der Kühlbereich der 2D-MOT im Anregungsbereich für die Erzeugung von metastabilem  $\text{Kr}^*$ . Ein simuliertes Kr-Atom darf weder gekühlt werden, bevor es im metastabilen Zustand ist, noch darf sich dessen Besetzungswahrscheinlichkeit während der Kühlung erhöhen, obwohl dort prinzipiell Atome angeregt werden. Es wird also ein definierter Zeitpunkt benötigt, an dem ein Atom als metastabil gilt. Eine naheliegende Lösung wäre, die Anregungswahrscheinlichkeit beim Eintritt in den Kühlbereich als Maß zu betrachten und das Atom nach erfolgreichem Einfang mit dieser Gewichtung zu zählen. Allerdings erhöht sich die Besetzung des metastabilen Zustands mit der Zeit, so dass man davon ausgehen muss, dass eine nicht zu vernachlässigende Anzahl  $\text{Kr}^*$  erst innerhalb des Kühlbereichs entstehen und mit dieser Methode ignoriert würden. Aus diesem Grund wurde ein Rasterverfahren entwickelt, in dem der Anregungsbereich jeweils auf eine kleine Region begrenzt wird und dadurch den Zeitpunkt definiert,



ab dem ein Atom als angeregt betrachtet wird. Zudem bietet das Verfahren die Möglichkeit, die räumliche Verteilung des Ursprungs der gefangenen Atome in der 2D-MOT-Kammer zu ermitteln.

Während eines Simulationsdurchlaufs wird der Modellraum in quaderförmige Rasterelemente aufgeteilt, die als jeweils aktuelle Anregungszone fungieren. Die Abrasterung erfolgt in der  $(x, z)$ -Ebene. In der Regel beträgt die Kantenlänge eines Elements und damit auch die Schrittgröße der Rasterung 2,5 mm. In  $y$ -Richtung umfasst ein Element die gesamte Ausdehnung des Modellraums. Durch Wiederholung der Simulation für alle Rasterelemente wird sukzessive der gesamte Modellraum abgedeckt.

Obwohl die Abrasterung gewissermaßen als virtuelles Verschieben eines 819 nm-Anregungslasers verstanden werden kann, wird sie in der Simulation durch selektives Einblenden der VUV-Strahlung realisiert. Die 819 nm-Photonen haben potenziell Einfluss auf Quenchvorgänge und sollen deshalb auch außerhalb des Anregungsbereichs aktiv sein, sofern das im nachgebildeten Experiment auch der Fall ist. Der simulierte 819 nm-Laser kann dennoch auch synchron mit der Rasterung verschoben werden (einige Messungen wurden auf diese Art durchgeführt und können so nachvollzogen werden). In der Regel ist das 819 nm-Lichtfeld jedoch stationär, wie z. B. bei der Verwendung des mehrfach reflektierenden Prismensystems.

### 6.3. Erzeugung der Testteilchen

Zu Beginn jedes Simulationsdurchgangs wird mithilfe von Pseudozufallszahlen eine Anzahl Testteilchen räumlich gleichverteilt im aktuellen Rasterelement erzeugt. Die Anfangsgeschwindigkeiten  $v_{0,x}, v_{0,y}, v_{0,z}$  werden den Teilchen mit einer ebenfalls per Zufallszahlen generierten Maxwell-Boltzmann-Verteilung zugeordnet, die einer voneinander unabhängigen Normalverteilung der Komponenten entspricht:

$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} \cdot \exp\left(-\frac{mv_i^2}{2k_B T}\right) \quad (6.1)$$

Die maximale horizontale Einfanggeschwindigkeit der 2D-MOT beträgt bei der gegebenen Kühlstrahlgeometrie und der in den Simulationen verwendeten Strahlleistung von 250 mW nach Gl. (2.33) etwa  $50 \text{ ms}^{-1}$ . Alle Testteilchen mit Anfangsgeschwindigkeiten  $\sqrt{v_{0,x}^2 + v_{0,y}^2} > 50 \text{ ms}^{-1}$  werden daher verworfen, ebenso Teilchen, deren Trajektorien den Kühlbereich verfehlen.

Für die Einfanggeschwindigkeit der (nicht mitsimulierten) 3D-MOT wurde ein Wert von  $20 \text{ ms}^{-1}$  angenommen, und Teilchen mit  $v_{0,z} < -20 \text{ ms}^{-1}$  werden folglich

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

bei Simulationen ohne Bremsstrahl ebenfalls entfernt. Gleiches gilt für Teilchen mit  $v_{0,z} > 0$  bei inaktivem Push-Strahl.

Bei vorhandenem Push-Strahl wird der zulässige  $v_{0,z}$ -Bereich nach oben auf  $100 \text{ ms}^{-1}$  erweitert, mit Bremsstrahl steigt die untere Grenze entsprechend auf  $-100 \text{ ms}^{-1}$ .

Damit die Testteilchen nicht inmitten des Anregungsbereichs starten, sondern ihn vollständig durchlaufen, werden ihre Startpositionen in der Zeit individuell so weit zurückverlegt, dass alle Trajektorien am Rand des Simulationsraums beginnen. Um in den zeitabhängigen Differentialgleichungen für den Anregungszustand ohne Einführung einer zusätzlichen Ortsabhängigkeit die Anregung aktivieren und deaktivieren zu können, werden außerdem die Ein- und Austrittszeiten für den Anregungsbereich ermittelt. Abbildung 6.1 veranschaulicht die einzelnen Schritte der Teilchenerzeugung.

Die Anzahl der Testteilchen betrug bei einfachen Konfigurationen ohne Push- und Bremsstrahl meist 250 000. Bei komplexeren Anordnungen oder wenn sich eine übermäßig lange Rechenzeit abzeichnete, wurde die Anzahl auf bis zu 70 000 reduziert. Diese Zahlen mögen etwas gering erscheinen, zumal die meisten Teilchen nicht gefangen oder schon zuvor als nicht einfangbar verworfen werden. Im Endeffekt sind sie aber ausreichend, denn in der Regel wird ein Bereich von  $8 \text{ cm} \times 8 \text{ cm}$  abgerastert, entsprechend 1024 Rasterelementen, so dass die Anzahl der Testteilchen bei einer vollständigen Simulation insgesamt mindestens  $7 \cdot 10^7$  beträgt.

## 6.4. Lichtfelder

### 6.4.1. Kühlstrahlen und 819 nm-Laser

Alle Laserstrahlen werden als elliptische oder runde Strahlen mit gaußscher Intensitätsverteilung modelliert. Für einen Strahl in  $x$ -Richtung mit einer Leistung  $P$ , einer Strahlachse bei  $y = y_0, z = z_0$  und  $1/e^2$ -Strahlradien  $w_y, w_z$  beträgt die ortsabhängige Intensität:

$$I(y, z) = P \cdot \frac{2}{\pi w_y w_z} \cdot \exp\left(-\frac{2(y - y_0)^2}{w_y^2} - \frac{2(z - z_0)^2}{w_z^2}\right) \quad (6.2)$$

Die Kühlstrahlen werden in vertikaler und horizontaler Richtung durch die Abmessungen der Zugänge zur Vakuumkammer und unten außerdem durch die Spiegel für den Bremsstrahl auf Höhe der differentiellen Pumpstrecke begrenzt, so dass die wirksame, von beiden Strahlpaaren abgedeckte Kühlregion einen Zylinder mit einem Durchmesser von 3,4 cm und einer Höhe von 7 cm bildet. Außerhalb dieses

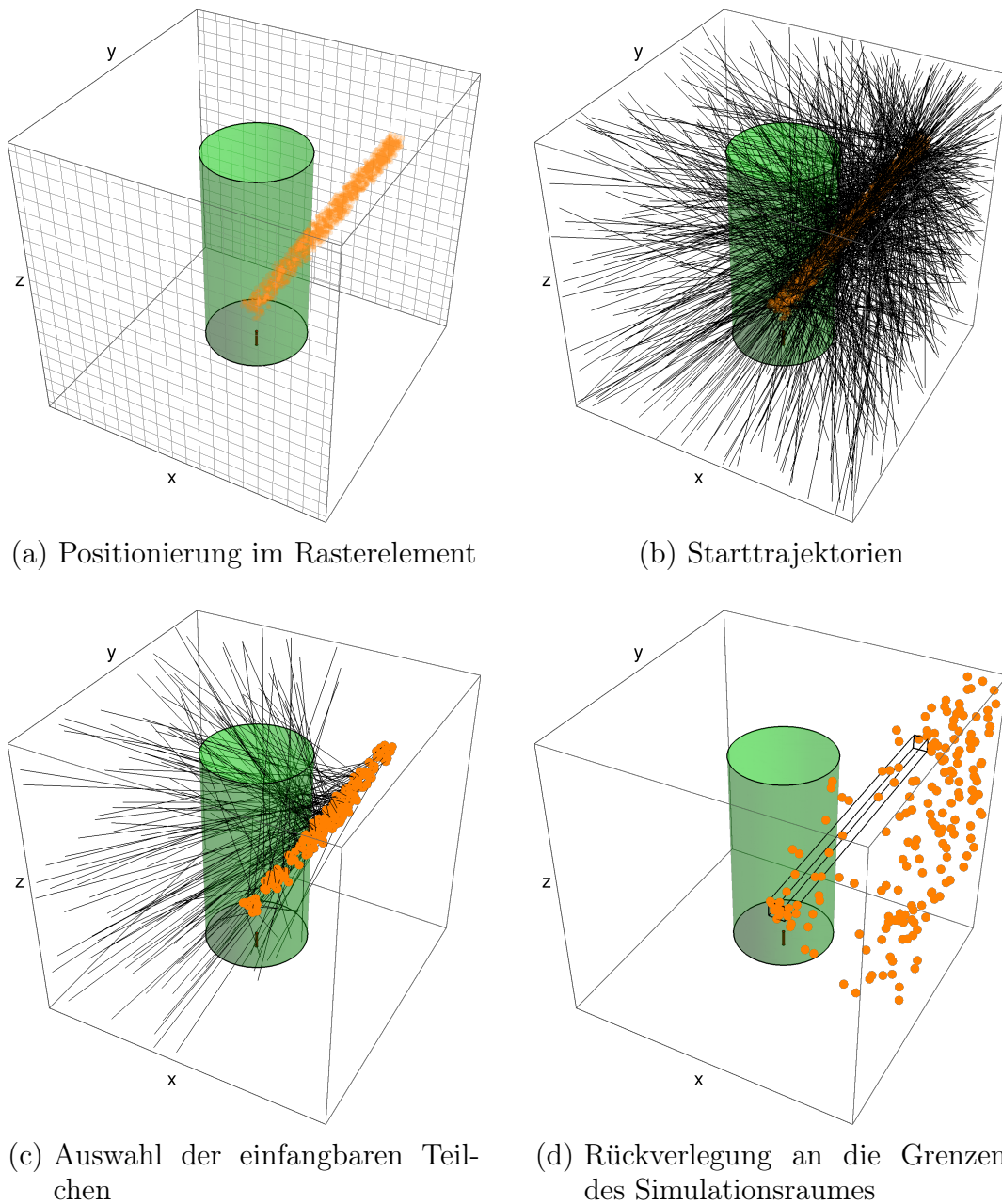


Abbildung 6.1.: **Erzeugung der Testteilchen für die Monte-Carlo-Simulation**

Abbildung (a) zeigt die im der aktuellen Anregungszone positionierten Teilchen. Die Bilder (b) und (c) illustrieren die Auswahl der potenziell einfangbaren Teilchen anhand ihrer Anfangstrajektorien. In (d) wird die endgültige Startposition für die Berechnung der Trajektorien und des Anregungszustands gezeigt. Der effektive Kühlbereich der 2D-MOT ist grün dargestellt. Unterhalb des Kühlbereichs ist die differentielle Pumpstrecke als dünne Linie erkennbar.

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

Bereichs wird die Intensität auf Null gesetzt. Die Strahlachsen befinden sich bei allen durchgeführten Simulationen auf einer Höhe von  $z_0 = -5$  cm.

Auch Push- und Bremsstrahl werden in der Simulation auf die zylindrische Kühlregion begrenzt, wobei beim Bremsstrahl außerdem der durch die Öffnung der differentiellen Pumpstrecke abgeschattete Bereich ausgespart wird.

Der 819 nm-Anregungslaser kann als einzelner Strahl an beliebiger  $(x, z)$ -Position oder als Modell des Prismensystems in einer Anordnung von  $3 \times 8$  Strahlen platziert werden. Die Strahlachse liegt immer in  $y$ -Richtung. Eine graphische Darstellung der 819 nm-Strahlen zusammen mit den Lichtfeldern der VUV-Lampen befindet sich im nächsten Abschnitt.

### 6.4.2. VUV-Lampen

Da die Besetzungswahrscheinlichkeit des metastabilen Zustands eine essentielle Rolle für der Effizienz des Systems spielt, wurde ein besonderes Augenmerk auf eine realitätsnahe Modellierung der Lichtfelder der Lampen gerichtet, insbesondere auf deren räumliche Intensitätsverteilung.

#### Lampen als Lambert'sche Strahler

Die VUV-Lampen werden als kreisförmige, diffus strahlende Flächen mit dem Durchmesser des Plasmavolumens betrachtet, d. h. als lambert'sche Strahler. Die Strahldichte  $L$  der emittierenden Fläche ist dabei richtungsunabhängig und über die Fläche konstant. Nach [Smi00] gilt für die Bestrahlungsstärke  $H$  an einem Punkt, der in einem Abstand  $Z$  auf der Normalen durch das Zentrum des Emitters liegt:

$$H(\theta) = \pi L \sin^2 \theta \quad (6.3)$$

wobei  $2\theta$  den Winkel beschreibt, der von der Emitterfläche im Abstand  $Z$  aufgespannt wird und  $\pi L$  die pro Flächeneinheit abgegebene Leistung angibt. Mit dem Radius des Emitters  $R$  lässt sich dies umformen zu

$$H(Z) = \pi L \frac{R^2}{R^2 + Z^2}, \quad (6.4)$$

Im allgemeinen Fall eines Punktes an einer beliebigen Position  $(x, y, z)$  und einer Emitterfläche am Koordinatenursprung in der  $(x, y)$ -Ebene gilt für den mittleren Abstand

$$Z^2 = x^2 + y^2 + z^2. \quad (6.5)$$

Die sichtbare Fläche des Emitters wird durch die Projektion unter dem Betrachtungswinkel  $\phi$  um den Faktor

$$\cos \phi = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (6.6)$$

reduziert. Zusammengefasst erhält man die Bestrahlungsstärke an einem beliebigen Punkt im Halbraum, normiert auf die pro Flächeneinheit abgegebene Leistung:

$$H_0(x, y, z) = \frac{R^2}{R^2 + x^2 + y^2 + z^2} \cdot \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (6.7)$$

Da die räumliche Ausdehnung der „Empfänger“ im vorliegenden Anwendungsfall als ausreichend klein im Vergleich zur Divergenz des Strahlungsfeldes angesehen werden kann, lässt sich die Bestrahlungsstärke mit der Intensität gleichsetzen.

### Abschattung

Die strahlende Fläche der Lampe befindet sich in einem Abstand  $d$  vom Innenraum der 2D-MOT-Kammer hinter einer Bohrung, die den optischen Zugang darstellt. Dadurch wird das emittierte Licht abhängig vom Betrachtungswinkel  $\phi$  teilweise abgeschattet.

Der Grad der Abschattung wird durch die Verschiebung zweier Kreisflächen mit Radius  $R$  gegeneinander modelliert. Die Kreisflächen stellen die beiden Öffnungen der Bohrung dar, deren Projektion entlang der Sichtlinie eine Verschiebung der Mittelpunkte um eine Strecke  $s = d \tan \phi$  bewirkt, bzw. für einen Punkt  $(x, y, z)$

$$s = d \cdot \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z}. \quad (6.8)$$

Die nun noch sichtbare Fläche entspricht der Fläche zweier Kreissegmente mit der Segmenthöhe  $h = R - s/2$ . Mit der allgemeinen Formel für die Segmentfläche

$$F(h) = R^2 \cdot \arccos \left( 1 - \frac{h}{R} \right) - (R - h) \sqrt{2Rh - h^2} \quad (6.9)$$

ergibt sich eine Abschattungsfunktion, die das Verhältnis der sichtbaren Fläche zur gesamten Emitterfläche beschreibt:

$$A(x, y, z) = \frac{2}{\pi} \cdot \arccos \left( \frac{d\sqrt{x^2 + y^2}}{2Rz} \right) - \frac{d\sqrt{x^2 + y^2}}{2R^2z} \sqrt{R^2 - \frac{d^2 \cdot (x^2 + y^2)}{4z^2}} \quad (6.10)$$

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

Für die vollständige Beschreibung der Intensitätsverteilung muss berücksichtigt werden, dass sich der Abstand zur Emitterfläche in  $z$ -Richtung um den Betrag von  $d$  vergrößert und dass die  $z$ -Koordinate im Modellraum negativ ist. Von der Abschattungsfunktion darf nur der Realteil verwendet werden, da sie im Bereich vollständiger Abschattung imaginär wird. Die endgültige, für die Simulation verwendete Intensitätsverteilung bei einer abgestrahlten Leistung  $P$  lautet:

$$I(x, y, z) = \frac{P}{\pi R^2} \cdot H_0(x, y, d - z) \cdot \operatorname{Re} [A(x, y, -z)] . \quad (6.11)$$

In Abbildung 6.2 ist die Intensitätsverteilung des verwendeten Modells im Vergleich zur Verteilung einer abgeschatteten Punktquelle dargestellt. Abbildung 6.3 zeigt die Lichtfelder der Lampen und des 819 nm-Lasers in zwei der in den Simulationen verwendeten Konfigurationen in dreidimensionaler Darstellung.

### VUV-Leistung und spektrale Verteilung

Zum Zeitpunkt der am ATTA-Experiment durchgeführten Messungen war sowohl die von den Lampen abgegebene Leistung als auch deren spektrale Verteilung unbekannt. Einige Erfahrungsberichte mit ähnlichen Lampendesigns konnten jedoch als Richtwerte dienen. In [YYD02] und [Din+07] werden VUV-Photonenflüsse von  $10^{16}$  bis  $10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$  genannt. Grundsätzlich muss davon ausgegangen werden, dass diese Werte anteilig auch die für die Anregung irrelevanten 116,5 nm Photonen enthalten, die durch den Übergang vom Niveau  $5s' [1/2]_1$  in den Grundzustand entstehen. Nach [Oka64] weist das Kr-Spektrum im VUV-Bereich allerdings eine starke Dominanz der 123,6 nm-Linie auf. Zudem fällt die Transmission der sowohl in diesem Experiment als auch in [YYD02] und [Din+07] verwendeten  $\text{MgF}_2$ -Fenster unterhalb von 120 nm stark ab, so dass davon ausgegangen werden kann, dass die 116,5 nm-Photonen keine signifikante Rolle spielen.

Eine große Unbekannte bildet die spektrale Verteilung der 123,6 nm-Photonen. Zu erwarten ist eine starke temperaturbedingte Dopplerverbreiterung der Linienprofile. Einen Anhaltspunkt zur Abschätzung der Temperatur liefern die Spektroskopiezellen, die zur Stabilisierung der Master-Laser des Experiments dienen (vgl. Abschnitt 4.7). In den Zellen wird mittels Radiofrequenzanregung ebenfalls ein Krypton-Plasma erzeugt, um die Zustände  $5s [3/2]_2$  und  $5s [3/2]_1$  zu bevölkern und die Spektroskopie des 811 nm- bzw. 819 nm-Übergangs zu ermöglichen. Der 811 nm-Übergang erscheint dort auf eine Halbwertsbreite von etwa 800 MHz verbreitert und lässt damit auf eine Neutralteilchentemperatur von 770 K im Plasma schließen. Die Zellen werden im Vergleich zu den Lampen allerdings mit einer wesentlich geringeren Anregungsleistung von nur 2 W betrieben, und die Einkopplung

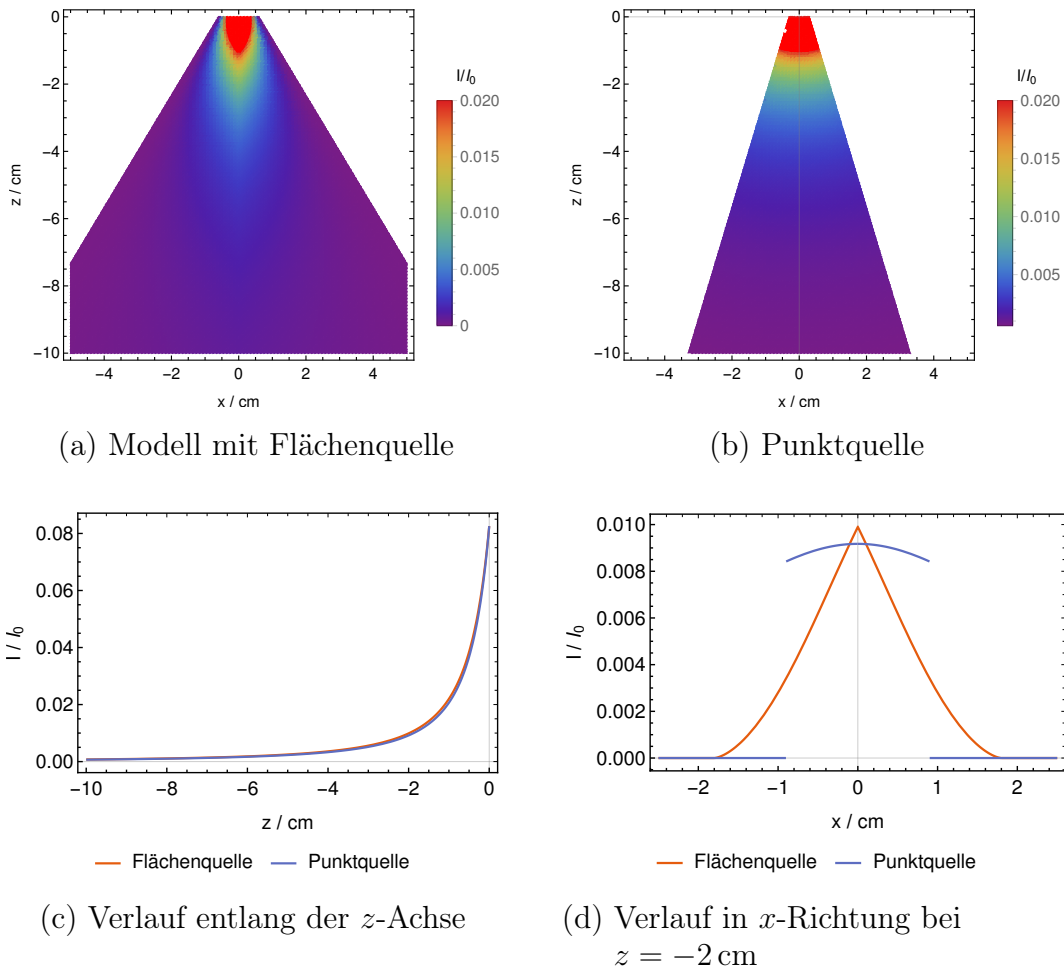
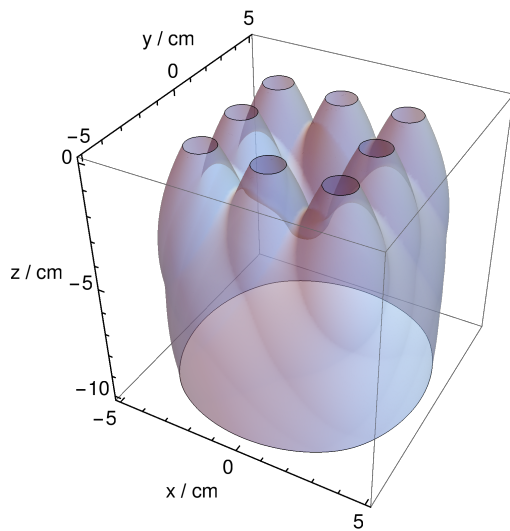


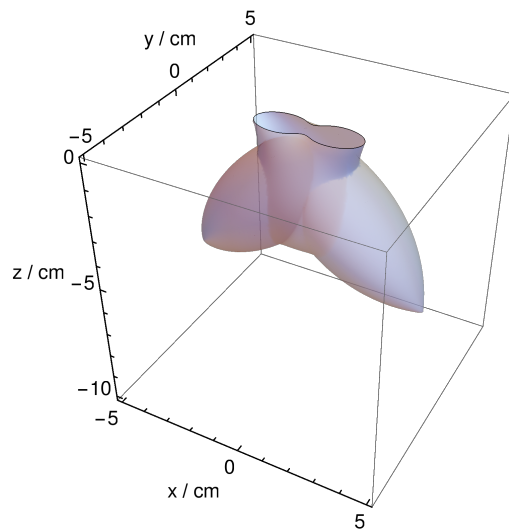
Abbildung 6.2.: **Intensitätsverteilungen der VUV-Lampen bei Modellierung als Punkt- oder Flächenquelle**

In (a) und (b) wird die normierte Intensitätsverteilung in der Ebene  $y = 0$  des in der Simulation verwendeten Flächenemitter-Modells der einer abgeschatteten Punktquelle gegenübergestellt. Die vollständig abgeschatteten Bereiche sind weiß dargestellt. In (c) und (d) wird der Verlauf auf der  $z$ -Achse und in  $x$ -Richtung bei  $y = 0, z = -2$  cm gezeigt. Auf der  $z$ -Achse sind die Intensitäten nahezu identisch. In transversaler Richtung fällt die Intensität der Flächenquelle zunächst deutlich schneller ab, erstreckt sich aber insgesamt über einen größeren Bereich.

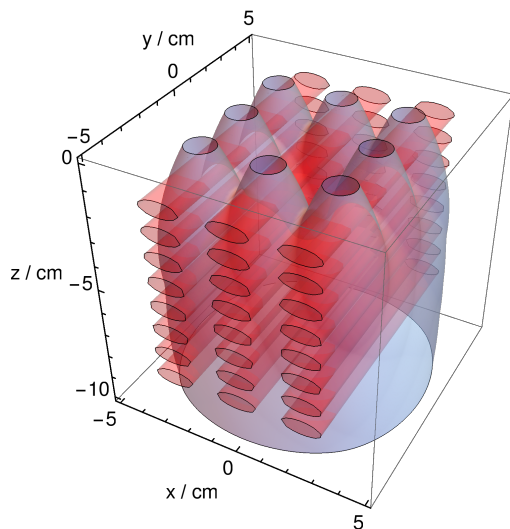
## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik



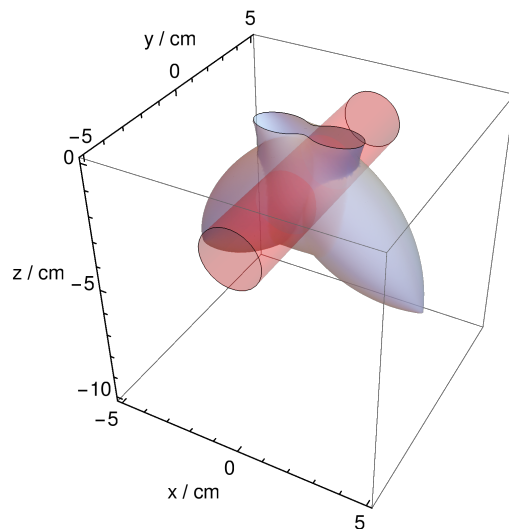
(a) Konfiguration mit acht Lampen



(b) Konfiguration mit zwei um  $45^\circ$  geneigten Lampen



(c) Acht Lampen mit Prismensystem



(d) Zwei Lampen mit individuellem Anregungsstrahl

### Abbildung 6.3.: Konfigurationen der modellierten Anregungsfelder

In (a) und (b) werden die modellierten Lichtkegel der Lampen als Isoflächen gleicher Intensität in den beiden Konfigurationen dargestellt. In (c) und (d) sind außerdem die Strahlen des 819-nm-Lasers mit Prismensystem und als Einzelstrahl an Position  $x = 0$ ,  $z = -2$  cm eingefügt.



in das Plasma erfolgt über eine einfache Induktionsspule, so dass in den Lampen mit einer entsprechend höheren Energiedichte und Temperatur gerechnet werden muss.

Im Resonanzbereich des Übergangs kann die Emission aufgrund von Selbstabsorption („*self reversal*“) reduziert werden. Diese tritt auf, wenn sich zwischen den lichtemittierenden, heißen Atomen und dem Austrittsfenster eine große Anzahl kälterer Atome im Grundzustand mit einem weniger verbreiterten Absorptionsprofil befinden. Das resultierende Linienprofil weist ein Tal in der Linienmitte auf, dessen Breite von der Temperatur der kalten Atome bestimmt wird. In [YYD02] wird von einem 10 GHz breiten Absorptionstal mit einem Abfall auf 10 % des Maximalwerts berichtet, so dass davon auszugehen ist, dass nur ein geringer Anteil der gemessenen Photonen zur Kr-Anregung genutzt werden konnte.

Mittlerweile ist das Emissionsverhalten der Lampen in einer am ZNF durchgeführten Arbeit von Sonder [Son19] näher untersucht worden. Abhängig von den gewählten Betriebsparametern konnten dort VUV-Photonenflüsse in der Größenordnung von  $10^{14} \text{ s}^{-1} \text{ sr}^{-1}$  realisiert werden. Absorptionsversuche deuten darauf hin, dass bis zu 85 % der Photonen in einem Spektralbereich liegen, in dem sie von Kr-Atomen bei Raumtemperatur absorbiert werden können, was auf eine deutlich geringere Breite des Spektrums und weniger Selbstabsorption hindeutet als in den Arbeiten von Young und Ding. Dadurch relativiert sich auch die im Vergleich geringere Photonenausbeute der ZNF-Lampe.

Von diesen Überlegungen ausgehend wurde in den Simulationen eine VUV-Leistung basierend auf dem von Sonder gemessenen Wert angenommen. Die Plasmatemperatur wurde mit 1000 K angesetzt, was einer spektralen Breite der VUV-Emission von etwa 6 GHz entspricht.

## Quench-Photonen

Neben den VUV-Photonen emittieren die Lampen prinzipiell ein Spektrum aller erlaubten optischen Kr-Übergänge, von denen einige, wie in Kapitel 3.4 beschrieben, ein metastabiles Kr\*-Atom wieder in den Grundzustand transferieren können. Die produzierten Photonенflüsse dieser Quench-Wellenlängen sind unbekannt; es kann aber mithilfe einiger theoretischer Betrachtungen eine obere Grenze abgeschätzt werden.

Bei einem Quench-Prozess wird das Atom zunächst vom metastabilen Zustand auf ein höher gelegenes Niveau gehoben, z. B. durch ein 760 nm-Photon auf den auch bei der Anregung vorübergehend besetzten Zustand  $5p [3/2]_2$ . Anschließend zerfällt es über das Niveau  $5s [3/2]_1$  unter Emission eines VUV-Photons in den

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

Grundzustand (siehe auch Abbildung 3.2 in Kap. 3.4). Um in der Lampe ein Quench-Photon zu erzeugen, muss also zwingend ein Niveau besetzt sein, das sowohl in den metastabilen Zustand als auch nach  $5s [3/2]_1$  zerfallen und anschließend ein VUV-Photon erzeugen kann. Das Verhältnis zwischen Quench- und VUV-Photonen hängt demnach von den Verzweigungsverhältnissen dieser beiden Zerfallskanäle und der Besetzung der entsprechenden Niveaus ab. Letztere ist unbekannt, aber die Präferenzen der Verzweigungsverhältnisse verteilen sich relativ gleichmäßig auf die beiden Zerfallskanäle [Dzi+00], so dass angenommen werden kann, dass auf diesem Weg etwa gleich viele VUV- und Quench-Photonen erzeugt werden. Zieht man weiterhin in Betracht, dass VUV-Photonen auch nach direkter Anregung des  $5s [3/2]_1$ -Zustands ohne vorherige Zerfallskette entstehen, erscheint es sinnvoll, die Anzahl der VUV-Photonen als Obergrenze für die Anzahl der Quench-Photonen zu betrachten.

In den durchgeführten Simulationen wurde die Anzahl der Quench-Photonen in der Regel als „Worst-Case“-Szenario mit der Anzahl der VUV-Photonen gleichgesetzt.

### 6.5. Berechnung der Trajektorien

Da meist nur ein relativ geringer Anteil der Testteilchen gefangen wird, hat es sich hinsichtlich einer Minimierung der Rechenzeit als sinnvoll erwiesen, die Berechnungen der Trajektorien und des Anregungszustands nicht simultan, sondern nacheinander durchzuführen und die Anregungswahrscheinlichkeit nur für die tatsächlich gefangenen Teilchen zu bestimmen.

Die Trajektorien werden durch numerisches Lösen der Bewegungsgleichungen der 2D-MOT

$$(\ddot{x}, \ddot{y}, \ddot{z}) = \vec{F}(x, y, z, \dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) \quad (6.12)$$

berechnet mit  $\vec{F}$  gemäß Gleichung (2.30):

$$\vec{F} = \sum_i \frac{\hbar \vec{k}_i \gamma}{2} \cdot \frac{\sum_{\Delta m} s_{i, \Delta m}(\vec{v})}{1 + \sum_{j, \Delta m} s_{j, \Delta m}(\vec{v})} \quad (6.13)$$

Für die gemäß (2.29) berechneten  $s_{i, \Delta m}$  wurden zur Reduktion der Rechenlast die folgenden vereinfachenden Annahmen getroffen:

- Die 2D-MOT-Kühlstrahlen wechselwirken nur mit den  $\sigma$ -Übergängen ( $\Delta m = \pm 1$ )

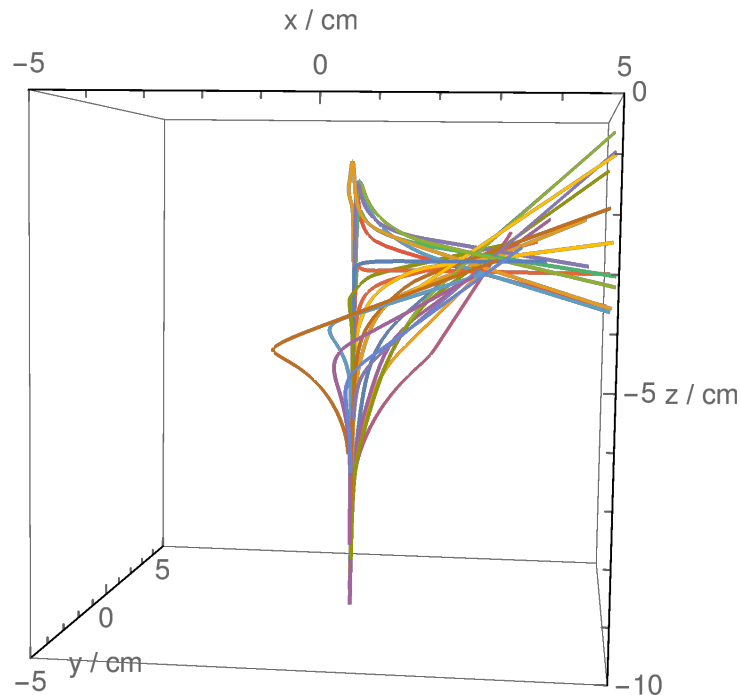


Abbildung 6.4.: **Simulierte Trajektorien in der 2D-MOT**

Die Anregungszone liegt bei den Rasterkoordinaten  $x = 2,5$  cm und  $z = -3$  cm. Push- und Bremsstrahl sind aktiv. Es sind nur die Trajektorien der Atome dargestellt, die gefangen werden.

- Die Push- und Bremstrahlen wechselwirken nur mit dem  $\pi$ -Übergang ( $\Delta m = 0$ )

Da ein Atom erst im metastabilen Zustand gekühlt werden kann, wird die Kühlung erst nach dem Durchlaufen des Anregungsbereichs aktiviert, auch wenn der Kühlbereich schon früher erreicht wird. Als gefangen gilt ein Teilchen, wenn es sowohl Eingang als auch Ausgang der differentiellen Pumpstrecke passiert. Erreicht ein Teilchen den Rand des Simulationsraums, wird dessen Berechnung abgebrochen. In Abbildung 6.4 ist eine solche simulierte Trajektorienschar beispielhaft dargestellt.

## 6.6. Berechnung der Anregung

Für die Berechnung der Wahrscheinlichkeit, dass sich ein Kr-Atom im Verlauf der Trajektorie im metastabilen Zustand befindet, wird ein Ratengleichungsmodell mit

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

Einstein-Koeffizienten und zeitlich variierenden Lichtfeldern verwendet.

Die Übergangswahrscheinlichkeiten für die auftretenden Prozesse der stimulierten Absorption, der stimulierten Emission und der spontanen Emission zwischen zwei Energieniveaus  $i$  und  $k$  mit der Übergangsenergie  $\Delta E_{ik} = \hbar\omega_0$  werden durch die Einstein-Koeffizienten des Übergangs sowie – für die stimulierten Prozesse – durch die spektrale Intensitätsverteilung des Lichts und das Linienprofil des Übergangs bestimmt. Mit dem Einstein-Koeffizienten für die spontane Emission  $A_{ki}$  und einer Besetzungsdichte des oberen Niveaus  $N_k$  ist die Rate der spontanen Emission durch

$$R_{ki}^{\text{SP}} = N_k \cdot A_{ki} \quad (6.14)$$

gegeben. Die Einstein-Koeffizienten der stimulierten Emission  $B_{ki}$  und der stimulierten Absorption  $B_{ik}$  lauten

$$B_{ki} = A_{ki} \frac{\lambda^3}{8\pi h} \quad (6.15)$$

$$B_{ik} = \frac{g_k}{g_i} B_{ki} \quad (6.16)$$

mit den statistischen Gewichten bzw. Entartungsgraden  $g = 2J + 1$  der Niveaus. Für die stimulierten Übergangsraten gilt dann

$$R_{ki}^{\text{st}} = N_k \frac{B_{ki}}{c} \int_{-\infty}^{\infty} i(\omega) g(\omega) d\omega \quad (6.17)$$

$$R_{ik}^{\text{st}} = N_i \frac{B_{ik}}{c} \int_{-\infty}^{\infty} i(\omega) g(\omega) d\omega \quad (6.18)$$

mit der spektralen Intensitätsverteilung  $i(\omega)$  des Lichtfeldes und dem normierten Linienprofil des Übergangs, das als Lorentz-Profil beschrieben wird:

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{\gamma}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (6.19)$$

Sofern die Linienbreite des eingestrahletes Lichts klein gegen die Breite des atomaren Übergangs ist, so wie es beim 819 nm-Laser der Fall ist, kann dessen spektrale Intensitätsverteilung in sehr guter Näherung als ideal monochromatisch mit der Kreisfrequenz  $\omega_L$  angenommen werden:

$$i(\omega) = \begin{cases} I & \text{für } \omega = \omega_L \\ 0 & \text{für } \omega \neq \omega_L \end{cases} \quad (6.20)$$

Das Integral über Intensitätsverteilung und Linienprofil vereinfacht sich dann zu:

$$\int_{-\infty}^{\infty} i(\omega) g(\omega) d\omega = I \cdot g(\omega_L) \quad (6.21)$$

Damit lässt sich die Ratengleichung für die Besetzung des angeregten Zustands  $k$  erstellen:

$$\frac{dN_k}{dt} = (N_i B_{ik} - N_k B_{ki}) \frac{I_{ki}}{2\pi c} \cdot \frac{\gamma_{ki}}{(\omega_{L,ki} - \omega_{0,ki})^2 + (\gamma_{ki}/2)^2} - N_k A_{ki} \quad (6.22)$$

Für den Fall, dass sich das Licht mit  $\omega_{L,ki} = \omega_{0,ki}$  in Resonanz zum Übergang befindet, vereinfacht sie sich zu

$$\frac{dN_k}{dt} = (N_i B_{ik} - N_k B_{ki}) \frac{J_{ki}}{c} - N_k A_{ki}. \quad (6.23)$$

mit

$$J_{ki} = \frac{2I_{ki}}{\pi\gamma_{ki}}. \quad (6.24)$$

Bei den stark dopplerverbreiterten Lichtfeldern der Lampe ist das Verhältnis von spektraler Intensitätsverteilung  $i(\omega)$  und Linienprofil des Übergangs gerade umgekehrt wie beim Laser: Der Übergang ist sehr viel schmäler als das Lichtspektrum. Mit einer Dopplerbite  $\Delta\omega$  kann in diesem Fall

$$i(\omega) = \frac{I}{\Delta\omega} = \text{const.} \quad (6.25)$$

im Bereich des Übergangs angenommen werden. Das verbleibende Integral über  $g(\omega)$  ist 1, und

$$J_{ki} = \frac{I_{ki}}{\Delta\omega_{ki}}. \quad (6.26)$$

Besitzt das Niveau  $k$  mehrere Übergänge zu anderen Niveaus, wird auf der rechten Seite von (6.23) über alle  $i$  summiert;

$$\frac{dN_k}{dt} = \sum_i (N_i B_{ik} - N_k B_{ki}) \frac{J_{ki}}{c} - N_k A_{ki} \quad (6.27)$$

Das gesamte Ratengleichungssystem setzt sich aus je einer Gleichung der Form (6.27) für jedes beteiligte Niveau zusammen und bildet ein System gekoppelter Differentialgleichungen. Die ortsabhängigen Lichtintensitäten  $I_{ki}$  werden durch die

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

veränderliche Position des Testteilchens auf der zuvor berechneten Trajektorie bestimmt und werden damit zeitabhängig:

$$I_{ki}(t) = I_{ki}(x(t), y(t), z(t)) \quad (6.28)$$

Damit bleibt auch das Differentialgleichungssystem ohne explizite Ortsabhängigkeit. Die Intensität des 819 nm-Lasers wird noch mit einem Korrekturfaktor

$$\frac{1}{1 + 4(k_{819} \cdot v_y(t) / \gamma_{819})^2} \quad (6.29)$$

für die aufgrund der Bewegung in  $y$ -Richtung entstehende Dopplerverschiebung multipliziert. Bei den Lichtfeldern der Lampe spielt dies wegen der großen spektralen Breite keine Rolle.

Die VUV-Intensität wird zu den anfangs berechneten Zeitpunkten des Ein- und Austritts in den bzw. aus dem Anregungsbereich durch eine Stufenfunktion ein- und ausgeschaltet. Alle anderen Wellenlängen bleiben ständig aktiv, um Quenchvorgänge zu ermöglichen.

In der Simulation wird neben dem Grundzustand und den an der Anregung und an 760 nm-Quenchprozessen beteiligten Niveaus  $5s [3/2]_1$ ,  $5p [3/2]_2$  und  $5s [3/2]_2$  auch der Zustand  $5p[5/2]_2$  berechnet, über den Quenchprozesse mit 810 nm-Licht ablaufen. Weitere Quench-Wellenlängen wurden nicht berücksichtigt, da sich in den ersten Tests der Simulation herausgestellt hat, dass diese nur einen geringen Effekt haben.

In Abbildung 6.5 ist das Ergebnis einer solchen Berechnung als zeitlicher Verlauf der Besetzungswahrscheinlichkeit des metastabilen Zustands auf Basis der in Abbildung 6.4 gezeigten Beispieltrajektorien dargestellt.

## 6.7. Datenspeicherung und Auswertung

Nach jeder vollständigen Abrasterung werden die Ergebnisse der Simulation in einer Datei im CSV-Format gespeichert. Darin bildet jeder Rasterpunkt einen Datensatz, der neben den Koordinaten des Rasterpunkts die Komponenten der Anfangs- und Endgeschwindigkeit sowie die Besetzungswahrscheinlichkeit des metastabilen Zustands bei Erreichen der Pumpstrecke und die Laufzeit jedes gefangenen Testteilchens enthält. In den Kopfzeilen der Datei werden die gewählten Betriebsparameter des simulierten Experiments und die für die Auswertung relevanten Parameter der Simulation gespeichert. Im Allgemeinen wurden mehrere Abrasterungen hintereinander durchgeführt, wobei ein Betriebsparameter automatisch variiert wurde. Dabei wird für jeden Parameterwert eine eigene CSV-Datei erzeugt.

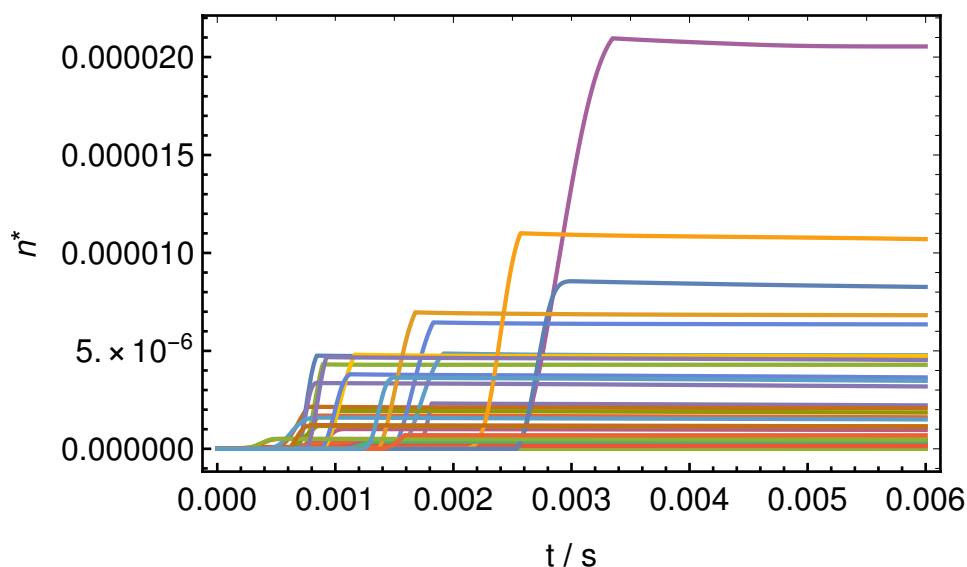


Abbildung 6.5.: Zeitlicher Verlauf der Besetzungswahrscheinlichkeit des metastabilen Zustands von Kr-Atomen auf den in Abbildung 6.4 gezeigten Trajektorien

Die Auswertung selbst erfolgt in einem separaten Mathematica-Script und umfasst im Wesentlichen die Berechnung des metastabilen Flusses am Ausgang der 2D-MOT aus den von der Simulation erzeugten Daten und die Visualisierung der Ergebnisse.

### 6.7.1. Berechnung des metastabilen Kr-Flusses

In einem Ensemble von Atomen führt eine mittlere Teilchendichte  $n$  mit einer mittleren Geschwindigkeit  $\bar{v}$  zu einem Fluss

$$\Phi = \frac{1}{4} n \cdot \bar{v} \cdot A \quad (6.30)$$

durch eine beliebig orientierte Fläche  $A$ , sofern nur Teilchen gezählt werden, die die Fläche in eine Richtung passieren. Übertragen auf die Simulation mit  $N$  Testteilchen in einem Rasterelement der Breite und Höhe  $d$  und Länge  $l$  mit  $d \ll l$  ergibt sich ein Testteilchenfluss von

$$\Phi_T = \frac{1}{4} \cdot \frac{N}{d^2 \cdot l} \cdot \bar{v} \cdot 4 \cdot d \cdot l = \frac{1}{d} \cdot \sum_i v_i \quad (6.31)$$

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

aus dem Rasterelement heraus, wenn man dessen kleine Stirnflächen vernachlässigt. Zur Skalierung auf die reale Situation muss nur noch mit dem Verhältnis von realer Dichte und Testteilchendichte multipliziert werden:

$$\Phi = \frac{n}{N} \cdot d \cdot l \cdot \sum_i v_i \quad (6.32)$$

Jedes Testteilchen mit Anfangsgeschwindigkeit  $v_i$  repräsentiert also einen Fluss

$$\phi_i = \frac{n}{N} \cdot d \cdot l \cdot v_i, \quad (6.33)$$

so dass sich durch Summieren der  $\phi_i$  über die gefangenen Teilchen der Fluss am Ausgang der 2D-MOT ergibt.

### 6.7.2. Berechnung der Stoßverluste

Auf den Trajektorien der  $\text{Kr}^*$ -Atome kann es zu Kollisionen mit Grundzustandsatomen des Hintergrundgases kommen. Es sind drei verschiedene Stoßprozesse zu unterscheiden [YYD02]:

#### 1. Elastischer Stoß

Es findet ein Impuls- und Energieübertrag statt, der metastabile Zustand bleibt aber erhalten. Aufgrund der i. A. großen Geschwindigkeitsdifferenz muss dennoch von einer so starken Veränderung der Trajektorie ausgegangen werden, dass das Atom nicht mehr gefangen wird.

#### 2. Inelastischer Stoß mit Transfer des metastabilen Zustands

Hier gilt analog zu Punkt 1, dass der Geschwindigkeitsvektor des nun metastabilen Stoßpartners üblicherweise zu stark von der Trajektorie des ursprünglichen Atoms abweicht, um als dessen „Nachfolger“ zu fungieren.

#### 3. Inelastischer Stoß mit Verlust der Metastabilität

Dabei kommt es zu temporärer Veränderung der Feinstruktur der Stoßpartner, so dass der metastabile Zustand schnell zerfällt.

Für (1) und (2) werden in [BV80] Wirkungsquerschnitte von  $0,42 \text{ nm}^2$  respektive  $0,75 \text{ nm}^2$  genannt. Für (3) wurde in [Phe59] ein Wert von nur  $4 \cdot 10^{-6} \text{ nm}^2$  für Neon ermittelt, so dass davon ausgegangen werden kann, dass dessen Beitrag zum gesamten Stoßquerschnitt auch für Krypton vernachlässigbar ist.

Die vergrößerten Stoßquerschnitte in Anwesenheit resonanter Lichtfelder infolge von Dipol-Dipol-Wechselwirkung (siehe Kap. 5.2) spielen an dieser Stelle keine



Rolle. Bei einer Kr-MOT können resonante lichtinduzierte Prozesse nur zwischen Kr\*-Atomen, nicht aber zwischen Kr\* und Atomen im Grundzustand stattfinden, da letztere nicht mit den Kühlstrahlen interagieren. Die Kr\*-Dichte ist jedoch um mindestens vier Größenordnungen niedriger anzunehmen als die der Atome im Grundzustand, so dass dieser Effekt hier keinen relevanten Einfluss haben dürfte. Für die Berechnung der Stoßverluste wird daher ein gesamter Wirkungsquerschnitt von

$$\sigma = 1,17 \text{ nm}^2 \quad (6.34)$$

als Summe der Stoßquerschnitte für elastischen Stoß und metastabilen Transfer angenommen.

Die Wahrscheinlichkeit, die Trajektorie ohne Kollision zu durchlaufen, hängt von der Laufzeit  $t$ , dem Wirkungsquerschnitt  $\sigma$  sowie von der Dichte  $n$  und der mittleren Geschwindigkeit  $\bar{v}_b$  des Hintergrundgases ab und bildet den Verlustterm

$$\exp(-\sigma \cdot n \cdot \bar{v}_b \cdot t) . \quad (6.35)$$

Drückt man die Dichte mit  $n = p/(k_B T)$  durch den Druck aus, wobei für die Flussberechnung der Partialdruck des gesuchten Isotops und im Verlustterm der Totaldruck einzusetzen sind, erhält man schließlich zusammen mit der berechneten Besetzungswahrscheinlichkeit  $W^*$  des metastabilen Zustands den von der 2D-MOT produzierten Kr\*-Fluss:

$$\Phi^* = \frac{p_p}{N k_B T} \cdot d \cdot l \cdot \sum_i v_i \cdot W_i^* \cdot \exp\left(-\sigma \cdot \frac{p_{tot}}{k_B T} \cdot \bar{v}_b \cdot t_i\right) \quad (6.36)$$

Da die Laufzeiten  $t_i$  in den Datensätzen enthalten sind, kann der Druck während der Auswertung der Simulationsdaten beliebig variiert werden.

## 6. Monte-Carlo-Simulation der Anregungs- und Einfangdynamik

# 7. Ergebnisse der Simulation

Das in Kapitel 6 vorgestellte Simulationsmodell wurde auf verschiedene Konfigurationen des ATTA-Systems unter Variation diverser Parameter angewendet. Die Ergebnisse werden in den folgenden Abschnitten vorgestellt und diskutiert.

## 7.1. Konfiguration mit 8 Lampen

Die Variante mit acht quadratisch angeordneten VUV-Lampen entspricht der ursprünglichen Planung und war vorgesehen, in dieser Form im regelmäßigen Messbetrieb eingesetzt zu werden. Die durchgeführten Untersuchungen legen ihren Schwerpunkt daher auf dieses System.

### 7.1.1. Vergleich mit Messungen: Variation von 819 nm-Leistung, Magnetfeld und Druck

Zunächst wurden die in Kapitel 5.3 präsentierten Messungen am ATTA-System modelliert und per Simulation nachvollzogen. Die Parameter der Simulation entsprechen jeweils den Parametern der Messung. Eine Ausnahme bilden die aktiven VUV-Lampen: Die Simulationen wurden mit allen Lampen durchgeführt, während bei den Messungen nur fünf Lampen in Betrieb waren.

Die in den Simulationen berechneten metastabilen Kr-Flüsse lagen um bis zu zwei Größenordnungen höher als die gemessenen. Um dennoch einen qualitativen Vergleich mit den Messungen durchzuführen, wurden die Messdaten für die grafische Darstellung mit einem Faktor skaliert, der durch Minimierung der quadratischen Differenzen zu den Simulationsdaten ermittelt wurde.

Abbildung 7.1 zeigt die mit einem Faktor 117 skalierten Messdaten bei Variation der 819 nm-Leistung und das Ergebnis der Simulation. Die simulierten Daten steigen deutlich langsamer an als die Messwerte. Eine mögliche Erklärung dafür wäre eine größere Sättigung des 819 nm-Übergangs im realen Experiment als in der Simulation bei gleicher Leistung, wie sie bei kleineren Abmessungen der Strahlen entstehen würde. Um dies zu verifizieren, wurde eine zweite Simulation mit einer

## 7. Ergebnisse der Simulation

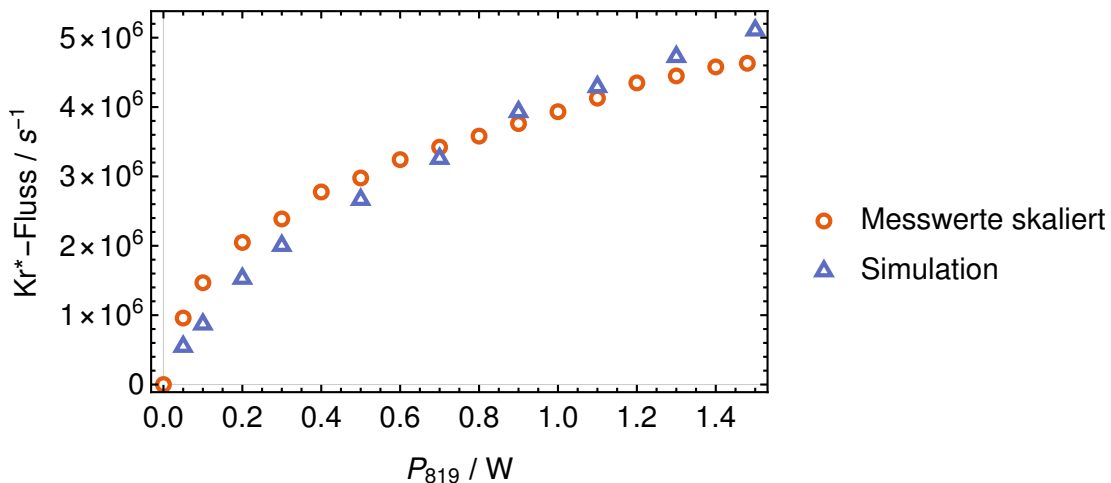


Abbildung 7.1.: **Simulierter und gemessener Fluss bei Variation der 819 nm-Leistung**

Die Messwerte wurden mit einem Faktor 117 skaliert. Die simulierten Werte verlaufen mit einem deutlich flacheren Anstieg als die Messwerte, was auf eine stärkere Sättigung im realen Aufbau hindeutet.

Strahlgeometrie des 819 nm-Lasers von  $2,5 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$  statt der am Experiment gemessenen  $3,9 \text{ mm} \times 1,6 \text{ mm}$  durchgeführt. Die Annahme kleinerer Strahlradien ist durchaus realistisch, da die von einem TA erzeugten Strahlen kein Gauß-Profil, sondern einen eher scharf begrenzten, rechteckigen Querschnitt mit mehreren Transversalmoden besaßen.

In Abbildung 7.2 ist das Ergebnis dargestellt. Der Skalierungsfaktor der Messdaten beträgt 73. Die Übereinstimmung der Kurvenverläufe ist mit den reduzierten Strahlmessungen deutlich besser, auch wenn nach wie vor geringe systematische Abweichungen bestehen.

Eine weitere Simulation wurde unter Variation des Feldgradienten durchgeführt. Der Vergleich mit der entsprechenden Messung ist in Abbildung 7.3 dargestellt. Der Skalierungsfaktor beträgt 77 und liegt damit nahe dem Faktor bei der 819 nm-Leistungsvariation. Auch hier zeigt die Simulation leichte Abweichungen vom Verlauf der Messwerte.

Die Simulation der Druckvariation in der 2D-MOT schließlich ist in Abbildung 7.4 dargestellt. Die Ergebnisse sind nicht das Resultat separater Simulationen für jeden Druck, sondern basieren auf einer einzigen Simulation aus der Feldvariationsreihe mit einem Spulenstrom von 5 A, bei der die Druckabhängigkeit während

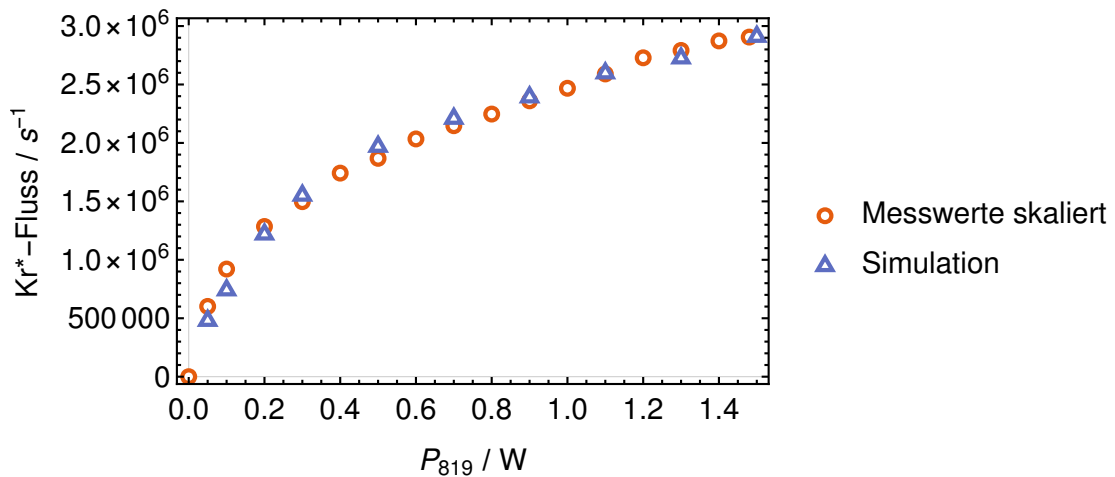


Abbildung 7.2.: **Simulierter und gemessener Fluss bei Variation der 819 nm-Leistung mit reduzierten Abmessungen der 819 nm-Strahlen in der Simulation**

In der Simulation wurden die Abmessungen der 819 nm-Strahlen auf  $2,5 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$  statt  $3,9 \text{ mm} \times 1,6 \text{ mm}$  gesetzt. Die Messwerte wurden mit einem Faktor 73 skaliert. Der Verlauf der simulierten Werte entspricht den Messwerten deutlich besser als mit der ursprünglichen Strahlgeometrie.

## 7. Ergebnisse der Simulation

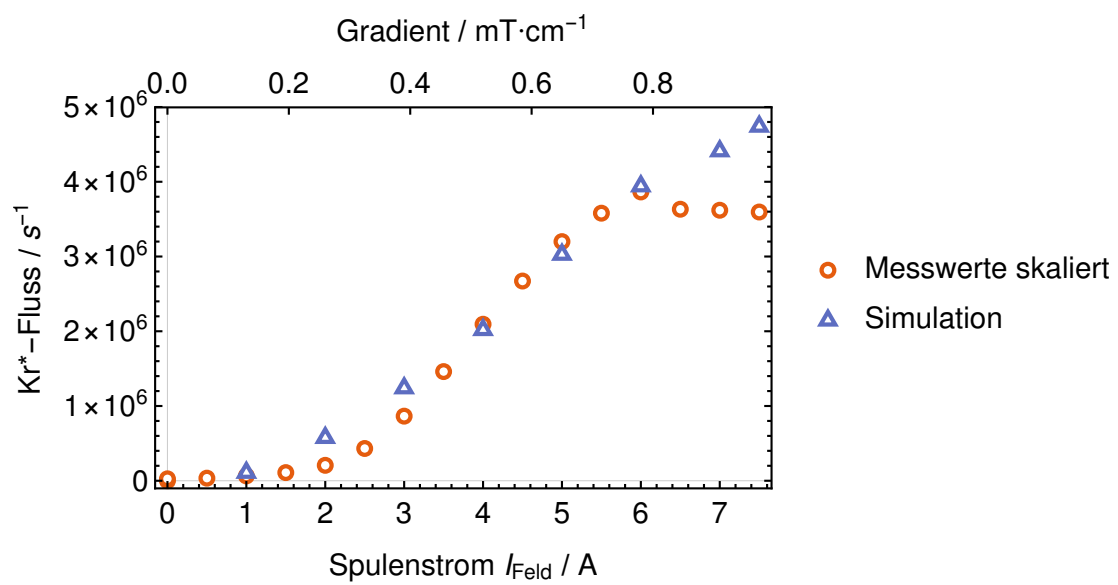


Abbildung 7.3.: **Simulierter und gemessener Fluss bei Variation des Magnetfelds**

Der Abfall der Messwerte oberhalb eines Spulenstroms von 6 A ist vermutlich auf Instabilitäten der VUV-Lampen zurückzuführen (siehe Kap. 5.3). Die Messwerte wurden mit dem Faktor 77 skaliert.

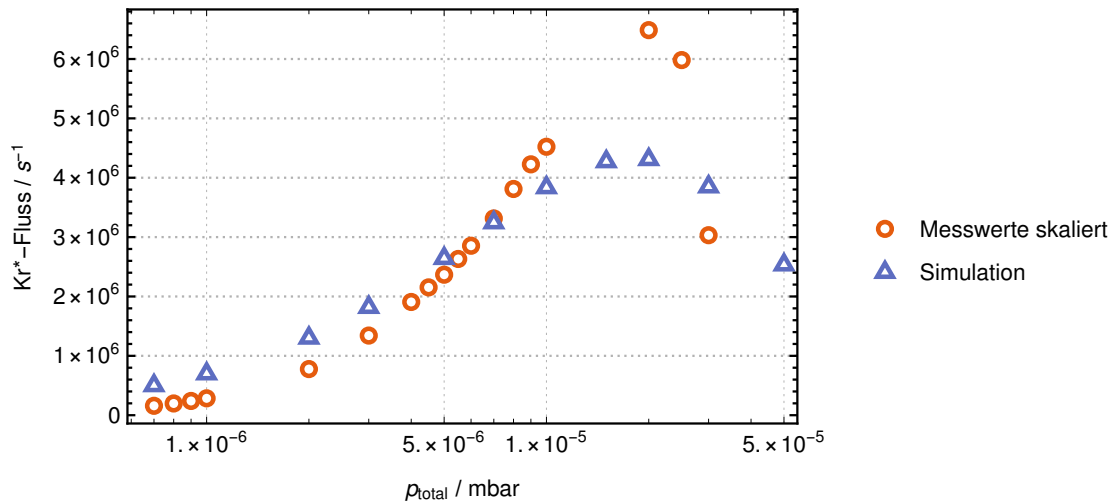


Abbildung 7.4.: **Simulierter und gemessener Fluss bei Variation des 2D-Kammerdrucks**

Die Messwerte wurden analog zur Feldgradientenreihe mit dem Faktor 77 skaliert. Das Maximum des Flusses liegt in Messung wie Simulation bei  $2 \cdot 10^{-5}$  mbar; die Verläufe unterscheiden sich jedoch deutlich.

der Auswertung über Teilchendichte und laufzeitabhängige Kollisionsverluste hergestellt wird (vgl. Kap. 6.7.2). Als Skalierungsfaktor für die Messwerte wurde daher der Wert 77 aus der Feldvariationsmessung gewählt. Der maximale Fluss wird in Simulation und Messung übereinstimmend bei einem Druck von  $2 \cdot 10^{-5}$  mbar erreicht. Bemerkenswerterweise ist der gemessene Fluss im Bereich des Maximums bei gegebener Skalierung etwa 50% größer als das Ergebnis der Simulation, und das Maximum besitzt in der Messung deutlich steilere Flanken.

### Bewertung der Ergebnisse

Für die besonders bei der Druckvariation deutlich unterschiedlichen Verläufe zwischen Simulation und Messung kommt als Ursache in erster Linie die Methode der Flussbestimmung aus den Fluoreszenzmessungen in Betracht:

- Die Berechnung des Flusses aus der gemessenen 3D-MOT-Fluoreszenz basiert auf einem vereinfachten Modell für die Stoßverluste in der MOT, das u. a. ein konstantes MOT-Volumen voraussetzt und Abschirm- und Streueffekte vernachlässigt (vgl. Kap. 5.2). Da die Stöße innerhalb der MOT quadratisch

## 7. Ergebnisse der Simulation

in die Flussberechnung eingehen, könnten Ungenauigkeiten in diesem Bereich signifikante Auswirkungen haben.

- Verluste durch Stöße zwischen gefangenen Atomen in der 3D-MOT und Atomen im 2D-MOT-Strahl bleiben unberücksichtigt.
- Es wird eine proportionale Abhängigkeit zwischen 2D- und 3D-Druck vorausgesetzt, der im Experiment nur näherungsweise gegeben ist.

Insgesamt produziert die Simulation offenbar dennoch qualitativ realistische Verläufe bei der Variation der Parameter. Viel gravierender als die Abweichungen bei den Kurvenverläufen ist der Unterschied von fast zwei Größenordnungen bei den absoluten Werten des Atomflusses. Auch wenn man berücksichtigt, dass während der Messungen nur 5 der 8 VUV-Lampen in Betrieb waren, und die Ergebnisse auf 8 Lampen extrapoliert, bleiben die Messwerte etwa um einen Faktor 50 kleiner als die Ergebnisse der Simulation. Die oben genannten Unzulänglichkeiten bei der Berechnung des Flusses aus den Messwerten können eine derartig große Differenz kaum erklären.

Um die Ursachen zu ermitteln, müssen daher weitere mögliche Fehlerquellen sowohl im experimentellen Aufbau als auch in der Simulation in Betracht gezogen werden:

1. Fortgeschrittene Degeneration der Lampenfenster mit reduziertem VUV-Photonenfluss
2. Möglicherweise stärkere Abweichung des Magnetfeldverlaufs in der 2D-MOT vom idealen Feld
3. Systematische Überschätzung der 2D-MOT-Einfangeffizienz in der Simulation aufgrund der Vereinfachungen bei der Streukraftberechnung
4. Intensitätsungleichgewicht zwischen hin- und zurücklaufenden Kühlstrahlen

Die Punkte 1 und 2 können im Nachhinein nicht mehr ermittelt oder reproduziert werden. Eine starke Degeneration der Lampen wird allerdings als unwahrscheinlich erachtet, da auch im Vorfeld der Messungen bei Justier- und Optimierungsarbeiten keine wesentlich größere MOT-Fluoreszenz gemessen wurde. Für Punkt 2 könnten prinzipiell entsprechende Simulationen durchgeführt werden; dies erscheint jedoch aufgrund der vielen Freiheitsgrade wenig sinnvoll, wenn die Form der vermuteten Abweichungen des Magnetfelds nicht bekannt ist. Ob Punkt 3 relevant ist, ließe sich nur durch eine Erweiterung des Simulationsmodells mit einer entsprechenden



Erhöhung der Komplexität und damit verbundener Vervielfachung der schon im bestehenden Modell erheblichen Berechnungszeiten evaluieren, weshalb in dieser Arbeit darauf verzichtet wurde.

Der letzte Punkt - ein Ungleichgewicht der Intensitäten der gegeneinander laufenden Kühlstrahlen - bietet jedoch einen vielversprechenden Ansatz, der anhand weiterer Simulationen untersucht wurde und im folgenden Abschnitt diskutiert wird.

### 7.1.2. Strahlungsgleichgewicht der Kühlstrahlpaare

Wie in Kapitel 4.3 beschrieben werden die zurücklaufenden Kühlstrahlen der 2D-MOT durch Rückreflexion der hinlaufenden Strahlen erzeugt. Einschließlich der Kammerfenster passiert der Strahl dabei insgesamt 9 optische Elemente, bis er wieder zurück in die Kammer gelangt. Nimmt man nur 1 % Transmissionsverluste pro Element an, was auch für Oberflächen mit Antireflex-Beschichtung ein niedriger Wert ist, sinkt die Intensität auf 91 % des hinlaufenden Strahls, bei 2 % Verlusten sogar bis auf 83 %. Um die Auswirkungen eines solchen Ungleichgewichts auf die Effizienz der 2D-MOT und gegebenenfalls Möglichkeiten zu dessen Kompensation zu untersuchen, wurden eine Reihe von Simulationen durchgeführt.

Abbildung 7.5 zeigt den Verlauf des metastabilen Flusses bei einem Leistungsgleichgewicht beider Kühlstrahlpaare zwischen 80 % und 100 % in logarithmischer Darstellung. Der stärkere Strahl verläuft jeweils in Richtung positiver Koordinaten. Die übrigen Parameter der Simulation waren identisch mit den Parametern bei den Simulationen der Messungen im vorherigen Kapitel. Im Bereich eines Gleichgewichts zwischen etwa 93 % und 90 % erfährt der generierte Atomfluss einen massiven Abfall um fast zwei Größenordnungen. Unterhalb von 90 % sinkt der Fluss weiter bis auf etwa 1/1 000 des ursprünglichen Wertes. Ein solch starker Effekt war bei der Konzeption der 2D-MOT nicht erwartet worden, da davon ausgegangen wurde, dass die etwa dreifache Sättigung im Zentrum der Kühlstrahlen die Auswirkungen kleinerer Intensitätsdifferenzen kompensieren würde.

Die konkreten Auswirkungen des Ungleichgewichts werden bei der Betrachtung der in Abbildung 7.6 gezeigten mittleren Endgeschwindigkeit der Atome nach Verlassen der 2D-MOT deutlich. Bis zu einem Ungleichgewicht von etwa 91 % bleiben longitudinale und transversale mittlere Geschwindigkeit stabil. Dass die Transversalgeschwindigkeit dort fast genau der Dopplergeschwindigkeit entspricht, ist allerdings Zufall, denn die dem Doppler-Limit zugrundeliegenden Heizprozesse werden im Modell nicht berücksichtigt. Die Dopplergrenze ist in den Simulationsergebnissen daher nur als Schwelle zu verstehen, bei deren Überschreiten die Kühlung als

## 7. Ergebnisse der Simulation

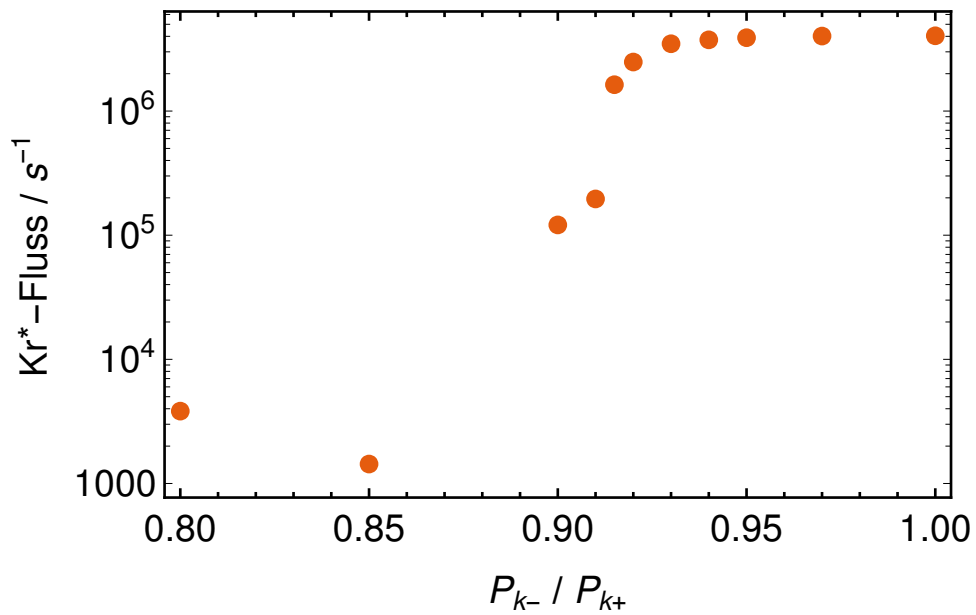


Abbildung 7.5.: **Simulierter metastabiler Fluss bei Variation des Leistungsverhältnisses von hin- und rücklaufenden Kühlstrahlen**

Bis zu einer Intensitätsdifferenz von etwa 7% ist nur ein geringer Effekt zu beobachten. Bei größerem Ungleichgewicht erfolgt jedoch ein starker Abfall des Atomflusses um drei Größenordnungen.

insuffizient betrachtet wird.

Bei stärkerem Ungleichgewicht ist dies der Fall, und beide Geschwindigkeiten steigen an. Außerdem verschiebt sich die mittlere transversale Komponente in  $x$ -Richtung von 0 im Gleichgewicht hin zu positiven Werten bei steigendem Ungleichgewicht, so dass der Atomstrahl - wie zu erwarten ist - in Propagationsrichtung des stärkeren Kühlstrahls abgelenkt wird.

Der Einfluss auf die räumliche Einfangeffizienz der 2D-MOT wird anhand der orts aufgelösten Darstellung der Ursprungsregion der in den Atomstrahl transferierten Atome in Abbildung 7.7 veranschaulicht. Auch hier stellt sich ein Gleichgewicht von etwa 91 % als Schwellenwert heraus, ab dessen Unterschreiten sich die Effizienz rapide verschlechtert und die Atome zudem fast ausschließlich aus einer Vorzugsrichtung gefangen werden.

### Verhalten der 2D-MOT im Strahlungsungleichgewicht

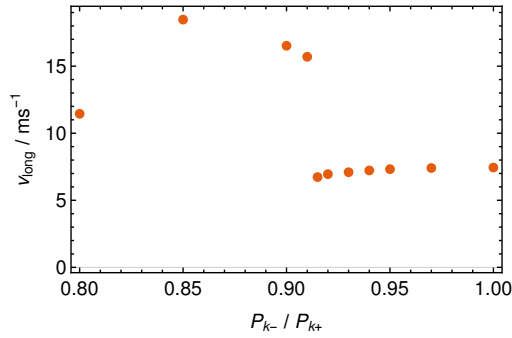
Es wurden weitere Simulationen durchgeführt, um das Verhalten der asymmetrisch gekühlten 2D-MOT zu untersuchen und mögliche Methoden zur Kompensation des Strahlungsungleichgewichts auszuloten.

Eine naheliegende Maßnahme wäre eine Erhöhung der Kühlstrahlleistung, da die Abhängigkeit der Streurrate von der Intensität mit zunehmender Sättigung abnimmt. In Abbildung 7.8 wird eine Simulation mit einer auf 500 mW verdoppelten Kühlleistung den in Abb. 7.5 gezeigte Daten gegenübergestellt. Entgegen der Erwartung erwies sich die Wirkung der Leistungserhöhung jedoch als vernachlässigbar gering. Lediglich ein etwas flacher verlaufender Abfall des Atomflusses ist zu erkennen, der aber nach wie vor schon bei einem Gleichgewicht von 91 % einsetzt.

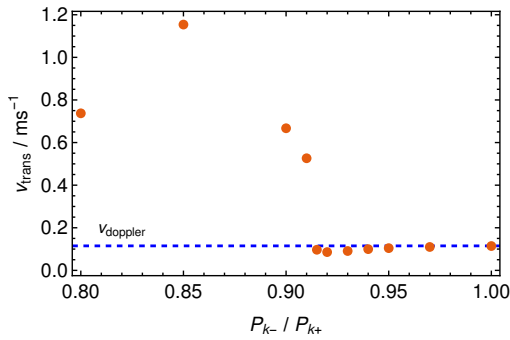
Ein weiterer Ansatzpunkt ist die Modifikation von Verstimmung und Feldgradient der 2D-MOT. Abbildung 7.9 zeigt das Ergebnis dreier Kombinationen von Feldgradient und Verstimmung. Eine Verstimmung von  $-4\gamma$  bewirkt bei Leistungsungleichgewicht einen größeren Fluss als der im Experiment als optimal ermittelte Wert von  $-2,5\gamma$ , führt aber bereits ab 95 % Gleichgewicht zu einem Abfall des Flusses. Mit einem doppelt so großen Feldgradienten - der im Experiment aufgrund von Kühlproblemen nicht erreicht werden konnte (siehe Kap. 5.3.2) - kann der maximale Fluss jedoch bis zu einer relativ starken Asymmetrie von etwa 85 % aufrecht erhalten werden.

Um die Abhängigkeit von Gradient und Verstimmung genauer zu bestimmen, wurden beide Parameter separat für Gleichgewichtswerte von 100 %, 90 % und 80 % variiert. Die Ergebnisse werden in den Abbildungen 7.10 und 7.11 gezeigt. Bei der Variation der Verstimmung zeigt sich, dass das Optimum offenbar tat-

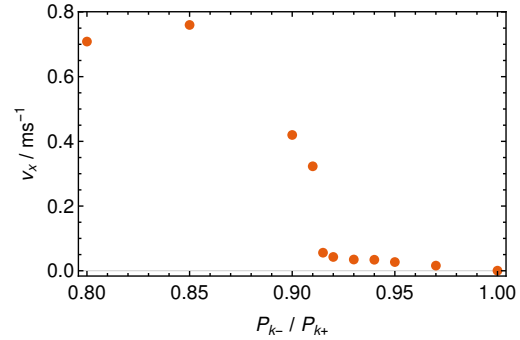
## 7. Ergebnisse der Simulation



(a) Longitudinale Geschwindigkeit



(b) Betrag der transversalen Geschwindigkeit



(c) Transversalgeschwindigkeit in  $x$ -Richtung

Abbildung 7.6.: **Mittlere Geschwindigkeiten im Atomstrahl bei Variation der Kühlleistungssymmetrie**

Sowohl longitudinale (a) als auch transversale (b) Geschwindigkeit der Atome zeigen deutlich, dass die Kühleffizienz der 2D-MOT ab einem Ungleichgewicht von 91 % rapide abnimmt. Die in (c) dargestellte Transversalkomponente in einer Raumrichtung zeigt zudem, dass der Atomstrahl in Richtung positiver Koordinaten - der Ausbreitungsrichtung des stärkeren Kühlstrahls - abgelenkt wird.

## 7.1. Konfiguration mit 8 Lampen

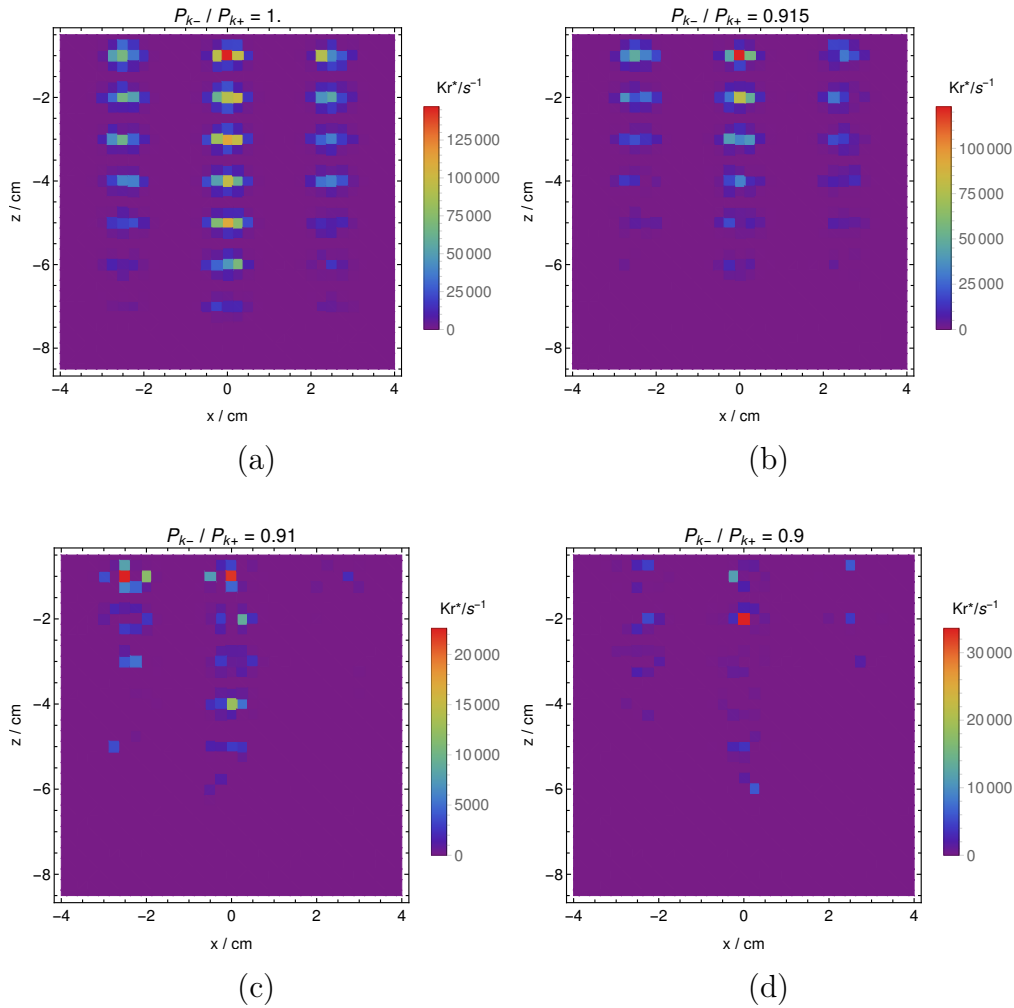


Abbildung 7.7.: **Quellregion der gefangenen Atome bei Variation der Kühlleistungssymmetrie**

Dargestellt sind die orts aufgelösten Quellregionen bei verschiedenen Kühlstrahlgleichgewichten. Die Farbskala gibt den aus dem jeweiligen Rasterpunkt stammenden metastabilen Atomfluss an. Bei 100 % Gleichgewicht (Bild (a)) werden die Atome symmetrisch um den zentral gelegenen Kühlbereich herum gefangen. Die durch das Prismensystem erzeugten Bereiche hoher Intensität des Anregungslasers sind als bevorzugte Quellregionen zu erkennen. Bei 91,5 % (b) ist der Bereich noch weitgehend symmetrisch; es stammen jedoch deutlich weniger Atome aus den unteren Regionen. Bei nur wenig stärkerem Ungleichgewicht von 91 % (c) zeichnet sich eine Asymmetrie der Einfangbereiche ab. Eine weitere Vergrößerung des Ungleichgewichts (d) scheint die Symmetrie wieder etwas herzustellen, aber mit weiter reduziertem Fluss.

## 7. Ergebnisse der Simulation

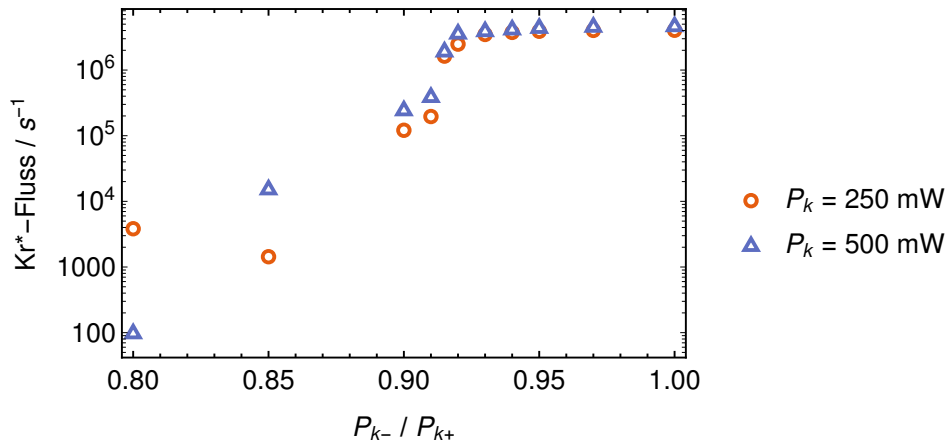


Abbildung 7.8.: **Variation der Kühlleistungssymmetrie bei Verdoppelung der Leistung der Kühlstrahlen**

Die simulierten Daten für 250 mW entsprechen Abb. 7.5. Der Atomfluss ist weitgehend unabhängig von der Kühlstrahlleistung. Auch eine Verschiebung des Schwellenwertes beginnender Insuffizienz der 2D-MOT kann nicht festgestellt werden.

sächlich bei  $-4\gamma$  liegt, sofern Leistungsgleichgewicht herrscht. Bei asymmetrischer Kühlleistung wird der maximale Fluss auf einem niedrigeren Niveau bei kleineren Verstimmungen erreicht und fällt bei wachsendem  $\delta$  schnell ab. Bei einer Asymmetrie von 90 % liegt das Maximum knapp unter  $-2\gamma$  und damit nicht weit entfernt vom experimentellen Wert von  $-2,5\gamma$ .

Die Variation des Feldgradienten bestätigt die Erkenntnis, dass eine moderate Asymmetrie der Kühlstrahlen bei einem größeren Gradienten ab ca. 1,3 mT/cm nur marginale Auswirkungen hat. Bei einem Gleichgewicht von 80 % besitzt der Fluss im mittleren Gradientenbereich ein Minimum, dessen Ursache mit den vorhandenen Simulationsdaten nicht ermittelt werden kann. Um den Grund für diese Anomalie zu klären, wäre ggf. eine direkte Untersuchung der simulierten Trajektorien erforderlich.

### Zusammenfassung

Die Untersuchung der Effekte eines Leistungsungleichgewichts zwischen hin- und zurücklaufenden Kühlstrahlen ergab in mehrfacher Hinsicht eine deutliche Korrelation mit den in Abschnitt 7.1.1 festgestellten Diskrepanzen zwischen den am Experiment durchgeführten Messungen und den Simulationsergebnissen. Festzu-

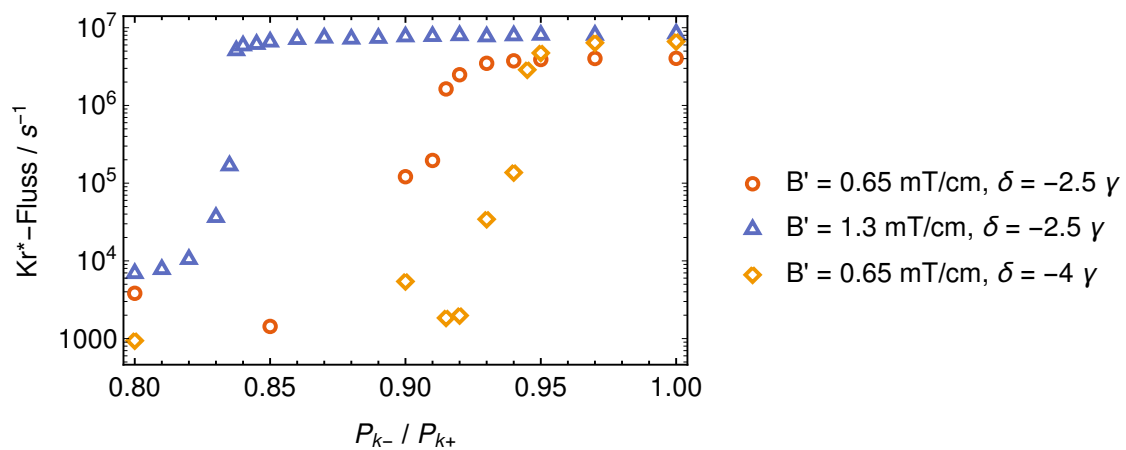


Abbildung 7.9.: **Variation der Kühlleistungssymmetrie bei verschiedenen Verstimmungen und Feldgradienten**

Die simulierten Daten für  $B' = 0,65 \text{ mT/cm}$ ,  $\delta = -2,5 \gamma$  entsprechen Abb. 7.5. Eine größere Verstimmung wirkt sich offenbar negativ aus. Der Fluss nimmt bereits unterhalb eines Gleichgewichts von 95 % ab, obwohl eine Verstimmung von  $-4 \gamma$  bei ausbalancierter Kühlleistung einen höheren Fluss generiert. Eine Verdoppelung des Feldgradienten scheint dagegen geeignet, ein Strahlungleichgewicht bis zu 85 % zu kompensieren.

## 7. Ergebnisse der Simulation

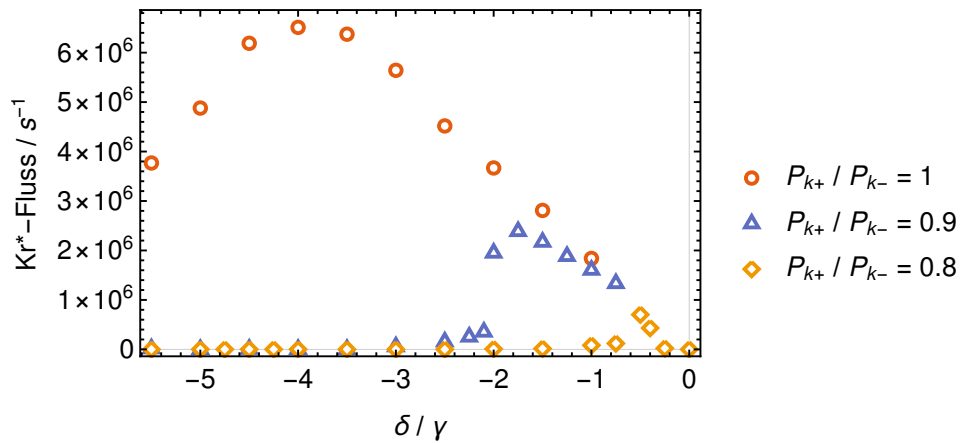
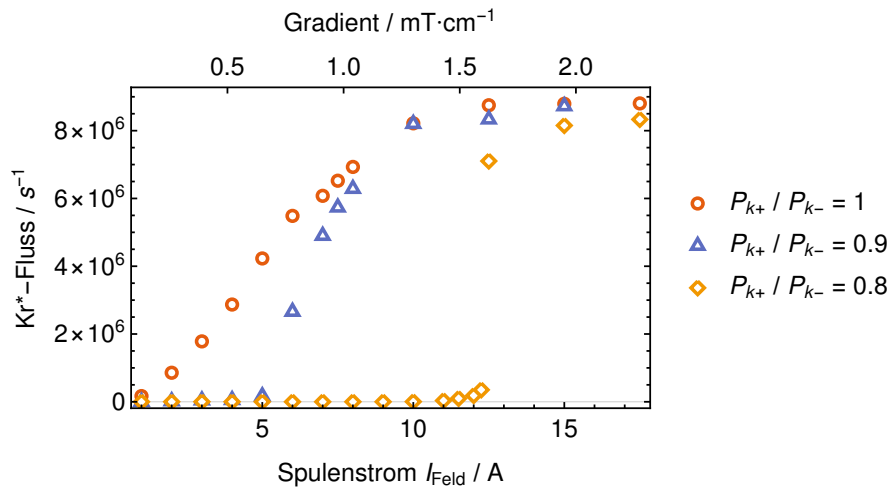


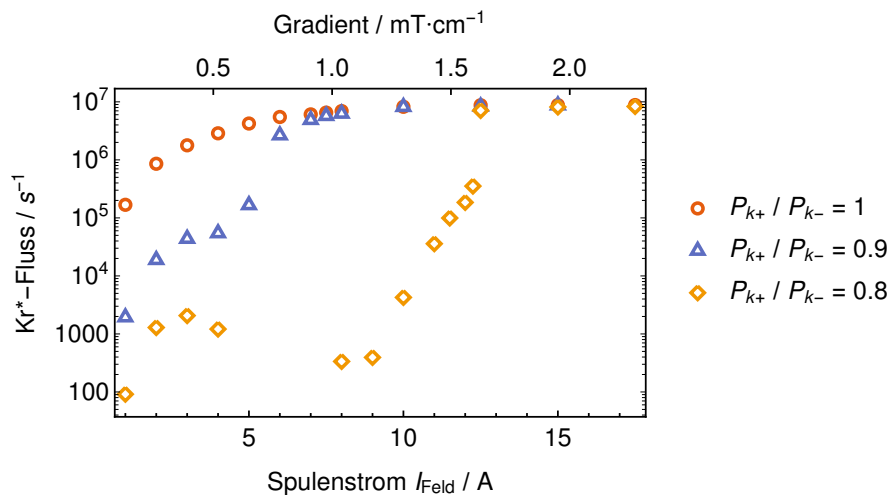
Abbildung 7.10.: **Variation der Verstimmung bei verschiedenen Kühlleistungssymmetrien**

Die Verstimmung der 2D-Kühlstrahlen wurde bei 100 %, 90 % und 80 % Leistungsgleichgewicht variiert. Der Feldgradient betrug  $0,65 \text{ mT/cm}$ . Bei vollständigem Gleichgewicht liegt das Flussmaximum bei einer Verstimmung von  $-4\gamma$ . Je stärker das Ungleichgewicht, desto weiter verschiebt sich das Maximum hin zu kleineren Verstimmungen. Im Experiment lag das Maximum bei  $-2,5\gamma$ , was die These eines vorhandenen Ungleichgewichts stützt.





(a) Lineare Darstellung



(b) Logarithmische Darstellung

### Abbildung 7.11.: Variation des Magnetfelds bei verschiedenen Kühlleistungssymmetrien

Der Gradient des 2D-MOT-Magnetfelds wurde bei 100 %, 90 % und 80 % Leistungsgleichgewicht variiert. Die Verstimmung betrug  $-2,5 \gamma$ . Ein nicht zu starkes Leistungsungleichgewicht kann durch einen größeren Feldgradienten weitgehend kompensiert werden. Der Kompensationseffekt setzt bei einem Wert ein, der von der Stärke des Ungleichgewichts abhängt. In der logarithmischen Darstellung ist zu erkennen, dass der Fluss bei 80 % Symmetrie im Bereich zwischen 5 und 7 A ein Minimum (in der Simulation 0) erreicht.

## 7. Ergebnisse der Simulation

stellen ist:

- Die Differenz der Flusswerte zwischen Simulation und Messung und das Absinken des Flusses bei asymmetrischer Strahlleistung liegen in der gleichen Größenordnung
- Die im Experiment ermittelte optimale Verstimmung entspricht nicht dem in der Simulation bei 100 % Gleichgewicht berechneten Wert, liegt aber in der Nähe des Wertes für eine Asymmetrie von 90 %
- Ein Leistungsungleichgewicht im Bereich um 90 % ist angesichts der Anordnung der optischen Elemente zur Erzeugung der Kühlstrahlen zu erwarten

Die genannten Punkte lassen den Schluss zu, dass ein Leistungsungleichgewicht der Kühlstrahlen sehr wahrscheinlich die dominierende Ursache für den geringen im Experiment erzielten Atomfluss darstellt. Die Ergebnisse der Simulation legen nahe, dass mit symmetrischer Leistungsverteilung und angepasster Verstimmung unter Beibehaltung der anderen Betriebsparameter ein Fluss von knapp  $10^7$  Kr-84/s erreicht werden könnte.

### 7.1.3. Optimierung des Systems

Um die optimalen Betriebsparameter unabhängig von den durch das reale System gegebenen Einschränkungen zu bestimmen und das Potenzial des 2D-3D-MOT-Konzepts mit optischer Anregung auszuloten, wurden Simulationen unter Variation weiterer Parameter durchgeführt.

#### VUV-Leistung und Quenching

Abbildung 7.12 zeigt das Ergebnis zweier Simulationen mit Variation der VUV-Leistung, wobei die Leistung der Quench-Wellenlängen 760 nm und 810 nm einmal identisch mit der VUV-Leistung war und ein anderes Mal auf Null gesetzt wurde. Der simulierte Leistungsbereich erstreckt sich bis 150 % der gemessenen VUV-Leistung. In diesem Bereich spielen Quench-Effekte offenbar keine signifikante Rolle. Dies ist konsistent mit der Beobachtung von Ding et al. [Din+07] bei einem Experiment zur optischen Anregung von Krypton in einem Atomstrahl mit einer ähnlich arbeitenden Lampe.

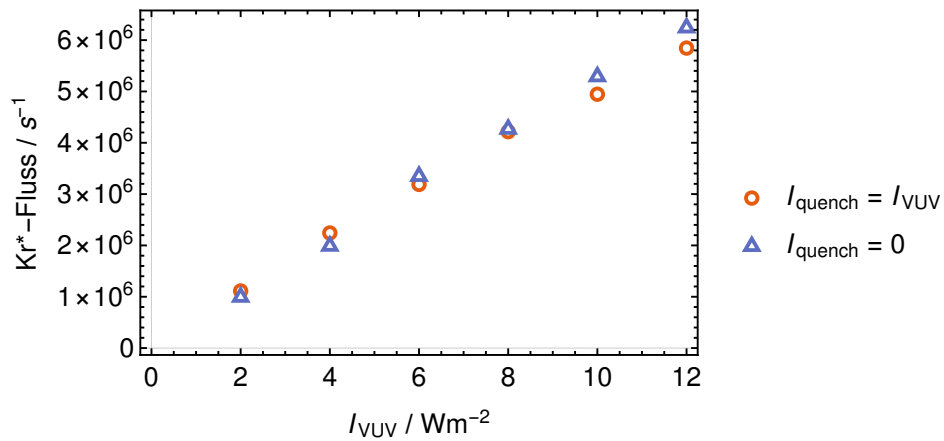


Abbildung 7.12.: **Variation der VUV-Intensität mit und ohne Quench-Wellenlängen**

Die VUV-Intensität wurde sowohl synchron mit der Intensität der Quench-Wellenlängen als auch mit Quench-Intensität 0 variiert. Die Intensitäten sind hier als die Leistungsdichten der als Flächenquelle modellierten Fenster der Lampen definiert. Mit einer Quench-Leistung von 0 ist der Verlauf nahezu linear, da der 123 nm-Übergang weit von der Sättigung entfernt ist. Mit Quench-Wellenlängen gleicher Leistung wie die VUV-Photonen reduziert sich der Atomfluss im betrachteten Bereich nur wenig.

## 7. Ergebnisse der Simulation

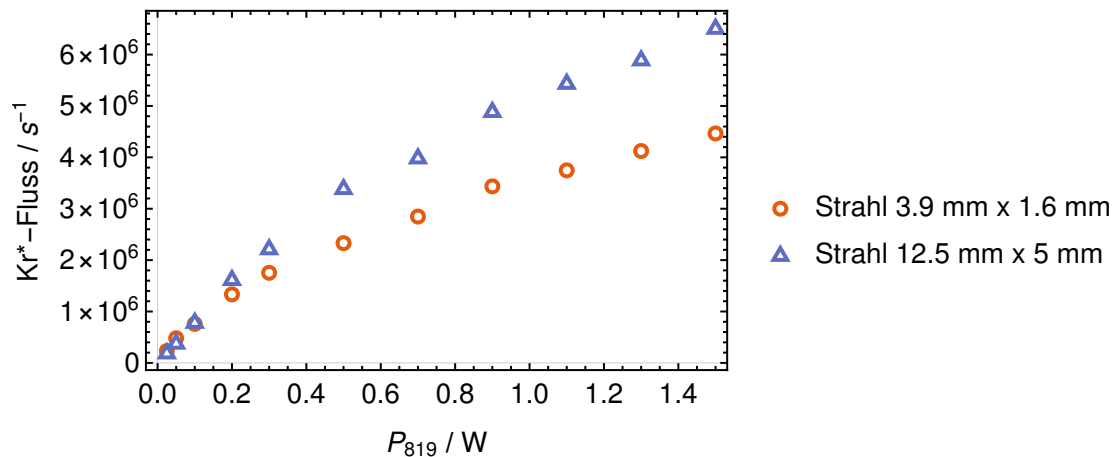


Abbildung 7.13.: **Variation der 819 nm-Leistung bei unterschiedlichen Strahlabmessungen**

Die 819 nm-Leistung wurde mit dem gemessenen Strahlradian von 3,9 mm  $\times$  1,6 mm und mit den ursprünglich geplanten Radien von 12,5 mm  $\times$  5 mm variiert. Die bessere Ausleuchtung des Anregungsraums durch die größeren Strahlen bewirkt eine deutlich höhere Anregungseffizienz.

### Geometrie der 819 nm-Strahlen

Die 819 nm-Strahlen des Prismensystems besaßen, wie schon in Kapitel 5.1 erwähnt, nicht die ursprünglich vorgesehenen Radien 12,5 mm  $\times$  5 mm, sondern waren mit 3,9 mm  $\times$  1,6 mm wesentlich kleiner. Um die Auswirkungen dieser Änderung zu quantifizieren, wurde mit beiden Geometrien die Variation der Anregungsleistung simuliert. Das Ergebnis wird in Abbildung 7.13 gezeigt. Der kleinere Strahl führt zu einer früher einsetzenden Sättigung, so dass die höhere Intensität die reduzierte räumliche Ausleuchtung nicht kompensieren kann. Bei einer Leistung von 1,5 W wird mit den großen Strahlradian eine etwa 1,4-fach höhere Anregungseffizienz erreicht.

### Verstimmung und Magnetfeld

Um die optimale Kombination von Verstimmung und Feldgradient zu ermitteln, wurden Simulationen mit Variation der Verstimmung bei sechs verschiedenen Spulenströmen durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 7.14 dargestellt. Bei einem Spulenstrom von 12,5 bis 15 A, entsprechend einem Gradienten von 1,6 bis 2 mT/cm, und einer Verstimmung zwischen  $-3\gamma$  und  $-3,5\gamma$  wird das Maximum

des Atomflusses erreicht. Mit schwächerem Feld ist tendenziell eine stärkere Verstimmung erforderlich, ohne jedoch Flüsse in ähnlicher Höhe erzeugen zu können.

#### 7.1.4. Optimiertes System mit Push- und Bremsstrahlen

Die vorgesehenen Push- und Bremsstrahlen sind in dieser Konfiguration des ATTA-Aufbaus nicht implementiert worden, so dass deren Wirkung experimentell nicht bestimmt werden konnte. Basierend auf den im vorherigen Abschnitt ermittelten optimierten Betriebsparametern wurde daher der Aufbau mit Push- und Bremsstrahl simuliert, um die potenzielle Effizienz des vollständigen Systems mit 2D<sup>+</sup>-MOT abschätzen zu können.

Die Simulationen wurden mit den ursprünglich geplanten größeren 819 nm-Strahlradien von 12,5 mm×5 mm, einer 819 nm-Leistung von 2 W, einem Feldgradienten von 1,6 mT/cm und einer Verstimmung von  $-3,5 \gamma$  durchgeführt. Bei den bisherigen Simulationen ohne Pushstrahl wurde eine maximale Einfanggeschwindigkeit der 3D-MOT von 20 m/s angenommen und alle schnelleren Atome im Atomstrahl der 2D-MOT verworfen. Da Push- und Bremsstrahlen die longitudinale Geschwindigkeitskomponente der Atome beeinflussen, wurden die Simulationsergebnisse nun für zwei maximale Einfanggeschwindigkeiten von 20 m/s und 30 m/s berechnet.

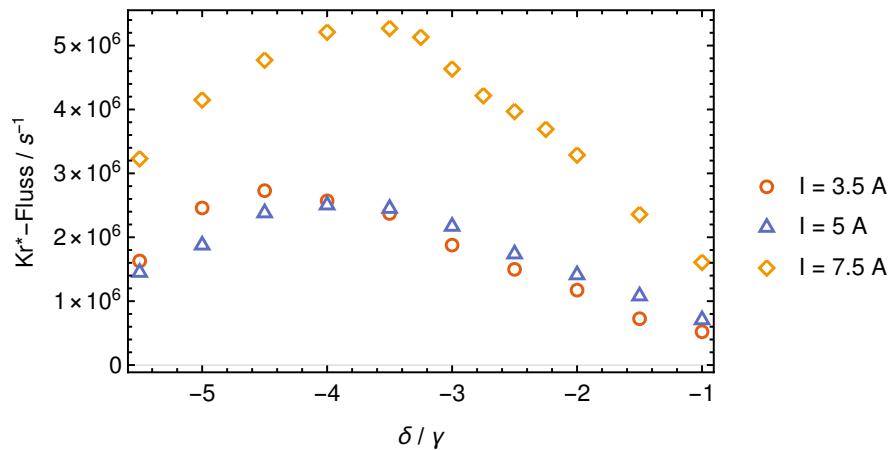
##### Nur Pushstrahl

Zunächst wurde ein Pushstrahl mit einem Durchmesser von 10 mm und einer Verstimmung von  $-2,3 \gamma$  mit variierter Leistung simuliert. Die Ergebnisse sind in Abbildung 7.15 dargestellt. Bei einer Begrenzung auf 20 m/s wird der maximale Fluss bei ca. 3 mW erreicht und liegt um einen Faktor 2,5 höher als ohne Pushstrahl. Mit einer Leistung über 7 mW sinkt der Fluss unter den Wert ohne Pushstrahl. Bei  $v_{z,\max} = 30 \text{ m/s}$  fällt der Fluss bei größerer Leistung nicht ab, steigt aber auch nur noch wenig und sättigt bei etwa dem dreifachen Fluss ohne Pushstrahl.

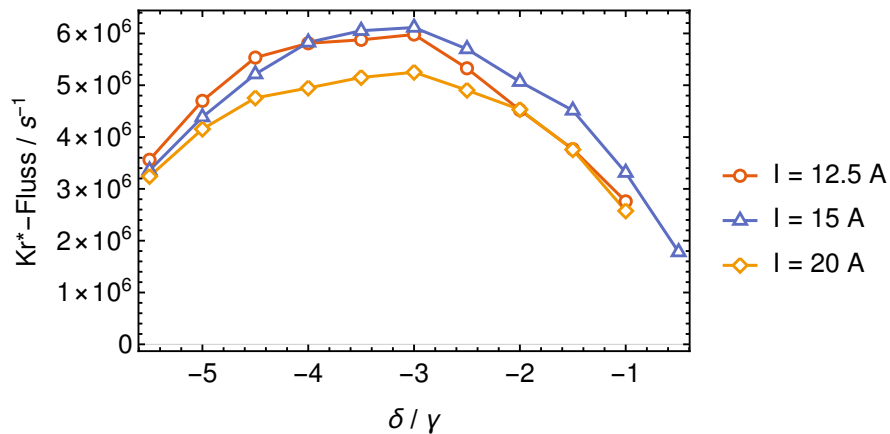
Die Longitudinalgeschwindigkeit steigt erwartungsgemäß mit wachsender Pushleistung. Auffällig ist der Anstieg der Transversalgeschwindigkeit oberhalb von  $P_{\text{push}} = 3 \text{ mW}$  mit  $v_{z,\max} = 20 \text{ m/s}$ . Dies deutet darauf hin, dass die Atome bei hoher Leistung nicht nur zu schnell werden, sondern dass die verbleibenden langsamen Atome auch schlechter gekühlt werden.

Die Ursache für diesen Effekt wird bei der Betrachtung der Quellregionen der gefangenen Atome in Abbildung 7.16 deutlich. Ohne Pushstrahl können ausschließlich Atome mit Bewegungsrichtung nach unten gefangen werden, die im oberen Bereich

## 7. Ergebnisse der Simulation



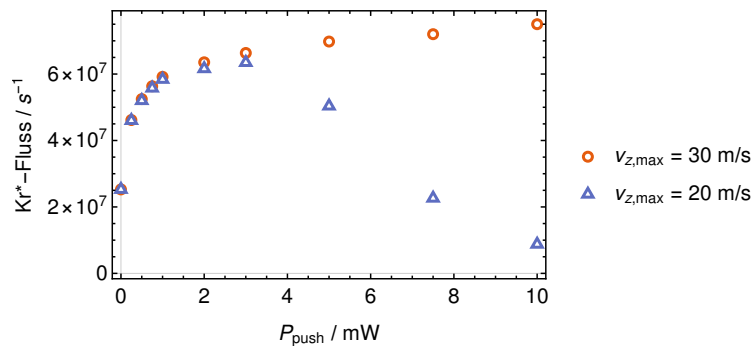
(a) Niedriger Strombereich



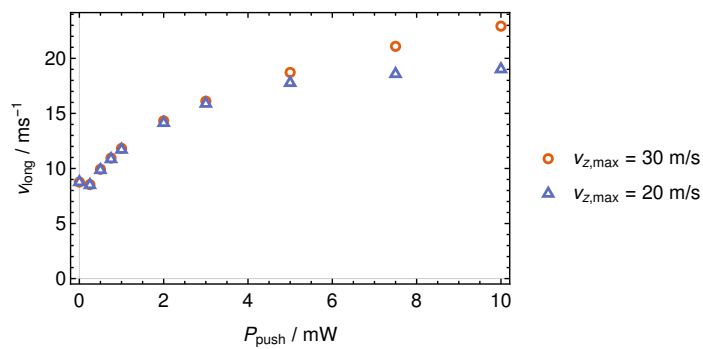
(b) Hoher Strombereich

Abbildung 7.14.: **Variation der Verstimmung bei verschiedenen Feldgradienten**

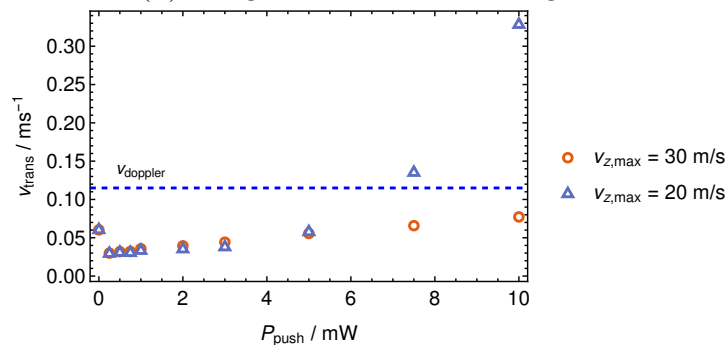
Zur besseren Übersicht sind die Ergebnisse auf zwei Diagramme verteilt. Der Gradient entspricht  $0,13 \text{ mT} \cdot \text{cm}^{-1} \text{ A}^{-1}$ . Infolge eines Fehlers bei der Parametereingabe wurden die Simulationen mit einer Leistung des 819 nm-Anregungslasers von nur 250 mW statt 1,4 W durchgeführt. Die absoluten Werte des Flusses sind daher zu niedrig. Hier ist jedoch der qualitative Verlauf relevant. Der optimale Spulenstrom liegt im Bereich 12,5 bis 15 A, entsprechend einem Gradienten zwischen 1,6 und 2 mT/cm, mit einer Verstimmung von  $-3\gamma$  bis  $-3,5\gamma$ .



(a) Atomfluss



(b) Longitudinale Geschwindigkeit



(c) Betrag der transversalen Geschwindigkeit

Abbildung 7.15.: **Variation der Leistung des Pushstrahls**

Es werden jeweils zwei Datensätze mit einer maximalen longitudinalen Endgeschwindigkeit der Atome von 20 m/s bzw. 30 m/s dargestellt, die als maximale Einfangeschwindigkeit der 3D-MOT angenommen wird. Schnellere Atome werden verworfen. Die Verstimmung des Pushstrahls betrug  $-2,3\gamma$ . Bei  $v_{z,\text{max}} = 20 \text{ m/s}$  erreicht der Fluss ein Maximum mit  $P_{\text{push}} = 3 \text{ mW}$ .

## 7. Ergebnisse der Simulation

der Kammer angeregt werden. Mit geringer Push-Leistung werden zunehmend auch Atome mit Bewegungsrichtung nach oben aus dem unteren Kammerbereich gefangen. Bei weiter wachsender Leistung steigt die Endgeschwindigkeit der Atome aus dem oberen Bereich, so dass sie die Einfanggeschwindigkeit überschreiten. Von unten können weiterhin Atome gefangen werden; jedoch treten diese auch weiter unten in den Kühlbereich ein, so dass die Verweilzeit in den Kühlstrahlen und damit die Kühleffizienz sinkt.

Die Variation der Verstimmung bei  $P_{\text{push}} = 3 \text{ mW}$  ist in Abbildung 7.17 dargestellt. Der erzeugte Fluss ist relativ tolerant gegenüber Veränderungen der Verstimmung und bildet ein breites Maximum im Bereich um  $-2,5 \gamma$ . Bei  $v_{z,\text{max}} = 20 \text{ m/s}$  bricht der Fluss oberhalb von  $-2 \gamma$  jedoch zusammen, während der Pushstrahl bei  $v_{z,\text{max}} = 30 \text{ m/s}$  sogar mit einer kleinen positiven Verstimmung noch wirksam ist. Bei kleinen Verstimmungen steigt die Transversalgeschwindigkeit an, ähnlich wie es bei großer Push-Leistung der Fall ist. Die in Abbildung 7.18 gezeigte Verteilung der Quellregionen bei Variation der Verstimmung ergibt ebenfalls ein ähnliches Bild wie bei der Leistungsvariation.

Bei einer Einfanggeschwindigkeit der 3D-MOT von  $20 \text{ m/s}$  kann mit Pushstrahl demnach ein Kr-Fluss von etwa  $7 \cdot 10^7$  Atome/s erreicht werden. Eine Erhöhung von  $v_{z,\text{max}}$  auf  $30 \text{ m/s}$  hätte nur eine unwesentliche Verbesserung zur Folge.

### Push- und Bremsstrahl

Für die Simulation der kombinierten Push- und Bremsstrahlen wurden die Parameter des Pushstrahls auf  $P_{\text{push}} = 3 \text{ mW}$  und  $\delta_{\text{push}} = -3 \gamma$  gesetzt und die Leistung des Bremsstrahls variiert. Die Verstimmung des Bremsstrahls war  $\delta_{\text{retard}} = \delta_{\text{push}}$ . Das Ergebnis wird in Abbildung 7.19 gezeigt. Entgegen der Erwartung bewirkt der Bremsstrahl nur eine geringe Erhöhung des Atomflusses gegenüber der Konfiguration ausschließlich mit Pushstrahl. Der Bremsstrahl reduziert jedoch die longitudinale Geschwindigkeit im Atomstrahl bis unter  $10 \text{ m/s}$  und eignet sich somit zum Ausgleich einer niedrigen Einfanggeschwindigkeit der 3D-MOT.

Das Ergebnis der Variation der Verstimmung des Bremsstrahls ist in Abbildung 7.20 dargestellt. Bei unveränderten Parametern des Pushstrahls war die Leistung des Bremsstrahls auf  $3 \text{ mW}$  gesetzt. Auch eine Variation der Verstimmung führt nicht zu einer signifikanten Erhöhung des Atomflusses durch den Bremsstrahl. Der maximal erzielbare Fluss der  $2\text{D}^+$ -MOT liegt somit bei etwa  $10^8$  Atomen/s.



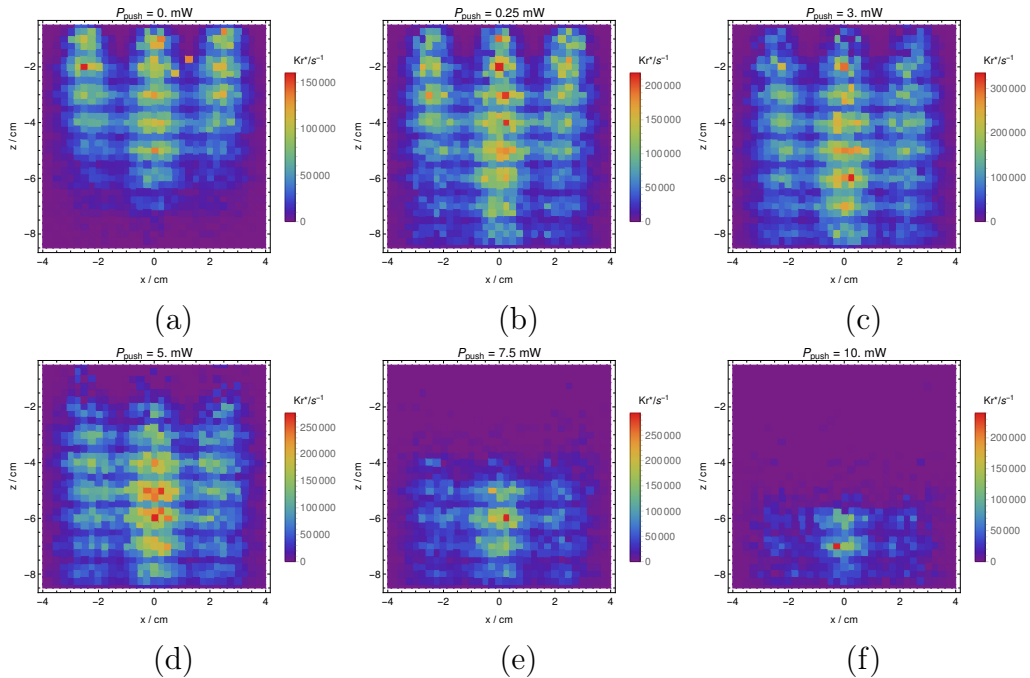
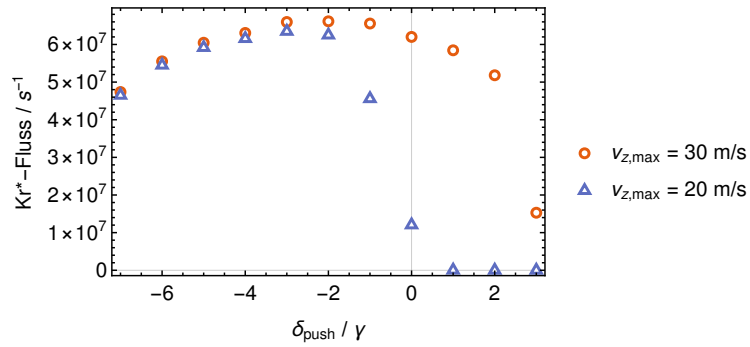


Abbildung 7.16.: **Quellregion der gefangenen Atome bei Variation der Pushstrahlleistung**

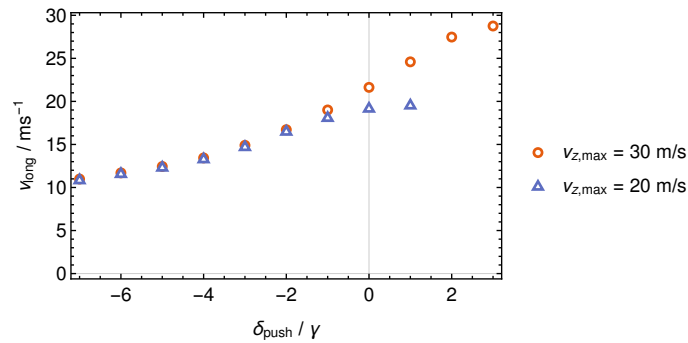
Dargestellt sind die ortsaufgelösten Quellregionen bei verschiedenen Leistungen des Pushstrahls, wobei eine maximale Einfanggeschwindigkeit der 3D-MOT von 20 m/s angenommen wird und Atome mit höherer Endgeschwindigkeit verworfen werden.

Mit steigender Leistung werden zunehmend Atome aus dem unteren Bereich der Kammer mit einer anfänglichen vertikalen Geschwindigkeitskomponente  $v_z > 0$  gefangen. Oberhalb von  $P_{\text{push}} = 3$  mW werden mehr Atome mit negativem  $v_z$  auf eine Endgeschwindigkeit  $> 20$  m/s beschleunigt, so dass aus dem oberen Kammerbereich kaum noch Atome gefangen werden.

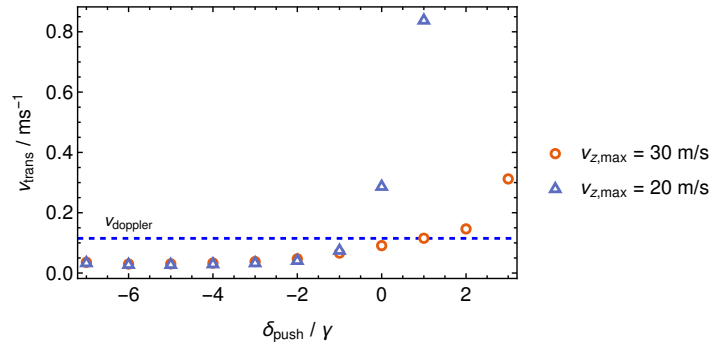
## 7. Ergebnisse der Simulation



(a) Atomfluss



(b) Longitudinale Geschwindigkeit



(c) Betrag der transversalen Geschwindigkeit

### Abbildung 7.17.: Variation der Verstimmung des Pushstrahls

Die Verstimmung wurde bei einer Pushstrahl-Leistung von 3 mW variiert. Das Maximum des Flusses ist relativ breit und liegt unabhängig von der Einfanggeschwindigkeit bei einer Verstimmung zwischen  $-2\gamma$  und  $-3\gamma$ .

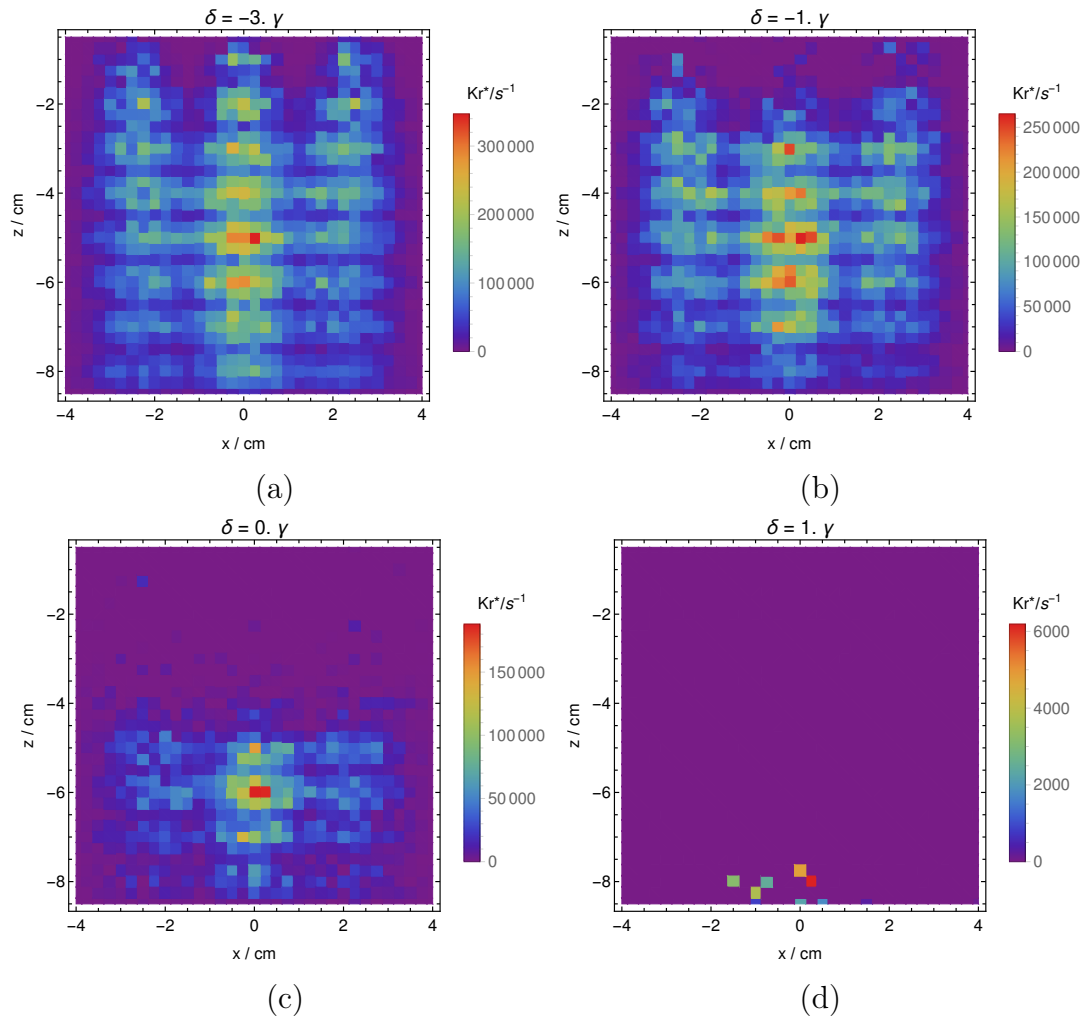
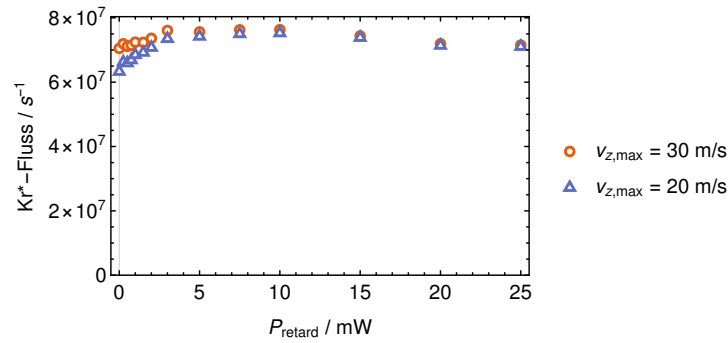


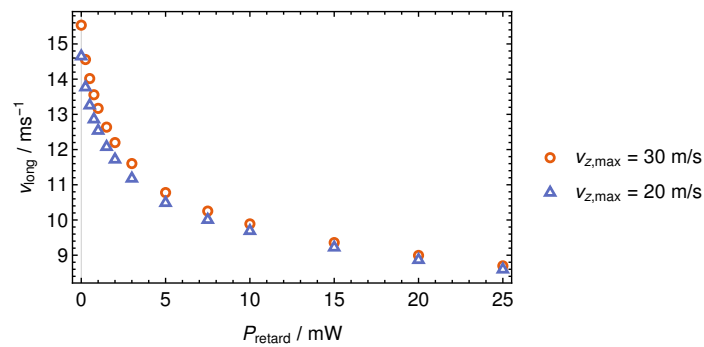
Abbildung 7.18.: **Quellregion der gefangenen Atome bei Variation der Verstimmung des Pushstrahls**

Die Quellregionen werden für eine maximale Einfanggeschwindigkeit von 30 m/s dargestellt. Die Veränderung der Quellregion verläuft mit positiver werdender Verstimmung ähnlich wie bei der Leistungsvariation bei steigender Leistung. Je positiver die Verstimmung, desto mehr Atome mit  $v_z < 0$  geraten in Resonanz und werden auf Geschwindigkeiten oberhalb 30 m/s beschleunigt.

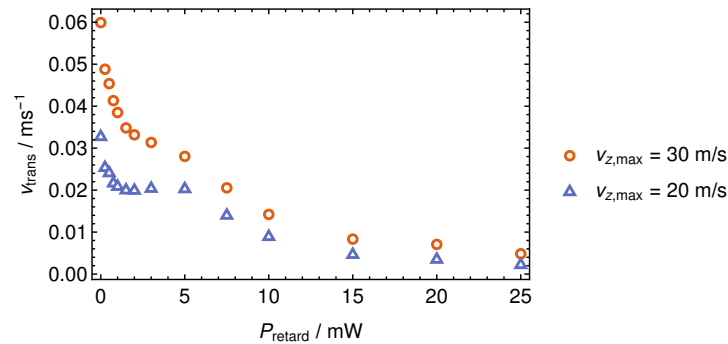
## 7. Ergebnisse der Simulation



(a) Atomfluss



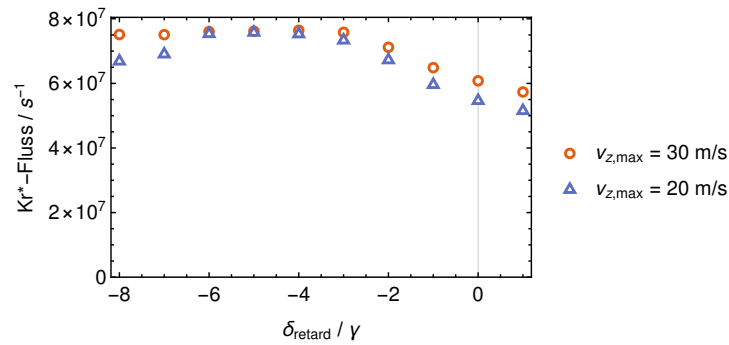
(b) Longitudinale Geschwindigkeit



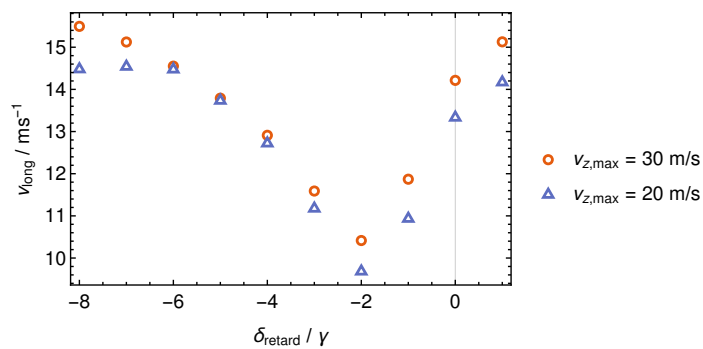
(c) Betrag der transversalen Geschwindigkeit

### Abbildung 7.19.: Variation der Leistung des Bremsstrahls

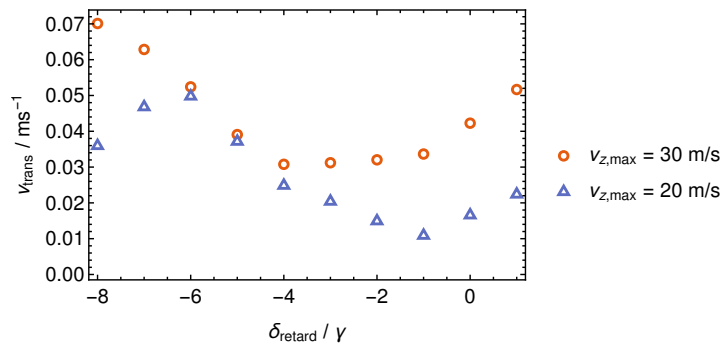
Der Pushstrahl war auf  $P_{\text{push}} = 3 \text{ mW}$  und  $\delta_{\text{push}} = -3\gamma$  eingestellt. Der maximale Fluss liegt mit  $7,5 \cdot 10^7$  Atomen/s nur wenig höher als bei Betrieb mit Pushstrahl allein. Die Longitudinalgeschwindigkeit wird mit steigender Bremsleistung jedoch deutlich reduziert. Der gezeigte Verlauf der Transversalgeschwindigkeit ist hypothetisch, da sie hier weit unterhalb der Dopplergeschwindigkeit von  $11,5 \text{ cm/s}$  liegt.



(a) Atomfluss



(b) Longitudinale Geschwindigkeit



(c) Betrag der transversalen Geschwindigkeit

Abbildung 7.20.: **Variation der Verstimmung des Bremsstrahls**

Die Parameter des Pushstrahls blieben unverändert. Die Leistung des Bremsstrahls betrug 3 mW. Die Verstimmung des Bremsstrahls hat im Bereich zwischen  $-4\gamma$  und  $-6\gamma$  nur geringen Einfluss auf den Atomfluss. Die minimale Longitudinalgeschwindigkeit wird bei  $-2\gamma$  auf Kosten eines etwas reduziertes Flusses erreicht. Die Transversalgeschwindigkeit ist wie zuvor als hypothetischer Wert ohne Dopplergrenze zu betrachten.

## 7.2. Konfiguration mit zwei Lampen

Mit der Anordnung mit zwei um  $45^\circ$  geneigten Lampen sollte überprüft werden, ob die Konzentration der VUV-Photonen auf einen Bereich in großer Nähe zu den 2D-MOT-Kühlstrahlen eine Erhöhung des erreichbaren Atomflusses gegenüber der 8-Lampen-Konfiguration bewirkt. Ferner wurde durch Messungen unter Abrasterung des Anregungsbereichs mit einem einzelnen 819nm-Strahl - ähnlich dem Prinzip der Simulationen in dieser Arbeit - die räumliche Verteilung der Ursprungsbereiche der gefangenen Atome ermittelt.

Die Messungen an diesem Aufbau wurden mit der CMOS-Kamera als Fluoreszenzsensor durchgeführt. Die Kamera ermöglicht die Aufnahme der 3D-MOT-Ladekurve mit einer zeitlichen Auflösung von 20 ms. Die Laderate kann dann direkt aus der Steigung der Kurve am Beginn des Ladevorgangs bestimmt werden, wo die Fluoreszenz noch näherungsweise linear steigt.

Von Simsek [Sim18] wurden umfangreiche Messungen mit der Abrasterungsmethode durchgeführt. Einige davon sollen hier dazu dienen, die Ergebnisse der Simulation auch hinsichtlich der Quellregionen der gefangenen Atome mit realen Messungen zu vergleichen. Zudem wurde an diesem Aufbau erstmalig der Pushstrahl im ATTA-System eingesetzt, dessen Wirkung am 8-Lampen-System nur simuliert wurde.

Messungen und Simulationen wurden jeweils mit Feldgradient  $0,7 \text{ mT/cm}$ , Verstimmung  $-2,5 \gamma$ , einer Kühlstrahlleistung von  $250 \text{ mW}$  und einem Druck von  $1 \cdot 10^{-5} \text{ mbar}$  durchgeführt. Die 819 nm-Leistung variierte in den Messungen zwischen  $200 \text{ mW}$  und  $250 \text{ mW}$  und wurde in den Simulationen auf  $250 \text{ mW}$  gesetzt. In der 3D-MOT wurden die Kühlstrahlradianen durch Einsetzen einer andere Strahlformungsoptik von  $13,5 \text{ mm}$  auf  $3,8 \text{ mm}$  reduziert.

### 7.2.1. Verteilung der Quellregionen

Zum Vergleich zwischen der Bestimmung der Quellregionen gefangener Atome durch Messung und durch Simulation wurde eine per Abrasterung durchgeführte Messung bei einem Druck von  $1 \cdot 10^{-5} \text{ mbar}$  mit einem Durchmesser des 819 nm-Strahls von  $2 \text{ mm}$  herangezogen. In den Abbildungen 7.21 und 7.22 sind die Ergebnisse dargestellt.

Die erreichten Werte des Atomflusses liegen bei der Simulation um einen Faktor von ca. 500 höher als in der Messung und übertreffen die bei der 8-Lampen-Konfiguration festgestellte Diskrepanz damit um etwa das fünffache. Es ist davon auszugehen, dass die Kühlstrahlasymmetrie der 2D-MOT auch hier eine ähnliche

Wirkung hat und den Fluss um etwa zwei Größenordnungen reduziert. Für die 3D-MOT mit verkleinerten Kühlstrahlen wurde von Woelk [Woe16] eine maximale Einfanggeschwindigkeit von 13 m/s abgeschätzt, während sie mit den ursprünglichen 13,5 mm-Strahlen über 20 m/s liegt. In Verbindung mit der Strahlasymmetrie erhalten die Transversalkomponenten zudem eine Vorzugsrichtung (Abb. 7.6c), so dass der kleinere Kühlbereich verfehlt werden kann. Eine Verringerung des gemessenen Atomflusses ist also durchaus plausibel.

Die bevorzugte Quellregion stimmt bei Messung und Simulation gut überein und bildet ein ausgeprägtes Maximum im Bereich der Überschneidung der Lampenkegel.

### 7.2.2. Pushstrahl

Der Pushstrahl mit einem Durchmesser von 10 mm wurde zunächst bei einer Verstimmung von  $-2,3\gamma$  in der Leistung variiert. Der Durchmesser des mit der Rasterung mitbewegten 819 nm-Strahls betrug ebenfalls 10 mm. Um eine gute räumliche Auflösung zu erzielen, blieben die Rasterschritte wie in allen Simulationen zuvor auf einem Wert von 2,5 mm, wodurch sich die Anregungsbereiche des Lasers überlappen und die absoluten Werte der Simulationsergebnisse zu hoch sind. Die Messwerte wurden für die Darstellung entsprechend skaliert.

Abbildung 7.23 zeigt das Ergebnis für simulierte maximale Einfanggeschwindigkeiten von 20 m/s und 15 m/s. Bei  $v_{z,\max} = 15$  m/s fällt der Fluss schon ab einer Leistung von 2 mW ab, während die Messwerte noch bis mindestens 5 mW relativ stabil bleiben. Dies spricht gegen die im vorherigen Abschnitt formulierte These, dass die verkleinerten 3D-Kühlstrahlen aufgrund einer verminderten Einfanggeschwindigkeit zu einer geringeren Laderate führen. Das potenzielle Problem, dass der Fangbereich verfehlt werden kann, insbesondere bei Strahlasymmetrie in der 2D-MOT, besteht jedoch fort. Der Pushstrahl bewirkt ebenso wie in der 8-Lampen-Konfiguration ungefähr eine Verdoppelung des Flusses.

In Abbildung 7.24 sind die Quellregionen der Simulation illustriert. Die Messungen wurden mit einem größeren Raster unter Auslassung einiger Bereiche durchgeführt und eignen sich nicht für einen visuellen Vergleich. Sie sind als Verlauf auf der  $z$ -Achse mit und ohne Pushstrahl in Abbildung 7.25 dargestellt. Auffällig ist sowohl in der Messung als auch in der Simulation die Verschiebung des Maximums mit zunehmender Leistung nach unten, da mit aktivem Pushstrahl auch Atome mit Bewegungsrichtung nach oben gefangen werden können. Da beim 8-Lampen-Aufbau kein ausgeprägtes Maximum der Quellregion existiert, konnte dieser Effekt dort nicht beobachtet werden.

## 7. Ergebnisse der Simulation

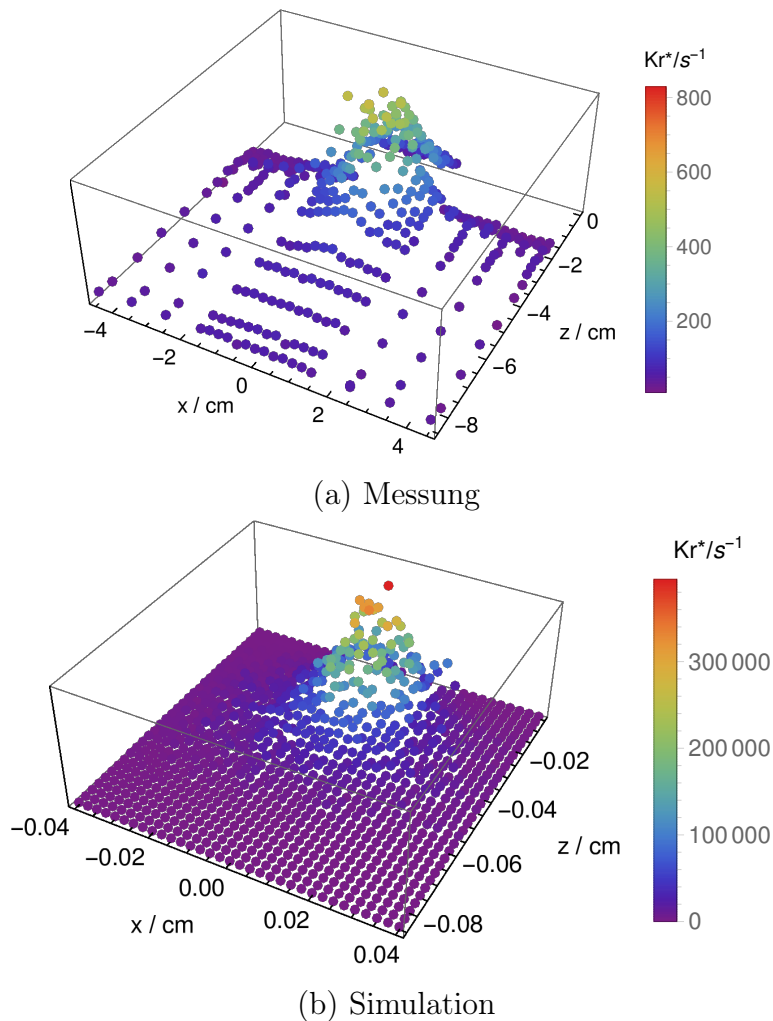
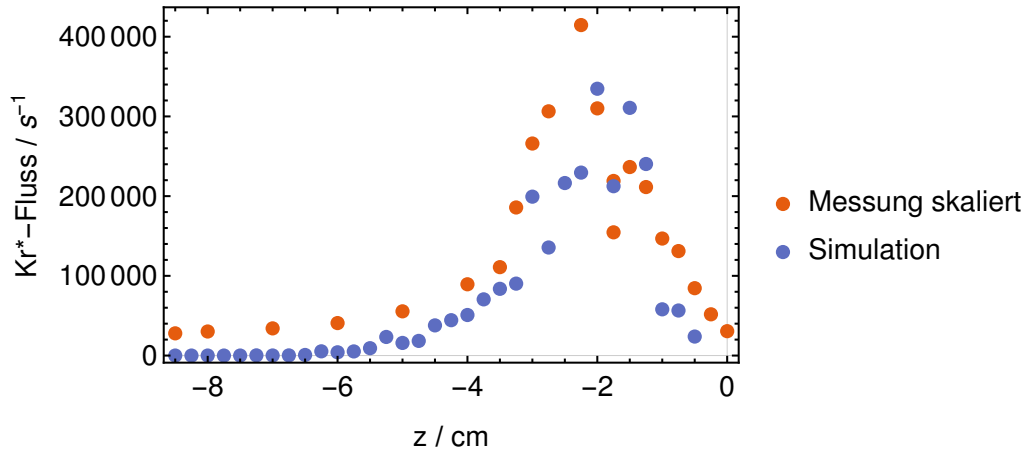


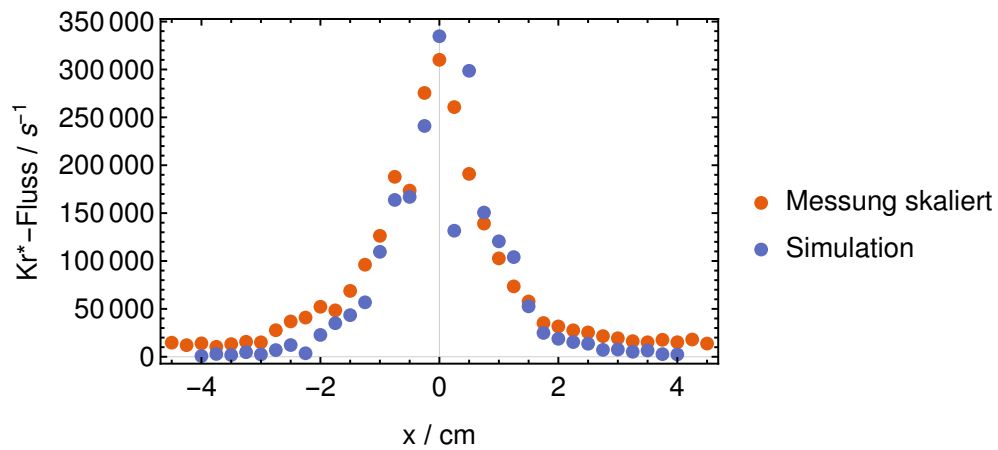
Abbildung 7.21.: **Quellregion der gefangenen Atome**

Messung und Simulation wurden mit  $p = 1 \cdot 10^{-5}$  mbar und  $P_{819} = 250$  mW durchgeführt. Zur besseren Erkennbarkeit der Verteilung wurde eine dreidimensionale Darstellung als Höhenprofil gewählt. Sowohl bei der Simulation als auch in der Messung konzentriert sich die Ursprungsregion der Atome auf den Kreuzungsbereich der Lampenkegel.





(a) vertikal



(b) horizontal

Abbildung 7.22.: **Querschnitte der Quellregion der gefangenen Atome**

Dargestellt ist ein vertikaler und ein horizontaler Schnitt durch das Maximum der Datensätze aus Abb. 7.21 bei  $x = 0$  bzw.  $z = -2$  cm. Die Messwerte wurden mit dem Faktor 500 skaliert.

## 7. Ergebnisse der Simulation

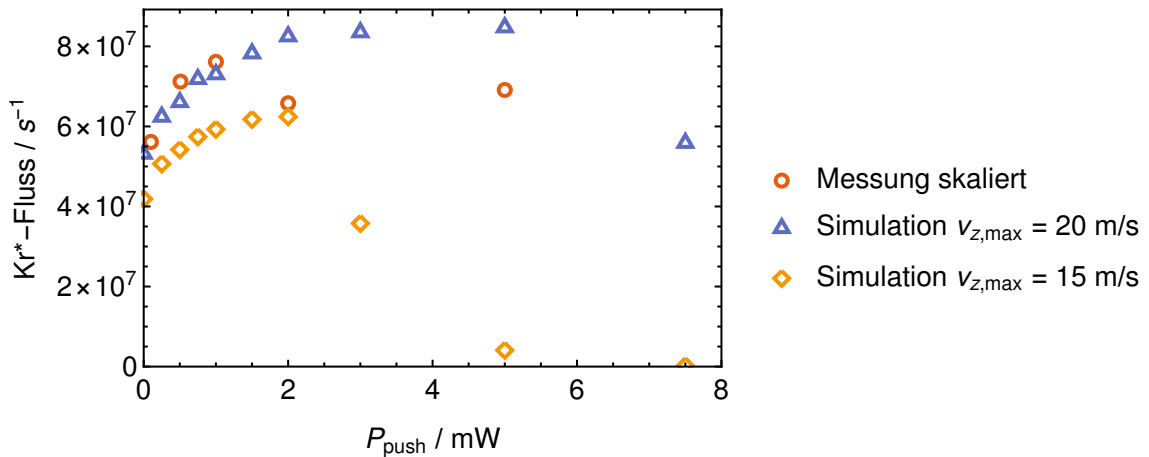


Abbildung 7.23.: **Leistungsvariation des Pushstrahls**

Gezeigt wird der Vergleich der Messung mit der Simulation für zwei maximale Einfanggeschwindigkeiten der 3D-MOT. Die Werte lassen vermuten, dass die Einfanggeschwindigkeit durch die kleineren 3D-Strahlen nicht wesentlich unter 20 m/s reduziert wird.

Die Untersuchung der 2-Lampen-Konfiguration konnte in gewissem Maße dazu beitragen, das Simulationsmodell zu validieren. Die Ursache der noch größeren Diskrepanz zwischen Modell und Messung als beim 8-Lampen-System bleibt aber unklar und hinterlässt einen Rest Unsicherheit, ob das Modell auch bei stark unterschiedlichen Konfigurationen brauchbare Ergebnisse liefert. Eine Verbesserung der Effizienz durch das 2-Lampen System hat sich weder in den Messungen noch in den Simulationen abgezeichnet.

## 7.2. Konfiguration mit zwei Lampen

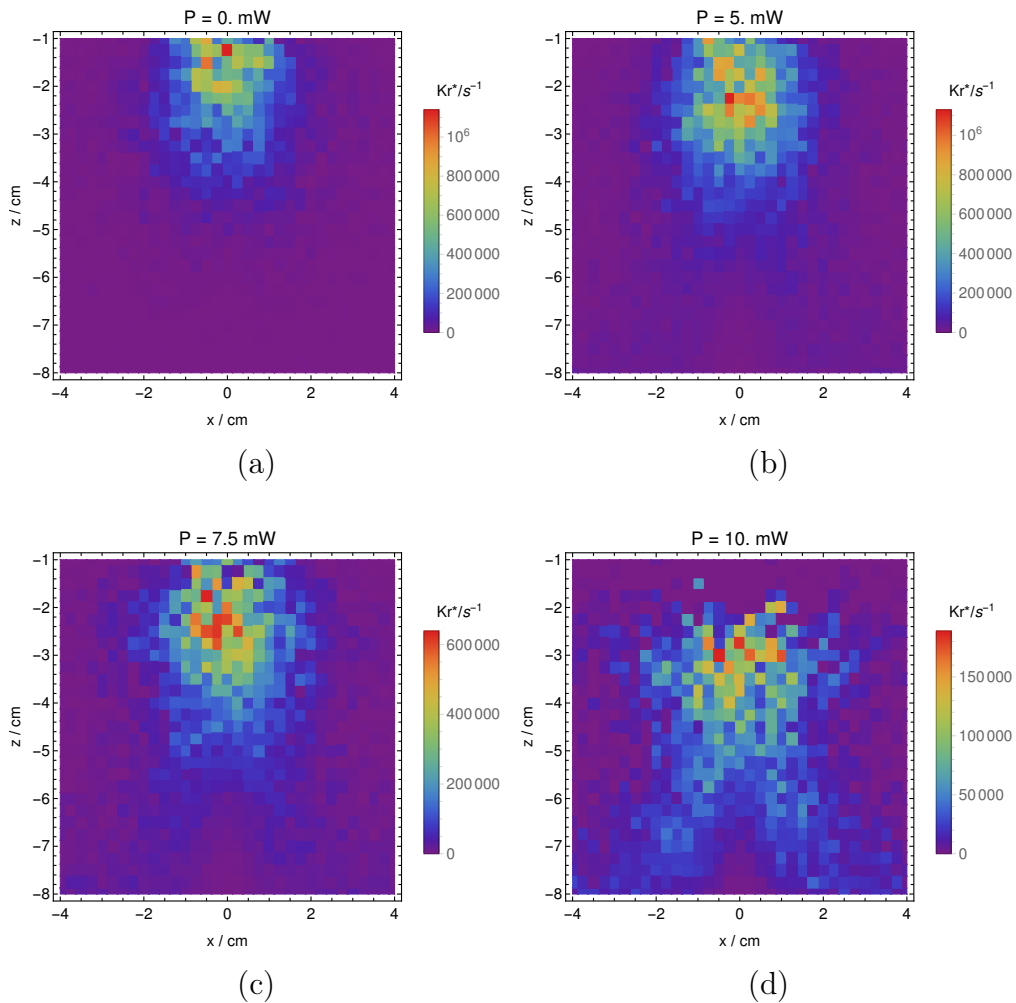


Abbildung 7.24.: **Quellregion bei simulierter Variation der Pushstrahlleistung**

Dargestellt sind die Quellregionen bei verschiedenen Pushstrahlleistungen mit einer angenommenen maximalen Einfanggeschwindigkeit der 3D-MOT von 20 m/s. Wie auch beim 8-Lampenaufbau mit Prismensystem (7.16) werden bei zunehmender Leistung mehr Atome aus dem unteren Bereich gefangen. Hier ist außerdem zu erkennen, dass sich das Maximum deutlich nach unten verschiebt.

## 7. Ergebnisse der Simulation

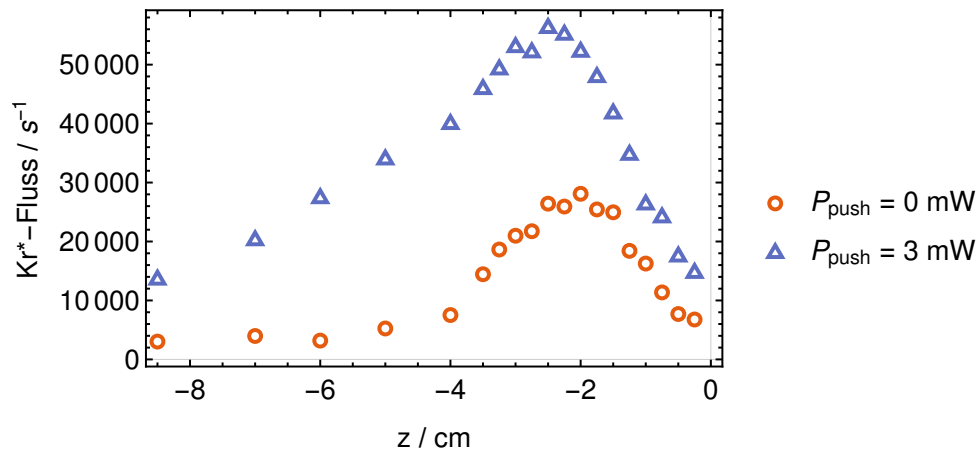


Abbildung 7.25.: **Gemessener Verlauf der Quellregion auf der  $z$ -Achse mit und ohne Pushstrahl**

Die dargestellten Messungen korrespondieren mit den in Abb. 7.24 gezeigten Simulationsergebnissen, wurden jedoch nur für wenige Messpunkte entlang der  $z$ -Achse durchgeführt. Auch hier ist mit aktivem Pushstrahl eine Verschiebung des Maximums und ein vermehrter Einfang aus dem unteren Bereich erkennbar.

## 8. Zusammenfassung und Ausblick

Mithilfe der in dieser Arbeit entwickelten mathematischen Modellierung einer zweidimensionalen magneo-optischen Falle mit integrierter optischer Erzeugung metastabiler Krypton-Atome konnten umfangreiche Monte-Carlo-Simulationen des am ZNF aufgebauten ATTA-Experiments durchgeführt werden. Die aus den Simulationsergebnissen gewonnenen Erkenntnisse können die von den Erwartungen stark abweichenden experimentellen Ergebnisse erklären und erlauben eine solide Einschätzung des Potenzials eines auf einer 2D/3D-MOT-Kombination basierenden ATTA-Aufbaus für die Konzentrationsmessung seltener Kryptonisotope:

- Der äußerst geringe im Experiment erzielte metastabile Kr-84-Fluss von weniger als 100 000 Atomen/s ist sehr wahrscheinlich das Resultat einer Leistungsasymmetrie der 2D-MOT-Kühlstrahlen, verursacht durch Verluste in einer Größenordnung von 10 % in der Rückreflexions- und Strahlformungsoptik. Ohne diese Einschränkung - beispielsweise durch die Verwendung von Prismen zur Rückreflexion - könnte mit einem Fluss von  $10^7$  Atomen/s gerechnet werden.
- Verluste von metastabilem Kr durch von den VUV-Lampen emittierte Quench-Photonen spielen keine signifikante Rolle.
- Eine weitere Optimierung des Systems, insbesondere eine Erhöhung des Feldgradienten und der 819 nm-Leistung und -raumabdeckung, könnte den Kr-84-Fluss auf über  $2 \cdot 10^7$ /s steigern.
- Die Konfiguration mit zwei Lampen bewirkt keine Verbesserung der Effizienz gegenüber dem System mit acht Lampen.
- Der vollständige Ausbau zur 2D<sup>+</sup>-MOT mit Push- und Bremsstrahl würde voraussichtlich einen Fluss von knapp  $10^8$ /s erzeugen.

## 8. Zusammenfassung und Ausblick

Damit läge die Effizienz der Anlage gerade eben an der Untergrenze für regelmäßige, in praktikablen Zeiträumen durchführbare Messungen zur Konzentrationsbestimmung von Kr-85 in atmosphärischen Proben, sofern als Referenzisotop Kr-83 verwendet wird. Dabei darf nicht außer Acht gelassen werden, dass die durchgeführten Simulationen auf einem zwar detailliert aufgebauten, aber dennoch in vielerlei Hinsicht idealisierten mathematischen Modell basieren, das den im realen Aufbau erzielbaren Atomfluss überschätzen dürfte.

Unter diesen Aspekten erschien eine Weiterverfolgung des 2D-MOT-Konzepts zur Erzeugung eines metastabilen Kr-Strahls nicht sinnvoll. Selbst bei einer optimistischen Einschätzung, dass der prognostizierte Fluss von  $10^8$  Atomen/s durch entsprechende Modifikationen des Aufbaus erreicht werden könnte, würde eines der Hauptziele, eine signifikante Erhöhung des Probendurchsatzes gegenüber der etablierten Methode mit RF-Anregung, verfehlt werden.

Die Ursache der geringen Effizienz liegt im Wesentlichen in einer Kombination aus zwei systeminhärenten Faktoren:

- Aus dem Hintergrundgas der 2D-MOT-Kammer treten im typischen Betriebsdruckbereich von  $10^5$  mbar etwa  $3 \cdot 10^{16}$  Atome/s in den Kühlbereich der 2D-MOT ein. Bei einer maximalen Einfanggeschwindigkeit von 50 m/s befindet sich bei einer maxwell'schen Geschwindigkeitsverteilung und einer Temperatur von 300 K jedoch nur ein Anteil von  $8 \cdot 10^{-4}$  dieses Teilchenflusses im Geschwindigkeitsbereich unterhalb von 50 m/s.
- Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Atom bei Eintritt in den Kühlbereich metastabil ist, liegt nur in der Größenordnung  $10^{-5}$  bis  $10^{-6}$ , da die Trajektorien der meisten Atome in relativ großem Abstand von den VUV-Lampen verlaufen, wo die VUV-Intensität niedrig ist.

Schon aus dieser groben Abschätzung ergibt sich ein maximal möglicher Fluss von etwa  $3 \cdot 10^8$ /s, der gut mit den Ergebnissen der Simulation übereinstimmt.

Um beide der oben genannten effizienzmindernden Faktoren zu vermeiden, sollten die anzuregenden Kr-Atome einerseits gezielt möglichst dicht an der VUV-Lampe entlang geführt werden; andererseits ist es erforderlich, einen größeren Geschwindigkeitsbereich der Maxwell-Verteilung zu nutzen. Eine Möglichkeit, die diese beiden Aspekte vereint, wäre die Erzeugung eines Atomstrahls mittels geeigneter Anordnungen von Kapillaren nahe am Austrittsfenster der Lampe und das anschließende Abbremsen mithilfe eines Zeeman-Slowers, bevor die Atome wie bisher in einer 3D-MOT gefangen und detektiert werden. Eine solche Anlage hätte Ähnlichkeit mit dem von Jiang et al. in [Jia+12] vorgestellten Aufbau mit RF-Anregung,

würde aber die Vorteile einer rein optischen Erzeugung des metastabilen Zustands beibehalten.

Während der Anfertigung dieser Arbeit hat die ATTA-Gruppe des ZNF mit der Konzeption und dem Aufbau eines ATTA-Experiments mit optischer Anregung unter Verwendung eines Zeeman-Slowers mit Permanentmagneten in Halbach-Konfiguration [Che+11] begonnen. Erste vorläufige Experimente deuten darauf hin, dass mit diesem System die Erzeugung eines Flusses langsamer metastabiler Kr84-Atome von über  $10^9$  Atomen/s möglich sein könnte, was das Ziel einer atmosphärischen Konzentrationsbestimmung von Kr-85 im routinemäßigen Messbetrieb in greifbare Nähe rückt.

## 8. Zusammenfassung und Ausblick



# Literatur

- [A K+20] A. Kramida u. a. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.8), [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd>. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. 2020.
- [AR97] C.S. Adams und E. Riis. “Laser cooling and trapping of neutral atoms”. In: *Progress in Quantum Electronics* 21.1 (1997), S. 1–79. ISSN: 0079-6727. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0079-6727\(96\)00006-7](https://doi.org/10.1016/S0079-6727(96)00006-7). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079672796000067>.
- [Bjo80] Gary C. Bjorklund. “Frequency-modulation spectroscopy: a new method for measuring weak absorptions and dispersions”. In: *Opt. Lett.* 5.1 (Jan. 1980), S. 15–17. DOI: 10.1364/OL.5.000015. URL: <http://www.osapublishing.org/ol/abstract.cfm?URI=ol-5-1-15>.
- [BV80] C. Bréchnac und R. Vetter. “Measurement of a metastability-exchange cross section in Krypton”. In: *Physical Review A* 22 (1980), S. 496–501.
- [CD48] R.D. Cowan und G.H. Dieke. “Self-Absorption of Spectrum Lines”. In: *Review of Modern Physics* 20 (1948), S. 418–454.
- [Che+01] C. Y. Chen u. a. “Beam of metastable krypton atoms extracted from a rf-driven discharge”. In: *Review of Scientific Instruments* 72.1 (2001), S. 271–272. DOI: 10.1063/1.1328400. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1328400>.
- [Che+10] C.-F. Cheng u. a. “An efficient magneto-optical trap of metastable krypton atoms”. In: *Review of Scientific Instruments* 81.12 (2010), S. 123106. DOI: 10.1063/1.3520133. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.3520133>. URL: <https://doi.org/10.1063/1.3520133>.
- [Che+11] P. Cheiney u. a. “A Zeeman slower design with permanent magnets in a Halbach configuration”. In: *Review of Scientific Instruments* 82.6 (Juni 2011), S. 063115. ISSN: 1089-7623. DOI: 10.1063/1.3600897. URL: <http://dx.doi.org/10.1063/1.3600897>.

## Literatur

- [CRU06] Saptarishi Chaudhuri, Sanjukta Roy und C. S. Unnikrishnan. “Realization of an intense cold Rb atomic beam based on a two-dimensional magneto-optical trap: Experiments and comparison with simulations”. In: *Phys. Rev. A* 74 (2 Aug. 2006), S. 023406. DOI: 10.1103/PhysRevA.74.023406. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.74.023406>.
- [Dae+11] Heiner Daerr u. a. “A novel vacuum ultra violet lamp for metastable rare gas experiments”. In: *Review of Scientific Instruments* 82.7 (2011), S. 073106. DOI: 10.1063/1.3610465. eprint: <https://doi.org/10.1063/1.3610465>. URL: <https://doi.org/10.1063/1.3610465>.
- [Dae11] Heiner Daerr. “Optische Systeme und Konzeptionen für die Ultraspu-renanalyse von Krypton-Isotopen”. Dissertation. Universität Hamburg, 2011.
- [Die+98] K. Dieckmann u. a. “Two-dimensional magneto-optical trap as a source of slow atoms”. In: *Phys. Rev. A* 58.5 (Nov. 1998), S. 3891–3895. DOI: 10.1103/PhysRevA.58.3891.
- [Din+07] Y. Ding u. a. “Thermal beam of metastable krypton atoms produced by optical excitation”. In: *Review of Scientific Instruments* 78.2, 023103 (2007), S. 023103. DOI: 10.1063/1.2437193. URL: <http://link.aip.org/link/?RSI/78/023103/1>.
- [Dzi+00] Krzysztof Dzierżęga u. a. “Accurate transition rates for the  $5p - 5s$  transitions in Kr I”. In: *Phys. Rev. A* 62.2 (Juli 2000), S. 022505. DOI: 10.1103/PhysRevA.62.022505.
- [Her09] Franziska Herrmann. “Entwicklung optischer Elemente für das Atom Trap Trace Analysis Experiment zur Spurengasanalyse von Kryptonisotopen”. Diplomarbeit. Universität Hamburg, 2009.
- [IAE13] IAEA. *Isotope Methods for Dating Old Groundwater*. Non-serial Publications. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2013. ISBN: 978-92-0-137210-9. URL: <https://www.iaea.org/publications/8880/isotope-methods-for-dating-old-groundwater>.
- [Jia+12] W. Jiang u. a. “An atom counter for measuring  $81\text{Kr}$  and  $85\text{Kr}$  in environmental samples”. In: *Geochimica et Cosmochimica Acta* 91 (2012), S. 1–6. ISSN: 0016-7037. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.gca.2012.05.019>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016703712003067>.

- [KNM05] Katoh Katsumi, Nishimiya Nobuo und Suzuki Masao. “Analysis of hyperfine structures and isotope shifts of Kr by saturated absorption spectroscopy”. In: *The academic reports* 28.1 (2005), S. 76–94. ISSN: 03876055. URL: <https://ci.nii.ac.jp/naid/110004066118/en/>.
- [Koh+14] M. Kohler u. a. “All-optical production and trapping of metastable noble-gas atoms down to the single-atom regime”. In: *EPL (Europhysics Letters)* 108.1 (2014), S. 13001. URL: <http://stacks.iop.org/0295-5075/108/i=1/a=13001>.
- [Koh11] Markus Kohler. “Vakuum-Ultra-Violette-Lichtquelle und Konzeptionen für die Ultrapurenanalyse von seltenen Kryptonisotopen”. Dissertation. Universität Hamburg, 2011.
- [KS93] Hidetoshi Katori und Fujio Shimizu. “Lifetime measurement of the  $1s_5$  metastable state of argon and krypton with a magneto-optical trap”. In: *Phys. Rev. Lett.* 70.23 (Juni 1993), S. 3545–3548. DOI: 10.1103/PhysRevLett.70.3545.
- [LL95] A. I. Ludin und B. E. Lehmann. “High-resolution diode-laser spectroscopy on a fast beam of metastable atoms for detecting very rare krypton isotopes”. In: *Applied Physics B* 61.5 (Nov. 1995), S. 461–465. ISSN: 1432-0649. DOI: 10.1007/BF01081274. URL: <https://doi.org/10.1007/BF01081274>.
- [MV99] H.J. Metcalf und P. Van der Straten. *Laser Cooling and Trapping*. Graduate texts in contemporary physics. Springer, 1999. ISBN: 978-0-387-98747-7.
- [Oka64] Hideo Okabe. “Intense Resonance Line Sources for Photochemical Work in the Vacuum Ultraviolet Region”. In: *J. Opt. Soc. Am.* 54.4 (Apr. 1964), S. 478–481. DOI: 10.1364/JOSA.54.000478. URL: <http://www.osapublishing.org/abstract.cfm?URI=josa-54-4-478>.
- [Phe59] A. V. Phelps. “Diffusion, De-excitation, and Three-Body Collision Coefficients for Excited Neon Atoms”. In: *Phys. Rev.* 114 (4 Mai 1959), S. 1011–1025. DOI: 10.1103/PhysRev.114.1011. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.114.1011>.
- [Sal07] E. Saloman. “Energy levels and observed spectral lines of krypton, Kr I through Kr XXXVI”. In: *Journal of Physical and Chemical Reference Data - J PHYS CHEM REF DATA* 36 (März 2007), S. 215–386. DOI: 10.1063/1.2227036.

## Literatur

- [SCF92] A. M. Steane, M. Chowdhury und C. J. Foot. “Radiation force in the magneto-optical trap”. In: *J. Opt. Soc. Am. B* 9.12 (Dez. 1992), S. 2142–2158. DOI: 10.1364/JOSAB.9.002142. URL: <http://www.osapublishing.org/josab/abstract.cfm?URI=josab-9-12-2142>.
- [Sim18] Ergin Simsek. “Charakterisierung der zweidimensionalen magneto-optischen Falle in Hinblick auf die Quellregion metastabiler Krypton-Atome und deren effektive Lebensdauer”. Masterarbeit. Universität Hamburg, 2018.
- [SLK98] T Stace, A N Luiten und R P Kovacich. “Laser offset-frequency locking using a frequency-to-voltage converter”. In: 9.9 (Sep. 1998), S. 1635–1637. DOI: 10.1088/0957-0233/9/9/038. URL: <https://doi.org/10.1088/0957-0233/9/9/038>.
- [SM01] P. van der Straten und H.J. Metcalf. *Laser Cooling and Trapping*. Hrsg. von Many. 1. Aufl. Springer, 2001.
- [Smi00] Warren Smith. *Modern Optical Engineering: The Design of Optical Systems*. Jan. 2000.
- [Son19] Svenja Sonder. “Charakterisierung und Optimierung einer VUV-Plasmalampe zur Produktion metastabiler Krypton-Atome für das ATTA-Experiment”. Masterarbeit. Universität Hamburg, 2019.
- [WAM11] J. Whichello, C. Annese und A. Monteith. *Novel Technologies for IAEA Safeguards*. Vienna, 2011.
- [Woe16] Pablo Woelk. “Implementierung einer auf Einzelatomnachweis hin optimierten 3D-MOT Kühlstrahloptik und Entwicklung einer Strahlanalysetechnik auf Basis eines CMOS-Sensors”. Masterarbeit. Universität Hamburg, 2016.
- [Woh+01] W. Wohlleben u. a. “An atom faucet”. In: *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics* 15.2 (Aug. 2001), S. 237–244. ISSN: 1434-6079. DOI: 10.1007/s100530170171. URL: <https://doi.org/10.1007/s100530170171>.
- [YYD02] L. Young, D. Yang und R. W. Dunford. “Optical production of metastable krypton”. In: *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 35 (2002), S. 2985–2992.

- [ZP10] Zheng-Tian Lu und Peter Mueller. “Atom Trap Trace Analysis of Rare Noble Gas Isotopes”. In: *Paul Berman, Ennio Arimondo and Chun Lin, Editor(s), Advances In Atomic, Molecular, and Optical Physics, Academic Press* 58 (2010), S. 173–205.

*Literatur*

# A. Script für Monte-Carlo-Simulation

Das Script wurde in Mathematica 11.3 verfasst. Als Datei im \*.wl-Format (*Wolfram Language*) kann es ohne grafische Mathematica-Oberfläche gestartet werden und läuft ohne weitere Interaktion durch. Die Parameter für die Simulation müssen im Script vor dessen Aufruf deklariert werden. Der Aufruf erfolgt durch:

```
math -script <scriptname.wl> <kernels>
```

Der optionale Parameter <kernels> ist eine Ganzzahl, mit der die gewünschte Anzahl an Parallelkernels vom System angefordert werden können.

```

(*=====*)
(*Monte-Carlo-Simulation ATTA 2D-MOT*)
(*=====*)

Print["Command:\n", $CommandLine, "\n-----"];
kernelRequest =
  ImportString[$CommandLine // Last, "List"] // Last;
  (*bei Aufruf als Script Anzahl der Parallelkernels als Parameter nach
  Scriptdatei übergeben, ohne Angabe: alle verfügbaren*)

Print["Kernel request: ",
  If[kernelRequest // NumberQ, kernelRequest, "max"], "\n-----"];

If[kernelRequest // NumberQ,
  If[kernelRequest // Positive, LaunchKernels[kernelRequest]],
  LaunchKernels[]];
Print[Format[Kernels[], OutputForm]];
Print["Kernels: ", $KernelCount, "\n-----"];

(*universelle Konstanten*)
h := 6.626070040 10^-34
hq := h/(2 Pi)
c := 299792458
kb := 1.38 10^-23
u := 1.66 10^-27
Na := 6.022 10^23
muB = 9.274*10^-24;

mbar = 100;(*Umrechnungsfaktor in Pascal*)

(*Kr-Eigenschaften*)
setKr84 := (
  masse := 84 u;
  lambda811 := 811.29 10^-9;
  gamma811 := 2 Pi 5.56 10^6;
  isat811 := Pi h c gamma811/(3 lambda811^3);
  mjg = -2;
  mje = -3;(*negative mj, da in energetisch abgesenkte Niveaus gepumpt wird
  ([Sigma]-Konfiguration)*)
  gjg = 1.501;
  gje = 1.336;(*aus Saloman, Energy Levels and Observed Spectral Lines of
  Krypton*)

  zeemanshift = (mje gje - mjg gjg) muB/hq;(*s^-1T^-1*)
  abundance = 0.570;
  abundance86 = 0.173;
  sigma := 117 10^-20; (*Stoßquerschnitt Kr*/Kr *)
)

setKr84 (*Vorgabe Krypton 84*)

maxwell1d[v_, temp_] := (masse/(2*Pi*kb*temp))^(1/2)*
  Exp[-masse*(v^2/(2*kb*temp))];
updatePressure := (nDichte[p_] = p/(kb temp); (*Teilchendichte, p in Pascal *))

updatePressure

(*Kühlstrahlen und Sättigung*)

updateBeams := (
  (*Intensitätsprofil der Kühlstrahlen,normiert auf Leistung*)
  gauss2Dellipse[x_, y_, wx_, wy_] =
    2/(Pi wx wy) Exp[-2 x^2/wx^2 - 2 y^2/wy^2];

```



```

coolX[{x_, y_, z_}] =
  gauss2Dellipse[y, z - z0cool, wxycool2d, wzcool2d];
coolY[{x_, y_, z_}] =
  gauss2Dellipse[x, z - z0cool, wxycool2d, wzcool2d];
push[{x_, y_, z_}] = gauss2Dellipse[x, y, wPush, wPush];
retard[{x_, y_, z_}] = gauss2Dellipse[x, y, wRetard, wRetard];

s0X[{x_, y_, z_}, power811_] = power811/isat811*coolX[{x, y, z}];
s0Y[{x_, y_, z_}, power811_] = power811/isat811*coolY[{x, y, z}];
s0Push[{x_, y_, z_}, powerPush_] = powerPush/isat811*push[{x, y, z}];
s0Retard[{x_, y_, z_}, powerRetard_] =
  powerRetard/isat811*retard[{x, y, z}];

s0total[{x_, y_, z_}, power811_, powerPush_, powerRetard_] =
  s0X[{x, y, z}, power811] + s0Y[{x, y, z}, power811] +
  s0Push[{x, y, z}, powerPush] + s0Retard[{x, y, z}, powerRetard];

spos[x_, v_, sat_, delta_, i2d_] =
  sat*gamma811^2/(gamma811^2 +
    4 (delta*gamma811 - v 2 Pi/lambda811 +
      x*gradient*i2d*zeemanshift)^2);
sneq[x_, v_, sat_, delta_, i2d_] =
  coolBalance*sat*
  gamma811^2/(gamma811^2 +
    4 (delta*gamma811 + v 2 Pi/lambda811 -
      x*gradient*i2d*zeemanshift)^2);
sBeamPairDiff[x_, v_, sat_, delta_, i2d_] =
  spos[x, v, sat, delta, i2d] - sneq[x, v, sat, delta, i2d];
sBeamPairSum[x_, v_, sat_, delta_, i2d_] =
  spos[x, v, sat, delta, i2d] + sneq[x, v, sat, delta, i2d];
)

(*MOT-Bewegungsgleichungen*)
updateForce := (
  acceleration1D[x_, v_, s0_, s0tot_] =
    h/lambda811/masse gamma811/2 (s0/(1 + s0tot));
  accel1X[{x_, y_, z_}, vx_, vy_, delta_, i2d_, power811_, powerPush_,
    powerRetard_] =
    acceleration1D[x, vx,
      sBeamPairDiff[x, vx, s0X[{x, y, z}, power811], delta, i2d],
      sBeamPairSum[x, vx, s0X[{x, y, z}, power811], delta, i2d] +
      sBeamPairSum[y, vy, s0Y[{x, y, z}, power811], delta, i2d]];
  accel1Y[{x_, y_, z_}, vx_, vy_, delta_, i2d_, power811_, powerPush_,
    powerRetard_] =
    acceleration1D[y, vy,
      sBeamPairDiff[y, vy, s0Y[{x, y, z}, power811], delta, i2d],
      sBeamPairSum[x, vx, s0X[{x, y, z}, power811], delta, i2d] +
      sBeamPairSum[y, vy, s0Y[{x, y, z}, power811], delta, i2d]];

  accel1Zdown[{x_, y_, z_}, vx_, vy_, vzz_, deltaP_, deltaR_,
    deltaCool_, i2d_, power811_, powerDown_, powerUp_] =
    h/lambda811/masse gamma811/
    2 (-sneq[z, vzz, s0Push[{x, y, z}, powerDown], deltaP, 0]/(1 +
      sBeamPairSum[x, vx, s0X[{x, y, z}, power811], deltaCool,
        i2d] + sBeamPairSum[y, vy, s0Y[{x, y, z}, power811],
          deltaCool, i2d] +
      sneq[z, vzz, s0Push[{x, y, z}, powerDown], deltaP, 0] +
      spos[z, vzz, s0Retard[{x, y, z}, powerUp], deltaR, 0]));
  accel1Zup[{x_, y_, z_}, vx_, vy_, vzz_, deltaP_, deltaR_,
    deltaCool_, i2d_, power811_, powerDown_, powerUp_] =
    h/lambda811/masse gamma811/
    2 (spos[z, vzz, s0Retard[{x, y, z}, powerUp], deltaR,
      0]/(1 + sBeamPairSum[x, vx, s0X[{x, y, z}, power811],
        deltaCool, i2d] +
      sneq[z, vzz, s0Push[{x, y, z}, powerDown], deltaP, 0] +
      spos[z, vzz, s0Retard[{x, y, z}, powerUp], deltaR, 0]));
)

```

```

        sBeamPairSum[y, vy, s0Y[{x, y, z}, power811], deltaCool,
            i2d] + sneg[z, vzz, s0Push[{x, y, z}, powerDown], deltaP,
            0] + spos[z, vzz, s0Retard[{x, y, z}, powerUp], deltaR,
            0]));
    )

updateBeams
updateForce

(*Lampen und 819nm*)
(* Lampenkegel als Flächenquelle mit Abschattung durch Deckelbohrung *)

rsq[{x_, y_, z_}, R_, d_] =
    R^2/(x^2 + y^2 + (-z + d)^2 + R^2)*(-z + d)/
    Sqrt[x^2 + y^2 + (-z + d)^2];
(* Abstrahlung einer Kreisfläche mit Radius R im Punkt (0,0,d),
Abstrahlung nach unten (negative z-Richtung) *)

segment[R_, s_] =
    Re[2/(Pi R^2) (R^2 ArcCos[Abs[s]/(2 R)] -
        Abs[s]/2 Sqrt[R^2 - s^2/4])];
(* Schnittfläche zweier Kreise mit Radius R, Mittelpunkte um s
gegeneinander verschoben (wird bei Abs(s)>2R imaginär, deshalb Realteil) *)

kegel[{x_, y_, z_}, R_, d_] =
    rsq[{x, y, z}, R, d]*segment[R, d Sqrt[x^2 + y^2]/(-z + d)];
(*1/r^2-Abschwächung*Sichtbares Segment des Lampenfensters am Ort
(x,y,z) bei Lochradius R und Deckeldicke d,z-Koordinate läuft vom
Deckel nach unten in negativer Richtung*)

kegelgekippt[{x_, y_, z_}, R_, d_, phi_] =
    kegel[{x Cos[phi] - z Sin[phi], y, x Sin[phi] + z Cos[phi]}, R, d];
(*in xz-Ebene um phi gedreht*)

doppelkegel[{x_, y_, z_}, R_, d_, dx_] =
    kegelgekippt[{x + dx, y, z}, R, d, -Pi/4] +
    kegelgekippt[{x - dx, y, z}, R, d, Pi/4];
(*zwei um 45° gekippte Kegel im Abstand +-dx vom Nullpunkt*)

kegel8[{x_, y_, z_}, R_, d_, dxy_] =
    kegel[{x - dxy, y - dxy, z}, R, d] + kegel[{x, y - dxy, z}, R, d] +
    kegel[{x + dxy, y - dxy, z}, R, d] + kegel[{x - dxy, y, z}, R, d] +
    kegel[{x + dxy, y, z}, R, d] +
    kegel[{x - dxy, y + dxy, z}, R, d] + kegel[{x, y + dxy, z}, R, d] +
    kegel[{x + dxy, y + dxy, z}, R, d];
beam819gauss[{x_, y_, z_}, {x0_, z0_}, {wx_, wz_}] =
    gauss2Dellipse[x - x0, z - z0, wx, wz];
(*auf Leistung normiert*)

(*Hilfsfunktionen für DGL, stellen Aufruf nur mit numerischen
Koordinatenwerten sicher*)

beam819gaussh[{x_?NumericQ, y_?NumericQ, z_?NumericQ}, {x0_, z0_}, {wx_, wz_}] :=
    beam819gauss[{x, y, z}, {x0, z0}, {wx, wz}]
doppelkegelh[{x_?NumericQ, y_?NumericQ, z_?NumericQ}] :=
    doppelkegel[{x, y, z}, .003, .01, .015]
kegel8h[{x_?NumericQ, y_?NumericQ, z_?NumericQ}] :=
    kegel8[{x, y, z}, .003, .01, .025]

(*819-Prismensystem*)

raster819gauss[{x_, y_, z_}, {wx_, wz_}] =
    Sum[beam819gauss[{x, y, z}, {xi, zi}, {wx, wz}], {xi, -0.025, 0.025,
        0.025}, {zi, -0.08, -0.01, 0.01}];

```

```

raster819gaussh[{x_?NumericQ, y_?NumericQ, z_?NumericQ}, {wx_, wz_}] :=
  Piecewise[{{raster819gauss[{x, y, z}, {wx, wz}],
    Element[{x, y, z}, excitationregion]}}, 0];

doppler819korr[vy_] =
  1/(1 + 4 (2 Pi vy/\[Lambda][s4, p6]/\[Gamma][s4,
    p6])^2);(*Dopplerterm in y-Richtung*)

(*-----*)
(*Ratengleichungen*)
(*-----*)

Subscript[\[CapitalDelta]\[Omega], Lampe][\[Lambda]_] =
  Sqrt[8 kb *1000 Log[
    2]/(84 u)]^2 Pi/\[Lambda] ;(*Dopplerbreite bei 1000K*)
\[Gamma][i_, k_] = 1/\[Tau][i] + 1/\[Tau][k];
p[i_, k_] = is[i, k]/c a[i, k] \[Lambda][i, k]^3/(8 Pi h);
rSpont[i_, k_][t_] = n[k][t] a[i, k];
rStimuDown[i_, k_][t_] = n[k][t] p[i, k];
rStimuUp[i_, k_][t_] = n[i][t] g[i, k] p[i, k];
rate[i_, k_][t_] =
  rSpont[i, k][t] + rStimuDown[i, k][t] - rStimuUp[i, k][t];

(*Daten der Niveaus*)
g[0] := 1
\[Tau][s4] := 4.44 10^-9
g[s4] := 3
\[Tau][p6] := 27.35 10^-9
g[p6] := 5
\[Tau][s5] := 39
g[s5] := 5
\[Tau][p8] := 32.04 10^-9
g[p8] := 5
\[Tau][p3] := 28.08 10^-9
g[p3] := 3
\[Tau][s2] := 3.16 10^-9
g[s2] := 3
\[Tau][s3] := 0.5
g[s3] := 1
\[Tau][p10] := 38.13 10^-9
g[p10] := 3
\[Tau][p7] := 29.62 10^-9
g[p7] := 3
\[Tau][p9] := 27.69 10^-9
g[p9] := 3

(*Daten der Übergänge*)
\[Lambda][0, s4] := 123.58 10^-9
is[0, s4] :=
  int123/Subscript[\[CapitalDelta]\[Omega], Lampe][\[Lambda][0,
    s4]](*spektrale Intensitätsdichte*)
a[0, s4] := 1/\[Tau][s4]
g[0, s4] := 3/1

\[Lambda][s4, p6] := 819.01 10^-9
is[s4, p6] := int819*2/(Pi \[Gamma][s4, p6])
a[s4, p6] := 8.94 10^6
g[s4, p6] := 5/3

\[Lambda][s5, p6] := 760.15 10^-9
is[s5, p6] :=
  intQuench/Subscript[\[CapitalDelta]\[Omega], Lampe][\[Lambda][s5, p6]]
a[s5, p6] := 27.32 10^6
g[s5, p6] := 5/5

```

```

a[0, s5] := 1/\[Tau][s5]

\[Lambda][s5, p8] := 810.44 10^-9
is[s5, p8] :=
  intQuench/Subscript[\[CapitalDelta]\[Omega], Lampe][\[Lambda][s5, p8]]
a[s5, p8] := 8.96 10^6
g[s5, p8] := 5/5

\[Lambda][s4, p8] := 877.68 10^-9
is[s4, p8] := 000*2/(Pi \[Gamma][s4, p8])
a[s4, p8] := 22.17 10^6
g[s4, p8] := 5/3

\[Lambda][s5, p3] := 557.03 10^-9
is[s5, p3] :=
  0/Subscript[\[CapitalDelta]\[Omega], Lampe][\[Lambda][s5, p3]]
a[s5, p3] := 0.98 10^6
g[s5, p3] := 3/5

\[Lambda][s4, p3] := 587.99 10^-9
is[s4, p3] := 0*2/(Pi \[Gamma][s4, p3])
a[s4, p3] := 0.055 10^6
g[s4, p3] := 3/3

\[Lambda][s3, p3] := 785.48 10^-9
is[s3, p3] := 000*2/(Pi \[Gamma][s3, p3])
a[s3, p3] := 20.41 10^6
g[s3, p3] := 3/1

\[Lambda][s2, p3] := 828.11 10^-9
is[s2, p3] := 000*2/(Pi \[Gamma][s2, p3])
a[s2, p3] := 14.18 10^6
g[s2, p3] := 3/3

a[s4, s3] := 1/\[Tau][s3]

\[Lambda][0, s2] := 116.49 10^-9
is[0, s2] :=
  0/Subscript[\[CapitalDelta]\[Omega], Lampe][\[Lambda][0, s2]]
a[0, s2] := 1/\[Tau][s2]
g[0, s2] := 3/1

\[Lambda][s5, p10] := 892.87 10^-9
is[s5, p10] :=
  0/Subscript[\[CapitalDelta]\[Omega], Lampe][\[Lambda][s5, p10]]
a[s5, p10] := 22.89 10^6
g[s5, p10] := 3/5

\[Lambda][s4, p10] := 975.18 10^-9
is[s4, p10] := 000*2/(Pi \[Gamma][s4, p10])
a[s4, p10] := 3.13 10^6
g[s4, p10] := 3/3

\[Lambda][s3, p10] := 1672.65 10^-9
is[s3, p10] := 0*2/(Pi \[Gamma][s3, p10])
a[s3, p10] := 0.126 10^6
g[s3, p10] := 3/1

\[Lambda][s2, p10] := 1878.55 10^-9
is[s2, p10] := 0*2/(Pi \[Gamma][s2, p10])
a[s2, p10] := 0.074 10^6
g[s2, p10] := 3/3

```

```

\[\Lambda][s5, p7] := 769.45 10^-9
is[s5, p7] :=
  0/Subscript[\[CapitalDelta]\[\Omega], Lampe][\[\Lambda][s5, p7]]
a[s5, p7] := 4.27 10^6
g[s5, p7] := 3/5

\[\Lambda][s4, p7] := 829.81 10^-9
is[s4, p7] := 000*2/(Pi \[\Gamma][s4, p7])
a[s4, p7] := 29.31 10^6
g[s4, p7] := 3/3

\[\Lambda][s3, p7] := 1286.19 10^-9
is[s3, p7] := 0*2/(Pi \[\Gamma][s3, p7])
a[s3, p7] := 0.076 10^6
g[s3, p7] := 3/1

\[\Lambda][s2, p7] := 1404.57 10^-9
is[s2, p7] := 0*2/(Pi \[\Gamma][s2, p7])
a[s2, p7] := 0.106 10^6
g[s2, p7] := 3/3

rgl0[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[rate[0, s4][t] + rate[0, s2][t] + rSpont[0, s5][t]]
rgls4[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[-rate[0, s4][t] + rate[s4, p6][t] + rate[s4, p8][t] +
    rate[s4, p3][t] + rSpont[s4, s3][t] + rate[s4, p10][t] +
    rate[s4, p7][t]]
rglp6[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[-rate[s4, p6][t] - rate[s5, p6][t]]
rgls5[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[-rSpont[0, s5][t] + rate[s5, p6][t] + rate[s5, p8][t] +
    rate[s5, p3][t] + rate[s5, p10][t] + rate[s5, p7][t]]
rglp8[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[-rate[s4, p8][t] - rate[s5, p8][t]]
rglp3[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[-rate[s5, p3][t] - rate[s4, p3][t] - rate[s3, p3][t] -
    rate[s2, p3][t]]
rgls2[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[rate[s2, p3][t] - rate[0, s2][t] + rate[s2, p10][t] +
    rate[s2, p7][t]]
rgls3[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[-rSpont[s4, s3][t] + rate[s3, p3][t] + rate[s3, p10][t] +
    rate[s3, p7][t]]
rglp10[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[-rate[s5, p10][t] - rate[s4, p10][t] - rate[s3, p10][t] -
    rate[s2, p10][t]]
rglp7[t_, int123_, int819_, intQuench_] :=
  Evaluate[-rate[s5, p7][t] - rate[s4, p7][t] - rate[s3, p7][t] -
    rate[s2, p7][t]]

vmaxwell[temp_] := Sqrt[8 kb temp/(masse Pi)];

tdoppler := hq gamma811/(2 kb)(*Dopplertemperatur*)
vdoppler :=
  Sqrt[2 kb tdoppler/masse)(*Dopplergeschwindigkeit*)

```

(\*DGL Trajektorien\*)

```
trajekt2d[{{x0_, y0_, z0_}, {v0x_, v0y_, v0z_}, z00_}] :=
  NDSolve[{x'[t] ==
    startcool[
      t] Piecewise[{{acellX[{x[t], y[t], z[t]}, x'[t], y'[t],
        delta2D, i2dCoil, coolpwr, pushpwr, retardpwr],
        coolingregionQ[x[t], y[t], z[t]]}},
    y'[t] ==
    startcool[
      t] Piecewise[{{acellY[{x[t], y[t], z[t]}, x'[t], y'[t],
        delta2D, i2dCoil, coolpwr, pushpwr, retardpwr],
        coolingregionQ[x[t], y[t], z[t]]}},
    z'[t] ==
    startcool[
      t] Piecewise[{{acellZdown[{x[t], y[t], z[t]}, x'[t], y'[t],
        z'[t], deltaPush, deltaRetard, delta2D, i2dCoil, coolpwr,
        pushpwr, retardpwr], pushregionQ[x[t], y[t], z[t]]}}] +
    startcool[
      t] Piecewise[{{acellZup[{x[t], y[t], z[t]}, x'[t], y'[t],
        z'[t], deltaPush, deltaRetard, delta2D, i2dCoil, coolpwr,
        pushpwr, retardpwr], retarderregionQ[x[t], y[t], z[t]]}},
    x[0] == x0, x'[0] == v0x, y[0] == y0, y'[0] == v0y, z[0] == z0,
    z'[0] == v0z, startcool[0] == 0,
    WhenEvent[{z[t] < zDiffpump, z[t] > 0, x[t] < -0.1, x[t] > 0.1,
      y[t] < -0.1, y[t] > 0.1}, ztime = t; "StopIntegration"],
    WhenEvent[z[t] == z00, {startcool[t] -> 1, "RemoveEvent"}], {x,
    x', y, y', z, z', startcool}, {t, 0, 0.1},
    DiscreteVariables -> startcool, PrecisionGoal -> 10,
    AccuracyGoal -> 10, MaxSteps -> 2000000, MaxStepSize -> 0.0001,
    Method -> {"DiscontinuityProcessing" -> False}]
```

(\*DGL Anregung\*)

```
anr = Function[{intP, intL, tmax, t00, tStart},
  NDSolve[{n[0]'[t] == rgl0[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[s4]'[t] == rgl4[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[p6]'[t] == rglp6[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[s5]'[t] == rgl5[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[p8]'[t] == rglp8[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[p3]'[t] == rglp3[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[s2]'[t] == rgl2[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[s3]'[t] == rgl3[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[p10]'[t] == rglp10[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    n[p7]'[t] == rglp7[t, i1en[t] i1 intL, i2 intP, i3 intL],
    WhenEvent[t > tStart, {i1en[t] -> 1, "RemoveEvent"}],
    WhenEvent[t > t00, {i1en[t] -> 0, "RemoveEvent"}], i1en[0] == 0,
    n[0][0] == 1, n[s4][0] == 0, n[p6][0] == 0, n[s5][0] == 0,
    n[p8][0] == 0, n[p3][0] == 0, n[s2][0] == 0, n[s3][0] == 0,
    n[p10][0] == 0, n[p7][0] == 0}, {n[s5]}, {t, 0, tmax},
    DependentVariables -> {n[0], n[s4], n[p6], n[s5], n[p8], n[p3],
    n[s2], n[s3], n[p10], n[p7]}, PrecisionGoal -> 10,
    AccuracyGoal -> 10, DiscreteVariables -> i1en,
    StartingStepSize -> 0.000001, MaxSteps -> 2000000,
    MaxStepSize -> 0.0001];
```

(\* ATTA default \*)

```
temp := 300;
initialSamples := 500000;
vmax := 50;
vzmin := -0.4;
delta2D := -2.5;
```

```

i2dCoil := 5.3;
coolpwr := .25;
coolBalance := 1;

vzmax := -20;

deltaPush := delta2D;
deltaRetard := delta2D;
pushpwr := 0.005;
retardpwr := 0.005;
lampField[{x_, y_, z_}] := kegel8h[{x, y, z}];

(*Erzeugung Testteilchen an Position (x,z) im Rastervolumen *)

maxwellRandom[temp_, m_] :=
  RandomVariate[
    NormalDistribution[0, Sqrt[kb temp/m]], {initialSamples, 3}];

makeTestParticles[{x819_, z819_, r819_}] :=

Block[{x8 = x819, z8 = z819, r8 = r819},
  randomv = maxwellRandom[temp, masse];
  lowvelocitysample =
  Select[randomv,
    Norm[Drop[#, {3}]] < vmax && vzmax < #[[3]] < vzmin &] //
  DeleteCases[Null];(*schnelle Teilchen verwerfen*)

  slowsamples = Length[lowvelocitysample];
  (*Print["Anzahl Atome v<,"vmax," m/s: ",slowsamples," von ",
  initialSamples];*)

  randomxyz = RandomReal[{-1, 1}, {slowsamples, 3}];
  localizedxyz =
  Map[{r8, yRange, r8}*#1 + {x8, 0, z8} &,
  randomxyz];(*im Rastervolumen verteilen*)

  (*Schnittpunkte Trajektorien - Kühlbereich*)

  coolEntryLeaveTimes =
  Parallelize[
  MapThread[
    FindInstance[{{RegionMember[coolingBoundary, #1 + #2 t], t >= 0},
      t, Reals, 2] &, {localizedxyz, lowvelocitysample}]];
  schnittQ = Map[# != {} &, coolEntryLeaveTimes];

  samplexyzv = Thread[{localizedxyz, lowvelocitysample}];
  validxyzv = Pick[samplexyzv, schnittQ];(*nur Teilchen,
  die Kühlbereich treffen*)
  actualsamples = Length[validxyzv];
  (*Print["Simulierte Teilchen: ",actualsamples];*)

  coolEntryTime =
  Map[Min[t /. #] &, Pick[coolEntryLeaveTimes, schnittQ]];
  coolEntryTimeEff =
  MapThread[
    If[RegionMember[coolingregion, #1],
      0, #2] &, {validxyzv[[All, 1]], coolEntryTime}];

  (*an den Rand verschieben*)

  trajektRegion =
  Cuboid[{-yRange - 2 testvolhalfsize, -yRange,
    2 testvolhalfsize}, {yRange + 2 testvolhalfsize, yRange,
    zDiffpump - 2 testvolhalfsize}];

```

```

trajektBoundary = RegionBoundary[trajektRegion];
trajektStartTime =
  Parallelize[
    MapThread[
      t /. FindInstance[{RegionMember[trajektBoundary, #1 + #2 t],
        t <= 0}, t, Reals, 1] &, {validxyzv[[All, 1]],
        validxyzv[[All, 2]]}] // Flatten;

(*Zeiten für Anregung/Kühlen*)
zOrigin = validxyzv[[All, 1, 3]];
timeOrigin = -trajektStartTime;

excitationregion =
  Cuboid[{x819 - r819, -yRange, z819 - r819}, {x819 + r819, yRange,
z819 + r819}];
excitationBoundary = RegionBoundary[excitationregion];
excitationLeaveTime =
  Parallelize[
    MapThread[
      t /. FindInstance[{RegionMember[excitationBoundary, #1 + #2 t],
        t >= 0}, t, Reals, 1] &, {validxyzv[[All, 1]],
        validxyzv[[All, 2]]}] // Flatten;
excitationEntryTime =
  Parallelize[
    MapThread[
      t /. FindInstance[{RegionMember[excitationBoundary, #1 + #2 t],
        t <= 0}, t, Reals, 1] &, {validxyzv[[All, 1]],
        validxyzv[[All, 2]]}] // Flatten;

excitationLeaveZpos =
  validxyzv[[All, 1, 3]] + validxyzv[[All, 2, 3]]*excitationLeaveTime;
startposition =
  Thread[{validxyzv[[All, 1]] - validxyzv[[All, 2]]*timeOrigin,
    validxyzv[[All, 2]], excitationLeaveZpos}];
Null
]
(* erzeugt zufällige Testteilchen mit Maxwell-Verteilung 0 bis vmax
und Trajektorie durch Anregungsbereich {x819+-r819, -0.05<y<0.05, z819+-r819}.
Ausgabevariable "startposition"
im Format {{x0i,y0i,z0i},{v0xi,v0yi,v0zi}},{},{}... *)

(*Simulation*)

simulate[position819_, intensities_] :=

Block[{tt, x, y, z, n, t, ii1 = intensities[[1]],
  ii2 = intensities[[2]],
  ii3 = intensities[[3]], $MaxExtraPrecision = 1000},

If[position819[[2]] < zDiffpump || position819[[2]] > 0 ||
  position819[[1]] > yRange || position819[[1]] < -yRange,
  Print["invalid coordinates ", position819]; Abort[]];

tempmsg0 = PrintTemporary["make..."];
makeTestParticles[{position819[[1]], position819[[2]],
  testvolhalFSIZE}];

tempmsg1 = PrintTemporary["trajekt..."];
trajekt[tt_] =
  ParallelMap[{ztime =
    0; {{x[tt], y[tt], z[tt], x'[tt], y'[tt], z'[tt]} /.
    trajekt2d[#][[1]], ztime} &, startposition];
(*Rückgabefunktion{{x,y,z,x',y',z'},tEnd}*)

```



```

vz = startposition[[All, 2, 3]];

tempmsg2 = PrintTemporary["result1..."];
result1 =
  ParallelMap#[#[[1]] /. t -> #[[2]] &,
    trajekt[t]];(*Endpunkte der Trajektorien*)

tempmsg3 = PrintTemporary["select..."];

(*Check, ob Teilchen in DiffPump*)

successQ =
  Map[Abs#[#[[3]] - zDiffpump] <
    0.0001 && #[[1]]^2 + #[[2]]^2 - (dDiffpump/2)^2 <
    0 && (#[[1]] + #[[4]] lDiffpump/-#[[6]])^2 + (#[[2]] + #[[5]]
    lDiffpump/-#[[6]])^2 - (dDiffpump/2)^2 <
    0 && (#[[1]] + #[[4]] (lDiffpump +
    lDiffpump2)/-#[[6]])^2 + (#[[2]] + #[[5]] (lDiffpump +
    lDiffpump2)/-#[[6]])^2 - (dDiffpump2/2)^2 < 0 &,
    result1];

trajekttimelimit =
  Pick[Thread[{trajekt[t][[All, 1]], trajekt[t][[All, 2]],
    timeOrigin + excitationLeaveTime,
    timeOrigin + excitationEntryTime}], successQ];
successN = Length[trajekttimelimit];

tempmsg4 = PrintTemporary["excitation..."];

Off[General::munfl];
s5anr[t_] =
  If[intensities[[1]] > 0,
    ParallelMap[
      n[s5][t] /.
        Block[{i1 = intensities[[1]], i2 = intensities[[2]],
          i3 = intensities[[3]]},
          SetSystemOptions["CheckMachineUnderflow" -> False];
          anr[up819Field#[#[[1, 1 ; 3]], {position819[[1]],
            position819[[2]]}]*doppler819korr#[#[[1, 5]]],
            lampField#[#[[1, 1 ; 3]], #[[2]], #[[3]], #[[4]]]] &,
      trajekttimelimit(*,Method\[Rule]"FinestGrained"*)[[All, 1]],
      Table[0, successN]];
On[General::munfl];

vzSucc = Pick[vz, successQ];
startposSucc = Pick[startposition, successQ];
xyzOriginSucc = Pick[validxyzv[[All, 1]], successQ];

tempmsg5 = PrintTemporary["result..."];
result =
  ParallelTable[{trajekttimelimit[[i, 1]], s5anr[t][[i]]} /.
    t -> trajekttimelimit[[i, 2]], {i, successN}];
success = Thread[{startposSucc, result}];

flow = -Total[Abs[success[[All, 1, 2, 3]]]];(*obsolete*)

excitation = success[[All, 2, 2]];

excitedflow =
  Total[Abs[success[[All, 1, 2, 3]]]*
    success[[All, 2, 2]]];(*obsolete*)
vAbs = ParallelMap[Norm[#] &, success[[All, 1, 2]]];(*obsolete*)
vAbsflow = Total[vAbs];(*obsolete*)
vxflow = Total[Abs[success[[All, 1, 2, 1]]]];(*obsolete*)

```

```

vzmaxsuccess = -Min[{success[[All, 2, 1, 6]], 0}];(*obsolete*)
vxmaxsuccess = Max[{RealAbs[success[[All, 1, 2, 1]]], 0}];(*obsolete*)
vrmaxsuccess =
  Max[{ParallelMap[Norm[Drop[#, {3}]] &, success[[All, 1, 2]]],
    0}];(*obsolete*)

travelTime =
  trajekttimelimit[[All, 2]] -
  Pick[timeOrigin, successQ];(*Laufzeit für Teilchen*)

NotebookDelete[{tempmsg0, tempmsg1, tempmsg2, tempmsg3, tempmsg4,
  tempmsg5}];

Length[success]
]

(*ATTA-Setup*)
setKr84
wzcool2d := 0.033 (*vertikaler Kühlstrahlradius (1/e^2-Intensitätsabfall)*)
wxycool2d := 0.011 (*horizontaler Kühlstrahlradius*)

wPush := 0.005 (*Radius Pushstrahl*)
wRetard := 0.005(*Radius Bremsstrahl*)

zDiffpump := -0.085 (*Position Anfang Pumpstrecke*)
dDiffpump := 0.001 (*Durchmesser Pumpstrecke*)
lDiffpump := 0.006 (*Länge Pumpstrecke*)
zDiffpump2 := -0.085 (*zweites Segment Pumpstrecke, für
ZNF-Setup erstmal gleichgesetzt*)
dDiffpump2 := 0.001
lDiffpump2 := 0.006

zDeckel := -0.015 (*Unterkante Deckel*)

z0cool := -0.05;(*z-Position der Kühlstrahlachsen*)
rohrbreite := 0.034 (*Breite Kühlstrahlzugänge*)

zCoolMin := z0cool - .035
zCoolMax := z0cool + .035
yRange := 0.05 (*halbe Tiefe Kammer in y-Richtung*)

coolingregion =
  Cylinder[{{0, 0, zCoolMin}, {0, 0, zCoolMax}},
    rohrbreite/2];(*2d*)
coolingBoundary =
  RegionBoundary[
    coolingregion];(*Begrenzung der Kühlstrahlen oben durch
Deckelkante, unten durch Pumpstrecke, seitlich durch Kühlstrahlzugänge*)

gradient := 0.013 (*in T/(A m)*)

updateRegions := (
  coolingregionQ[x_, y_, z_] = (x^2 + y^2) < rohrbreite^2/4 &&
    zCoolMin < z < zCoolMax;(*Zylinder*)

  pushregionQ[x_, y_, z_] = (x^2 + y^2) < rohrbreite^2/4 &&
    zDiffpump < z < -.005;
  retarderregionQ[x_, y_, z_] =
    dDiffpump^2/4 < (x^2 + y^2) < rohrbreite^2/4 &&
    zDiffpump < z < -.005;
)
updateRegions

```

```

(*-----*)
(* hier Parameter für Simulation eingeben *)
(*-----*)

temp := 300;
initialSamples := 250000;
vmax := 50;
vzmin := -0.4;

vzmin := -2;
vzmax := -20;
(*
vzmin:=100;(*mit push*)
vzmax:=-100;(*mit retarder*)
*)

delta2D := -2.5;
i2dCoil := 5.3;
coolpwr := .25;
coolBalance := 1;

deltaPush := delta2D;
deltaPush := -2.3;
deltaRetard := delta2D;
pushpwr := 0.005;
retardpwr := 0.005;

pushpwr := 0;
retardpwr := 0;

VUVpower := 8;
quenchpower := 8;
up819power := .25;(*2er-Deckel*)

(*Strahlradius 819nm*)
w819x := 0.0039;(*laut Messung Göring*)
w819z := 0.0016;
w819x := 0.0125;(*geplantes Maß*)
w819z := 0.005;
(*
w819x:=0.0025;(*Test sehr klein*)
w819z:=0.001;
*)

w819x := 0.005;(*2er-Deckel, gr. Strahl*)
w819z := 0.005;
w819x := 0.00125;(*2er-Deckel, kl. Strahl*)
w819z := 0.00125;

lampField[{x_, y_, z_}] := kegel8h[{x, y, z}];
up819Field[{x_, y_, z_}, {x0_, z0_}] :=
  beam819gaussh[{x, y, z}, {x0, z0}, {w819x, w819z}];(*Strahl mitrastern*)
(*
up819Field[{x_, y_, z_}, {x0_, z0_}] := raster819gauss[{x, y, z},
  {w819x, w819z}];*Aufzug*)
*)

(*2er-Deckel*)

lampField[{x_, y_, z_}] := doppelkegelh[{x, y, z}];
(*
up819Field[{x_, y_, z_}, {x0_, z0_}] := beam819gaussh[{x, y, z}, {x0, z0}, {w819x, w819z}];
(*Strahl mitrastern*)
*)

```

```

testvolhalfsize := .00125; (*halbe Höhe/Breite Rastervolumen*)
{xmin, xmax, xstep} := {-.04, .04, .0025};(*Rasterbereich*)
{zmin, zmax, zstep} := {-.005, -.085, -.0025};
(*)
testvolhalfsize:=.000625;
{xmin,xmax,xstep}:={-.04,.04,.00125};
{zmin,zmax,zstep}:={-.005,-.085,-.00125};
*)
(*)
(*2er_Deckel, Raster gr. Strahl*)
testvolhalfsize:=.005;
{xmin,xmax,xstep}:={-.04,.04,.0025};
{zmin,zmax,zstep}:={-.01,-.08,-.0025};
*)
pList := {5 10^-8 mbar, 1 10^-7 mbar, 1.25 10^-7 mbar,
          1.5 10^-7 mbar, 1.75 10^-7 mbar, 2 10^-7 mbar, 2.5 10^-7 mbar,
          3 10^-7 mbar, 4 10^-7 mbar, 5 10^-7 mbar};
zCoolLengthList := {0.003, 0.018, 0.027, 0.033, 0.04, 0.05, 0.06,
                    0.078, 0.09, 0.1, 0.11, 0.12}
coolingLength := 0.07
delta2DList := {-5.5, -5, -4.5, -4, -3.5, -3, -2.5, -2, -1.5, -1}

VUVpowerList := {2, 4, 6, 8, 10}
up819powerList := {.01, .02, .05, .1, .15, .2, .25, .3, .35, .4}(*2er-Deckel*)
up819powerList := {.025, .05, .1, .2, .3, .5, .7, .9, 1.1, 1.3, 1.5}(*Paper-
Messung*)
i2dCoilList := {1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 7.5, 8, 10, 12.5}(*Paper-Messung*)
(*coolBalance:=0.8;initialSamples:=500000;*)

dDiffpumpList := {.00025, .0005, .001, .0015, .002, .0025};
dDiffpump2 := dDiffpump;
i2dCoil := 5(*für dDiffpump-Durchlauf*)

up819power := 1.4;
delta2DList := {-5.5, -5, -4.5, -4., -3.5, -3, -2.5, -2, -1.5, -1};

coolBalanceList := {1, .95, .9, .85, .8};

coolpwrList := {.025, .05, .1, .15, .2, .25, .3, .4, .5, .6};

pushpwrList :=
{0, .00025, .0005, .00075, .001, .0015, .002, .003, .005, .0075, .01};
up819power := 2;
i2dCoil := 12.5;
delta2D := -3.5;

deltaPushList := {-6, -5, -4, -3.2, -2.3, -2, -1.4, -1, 0, 0.4, 1.3};
up819power := .25;
pushpwr := 0.003;
delta2D := -2.5;
i2dCoil := 5.3;
initialSamples := 70000;

pushpwrList :=
{0, .00025, .0005, .00075, .001, .0015, .002, .003, .005, .0075, .01};
up819power := 2;
i2dCoil := 12.5;
delta2D := -4;
deltaPush := -2.3;
retardpwr := pushpwr;
deltaRetard := deltaPush;

up819powerList := {.01, .02, .05, .1, .15, .2, .25, .3, .35};

```

```

initialSamples := 250000;
i2dCoil := 5.3;
delta2D := -2.5;
pushpwr := 0;
retardpwr := 0;

loopVarName := "up819power";(*Laufvariable für Simulationsdurchläufe*)

fileprefix = "atta45_819pwr_raster-d2.5";
filecomment = "";

(*-----*)

(*Simulationsdurchlauf starten*)

ToExpression["loopList:=" <> loopVarName <> "List;"];

Do[

  filecomment = loopVarName <> ToString[FortranForm[loopVar]];
  ToExpression[loopVarName <> ":=loopVar;"];

  updateRegions;

  updatePressure;
  updateBeams;
  updateForce;

  Print[loopVarName, " = ", loopVar];
  {loopTime, raster} = AbsoluteTiming[
    Do[Clear[trajekt, vz, result, success, result1, trajekttimelimit,
      s5anr]; Sow[xi, {{xi, zi}}]; Sow[zi, {{xi, zi}}];
      Print[xi, zi];
      Sow[simulate[{{xi, zi}, {VUVpower, up819power,
        quenchpower}], {{xi, zi}}];

      (*veraltete Variablen mitspeichern wg. Datenstruktur-
      Kompatibilität*)
      Sow[flow, {{xi, zi}}];(*obsolet*)

      Sow[excitedflow, {{xi, zi}}];(*obsolet*)

      Sow[vAbsflow, {{xi, zi}}];(*obsolet*)

      Sow[vzmaxsuccess, {{xi, zi}}];(*obsolet*)

      Sow[vrmaxsuccess, {{xi, zi}}];(*obsolet*)

      Sow[vxmaxsuccess, {{xi, zi}}];(*obsolet*)

      Sow[travelTime, {{xi, zi}}];
      Sow[success[[All, 1, 2, 3]], {{xi, zi}}];
      Sow[success[[All, 1, 2, 2]], {{xi, zi}}];
      Sow[success[[All, 1, 2, 1]], {{xi, zi}}];
      Sow[xyzOriginSucc[[All, 1]], {{xi, zi}}];
      Sow[xyzOriginSucc[[All, 3]], {{xi, zi}}];
      Sow[success[[All, 2, 1, 4]], {{xi, zi}}];
      Sow[success[[All, 2, 1, 5]], {{xi, zi}}];
      Sow[success[[All, 2, 1, 6]], {{xi, zi}}];
      Sow[excitation, {{xi, zi}}];,
    {xi, xmin, xmax, xstep}, {zi, zmin, zmax, zstep}] // Reap];
  Print["time: ", loopTime/60, " min, msg: ", raster[[1]]];

```

```

comments =
  SetPrecision[{"temp", temp}, {"initialSamples",
    initialSamples}, {"vmax", vmax}, {"vzmin", vzmin}, {"vzmax",
    vzmax}, {"delta2D", delta2D}, {"i2dCoil", i2dCoil}, {"coolpwr",
    coolpwr}, {"coolBalance", coolBalance}, {"VUV Intens",
    VUVpower}, {"Quench Intens", quenchpower}, {"819 power",
    up819power}, {"waist819x", w819x}, {"waist819z",
    w819z}, {"Vol radius", testvolhalfsize}, {"yRange",
    yRange}, {"pushpwr", pushpwr}, {"retardpwr",
    retardpwr}, {"deltaPush", deltaPush}, {"deltaRetard",
    deltaRetard}, {"wPush", wPush}, {"wRetard",
    wRetard}, {"abundance", abundance}, {"mass",
    masse}, {"crosssect", sigma}, {"coolingLength",
    coolingLength}, {"dDiffpump", dDiffpump}], MachinePrecision];
headers =
  Join[comments, {"x-Coord", "z-Coord", "Trapped n", "Sum(vzi)",
    "Kr* Flux", "Sum(vAbs)", "vznax", "vrmax", "vxmax",
    "travelTime", "vzStart", "vyStart", "vxStart", "xStart",
    "zStart", "vxEnd", "vyEmd", "vzEnd", "excitation"}];
csvdata = Join[headers, raster[[2]]];
filename =
  StringReplace[DateString["ISODateTime"], ":" -> "-"] <> "_" <>
  fileprefix <> "_" <> filecomment <> ".csv";
Export[filename, csvdata, "CSV", "FieldSeparators" -> ",,"];
Print["File: ", filename],

  {loopVar, loopList}];
Print["-finished-"]
Print["MemInUse: ", MemoryInUse[], " MaxMemUsed: ",
  MaxMemoryUsed[], " MemAvail: ", MemoryAvailable[]]

(*-- Script Ende --*)

```

