

## A 2: Atomic Systems in External Fields I

Time: Monday 14:00–16:00

Location: F 107

A 2.1 Mo 14:00 F 107

**Pseudo-classical Theory for Fidelity of Kicked Ultracold Atoms** — ●BENEDIKT PROBST<sup>1</sup>, ITALO GUARNERI<sup>2</sup>, and SANDRO WIMBERGER<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Institut für Theoretische Physik, Universität Heidelberg, Philosophenweg 19, D-69120 Heidelberg — <sup>2</sup>Centre for Non-linear and Complex Systems, Università degli Studi dell'Insubria, Via Valleggio 11, I-22100 Como

Fidelity, the overlap of two wave functions evolved with slightly different Hamiltonians, constitutes a sensitive measure to probe the dynamical evolution of a quantum system. We investigate the energy absorption of (ultra)cold atoms periodically kicked by an optical lattice, which is a realization of the famous quantum kicked rotor. We study this model in a regime with classical completely chaotic dynamics. In the vicinity of resonant kicking, the problem maps, however, to a pseudo-classical system, which allows us to apply semi-classical methods. In this case we can use semi-classics on a nearly integrable phase space to describe the quantum behaviour. Based on this pseudo-classical model, we analytically predict the occurrence of revivals for the fidelity. These revivals can be understood as recurrences in the pseudo-classical phase space. Our predictions are supported by numerical simulations. Moreover, a possible experimental verification is discussed.

A 2.2 Mo 14:15 F 107

**Effective potentials in a density functional theory via local force equations** — ●MICHAEL RUGGENTHALER<sup>1,2</sup> and DIETER BAUER<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Institut für Physik, Universität Rostock, 18057 Rostock — <sup>2</sup>Max-Planck-Institut für Kernphysik, 69117 Heidelberg

Time-dependent density functional theory reformulates usual wave-function-based time-dependent quantum mechanics in terms of the simple one-particle density alone [1]. The basis of a time-dependent Kohn-Sham (KS) scheme, i.e., mapping the interacting many-body problem uniquely to an auxiliary system of fictitious noninteracting particles, was given in the van Leeuwen theorem [2]. However, the van Leeuwen theorem does merely prove the uniqueness of an effective KS potential. The existence of such a potential, given via the local force balance equation of quantum mechanics, was not further investigated. We find conditions for the existence of an effective potential and prove its existence under certain restrictions [3]. Further, by expressing the interacting wave-function in terms of the noninteracting KS wave-function we find differential equations for the local Hartree-exchange and the local correlation potential [4]. Under certain assumptions we give explicit expressions for both potentials and compare the local Hartree-exchange-only approximation with the exact-exchange approximation.

[1] E. Runge and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* 52, 997 (1984)[2] R. Van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* 82, 3863 (1999)[3] M. Ruggenthaler, M. Penz, D. Bauer, *J. Phys. A* 42, 425207 (2009)[4] M. Ruggenthaler and D. Bauer, *Phys. Rev. A* 80, 052502 (2009)

A 2.3 Mo 14:30 F 107

**<sup>3</sup>He/<sup>129</sup>Xe Uhrenvergleichsexperimente: Tests fundamentaler Symmetrie mit höchster Präzision** — ●KATHLYNNE TULLNEY<sup>1</sup>, CLAUDIA GEMMEL<sup>1</sup>, WERNER HEIL<sup>1</sup>, KAI LENZ<sup>1</sup>, CHRISTIAN LUDIWIIG<sup>1</sup>, SERGEJ KARPUK<sup>1</sup>, YURI SOBOLEV<sup>1</sup>, MARTIN BURGHOFF<sup>2</sup>, SILVIA KNAPPE-GRÜNEBERG<sup>2</sup>, WOLFGANG KILIAN<sup>2</sup>, WOLFGANG MÜLLER<sup>2</sup>, ALLARD SCHNABEL<sup>2</sup>, FRANK SEIFERT<sup>2</sup>, LUTZ THRAMS<sup>2</sup> und STEFAN BAESSLER<sup>3</sup> — <sup>1</sup>Universität Mainz — <sup>2</sup>PTB Berlin — <sup>3</sup>University of Virginia

Die freie Spinpräzession von polarisiertem <sup>3</sup>He und <sup>129</sup>Xe Gas, welche mit hochempfindlichen SQUIDS detektiert wird, erlaubt hochpräzise Messungen von Magnetfeldern bis hinab in den 10<sup>-4</sup> fT Bereich. Die hohe Empfindlichkeit wird erreicht durch die langen Spinkohärenzzeiten (transversale Relaxationszeit) von mehreren Tagen und durch das hohe Signal-Rausch Verhältnis von über 5000:1. Die Experimente wurden am BMSR-2 (magnetisch abgeschirmter Raum) an der PTB in Berlin durchgeführt. Mischt man beide polarisierten Gase, können so genannte Uhrenvergleichsexperimente durchgeführt werden. Durch Bildung der mit den gyromagnetischen Verhältnissen gewichteten Differenz der Larmorfrequenzen eliminiert man den Zeeman-Term und wird somit empfindlich auf nicht-magnetische Wechselwirkungen. So sind diese Uhren äußerst sensitiv auf eine mögliche siderische Variation

der Spinpräzessionsfrequenz aufgrund der Verletzung der Lorentzinvarianz, oder dem Nachweis eines elektrischen Dipolmoments von <sup>129</sup>Xe. In diesem Vortrag werden die technische Realisierung vorgestellt, sowie erste Resultate aus den Uhrenvergleichsexperimenten gezeigt.

A 2.4 Mo 14:45 F 107

**Polarization transfer in the inner-shell photoionization of sodium-like ions** — ●LALITA SHARMA<sup>1,2</sup>, ANDREY SURZHYKOV<sup>1,2</sup>, MOKHTAR K INAL<sup>3</sup>, and STEPHAN FRITZSCHE<sup>2,4</sup> — <sup>1</sup>Physikalisches Institut der Universität Heidelberg — <sup>2</sup>GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung GmbH — <sup>3</sup>Département de Physique, Université A. Belkaid, Tlemcen, Algeria — <sup>4</sup>Department of Physical Sciences, University of Oulu, Finland

Density matrix formalism based on Dirac's relativistic equation has been applied to study the characteristic emission following the inner-shell photoionization of many-electron ions. In our theoretical analysis, emphasis is placed on the question how the polarization of the incident light affects the polarization of the characteristic radiation. Detailed computations have been carried out, in particular, for two electric dipole  $2p^5 3s \ ^1P_1 \rightarrow 2p^6 \ ^1S_0$  and  $2p^5 3s \ ^3P_1 \rightarrow 2p^6 \ ^1S_0$  as well as one magnetic quadrupole  $2p^5 3s \ ^3P_2 \rightarrow 2p^6 \ ^1S_0$  transitions following the ionization of the  $2p$  electron from the sodium-like  $\text{Fe}^{15+}$  and  $\text{U}^{81+}$  ions by linearly polarized light. From these calculations, it is shown that the (degree of) linear polarization of the characteristic radiation may be enhanced by a factor of two due to the polarization transfer from the incident light. In addition to the polarization transfer, higher-order (nondipole) terms in the electron-photon interaction as well as cascade feeding from higher levels are found to have strong influence on the polarization of the subsequently emitted photons.

A 2.5 Mo 15:00 F 107

**Low-Field Mobilities in the Lanthanide Region** — ●MUSTAFA LAATIAOUI<sup>1</sup>, DIETER HABS<sup>1</sup>, HARTMUT BACKE<sup>2</sup>, and WERNER LAUTH<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Uni München (LMU), Fakultät für Physik, 85748 Garching — <sup>2</sup>Uni Mainz, Institut für Kernphysik, 55099 Mainz

In the past, Ion Mobility Spectrometry (IMS) devices have proven to be powerful tools for state-selective mobility investigations at a variety of elements [1, 2]. Hence, the mobility spectrometry increasingly gains importance if dealing with the heaviest elements, where relativistic effects strongly affect their valence electron configurations [3]. The aim of this contribution is to give an overview of low-field mobilities of rare-earth metals, where the electronic configuration is expected to be influenced by such relativistic effects. Most of the measured mobilities have shown a great similarity except for the element gadolinium. This observed deviation is assumed to be a direct consequence of occupying the  $d$ -orbital in gadolinium, which in turn has a big impact on its corresponding ion-atom interaction potential. This work is supported by the BMBF(06ML236I).

[1] P. Kemper et al., *J. Am. Chem. Soc.* 112 (1990) 3231.[2] C. Iecman et al., *J. Am. Soc. Mass Spectrom.* 18 (2007) 1196.[3] P. Indelicato et al., *Eur. Phys. J. D* 45 (2007) 155.

A 2.6 Mo 15:15 F 107

**A canonical transforms approach to the numerical solution of time-dependent quantum wave equations** — ●HEIKO BAUKE and CHRISTOPH H. KEITEL — Max-Planck-Institut für Kernphysik, Saupfercheckweg 1, 69117 Heidelberg

The dynamics of quantum systems is governed by quantum wave equations, which are analytically tractable in rare cases only. Therefore, efficient numerical algorithms are a major tool for the investigation of quantum dynamical processes in atomic systems and others.

The Shannon sampling theorem induces limits that bound the performance of algorithms for the numerical propagation of quantum wave functions. Algorithms are fundamentally limited by the wave-function's energy spectrum as well as its momentum spectrum. However, these spectra depend on the wave-function's Hilbert-space representation and, therefore, the efficiency of numerical propagation schemes depends on the Hilbert-space representation. We demonstrate how canonical transforms may be utilized to transform the wave function into a space where it has energy and momentum spectra with reduced band width. This may increase the performance of numerical

algorithms by up to several orders of magnitude. Our approach includes the so-called Kramers-Henneberger transform as a special case and puts forward modifications towards an improved numerical efficiency.

[1] Heiko Bauke and Christoph H. Keitel, Phys. Rev. E **80**, 016706 (2009)

A 2.7 Mo 15:30 F 107

**Entwicklung homogener Magnetfelder für Handhabung und Transport von kernspinpolarisierten Gasen (Spinkoffer) —**

•SERGEI KARPUK, STEFAN HIEBEL, WERNER HEIL, JOCHEN KRIMMER, ERNST OTTEN und ZAHIR SALHI — Institut für Physik, Universität Mainz

Die Magnetresonanztomographie mit hyperpolarisierten Gasen ist inzwischen ein etabliertes medizinisches Bildgebungsverfahren. Die  $^3\text{He}$ -Polarisationsanlage in Mainz ist weltweit die einzige, welche über eine medizinische Zulassung im Rahmen des Arzneimittelproduktgesetzes verfügt und für Humanstudien eingesetzt werden darf. Das kernspinpolarisierte  $^3\text{He}$  wird in relaxationsarme Zellen abgefüllt und in magnetisch abschirmenden Zylindern mit dem homogenen Führungsfeld von 1 mT an Kliniken und Forschungseinrichtungen weltweit verschickt.

Angesichts von Transportzeiten bis zu 40 Stunden wurden permanent magnetisierte, wie auch stromgetriebene Spinkoffer mit einer restlichen relativen Feldinhomogenität  $(\text{grad}B)/B < 10^{-3}/\text{cm}$  entwickelt, die eine gradientenbedingte Relaxationszeit von mehr als 400 Stunden garantiert. Das neue Verfahren zur Homogenisierung eines eingeschlossenen, permanenten Magnetfelds beruht auf der Stetigkeit seiner Parallelkomponente an der Grenzfläche zu dem parallel zur Feldrichtung magnetisierten Zylindermantel des Spinkoffers. Dabei müssen Streufusseffekte durch Anpassung der Manteldicke kompensiert werden. Die

Stirnflächen des Zylinders dienen als Polflächen. Beim stromgetriebenen Spinkoffer genügt es, ein Solenoid eng in einen Zylinder aus Mu-Metall einzupassen, um die geforderte Homogenität zu erreichen.

A 2.8 Mo 15:45 F 107

**Homogenisierung des magnetischen Führungsfeldes für die Polarisation von  $^3\text{He}$  in einer kompakten Anlage —**

•CHRISTIAN MROZIK<sup>1</sup>, SERGEJ KARPUK<sup>1</sup>, WERNER HEIL<sup>1</sup>, ERNST OTTEN<sup>1</sup>, THEO SCHNEIDER<sup>2</sup>, MAX BECKENBACH<sup>2</sup>, MARION KLÄSER<sup>2</sup> und STEFAN HIEBEL<sup>3</sup> — <sup>1</sup>Institut für Physik, Johannes Gutenberg-Universität Mainz — <sup>2</sup>Institut für technische Physik, Karlsruher Institut für Technologie — <sup>3</sup>Seckels GmbH, 61239 Ober-Mörlen

Zur Herstellung kernspinpolarisierten  $^3\text{He}$ -Gases für die Grundlagenforschung sowie der Bildgebung in der Medizin dient seit 10 Jahren in Mainz eine zentrale Polarisationsanlage nach dem Prinzip des metastabilen optischen Pumpens in einem  $^3\text{He}$ -Niederdruckplasma bei einem Führungsfeld von 1 mT. Die bisherige Magnetfeldquelle aus Ringspulen erreichte die erforderliche Homogenität von  $\frac{\nabla B}{B} < 2 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$  nur in einem kleinen Volumenbruchteil und bot keine Abschirmung gegen Störfelder. Beides führte zu großen Abmessungen. Ein neues Konzept für eine weiträumige Homogenisierung und komplette Abschirmung des Magnetfelds ermöglicht nun den Bau eines kompakteren, auch für den dezentralen Einsatz beim Anwender geeigneten, Polarisators. Hierzu wurde ein Solenoid von 2 m Länge und 0,8 m Durchmesser eng in einen Zylinder aus weichmagnetischem Material eingepasst. Der gesamte Innenraum bietet nun eine hinreichende Feldhomogenität für die Aufnahme aller Bauteile zum Polarisieren des  $^3\text{He}$ . Eine Stirnfläche ist als Tür zur Entnahme des polarisierten Gases ausgelegt, die andere bietet durch eine kaminartige und mit einer Korrekturspule versehene Öffnung Zugang zur Tragekonstruktion und zu Versorgungsleitungen.