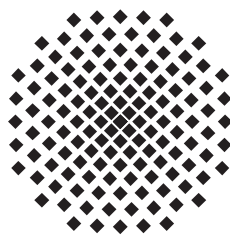


Berechnung der Fluktuationsdeterminante für Bouncetrajektorien in Bose-Einstein Kondensaten

Diplomarbeit von
Matin Kaufmann

8. August 2012

Hauptberichter: Prof. Dr. Jörg Main
Mitberichter: Prof. Dr. Udo Seifert



1. Institut für Theoretische Physik
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 57, 70550 Stuttgart

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Beschreibung des Bose-Einstein-Kondensats	3
2.1.1	Wechselwirkungen	4
2.1.2	Skalierung der Gross-Pitaevskii-Gleichung	6
2.2	Variationsverfahren zur Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung	8
2.2.1	Lösungsansatz mit gekoppelten Gaußfunktionen	9
2.2.2	Betrachtung des selbsteinschließenden Kondensats mit einer einzigen Gaußfunktion	10
3	Makroskopisches Quantentunneln	13
3.1	Tunnelrate	13
3.2	Die Gross-Pitaevskii-Gleichung in Imaginärzeit	17
3.3	Berechnung der Bouncetrajektorie	19
4	Stabilitätsanalyse	21
4.1	Die Fluktuationsdeterminante	21
4.2	Berechnung der Fluktuationen	22
4.2.1	Variation der Gaußparameter	22
4.2.2	Basisentwicklung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen	25
4.3	Stabilitätseigenwerte	31
4.3.1	Angepasstes Berechnungsverfahren	32
5	Ergebnisse	35
5.1	Das Eigenwertspektrum der stationären Zustände	35
5.1.1	Die Eigenwerte der linearisierten Bewegungsgleichungen	36
5.1.2	Die Eigenwerte in der Laguerrebasis	36
5.2	Die Stabilitätseigenwerte der periodischen Bahnen	42
5.2.1	Die Eigenwerte der linearisierten Bewegungsgleichungen	42
5.2.2	Die Eigenwerte in der Laguerrebasis	44
5.3	Der Fluktuationsvorfaktor für das selbsteinschließende Kondensat	45
5.4	Der Fluktuationsvorfaktor für das extern gefangene Kondensat	50

6 Zusammenfassung und Ausblick	55
A Integrale des Variationsansatzes	57
B Integrale der BdG-Gleichungen	59
Literaturverzeichnis	63
Danksagung	67

1 Einleitung

Das Bose-Einstein-Kondensat (BEC) ist ein Quantenzustand eines schwach wechselwirkenden Gases aus Bosonen, der bei Temperaturen in der Nähe des Nullpunkts auftritt. Schon 1924/25 sagten S. Bose [1] und A. Einstein [2, 3] die Kondensation eines idealen Gases aus Bosonen unterhalb einer kritischen Temperatur in einen makroskopischen Grundzustand vorher.

Experimentell konnten BECs aus ^{87}Rb von E.A. Cornell und C.E. Wieman [4] und wenig später aus ^{23}Na von W. Ketterle [5] im Jahr 1995 erstmals realisiert werden. Dafür erhielten diese 2001 den Nobelpreis. Auch ^7Li gehörte zu den ersten Kondensaten [6]. Techniken zur Erzeugung von BECs, beispielsweise die Laserkühlung, Verdampfungskühlung und das Einfangen von Atomen in magneto-optischen Fallen sind inzwischen ausgereift und es konnten BECs aus einer Vielzahl von Elementen erzeugt werden. Auch $^6\text{Li}_2$ Moleküle konnten schon 2003 zur Kondensation gebracht werden [7] und inzwischen gibt es auch Fortschritte in Richtung Kondensation von heteronuklearen Molekülen [8].

Mit der Kondensation von ^{52}Cr im Jahr 2005 [9] wurden erstmals Atome mit starkem Dipolmoment kondensiert, welche damit eine langreichweitige, attraktive Wechselwirkung besitzen. Auch für Atome ohne Dipolmoment gibt es ein Modell, wie eine langreichweitige, gravitationsartige Wechselwirkung $\sim 1/r$ erzeugt werden kann [10], welche aber bislang experimentell nicht realisiert wurde. Diese Wechselwirkung ist aber im Gegensatz zur Dipol-Dipol-Wechselwirkung isotrop und daher von theoretischem Interesse, da die Effekte einer langreichweitigen Wechselwirkung an einem einfachen Modell untersucht werden können.

Für eine attraktive Kontaktwechselwirkung der Atome, wie es z.B. bei ^7Li der Fall ist, wird das BEC metastabil gegenüber Quantenfluktuationen. Dann existiert neben thermisch verursachten Zerfallsprozessen der Zerfall durch *makroskopisches Quantentunneln*, bei dem das Kondensat vom Grundzustand in einen instabilen Zustand höherer Dichte übergeht und anschließend zerfällt. Dieser Effekt wird im Rahmen einer semiklassischen Näherung untersucht, welche den Tunnelprozess durch eine klassische Bahn, die *Bounce-trajektorie*, beschreibt.

Ausgangspunkt zur theoretischen Betrachtung von BECs ist die Gross-Pitaevskii-Gleichung, welche von E.P. Gross [11] und L.P. Pitaevskii [12] 1961 unabhängig voneinander

entwickelt wurde als Modell für ein BEC am Temperaturnullpunkt. Näherungsweise kann diese über ein zeitabhängiges Variationsprinzip [13] mit einer komplexen Gaußfunktion als Ansatz für die Wellenfunktion gelöst werden. Innerhalb dieses Rahmens wurde von H.T.C. Stoof die Rate des Quantentunnelns berechnet [14].

Die Ungenauigkeit dieses Variationsansatzes wirkt sich in zwei Punkten aus: Zum einen als Ungenauigkeit der Tunnellösung $\Psi(\mathbf{r}, t)$ und zum anderen als Ungenauigkeit der *Fluktuationsdeterminante*, ein Teil der Berechnungsformel, welcher die Stabilität der Tunnellösung gegenüber Quantenfluktuationen berücksichtigt. Der erste Punkt wurde schon 1999 von J.A. Freire und D.P. Arovas erfolgreich angegangen, welche die Tunnellösung für eine allgemeine Wellenfunktion herleiteten und vollnumerische Rechnungen auf einem Raum-Zeit-Gitter dazu ausführten [15]. Diese Rechnungen wurden vor Kurzem weitergeführt und nun auch Tunnelraten für ein BEC mit der $1/r$ -Wechselwirkung berechnet [16].

Des Weiteren ermöglichte der Ansatz von Freire und Arovas die Anwendung eines erweiterten Variationsansatzes mit einer Superposition von mehreren komplexen Gaußfunktionen. Dieser Ansatz, ursprünglich vorgeschlagen von E.J. Heller [17, 18], hat sich in der Anwendung auf BECs schon mehrfach bewährt (z.B. [19, 20]), indem mit geringem Rechenaufwand die Kondensatwellenfunktion sehr gut approximiert werden konnte. Die Anwendung auf das Quantentunneln und Berechnung der Tunnelrate für das Kondensat mit $1/r$ -Wechselwirkung und der anschließende Vergleich mit den vollnumerischen Rechnungen zeigte auch wieder eine gute Übereinstimmung der Resultate [21, 22].

Diese Arbeit geht nun die Näherung der Fluktuationsdeterminante an, wobei der Rahmen des erweiterten Variationsansatzes wegen des geringeren Rechenaufwands gewählt wird. Dabei wird versucht, sowohl für ein BEC ohne langreichweitige Wechselwirkung, als auch für ein BEC mit $1/r$ -Wechselwirkung die Ungenauigkeit abzuschätzen, die in der ursprünglichen Berechnung von Stoof gemacht wurde. Diese wird durch eine Erweiterung der “Stoof-Formel” kompensiert, wobei die Stabilität der Bouncetrajektorie über die Eigenwerte der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen charakterisiert wird. Diese Methode wurde von M. Kreibich schon für stationäre Lösungen der Kondensatwellenfunktion angewendet mit vielen Ergebnissen [23] und einige der dort verwendeten Methoden und Ergebnisse gehen auch in diese Arbeit ein.

2 Grundlagen

2.1 Beschreibung des Bose-Einstein-Kondensats

Ein Bose-Einstein-Kondensat aus N ununterscheidbaren Teilchen der Masse m lässt sich als quantenmechanisches Vielteilchensystem durch die stationäre Schrödingergleichung beschreiben

$$\sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) + \sum_{j=1}^{i-1} V_{\text{int}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) .$$

Der Hamiltonoperator besitzt einen kinetischen Term mit Δ_i , dem Laplaceoperator bezüglich den Koordinaten \mathbf{r}_i des i -ten Teilchens, das harmonische Potential einer äußeren Falle

$$V_{\text{ext}} = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (2.1)$$

und das Potential V_{int} , das durch Zweiteilchen-Wechselwirkungen innerhalb des Kondensats hervorgerufen wird. Da die Teilchendichte sehr niedrig ist, können Mehrteilchen-Wechselwirkungseffekte vernachlässigt werden.

Wegen des Wechselwirkungspotentials ist die Schrödingergleichung nicht analytisch lösbar. Für eine schwache Wechselwirkung und niedrige Temperaturen deutlich unterhalb der kritischen Temperatur, bei der die Kondensation einsetzt, kann die Meanfield-Näherung vorgenommen werden. Dabei wird die Vielteilchen-Wellenfunktion als ein Produkt identischer Einteilchen-Wellenfunktionen angesetzt,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \Phi(\mathbf{r}_i) ,$$

und der Zustand mit minimaler Energie gesucht. Diese Näherung wird exakt, wenn sich alle Atome im Grundzustand befinden und nicht wechselwirken.

Die Meanfieldenergie erhält man als Erwartungswert des Vielteilchen-Hamiltonoperators:

$$\begin{aligned} E_{\text{mf}} &= \langle \Psi | H | \Psi \rangle \\ &= N \int d^3r \Phi^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] \Phi(\mathbf{r}) \\ &\quad + \frac{1}{2} N(N-1) \iint d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi^*(\mathbf{r}') V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}') \Phi(\mathbf{r}) . \end{aligned}$$

Nun wird die Einteilchen-Wellenfunktion $\Phi(\mathbf{r})$ variiert und das Minimum der Energie bestimmt unter der Bedingung, dass die Norm $\int d^3\mathbf{r} |\Phi(\mathbf{r})|^2 = 1$ erhalten bleibt. Diese Bedingung wird über einen Lagrange-Multiplikator μN berücksichtigt

$$E_{\text{mf}} - \mu N \left(\int d^3\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}) - 1 \right) .$$

Indem man die Variationen dieses Funktionals nach Φ^* gleich Null setzt, folgt mit der Näherung $N \approx N - 1$ für große Teilchenzahlen die Gross-Pitaevskii Gleichung (GPE) [24] mit dem Meanfield-Hamiltonoperator H_{mf}

$$H_{\text{mf}} \Phi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + N \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\Phi(\mathbf{r}')|^2 \right] \Phi(\mathbf{r}) = \mu \Phi(\mathbf{r}) . \quad (2.2)$$

Dabei hat μ die Bedeutung des chemischen Potentials.

Die zeitabhängige GPE erhält man durch Ersetzen des chemischen Potentials durch den Zeitoperator $\mu \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + N \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}', t)|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) . \quad (2.3)$$

2.1.1 Wechselwirkungen

Der Wechselwirkungsterm V_{int} in der GPE beinhaltet sämtliche Zweiteilchen-Wechselwirkungen. Dabei tritt außer der Kontaktwechselwirkung eine attraktive langreichweitige Wechselwirkung für Atome mit Dipolmoment auf, die hier nicht behandelt wird. Aber auch für Atome ohne Dipolmoment kann eine langreichweitige Wechselwirkung erzeugt werden.

Kontaktwechselwirkung Kurzreichweitige Wechselwirkungen erzeugen eine Streuung der Atome bei Stößen untereinander. Diese wird im Rahmen der Streutheorie der Quantenmechanik in vielen Lehrbüchern behandelt, siehe z.B. [25]. Mit einer Transformation

in das mitbewegte Koordinatensystem eines Teilchens hat die Wechselwirkung die Form der Streuung eines Teilchens an einem Potential.

Für große Abstände r ist die zugehörige Wellenfunktion eine Überlagerung einer einlaufenden ebenen mit einer auslaufenden Kugelwelle

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f_k(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}$$

mit dem Wellenvektor \mathbf{k} , dem Streuwinkel θ und der Streuamplitude $f_k(\theta)$, deren Betragsquadrat den differentiellen Wirkungsquerschnitt ergibt

$$d\sigma = |f_k(\theta)|^2 d\Omega .$$

Im Grenzfall $T \rightarrow 0$ werden die Teilchen langsam, d.h. $k \rightarrow 0$. Es ist dann nur noch die s-Wellen-Streuung (Drehimpuls $l = 0$) relevant und die Streuamplitude wird konstant bezüglich des Streuwinkels θ

$$f(\theta) = -\frac{a_{\text{sc}}}{1 + ia_{\text{sc}}k} ,$$

wobei a_{sc} die Streulänge ist.

In der Gross-Pitaevskii-Gleichung wird anstatt des Streupotentials ein Pseudopotential verwendet

$$V_{\text{sc}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \hbar^2 \frac{4\pi a_{\text{sc}}}{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') . \quad (2.4)$$

Dieses ergibt denselben Wirkungsquerschnitt.

Die Streulänge a_{sc} ist experimentell über Feshbach-Resonanzen [26] durch das äußere Magnetfeld anpassbar und dient für die Simulationen als freier Parameter.

Monopolare Wechselwirkung Bei Atomen ohne Dipolmoment kann mit Hilfe von Lasern eine langreichweitige, attraktive Wechselwirkung durch induzierte Dipole erzeugt werden. Wie von O'Dell et al. gezeigt [10], entsteht durch eine geschickte Anordnung von sechs Lasertriaden eine isotrope gravitationsartige Wechselwirkung $\sim 1/r$.

Das Potential V_{lr} hat die Form

$$V_{\text{lr}} = -\frac{11}{4\pi} \frac{I k^2 \alpha^2}{c \epsilon_0^2} \frac{1}{r} = -\frac{u}{r} , \quad (2.5)$$

wobei die Intensität I und Wellenzahl k des Lasers, sowie die Polarisierbarkeit α der Atome eingehen. Mit der langreichweitigen, attraktiven Wechselwirkung kann sich das Kondensat in einem Grundzustand stabilisieren, was als Selbsteinschluss ("self-trapping") bezeichnet wird und es ist keine externe Falle notwendig.

Betrachtete Kondensate

Es werden zwei Systeme betrachtet, die unterschiedliche Wechselwirkungen berücksichtigen. Diese beschreiben Kondensate von Alkalimetallen, die kaum ein eigenes Dipolmoment besitzen.

Im einfachen Fall interagieren die Atome nur über die kurzreichweitige Kontaktwechselwirkung und werden über ein sphärisch symmetrisches Fallenpotential $V_{\text{ext}} = \frac{m}{2}\omega^2 r^2$ eingeschlossen. Der Meanfield-Hamiltonoperator dieses Systems ist dann

$$H_{\text{mf}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{m}{2}\omega^2 r^2 + N \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{sc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\Psi(\mathbf{r}')|^2 .$$

Dieser Fall wird als “externe Falle” bezeichnet.

Außerdem werden Kondensate betrachtet, deren Atome ebenfalls über die kurzreichweitige Kontaktwechselwirkung interagieren, sich aber zusätzlich durch die induzierte $1/r$ -Wechselwirkung über große Abstände hin anziehen, so dass sie sich ohne Falle selbst stabilisieren. Der Meanfield-Hamiltonoperator hat in diesem Fall die Form

$$H_{\text{mf}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + N \int d^3\mathbf{r}' [V_{\text{sc}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + V_{\text{lr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')] |\Psi(\mathbf{r}')|^2 .$$

Dieser Fall wird als “Selbsteinschluss” bezeichnet.

Da ab jetzt alle Betrachtungen in der Meanfield-Näherung erfolgen, wird der Index des Meanfield-Hamiltonoperators im Folgenden weggelassen.

2.1.2 Skalierung der Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die GPE (2.2) in einer Falle (2.1) mit den Wechselwirkungstermen (2.4) und (2.5)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + 4\pi\hbar^2 \frac{a_{\text{sc}}}{m} N |\Psi(\mathbf{r})|^2 - uN \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\Psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \Psi(\mathbf{r}) = \mu \Psi(\mathbf{r})$$

wird in dimensionslose Form gebracht, indem sie in ein Einheitensystem transformiert wird, für das fast alle Konstanten verschwinden.

Mit der Transformation des Ortes $\mathbf{r} = \tilde{\mathbf{r}} a_u$ und der Wellenfunktion $\Psi(r) = \sqrt{a_u}^{-3} \tilde{\Psi}(\tilde{r})$

ergibt sich

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2ma_u^2}\tilde{\Delta} + \frac{m}{2}a_u^2(\omega_x^2\tilde{x}^2 + \omega_y^2\tilde{y}^2 + \omega_z^2\tilde{z}^2) + 4\pi\hbar^2\frac{a_{sc}}{m}N|a_u^{-\frac{3}{2}}\tilde{\Psi}(\tilde{r})|^2 \right. \\ \left. - uN \int a_u^3 d^3\tilde{r}' \frac{|a_u^{-\frac{3}{2}}\tilde{\Psi}(\tilde{r}')|^2}{|a_u(\tilde{r} - \tilde{r}')|} \right] a_u^{-\frac{3}{2}}\tilde{\Psi}(\tilde{r}) = \mu a_u^{-\frac{3}{2}}\tilde{\Psi}(\tilde{r}) .$$

Für die GPEs bei externer Falle und bei Selbsteinschluss wird jeweils ein geeignetes Einheitensystem gewählt.

Externe Falle

Mit den Einheiten für die Länge, die Zeit und die Masse

$$a_u = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} , \\ t_u = \frac{2}{\omega} , \\ m_u = 2m$$

ist die Einheit der Energie $E_u = \frac{\hbar\omega}{2}$ und die Einheit der Wirkung $S_u = \hbar$.

Nach der Transformation $r \rightarrow a_u\tilde{r}$, $\Psi \rightarrow a_u^{-3/2}\tilde{\Psi}$ und nach Weglassen der Tilden und einer weiteren Skalierung der Streulänge $\tilde{a}_{sc}N \rightarrow a_{sc}$ folgt die GPE

$$[-\Delta + r^2 + 8\pi a_{sc}|\Psi|^2] \Psi = \mu\Psi .$$

Selbsteinschluss

Im Kondensat mit der langreichweitigen Wechselwirkung werden die Einheiten

$$a_u = \frac{\hbar^2}{um} , \\ t_u = \frac{2a_u\hbar}{u} , \\ m_u = 2m$$

für die Länge, die Zeit und die Masse gewählt. Es folgen die Einheiten der Energie $E_u = \hbar^2/2ma_u^2$ und der Wirkung $S_u = \hbar$. Auch hier lässt sich die Teilchenzahlabhängigkeit durch eine weitere Skalierung vermeiden, wobei

$$\tilde{r}N \rightarrow r , \quad \tilde{\Psi}N^{-3/2} \rightarrow \Psi , \quad \tilde{a}_{sc}N^2 \rightarrow a_{sc} , \quad \mu N^{-2} \rightarrow \mu .$$

Nach Weglassen der Tilden erhält man mit $\Psi' := \Psi(r')$

$$\left[-\Delta + 8\pi a_{sc} |\Psi|^2 - 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{|\Psi'|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \Psi = \mu \Psi .$$

2.2 Variationsverfahren zur Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung

Um die GPE zu lösen können einerseits vollnumerische Methoden angewendet werden, die mit viel Rechenaufwand die Dynamik der Wellenfunktion beliebig genau liefern, andererseits kann für die Wellenfunktion ein Ansatz einer einfachen Funktion gewählt werden, die durch einige wenige Parameter angepasst wird und deren Form über weite Strecken gut mit dem Verlauf der numerischen Lösung übereinstimmt. Im Unterschied zu vollnumerischen Methoden ist der Rechenaufwand deutlich geringer, während die Genauigkeit bei einem geeigneten Ansatz dennoch sehr gut ist [13].

Allgemein wird also eine Wellenfunktion

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{z}(t))$$

angesetzt mit dem Vektor $\mathbf{z}(t)$ der Variationsparameter, welcher die Dynamik von f vollständig beschreibt.

Da $i\dot{\Psi} = H\Psi$ allgemein nicht mehr erfüllt ist, wird anstatt dessen nur die Funktion I minimiert

$$I = \|i\dot{\Psi}(t) - H\Psi(t)\|^2 .$$

I ist dabei das Betragsquadrat der Differenz von linker und rechter Seite der GPE.

Da am Minimum von I die Variation δI verschwinden muss

$$\delta I = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \delta \mathbf{z} \left| \dot{\Psi} + iH\Psi \right. \right\rangle + \left\langle \dot{\Psi} + iH\Psi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \delta \mathbf{z} \right. \right\rangle \stackrel{!}{=} 0$$

und die Variation $\delta \mathbf{z}$ beliebig ist, müssen die Gleichungen

$$0 = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \left| \dot{\Psi} + iH\Psi \right. \right\rangle \quad (2.6)$$

erfüllt sein.

Für eine spätere Verwendung wird der Hamiltonoperator aufgespalten in $H = T + V$ und Gl. (2.6) dargestellt als

$$\left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \left| \left(i \frac{\partial}{\partial t} - T \right) \Psi \right. \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{z}} \left| V \Psi \right. \right\rangle . \quad (2.7)$$

2.2.1 Lösungsansatz mit gekoppelten Gaußfunktionen

Es wird eine Überlagerung von n_g radialsymmetrischen komplexen Gaußfunktionen χ_k als Wellenfunktion angesetzt

$$\Psi(r, t) = \sum_{k=1}^{n_g} \chi_k = \sum_{k=1}^{n_g} e^{i(A_k(t)r^2 + \gamma_k(t))} ,$$

mit den komplexen Parametern $A_k(t)$ und $\gamma_k(t)$, $k = 1, \dots, n_g$, also ist

$$\mathbf{z}(t) = (A_1(t), \gamma_1(t), \dots, A_{n_g}(t), \gamma_{n_g}(t)) .$$

Hierfür ist

$$\begin{aligned} T\Psi &= -\Delta\Psi = \sum_k [-6iA_k(t) + 4r^2 A_k(t)^2] \chi_k , \\ \dot{\Psi} &= \sum_k i[r^2 \dot{A}_k(t) + \dot{\gamma}_k(t)] \chi_k , \\ \left[i \frac{\partial}{\partial t} - T \right] \Psi &= \sum_k \underbrace{[-\dot{\gamma}_k + 6iA_k]}_{v_0^{(k)}} + \underbrace{(-\dot{A}_k - 4A_k^2)r^2}_{v_2^{(k)}} \chi_k . \end{aligned} \quad (2.8)$$

Mit $v_0^{(k)}$ und $v_2^{(k)}$ aus Gl. (2.8) lautet Gl. (2.7)

$$\begin{aligned} \sum_l \langle ir^2 \chi_k | (v_0^{(l)} + r^2 v_2^{(l)}) \chi_l \rangle &= \sum_l \langle ir^2 \chi_k | V \chi_l \rangle , \\ \sum_l \langle i \chi_k | (v_0^{(l)} + r^2 v_2^{(l)}) \chi_l \rangle &= \sum_l \langle i \chi_k | V \chi_l \rangle , \end{aligned}$$

und es ergibt sich das lineare Gleichungssystem für v_0 und v_2

$$\sum_l \langle \chi_k | \chi_l \rangle v_0^{(l)} + \langle \chi_k | r^2 | \chi_l \rangle v_2^{(l)} = \sum_l \langle \chi_k | V | \chi_l \rangle , \quad (2.9a)$$

$$\sum_l \langle \chi_k | r^2 | \chi_l \rangle v_0^{(l)} + \langle \chi_k | r^4 | \chi_l \rangle v_2^{(l)} = \sum_l \langle \chi_k | r^2 V | \chi_l \rangle , \quad (2.9b)$$

mit lösbaren Gaußintegralen (Anhang A).

Damit erhält man die Differentialgleichungen

$$\dot{A}_i = -4A_i^2 - v_2^{(i)} , \quad (2.10a)$$

$$\dot{\gamma}_i = 6iA_i - v_0^{(i)} , \quad (2.10b)$$

welche die zeitliche Entwicklung von $\mathbf{z}(t)$ im Parameterraum definieren.

2.2.2 Betrachtung des selbsteinschließenden Kondensats mit einer einzigen Gaußfunktion

Im Fall einer einzigen Gaußfunktion ist (2.9) direkt lösbar und v_0 und v_2 können in (2.10) eingesetzt werden.

Für ein selbsteinschließendes Kondensat erhält man mit den Abkürzungen $\text{Re}(A) = A_R$, $\text{Im}(A) = A_I$, $\text{Re}(\gamma) = \gamma_R$ und $\text{Im}(\gamma) = \gamma_I$

$$v_0 = -\frac{\pi e^{-2\gamma_I}}{\sqrt{2}^3 A_I} (5 - 14a_{\text{sc}} A_I)$$

und

$$v_2 = -\sqrt{2}^3 \pi e^{-2\gamma_I} (a_{\text{sc}} A_I - \frac{1}{6}) .$$

Die Normierungsbedingung $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ liefert eine zusätzliche Gleichung

$$\gamma_I = -\frac{3}{4} \ln \frac{2A_I}{\pi} .$$

Mit Einsetzen der Norm und der v_0, v_2 erhält man mit Gl. (2.10) ein Gleichungssystem für die übrigen drei (reellen) Gaußparameter

$$\dot{A}_R = -4(A_R^2 - A_I^2) + \frac{8}{\sqrt{\pi}} A_I^{3/2} (a_{\text{sc}} A_I - \frac{1}{6}) , \quad (2.11a)$$

$$\dot{A}_I = -8A_R A_I , \quad (2.11b)$$

$$\dot{\gamma}_R = -6A_I + \frac{\sqrt{A_I}}{\sqrt{\pi}} (5 - 14a_{\text{sc}} A_I) .$$

γ ist also durch den komplexen Breitenparameter A vollständig bestimmt.

Stationäre Zustände werden durch Nullsetzen von A_R und A_I in Gl. (2.11) erhalten, wobei sich die Lösungen

$$A_R = 0 \quad , \quad A_I = \frac{1}{6a_{\text{sc}}} + \frac{\pi}{8a_{\text{sc}}^2} \left(1 \pm \sqrt{1 + \frac{8a_{\text{sc}}}{3\pi}} \right) \quad (2.12)$$

ergeben.

Die beiden Lösungen sind von der Streulänge abhängig und entstehen in einer Tangentebifurkation bei einer kritischen Streulänge $a_{\text{crit}} = -3\pi/8$. Für kleinere Streulängen existiert keine Lösung. Die Lösungen haben unterschiedliche Energien (Abb. 2.1) und bilden den Grundzustand und einen stationären angeregten Zustand.

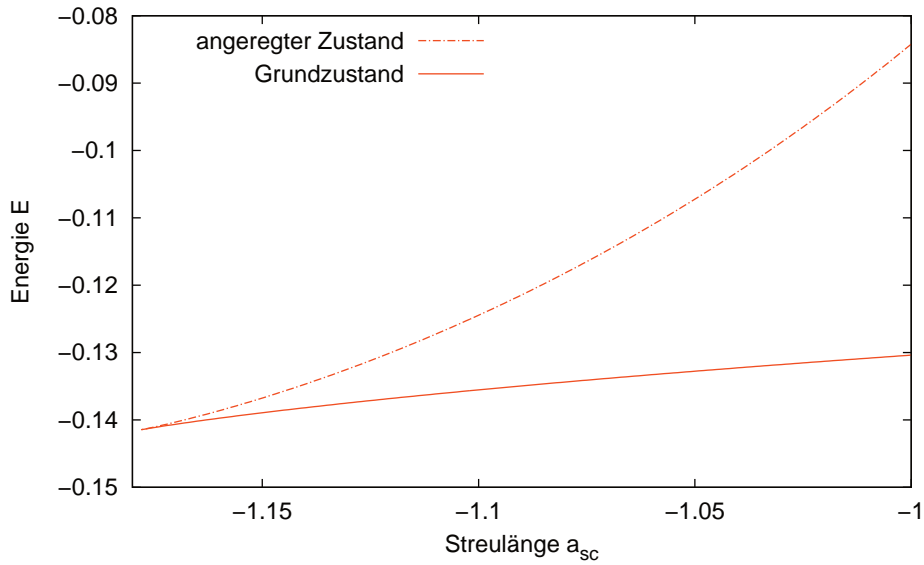


Abbildung 2.1: Die Energie der stationären Zustände, die bei einer kritischen Streulänge a_{crit} in einer Tangentenbifurkation entstehen, in Abhängigkeit vom Streuparameter a_{sc} . Für $a_{\text{sc}} \rightarrow 0$ divergiert die Energie des angeregten Zustands.

Kanonische Koordinaten

Die Bewegungsgleichungen (2.11) für den Ansatz einer Gaußfunktion im zeitabhängigen Variationsprinzip können auf hamiltonsche Form

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad , \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

gebracht werden. Dazu werden die Gaußparameter A_R und A_I auf geeignete kanonische Größen

$$q(t) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{A_I(t)}} = \sqrt{\langle r^2 \rangle} \quad , \quad p(t) = A_R(t) \sqrt{\frac{3}{A_I(t)}}$$

transformiert [27], wobei die verallgemeinerte Koordinate q gleich der Ausdehnung des Kondensats ist und p der dazu konjugierte Impuls.

Die zugehörige Hamiltonfunktion hat dann die Form

$$H(q, p) = \underbrace{p^2}_T + \underbrace{\frac{9}{4q^2} + \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{3a_{\text{sc}}}{2q^3} - \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q}}_V \quad (2.13)$$

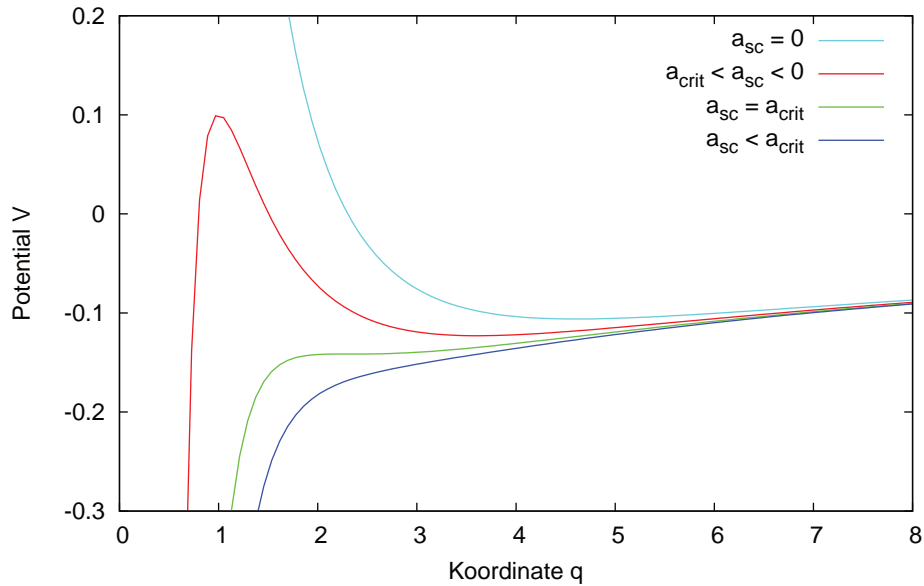


Abbildung 2.2: Das Potential $V(q)$ aus Gl. (2.13) für unterschiedliche Werte der Streulänge a_{sc} . Ohne Kontaktwechselwirkung gibt es einen stabilen Grundzustand, für eine attraktive Wechselwirkung erhält man bis zu einer kritischen Streulänge zusätzlich einen instabilen stationären Zustand.

mit dem kinetischen Term T und dem Potentialterm V für das Kondensat mit $1/r$ -Wechselwirkung.

Da sich das Problem in ein kanonisches System transformieren lässt, kann die Dynamik der Wellenfunktion also äquivalent zu der eindimensionalen Bewegung eines Massepunktes in einem äußeren Potential behandelt werden.

Die Form des Potentials V wird in Abb. 2.2 für verschiedene Streuparameter a_{sc} gezeigt. Die Kontaktwechselwirkung beeinflusst dabei den Verlauf für große Dichten, während für kleine Dichten die attraktive $1/r$ -Wechselwirkung den Verlauf bestimmt. Ohne Kontaktwechselwirkung erzeugt die $1/r$ -Wechselwirkung ein Potentialminimum mit einem stationären Grundzustand, welcher auch für eine repulsive Kontaktwechselwirkung wegen der kleinen Reichweite erhalten bleibt. Eine attraktive Kontaktwechselwirkung erzeugt bei großen Dichten ein Potentialgefälle, wodurch ein lokales Maximum mit einem stationären angeregten Zustand entsteht.

3 Makroskopisches Quantentunneln

Das BEC als metastabiler Zustand unterliegt verschiedenen Zerfallsprozessen.

In der Nähe der kritischen Temperatur ist die *thermal depletion* ein dominanter Prozess, welcher das Ausscheiden von Atomen aus dem Kondensat durch thermische Anregung derselben beschreibt. Das Kondensat selbst kann aber auch schon bei tieferen Temperaturen thermische Schwingungen ausführen, welche bei genügend starker Anregung zum Kollaps der Wellenfunktion führen (*thermische Zerfälle*).

Erst für sehr tiefe Temperaturen ist das *makroskopische Quantentunneln* als dominanter Prozess zu erwarten, welches im Gegensatz zu den thermisch veranlassten Zerfällen einen durch Quantenfluktuationen herbeigeführten Kollaps beschreibt. Voraussetzung dafür ist eine attraktive Kontaktwechselwirkung. Diese wird für sehr kleine Atomabstände dominant und führt damit zum Kollaps der Wellenfunktion. Der Übergang in den Bereich extremer Lokalisierung erfolgt durch einen Tunnelprozess.

Eine erste Beschreibung des Quantentunnelns beruht auf der Variationslösung mit einer Gaußfunktion als Näherung der Wellenfunktion und der Darstellung in kanonischen Koordinaten, wobei der Tunnelprozess durch eine klassische Bahn, die "Bouncetrajektorie", repräsentiert wird. Es kann die Tunnelrate berechnet werden [14] und die hierbei resultierende "Stoof-Formel" ist der Ausgangspunkt für alle weiteren Überlegungen, die sich um die Verbesserung dieser Berechnungsformel bemühen.

Im ersten Schritt wird die Berechnung der Bouncetrajektorie verbessert, entweder durch numerische Berechnung, wie in [15] (externe Falle) und [16] (Selbsteinschluss), oder durch einen erweiterten Variationsansatz, wie in [28] (externe Falle) und [22] (Selbsteinschluss). Hier wird jedoch nur die Methode des erweiterten Variationsansatzes mit mehreren komplexen Gaußfunktionen vorgestellt, welche in dieser Arbeit verwendet wurde.

3.1 Tunnelrate

Für eine attraktive Streuwechselwirkung $a_{\text{crit}} < a_{\text{sc}} < 0$ wird im Potentialbild der Grundzustand metastabil, da in einer quantenmechanischen Betrachtung des klassischen Pro-

blems ein Tunnelprozess des Pseudoteilchens durch die Potentialbarriere möglich ist.

Ausgehend vom lokalen Minimum des Potentials am Grundzustand durchtunnelt es die Barriere um den stationären angeregten Zustand und “fällt” auf der anderen Seite in Richtung $q = 0$. Im Bild der Wellenfunktion entspricht das einer starken Kontraktion der Wellenfunktion und anschließendem Kollaps.

Der Tunnelprozess existiert nicht als eine Lösung der GPE, da diese im Gegensatz zur vollen Schrödingergleichung Quantenfluktuationen vernachlässigt. Das Problem wird daher im Rahmen eines Pfadintegralformalismus betrachtet, der in Analogie zum Tunneln eines Teilchens sämtliche möglichen Bahnen berücksichtigt.

Ausgangspunkt ist die Tunnelrate Γ_0 für ein Teilchen im Potential, welche man aus dem Imaginärteil der Grundzustandsenergie erhält

$$\Gamma_0 = -\frac{2}{\hbar} \text{Im}(E_0) = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{2k_B T}{\hbar} \text{Im}(\ln Z) .$$

Hierbei geht eine formale Analogie der Zustandssumme aus der statistischen Mechanik und dem Zeitentwicklungsoperator der Quantenmechanik ein, welche $\hbar\beta$ mit der Imaginärzeit $it = \tau$ identifiziert.

Die Zustandssumme ist dann durch $Z = \text{Spur}[e^{-\beta H}]$ gegeben, was sich durch das Pfadintegral

$$Z = \iint d[q] d[p] \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \left(-ip \frac{dq}{d\tau} + H(q, p) \right) \right] \quad (3.1)$$

darstellen lässt mit $\beta = 1/k_B T$.

Für eine allgemeine Kondensatwellenfunktion lässt sich die Zustandssumme nicht so darstellen und man muss das Pfadintegral feldtheoretisch erweitern. Dessen Lösung ist im Allgemeinen schwierig. Durch die Darstellung in kanonischen Koordinaten kann das Pfadintegral aber wie in Gl. (3.1) mit der Hamiltonfunktion (2.13) dargestellt werden.

Das Integral über die Impulse $p(\tau)$ in der Zustandssumme liefert ein lösbares Gaußintegral und es bleibt

$$Z = \int d[q] e^{-S[q]/\hbar}$$

mit der euklidischen Wirkung

$$S[q] = \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \right] .$$

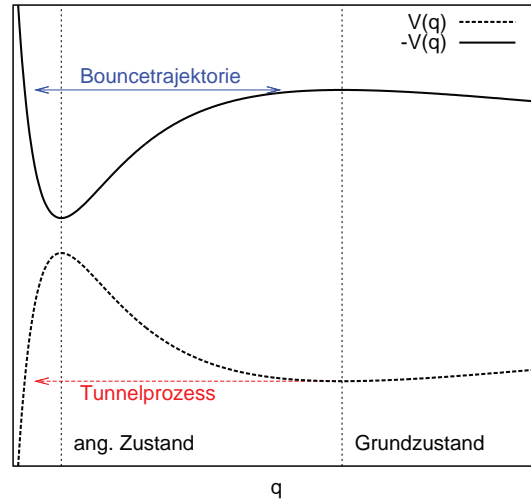


Abbildung 3.1: Die Transformation in Imaginärzeit dreht das Potential und es finden sich geschlossene Bahnen in dem Potential. Sie entsprechen dem Tunneln durch die Potentialbarriere, Umkehren und Zurücktunneln, daher Bouncetrajektorie.

Hierbei ist $q(-\hbar\beta/2) = q(\hbar\beta/2)$ und $\hbar\beta$ ist damit die Periodendauer der Bahn $q(\tau)$ in Imaginärzeit τ .

Das Übergehen in die Imaginärzeit $it \rightarrow \tau$ ist eine analytische Fortsetzung der Wellenfunktionen auf der imaginären Achse. Das Potential wird dabei invertiert $V \rightarrow -V$, der Grundzustand wird also instabil und der angeregte Zustand stabil.

Als Näherung zur Lösung des Pfadintegrals wird daher die Wirkung als Integral über die Lagrangefunktion zum invertierten Potential $-V(q)$ geschrieben

$$L = T - V = \frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 - (-V(q)) .$$

In der Zustandssumme wird nur die Wirkung der klassischen Bahn, die sich durch Lösen der entsprechenden Euler-Lagrange-Gleichungen ergibt, und kleine Variationen jener berücksichtigt, da für diese Bahn die Wirkung extremal und somit lokal konstant ist. Diese Bahn liefert damit eine Phase als Beitrag zur Zustandssumme, während die Variationen zusätzlich berücksichtigt werden müssen.

Klassisch erlaubte Bahnen bezüglich des invertierten Potentials $-V$ haben q -Werte, die innerhalb der Potentialbarriere von V liegen, die den Kollaps aus dem Grundzustand verhindert; sie entsprechen also Tunnelbahnen (Abb. 3.1). Sucht man Tunnelbahnen ausgehend vom stationären angeregten Zustand und lässt die Energie des Pseudoteil-

chens gegen die Grundzustandsenergie laufen, erhält man als Grenzwert eine Bahn, die vom Grundzustand aus einmal durch die Potentialbarriere und wieder zurück läuft, die Bouncetrajektorie. Da der Grundzustand stationär ist, existiert diese nur als Grenzwert $\beta \rightarrow \infty$ und unterscheidet sich für fast alle Zeiten kaum von der stationären Grundzustandslösung, um dann einmal durch die Barriere und wieder zurück zu laufen.

Im Temperaturgrenzfall $T \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow \infty$ befinden sich alle Atome im Grundzustand. Es trägt dadurch nur die Bouncetrajektorie $\beta = \infty$ zur Zerfallsrate bei.

Zu einer analytischen Lösung kommt man, wenn man das Potential polynomial um den Grundzustand entwickelt, wobei die Grundzustandslösung und die Bouncetrajektorie existiert, deren Wirkungen sich unterscheiden. Die Grundzustandslösung liefert keinen Anteil zur Zerfallsrate, die Bouncetrajektorie aber schon. Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass ein Pfad beliebig viele Bounces hintereinander durchlaufen kann, erhält man die Grundzustandsenergie

$$E_0 \simeq V(q_0) + \frac{\hbar\omega_0}{2} - \lim_{T \rightarrow 0} k_B T \left[\frac{\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_0^2)}{\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_b(\tau)^2)} \right]^{1/2} e^{-(S[q_b] - S[q_0])/\hbar},$$

wobei $S[q_0]$ die euklidische Wirkung des Grundzustands und $S[q_b]$ die der Bouncetrajektorie ist, und $\det(-d^2/d\tau^2 + \omega^2)$ das Produkt der Eigenwerte der Gelfand-Yaglom Differentialgleichungen, welche Fluktuationen um die Bouncetrajektorie in zweiter Ordnung berücksichtigen.

Die Fluktuationsdeterminante lässt sich im Rahmen des eindimensionalen Problems ausrechnen, wobei die einzige Variation, die berücksichtigt werden muss, entlang der Bahn verläuft [29]

$$\lim_{T \rightarrow 0} k_B T \left[\frac{\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_0^2)}{\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_b(\tau)^2)} \right]^{1/2} = \frac{i}{2} \sqrt{\frac{mv_0^2 \hbar \omega_0}{\pi}}, \quad (3.2)$$

und schließlich folgt die Tunnelrate mit

$$\Gamma_0 = \sqrt{\frac{Nm\omega v_0^2}{\pi \hbar}} e^{-(S[q_b] - S[q_0])N/\hbar}, \quad (3.3)$$

wobei die Teilchenzahl N , die Frequenz ω der Oszillatornäherung des Potentials am Grundzustand, die ‘‘Bouncegeschwindigkeit’’ v_0 und die Wirkung S der stationären Lösung am Grundzustand $q_0(\tau)$ und der Bouncetrajektorie $q_b(\tau)$ eingehen. Dabei ist v_0 die ‘‘Anlaufgeschwindigkeit’’ des Pseudoteilchens und ist definiert über den Ort des Teilchens $q(\tau)$ mit dem Grundzustand bei q_0

$$q(\tau) = q_0 + \frac{v_0}{\omega} e^{-\omega|\tau|}.$$

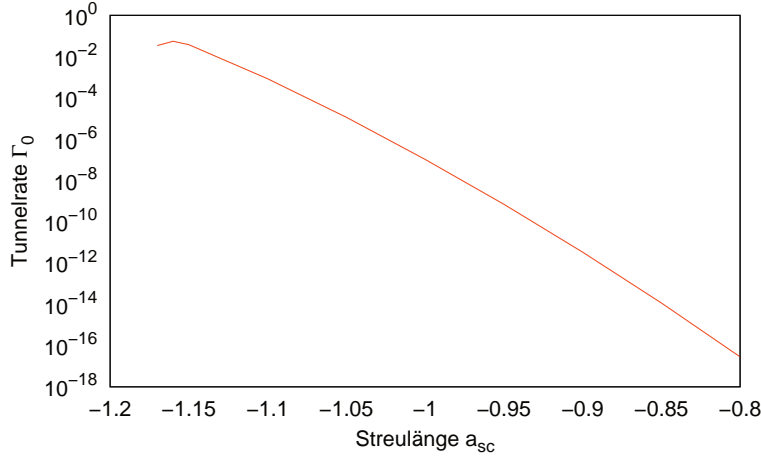


Abbildung 3.2: Tunnelrate Γ_0 für ein Kondensat mit $N = 30$ Teilchen und $1/r$ -Wechselwirkung im Rahmen des Variationsansatzes mit einer Gaußfunktion. (Rechnung aus [22])

3.2 Die Gross-Pitaevskii-Gleichung in Imaginärzeit

Im Fall einer einzigen Gaußfunktion können die Rechnungen in Imaginärzeit einfach durch den Übergang ins invertierte Potential durchgeführt werden. Für eine Superposition von Gaußfunktionen können jedoch keine Koordinaten für eine Transformation auf ein kanonisches System gefunden werden. Die Imaginärzeitdynamik kann auch als numerisch exakte Lösung der GPE berechnet werden [15]. Dabei wird die GPE $H\Psi = i\dot{\Psi}$ und ihr konjugiert Komplexes $H\Psi^* = -i\dot{\Psi}^*$ unter Benutzung der reellwertigen Wellenfunktionen $\Psi(r, \tau)$ und $\bar{\Psi}(r, \tau)$ in Imaginärzeit transformiert mit den Ersetzungen $it \rightarrow \tau$, $\Psi(r, t) \rightarrow \Psi(r, \tau)$ und $\Psi^*(r, t) \rightarrow \bar{\Psi}(r, \tau)$.

Dabei ergeben sich die Gleichungen

$$-i\dot{\Psi} = H\Psi, \quad i\dot{\bar{\Psi}} = H\bar{\Psi}, \quad (3.4)$$

mit

$$H = -\Delta + 8\pi a_{sc} \bar{\Psi}\Psi - 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{\bar{\Psi}'\Psi'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \mu.$$

Dabei sind die Zeitentwicklungsoperatoren $U = e^{\pm H\tau}$ der beiden GPEs ebenfalls reell.

Der Übergang zu $\Psi(r, \tau)$ und $\bar{\Psi}(r, \tau)$ erhält die Norm $\int d^3\mathbf{r} \bar{\Psi}\Psi = 1$ mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \bar{\Psi}(r, \tau)\Psi(r, \tau)$.

Um die Tunnelrate mit einer verbesserten Wellenfunktion innerhalb eines Variationsansatzes zu berechnen, wird nun eine Superposition von n_g Gaußfunktionen sowohl für Ψ

als auch für $\bar{\Psi}$ angesetzt [21]

$$\Psi(r, \tau) = \sum_{i=1}^{n_g} \chi_i = \sum_{i=1}^{n_g} e^{-A_i(\tau)r^2 - \gamma_i(\tau)},$$

$$\bar{\Psi}(r, \tau) = \sum_{i=1}^{n_g} \bar{\chi}_i = \sum_{i=1}^{n_g} e^{-\bar{A}_i(\tau)r^2 - \bar{\gamma}_i(\tau)}$$

mit reellen Parametern

$$\mathbf{z} = (A_1(\tau), \gamma_1(\tau), \dots, A_{n_g}(\tau), \gamma_{n_g}(\tau), \bar{A}_1(\tau), \bar{\gamma}_1(\tau), \dots, \bar{A}_{n_g}(\tau), \bar{\gamma}_{n_g}(\tau)).$$

Es wird wieder das zeitabhängige Variationsprinzip (2.7) angewandt, wobei aber ein Gleichungssystem für $v_0^{(k)}, v_2^{(k)}, \bar{v}_0^{(k)}$ und $\bar{v}_2^{(k)}$ folgt

$$\sum_l v_l^{(0)} \langle \chi_k | \chi_l \rangle + \sum_l v_l^{(2)} \langle \chi_k | r^2 | \chi_l \rangle = \sum_l \langle \chi_k | V | \chi_l \rangle, \quad (3.5a)$$

$$\sum_l v_l^{(0)} \langle \chi_k | r^2 | \chi_l \rangle + \sum_l v_l^{(2)} \langle \chi_k | r^4 | \chi_l \rangle = \sum_l \langle \chi_k | r^2 V | \chi_l \rangle, \quad (3.5b)$$

$$\sum_l \bar{v}_l^{(0)} \langle \chi_l | \chi_k \rangle + \sum_l \bar{v}_l^{(2)} \langle \chi_l | r^2 | \chi_k \rangle = \sum_l \langle \chi_l | V | \chi_k \rangle, \quad (3.5c)$$

$$\sum_l \bar{v}_l^{(0)} \langle \chi_l | r^2 | \chi_k \rangle + \sum_l \bar{v}_l^{(2)} \langle \chi_l | r^4 | \chi_k \rangle = \sum_l \langle \chi_l | r^2 V | \chi_k \rangle, \quad (3.5d)$$

mit den Integralen aus Anhang A und damit die Differentialgleichungen für die Gaußparameter

$$\dot{A}_i = -4A_i^2 + v_i^{(2)}, \quad (3.6a)$$

$$\dot{\gamma}_i = 6A_i + v_i^{(0)}, \quad (3.6b)$$

$$\dot{\bar{A}}_i = 4\bar{A}_i^2 - \bar{v}_i^{(2)}, \quad (3.6c)$$

$$\dot{\bar{\gamma}}_i = -6\bar{A}_i - \bar{v}_i^{(0)}. \quad (3.6d)$$

Es ergeben sich wieder stationäre Zustände, wie schon im Fall einer Gaußfunktion. Rechnungen zeigen [22, 28], dass das Verhalten der Wellenfunktion schnell verbessert wird und die dynamischen Größen, wie die Wirkung, schon bei einer geringen Anzahl n_g von Gaußfunktionen gegen die Werte aus vollnumerischen Rechnungen konvergieren (Abb. 3.3).

Für die Berechnung der Tunnelrate Γ_0 wird dann Gl. (3.3) genutzt, wobei die verwendeten Größen, wie die Wirkung S aus den Rechnungen mit der verbesserten Wellenfunktion stammen.

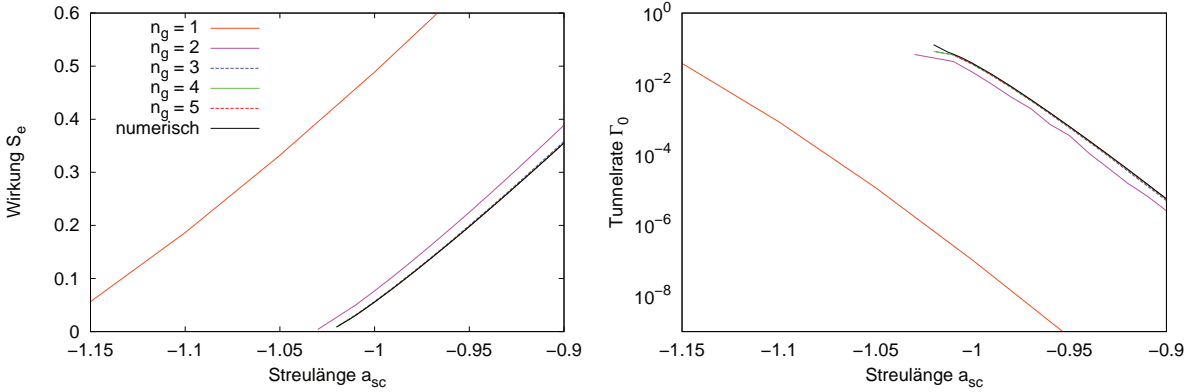


Abbildung 3.3: *Links:* Die euklidische Wirkung der Bahn über der Streulänge a_{sc} für $n_g = 1, \dots, 5$ Gaußfunktionen und zum Vergleich eine numerische Gitterrechnung. Die Kurven für $n_g = 3, 4, 5$ liegen praktisch übereinander. *Rechts:* Die Tunnelrate über der Streulänge a_{sc} . Die in (3.3) eingehenden Parameter wurden aus Rechnungen für n_g Gaußfunktionen und einer numerischen Gitterrechnung gewonnen. (Rechnungen für das selbsteinschließende Kondensat aus [16, 22])

3.3 Berechnung der Bouncetrajektorie

Um die benötigten dynamischen Größen zu erhalten, werden klassische periodische Bahnen im invertierten Potential berechnet, möglichst nahe der Bouncetrajektorie. Dabei müssen die Differentialgleichungen des Variationsansatzes mit geeigneten Anfangsbedingungen gelöst werden.

Was für den einfachen Ansatz einer einzigen Gaußfunktion möglich ist, wird für mehr Gaußfunktionen numerisch schwierig, da die Differentialgleichungen numerisch instabil sind. Daher wird die Bahn in Segmente unterteilt und mit einem entsprechend erweiterten Satz von Anfangsbedingungen die Segmente einzeln integriert.

Die Anfangsbedingungen für eine periodische Bahn bestehen größtenteils aus den Anschlussbedingungen zwischen angrenzenden Segmenten

$$\begin{aligned} A_{i,k}(\tau_k) &= A_{i,k+1}(\tau_k) , \\ \gamma_{i,k}(\tau_k) &= \gamma_{i,k+1}(\tau_k) , \\ \bar{A}_{i,k}(\tau_k) &= \bar{A}_{i,k+1}(\tau_k) , \\ \bar{\gamma}_{i,k}(\tau_k) &= \bar{\gamma}_{i,k+1}(\tau_k) , \end{aligned}$$

wobei τ_k die Zeit nach Durchlauf des k-ten Segmentes ist. Außerdem muss die Norm

erhalten bleiben

$$\int d^3\mathbf{r} \bar{\Psi}\Psi = 1 ,$$

an den Umkehrpunkten $\tau = 0, \frac{\beta}{2}$ muss $\Psi = \bar{\Psi}$ gelten

$$\begin{aligned} A_i(0) &= \bar{A}_i(0) , \\ \gamma_i(0) &= \bar{\gamma}_i(0) , \\ A_i\left(\frac{\beta}{2}\right) &= \bar{A}_i\left(\frac{\beta}{2}\right) , \\ \gamma_i\left(\frac{\beta}{2}\right) &= \bar{\gamma}_i\left(\frac{\beta}{2}\right) \end{aligned}$$

und die Meanfieldenergie den gewünschten Wert haben

$$\int d^3\mathbf{r} \bar{\Psi}(\mathbf{r}) \left[T + V_{\text{ext}} + \frac{1}{2}V_{\text{int}} \right] \Psi(\mathbf{r}) = E_{\text{mf}} .$$

Mit Hilfe des Newton-Algorithmus für eine mehrdimensionalen Nullstellensuche werden die Anfangsbedingungen alle gleichzeitig gesucht, wobei aber schon gute Startvektoren erforderlich sind.

Die Linearisierung der Jacobimatrix am stationären angeregten Zustand in Imaginärzeit liefert zwei stabile (rein imaginäre) Eigenwerte. Indem die Parameter für den angeregten Zustand in Richtung der zu den stabilen Eigenwerten gehörigen Eigenvektoren geändert werden, erhält man Startvektoren für Bahnen mit Energien, die leicht unterhalb des angeregten Zustands liegen.

Diese lineare Näherung ist nur in der unmittelbaren Umgebung des angeregten Zustands gültig, Ziel ist es aber, Bahnen in der Nähe der Grundzustandsenergie zu finden. Man kann aber schrittweise vorgehen und unter Kenntnis der Parametervektoren zweier Bahnen den Startvektor einer dritten linear extrapolieren und so rekursiv die Meanfieldenergie verringern, bis man in die Nähe der Bouncetrajektorie kommt.

Die Integration der Bewegungsgleichungen beim Multi-Shooting wird numerisch mit Hilfe eines Runge-Kutta-Verfahrens durchgeführt.

4 Stabilitätsanalyse

Für die bisherigen Rechnungen zur Tunnelrate lag immer die Stoof-Formel zugrunde, die das Problem nur im Rahmen des Variationsansatzes einer Gaußfunktion als Wellenfunktion behandelt. Die Herleitung für eine Wellenfunktion aus mehreren Gaußfunktionen ist schwieriger und muss feldtheoretisch geführt werden, da keine Transformation auf ein kanonisches System mehr gefunden werden kann. Daher wurden in den bisherigen Arbeiten nur die dynamischen Größen der Bouncetrajektorie mit Hilfe erweiterter Methoden besser berechnet und die verbesserten Werte in der Stoof-Formel verwendet.

Jetzt wird die Fluktuationsdeterminante, welche in der Herleitung der Tunnelrate für das kanonische System ausgerechnet wurde (Gl. (3.2)), mit einem Fluktuationsvorfaktor ergänzt, der die Einschränkung der eindimensionalen Betrachtung kompensiert. Dazu wird die Stabilität des Grundzustands und der Bouncetrajektorie gegenüber Quantenfluktuationen näher untersucht und das Verhalten des Systems unter dem Einfluss kleiner Störungen betrachtet, also die Dynamik einer leicht variierten Wellenfunktion. Diese wird in linearer Näherung durch die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen (BdG-Gleichungen) beschrieben, die sich aus der GPE herleiten lassen.

4.1 Die Fluktuationsdeterminante

Die Fluktuationsdeterminante wird aus den Eigenwerten der Gelfand-Yaglom Gleichungen für den Grundzustand und die Bouncetrajektorie gebildet und wurde in Gl. (3.2) für ein eindimensionales System berechnet. Das heißt, dass in die Berechnung nur die Stabilität entlang der einzigen erlaubten Bewegungsrichtung einging.

Die Stabilität gegenüber beliebigen Fluktuationen wird über die Eigenwerte der BdG-Gleichungen berücksichtigt. Dabei bilden die Verhältnisse der korrespondierenden Stabilitätseigenwerte λ für Grundzustand und Bouncetrajektorie die Vorfaktoren ζ , welche die Fluktuationsdeterminante erweitern. Eine ausführlichere theoretische Betrachtung findet sich in der Arbeit von T. Schwidder [28].

Die Vorfaktoren sind dann

$$\zeta_i = \sqrt{\frac{\lambda_0^{(i)}(\beta)}{\lambda_p^{(i)}(\beta)}}. \quad (4.1)$$

Dabei sind $\lambda_p(\beta)$ die Stabilitätseigenwerte für eine periodische Bahn im invertierten Potential mit der Periodenlänge β nach Durchlaufen einer Periode, die für $\beta \rightarrow \infty$ in die Bouncetrajektorie übergeht, und $\lambda_0(\beta)$ die zeitliche Entwicklung der Eigenwerte für den Grundzustand $\lambda_0(\tau) = e^{\omega_0 \tau}$ nach der Zeit β .

Diese Verhältnisse werden dann als Vorfaktoren in die Fluktuationsdeterminante eingerechnet und die Tunnelrate ist

$$\Gamma = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^{\infty} \zeta_i \sqrt{\frac{Nm\omega v_0^2}{\pi \hbar}} e^{-(S[q_b] - S[q_0])N/\hbar},$$

wobei für die numerischen Berechnungen nur endlich viele Eigenwerte berücksichtigt werden können und im Folgenden die Tunnelrate lediglich unter Berücksichtigung der ersten k Eigenwerte gebildet wird

$$\Gamma_k = \Gamma_0 \prod_{i=1}^k \zeta_i.$$

4.2 Berechnung der Fluktuationen

Für die Kondensatwellenfunktionen in Imaginärzeit Ψ_0 und $\bar{\Psi}_0$ werden nun Variationslösungen mit mehreren Gaußfunktionen angesetzt. Zur Berechnung der Fluktuationen kommen zwei Methoden zum Einsatz. Einmal werden die Fluktuationen durch Störung der Variationsparameter erzeugt und einmal werden sie allgemein angesetzt und eine geeignete Basis gewählt, in der die BdG-Gleichungen in Differentialgleichungen für die Parameter der Basisfunktionen übergehen.

4.2.1 Variation der Gaußparameter

Hier im Rahmen des Variationsansatzes kann man sich zunutze machen, dass die Wellenfunktion des Kondensats

$$\Psi = \sum_{i=1}^n \chi_i(\mathbf{z}_i)$$

durch parametrisierte Funktionen $\chi_i(\mathbf{z}_i)$ dargestellt wird und ihre Dynamik über Differentialgleichungen für die Parameter bestimmt ist. In diesem Fall ist $\mathbf{z}_i = (A_i, \gamma_i)$ und $\chi_i(\mathbf{z}_i) = e^{-(A_i r^2 + \gamma_i)}$.

Abweichungen von der Wellenfunktion werden über Variationen der Funktionsparameter $\mathbf{z} + \delta\mathbf{z}$ erzeugt, wobei die Fluktuationswellenfunktionen dann die Form

$$\begin{aligned}\Psi + \delta\Psi &= \sum_i \chi_i(\mathbf{z}_i + \delta\mathbf{z}_i) \\ &= \sum_i e^{-(A_i r^2 + \gamma_i)} e^{-(\delta A_i r^2 + \delta\gamma_i)}, \\ \delta\Psi &= \sum_i \{\chi_i(\mathbf{z}_i)(\chi_i(\delta\mathbf{z}_i) - 1)\}\end{aligned}$$

haben.

Die Dynamik der Wellenfunktion wird durch Gl. (3.6) beschrieben, welche die Form

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{f}(\mathbf{z})$$

hat mit den Gaußparametern $\mathbf{z} = (\gamma_1, A_1, \bar{\gamma}_1, \bar{A}_1, \dots, \gamma_n, A_n, \bar{\gamma}_n, \bar{A}_n)$.

Es wird eine Störung $\mathbf{z}_i + \delta\mathbf{z}_i$ der Parameter der Wellenfunktion angesetzt, die der Veränderung durch eine Fluktuation $\delta\Psi$ entspricht. Nach Linearisierung um \mathbf{z}_i wird die Dynamik der Störung durch

$$\delta\dot{\mathbf{z}}_i = J \delta\mathbf{z}_i$$

beschrieben, mit der Jacobi-Matrix $J_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial z_j}$.

Die Gleichungen für die Gaußparameter werden unter Verwendung der Größen $v^{(0)}$ und $v^{(2)}$ aufgestellt, für deren Bestimmung ein eigenes Gleichungssystem zu lösen ist

$$K\vec{v} = \vec{V}, \quad (4.2)$$

$$K^T\vec{v} = \vec{V}, \quad (4.3)$$

mit

$$\begin{aligned}
 K_{i,j} &= \begin{pmatrix} \langle \chi_i | \chi_j \rangle & \langle \chi_i | r^2 | \chi_j \rangle \\ \langle \chi_i | r^2 | \chi_j \rangle & \langle \chi_i | r^4 | \chi_j \rangle \end{pmatrix}, \\
 v_j &= \begin{pmatrix} v_j^{(0)} \\ v_j^{(2)} \end{pmatrix}, \\
 \bar{v}_j &= \begin{pmatrix} \bar{v}_j^{(0)} \\ \bar{v}_j^{(2)} \end{pmatrix}, \\
 V_i &= \sum_j \begin{pmatrix} \langle \chi_i | V | \chi_j \rangle \\ \langle \chi_i | r^2 V | \chi_j \rangle \end{pmatrix}, \\
 \bar{V}_i &= \sum_j \begin{pmatrix} \langle \chi_j | V | \chi_i \rangle \\ \langle \chi_j | r^2 V | \chi_i \rangle \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Die Variationen $\delta v^{(0)}$ und $\delta v^{(2)}$ werden nun berechnet, indem man ausgehend von dem Gleichungssystem 4.3 zur Bestimmung der \mathbf{v} Störungen $\mathbf{z} + \delta \mathbf{z}$ der Parameter der Gaußfunktionen χ_i ansetzt

$$(K + \delta K)(v + \delta v) = V + \delta V, \quad (K + \delta K)^T(\bar{v} + \delta \bar{v}) = \bar{V} + \delta \bar{V},$$

mit

$$\delta K = \frac{\partial K}{\partial \mathbf{z}} \delta \mathbf{z}, \quad \delta V = \frac{\partial V}{\partial \mathbf{z}} \delta \mathbf{z}.$$

Die Bestimmungsgleichungen für δv und $\delta \bar{v}$ lauten dann

$$\begin{aligned}
 K \delta v &= \delta V - \delta K v, \\
 K^T \delta \bar{v} &= \delta \bar{V} - \delta K^T \bar{v}.
 \end{aligned}$$

Damit sind die Bewegungsgleichungen für die Variationen der Gaußparameter

$$\begin{aligned}
 \delta \dot{A}_i &= -8A_i \delta A_i + \delta v_i^{(2)}, \\
 \delta \dot{\gamma}_i &= 6\delta A_i + \delta v_i^{(0)}, \\
 \delta \dot{\bar{A}}_i &= -8\bar{A}_i \delta \bar{A}_i + \delta \bar{v}_i^{(2)}, \\
 \delta \dot{\bar{\gamma}}_i &= 6\delta \bar{A}_i + \delta \bar{v}_i^{(0)},
 \end{aligned}$$

wobei $i = 1, \dots, n_g$ und n_g die Anzahl der Gaußfunktionen ist.

Die zeitliche Entwicklung der Variationen $\delta\mathbf{z}$ ist damit in linearer Näherung durch die Jacobi-Matrix der Bewegungsgleichungen der Parameter \mathbf{z} beschrieben.

Im Rahmen dieses Ansatzes können nicht alle Fluktuationen berücksichtigt werden, da aufgrund der sphärisch symmetrischen Wellenfunktion auch nur radialsymmetrische Störungen mit Drehimpuls $l = 0$ erzeugt werden können. Die Anzahl der Eigenwerte ist durch die Anzahl Gaußfunktionen n_g auf $4n_g$ Eigenwerte beschränkt, da pro Gaußfunktion zwei komplexe Parameter eingehen.

4.2.2 Basisentwicklung der Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen

Die GPE in Imaginärzeit (3.4) lauten

$$\dot{\Psi}(\mathbf{r}, \tau) = -H(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, \tau) \quad , \quad \dot{\bar{\Psi}}(\mathbf{r}, \tau) = H(\mathbf{r}) \bar{\Psi}(\mathbf{r}, \tau)$$

mit dem Hamiltonoperator

$$H(\mathbf{r}) = T + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \bar{\Psi}(\mathbf{r}', \tau) \Psi(\mathbf{r}', \tau) - \mu \quad ,$$

der zunächst sämtliche Potentialterme enthält.

Für die radialsymmetrischen Wellenfunktionen $\Psi_0(r, \tau)$ und $\bar{\Psi}_0(r, \tau)$, die Lösungen der GPE mit dem Hamiltonoperator

$$H_0(\mathbf{r}) = T + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \bar{\Psi}_0(\mathbf{r}', \tau) \Psi_0(\mathbf{r}', \tau) - \mu \quad ,$$

sind, werden kleine Störungen $\delta\Psi(\mathbf{r}, \tau)$ und $\delta\bar{\Psi}(\mathbf{r}, \tau)$ angesetzt und die GPEs für die Gesamtwellenfunktionen $\Psi_0(r, \tau) + \delta\Psi(\mathbf{r}, \tau)$ und $\bar{\Psi}_0(r, \tau) + \delta\bar{\Psi}(\mathbf{r}, \tau)$ aufgestellt.

Die GPEs lauten dann

$$\dot{\Psi}_0 + \delta\dot{\Psi} = - \left[T + V_{\text{ext}} + \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} (\bar{\Psi}_0 \Psi_0 + \bar{\Psi}_0 \delta\Psi + \Psi_0 \delta\bar{\Psi} + \delta\bar{\Psi} \delta\Psi) - \mu \right] (\Psi_0 + \delta\Psi) \quad ,$$

$$\dot{\bar{\Psi}}_0 + \delta\dot{\bar{\Psi}} = \left[T + V_{\text{ext}} + \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} (\bar{\Psi}_0 \Psi_0 + \bar{\Psi}_0 \delta\Psi + \Psi_0 \delta\bar{\Psi} + \delta\bar{\Psi} \delta\Psi) - \mu \right] (\bar{\Psi}_0 + \delta\bar{\Psi}) \quad .$$

Nach Vernachlässigung aller Terme, die quadratischer oder höherer Ordnung in der Störung sind, und Berücksichtigung von $\dot{\Psi}_0 = -H_0\Psi_0$ und $\dot{\bar{\Psi}}_0 = H_0\bar{\Psi}_0$ ergeben sich die BdG-Gleichungen in Imaginärzeit

$$\delta\dot{\Psi} = - H_0\delta\Psi - \Psi_0 \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} (\bar{\Psi}_0\delta\Psi + \Psi_0\delta\bar{\Psi}) \quad , \quad (4.4a)$$

$$\delta\dot{\bar{\Psi}} = H_0\delta\bar{\Psi} + \bar{\Psi}_0 \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} (\bar{\Psi}_0\delta\Psi + \Psi_0\delta\bar{\Psi}) \quad . \quad (4.4b)$$

Diese haben also die Form

$$\begin{pmatrix} \delta\dot{\Psi} \\ \delta\dot{\bar{\Psi}} \end{pmatrix} = B \begin{pmatrix} \delta\Psi \\ \delta\bar{\Psi} \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

wobei $B(\Psi_0)$ ein linearer Operator ist.

Die BdG-Gleichungen (4.4) werden nun für eine Entwicklung der Fluktuationen $\delta\Psi$, $\delta\bar{\Psi}$ in einer vollständigen, orthonormalen Basis umgeschrieben. Da die Gaußfunktionen eine radialsymmetrische Wellenfunktion liefern, lässt sich der Winkelanteil und der Radialanteil der Fluktuationen trennen

$$\delta\Psi(\mathbf{r}, \tau) = \sum_{n,l,m} c_{n,l,m}(\tau) \Phi_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (4.6)$$

$$\delta\bar{\Psi}(\mathbf{r}, \tau) = \sum_{n,l,m} \bar{c}_{n,l,m}(\tau) \Phi_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (4.7)$$

wobei $Y_{l,m}$ die Kugelflächenfunktionen und $\Phi_{n,l}$ Basisfunktionen für den Radialteil der $\delta\Psi$ sind.

Damit sind nur noch c und \bar{c} zeitabhängig und es gilt

$$\begin{aligned} \dot{c}_{n,l,m} &= \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \delta\dot{\Psi} \rangle, \\ \dot{\bar{c}}_{n,l,m} &= \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \delta\dot{\bar{\Psi}} \rangle. \end{aligned}$$

Zusammen mit (4.4) erhält man dann Gleichungen für die Parameter c , \bar{c}

$$\begin{aligned}
 \dot{c}_{n,l,m} &= -\langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | H_0 | \delta\Psi \rangle - \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} (\bar{\Psi}_0 \delta\Psi + \Psi_0 \delta\bar{\Psi}) | \Psi_0 \rangle \\
 &= \sum_{n',l',m'} \left\{ -\langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | H_0 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle c_{n',l',m'} \right. \\
 &\quad - \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} \bar{\Psi}_0 \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} | \Psi_0 \rangle c_{n',l',m'} \\
 &\quad \left. - \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} \Psi_0 \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} | \bar{\Psi}_0 \rangle \bar{c}_{n',l',m'} \right\} , \tag{4.8a}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \dot{\bar{c}}_{n,l,m} &= \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | H_0 | \delta\bar{\Psi} \rangle + \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} (\Psi_0 \delta\bar{\Psi} + \bar{\Psi}_0 \delta\Psi) | \bar{\Psi}_0 \rangle \\
 &= \sum_{n',l',m'} \left\{ \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | H_0 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \bar{c}_{n',l',m'} \right. \\
 &\quad + \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} \Psi_0 \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} | \bar{\Psi}_0 \rangle \bar{c}_{n',l',m'} \\
 &\quad \left. + \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \int d^3\mathbf{r}' V_{\text{int}} \bar{\Psi}_0 \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} | \bar{\Psi}_0 \rangle c_{n',l',m'} \right\} . \tag{4.8b}
 \end{aligned}$$

Für die Basisfunktionen $\Phi(r)$ werden verallgemeinerte Laguerre-Polynome gewählt, die für große r exponentiell abfallen

$$\Phi_{n,l}(r) = \frac{1}{N_{nl}} r^l \mathbf{L}_n^{(l+\frac{1}{2})}(br^2) e^{-\frac{b}{2}r^2} , \tag{4.9}$$

wobei b ein zusätzlicher freier Parameter und N_{nl} der Normierungsfaktor ist.

Das Verhalten $\sim e^{-br^2}$ der Basisfunktionen wurde so gewählt, damit die Überlappintegrale mit den Gaußfunktionen $\sim e^{-A_i r^2}$ analytisch lösbar sind.

Die $\Phi_{n,l}$ sind orthogonal

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi_{n,l} | \Phi_{n',l'} \rangle &= \frac{1}{N_{nl} N_{n'l'}} \int_0^\infty dr r^{2l+2} \mathbf{L}_n^{(l+\frac{1}{2})}(br^2) \mathbf{L}_{n'}^{(l'+\frac{1}{2})}(br^2) e^{-br^2} \\
 &= \frac{b^{-(l+\frac{3}{2})}}{2 N_{nl} N_{n'l'}} \int_0^\infty dx x^{l+\frac{1}{2}} \mathbf{L}_n^{(l+\frac{1}{2})}(x) \mathbf{L}_{n'}^{(l'+\frac{1}{2})}(x) e^{-x} \\
 &= \frac{b^{-(l+\frac{3}{2})}}{2 N_{nl} N_{n'l'}} \frac{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})}{n!} \delta_{nn'}
 \end{aligned}$$

und die Normierung ergibt sich mit

$$N_{nl} = b^{-\frac{2l+3}{4}} \sqrt{\frac{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})}{2n!}} .$$

Um die Überlappintegrale zu berechnen, werden die Basisfunktionen unter Ausnutzung der Summendarstellung

$$\mathbb{L}_n^{(\alpha)}(x) = \sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{n+\alpha}{n-i} \frac{x^i}{i!}$$

für verallgemeinerte Laguerre-Polynome $\mathbb{L}_n^{(\alpha)}$ in die Form

$$\Phi_{n,l}(r) = \sum_{k=0}^n d_k^{(l)} r^{2k+l} e^{-\frac{b}{2}r^2} \quad (4.10)$$

gebracht, wobei die Koeffizienten $d_k^{(l)}$ gegeben sind durch

$$\begin{aligned} d_k^{(l)} &= \frac{(-b)^k}{N_{nl} k!} \binom{n+l+\frac{1}{2}}{n-k} \\ &= b^{\frac{2l+3}{4}} \sqrt{\frac{2n!}{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})}} \frac{(-b)^k}{k!} \frac{(n+l+\frac{1}{2})(n+l-\frac{1}{2}) \cdots (k+l+\frac{3}{2})}{(n-k)!} . \end{aligned}$$

Damit sind die vorkommenden Integrale analytisch lösbar und die Gleichungen (4.8) können gelöst werden, wenn man die Entwicklung nach einer Anzahl n_{max} Basisfunktionen abbricht.

Für die beiden betrachteten Kondensate werden nun die Gl. (4.8) konkret ausgerechnet.

Externe Falle

Mit dem Hamiltonoperator des gefangenen Kondensats

$$H = -\Delta + r^2 + 8\pi a_{sc} |\Psi|^2 - \mu$$

können die BdG-Gleichungen (4.8) konkret ausgedrückt werden

$$\begin{aligned} \dot{c}_{n,l,m} &= \sum_{n',l',m'} \left\{ \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \Delta - r^2 - 16\pi a_{sc} \bar{\Psi}_0 \Psi_0 + \mu | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle c_{n',l',m'} \right. \\ &\quad \left. - 8\pi a_{sc} \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \Psi_0 \Psi_0 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \bar{c}_{n',l',m'} \right\} \end{aligned} \quad (4.11a)$$

$$\begin{aligned} \dot{\bar{c}}_{n,l,m} &= \sum_{n',l',m'} \left\{ \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | -\Delta + r^2 + 16\pi a_{sc} \bar{\Psi}_0 \Psi_0 - \mu | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \bar{c}_{n',l',m'} \right. \\ &\quad \left. + 8\pi a_{sc} \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \bar{\Psi}_0 \bar{\Psi}_0 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle c_{n',l',m'} \right\} . \end{aligned} \quad (4.11b)$$

Die in den Differentialgleichungen auftretenden Integrale können vereinfacht werden (Anhang B). Dann sind die $\dot{c}_{n,l,m}$ und $\dot{\bar{c}}_{n,l,m}$ nicht mehr von m abhängig und sie lassen sich nach l separieren.

Selbsteinschluss

Mit dem Hamiltonoperator des selbsteinschließenden Kondensats

$$H = -\Delta + 8\pi a_{\text{sc}} |\Psi|^2 - 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{|\Psi(r')|}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \mu$$

haben die BdG-Gleichungen (4.8) die Form

$$\begin{aligned} \dot{c}_{n,l,m} = \sum_{n',l',m'} \left\{ \left(\langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \Delta - 16\pi a_{\text{sc}} \bar{\Psi}_0 \Psi_0 + 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\bar{\Psi}_0(r') \Psi_0(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \mu | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \right. \right. \\ + \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\bar{\Psi}_0(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} | \Psi_0 \rangle \Big) c_{n',l',m'} \\ + \left(-8\pi a_{\text{sc}} \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \Psi_0 \Psi_0 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \right. \\ \left. \left. + \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\Psi_0(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} | \Psi_0 \rangle \right) \bar{c}_{n',l',m'} \right\}, \end{aligned} \quad (4.12a)$$

$$\begin{aligned} \dot{\bar{c}}_{n,l,m} = \sum_{n',l',m'} \left\{ \left(\langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | -\Delta + 16\pi a_{\text{sc}} \bar{\Psi}_0 \Psi_0 - 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\bar{\Psi}_0(r') \Psi_0(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \mu | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \right. \right. \\ - \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\Psi_0(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} | \bar{\Psi}_0 \rangle \Big) \bar{c}_{n',l',m'} \\ + \left(8\pi a_{\text{sc}} \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \bar{\Psi}_0 \bar{\Psi}_0 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \right. \\ \left. \left. - \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{\bar{\Psi}_0(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} | \bar{\Psi}_0 \rangle \right) c_{n',l',m'} \right\}, \end{aligned} \quad (4.12b)$$

wobei die Terme der langreichweitigen Wechselwirkung zunächst umgeformt werden müssen, bevor sich die Integrale lösen lassen.

Der Potentialterm für die langreichweitige Wechselwirkung wird zunächst unter Benutzung der Fourier-Transformation

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{2\pi^2} \int d^3 k \frac{1}{k^2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}$$

und der Entwicklung einer ebenen Welle in Kugelwellen

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l,m} i^l j_l(kr) Y_{l,m}^*(\mathbf{r}_0) Y_{l,m}(\mathbf{k}_0)$$

mit den sphärischen Bessel-Funktionen j_l und zwei zunächst beliebigen Wellenfunktionen Ψ_1 und Ψ_2 umgeschrieben als

$$\begin{aligned} & 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{\Psi_1 \Psi_2}{|r - r'|} \\ &= 16 \int d^3\mathbf{r}' \Psi_1 \Psi_2 \int d^3\mathbf{k} \frac{1}{k^2} \sum_{l,m} i^l j_l(kr) Y_{l,m}^*(\theta_r, \phi_r) Y_{l,m}(\theta_k, \phi_k) \\ & \quad \times \sum_{l',m'} i^{l'} j_{l'}(kr') Y_{l',m'}(\theta_{r'}, \phi_{r'}) Y_{l',m'}(\theta_k, \phi_k) \\ &= 16 \int d^3\mathbf{r}' \Psi_1 \Psi_2 \int_0^\infty dk \sum_{l,m} (-1)^l j_l(kr) j_l(kr') Y_{l,m}^*(\theta_r, \phi_r) Y_{l,m}(\theta_{r'}, \phi_{r'}) . \end{aligned}$$

Für $\Psi_1 = \bar{\Psi}_0$ und $\Psi_2 = \Psi_0$ sind die beiden Funktionen nur noch von r' abhängig und die Winkelintegration liefert

$$\begin{aligned} & 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{\bar{\Psi}_0 \Psi_0}{|r - r'|} \\ &= 16 \int_0^\infty dk j_0(kr) \int_0^\infty dr' r'^2 \bar{\Psi}_0 \Psi_0 j_0(kr') . \end{aligned} \quad (4.13)$$

Der Term mit $\Psi_1 = \bar{\Psi}_0$ und $\Psi_2 = \delta\Psi$ lässt sich nicht so weit vereinfachen und ist mit (4.6)

$$\begin{aligned} & 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{\bar{\Psi}_0 \delta\Psi}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ &= 16 \sum_{n',l',m'} c_{n',l',m'} (-1)^{l'} Y_{l',m'}(\theta_r, \phi_r) \int_0^\infty dk j_{l'}(kr) \int_0^\infty dr' r'^2 \bar{\Psi}_0 \Phi_{n',l',m'} j_{l'}(kr') . \end{aligned} \quad (4.14)$$

Damit können auch die Integrale der langreichweitigen Wechselwirkung behandelt werden (Anhang B). Wie vorher sind $\dot{c}_{n,l,m}$ und $\dot{\bar{c}}_{n,l,m}$ unabhängig von m und lassen sich nach l separieren.

Die Basisentwicklung der BdG Gleichungen liefert Bestimmungsgleichungen für Fluktuationen mit beliebigem Drehimpuls l , wobei die Anzahl der Eigenwerte, die berechnet werden können, von der Anzahl der mitgenommenen Basisfunktionen abhängt. In dieser Basis ist es möglich, beliebige Fluktuationen zu berechnen und die Eigenwerte zu bestimmen.

4.3 Stabilitätseigenwerte

Die BdG-Gleichungen (4.4) sind Differentialgleichungen für die Dynamik kleiner Störungen $\delta\Psi$ der Wellenfunktion einer gegebenen Lösung Ψ_0 und liefern damit Information über deren Stabilität.

Generell gibt es zwei Möglichkeiten: Führt eine kleine Veränderung der Wellenfunktion nur zu einer Oszillation um den ursprünglichen Zustand, so ist dieser stabil, wenn dagegen die Veränderung dazu führt, dass die Wellenfunktion nach einer gewissen Zeit sich deutlich vom ursprünglichen Zustand unterscheidet, so ist dieser instabil.

Die Klassifikation der Fluktuationen findet über Stabilitätseigenwerte λ statt. Dazu wird die Zeitentwicklung der $(\delta\Psi, \delta\bar{\Psi})$ betrachtet

$$\begin{pmatrix} \delta\Psi(\tau_0 + \tau) \\ \delta\bar{\Psi}(\tau_0 + \tau) \end{pmatrix} = A(\tau_0, \tau) \begin{pmatrix} \delta\Psi(\tau_0) \\ \delta\bar{\Psi}(\tau_0) \end{pmatrix}$$

mit der Fundamentalmatrix A der BdG-Gleichungen B (siehe Abs. 4.2.2, Gl. (4.5))

$$A(\tau_0, \tau) = \int_{\tau_0}^{\tau_0 + \tau} d\tilde{\tau} BA(\tau_0, \tilde{\tau}) \quad , \quad A(\tau_0, \tau_0) = \mathbb{1} .$$

Durch Diagonalisieren von A erhält man Eigenwerte $\lambda(\tau_0, \tau)$

$$\det(A(\tau_0, \tau) - \lambda\mathbb{1}) = 0 ,$$

diese sind aber noch von dem gewählten Zeitintervall abhängig.

Ist Ψ_0 zeitunabhängig, erhält man die Eigenwerte $\lambda(\tau_0, \tau)$ weniger aufwendig aus den Eigenwerten ω der BdG-Gleichungen

$$\det(B - \omega\mathbb{1}) = 0 \tag{4.15}$$

als exponentielle Zeitentwicklung

$$\lambda(\tau_0, \tau) = e^{\omega\tau} .$$

In diesem Fall sind die λ dann nicht mehr von τ_0 abhängig.

Gebundene, nicht-stationäre Lösungen Ψ_0 entsprechen im Rahmen der semiklassischen Behandlung geschlossenen Bahnen im Parameterraum. Ihre Stabilität wird in erster Ordnung durch die Eigenwerte der Monodromiematrix M gegeben, welche gleich der Fundamentalmatrix $A(\tau_0, \beta)$ für die Zeit β einer Bahnperiode ist

$$M = A(\tau_0, \beta) .$$

Es ergeben sich $\lambda(\tau_0, \beta)$ mit

$$\det(M - \lambda \mathbb{1}) = 0 . \quad (4.16)$$

Da die BdG-Gleichungen nur lineare Effekte berücksichtigen, sind $A(\tau_0, \beta)$ und ihre Eigenwerte λ nun unabhängig vom Startzeitpunkt τ_0 .

4.3.1 Angepasstes Berechnungsverfahren

Das Eigenwertproblem wird nun umformuliert, um zwei Schwierigkeiten zu begegnen, die bei der numerischen Berechnung der Eigenwerte auftreten. Einerseits ist das Gleichungssystem für die Fluktuationen numerisch instabil, das heißt kleine numerische Abweichungen vergrößern sich schon in kurzen Integrationszeiten und machen die Ergebnisse unbrauchbar. Andererseits unterscheiden sich die Eigenwerte nach der Zeit einer Periode um mehrere Größenordnungen, vor allem bei längeren Bahnen, wodurch beim Diagonalisieren der Monodromiematrix die kleinen Eigenwerte nicht mehr innerhalb der *double precision* Rechengenauigkeit liegen und im numerischen Rauschen untergehen.

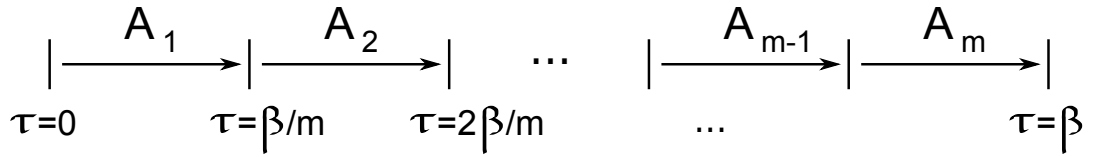


Abbildung 4.1: Segmentierung der Bahn

Die Bahn wird in m Segmente unterteilt und anstatt der Monodromiematrix M die Fundamentalmatrizen A_i der einzelnen Segmente berechnet

$$A_i = A(\tau_{i-1}, \tau_i) = \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} d\tilde{\tau} BA(\tau_{i-1}, \tilde{\tau}) , \quad i = 1, \dots, m ,$$

wobei $\tau_i = i \frac{\beta}{m}$ die Zeit nach dem i -ten Segment ist.

Diese werden zum Aufbau einer Blockmatrix verwendet, um die Fluktuationswellenfunktionen an den Segmentgrenzen jeweils ein Segment weiter zu verschieben.

$$\begin{pmatrix} 0 & & & & & & A_m \\ A_1 & \ddots & & & & & \\ & A_2 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & A_{m-1} & & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\delta\Psi(\tau_0), \delta\bar{\Psi}(\tau_0)) \\ \vdots \\ (\delta\Psi(\tau_{m-1}), \delta\bar{\Psi}(\tau_{m-1})) \end{pmatrix} = \tilde{\lambda} \begin{pmatrix} (\delta\Psi(\tau_0), \delta\bar{\Psi}(\tau_0)) \\ \vdots \\ (\delta\Psi(\tau_{m-1}), \delta\bar{\Psi}(\tau_{m-1})) \end{pmatrix} .$$

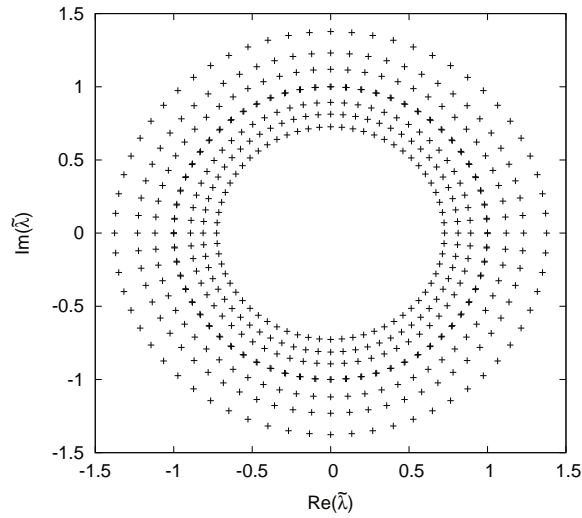


Abbildung 4.2: Alle Eigenwerte $\tilde{\lambda}$ einer Basis aus vier Laguerrepolynomen für eine Bahn bei einer Streulänge $a_{sc} = -0.95$ mit $m = 64$ Segmenten. Es ergeben sich Kreise um den Ursprung mit dem Betrag der acht Eigenwertpaare als Radius, wobei ein doppelter Eigenwert $\lambda^{\frac{1}{m}} = 1$ auftritt.

Diagonalisieren dieser Matrix liefert m -fach komplex entartete Eigenwerte $\tilde{\lambda}$ mit

$$|\tilde{\lambda}| = \lambda^{\frac{1}{m}},$$

wobei λ die Eigenwerte der Monodromiematrix sind (Abb. 4.2).

Damit werden sowohl lange Integrationszeiten, als auch große Eigenwerte, die bei einer Integration über den Zeitraum einer periodischen Bahn entstehen, vermieden.

5 Ergebnisse

Die Berechnung der Bouncetrajektorie liefert die Gaußparameter A, γ , außerdem die Wirkung S der Bahn und die Anlaufgeschwindigkeit v_0 , welche in (3.3) eingehen. Mit den Gaußparametern können auch die linearisierten Bewegungsgleichungen oder die Bewegungsgleichungen für die Koeffizienten der Basisentwicklung gelöst werden und damit die Stabilitätseigenwerte berechnet werden.

Weiterhin gehen die Grundzustandseigenwerte in den Vorfaktor ein, wobei der erste schon in Gl. (3.3) eingeht. Für das Spektrum der Stabilitätseigenwerte stationärer Zustände existieren sowohl vollnumerische Berechnungen der Wellenfunktion über die Bogoliubov-de Gennes Gleichungen [23], als auch Variationsrechnungen für eine Superposition von Gaußfunktionen [23, 30].

5.1 Das Eigenwertspektrum der stationären Zustände

Hier werden die Eigenwerte in der Laguerrebasis berechnet und mit den Ergebnissen der beiden anderen Methoden verglichen, um das Konvergenzverhalten in dieser Basis zu prüfen.

Der Vergleich der Methoden für stationäre Zustände dient auch zur Abschätzung, wie gut sich diese für periodische Bahnen einsetzen lassen. Es stellt sich heraus, dass eine schnelle Konvergenz der Fixpunkteigenwerte gegen die numerischen Werte Voraussetzung dafür ist, sinnvolle Eigenwerte für die Bouncelösung zu erhalten. Mit Kenntnis der Wellenfunktion der stationären Lösungen erhält man die Stabilitätseigenwerte ω über die entsprechenden Differentialgleichungen für die Fluktuationen durch Diagonalisieren der BdG-Gleichungen (Gl. (4.15)).

Diese treten aufgrund der Symmetrie von Ψ und $\bar{\Psi}$ in Paaren $\omega_{2i} = -\omega_{2i-1}$ auf, wobei $i = 1, \dots, n$ mit der Basisgröße $2n$ ist. Das heißt, für n_g Gaußfunktionen erhält man $2n_g$ Eigenwertpaare und für eine Entwicklung der $\delta\Psi$ und $\delta\bar{\Psi}$ mit jeweils n_l Laguerrepolynomen erhält man n_l Eigenwertpaare. Daraus folgt, dass die Stabilitätseigenwerte λ reziproke Paare bilden.

Abb. 5.1 zeigt die Eigenwerte für beide Kondensattypen aus vollnumerischen Lösungen der BdG-Gleichungen, die hier auch weiterhin als Referenzwerte genutzt werden. Die Eigenwerte des Grundzustands sind alle reell, mit einem Eigenwert $\omega = 0$. Auch für den angeregten Zustand gibt es einen Eigenwert $\omega = 0$, des Weiteren einen rein imaginären Eigenwert, der Rest ist wieder reell.

In Realzeit sind die reellen Eigenwerte stabil und die imaginären instabil. Die Instabilität am angeregten Zustand kann man sich schon durch das Potentialbild im Ansatz einer Gaußfunktion veranschaulichen, jener verhält sich also als Sattelpunkt.

In Imaginärzeit werden die reellen Eigenwerte instabil und die imaginären stabil. Die stabile Richtung am angeregten Zustand führt zu den periodischen Tunnelbahnen, aber die restlichen Eigenwerte sind instabil und machen damit die Imaginärzeitrechnungen schwierig.

5.1.1 Die Eigenwerte der linearisierten Bewegungsgleichungen

Es werden die Eigenwerte ω der stationären Zustände in der Gaußbasis mit den numerisch exakten Werten für das selbsteinschließende und das Kondensat in einer externen Falle bei einem festen Wert des Streuparameters a_{sc} verglichen (Abb. 5.2). Mit zunehmender Anzahl Gaußfunktionen nähern sich die Eigenwerte denjenigen aus den vollnumerischen Rechnungen an, wobei die niedrigsten Eigenwerte am schnellsten konvergieren.

Beim selbsteinschließenden Kondensat erhält man zwar den ersten Eigenwert schon bei drei Gaußfunktionen relativ genau, für den zweiten reichen sechs Gaußfunktionen gerade aus. Die höheren Eigenwerte sind nicht konvergiert. Beim Kondensat in einer externen Falle ist mit sechs Gaußfunktionen auch der dritte Eigenwert schon konvergiert.

Die Eigenwerte der Jacobi-Matrix konvergieren mit steigender Anzahl Gaußfunktionen n_g , aber die zusätzlich dazukommenden Eigenwerte sind sehr hoch und schlecht konvergiert. Daher sind die niedrigsten Eigenwerte sehr gut konvergiert, aber es treten weitere schlecht konvergierte Eigenwerte auf.

5.1.2 Die Eigenwerte in der Laguerrebasis

Bei der Basisentwicklung in Laguerrepolyomen kann die Basisgröße unabhängig von der Anzahl Gaußfunktionen gewählt werden, die zur Konstruktion der Wellenfunktion Ψ_0 genutzt werden. Man erhält n_1 Eigenwertpaare, wobei n_1 die Größe der abgeschnit-

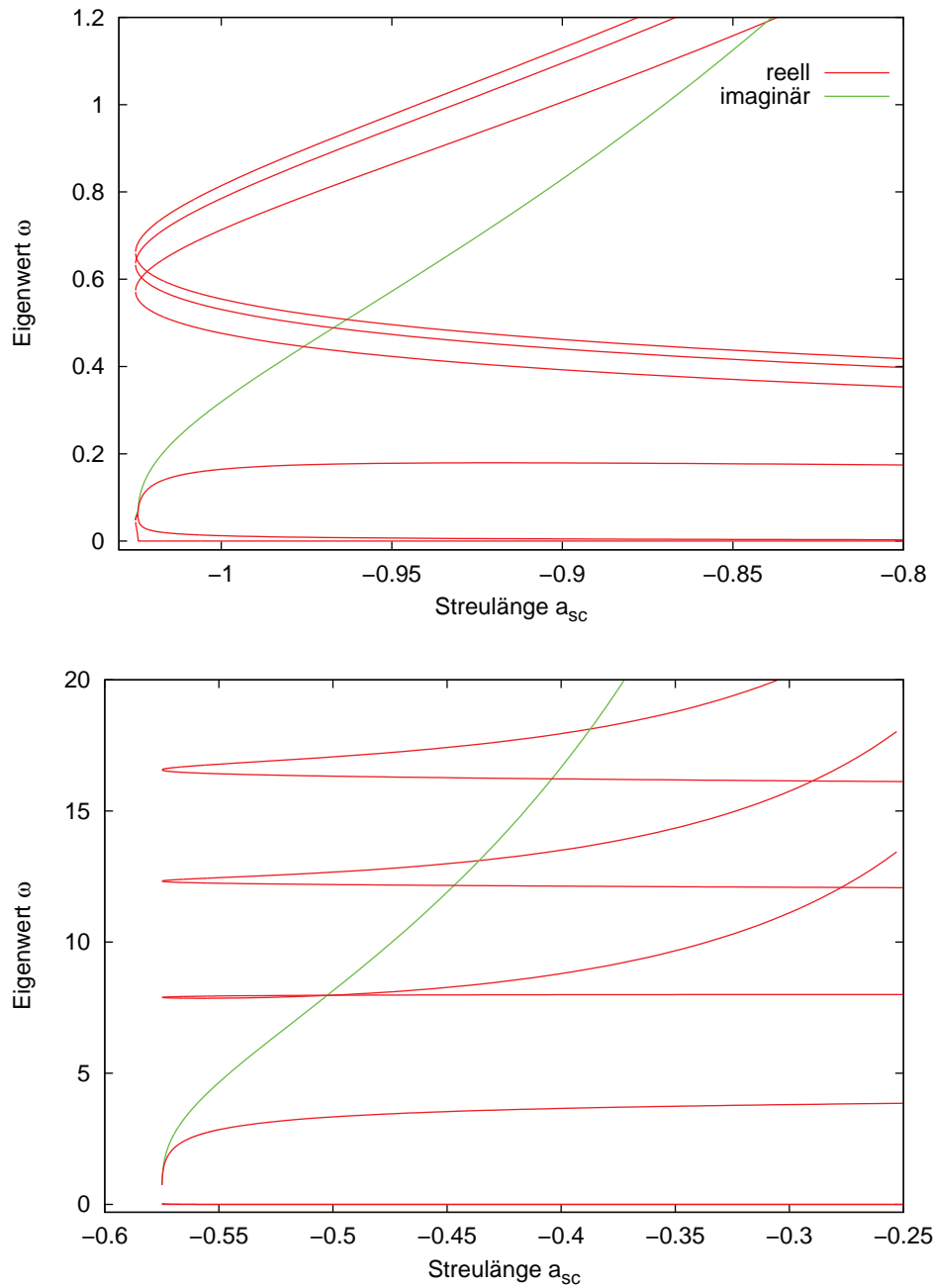


Abbildung 5.1: Die ersten fünf Eigenwerte ω für den Grundzustand und den angeregten Zustand für Fluktuationen mit Drehimpuls $l = 0$ eines Kondensats mit $1/r$ -Wechselwirkung (*oben*) und in einer Falle (*unten*) aufgetragen über der Streulänge a_{sc} . Für die Bifurkation bei der kritischen Streulänge fallen die Eigenwerte zusammen. (Rechnungen aus [23])

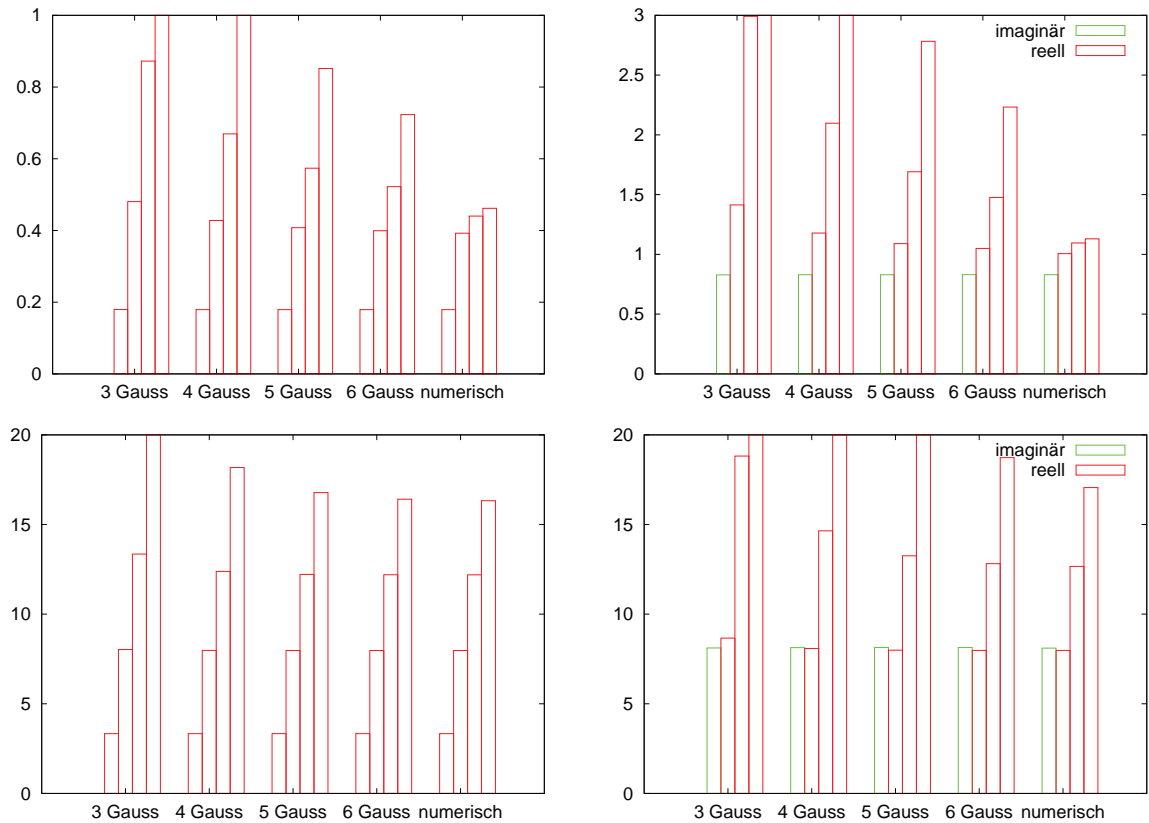


Abbildung 5.2: Die ersten vier nicht-trivialen Eigenwerte zum Drehimpuls $l = 0$ des Grundzustands (*links*) und des angeregten Zustands (*rechts*) für den Selbsteinschluss (*oben*) und eine externe Falle (*unten*) Kondensat in einer Gaußbasis aus $n_g = 3, \dots, 6$ Gaußfunktionen im Vergleich mit den numerisch exakten Werten. Der Streuparameter ist für den Selbsteinschluss $a_{sc} = -0.9$ und für die externe Falle $a_{sc} = -0.5$. (Rechnungen aus [23])

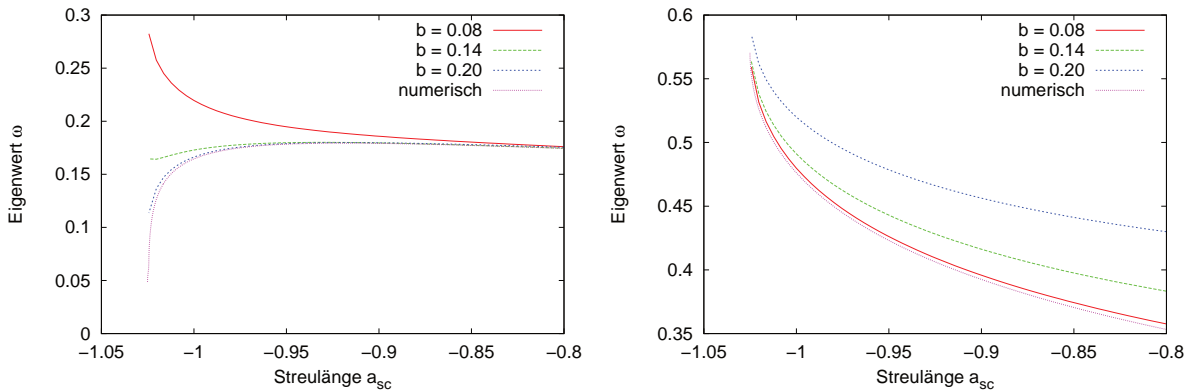


Abbildung 5.3: Der erste (*links*) und der zweite (*rechts*) Eigenwert ω des Grundzustands. Die Kurven zeigen Rechnungen mit $n_1 = 10$ Laguerrepolynomen für unterschiedliche Werte des Konvergenzparameters b und die vollnumerischen Vergleichswerte.

tenen Basis $(\Phi_1, \dots, \Phi_{n_1})$ ist. Damit ist die Basis wesentlich flexibler, da auch ein freier Parameter b dem Verhalten der Fluktuationen angepasst werden kann.

Selbsteinschluss

Die Rechnungen zeigen, dass sich die Konvergenz durch Mitnehmen weiterer Laguerrepolynome nur langsam verbessert. Durch eine gute Wahl des Konvergenzparameters b für die radialen Basisfunktionen in Gl. (4.9) erreicht man aber schon sehr schnell eine gute Übereinstimmung mit den numerischen Werten. Der optimale Wert von b unterscheidet sich jedoch für verschiedene Eigenwerte, das heißt, um ein gutes Spektrum zu bekommen, muss für jeden Eigenwert eine eigene Rechnung mit entsprechendem b durchgeführt werden.

Abb. 5.3 zeigt die niedrigsten beiden Eigenwerte für $n_1 = 10$ Laguerrepolynome in Abhängigkeit von b im Vergleich zu den numerisch exakten Werten und damit den starken Einfluss des Konvergenzparameters auf die Eigenwerte.

Abb. 5.4 zeigt die ersten beiden Eigenfunktionen der Fluktuationen. Die Übereinstimmung der in der Laguerrebasis gerechneten Werte mit den numerischen verhält sich ähnlich wie die Übereinstimmung der Eigenwerte.

Sucht man für jeden Eigenwert den optimalen Wert für b , erhält man mit $n_1 = 10$ Laguerrepolynomen schon gute Resultate (Abb. 5.5).

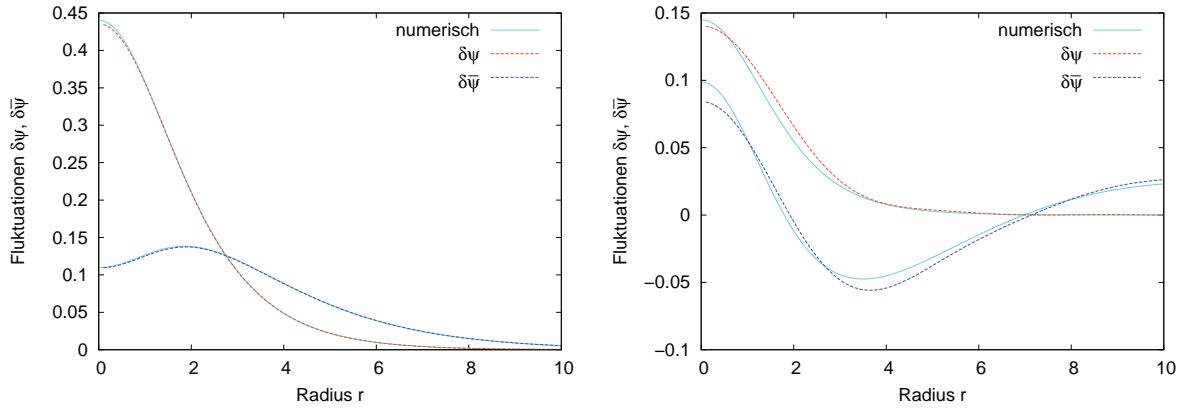


Abbildung 5.4: Die Eigenfunktionen $\delta\Psi, \delta\bar{\Psi}$ zum ersten (*links*) und zum zweiten (*rechts*) Eigenwert für $n_l = 10$ Laguerrepolynome bei einer Streulänge $a_{sc} = -0.95$. Für den ersten Eigenwert wurde $b = 0.2$, für den zweiten $b = 0.08$ gewählt, entsprechend der besten Kurve in Abb. 5.3.

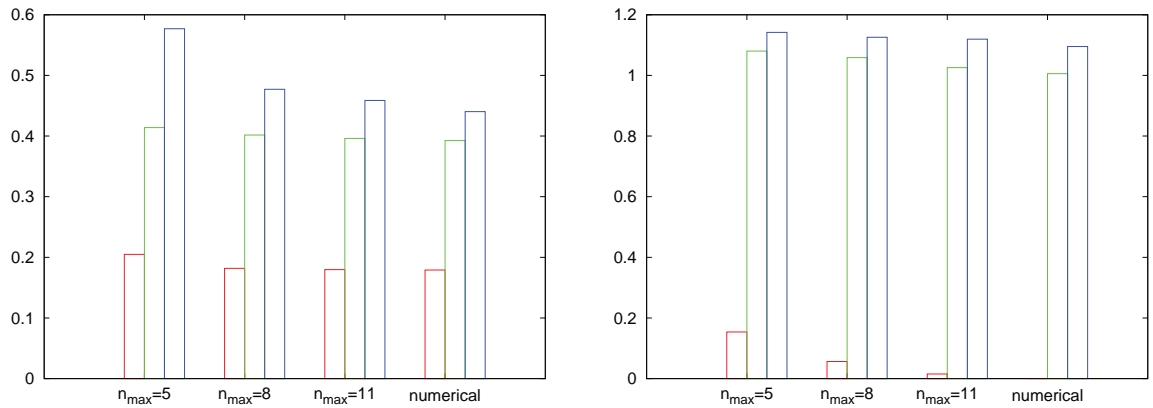


Abbildung 5.5: Die ersten drei nicht verschwindenden Eigenwerte zum Drehimpuls $l = 0$ für den Grundzustand (*links*) und den angeregten stationären Zustand (*rechts*). Rechnungen unter Berücksichtigung von $n_l = 5, 8, 11$ Laguerrepolynomen werden verglichen mit den vollnumerischen Werten für die Streulänge $a_{sc} = -0.9$. Es wurden nur die Realteile aufgetragen, der gegen Null strebende Eigenwert ist der rein imaginäre.

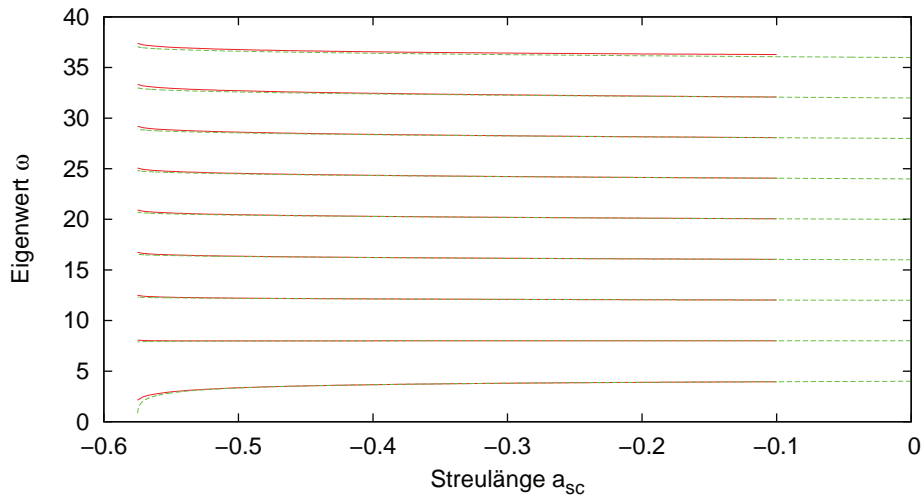


Abbildung 5.6: Eigenwertspektrum am Grundzustand für $n_1 = 10$ Laguerrepolynome mit $b = 1.05$ (rot) im Vergleich mit den numerischen Werten (grün).

Ein direkter Vergleich von Abb. 5.5 und 5.2, zeigt, dass mit der Entwicklung der Fluktuationen in der Basis aus Laguerrepolynomen unter Wahl eines geeigneten Konvergenzparameters b im Gegensatz zur Basis aus Gaußfunktionen sich auch die höheren Eigenwerte gut berechnen lassen.

Das Verhalten der Laguerrebasis ist für dieses Kondensat nicht optimal, da eine starke Abhängigkeit von b herrscht und die Eigenwerte bei Erhöhung von n_1 nur langsam besser werden. Das liegt daran, dass die natürliche Basis für dieses Kondensat e^{-r} ist [31].

Die höheren Eigenwerte können aber deutlich besser bestimmt werden, außerdem lässt die Laguerrebasis beliebige Drehimpulse l zu.

Externe Falle

Für das Kondensat ohne $1/r$ -Wechselwirkung in einer harmonischen Falle lassen sich mit der Basisentwicklung in Laguerrepolynome die Fluktuationen sehr gut berechnen. Die verschiedenen Eigenwerte der Laguerrebasis können mit Festsetzen von $b = 1$ gleichzeitig zu einer guten Übereinstimmung mit den numerischen Werten gebracht werden.

Abb. 5.6 zeigt für $b = 1.05$, dass selbst der höchste Eigenwert noch relativ nahe an die numerischen Rechnungen herankommt. Lediglich für Streulängen in der Nähe der Bifurkation ist die Übereinstimmung nicht so gut.

5.2 Die Stabilitätseigenwerte der periodischen Bahnen

Das Eigenwertspektrum wird für periodische Bahnen berechnet; zunächst für Bahnen, die sich kaum von der stationären Lösung des angeregten Zustands unterscheiden mit einer Periodendauer der Oszillatornäherung und dann für Bahnen mit kleineren Energien.

Da die Periode der Bahn unendlich lang wird, wenn man sich der Bouncetrajektorie annähert, werden die Rechnungen numerisch schwieriger. Ziel ist es, Eigenwerte von energetisch höher liegenden Bahnen, die schon hinreichend gut gegen die Eigenwerte der Bouncetrajektorie konvergiert sind, zu bestimmen.

In Abb. 5.7 sind die zeitliche Entwicklung der Grundzustandseigenwerte $e^{\omega\beta}$ und die Eigenwerte λ der periodischen Bahnen über der Periodenlänge aufgetragen. Bei der Periodenlänge von $\beta \approx 21$ liegt die Bahn ungefähr 10% über der Grundzustandsenergie. Für die Anpassung der Tunnelrate muss das Eigenwertverhältnis für die Stabilität des Grundzustands und des Tunnelprozesses λ_0/λ_p berechnet werden.

Zur besseren Vergleichbarkeit des Eigenwertspektrums werden die Eigenwerte λ_p von der Zeit bereinigt und in ω_p umgewandelt

$$\omega_p = \frac{\ln(\lambda_p)}{\beta}.$$

Für periodische Bahnen erhält man zwei Eigenwertpaare $\lambda_p = 1$ und damit $\omega_p = 0$. Die restlichen Eigenwerte sind rein reell.

5.2.1 Die Eigenwerte der linearisierten Bewegungsgleichungen

Abb. 5.8 zeigt die ersten Eigenwerte des Spektrums für Bahnen mit unterschiedlicher Periodenlänge β . Beim Übergang zu niedrigeren Energien und längeren Bahnen werden die Eigenwerte ω kleiner.

Als Unterschied des Spektrums für drei und vier Gaußfunktionen fallen zunächst wieder die unterschiedlich gut konvergierten Eigenwerte für die stationäre Lösung auf. Es gibt keine vollnumerischen Vergleichswerte für die Eigenwerte der periodischen Lösungen, es ist aber anzunehmen, dass sie höchstens so gut wie die Werte der stationären Lösung bei gleicher Anzahl Gaußfunktionen sind. Diese unterscheiden sich von den Werten der kürzesten Bahnen kaum. Für die Eigenwerte der periodischen Lösungen gilt also genauso, dass erst bei einer ausreichenden Anzahl Gaußfunktionen hinreichend konvergierte Werte resultieren.

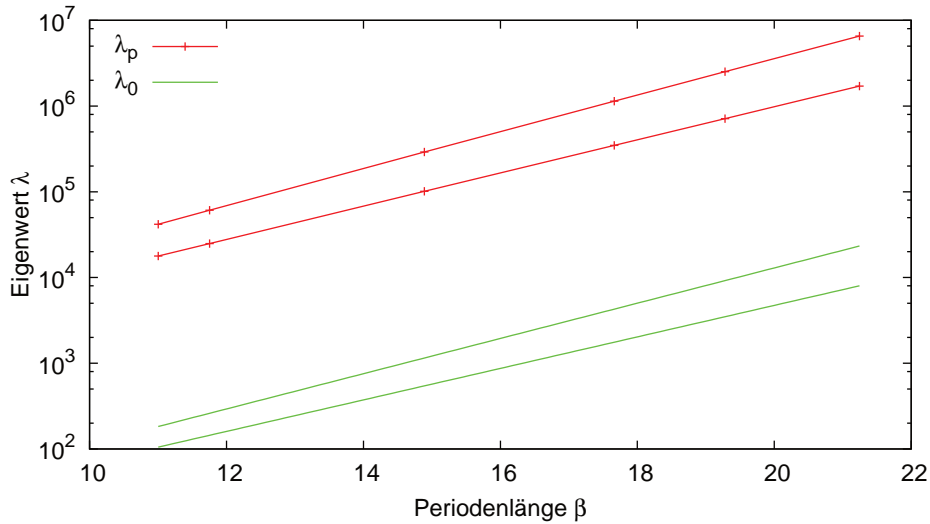


Abbildung 5.7: Zwei Eigenwerte λ_p für periodische Bahnen aufgetragen über der Bahnlänge im Vergleich zu der zeitlichen Entwicklung der korrespondierenden Grundzustandseigenwerte $\lambda_0 = \exp(\omega_0\beta)$.

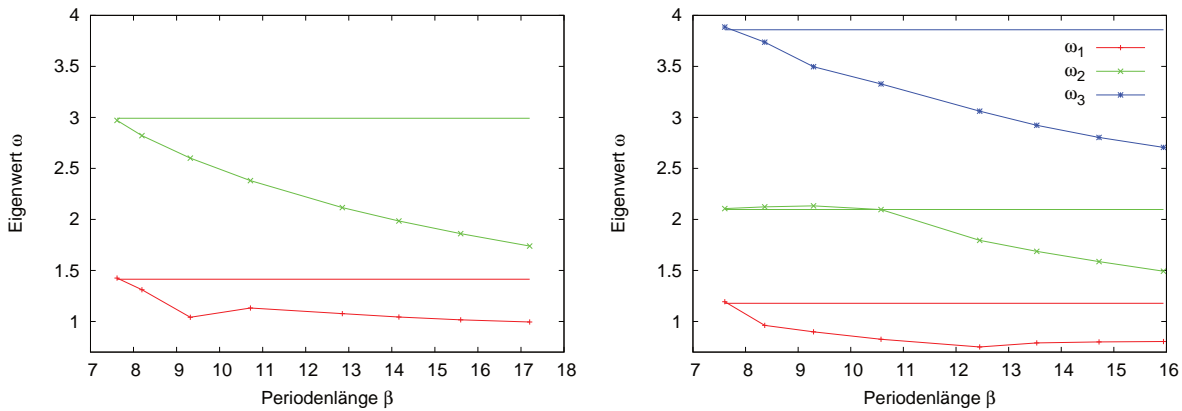


Abbildung 5.8: Die Eigenwerte ω aufgetragen über der Periodendauer β für drei Gaußfunktionen (*links*) und für vier Gaußfunktionen (*rechts*). Die konstanten Werte sind für den stationären angeregten Zustand, für periodische Lösungen werden die Eigenwerte mit zunehmender Periodendauer kleiner.

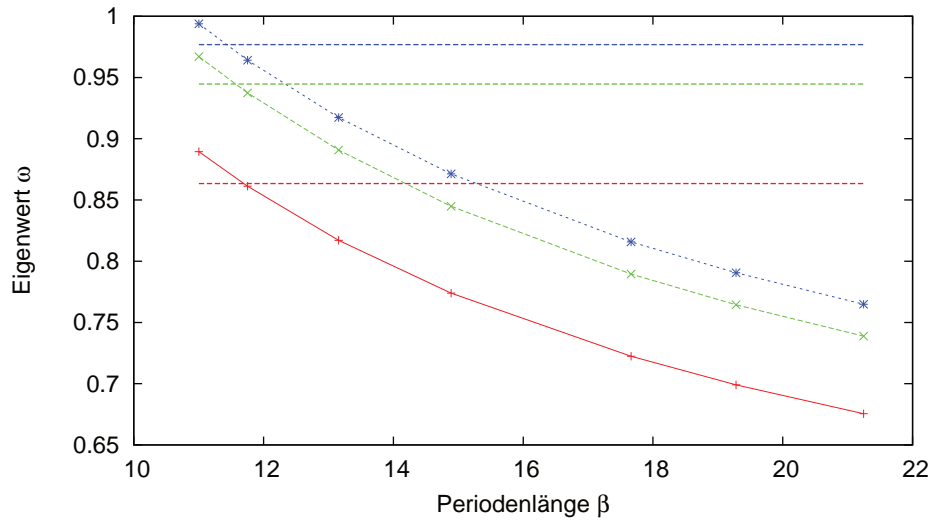


Abbildung 5.9: Die Entwicklung der ersten drei Eigenwerte des Bogoliubov-Spektrums für unterschiedliche Bahnen bei einer Streulänge $a_{sc} = -0.95$. Die ersten Werte sind für Bahnen, die sich kaum vom stationären angeregten Zustand unterscheiden. Zum Vergleich die entsprechenden Eigenwerte am stationären Zustand aus numerischen Rechnungen (gestrichelt).

Bis zu der Periodendauer β , die noch berechnet werden konnte, ist auch noch nicht abzusehen, gegen welche Werte die Eigenwerte laufen würden, wenn man den Übergang zur Bouncetrajektorie $\beta \rightarrow \infty$ macht. Des Weiteren sieht man, dass für drei und vier Gaußfunktionen die Eigenwerte für längere Bahnperioden nicht mehr monoton fallen, daher sind die Ergebnisse nicht vertrauenswürdig.

5.2.2 Die Eigenwerte in der Laguerrebasis

Die Rechnungen mit der Basisentwicklung der BdG-Gleichungen bestätigen den prinzipiellen Verlauf der Eigenwerte, die beim Übergang zu größeren β kleiner werden (Abb. 5.9).

Mit zehn Laguerrepoly-nomen und angepasstem Konvergenzparameter ist hier die Übereinstimmung der ersten drei Eigenwerte am stationären angeregten Zustand schon recht gut. Aber auch hier zeigt sich, dass bei den Periodenlängen, die noch berechnet werden können, noch nicht absehbar ist, gegen welche Werte die Eigenwerte beim Übergang zur Bouncetrajektorie $\beta \rightarrow \infty$ laufen.

Abb. 5.10 zeigt den ersten Eigenwert des Bogoliubov-Spektrums noch einmal im Vergleich mit dem der Jacobi-Matrix bei der gleichen Streulänge für fünf Gaußfunktionen.

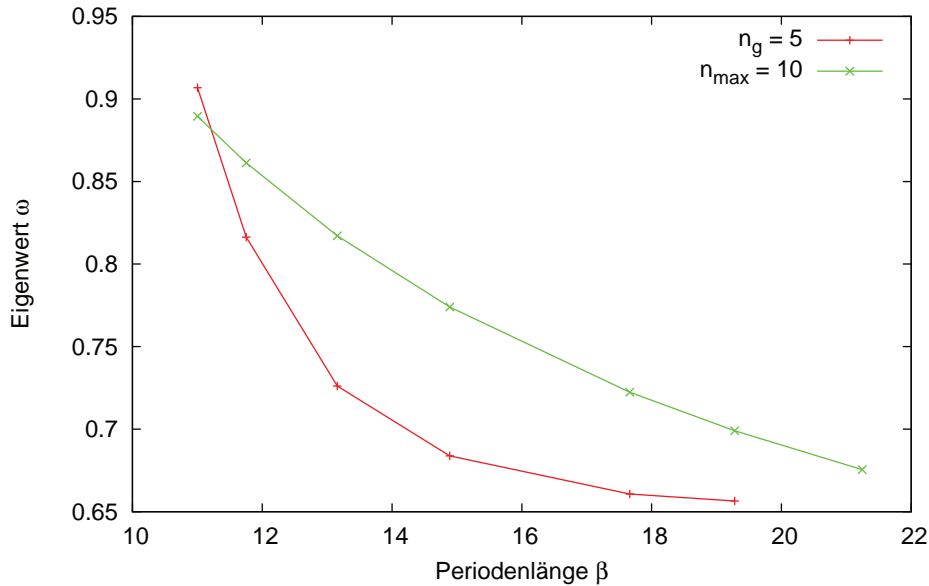


Abbildung 5.10: Die Entwicklung des ersten Eigenwerts der linearisierten Bewegungsgleichungen für $n_g = 5$ Gaußfunktionen im Vergleich mit der Entwicklung des ersten Eigenwerts in der Laguerrebasis mit $n_l = 10$ Laguerrepoly-nomen bei einer Streulänge $a_{sc} = -0.95$.

Es zeigt sich, dass die Eigenwerte in der Laguerrebasis besser konvergiert und verlässlicher sind als in der Gaußbasis, außerdem steigen die höchsten Eigenwerte nicht so schnell an und die Rechnungen sind numerisch besser unter Kontrolle.

5.3 Der Fluktationsvorfaktor für das selbsteinschließende Kondensat

Die Fluktationsdeterminante, die sich für den Ansatz einer Gaußfunktion ergibt, wird angepasst mit dem Verhältnis ζ_i der Stabilitätseigenwerte des Grundzustands und des Tunnelprozesses (4.1), um die tatsächliche Stabilität des Grundzustands zu berücksichtigen

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^k \zeta_i = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^k \sqrt{\frac{\lambda_0^{(i)}}{\lambda_p^{(i)}(\beta)}}.$$

k ist dabei nicht nur durch die Basisgröße beschränkt, da alle nicht konvergierten Eigenwerte nicht in die Rechnung miteinbezogen werden sollten.

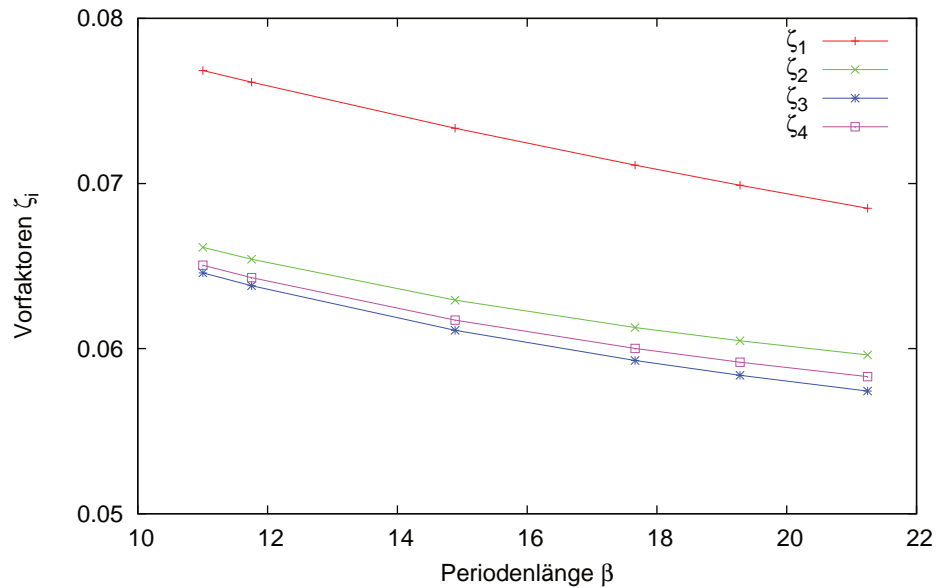


Abbildung 5.11: Die Verhältnisse ζ_i der vier niedrigsten Eigenwerte $i = 1, \dots, 4$ für Bahnen mit unterschiedlicher Periodendauer β für den Wert $a_{sc} = -0.95$ des Streuparameters.

In Abb. 5.11 sind die Verhältnisse ζ_i aufgetragen über der Periodenlänge der Bahn, aus der sich die Eigenwerte ergeben haben, bis zu $\beta \approx 21$. Es wird klar, dass sich bis zu dieser Periodenlänge die ζ_i noch stark ändern, d.h. es ist zu erwarten, dass sich beim weiteren Fortschreiten in Richtung Bouncetrajektorie andere Werte ergeben.

Des Weiteren sind alle vier berechneten Vorfaktoren $\zeta_i \ll 1$ und tragen damit zur Verringerung der Tunnelrate bei. Auch hier steht zu erwarten, dass noch einige Verhältnisse ζ_i für höhere Eigenwerte einen ähnlichen Beitrag leisten, also nicht vernachlässigt werden können.

Mit den Vorfaktoren folgt die Tunnelrate Γ_k , wobei k die Anzahl der Eigenwertverhältnisse angibt, die berücksichtigt werden

$$\Gamma_k = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^k \zeta_i \sqrt{\frac{Nm\omega v_0^2}{\pi\hbar}} e^{-(S[q_b] - S[q_0])N/\hbar} .$$

Extrapolation der Vorfaktoren für große Perioden

Die Tunnelrate (Abb. 5.12) wird durch die Vorfaktoren signifikant erniedrigt. Dabei wurden die letzten Werte aus Abb. 5.11 zur Berechnung verwendet. Hier wird ersichtlich,

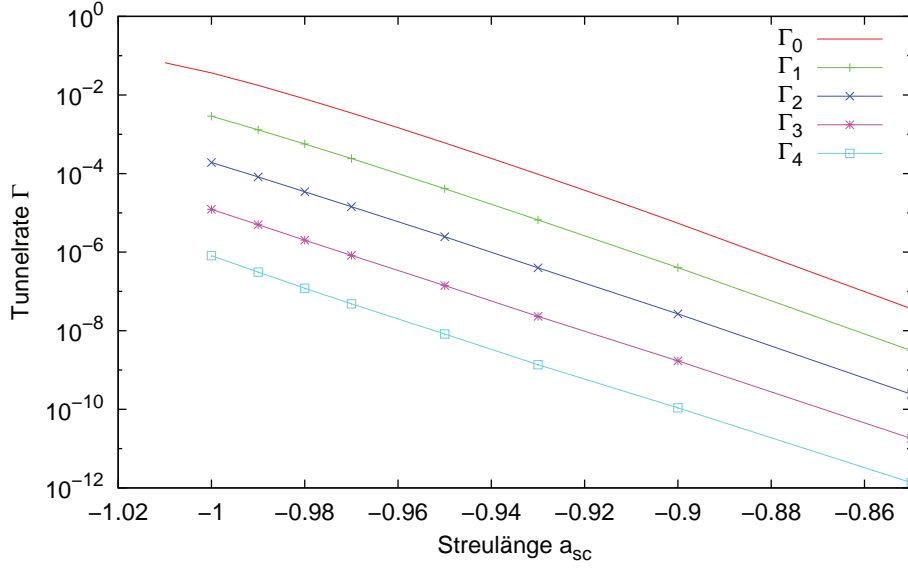


Abbildung 5.12: Die modifizierte Tunnelrate Γ_k für $N = 30$ Teilchen aufgetragen über der Streulänge a_{sc} unter Berücksichtigung der ersten vier Eigenwerte. Zur Anpassung wurden die Werte der Vorfaktoren für die längsten berechneten Bahnen verwendet ($\beta \approx 21$).

dass wegen der beiden oben genannten Gründe, nämlich der Konvergenz der ζ_i für $\beta \rightarrow \infty$ und vor allem der kleinen Anzahl k der ζ_i , noch keine Aussage über das Verhalten des Tunneleffekts getroffen werden kann.

Um den Grenzwert der ζ_i für $\beta \rightarrow \infty$ besser abschätzen zu können, werden die Vorfaktoren über dem Kehrwert $1/\beta$ der Periodendauer aufgetragen und mit Hilfe einer an die Werte angepassten Funktion der Wert $1/\beta \rightarrow 0$ ermittelt.

Es wird eine Fitfunktion

$$f(x) = e^{c_1 x^2 + c_2 x + c_3}$$

mit $x = \frac{1}{\beta}$ angesetzt und mit den Konstanten c_1, c_2, c_3 der Verlauf von $f(x)$ an die Werte der Vorfaktoren angepasst.

Abb. 5.13 zeigt die Extrapolation der Werte am Beispiel des ersten und des zweiten Vorfaktors. Die quantitative Änderung der Vorfaktoren durch die Extrapolation ist also nicht groß (Abb. 5.14), es zeigt sich aber, dass für eine genaue Bestimmung der Tunnelrate weitere Rechnungen für größere Periodenlängen notwendig sind.

Dennoch ergibt sich für die Tunnelrate ein sehr ähnliches Bild, ersichtlich in Abb. 5.15, in der die Γ_k unter Benutzung der zu $\beta \rightarrow \infty$ extrapolierten ζ_i berechnet wurden. Qualitativ

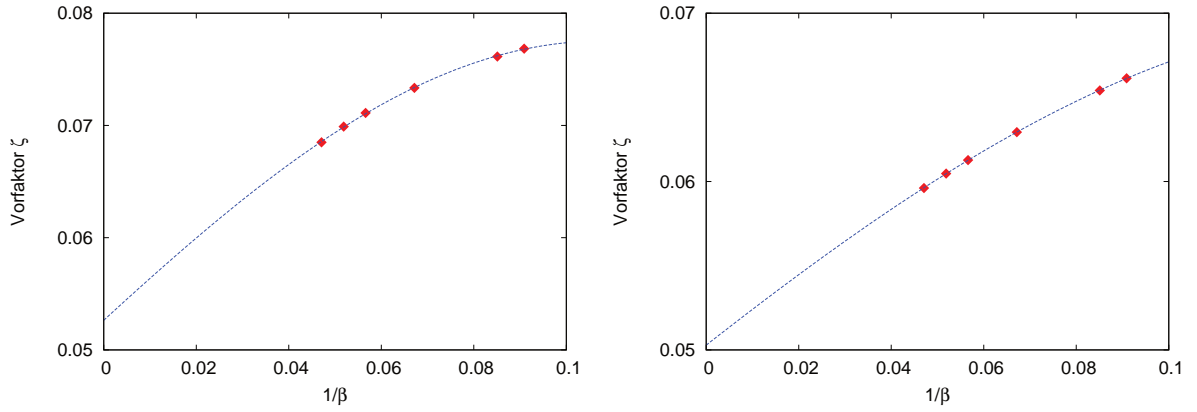


Abbildung 5.13: Der Verlauf der Vorfaktoren ζ_1 (links) und ζ_2 (rechts) für verschiedene Bahnen mit Periodenlänge β jeweils mit der angepassten Fitfunktion $f(x)$ für die Streulänge $a_{sc} = -0.95$.

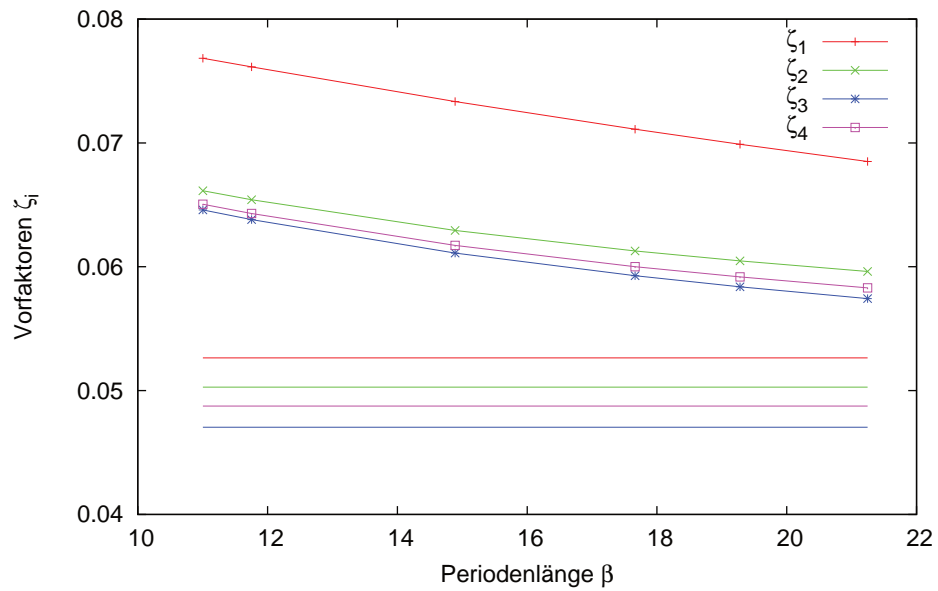


Abbildung 5.14: Vergleich der extrapolierten Vorfaktoren ζ_i und der berechneten aus Abb. 5.11 bei $a_{sc} = -0.95$.

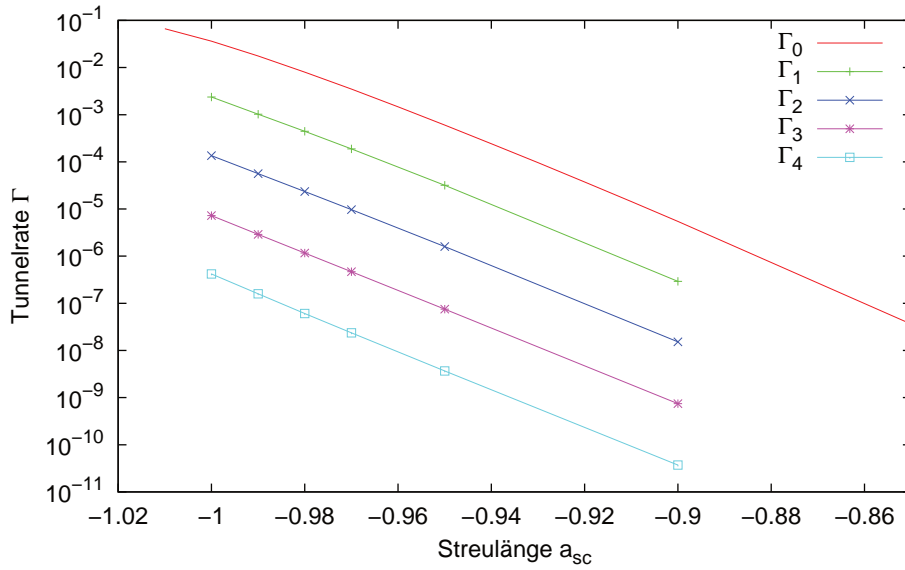


Abbildung 5.15: Angepasste Tunnelrate Γ_k aufgetragen über der Streulänge a_{sc} unter Benutzung der extrapolierten Werte für die Vorfaktoren.

lässt sich feststellen, dass die Tunnelrate weiterhin stark gesenkt wird.

Extrapolation für höhere Eigenwerte

Einen weiteren, möglicherweise größeren Einfluß auf die Tunnelrate könnten die höheren, bisher unberücksichtigten Eigenwerte und die dazugehörigen Verhältnisse ζ_i haben.

Es wird nun versucht, die Werte der ζ_i für $i \rightarrow \infty$ abzuschätzen. Dazu werden die vier berechneten Vorfaktoren ζ_i über $\frac{1}{i}$ aufgetragen und eine lineare Extrapolation zu $\frac{1}{i} \rightarrow 0$ gemacht (Abb. 5.16).

Falls obige Extrapolation das Verhalten der ζ_i für $i \rightarrow \infty$ qualitativ richtig beschreibt, ist das Produkt der Vorfaktoren

$$\prod_{i=1}^k \zeta_i \stackrel{(k \rightarrow \infty)}{=} 0,$$

was heißt, dass der Grundzustand stabil ist und kein Tunneln möglich ist.

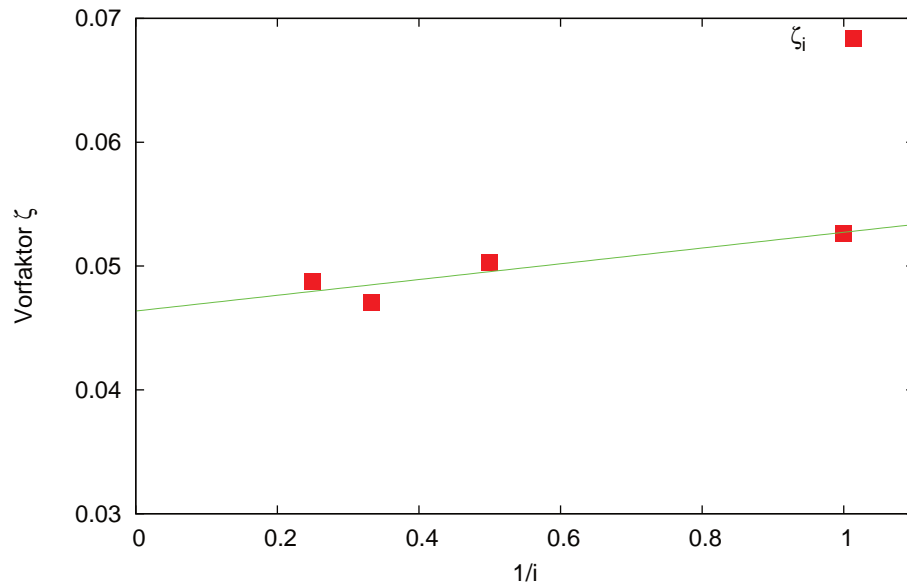


Abbildung 5.16: Die ersten $i = 4$ Eigenwertverhältnisse aufgetragen über $1/i$ für $a_{sc} = -0.95$.

5.4 Der Fluktationsvorfaktor für das extern gefangene Kondensat

Das Vorgehen ist hier analog zum vorhergehenden Abschnitt, indem mit Extrapolationen die Grenzfälle $\beta \rightarrow \infty$ und $n_l \rightarrow \infty$ abgeschätzt werden. Im Unterschied zu vorher stehen in diesem Abschnitt auch Rechnungen zu Drehimpulsen $l > 0$ zur Verfügung.

Abb. 5.17 zeigt exemplarisch Verhältnisse λ_0/λ_{po} für verschiedene Eigenwerte. Die Rechnungen hier sind näher an die Bouncetrajektorie herangekommen und die Konvergenz für $\beta \rightarrow \infty$ ist schon erkennbar, daher ist diese Extrapolation unkritisch.

Extrapolation der Vorfaktoren für große Perioden

Es wird eine exponentielle Fitfunktion $f(x)$ an die Werte angepasst

$$f(x) = c_1 e^{c_2 x} + c_3 ,$$

wobei $x = 1/\beta$ und c_1, c_2, c_3 die Fitparameter sind und dann zu $x \rightarrow 0$ extrapoliert.

Es stellt sich heraus, dass sich für fast alle berechneten Eigenwerte eine optisch sehr gute Anpassung an die Messpunkte ergibt, siehe Abb. 5.18. Außerdem ist diese Extrapolation

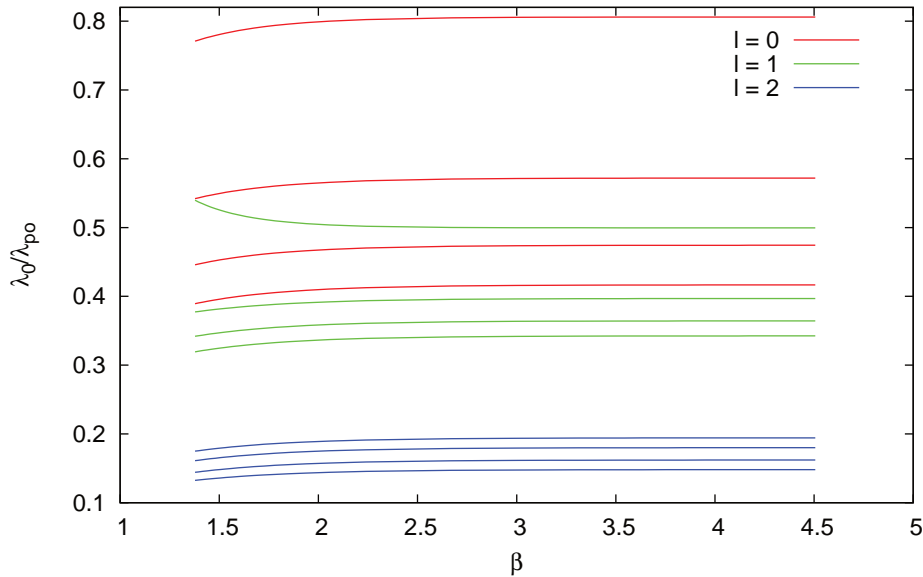


Abbildung 5.17: Die Eigenwertverhältnisse λ_0/λ_{po} der niedrigsten vier Eigenwerte zu $l = 0, 1, 2$ über der Periodendauer β der Bahnen bei der Streulänge $a_{sc} = -0.55$. Für die Rechnungen wurden eine Basisgröße $n_1 = 15$ gewählt, der freie Parameter war $b = 1$.

kaum nötig, da der Unterschied zum letzten gerechneten Wert in den meisten Fällen nur eine Änderung in der vierten Nachkommastelle ist.

Extrapolation für höhere Eigenwerte

Es sind die Eigenwerte für Basisgrößen bis zu $n_1 = 16$ berechnet worden, was aber in manchen Fällen noch nicht ausreicht, dass die Vorfaktoren ζ konvergiert sind, sich also durch Wahl einer größeren Basis $n_1 > 16$ nicht mehr wesentlich ändern.

Daher wird an die Werte für ζ eine lineare Fitfunktion angepasst und dann zu $1/n_1 \rightarrow 0$ extrapoliert.

Es stellt sich heraus, dass zu den Drehimpulsen $l > 2$ die Vorfaktoren ζ schon bei $n_1 = 10$ konvergiert sind und sich auch für $l = 2$ keine wesentlichen Änderungen durch die Extrapolation ergeben, siehe Abb. 5.19. Für $l = 1, 2$ muss man eine größere Ungenauigkeit der Ergebnisse einräumen, da sich die Vorfaktoren teilweise noch deutlich ändern.

Um die Zuverlässigkeit der Extrapolation besser einschätzen zu können, wurden zu einem Eigenwert Rechnungen mit unterschiedlichen Einstellungen des freien Parameters b

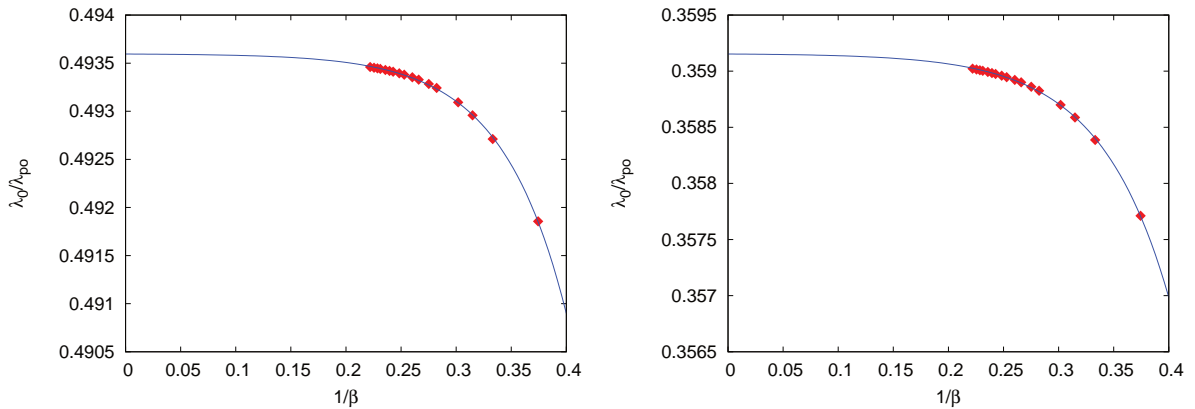


Abbildung 5.18: Ein Eigenwertverhältnis λ_0/λ_{po} für $l = 0$ (*links*) und $l = 1$ (*rechts*) jeweils mit der exponentiellen Fitfunktion $f(x)$.

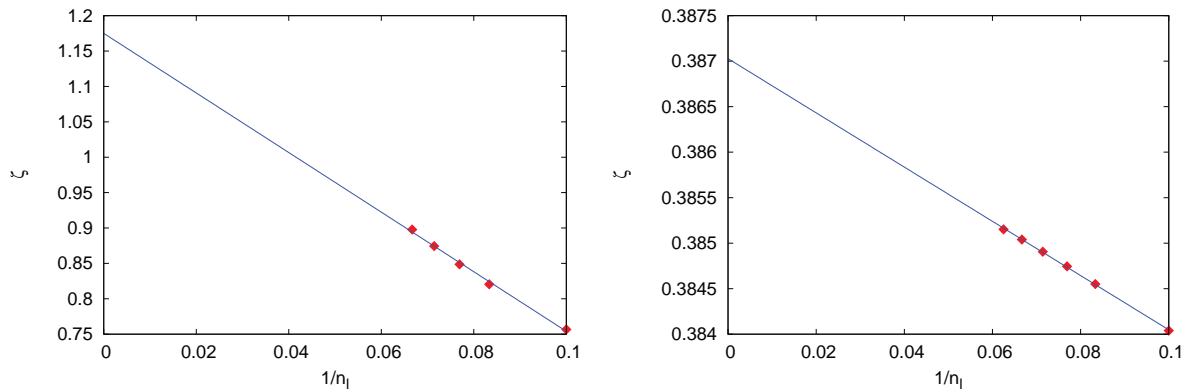


Abbildung 5.19: Die Vorfaktoren ζ für $l = 0$ (*links*) und $l = 2$ (*rechts*) mit der linearen Fitfunktion $f(x)$.

der Laguerrebasis durchgeführt. Vergleicht man die Rechnungen und nimmt jeweils eine lineare Extrapolation vor, lässt sich eine ungefähre Übereinstimmung in der Extrapolation erkennen (Abb. 5.20).

Angepasste Tunnelrate

Abschließend muss auch hier wieder der Einfluss der Fluktuationen auf die Tunnelrate geprüft werden. In Abbildung 5.21 sind einige Vorfaktoren ζ für verschiedene Drehimpulse aufgetragen. Auch wenn diese näher bei 1 liegen, als beim Selbsteinschluss, resultiert ein sehr kleiner Fluktuationsvorfaktor, da alle Eigenwerte die Multiplizität $m = 2l + 1$ besitzen, was dementsprechend auch für die Vorfaktoren gilt.

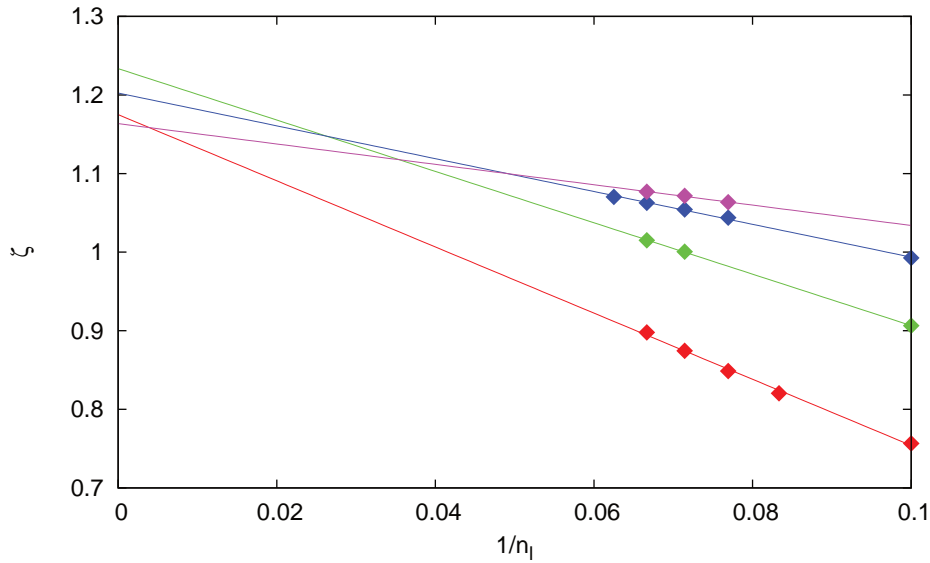


Abbildung 5.20: Der Vorfaktor zum ersten Eigenwert mit Drehimpuls $l = 0$. Die verschiedenen Werte mit jeweiligen Fitfunktionen sind mit unterschiedlichem Konvergenzparameter $b = 1.0 - 2.3$ berechnet worden.

Auch wenn für $l = 0$ und $l = 1$ die Extrapolationen einen gewissen Spielraum lassen, lässt sich bei den Vorfaktoren mit höheren Drehimpulsen keine Tendenz in Richtung 1 erkennen. Damit würde durch Zulassen von Quantenfluktuationen der Grundzustand stark stabilisiert werden und auch hier wäre kein Quantentunneln möglich.

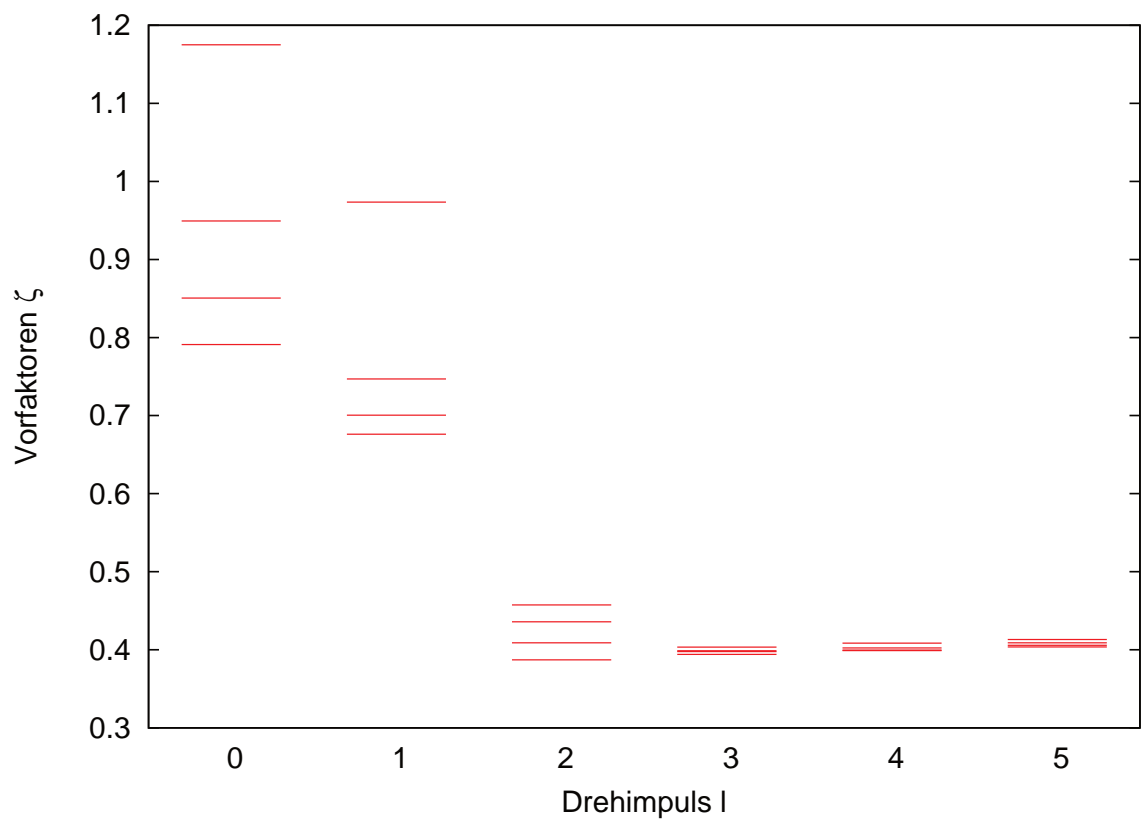


Abbildung 5.21: Die ersten vier Vorfaktoren ζ zu den Drehimpulsen $l = 1, \dots, 5$.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Aufbauend auf Berechnungen periodischer Bahnen mit superponierten Gaußfunktionen in Imaginärzeit wurde eine Methode erarbeitet, um die Stabilität periodischer Bahnen zu berechnen. Dazu wurden die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen in Imaginärzeit aufgestellt und in einer Basis aus radial exponentiell abfallenden, verallgemeinerten Laguerrepolynomen entwickelt. Dann wurden die Differentialgleichungen für die Basiskoeffizienten aufgestellt, wobei sich die auftretenden Überlappintegrale zwischen den Basisfunktionen und den Gaußfunktionen analytisch lösen ließen.

Anschließend wurde diese Basis getestet, indem die Eigenwerte an den stationären Punkten berechnet und mit numerischen Rechnungen verglichen wurden. Es stellte sich heraus, dass diese Basis bei den niedrigsten Eigenwerten zum Drehimpuls $l = 0$ problematisch war, aber die Eigenwerte zu den Drehimpulsen $l \geq 2$ schon mit wenigen Basisfunktionen äußerst gut approximiert.

Dann wurden erfolgreich die Stabilitätseigenwerte von periodischen Bahnen bis in die Nähe der Bouncetrajektorie berechnet und zusammen mit den Stabilitätseigenwerten des Grundzustands die Vorfaktoren ζ der Fluktuationsdeterminante berechnet. In diesen Schritt gingen noch zwei Extrapolationen ein und die Vorfaktoren wurden bestimmt, wobei die Genauigkeit unterschiedlich gut war. Ein klares Resultat ist aber, dass die Berücksichtigung von Quantenfluktuationen einen Faktor liefert, der die Tunnelrate um Größenordnungen verkleinert.

Die Rechnungen wurden für zwei unterschiedliche Kondensattypen ausgeführt, das Kondensat in einer externen Falle mit einer kurzreichweitigen Streuwechselwirkung und das selbsteinschließende Kondensat, was eine langreichweitige Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung besitzt und keine externe Falle benötigt. In beiden Fällen konnte festgestellt werden, dass sich unter Berücksichtigung der Quantenfluktuationen die Tunnelrate um Größenordnungen ändert und es möglich ist, dass das Quantentunneln kein realer Zerfallsprozess sein kann.

Ein genauer Vergleich der Ergebnisse mit Resultaten für eine Variation der Gaußparameter [28] steht noch aus. Dieser könnte weitere Einsichten bieten, genauso wie ein genauerer Vergleich des qualitativen Verhaltens der beiden Kondensate. Außerdem könnten weitere Rechnungen durchgeführt werden, beispielsweise für die Stabilitätseigenwerte

zu $l > 0$ für das selbsteinschließende Kondensat. Als ein weiterer interessanter Vergleich könnten die BdG-Gleichungen auch vollnumerisch für periodische Bahnen gelöst werden.

A Integrale des Variationsansatzes

Die Integrale zur Lösung des Gleichungssystems (2.9) für $v_k^{(0)}$ und $v_k^{(2)}$ mit

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n_g} \chi_i = \sum_{i=1}^{n_g} e^{-(A_i r^2 + \gamma_i)}$$

haben die Form

$$\begin{aligned} \langle \chi_l | \chi_k \rangle &= \pi^{3/2} \frac{e^{i\gamma_{kl}}}{(-iA_{kl})^{3/2}} , \\ \langle \chi_l | r^2 | \chi_k \rangle &= \frac{3}{2} \pi^{3/2} \frac{e^{i\gamma_{kl}}}{(-iA_{kl})^{5/2}} , \\ \langle \chi_l | r^4 | \chi_k \rangle &= \frac{15}{4} \pi^{3/2} \frac{e^{i\gamma_{kl}}}{(-iA_{kl})^{7/2}} , \\ \langle \chi_l | V_{sc} | \chi_k \rangle &= 8\pi^{5/2} a_{sc} \sum_{i,j=1}^{n_g} \frac{e^{i\gamma_{ijkl}}}{(-iA_{ijkl})^{3/2}} , \\ \langle \chi_l | r^2 V_{sc} | \chi_k \rangle &= 12\pi^{5/2} a_{sc} \sum_{i,j=1}^{n_g} \frac{e^{i\gamma_{ijkl}}}{(-iA_{ijkl})^{5/2}} , \\ \langle \chi_l | V_{lr} | \chi_k \rangle &= 4\pi^{5/2} \sum_{i,j=1}^{n_g} \frac{e^{i\gamma_{ijkl}}}{A_{ij} A_{kl} (-iA_{ijkl})^{1/2}} , \\ \langle \chi_l | r^2 V_{lr} | \chi_k \rangle &= 2\pi^{5/2} \sum_{i,j=1}^{n_g} \frac{e^{i\gamma_{ijkl}} (2A_{ij} + 3A_{kl})}{A_{ij} A_{kl}^2 (-iA_{ijkl})^{3/2}} , \end{aligned}$$

mit den Abkürzungen

$$\begin{aligned} A_{ij} &= A_i - A_j^* , \\ A_{ijkl} &= A_{ij} + A_{kl} , \\ \gamma_{ij} &= \gamma_i - \gamma_j^* , \\ \gamma_{ijkl} &= \gamma_{ij} + \gamma_{kl} . \end{aligned}$$

Die Form der Integrale in Imaginärzeit zur Lösung des Gleichungssystems (3.5) für $v_k^{(0)}$, $v_k^{(2)}$, $\bar{v}_k^{(0)}$ und $\bar{v}_k^{(2)}$ entspricht der obigen und es ergibt sich mit

$$\Psi = \sum_{i=1}^{n_g} \chi_i = \sum_{i=1}^{n_g} e^{-(A_i r^2 + \gamma_i)} \quad , \quad \bar{\Psi} = \sum_{i=1}^{n_g} \bar{\chi}_i = \sum_{i=1}^{n_g} e^{-(\bar{A}_i r^2 + \bar{\gamma}_i)}$$

zu

$$\begin{aligned} \langle \chi_l | \chi_k \rangle &= \pi^{3/2} \frac{e^{-\gamma_{kl}}}{A_{kl}^{3/2}} \quad , \\ \langle \chi_l | r^2 | \chi_k \rangle &= \frac{3}{2} \pi^{3/2} \frac{e^{-\gamma_{kl}}}{A_{kl}^{5/2}} \quad , \\ \langle \chi_l | r^4 | \chi_k \rangle &= \frac{15}{4} \pi^{3/2} \frac{e^{-\gamma_{kl}}}{A_{kl}^{7/2}} \quad , \\ \langle \chi_l | V_{sc} | \chi_k \rangle &= 8\pi^{5/2} a_{sc} \sum_{i,j=1}^{n_g} \frac{e^{-\gamma_{ijkl}}}{A_{ijkl}^{3/2}} \quad , \\ \langle \chi_l | r^2 V_{sc} | \chi_k \rangle &= 12\pi^{5/2} a_{sc} \sum_{i,j=1}^{n_g} \frac{e^{-\gamma_{ijkl}}}{A_{ijkl}^{5/2}} \quad , \\ \langle \chi_l | V_{tr} | \chi_k \rangle &= -4\pi^{5/2} \sum_{i,j=1}^{n_g} \frac{e^{-\gamma_{ijkl}}}{A_{ij} A_{kl} A_{ijkl}^{1/2}} \quad , \\ \langle \chi_l | r^2 V_{tr} | \chi_k \rangle &= -2\pi^{5/2} \sum_{i,j=1}^{n_g} \frac{e^{-\gamma_{ijkl}} (2A_{ij} + 3A_{kl})}{A_{ij} A_{kl}^2 A_{ijkl}^{3/2}} \quad , \end{aligned}$$

unter Benutzung der Abkürzungen

$$\begin{aligned} A_{ij} &= A_i + \bar{A}_j \quad , \\ A_{ijkl} &= A_{ij} + A_{kl} \quad , \\ \gamma_{ij} &= \gamma_i + \bar{\gamma}_j \quad , \\ \gamma_{ijkl} &= \gamma_{ij} + \gamma_{kl} \quad . \end{aligned}$$

B Integrale der BdG-Gleichungen

Die Integrale aus den Gleichungen (4.11) und (4.12) lassen sich unter Benutzung der Summendarstellung der Laguerrepolynome (4.10) ausrechnen.

Für das Fallenpotential ergibt sich

$$\begin{aligned}
 & \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | r^2 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \\
 &= \int dr r^2 \iint d\Omega \Phi_{n,l} Y_{l,m}^* r^2 \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \\
 &= \int dr r^4 \Phi_{n,l} \Phi_{n',l'} \tag{B.1}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{k=0}^n \sum_{k'=0}^{n'} d_k^{(l)} d_{k'}^{(l)} \int dr r^{2k+2k'+2l+4} e^{-br^2} \\
 &= \sum_{k=0}^n \sum_{k'=0}^{n'} d_k^{(l)} d_{k'}^{(l)} \frac{\Gamma(k+k'+l+5/2)}{2b^{k+k'+l+5/2}}. \tag{B.2}
 \end{aligned}$$

Die Terme des Streupotentials haben die Form

$$\langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \Psi_1 \Psi_2 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle$$

mit

$$\Psi_1 = \sum_{i=1}^{n_g} e^{-(A_i^{(1)} r^2 + \gamma_i^{(1)})}, \quad \Psi_2 = \sum_{i=1}^{n_g} e^{-(A_i^{(2)} r^2 + \gamma_i^{(2)})},$$

wobei n_g die Anzahl Gaußfunktionen ist und $\Psi_1 = \Psi_2 = \bar{\Psi}_0$, $\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi_0$ oder $\Psi_1 = \Psi_0$, $\Psi_2 = \bar{\Psi}_0$.

Dann ergibt sich

$$\begin{aligned}
 & \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \Psi_1 \Psi_2 | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \\
 &= \int dr r^2 \iint d\Omega \Phi_{n,l} Y_{l,m}^* \Psi_1 \Psi_2 \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \\
 &= \int dr r^2 \Phi_{n,l} \Phi_{n',l'} \Psi_1 \Psi_2
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^{n_g} \sum_{k=0}^n \sum_{k'=0}^{n'} d_k^{(l)} d_{k'}^{(l)} \int dr r^{2k+2k'+2l+2} e^{-br^2} e^{-(A_i^{(1)} r^2 + \gamma_i^{(1)})} e^{-(A_j^{(2)} r^2 + \gamma_j^{(2)})} \\
 &= \sum_{i=1}^{n_g} \sum_{j=1}^{n_g} \sum_{k=0}^n \sum_{k'=0}^{n'} d_k^{(l)} d_{k'}^{(l)} e^{-(\gamma_i^{(1)} + \gamma_j^{(2)})} \frac{\Gamma(k + k' + l + 3/2)}{2(b + A_i^{(1)} + A_j^{(2)})^{k+k'+l+3/2}}.
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

Für den kinetischen Term ergibt sich

$$\begin{aligned}
 & \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | \Delta | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \\
 &= \int dr r^2 \iint d\Omega \Phi_{n,l} Y_{l,m}^* \left(Y_{l',m'} \Delta_r \Phi_{n',l'} + \frac{1}{r^2} \Phi_{n',l'} \Delta_{\theta,\phi} Y_{l',m'} \right) \\
 &= \int dr r^2 \left(\Phi_{n,l} \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Phi_{n',l'}) - \frac{l(l+1)}{r^2} \Phi_{n,l} \Phi_{n',l'} \right)
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{k=0}^n \sum_{k'=0}^{n'} d_k^{(l)} d_{k'}^{(l)} \int dr r^{2k+2k'+2l} e^{-br^2} \left\{ \right. \\
 &\quad \left. [(2k' + l)(2k' + l + 1) - (4k' + 2l + 3)br^2 + b^2 r^4] - l(l + 1) \right\} \\
 &= \sum_{k=0}^n \sum_{k'=0}^{n'} d_k^{(l)} d_{k'}^{(l)} \left\{ \right. \\
 &\quad \left. [(2k' + l)(2k' + l + 1) - l(l + 1)] \frac{\Gamma(k + k' + l + 1/2)}{2b^{k+k'+l+1/2}} \right. \\
 &\quad \left. - (4k' + 2l + 3) b \frac{\Gamma(k + k' + l + 3/2)}{2b^{k+k'+l+3/2}} \right. \\
 &\quad \left. + b^2 \frac{\Gamma(k + k' + l + 5/2)}{2b^{k+k'+l+5/2}} \right\}.
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

Die Terme der $1/r$ -Wechselwirkung ergeben unter Nutzung von (4.13) und (4.14)

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | 16 \int dk j_0(kr) \int dr' r'^2 \bar{\Psi}_0 \Psi_0 j_0(kr') | \Phi_{n',l'} Y_{l',m'} \rangle \\
&= 16 \int dr r^2 \Phi_{n,l} \Phi_{n',l} \int dk j_0(kr) \int dr' r'^2 \bar{\Psi}_0 \Psi_0 j_0(kr') \\
&= 16 \int dk \int dr r^2 \Phi_{n,l} \Phi_{n',l} j_0(kr) \int dr' r'^2 \bar{\Psi}_0 \Psi_0 j_0(kr')
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_{n,l} Y_{l,m} | 16 (-1)^{l'} Y_{l',m'}(\theta_r, \phi_r) \int dk j_{l'}(kr) \int dr' r'^2 \bar{\Psi}_0 \Phi_{n',l'} j_{l'}(kr') | \Psi_0 \rangle \\
&= 16 (-1)^{l'} \int d^3 \mathbf{r} \Psi_0(r) \Phi_{n,l}(r) Y_{l,m}^*(\theta_r, \phi_r) Y_{l',m'}(\theta_r, \phi_r) \int dk j_{l'}(kr) \\
&\quad \times \int dr' r'^2 \bar{\Psi}_0(r') \Phi_{n',l'}(r') j_{l'}(kr') \\
&= 16 (-1)^l \int dk \int dr r^2 \Psi_0(r) \Phi_{n,l}(r) j_l(kr) \int dr' r'^2 \bar{\Psi}_0(r') \Phi_{n',l}(r') j_l(kr') ,
\end{aligned}$$

wobei die übrigen Kombinationen von $\delta\Psi$, $\delta\bar{\Psi}$, Ψ_0 und $\bar{\Psi}_0$ analoge Form haben.

Literaturverzeichnis

- [1] S. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik* 26, 178–181 (1924).
- [2] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1924, 261–267 (1924).
- [3] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases II. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1925, 3–14 (1925).
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science* 269, 198–201 (1995).
- [5] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969–3973 (1995).
- [6] C. C. Bradley, C. A. Sackett und R. G. Hulet. Bose-Einstein Condensation of Lithium: Observation of Limited Condensate Number. *Physical Review Letters* 78, 985–989 (1997).
- [7] S. Jochim, M. Bartenstein, A. Altmeyer, G. Hendl, S. Riedl, C. Chin, J. Hecker Denschlag und R. Grimm. Bose-Einstein Condensation of Molecules. *Science* 302, 2101–2103 (2003).
- [8] K. K. Ni, S. Ospelkaus, M. H. G. de Miranda, A. Pe’er, B. Neyenhuis, J. J. Zirbel, S. Kotochigova, P. S. Julienne, D. S. Jin und J. Ye. A High Phase-Space-Density Gas of Polar Molecules. *Science* 322, 231–235 (2008).
- [9] Axel Griesmaier, Jörg Werner, Sven Hensler, Jürgen Stuhler und Tilman Pfau. Bose-Einstein Condensation of Chromium. *Physical Review Letters* 94, 160401 (2005).
- [10] S. Giovanazzi, D. O’Dell und G. Kurizki. Self-binding transition in Bose condensates with laser-induced “gravitation”. *Phys. Rev. A* 63, 031603 (2001).

- [11] E. P. Gross. Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems. *Il Nuovo Cimento* 20, 454–477 (1961).
- [12] L. P. Pitaevskii. Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas. *Soviet Physics JETP* 13, 451–454 (1961).
- [13] A. D. McLachlan. A variational solution of the time-dependent Schrodinger equation. *Molecular Physics* 8:1, 39–44 (1964).
- [14] H. T. C. Stoof. Macroscopic Quantum Tunneling of a Bose Condensate. *Journal of Statistical Physics* 87, 1353–1366 (1997).
- [15] José A. Freire und Daniel P. Arovas. Collapse of a Bose condensate with attractive interactions. *Phys. Rev. A* 59, 1461–1467 (1999).
- [16] Pascal Wieland. *Numerische Simulationen auf Raum-Zeit-Gittern zum makroskopischen Quantentunneln bei Bose-Einstein Kondensaten mit attraktiver 1/r-Wechselwirkung*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2011).
- [17] E. J. Heller. Classical S-matrix limit of wave packet dynamics. *The Journal of Chemical Physics* 65, 4979–4989 (1976).
- [18] E. J. Heller. Frozen Gaussians: A very simple semiclassical approximation. *Journal of Chemical Physics* 75, 2923–2931 (1981).
- [19] Stefan Rau, Jörg Main und Günter Wunner. Variational methods with coupled Gaussian functions for Bose-Einstein condensates with long-range interactions. I. General concept. *Phys. Rev. A* 82, 023610 (2010).
- [20] Stefan Rau, Jörg Main, Holger Cartarius, Patrick Köberle und Günter Wunner. Variational methods with coupled Gaussian functions for Bose-Einstein condensates with long-range interactions. II. Applications. *Phys. Rev. A* 82, 023611 (2010).
- [21] Rolf Häfner. *Quantendefekttheorie für makroskopische Anregungen und Quantentunneln bei Bose-Einstein-Kondensaten mit langreichweitiger Wechselwirkung*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2010).
- [22] Kai Marquardt. *Multi-shooting Algorithmus zur Berechnung der Bounce-Trajektorie bei Bose-Einstein Kondensaten mit attraktiver 1/r-Wechselwirkung*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2011).
- [23] Manuel Kreibich. *Stabilität von Bose-Einstein-Kondensaten mit langreichweitigen Wechselwirkungen: Variations- und numerischer Ansatz*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2011).

- [24] Christopher J. Pethick und Henrik Smith. *Bose-Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge University Press, Cambridge [u.a.] (2002).
- [25] Claude Cohen-Tannoudji. *Quantum Mechanics, Volume 2*. Wiley-Interscience (1978).
- [26] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D.M. Stamper-Kurn und W. Ketterle. Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate. *Nature* 392, 151–154 (1998).
- [27] J Broeckhove, L Lathouwers und P Van Leuven. Time-dependent variational principles and conservation laws in wavepacket dynamics. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 22, 4395 (1989).
- [28] Torsten Schwidder. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (in Vorbereitung).
- [29] I. H. Duru, H. Kleinert und N. Ünal. Decay Rate for Supercurrent in Thin Wire. *Journal of Low Temperature Physics* 42, 137–150 (1981).
- [30] Stefan Rau. *Variational methods with coupled Gaussian functions for Bose-Einstein condensates with long-range interaction*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2010).
- [31] M. Kreibich, J. Main und G. Wunner. Relation between the eigenfrequencies of Bogoliubov excitations of Bose-Einstein condensates and the eigenvalues of the Jacobian in a time-dependent variational approach. *Phys. Rev. A* 86, 013608 (2012).

Danksagung

Ich möchte mich für die große Unterstützung bedanken, die ich während meiner Diplomarbeit in vielfältiger Weise erfahren habe. Zum einen gilt mein Dank dem ganzen Institut und den vielen hilfsbereiten Kollegen, die mir jederzeit bei Problemen und Fragen weiterhelfen konnten. Insbesondere meinem Betreuer Prof. Dr. Jörg Main, der in vielen Diskussionen immer wieder neue Ansätze lieferte oder Ergebnisse in ein neues Licht rückte, wenn einmal die Arbeit stockte, spreche ich hiermit meinen Dank aus.

Explizit danke ich auch Kai, Manuel und Torsten für das Bereitstellen ihrer Arbeiten, auf denen die vorliegende Diplomarbeit aufbaut, sowie meinen Korrekturlesern Manuel und Andrej, welcher zudem als Zimmernachbar genauso unkompliziert war, wie seine Zimmerpalme pflegeleicht.

Zum anderen danke ich meinen Eltern für die vielfältige und ausgiebige Unterstützung während der Arbeit und im Studium, speziell meiner Mutter für die Verpflegung, die Motivation und das Verständnis und meinem Vater für das Mitfiebern, die Bereitschaft, zuzuhören, und die kritischen Fragen.

Shoutout an [b4dm4sh] und die Jungs :3

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre, dass ich diese Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Stuttgart, den 8. August 2012

Matin Kaufmann

