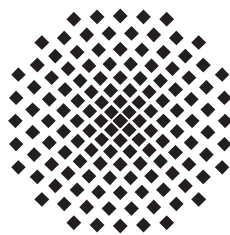


# **Stabilitätslücke bei $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Bose-Einstein-Kondensaten**

Bachelorarbeit von  
**Andreas Löhle**

16. August 2013

Prüfer: Prof. Dr. Jörg Main



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



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Motivation und Einführung in das Thema . . . . .	1
1.2	Aufbau der Arbeit . . . . .	2
<b>2</b>	<b><math>\mathcal{PT}</math>-Symmetrie</b>	<b>5</b>
2.1	$\mathcal{PT}$ -Operator . . . . .	5
2.2	Eigenzustände und Eigenwerte des $\mathcal{PT}$ -Operators . . . . .	5
2.3	Eigenschaften $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systeme . . . . .	6
2.3.1	Eigenschaften nicht-hermitescher Systeme . . . . .	7
2.3.2	Kontinuitätsgleichung . . . . .	8
2.3.3	Energieeigenwerte linearer $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systeme . . . . .	9
2.3.4	Nichtlineare $\mathcal{PT}$ -symmetrische Systeme . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Bose-Einstein-Kondensate</b>	<b>13</b>
3.1	Gross-Pitaevskii Gleichung (GPE) . . . . .	13
3.1.1	Herleitung der GPE . . . . .	14
3.2	Formulierung der Gross-Pitaevskii Gleichung in dimensionslosen Größen .	17
3.3	Bogoliubov de Gennes-Gleichungen . . . . .	18
3.3.1	Herleitung . . . . .	18
3.3.2	Verhalten unter Eichtransformation . . . . .	19
3.3.3	Symmetrien der BdGE . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Bifurkationen</b>	<b>23</b>
4.1	Tangentenbifurkation . . . . .	23
4.2	Heugabelbifurkation . . . . .	25
<b>5</b>	<b>Stabilitätslücke für BECs im <math>\mathcal{PT}</math>-symmetrischen Doppel-<math>\delta</math>-Potential</b>	<b>29</b>
5.1	Gross-Pitaevskii Gleichung . . . . .	29

5.1.1	Numerische Methode zur Lösung der GPE für das Doppel- $\delta$ -Potential	31
5.1.2	Stationäre Lösungen der Gross-Pitaevskii Gleichung . . . . .	32
5.2	Stabilitätsanalyse der stationären Zustände . . . . .	38
5.2.1	Bogoliubov de Gennes-Gleichungen des BEC im Doppel- $\delta$ -Potential	38
5.2.2	Auftreten der Stabilitätslücke . . . . .	40
5.2.3	Diskussion der Stabilitätslücke . . . . .	44
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>49</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>51</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>53</b>

# 1 Einleitung

## 1.1 Motivation und Einführung in das Thema

Ein wesentliches Axiom der Quantenmechanik ist die Forderung nach Hermitizität der verwendeten Operatoren. Diese Forderung stellt sicher, dass die Eigenwerte des Operators rein reell sind und dementsprechend auch alle physikalischen Messgrößen. Für den Hamiltonoperator eines Systems garantiert diese Forderung ein rein reelles Energiespektrum, sowie die Normerhaltung des quantenmechanischen Zustandes. Es zeigt sich jedoch, dass für die Beschreibung offener Quantensysteme mit hermiteschen Operatoren in der Regel eine sehr aufwendige zeitabhängige Rechnung erforderlich ist [1]. Eine mathematisch einfachere Möglichkeit derartige Phänomene zu beschreiben besteht in der Verwendung nicht-hermitescher Operatoren. Ein Beispiel hierfür ist die Einführung imaginärer Potentiale, die in der Lage sind, Gewinne bzw. Verluste von Teilchen in einem System effektiv zu beschreiben.

Eine besonders interessante Klasse von nicht-hermiteschen Systemen sind die von Bender und Boettcher erstmals vorgestellten  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Operatoren [2]. Es konnte gezeigt werden, dass sofern der Hamiltonoperator mit dem Zeit-Paritäts-Operator kommutiert ( $[H, \mathcal{PT}] = 0$ ), unter bestimmten Bedingungen ein rein reelles Spektrum der Energieeigenwerte existiert. Experimentell wurden derartige  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Systeme in optischen Wellenleitern beobachtet [3]. Dabei handelt es sich zwar nicht um ein echtes quantenmechanisches System, aufgrund der formalen Äquivalenz einer Transversalmode in einem Wellenleiter zu einem quantenmechanischen Teilchen kann dieses optische System jedoch als quasi-quantenmechanisch betrachtet werden. Die Beobachtung  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Effekte in echten Quantensystemen steht jedoch noch aus.

Die Beschreibung quantenmechanischer Systeme durch nicht-hermitesche Operatoren ist dabei nicht allein auf lineare Systeme beschränkt. Ein Bose-Einstein-Kondensat (BEC)

wird unter Annahme schwach wechselwirkender Bosonen im Rahmen einer Mean-Field Näherung durch die Gross-Pitaevskii Gleichung (GPE) beschrieben [4]. Für ein Bose-Einstein-Kondensat bei geringer Dichte und niedriger Temperatur kann die Wechselwirkung der Teilchen im Kondensat durch einen s-Wellenstreuprozess beschrieben werden. Die GPE ist dann eine nichtlineare Differentialgleichung zweiter Ordnung. Das Verhalten von BECs in komplexen  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Potentialen wurde bereits in früheren Arbeiten behandelt [5–8]. Für ein ausgedehntes Doppelmuldenpotential [5] konnten dabei die wesentlichen Eigenschaften  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systemen, wie beispielsweise die Existenz von  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zuständen mit rein reellen Energieeigenwerten, gezeigt werden. Bei der Analyse der Stabilitätseigenschaften der stationären Zustände zeigte sich dabei ein interessanter Effekt. Betrachtet man die Energieeigenwerte des Systems in Abhängigkeit eines komplexen Potentialparameters  $\gamma$ , der den Verlust bzw. Gewinn von Teilchen im System beschreibt, so durchlaufen zwei Lösungen der GPE an einem kritischen Punkt eine Verzweigung. An dieser Bifurkation würde man eine Änderung der Stabilitätseigenschaften erwarten. Die Berechnung zeigt jedoch, dass ein Stabilitätswechsel bereits vor der Bifurkation auftritt. Eine mögliche Erklärung sieht die Gründe für die auftretende Lücke im Vorhandensein höher angeregter Zustände. Eine andere Erklärung sieht die Nichtlinearität in der GPE als Ursache für das Auftreten der Stabilitätslücke [5, 6]. Ziel dieser Bachelorarbeit ist es, die stationären Lösungen der GPE in einem idealisierten eindimensionalen Doppel- $\delta$ -Potential numerisch zu bestimmen und eine Analyse der Stabilität dieser Zustände mit Hilfe der Bogoliubov de Gennes-Gleichungen durchzuführen. Im letzten Teil soll schließlich die Ursache für das Auftreten der Stabilitätslücke geklärt werden.

## 1.2 Aufbau der Arbeit

- Kapitel 2 behandelt die Grundlagen  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Operatoren, sowie die daraus resultierenden Eigenschaften für lineare und nichtlineare quantenmechanische Systeme.
- Kapitel 3 befasst sich mit der mathematischen Beschreibung von Bose-Einstein-Kondensaten. Es werden die Gross-Pitaevskii-Gleichung (GPE) und die Bogoliubov de Gennes-Gleichungen (BdGE) eingeführt und hergeleitet, sowie deren grundlegende Eigenschaften besprochen.

- Kapitel 4 beschäftigt sich mit den Grundlagen von Bifurkationen, die anhand von zwei einfachen Beispielen erklärt werden.
- In Kapitel 5 werden die stationären Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung für ein eindimensionales Doppel- $\delta$ -Potential bestimmt. Dabei wird zuerst der lineare Fall ohne Wechselwirkung und anschließend der nichtlineare Fall mit kurzreichweitiger Wechselwirkung berücksichtigt und das jeweils dazugehörige Spektrum der Energieeigenwerte bestimmt. Im letzten Abschnitt wird mit Hilfe der Bogoliubov de Gennes-Gleichungen eine lineare Stabilitätsanalyse durchgeführt um die Ursache der Stabilitätslücke aufzuklären.





## 2 $\mathcal{PT}$ -Symmetrie

### 2.1 $\mathcal{PT}$ -Operator

Der  $\mathcal{PT}$ -Operator setzt sich zusammen aus einer Raumspiegelung  $\mathcal{P}$  und einer Zeitumkehr  $\mathcal{T}$ . Für die Wirkung der Operatoren gilt:

$$\mathcal{P} : \quad \hat{x} \rightarrow -\hat{x}, \quad \hat{p} \rightarrow -\hat{p} \quad (2.1)$$

$$\mathcal{T} : \quad \hat{x} \rightarrow \hat{x}, \quad \hat{p} \rightarrow -\hat{p}, \quad i \rightarrow -i \quad (2.2)$$

Im Gegensatz zum  $\mathcal{P}$ -Operator handelt es sich bei der Zeitumkehr  $\mathcal{T}$  um einen anti-linearen Operator. Durch die komplexe Konjugation im Ortsraum ist zwar die Additivität der Abbildung  $T(x+y) = T(x)+T(y)$ , nicht jedoch die Homogenität  $T(\lambda x) = \lambda T(x)$  erhalten. Für  $\mathcal{T}$  gilt allgemein:

$$\mathcal{T}(\lambda |\Psi\rangle) = \lambda^* \mathcal{T} |\Psi\rangle$$

Der  $\mathcal{PT}$ -Operator hat somit folgende Wirkung:

$$\mathcal{PT} : \quad \hat{x} \rightarrow -\hat{x}, \quad \hat{p} \rightarrow \hat{p}, \quad i \rightarrow -i \quad (2.3)$$

### 2.2 Eigenzustände und Eigenwerte des $\mathcal{PT}$ -Operators

Sei  $|\Psi\rangle$  ein Eigenzustand zum  $\mathcal{PT}$ -Operator. Für die möglichen Eigenwerte ergeben sich:

$$\begin{aligned} \mathcal{PTPT} |\Psi\rangle &= \lambda |\Psi\rangle = \lambda \lambda^* |\Psi\rangle \\ |\lambda|^2 &= 1 \rightarrow \lambda = e^{i\phi} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Aus den Eigenschaften des Operators (2.3) zeigt sich unmittelbar, dass eine zweifache Hintereinanderausführung den Zustand wieder in sich selbst überführt. Für die möglichen Eigenwerte ergeben sich dadurch komplexe Zahlen mit Betrag eins und einer Phase  $\phi$ . Die Eigenwerte hängen dabei von der Wahl eines komplexen Vorfaktors des Zustandes ab. Ein möglicher Vorfaktor wäre eine globale Phase. Der Eigenwert kann daher durch die freie Phasenwahl umgeformt werden.

$$\begin{aligned}
 \mathcal{PT}|\Psi\rangle &= e^{i\phi}|\Psi\rangle \\
 e^{-i\beta}\mathcal{PT}|\Psi\rangle &= e^{-i\beta}e^{i\phi}|\Psi\rangle \\
 \mathcal{PT}e^{i\beta}|\Psi\rangle &= e^{-i2\beta}e^{i\phi}e^{i\beta}|\Psi\rangle \\
 \mathcal{PT}|\tilde{\Psi}\rangle &= e^{i\phi'}|\tilde{\Psi}\rangle
 \end{aligned} \tag{2.5}$$

Die Phase des Eigenzustandes wird mit  $\phi$  bezeichnet.  $|\tilde{\Psi}\rangle = e^{i\beta}|\Psi\rangle$  ist dann ein Eigenzustand mit der Phase  $\phi' = \phi - 2\beta$ . Im einfachsten Fall wird die Phase  $\phi'$  null gesetzt, sodass der Eigenwert stets eins beträgt. Dies wird bspw. durch die Wahl  $\text{Im}\Psi(0) = 0$  erreicht. Alle Eigenzustände zum  $\mathcal{PT}$ -Operator sind mit dieser Phasenwahl selbst  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch und es gilt:

$$\begin{aligned}
 \Psi(\mathbf{r}) &= \Psi^*(-\mathbf{r}) \\
 \text{Re}\Psi(\mathbf{r}) &= \text{Re}\Psi(-\mathbf{r}) \\
 \text{Im}\Psi(\mathbf{r}) &= -\text{Im}\Psi(-\mathbf{r})
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

## 2.3 Eigenschaften $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systeme

Ein System wird als  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch bezeichnet wenn der entsprechende Hamiltonoperator des Systems mit dem  $\mathcal{PT}$ -Operator kommutiert. Für ein beliebiges komplexes Potential  $V$  ergibt sich daher:

$$\begin{aligned}
 [\hat{H}, \mathcal{PT}] &= 0 \\
 \hat{H}\mathcal{PT} - \mathcal{PT}\hat{H} &= 0 \\
 \mathcal{PT}\hat{H} &= \mathcal{PT}\left(\frac{\hat{p}}{2m} + V(\mathbf{r})\right) \\
 &= \mathcal{P}\left(\frac{\hat{p}}{2m} + V^*(\mathbf{r})\right) \\
 &= \frac{\hat{p}}{2m} + V^*(-\mathbf{r})
 \end{aligned} \tag{2.7}$$

Man sieht sofort, dass der Term für die kinetische Energie immer die  $\mathcal{PT}$ -Symmetriebedingung erfüllt. Für das Potential hingegen gilt die Bedingung:

$$V(\mathbf{r}) = V^*(-\mathbf{r}) \quad (2.8)$$

bzw.

$$\operatorname{Re} V(\mathbf{r}) = \operatorname{Re} V(-\mathbf{r})$$

$$\operatorname{Im} V(\mathbf{r}) = -\operatorname{Im} V(-\mathbf{r})$$

### 2.3.1 Eigenschaften nicht-hermitescher Systeme

Das Ersetzen der Forderung nach Hermitizität des Operators durch die Forderung nach  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie wirft die Frage auf, inwieweit die bekannten Eigenschaften eines klassischen hermiteschen Systems wie Orthogonalität oder Normerhaltung auf ein  $\mathcal{PT}$ -symmetrisches System übertragbar sind. Ein erster wichtiger Unterschied ist, dass für ein nicht-hermitesches System nicht immer eine Orthonormalbasis aus Eigenzuständen gebildet werden kann [1]. Darüber hinaus sind die zugehörigen Eigenwerte nicht ausschließlich reell sondern im Allgemeinen komplex. In der Quantenmechanik beschreiben die Eigenwerte die möglichen Messwerte der Observablen und müssen daher rein reell sein. Die physikalische Interpretation komplexer Eigenwerte eines  $\mathcal{PT}$ -Operators lässt sich wie folgt zeigen:

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (2.9)$$

Sei  $\Psi$  ein Eigenzustand der stationären Schrödingergleichung mit einem komplexen Energieeigenwert  $E$ . Für die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte gilt dann:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iEt} |\Psi(0)\rangle \quad (2.10a)$$

$$||\Psi(t)\rangle|^2 = e^{-iEt} \cdot e^{iE^*t} |\Psi(0)\rangle|^2 = e^{2\operatorname{Im}(E)t} |\Psi(0)\rangle|^2 \quad (2.10b)$$

An Gleichung (2.10a) erkennt man sofort, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte des Zustandes  $||\Psi(t)\rangle|^2$  bei positiven Eigenwerten exponentiell ansteigt bzw. bei negativen exponentiell abfällt. Die physikalische Interpretation komplexer Eigenwerte lässt sich anhand der Kontinuitätsgleichung veranschaulichen.

### 2.3.2 Kontinuitätsgleichung

In nicht-hermiteschen Systemen ist die Zeitentwicklung eines Zustands nicht mehr unitär, was zum Verlust der Normerhaltung führt, wie sie aus der Quantenmechanik bekannt ist [1]. Für die zeitliche Änderung der Norm gilt in einem nicht-hermiteschen System:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial}{\partial t} \Psi | \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | \frac{\partial}{\partial t} \Psi \right\rangle \\ &= \left\langle -i \hat{H} \Psi | \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | -i \hat{H} \Psi \right\rangle \\ &= i \langle \Psi | \hat{H}^\dagger - \hat{H} | \Psi \rangle\end{aligned}\quad (2.11)$$

Da in nicht-hermiteschen Systemen die Aussage  $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$  nicht mehr gilt, folgt daraus  $\hat{H}^\dagger - \hat{H} \neq 0$ . Die Norm ist somit keine allgemeine Erhaltungsgröße mehr. Betrachtet man die Kontinuitätsgleichung,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (2.12)$$

und setzt dann für  $\rho$  den in (2.11) bestimmten Ausdruck für die Wahrscheinlichkeitsdichte ein, so ergibt sich in der Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ &= i \Psi \hat{H}^* \Psi^* - i \Psi^* \hat{H} \Psi\end{aligned}\quad (2.13)$$

Setzt man in (2.13) einen Hamiltonoperator mit einem allgemeinen komplexen Potential  $V(\mathbf{r})$  ein so ergibt sich:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= i \Psi (-\nabla^2 + \operatorname{Re} V(\mathbf{r}) - i \operatorname{Im} V(\mathbf{r})) \Psi^* - i \Psi^* (-\nabla^2 + \operatorname{Re} V(\mathbf{r}) + i \operatorname{Im} V(\mathbf{r})) \Psi \\ &= 2 \operatorname{Im} V(\mathbf{r}) |\Psi|^2 + i (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) \\ &= 2 \operatorname{Im} V(\mathbf{r}) |\Psi|^2 - \operatorname{div} \mathbf{j} \\ &= 2 \operatorname{Im} V(\mathbf{r}) \rho - \operatorname{div} \mathbf{j}\end{aligned}\quad (2.14)$$

Der zusätzliche Term  $2 \operatorname{Im} V(\mathbf{r}) \rho$ , der in der Kontinuitätsgleichung aufgrund des Imaginärteils des Potentials auftritt, kann als Quelle bzw. Senke interpretiert werden. Es ist somit möglich, Gewinne bzw. Verluste von Teilchen im System durch ein komplexes Potential zu modellieren. Ist  $\operatorname{Im} V(\mathbf{r}) > 0$ , so handelt es sich um eine Quelle, bei  $\operatorname{Im} V(\mathbf{r}) < 0$  um eine Senke.

### 2.3.3 Energieeigenwerte linearer $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systeme

Es wird das Verhalten eines  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systems im Falle nicht-entarteter Eigenwerte betrachtet. Ausgehend von einem Zustand mit Energieeigenwert  $\mu$ ,

$$\hat{H}\Psi = \mu\Psi \quad (2.15)$$

ergibt sich bei Anwendung des  $\mathcal{PT}$ -Operators:

$$\mathcal{PT}(\hat{H}\Psi) = \mathcal{PT}(\mu\Psi) \quad (2.16a)$$

$$\hat{H}(\mathcal{PT}\Psi) = \mu^*(\mathcal{PT}\Psi) \quad (2.16b)$$

Für reelle  $\mu$  muss  $\mathcal{PT}\Psi$  kollinear zu  $\Psi$  sein. Für komplexe  $\mu$  sind die Zustände  $\mathcal{PT}\Psi$  wieder Eigenzustände des Hamiltonoperators mit dem komplex konjugierten Eigenwert  $\mu^*$ . Betrachtet man andererseits die  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Eigenzustände mit  $\lambda$  als Eigenwert des  $\mathcal{PT}$ -Operators genauer,

$$\begin{aligned} \mu^*(\mathcal{PT}\Psi) &= \hat{H}(\mathcal{PT}\Psi) \\ &= \hat{H}(\lambda\Psi) \\ &= \lambda\hat{H}\Psi \\ &= \lambda\mu\Psi \\ &= \mu\lambda\Psi \\ &= \mu(\mathcal{PT}\Psi) \end{aligned} \quad (2.17)$$

so sieht man sofort, dass im Fall  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Eigenzustände des Hamiltonoperators die Eigenwerte immer reell sind. Zusammenfassend lassen sich damit bei nicht-entarteten Eigenwerten folgende Aussagen treffen:

- Gibt es einen Eigenzustand  $\Psi$  mit einem Eigenwert  $\mu$ , so ist  $\mathcal{PT}\Psi$  ein Eigenzustand zum Eigenwert  $\mu^*$ .
- Die Energieeigenwerte eines  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systems sind genau dann reell, wenn auch die Eigenzustände  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch sind.

Für den Fall entarteter Energieeigenwerte lassen sich ergänzend folgende Eigenschaften nennen [6]:

- Wie bei nicht-entarteten Eigenwerten haben  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Eigenzustände eines  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systems immer reelle Eigenwerte.

- Der zugehörige Eigenraum lässt sich aus linear unabhängigen  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Eigenzuständen aufspannen. Bei reellen Eigenwerten ist der Eigenraum invariant bei Anwendung des  $\mathcal{PT}$ -Operators.
- Gibt es einen Eigenzustand  $\Psi$  mit einem Eigenwert  $\mu$ , so ist  $\mathcal{PT}\Psi$  ein Eigenzustand zum Eigenwert  $\mu^*$ .

### 2.3.4 Nichtlineare $\mathcal{PT}$ -symmetrische Systeme

In Abschnitt 2.3 wurden bis jetzt die Eigenschaften eines  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systems mit einem linearen Hamiltonoperator der Form  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$  betrachtet. In dieser Arbeit wird ein BEC in einem Doppel- $\delta$ -Potential betrachtet. Die für ein solches System relevante GPE (3.24) enthält hingegen einen zusätzlichen nichtlinearen Term der Form  $g|\Psi|^2$ , der die kurzreichweitige Wechselwirkung beschreibt. Im folgenden Abschnitt wird daher untersucht, inwieweit die bereits bestimmten Eigenschaften linearer  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systeme auf nichtlineare Systeme übertragbar sind. Im ersten Schritt wird hierzu der Hamiltonoperator in einen linearen und nichtlinearen Anteil aufgespalten.

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{lin}} + \hat{H}_{\text{nonlin}} \quad (2.18)$$

Der lineare Anteil hat die bekannte Form  $\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$  der nichtlineare Anteil  $\hat{H}_{\text{nonlin}} = f(\Psi)$  sei eine von  $\Psi$  abhängige Funktion. Für den Kommutator des nichtlinearen Hamiltonoperators und des  $\mathcal{PT}$ -Operators ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} [H, \mathcal{PT}]\Psi &= [H_{\text{lin}}, \mathcal{PT}]\Psi + [f(\Psi), \mathcal{PT}]\Psi \\ &= 0 + [f(\Psi), \mathcal{PT}]\Psi \\ &= f(\Psi)\mathcal{PT}\Psi - \mathcal{PT}f(\Psi)\Psi \end{aligned} \quad (2.19)$$

Sofern die Bedingung an das Potential,  $V(\mathbf{r}) = V^*(-\mathbf{r})$ , erfüllt ist, kommutiert der lineare Anteil  $\hat{H}_{\text{lin}}$  mit dem  $\mathcal{PT}$ -Operator. Für den nichtlinearen Anteil ist die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie nur dann erfüllt, wenn die Beziehung  $\mathcal{PT}f(\Psi) = f(\mathcal{PT}\Psi)$  gilt und  $\Psi$  selbst eine  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Funktion ist.

Im nächsten Schritt wird die stationäre Schrödingergleichung für einen nichtlinearen

Hamiltonoperator betrachtet.  $\Psi$  sei hier wieder ein Eigenzustand zum Energieeigenwert  $\mu$ :

$$\hat{H}\Psi = \mu\Psi \quad (2.20a)$$

$$\left(\hat{H}_{\text{lin}} + f(\Psi)\right)\Psi = \mu\Psi \quad (2.20b)$$

Nach Anwendung der  $\mathcal{PT}$ -Operators ergibt sich:

$$\mathcal{PT}\left(\hat{H}_{\text{lin}} + f(\Psi)\right)\Psi = \mathcal{PT}\mu\Psi \quad (2.21a)$$

$$\left(\hat{H}_{\text{lin}} + f(\mathcal{PT}\Psi)\right)\mathcal{PT}\Psi = \mu^*\mathcal{PT}\Psi \quad (2.21b)$$

Ist  $\mu$  reell so sind  $\Psi$  und  $\mathcal{PT}\Psi$  beides Eigenzustände zum gleichen Eigenwert  $\mu$ . Ist  $\mu$  nicht-entartet, muss gelten:  $\mathcal{PT}\Psi = e^{i\phi}\Psi$ . Setzt man diese Beziehung in (2.21a) ein so erhält man:

$$\left(\hat{H}_{\text{lin}} + f(e^{i\phi}\Psi)\right)e^{i\phi}\Psi = \mu e^{i\phi}\Psi \quad (2.22)$$

Die Eigenschaften des linearen Falls gelten also dann weiterhin wenn folgende Anforderungen an die Funktion  $f(\Psi)$  erfüllt sind:

1. Eine Anwendung des  $\mathcal{PT}$ -Operators auf  $f(\Psi)$  ist äquivalent zum Funktionswert von  $f$  an der Stelle  $\mathcal{PT}\Psi$ :

$$\mathcal{PT}f(\Psi) = f(\mathcal{PT}\Psi) \quad (2.23)$$

2. Der nichtlineare Anteil muss unabhängig von der Phase der Wellenfunktion sein:

$$f(\Psi) = f(e^{i\phi}\Psi), \quad \phi \in \mathbb{R} \quad (2.24)$$

Betrachtet man die Gleichungen (2.20b) und (2.21b), so sieht man, dass wenn  $\mu$  ein Eigenwert zum Zustand  $\Psi$  ist, so ist auch für entartete Eigenwerte  $\mathcal{PT}\Psi$  ein Eigenzustand zum Eigenwert  $\mu^*$ . Weiterhin gilt für komplexe Eigenwerte die Aussage, dass Eigenzustände paarweise mit ihren komplex-konjugierten Eigenwerten auftreten und durch Anwendung des  $\mathcal{PT}$ -Operators ineinander übergehen [5]. Ist  $\mu \in \mathbb{R}$ , so sind  $\mathcal{PT}\Psi$  und  $\Psi$  jeweils entartete Zustände. Erfüllt der nichtlineare Anteil des Hamiltonoperators die Bedingungen (2.23) und (2.24) so sieht man, dass für den nichtlinearen Anteil des Hamilton-

operators auch weiterhin die Eigenwerte zu  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Eigenzuständen rein reell sind:

$$\begin{aligned}
 \mu^* (\mathcal{PT}\Psi) &= \left( \hat{H}_{\text{lin}} + f(\mathcal{PT}\Psi) \right) \mathcal{PT}\Psi \\
 &= \left( \hat{H}_{\text{lin}} + f(e^{i\phi}\Psi) \right) e^{i\phi}\Psi \\
 &= e^{i\phi} \left( \hat{H}_{\text{lin}} + f(\Psi) \right) \Psi \\
 &= e^{i\phi} \mu \Psi \\
 &= \mu (\mathcal{PT}\Psi)
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

Dies gilt für entartete und nicht-entartete Eigenwerte gleichermaßen [6].

Zusammenfassend lassen sich über die Eigenschaften nichtlinearer  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systeme folgende Aussagen treffen:

1. Gibt es einen Eigenwert  $\mu$  zum Eigenzustand  $\Psi$ , so ist  $\mu^*$  ein Eigenwert zum Eigenzustand  $\mathcal{PT}\Psi$ .
2. Ein Hamiltonoperator der Form  $\hat{H} = \hat{H}_{\text{lin}} + f(\Psi)$  mit **nicht-entarteten** Eigenwerten, bei dem der lineare Anteil  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch ist und der nichtlineare Anteil  $f(\Psi)$  die Bedingungen (2.23) und (2.24) erfüllt, hat stets reelle Eigenwerte sofern die dazugehörigen Eigenzustände  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch sind. Im nicht-entarteten Fall ist eine Umkehrung der letzten Aussage **möglich**.
3. Ein Hamiltonoperator der Form  $\hat{H} = \hat{H}_{\text{lin}} + f(\Psi)$  mit **entarteten** Eigenwerten bei dem der lineare Anteil  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch ist und der nichtlineare Anteil  $f(\Psi)$  die Bedingungen (2.23) und (2.24) erfüllt, hat stets reelle Eigenwerte, sofern die dazugehörigen Eigenzustände  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch sind. Die Umkehrung der letzten Aussage gilt im Falle entarteter Eigenwerte jedoch **nicht**.



# 3 Bose-Einstein-Kondensate

Unter einem Bose-Einstein-Kondensat versteht man ein makroskopisches Vielteilchen-Quantenphänomen, bei dem alle Teilchen eines System durch eine einzige makroskopische Wellenfunktion beschrieben werden können [9, 10]. Die Möglichkeit eines solchen Zustandes wurde bereits 1924 von Albert Einstein, aufgrund von theoretischen Überlegungen die auf den Arbeiten von Satyendranath Bose über die Quantenstatistik bei Photonen basierten [11], vorhergesagt. Im Gegensatz zu Fermionen, die dem Pauli-Ausschlussprinzip unterliegen und bei denen deshalb immer nur ein Teilchen den selben quantenmechanischen Zustand besetzen kann, kann eine beliebige Anzahl von Bosonen den selben Quantenzustand einnehmen. Für Bosonen erfolgt die Besetzung der verschiedenen Energieniveaus nach der Bose-Einstein-Statistik, danach gilt bei Wechselwirkungsfreiheit folgende Verteilungsfunktion:

$$\langle n(E) \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{k_B T}\right) - 1} \quad (3.1)$$

Das chemische Potential wird hier mit  $\mu$  bezeichnet, wobei für Bosonen stets gilt  $\mu < E$ . Betrachtet man die Verteilung der Bosonen im Limes  $T \rightarrow 0$ , so besetzen alle Teilchen den Grundzustand des Systems. Jedoch zeigt sich, dass bereits bei Temperaturen nahe des absoluten Nullpunkts, bei einer kritischen Temperatur  $T_c$ , eine überwiegende Mehrheit der Teilchen sich im Grundzustand befinden und somit die Bose-Einstein-Kondensation einsetzt [10].

## 3.1 Gross-Pitaevskii Gleichung (GPE)

Die Gross-Pitaevskii-Gleichung, kurz GPE (Gross-Pitaevskii equation), ist eine nicht-lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung, die die Dynamik einer makroskopischen Wellenfunktion im Grundzustand beschreibt. Die GPE ergibt sich aus einer Mean-Field-

Näherung der Schrödingerleichung und unterscheidet sich von dieser durch einen zusätzlichen, nichtlinearen Wechselwirkungsterm, der die Wechselwirkung der Teilchen im Kondensat beschreibt,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U_{\text{ext}} + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}, t) , \quad (3.2)$$

wobei  $U_{\text{ext}}$  für ein externes Potential steht,  $m$  die Masse eines Teilchens im Kondensat beschreibt, sowie  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  die Teilchendichte am Ort  $\mathbf{r}$ . Die Stärke der Wechselwirkung wird durch den Faktor  $g$  berücksichtigt.

### 3.1.1 Herleitung der GPE

Die exakte Dynamik des Bose-Einstein-Kondensat wird durch die Vielteilchen-Schrödingergleichung beschrieben. Der Hamiltonoperator in seiner allgemeinen Form sieht für ein System mit  $N$  Teilchen wie folgt aus:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (3.3)$$

Der erste Term bestimmt die kinetische Energie des Systems, der zweite die potentielle Energie der Teilchen im externen Potential. Der letzte Term beschreibt die Wechselwirkung der Teilchen untereinander. Der Hamiltonoperator entspricht der Gesamtenergie des Systems. Es bietet sich nun an, mit Hilfe der Gesetzmäßigkeiten der Thermodynamik den Gleichgewichtszustand des Systems zu bestimmen. Der gesuchte Grundzustand des Systems findet sich dabei durch Minimierung der Freien Energie  $F = E - \mu N$  [12]. Für die Energie  $E$  des Systems gilt dabei:

$$E = \langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (3.4)$$

Das Kondensat beinhaltet  $N$  Teilchen, zu denen jeweils eine Wellenfunktion  $\psi_i$  korrespondiert. Im Rahmen der Mean-Field-Näherung wird nun angenommen, dass sich alle Teilchen im Grenzfall  $T = 0$  im Einteilchenzustand  $|\psi\rangle$  befinden, der vom 'Mean Field' aller anderen Teilchen beeinflusst wird. Die Gesamtwellenfunktion ergibt sich nun aus dem Tensor-Produkt aller Einteilchenzustände:

$$|\Phi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \dots \dots \dots \otimes |\psi_N\rangle \quad (3.5)$$

Es wird nun folgender Ausdruck minimiert:

$$F = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle - \mu \langle \Phi | \Phi \rangle \quad (3.6)$$

Zuerst wird der Term für die kinetische Energie berechnet:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} | \Phi \rangle &= \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} \int \nabla \psi^*(\mathbf{r}_i) \nabla \psi(\mathbf{r}_i) d^3 \mathbf{r}_i \\ &= N \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \psi(\mathbf{r})|^2 d^3 \mathbf{r} && \text{(Satz von Green)} \\ &= -N \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Der Term für das externe Potential ergibt sich zu:

$$\langle \Phi | \sum_{i=1}^N U_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) | \Phi \rangle = N \int \psi^*(\mathbf{r}) U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (3.8)$$

Für den Wechselwirkungsterm gilt:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) | \Phi \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N \int d^3 \mathbf{r}_i \int d^3 \mathbf{r}_j \psi^*(\mathbf{r}_i) \psi^*(\mathbf{r}_j) V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \psi(\mathbf{r}_i) \psi(\mathbf{r}_j) d^3 \mathbf{r}_i d^3 \mathbf{r}_j \\ &= \frac{N(N-1)}{2} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \psi^*(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \end{aligned} \quad (3.9)$$

Der letzte Term für das chemische Potential  $\mu$  lautet:

$$\langle \Phi | \mu | \Phi \rangle = \mu \left( \int \psi(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \right)^N \quad (3.10)$$

Das Minimum lässt sich nun durch Variation der Freien Energie bestimmen, wobei  $\psi^*(\mathbf{r})$  und  $\psi(\mathbf{r})$  jeweils als unabhängige Variable betrachtet werden. Für den ersten Term ergibt sich daraus:

$$\frac{\delta}{\delta \psi^*} \left[ -N \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \right] = -N \frac{\hbar^2}{2m} \int \delta \psi^* \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (3.11)$$

Für die potentielle Energie gilt:

$$\frac{\delta}{\delta\psi^*} \left[ N \int \psi^*(\mathbf{r}) U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right] = N \int \delta\psi^* U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (3.12)$$

Für den Wechselwirkungsterm und das chemische Potential wird die Tatsache ausgenutzt, dass  $\mathbf{r}$  mit  $\mathbf{r}'$  vertauschbar ist. Dies vereinfacht den Ausdruck für das Wechselwirkungspotential zu:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta\psi^*} \left[ \langle \Phi | \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) | \Phi \rangle \right] = \\ = N(N-1) \int \delta\psi^*(\mathbf{r}) \left( \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' \right) \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (3.13)$$

Für das chemische Potential  $\mu$  ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta\psi^*} \langle \Phi | \Phi \rangle = N \left( \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right)^{N-1} \int \delta\psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ = N \int \delta\psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \end{aligned} \quad (3.14)$$

Nach einsetzen aller Terme ergibt sich für die Variation der Freien Energie:

$$\frac{\delta F}{\delta\psi^*} = N \int \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) + \right. \quad (3.15a)$$

$$\left. (N-1) \left( \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3\mathbf{r}' \right) \psi(\mathbf{r}) - \mu \psi(\mathbf{r}) \right] \delta\psi^*(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = 0 \quad (3.15b)$$

Damit die Gleichung (3.15b) für ein beliebiges  $\delta\psi^*$  erfüllt werden kann, muss der Ausdruck innerhalb der eckigen Klammer verschwinden. Des Weiteren gilt für  $N \gg 1 \rightarrow (N-1) \approx N$ . Die zeitunabhängige GPE lautet somit für einen allgemeinen Wechselwirkungsterm:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}) + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) + N \left( \int |\psi(\mathbf{r}')|^2 V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3\mathbf{r}' \right) \psi(\mathbf{r}) = \mu \psi(\mathbf{r}) \quad (3.16)$$

### GPE mit kurzreichweitiger Wechselwirkung

Für ein System bei geringer Dichte und niedriger Temperatur kann die kurzreichweitige Van-der-Waals Wechselwirkung durch folgendes Pseudopotential angenähert werden [13]:

$$V(\mathbf{r}) = 4\pi\hbar^2 \frac{b}{m} N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (3.17)$$

Die Streulänge  $b$  beschreibt die Stärke der Wechselwirkung zwischen den Teilchen im Kondensat. Für  $b < 0$  ist die Wechselwirkung attraktiv, für  $b > 0$  repulsiv. Setzt man das Pseudopotential in Gleichung (3.16) ein, so erhält man für die GPE folgende Gleichung:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 4\pi\hbar^2 \frac{b}{m} N |\Psi(\mathbf{r})|^2 \right) \Psi(\mathbf{r}) = \mu \Psi(\mathbf{r}) \quad (3.18)$$

## 3.2 Formulierung der Gross-Pitaevskii Gleichung in dimensionslosen Größen

Zum Zwecke der Bestimmung numerischer Lösungen wird aus Vereinfachungsgründen die GPE zuerst in dimensionslosen Größen formuliert. Hierzu wird zuerst eine dimensionslose Ortskoordinate  $\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/b_0$ , mit einer charakteristischen Länge  $b_0$  eingeführt. In dieser Form ergibt sich für die GPE:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2mb_0^2} \tilde{\nabla}^2 + U_{\text{ext}}(\tilde{\mathbf{r}}b_0) + 4\pi\hbar^2 \frac{b}{m} N |\Psi(\tilde{\mathbf{r}}b_0)|^2 \right) \Psi(\tilde{\mathbf{r}}b_0) = \mu \Psi(\tilde{\mathbf{r}}b_0) \quad (3.19)$$

Für die Wellenfunktion gilt dabei:

$$\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}) = \Psi(b_0\tilde{\mathbf{r}}) b_0^{\frac{3}{2}}, \quad (3.20a)$$

da gelten muss:

$$\int |\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}})|^2 d^3\tilde{r} = \int |\Psi(\mathbf{r})|^2 d^3r \quad (3.20b)$$

Die Dimension der Energie wird vereinfacht zu  $E_0 = \frac{\hbar^2}{2mb_0^2}$ . Eingesetzt in die GPE führt dies zu:

$$\left( -E_0 \tilde{\nabla}^2 + U_{\text{ext}}(\tilde{\mathbf{r}}b_0) + 4\pi\hbar^2 \frac{b}{b_0^3 m} N |\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}})|^2 \right) \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}) = \mu \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}) \quad (3.21)$$

Im nächsten Schritt wird die Gleichung durch  $E_0$  geteilt. Hierdurch ergibt sich das chemische Potential in Einheiten von  $E_0$ :

$$\tilde{\mu} = \frac{\mu}{E_0} \quad (3.22)$$

Entsprechend gilt für das Potential:

$$\tilde{U}_{\text{ext}}(\tilde{\mathbf{r}}) = \frac{U_{\text{ext}}(\tilde{\mathbf{r}})}{E_0} \quad (3.23)$$

Die Gross-Pitaevskii Gleichung in dimensionsloses Form lautet somit:

$$\left[ -\tilde{\nabla}^2 + \tilde{U}_{\text{ext}}(\tilde{\mathbf{r}}) + 8\pi \frac{b}{b_0} N |\tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}})|^2 \right] \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}) = \tilde{\mu} \tilde{\Psi}(\tilde{\mathbf{r}}) \quad (3.24)$$

Im letzten Schritt wird der nichtlineare Wechselwirkungsterm durch Einführung des dimensionslosen Faktors  $g$  vereinfacht:

$$g = 8\pi \frac{b}{b_0} N \quad (3.25)$$

Die zeitunabhängige GPE in vereinfachter Form lautet damit:

$$\left[ -\nabla^2 + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + g |\Psi(\mathbf{r})|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}) = \mu \Psi(\mathbf{r}) \quad (3.26)$$

Für eine Zeitskala mit  $t_0 = \frac{\hbar^2}{E_0}$  ergibt sich für die zeitabhängige GPE

$$\left[ -\nabla^2 + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + g |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (3.27)$$

## 3.3 Bogoliubov de Gennes-Gleichungen

### 3.3.1 Herleitung

Aufgrund des nichtlinearen Terms in der GPE ist eine Beschreibung von zeitabhängigen Zuständen durch eine Zeitentwicklung der stationären Zustände nicht mehr möglich. Lösungen der zeitunabhängigen GPE können stabil oder auch instabil bezüglich einer kleinen Störung des Systems sein. Um nun die Dynamik in der Umgebung von kleinen Störungen um eine stationäre Lösung  $\Psi_0$  zu beschreiben wird folgender Ansatz gewählt:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\mu t} (\Psi_0(\mathbf{r}) + \lambda \Theta(\mathbf{r}, t)) \quad (3.28)$$

Dabei bezeichnet  $\Theta(\mathbf{r}, t)$  die Art der Störung, wobei  $|\lambda| \ll 1$  ist und folgende Form angenommen wird:

$$\Theta(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} + v^*(\mathbf{r}) e^{i\omega^* t} \quad (3.29)$$

Im ersten Schritt wird der Ansatz für die Störung (3.29) in die zeitabhängige GPE (3.27) eingesetzt:

$$\begin{aligned} \left[ -\nabla^2 + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + g |e^{-i\mu t} (\Psi_0(\mathbf{r}) + \lambda \Theta(\mathbf{r}, t))|^2 \right] e^{-i\mu t} (\Psi_0(\mathbf{r}) + \lambda \Theta(\mathbf{r}, t)) = \\ i \frac{\partial}{\partial t} [e^{-i\mu t} (\Psi_0(\mathbf{r}) + \lambda \Theta(\mathbf{r}, t))] \end{aligned} \quad (3.30)$$

An Gleichung (3.30) sieht man sofort, dass sich für die Terme mit nullter Ordnung wieder die ursprüngliche GPE ergibt. Für die Terme erster Ordnung ergibt sich:

$$\begin{aligned} & (-\nabla^2 + U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2g|\Psi_0(\mathbf{r})|^2) (u(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + v^*(\mathbf{r})e^{i\omega^*t}) \\ & \quad + g\Psi_0(\mathbf{r})^2 (u^*(\mathbf{r})e^{i\omega^*t} + v(\mathbf{r})e^{-i\omega t}) \\ & = (\mu + \omega)u(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + (\mu - \omega^*)v^*(\mathbf{r})e^{i\omega^*t} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Dies führt auf die Gleichung:

$$e^{-i\mu t} [-\nabla^2\Theta(\mathbf{r}, t) + [U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + 2g|\Psi_0(\mathbf{r})|^2] \Theta(\mathbf{r}, t) + g\Psi_0^2(\mathbf{r})\Theta^*(\mathbf{r}, t)] = i\frac{\partial}{\partial t} (\Theta(\mathbf{r}, t)e^{-i\mu t}) \quad (3.32)$$

Terme mit  $\mathcal{O}(\lambda^2)$  werden aufgrund der sehr kleinen betrachteten Störung des Systems nicht weiter berücksichtigt. Sortiert man nun, die Terme vor  $e^{i\omega^*t}$  und  $e^{-i\omega t}$ , so ergeben sich die Bogoliubov-de Gennes-Gleichungen (BdGE):

$$\nabla^2 u(\mathbf{r}) = [U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu - \omega + 2g|\Psi_0(\mathbf{r})|^2] u(\mathbf{r}) + g\Psi_0(\mathbf{r})^2 v(\mathbf{r}) \quad (3.33)$$

$$\nabla^2 v(\mathbf{r}) = [U_{\text{ext}}^*(\mathbf{r}) - \mu^* + \omega + 2g|\Psi_0(\mathbf{r})|^2] v(\mathbf{r}) + g\Psi_0^*(\mathbf{r})^2 u(\mathbf{r}) \quad (3.34)$$

Die Bogoliubov de Gennes-Gleichungen sind zwei gekoppelte Differentialgleichungen die mathematisch betrachtet ein Eigenwertproblem mit  $\omega$  als Eigenwert darstellen. Die BdGE beschreiben dabei die Dynamik eines Bose-Einstein-Kondensats in der Nähe einer stationären Lösung der GPE. Die Lösungen der BdGE geben Aufschluss über verschiedene Anregungszustände des System. Bei den möglichen Eigenmoden des Bogoliubov-Spektrums  $\omega_i$  handelt es sich um kollektive Anregung aller Teilchen im Kondensat, die insgesamt durch einen quantenmechanischen Zustand beschrieben werden können. Darüber hinaus lassen sich aus der Betrachtung der Eigenwerte Schlüsse über die Stabilität des Systems ziehen. Im Fall  $\text{Im}(\omega) > 0$  entfernt sich das System exponentiell vom stationären Zustand, die Dynamik des BEC ist somit in diesem Fall nicht stabil. Für rein reelle Eigenwerte hingegen bewegt sich das System um die stationären Lösungen und kann daher als stabil betrachtet werden.

### 3.3.2 Verhalten unter Eichtransformation

In Gleichung (3.32) sieht man, dass die Phase von  $\Theta$  nicht einfach frei gewählt werden kann, sondern durch die Phase des zugehörigen stationären Zustandes bestimmt wird.

Betrachtet man eine Lösung von Gleichung (3.32), so zeigt sich das  $\tilde{\Psi}_0 = e^{i\Phi}\Psi_0$  wieder eine Lösung zum selben Eigenwert  $\mu$  ist,

$$|\tilde{\Psi}_0|^2 = |e^{i\Phi}\Psi_0|^2 = |\Psi_0|^2, \quad (3.35)$$

und das Betragsquadrat unverändert bleibt. Die Änderung zeigt sich nur im Summanden,

$$g\Psi_0^2(\mathbf{r})e^{i2\Phi}\tilde{\Theta}^*(\mathbf{r}, t). \quad (3.36)$$

Die globale Phase von  $\Theta$  ist also direkt mit der Phase der stationären Lösung  $\Psi_0$  verknüpft. Wird nun eine Phase frei gewählt, so ist die andere Phase dadurch bestimmt.

Betrachtet man die Gleichung (3.32), so sieht man, dass die BdGE aufgrund ihrer Linearität eine weitere Freiheit besitzen. Sie sind invariant für folgende Transformation von  $u$  und  $v$  :

$$\begin{aligned} \tilde{u}(\mathbf{r}) &= u(\mathbf{r})e^{i\chi} \\ \tilde{v}(\mathbf{r}) &= v(\mathbf{r})e^{i\chi} \end{aligned} \quad (3.37)$$

Diese Freiheit der Wahl von  $\chi$  wird später für die numerische Lösung bestimmt.

### 3.3.3 Symmetrien der BdGE

Es gibt zwei zusätzliche Symmetrien der BdGE:

1. Der verwendete Ansatz  $\Theta(\mathbf{r}, t) = u(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + v^*(\mathbf{r})e^{i\omega^* t}$  ist invariant sofern  $u \rightarrow v^*$  und  $v \rightarrow u^*$  ersetzt werden. Daraus folgt sofort, dass, falls  $\omega$  Eigenwert der BdGE (3.33) und (3.34) mit  $(u, v)$  ist, so tritt  $-\omega^*$  als Eigenwert zu den Eigenfunktionen und  $(v^*, u^*)$  auf.
2. Bei Anwendung des  $\mathcal{PT}$ -Operators auf die Bogoliubov de Gennes-Gleichungen erhält man:

$$\nabla^2 \mathcal{PT}u(\mathbf{r}) = [U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu^* - \omega + 2g\mathcal{PT}|\Psi_0(r)|^2] \mathcal{PT}u(\mathbf{r}) + g\mathcal{PT}(\Psi_0^2(\mathbf{r})) \mathcal{PT}v(\mathbf{r}) \quad (3.38)$$

$$\nabla^2 \mathcal{PT}v(\mathbf{r}) = [U_{\text{ext}}^*(\mathbf{r}) - \mu + \omega^* + 2g\mathcal{PT}|\Psi_0(r)|^2] \mathcal{PT}v(\mathbf{r}) + g\mathcal{PT}(\Psi_0^2(\mathbf{r})) \mathcal{PT}u(\mathbf{r}) \quad (3.39)$$



Ist ein Zustand  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch so gilt  $\mathcal{PT}\Psi_0 = \Psi_0 e^{i\phi}$  und  $\mu^* = \mu$ . Daraus ergibt sich:

$$\nabla^2 \mathcal{PT}u(\mathbf{r}) = [U_{\text{ext}}(\mathbf{r}) - \mu - \omega^* + 2g|\Psi_0(r)|^2] \mathcal{PT}u(\mathbf{r}) + ge^{i2\phi}\Psi_0^2(\mathbf{r})\mathcal{PT}v(\mathbf{r}) \quad (3.40)$$

$$\nabla^2 \mathcal{PT}v(\mathbf{r}) = [U_{\text{ext}}^*(\mathbf{r}) - \mu + \omega^* + 2g|\Psi_0(r)|^2] \mathcal{PT}v(\mathbf{r}) + ge^{-i2\phi}(\Psi_0^*(\mathbf{r}))^2\mathcal{PT}u(\mathbf{r}) \quad (3.41)$$

Ersetzt man  $e^{i\phi}\mathcal{PT}u(\mathbf{r})$  durch  $\tilde{u}(\mathbf{r})$ ,  $e^{-i\phi}\mathcal{PT}v(\mathbf{r})$  durch  $\tilde{v}(\mathbf{r})$  und  $\omega$  durch  $\omega^*$  so ergeben sich wieder die ursprünglichen BdGE. Der Eigenwert  $\omega^*$  tritt also immer zusammen mit dem Eigenwert  $\omega$  auf

Aufgrund dieser beiden Symmetrien der BdGE ist daher für  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zustände eine alleinige Betrachtung von  $\text{Re}(\omega) \geq 0$  und  $\text{Im}(\omega) \geq 0$  ausreichend.



# 4 Bifurkationen

Unter einer Bifurkation versteht man allgemein das Auftreten von qualitativen Zustandsänderungen in nichtlinearen Systemen bei Änderung eines Parameters  $\mu$ . Wird bspw. ein nichtlineares System durch eine Funktion  $f(x(t), \mu)$  beschrieben, so wird die zeitliche Entwicklung  $\dot{x} = f(x(t), \mu)$  durch den Zustand  $x$  des System und einen Parameter  $\mu$  bestimmt. Gibt es nun einen kritischen Wert  $\mu_c$ , bei dem sich das Verhalten des Systems bei Werten  $\mu > \mu_c$  deutlich vom Verhalten bei  $\mu < \mu_c$  unterscheidet, so bezeichnet man  $\mu_c$  als Bifurkationspunkt des Systems. Von einer „qualitativen“ Änderung spricht man dann, wenn für zwei Parameterwerte  $\mu_1$  und  $\mu_2$  die Systeme  $f(x(t), \mu_1)$  und  $f(x(t), \mu_2)$  nicht mehr zueinander topologisch äquivalent sind. Ein Beispiel hierfür sind gebundene Lösungen, die sich ab einem bestimmten Wert für  $\mu$  in divergente Lösungen entwickeln. Im Folgenden wird anhand von zwei einfachen Beispielen jeweils die Tangenten- und Heugabelbifurkation erklärt. Beide Bifurkationstypen treten in den Spektren eines Bose-Einstein-Kondensats in einem Doppel- $\delta$ -Potential auf.

## 4.1 Tangentenbifurkation

Es wird eine einfache gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung betrachtet:

$$\dot{x} = f_1(x, \mu) = \mu - x^2 \quad (4.1)$$

Die stationären Lösungen ergeben sich dabei zu:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \mu - x^2 \\ 0 &= \mu - x^2 \\ x_{1/2} &= \pm\sqrt{\mu} \end{aligned} \quad (4.2)$$

Man sieht an Lösung (4.2) sofort, dass nur für positive  $\mu$  reelle stationäre Lösungen für  $x$  existieren. Für  $\mu < 0$  sind die Lösungen komplex. An der Bifurkation bei  $\mu = 0$

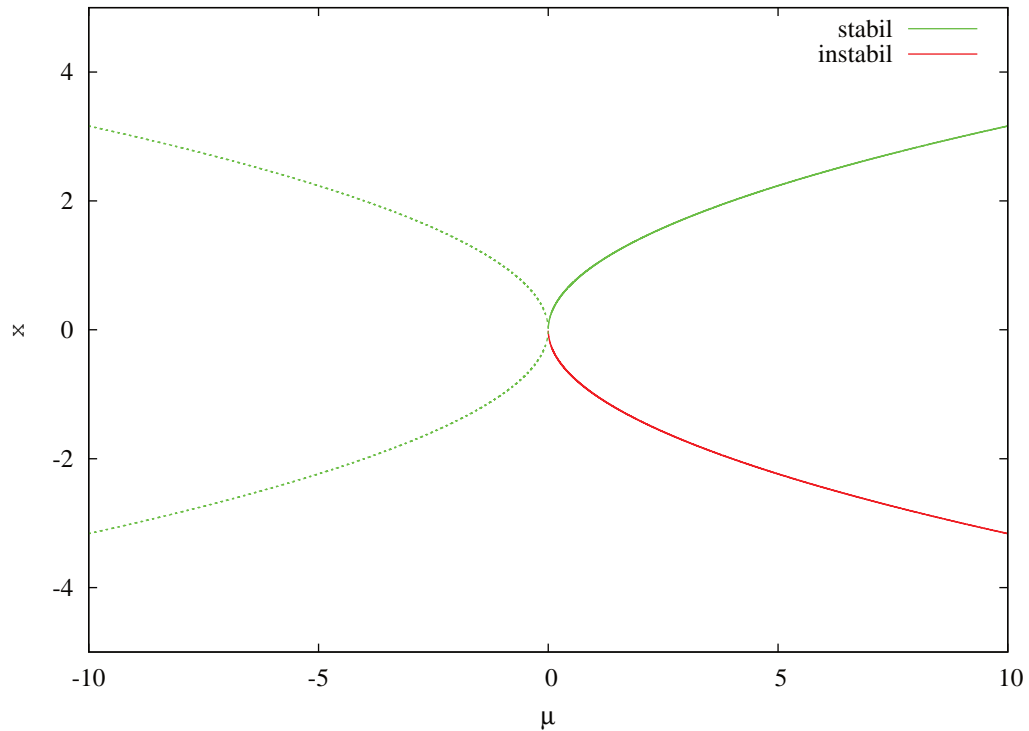


Abbildung 4.1: Die Abbildung zeigt das Bifurkationsdiagramm für Gleichung (4.1). Die reellen Lösungen entsprechen durchgezogenen, die imaginären Lösungen gestrichelten Linien. Die Stabilität der jeweiligen Lösung wird farblich gekennzeichnet. Die verschwindenden reellen und imaginären Lösungen werden aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht extra geplottet. Bei  $\mu = 0$  durchlaufen die Lösungen eine Tangentenbifurkation

treffen sich beide Lösungen. Abbildung 4.1 zeigt die nicht verschwindenden Real- und Imaginärteile der stationären Lösungen zu Gleichung (4.1).

Um die Stabilität der Lösung zu untersuchen, werden die stationären Lösung bei einer kleinen Störungen  $\delta = \mathbf{x}(t) - \mathbf{x}_R$  untersucht, wobei  $\mathbf{x}_R$  die Ruhelage des Systems bezeichnet. Bei einem linearen System kann die Störung vollständig durch die Jacobi-Matrix der ersten Ableitung ausgedrückt werden. Im nichtlinearen Fall kann das System durch eine Taylorentwicklung linearisiert werden. Die Zeitentwicklung der Störung wird in beiden Fällen beschrieben durch  $\dot{\delta} = \mathbf{J}(\mathbf{x}_R)\delta$ . Im hier betrachteten eindimensionalen Fall

entspricht die Jakobimatrix einfach der ersten Ableitung an der Stelle  $\mathbf{x}_R$ . Daraus folgt für die Differentialgleichung (4.1):

$$\frac{\partial f_1(x, \mu)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} (\mu - x^2) = -2x \quad (4.3)$$

Für die reellen Lösungen  $x_1$  und  $x_2$  für  $\mu > 0$  ergeben sich dann:

$$\left. \frac{\partial f_1(x, \mu)}{\partial x} \right|_{x=+\sqrt{\mu}} = -2\sqrt{\mu}, \quad \left. \frac{\partial f_1(x, \mu)}{\partial x} \right|_{x=-\sqrt{\mu}} = +2\sqrt{\mu}, \quad (4.4)$$

sowie für imaginären Lösungen  $x_1$  und  $x_2$  für  $\mu < 0$ :

$$\left. \frac{\partial f_1(x, \mu)}{\partial x} \right|_{x=+i\sqrt{\mu}} = -2i\sqrt{\mu}, \quad \left. \frac{\partial f_1(x, \mu)}{\partial x} \right|_{x=-i\sqrt{\mu}} = 2i\sqrt{\mu} \quad (4.5)$$

Für  $\mu < 0$  sind die Lösungen  $x_1$  und  $x_2$  rein imaginär und stabil. Für  $\mu > 0$  sind die Lösungen reell. Für die reelle Lösung  $x_1$  gilt  $\partial_x f_1 < 0$ , dies führt auf eine stabile Lösung, da die Auslenkung klein bleibt und die gestörte Lösung  $x(t)$  gegen die Ruhelage  $x_R(t)$  konvergiert. Für  $x_2$  ist die reelle Lösung hingegen nicht stabil, da  $\partial_x f_1 > 0$  ist und somit die  $x(t)$  nicht gegen  $x_R(t)$  konvergiert. Das zugehörige Bifurkationsdiagramm ist in Abbildung 4.1 dargestellt.

## 4.2 Heugabelbifurkation

Für eine Heugabelbifurkation wird folgende Differentialgleichung betrachtet:

$$\dot{x} = f_2(x, \mu) = \mu x - x^3 \quad (4.6)$$

Für die stationären Lösungen ergeben sich:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \mu x - x^3 \\ 0 &= \mu x - x^3 \\ x_1 &= 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$x_2 = \sqrt{\mu} \quad (4.8)$$

$$x_3 = -\sqrt{\mu} \quad (4.9)$$

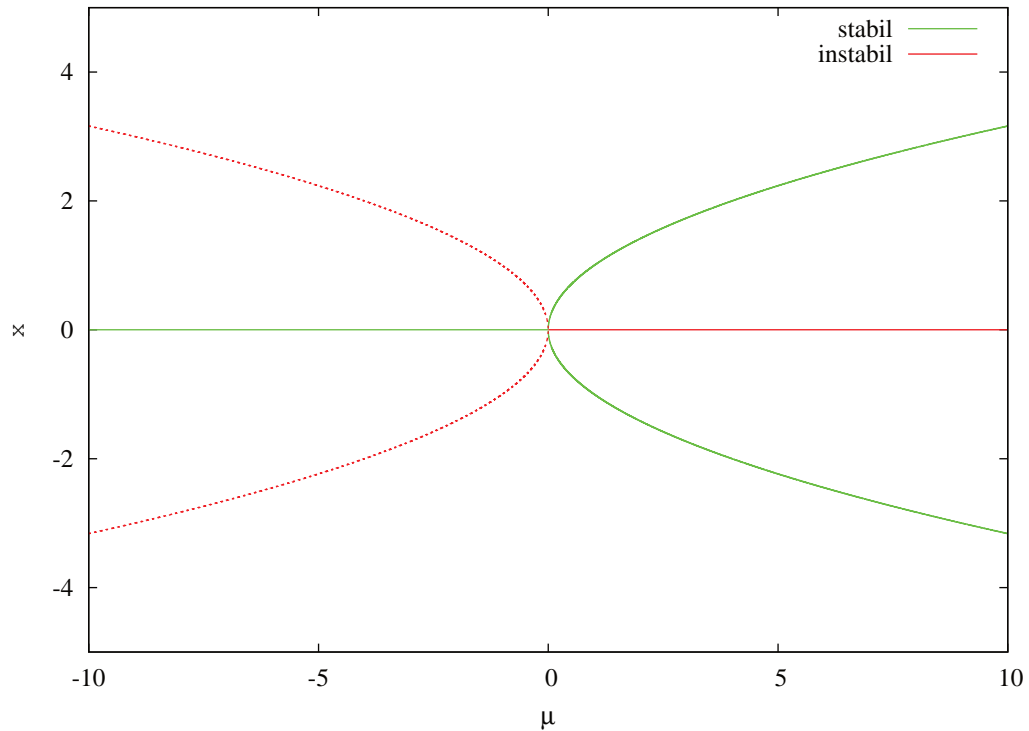


Abbildung 4.2: Die Abbildung zeigt das Bifurkationsdiagramm für Gleichung (4.6). Die reellen Lösungen entsprechen durchgezogenen, die imaginären Lösungen, gestrichelten Linien. Die Stabilität der jeweiligen Lösung wird farblich gekennzeichnet. Die verschwindenden reellen und imaginären Lösungen werden, abgesehen von der Lösung  $x = 0$ , aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht extra geplottet. Bei  $\mu = 0$  durchlaufen die Lösungen eine Heugabelbifurkation

Die Lösung  $x_1$  ist hier für alle  $\mu \in \mathbb{R}$  reel. Für  $x_2$  und  $x_3$  sind die Lösung für  $\mu > 0$  rein reell, für  $\mu < 0$  dagegen rein imaginär. Für die Betrachtung der Stabilität werden wieder die Ableitungen betrachtet:

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} = \mu - 3x^2$$

$$\left. \frac{\partial f_1}{\partial x} \right|_{x_1=0} = \mu \quad (4.10)$$

$$\left. \frac{\partial f_1}{\partial x} \right|_{x_2=\sqrt{\mu}} = -2\mu \quad (4.11)$$

$$\left. \frac{\partial f_1}{\partial x} \right|_{x_3=-\sqrt{\mu}} = -2\mu \quad (4.12)$$

Für  $x_1$  hängt die Stabilität der Lösung von  $\mu$  ab. Ist  $\mu > 0$  ist die Lösung instabil, für  $\mu < 0$  dagegen stabil. Für  $x_3$  und  $x_2$  sind die Lösungen für  $\mu > 0$  aufgrund der negativen Ableitung stabil. Für  $\mu < 0$  werden die Lösungen dagegen wieder instabil.





# 5 Stabilitätslücke für Bose-Einstein-Kondensate im $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Doppel- $\delta$ -Potential

## 5.1 Gross-Pitaevskii Gleichung

Im Folgendem wird das Verhalten eines Bose-Einstein-Kondensats in einem eindimensionalen  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Doppel- $\delta$ -Potential behandelt. Für den Imaginärteil gilt dabei  $\text{Im } V(-x) = -\text{Im } V(x)$ . Der Imaginärteil des Potentials wird, wie in Kapitel 2 erläutert wird, physikalisch als Teilchenquelle bzw. Senke für das Ein- bzw. Auskoppeln von Teilchen im Kondensat interpretiert. Es wird dabei folgendes Doppel- $\delta$ -Potential betrachtet:

$$V(x) = -(1 - i\gamma) \delta(x - b) - (1 + i\gamma) \delta(x + b) \quad (5.1)$$

Der Realteil des Potentials beschreibt zwei symmetrische, unendlich dünne, attraktive Potentialmulden im Abstand  $2b$ . Der Imaginärteil ist auf der linken Seite bei  $-b$  kleiner null und modelliert damit eine Senke an der Teilchen ausgekoppelt werden. Der Imaginärteil auf der rechten Seite bei  $+b$  ist größer null und stellt dementsprechend eine Quelle dar, an der Teilchen eingekoppelt werden. Beim Ein- bzw. Auskoppeln wird die Stärke der Gewinn- bzw. Verlustterme durch den Faktor  $\gamma$  bestimmt, wobei  $\gamma \in \mathbb{R}$  gilt. Setzt man nun das Potential in die dimensionslose zeitunabhängige GPE aus (3.26) ein, so erhält man:

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} - (1 - i\gamma) \delta(x - b) - (1 + i\gamma) \delta(x + b) + g|\Psi(x)|^2 \right] \Psi(x) = \mu\Psi(x)$$

bzw. mit  $\mu = -\kappa^2$

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} - (1 - i\gamma) \delta(x - b) - (1 + i\gamma) \delta(x + b) + g|\Psi(x)|^2 \right] \Psi(x) = -\kappa^2 \Psi(x) \quad (5.2)$$

Außerhalb der  $\delta$ -Peaks bei  $x = \pm b$  verschwindet das externe Potential. Hier vereinfacht sich die Gleichung (5.2) zu:

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} - g|\Psi(x)|^2 \right] \Psi(x) = -\kappa^2 \Psi(x) \quad (5.3)$$

Die ausschließliche Wirkung des Potentials in den  $\delta$ -Peaks wird jeweils separat betrachtet. Für den Bereich bei  $-b - \epsilon < x < -b + \epsilon$  gilt für die GPE:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-b-\epsilon}^{-b+\epsilon} \left[ -\frac{d^2}{dx^2} - (1 - i\gamma) \delta(x - b) - (1 + i\gamma) \delta(x + b) - g|\Psi(x)|^2 \right] \Psi(x) dx \\ = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-b-\epsilon}^{-b+\epsilon} -\kappa^2 \Psi(x) dx \end{aligned} \quad (5.4)$$

Es wird um einen kleinen Bereich  $\pm\epsilon$  um den  $\delta$ -Peak bei  $-b$  integriert. Da die Wellenfunktion selbst kontinuierlich sein soll, verschwinden die Terme des Integrals, die diese enthalten, im Limes  $\epsilon \rightarrow 0$ . Die Sprungbedingungen für die Ableitungen lassen sich dabei wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-b-\epsilon}^{-b+\epsilon} \left[ -\frac{d^2}{dx^2} - (1 + i\gamma) \delta(x + b) \right] \Psi(x) dx &= 0 \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [ -(\Psi'(-b + \epsilon) - \Psi'(-b - \epsilon))] - (1 + i\gamma) \Psi(-b) &= 0 \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [ -\Psi'(-b + \epsilon) + \Psi'(-b - \epsilon)] - (1 + i\gamma) \Psi(-b) &= 0 \\ -\Psi'_2(-b) + \Psi'_1(-b) - (1 + i\gamma) \Psi_{1,2}(-b) &= 0 \\ \Psi'_1(-b) - \Psi'_2(-b) &= (1 + i\gamma) \Psi_{1,2}(-b) \end{aligned}$$

Dabei bezeichnet  $\Psi'_1$  die Ableitung der Wellenfunktion im Bereich  $-\infty$  bis  $-b$ , sowie  $\Psi'_2$  die Wellenfunktion im Bereich  $-b$  bis  $+b$ . Für den  $\delta$ -Peak bei  $x = +b$  wird analog zu (5.4) vorgegangen, wobei  $\Psi'_3$  die Ableitung der Wellenfunktion im Bereich  $b$  bis  $\infty$  beschreibt. Insgesamt ergeben sich somit folgende Sprungbedingungen für die stationären Lösungen der GPE:

$$\Psi'_1(-b) - \Psi'_2(-b) = (1 + i\gamma) \Psi_{1,2}(-b) \quad (5.5)$$

$$\Psi'_2(b) - \Psi'_3(b) = (1 - i\gamma) \Psi_{2,3}(b) \quad (5.6)$$

### 5.1.1 Numerische Methode zur Lösung der GPE für das Doppel- $\delta$ -Potential

In dieser Arbeit werden numerisch die Lösungen der Gross-Pitaevskii Gleichung bestimmt. Die GPE ist in diesem Falle eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung deren Lösung durch den Eigenwert  $\kappa$  und den Parameter  $\gamma$  des Potentials bestimmt wird. Die stationäre Lösung  $\Psi(x)$  der GPE muss dabei folgende Bedingungen erfüllen:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Psi(\infty) &= 0 & \operatorname{Re} \Psi(-\infty) &= 0 & \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx &= 1 \\ \operatorname{Im} \Psi(\infty) &= 0 & \operatorname{Im} \Psi(-\infty) &= 0 & & \end{aligned} \quad (5.7)$$

Da  $\Psi$  im Allgemeinen komplex ist, müssen sowohl der Real- als auch der Imaginärteil im Unendlichen auf null abfallen. Darüber hinaus muss für eine physikalisch sinnvolle Lösung die Norm der Wellenfunktion eins ergeben. Aufgrund der Symmetrie des Problems wird jeweils von  $x = 0$  beginnend separat von 0 bis  $-\infty$  und von 0 bis  $\infty$  numerisch ausintegriert. Da nur die richtige Wahl der Startwerte und des Eigenwertes  $\kappa$  die Lösung liefert, die die in (5.7) genannten Bedingungen erfüllt, lässt sich das Problem auf eine Nullstellensuche reduzieren. Da wie in (2.5) beschrieben die globale Phase der Wellenfunktion frei wählbar ist, wird der Imaginärteil der Wellenfunktion bei  $x = 0$  immer auf null gesetzt und das Problem wird auf fünf Startwerte reduziert. Es müssen somit folgende Startwerte vorgegeben werden:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \Psi(0) \\ \operatorname{Re} \Psi'(0) \\ \operatorname{Im} \Psi'(0) \\ \operatorname{Re} \kappa \\ \operatorname{Im} \kappa \end{aligned} \quad (5.8)$$

In einem ersten Schritt werden für die Startwerte geeignete Werte geschätzt. Nach Integration der Wellenfunktion werden die Bedingungen in (5.7) überprüft. Sind die Abweichungen außerhalb einer vorgegebenen Toleranz werden die Startwerte variiert und die Integration erneut durchgeführt. Dieser Vorgang wird dabei so oft wiederholt, bis die errechnete Wellenfunktion innerhalb der Toleranz liegt. Für das Ausintegrieren der Wellenfunktion wird der ZVODE-Integrator aus dem ODEPACK von Scientific Python verwendet. Die Nullstellen werden jeweils mit Hilfe des mehrdimensionalen Newtonverfahrens bestimmt.

## 5.1.2 Stationäre Lösungen der Gross-Pitaevskii Gleichung

### Linearer Fall

In diesem Abschnitt wird die GPE zuerst ohne Nichtlinearität, also für den Fall  $g = 0$  betrachtet. Die GPE für das Doppel- $\delta$ -Potential vereinfacht sich damit zu folgender Schrödingerleichung:

$$\left[ -\frac{d^2}{dx^2} - (1 + i\gamma) \delta(x + b) - (1 - i\gamma) \delta(x - b) \right] \Psi(x) = -\kappa^2 \Psi(x), \quad (5.9)$$

wobei weiterhin  $\mu = -\kappa^2$  gilt. Abbildung 5.1 zeigt die Real- und Imaginärteile von  $\kappa$  in Abhängigkeit des Potentialparameters  $\gamma$ . Man erkennt, dass bis zum Bifurkationspunkt  $\gamma_c \approx 0.4005$  die Energieeigenwerte rein reell sind und nach der Bifurkation komplex werden. Es gibt somit einen Bereich für  $\gamma \leq \gamma_c$  bei dem die Lösungen der GPE Eigenzustände des  $\mathcal{PT}$ -Operators sind. Für Werte  $\gamma > \gamma_c$  werden die Energieeigenwerte komplex und die Lösungen sind nicht länger  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch. Man erkennt zudem, dass es sich im linearen Fall um eine, wie in Kapitel 4 beschriebene, Tangentenbifurkation handelt.

Abbildung 5.2 zeigt die Wellenfunktion jeweils an einem Punkt vor und nach der Bifurkation. Die Abbildung 5.2(a) zeigt beispielhaft die Lösung der GPE vor der Bifurkation bei  $\gamma = 0.400$ . Man erkennt, dass die Wellenfunktion einen symmetrischen Realteil und einen antisymmetrischen Imaginärteil besitzt. Das dazugehörige Betragsquadrat der Funktion ist dementsprechend wieder eine symmetrische Funktion (siehe Abbildung 5.2(c)). Abbildung 5.2(c) zeigt die Lösung kurz nach der Bifurkation bei  $\gamma = 0.401$ . Der Realteil der Wellenfunktion ist nicht länger symmetrisch und die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie (siehe Abbildung 5.2(d)) ist gebrochen. Direkt an der Bifurkation sind die Wellenfunktionen identisch. Es handelt sich hier um einen exzeptionellen Punkt [5].

### Nichtlinearer Fall

Für nicht-verschwindende Nichtlinearitäten wird im Folgenden für das eindimensionale Doppel- $\delta$ -Potential mit repulsiver Wechselwirkung, also  $g > 0$ , die Gleichung (5.2) numerisch gelöst:

Die Abbildungen 5.3(a) und 5.3(b) zeigen jeweils die Real- und Imaginärteile der Energieeigenwerte für verschieden starke Nichtlinearitäten. Für den Fall größer werdender Werte

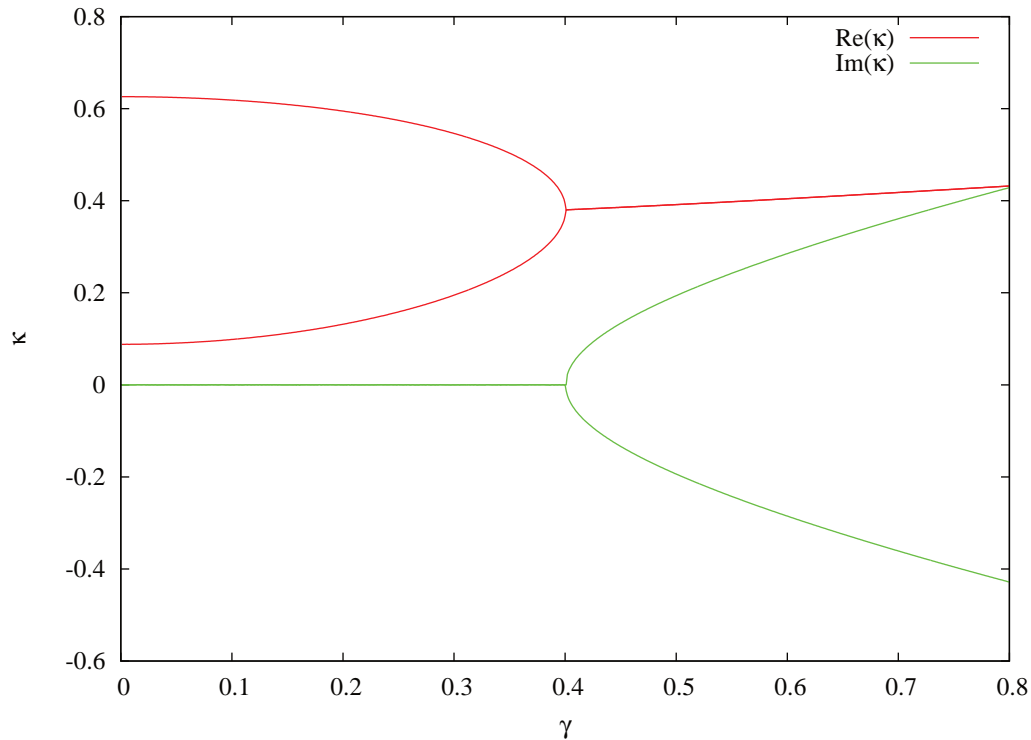
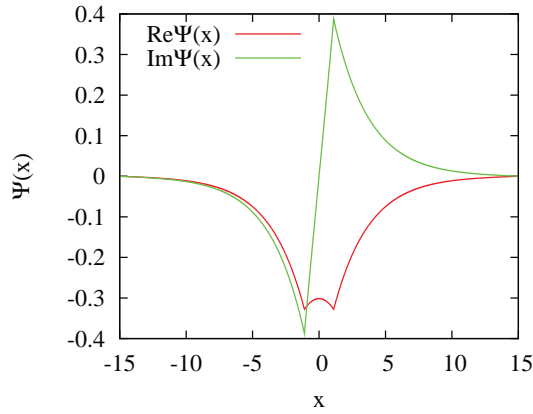
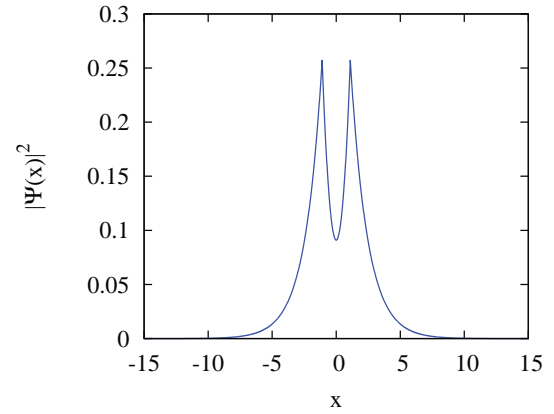


Abbildung 5.1: Tangentenbifurkation für den linearen Fall  $g = 0$ . Unterhalb des Bifurkationspunkts bei  $\gamma_c \approx 0.4005$  sind die Eigenwerte  $\kappa$  rein reell, oberhalb davon wird  $\kappa$  komplex

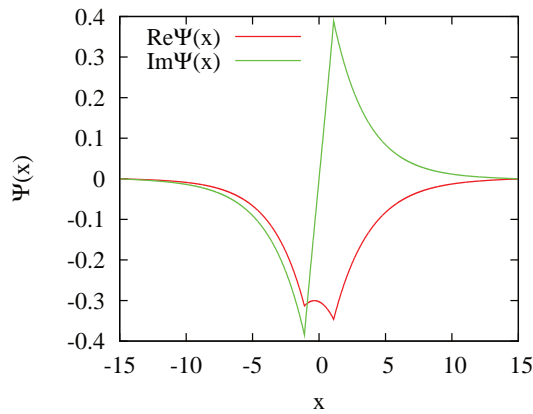
für  $g$  zeigt sich, dass sich der Verzweigungspunkt, an dem die beiden Lösungen mit komplexen  $\kappa$  entstehen, sowohl für den Real- wie auch Imaginärteil der Energieeigenwerte, zu kleineren Werten für  $\gamma$  verschiebt. Bis zur Verzweigung existieren weiterhin ausschließlich  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Lösungen. An der Verzweigung spalten sich dann Lösungen vom angeregten Zustand ab. Zwischen dem Verzweigungspunkt und dem exzeptionellen Punkt  $\gamma_c$  existieren nun gleichzeitig sowohl  $\mathcal{PT}$ -symmetrische, als auch  $\mathcal{PT}$ -gebrochene Lösungen. Abbildung 5.4 zeigt zwei mögliche Lösungen der Wellenfunktion für den Fall  $g = 0.2$  und  $\gamma = 0.4$ , sowie die jeweils dazugehörige Wahrscheinlichkeitsdichte. Abbildung 5.4(a) zeigt die  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Lösung. Abbildung 5.4(c) zeigt dementsprechend für den gleichen Wert für  $\gamma$  die gebrochene Lösung mit dazugehörigem Betragsquadrat der Funktion. Für den Bereich  $\gamma > \gamma_c$  existieren dann wiederum nur noch gebrochene Zustände.



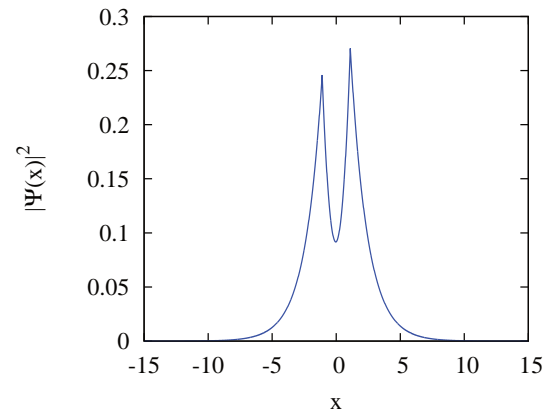
(a)  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Wellenfunktion bei  $\gamma = 0.400$



(b) Betragsquadrat der  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Wellenfunktion bei  $\gamma = 0.400$



(c)  $\mathcal{PT}$ -gebrochene Wellenfunktion bei  $\gamma = 0.401$



(d) Betragsquadrat der  $\mathcal{PT}$ -gebrochenen Wellenfunktion bei  $\gamma = 0.401$

Abbildung 5.2: Darstellung der Wellenfunktionen, sowie des jeweiligen Betragsquadrates  $|\Psi(x)|^2$  für den linearen Fall  $g = 0$  bei unterschiedlichen Werten für den Potentialparameter  $\gamma$  jeweils vor und nach der Bifurkation

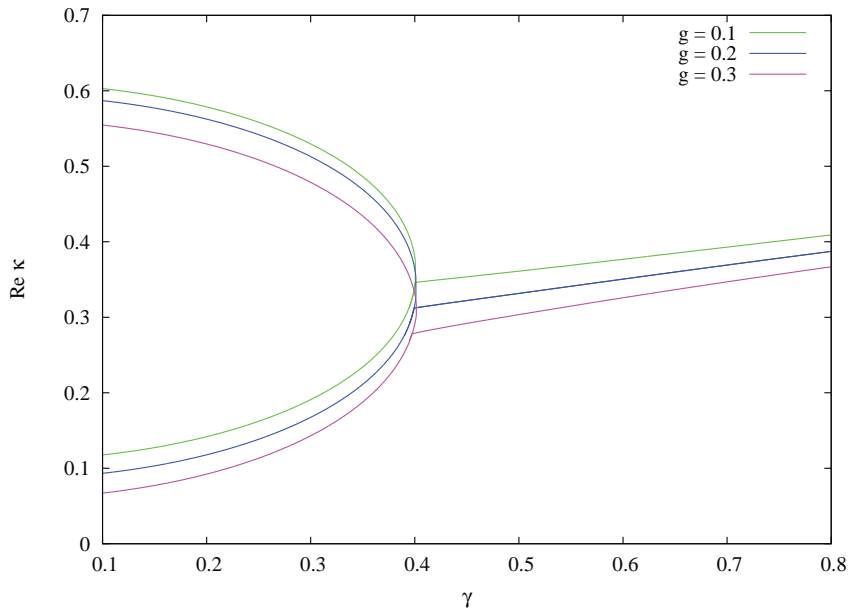
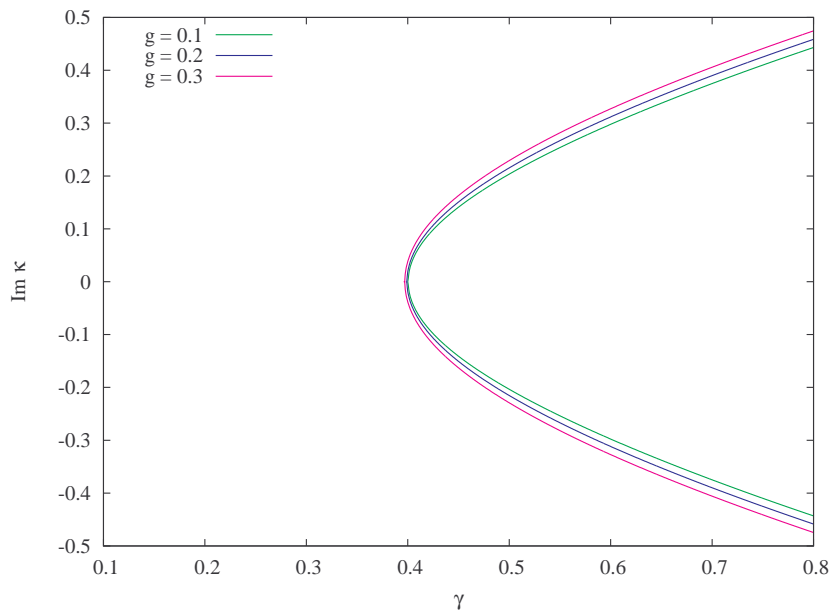
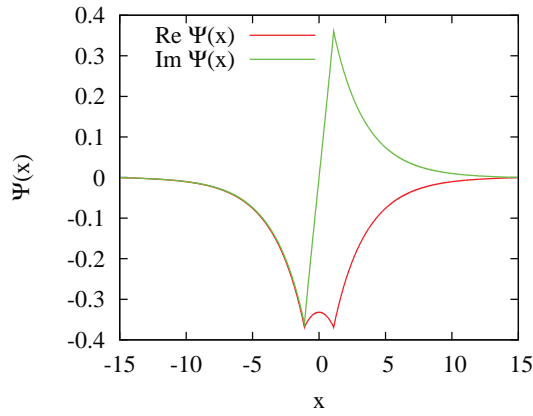
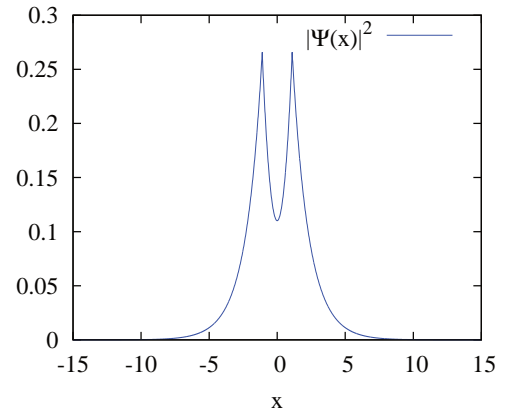
(a) Realteil von  $\kappa$ (b) Imaginärteil von  $\kappa$ 

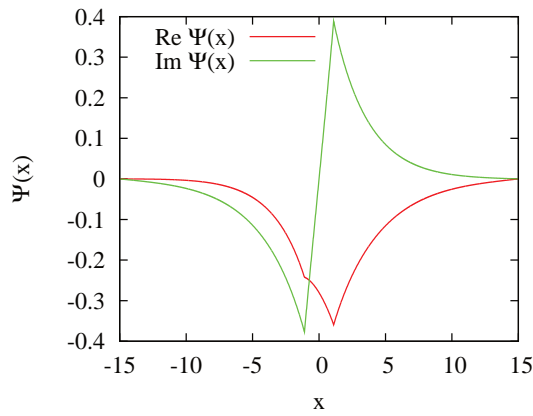
Abbildung 5.3: Real- (a) und Imaginärteil (b) von  $\kappa$  für verschiedene Stärken der Nichtlinearität. Die Realteile werden für zunehmende  $g$  zu niedrigeren Werten verschoben. Der Schnittpunkt zwischen gebrochenen und  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zuständen verschiebt sich hin zu kleineren Werten für  $\gamma$ . Es entsteht ein Bereich, in dem  $\mathcal{PT}$ -symmetrische und gebrochene Lösungen gleichzeitig existieren.



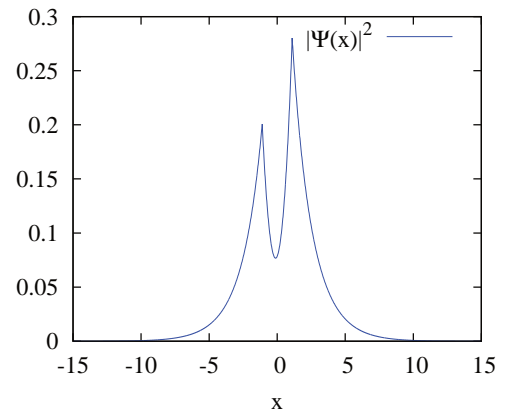
(a)  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Wellenfunktion



(b) Betragsquadrat der  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Wellenfunktion



(c) Gebrochene Wellenfunktion



(d) Betragsquadrat der  $\mathcal{PT}$ -gebrochenen Wellenfunktion

Abbildung 5.4:  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Lösung des angeregten Zustandes, sowie die  $\mathcal{PT}$ -gebrochene Lösung für  $\text{Im } \kappa > 0$ , bei  $g = 0.2$  und  $\gamma = 0.4$



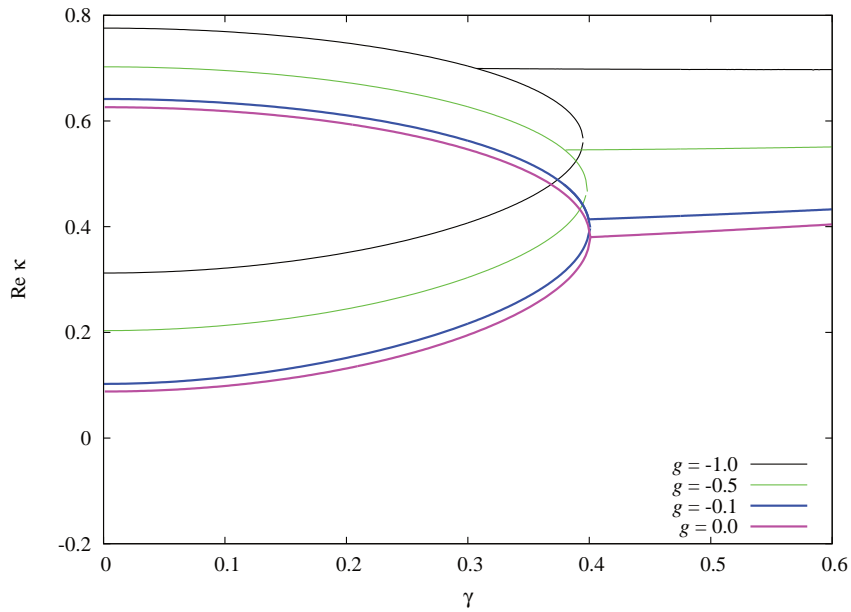
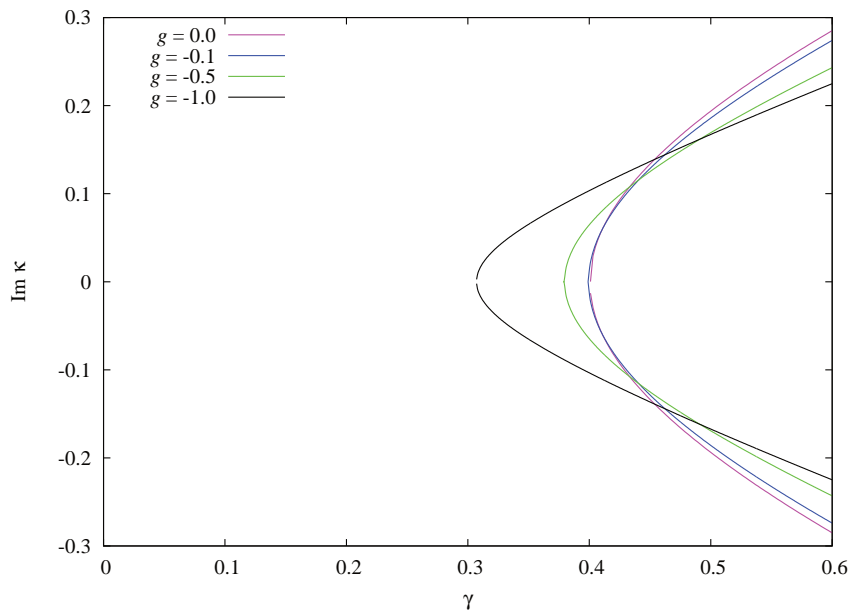
(a) Realteil von  $\kappa$ (b) Imaginärteil von  $\kappa$ 

Abbildung 5.5: Real-(a) und Imaginärteil (b) von  $\kappa$  für verschiedene Stärken der Nichtlinearität bei attraktiver Wechselwirkung. Die Realteile werden im attraktiven Fall für zunehmende negative  $g$  zu höheren Werten verschoben. Der Schnittpunkt zwischen gebrochenen und  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zuständen verschiebt sich analog zum repulsiven Fall hin zu kleineren Werten für  $\gamma$ .

Abbildung 5.5 zeigt die Real- und Imaginärteile des Energieeigenwerte  $\kappa$  für den Fall  $g \leq 0$  und damit für eine attraktive kurzreichweitige Wechselwirkung. Die stationären Lösungen verhalten sich für den attraktiven Fall qualitativ gleich wie für den Fall  $g > 0$ . Im Gegensatz zum repulsiven Fall werden jedoch die Realteile von  $\kappa$  hin zu größeren Werten verschoben. Es zeigt sich, dass die numerische Bestimmung der stationären Lösungen deutlich stabiler verläuft als im repulsiven Fall, da hier die Realteile für  $\kappa$  für größer werdende  $g$  gegen sehr kleine Werte verschoben werden. Da sich die Lösungen in beiden Fällen qualitativ gleich verhalten, aber der attraktive Fall numerisch leichter zu behandeln ist, wird im Folgenden nur noch der Fall für  $g < 0$  betrachtet.

## 5.2 Stabilitätsanalyse der stationären Zustände

### 5.2.1 Bogoliubov de Gennes-Gleichungen des BEC im Doppel- $\delta$ -Potential

Die Frage inwieweit Lösungen der zeitunabhängigen GPE stabil bzw. instabil bezüglich einer kleinen Störung sind, ist bspw. für die experimentelle Realisierung wichtig, da hierfür nur stabile Zustände in Frage kommen. Für die Stabilitätsanalyse der stationären Zustände werden die Eigenwerte  $\omega$  der Bogoliubov de Gennes-Gleichungen betrachtet (siehe Abschnitt 3.3.1). Die Lösungen der GPE sind daher nur als stabil zu betrachten, solange  $\text{Im } \omega = 0$  gilt. Setzt man für den nichtlinearen Fall das Doppel- $\delta$ -Potential aus (5.1) in die BdGE ein so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2}u(\mathbf{x}) = & \left[ - (1 + i\gamma) \delta(x + b) - (1 - i\gamma) \delta(x - b) \right. \\ & \left. + \kappa^2 - \omega + 2g|\Psi_0(x)|^2 \right] u(x) + g\Psi_0(x)^2 v(x) \end{aligned} \quad (5.10a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2}v(\mathbf{x}) = & \left[ - (1 - i\gamma) \delta(x + b) - (1 + i\gamma) \delta(x - b) \right. \\ & \left. + (\kappa^2)^* + \omega + 2g|\Psi_0(x)|^2 \right] v(x) + g\Psi_0^*(x)^2 u(x) \end{aligned} \quad (5.10b)$$

Zur numerischen Lösung der BdGE wird das gleiche Verfahren verwendet wie für die Lösung der GPE. Im Falle der Bogoliubov de Gennes- Gleichungen handelt es sich jedoch um zwei gekoppelte Differentialgleichungen, wodurch sich die Anzahl der Startwerte im

Vergleich zur numerischen Berechnung der GPE deutlich erhöht. Wie bei der Lösung der GPE wird durch die freie Wahl der Phase (3.39) die Anzahl der Startwerte um eins reduziert. Für die Lösung der BdGE wurde in dieser Arbeit immer  $\text{Im } v(0) = 0$  gesetzt. Es ergeben sich somit die folgenden neun Startparameter:

$$\begin{array}{cccc}
 \text{Re } u(0) & \text{Re } v(0) & \text{Im } u(0) & \\
 \text{Re } u'(0) & \text{Re } v'(0) & \text{Im } u'(0) & \text{Im } v'(0) \\
 \text{Re } \omega & \text{Im } \omega & & 
 \end{array} \tag{5.11}$$

Die Bedingungen, die an physikalisch sinnvolle Lösungen gestellt werden sind analog zu denen für die GPE, wobei sich auch hier die Anzahl von fünf auf neun erhöht:

$$\begin{array}{cccc}
 \text{Re } u(\infty) = 0 & \text{Re } v(\infty) = 0 & \text{Re } u(-\infty) = 0 & \text{Re } v(-\infty) = 0 \\
 \text{Im } u(\infty) = 0 & \text{Im } v(\infty) = 0 & \text{Im } u(-\infty) = 0 & \text{Im } v(-\infty) = 0 \\
 \int_{-\infty}^{\infty} |\Theta(t=0)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |u(x) + v^*(x)|^2 dx = 1 & & & 
 \end{array} \tag{5.12}$$

Die Normierung aus (5.12) garantiert, dass die Fluktation die durch  $\Theta$  beschrieben wird, die Randbedingungen an die stationäre Lösung  $\Psi_0$  nicht verändert und die Fluktation die Normierbarkeit der Wellenfunktion nicht verletzt. Die Wahl einer Norm für  $\Theta$  ist willkürlich möglich. Es wird beispielhaft der nichtlineare Fall für  $g = -1.0$  betrachtet. Abbildung 5.6 zeigt die dazugehörigen Real- und Imaginärteile für  $\kappa$ . Die schwarze senkrechte Linie zeigt dabei den Bifurkationspunkt, an dem die sich die gebrochenen Lösungen vom Grundzustand abspalten. Das Bifurkationsdiagramm zeigt hier teilweise die Struktur einer Heugabelbifurkation. Der Unterschied zu der in Kapitel 4 beschriebenen Heugabelbifurkation liegt in den beiden fehlenden reellen Lösungen. Der Grund hierfür liegt hier im nichtanalytischen Term  $g|\Psi_0|^2$  der GPE [5, 6]. Eine Möglichkeit, die reellen Lösung zu bestimmen, besteht dabei in der Verwendung bikomplexer Zahlen [5, 6] auf die im Folgenden jedoch nicht näher eingegangen wird. Bei Berücksichtigung dieser reellen Lösungen zeigt sich somit das vollständige, wie in Kapitel 4.2 beschriebene, Verhalten einer Heugabelbifurkation. Es ist deshalb davon auszugehen, dass ein Stabilitätswechsel, exakt an der Bifurkation erfolgen sollte.

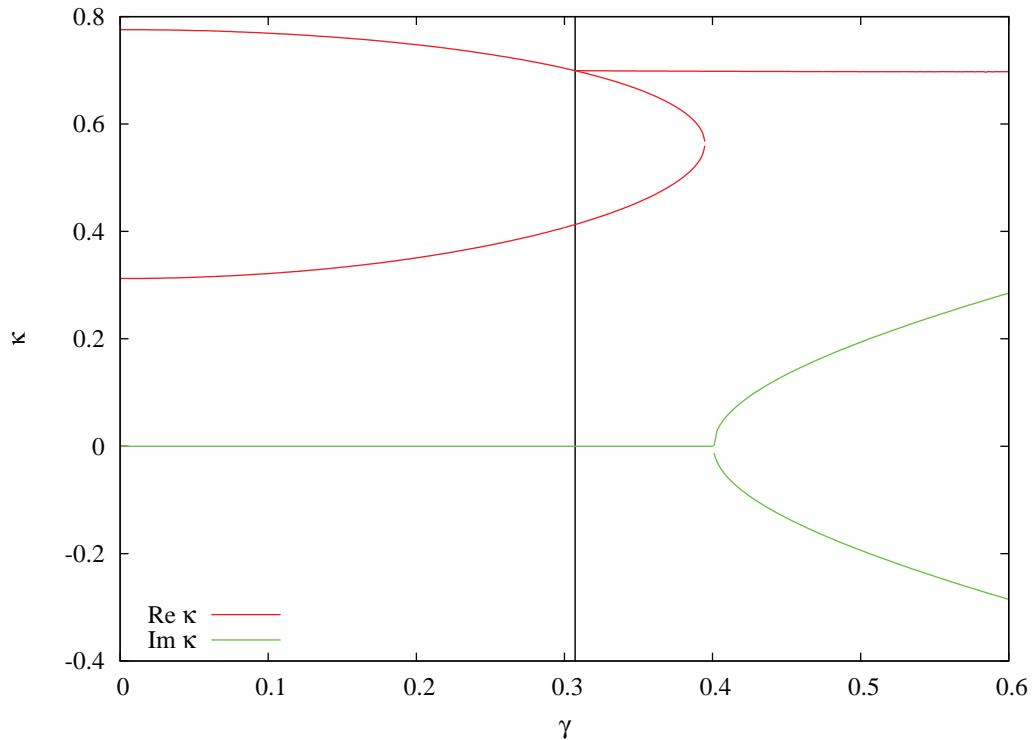


Abbildung 5.6: Real- und Imaginärteile von  $\kappa$  für den Fall  $g = -1.0$ . Die schwarze senkrechte Linie markiert den Wert für  $\gamma$  an dem sich die gebrochenen Lösungen vom Grundzustand abspalten.

### 5.2.2 Auftreten der Stabilitätslücke

Bei genauerer Betrachtung der Stabilitätseigenwerte zeigt sich, dass der Stabilitätswechsel etwas hinter der Bifurkation stattfindet. Abbildung 5.7 zeigt einen vergrößerten Ausschnitt um die Bifurkation aus Abbildung 5.6, sowie die Real- und Imaginärteil des dazugehörigen Stabilitätseigenwerts  $\omega$  aus den Bogoliubov de Gennes-Gleichungen. Für den Stabilitätswechsel würde man erwarten, dass der Realteil von  $\omega$  genau an der Bifurkation verschwindet und anschließend der Imaginärteil ungleich null wird. Man erkennt sehr deutlich, dass dies erst hinter der Bifurkation geschieht. Für  $g = -1.0$  findet der Stabilitätswechsel etwa bei einem um  $6 \cdot 10^{-3}$  größeren Wert für  $\gamma$  statt. Darüber hinaus ist klar zu erkennen, dass die Lücke deutlich größer ist als die auftretenden numerischen Ungenauigkeiten. Dies bedeutet, dass die Stabilität des stationären Zustandes für den nichtlinearen Fall sich bereits ändert, nachdem bereits gebrochene Zustände existie-

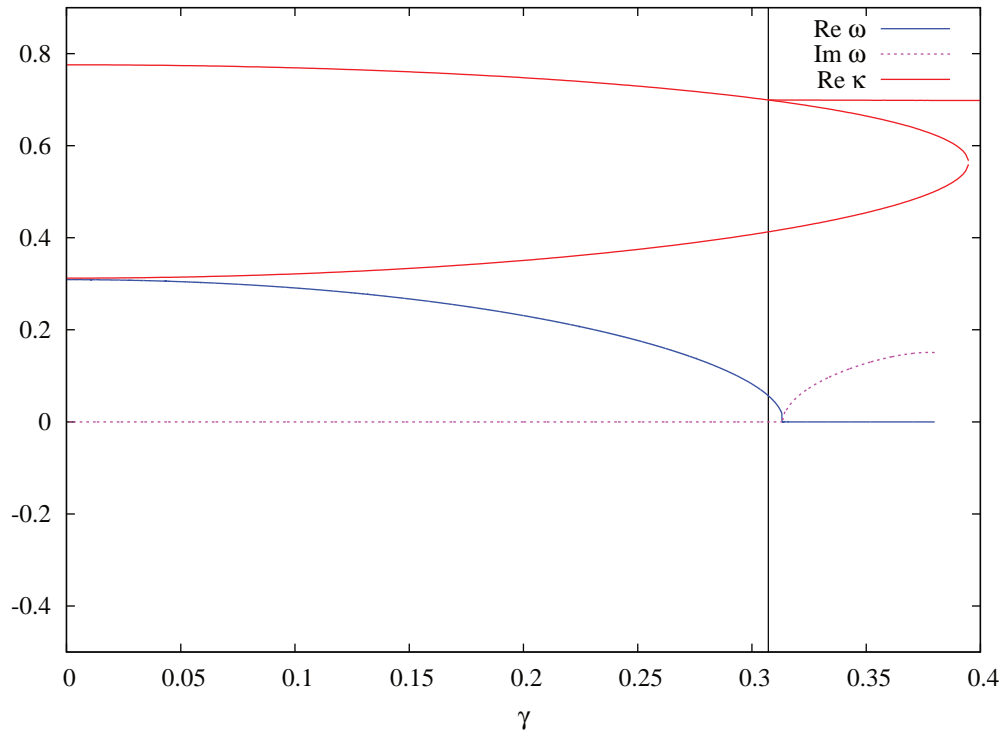
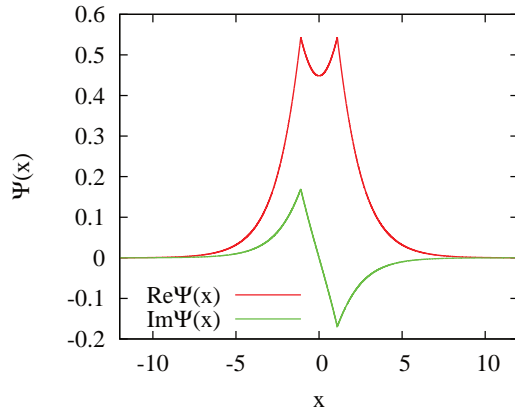
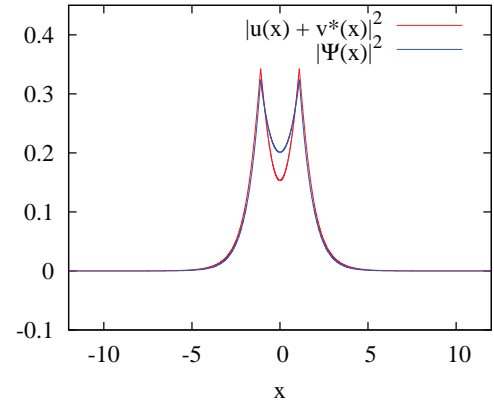


Abbildung 5.7: Real- und Imaginärteil des Stabilitätseigenwertes  $\omega$ , sowie der Realteil von  $\kappa$  für den Fall  $g = -1.0$ . Die schwarze senkrechte Linie markiert den Wert für  $\gamma$  an dem sich die gebrochenen Lösungen vom Grundzustand abspalten. Man erkennt, dass der Stabilitätswechsel bei Betrachtung des Stabilitätseigenwertes  $\omega$  erst hinter der Bifurkation stattfinden würde.

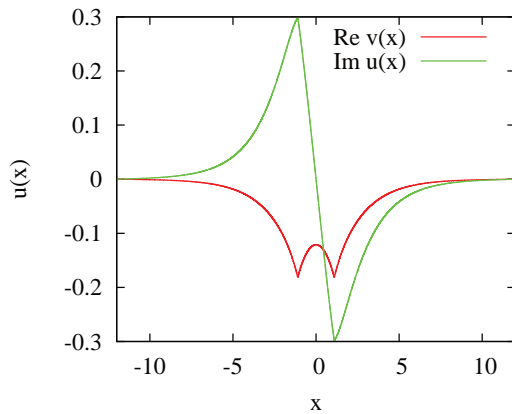
ren. Die Lücke kann nicht durch die Bifurkation oder den exzeptionellen Punkt selbst erklärt werden, da der Stabilitätswechsel zwangsweise mit dem Auftreten von komplexen Eigenwerten verbunden ist und daher exakt an der Bifurkation stattfinden muss. Abbildung 5.8 zeigt beispielhaft die dazugehörigen Wellenfunktion, sowie die dazugehörigen Bogoliubov-Lösungen, für den Fall  $g = -1.0$  und  $\gamma = 0.2$ . Man erkennt, dass die Bogoliubov-Lösungen langsamer als die Lösungen der GPE abfallen (5.8(b)), aber alle Bedingungen aus (5.12) erfüllt werden.



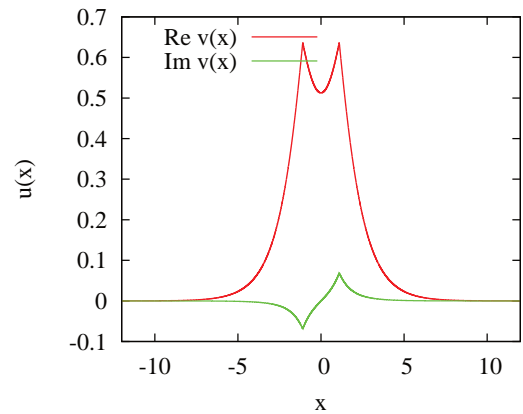
(a) Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion des stationären Zustandes



(b) Betragsquadrat von BdGE und GPE-Lösung



(c) Real- und Imaginärteil von  $u(x)$



(d) Real- und Imaginärteil von  $v(x)$

Abbildung 5.8:  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Wellenfunktion des Grundzustandes mit Darstellung der Fluktuationen  $|\Theta|^2 = |u(x) + v^*(x)|$  für den Fall  $g = -1.0$  und  $\gamma = 0.2$ .

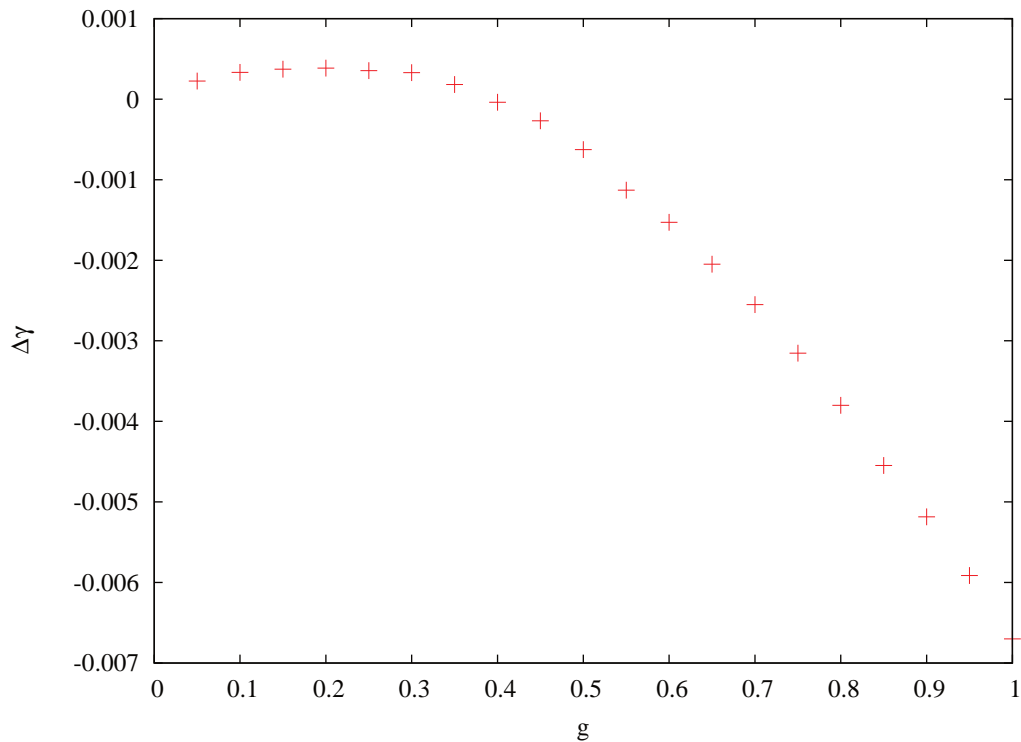


Abbildung 5.9: Darstellung der Stabilitätslücke  $\Delta\gamma$  für verschieden große  $g$ . Die Lücke  $\Delta\gamma$  beschreibt jeweils die Differenz zwischen dem  $\gamma$ -Wert ab dem  $\text{Im } \omega \neq 0$  gilt und dem Punkt an dem die gebrochenen Lösungen vom Grundzustand abspalten.

Abbildung 5.9 zeigt die Änderung der Größe der auftretenden Stabilitätslücken für unterschiedlich starke Nichtlinearitäten. Die Lücke berechnet sich dabei wie folgt:

$$\Delta\gamma = \gamma_\kappa - \gamma_\omega, \quad (5.13)$$

wobei  $\gamma_\kappa$  den Wert bezeichnet, ab dem sich die gebrochenen Lösungen vom Grundzustand abspalten und  $\gamma_\omega$  den Wert für  $\gamma$ , an dem der Stabilitätseigenwert der BdGE komplex wird. Man erkennt in Abbildung 5.9, dass für unterschiedliche starke Nichtlinearitäten sowohl positive als auch negative Lücken auftreten. Die Änderung der Lücke zeigt dabei einen funktionalen Verlauf, der offensichtlich eine komplizierte Abhängigkeit der auftretenden Stabilitätslücke von der Stärke der Nichtlinearität beschreibt. Für  $g \rightarrow 0$  zeigt sich, dass die Lücke erwartungsgemäß verschwindet.

### 5.2.3 Diskussion der Stabilitätslücke

Vergleicht man die Ergebnisse der Stabilitätsuntersuchung mit denen eines  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systems, das durch ein Bose-Hubbard-Modell beschrieben wird, so zeigt dieses keine auftretende Lücke [14]. Dieses System unterscheidet sich zu dem, vor dieser Arbeit betrachteten Bose-Einstein-Kondensat im ausgedehnten Doppelmuldenpotential [5, 6] in zwei wesentlichen Punkten. Eine mögliche Erklärung für das Auftreten der Lücke, die für das ausgedehnte Doppelmuldenpotential bereits diskutiert wurde [5], ist die Annahme, dass die Lücke eine Folge höher angeregter Zustände ist. Im hier betrachteten Doppel- $\delta$ -Potential wird davon ausgegangen, dass wie im linearen nicht-hermiteschen Fall, nur die beiden  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zustände mit reellem  $\kappa$  und die beiden  $\mathcal{PT}$ -gebrochenen Zustände mit zueinander komplex konjugierten Eigenwerten bestehen. Damit besitzt dieses System exakt die gleiche Eigenwertstruktur wie das Bose-Hubbard-System [14]. Darüber hinaus würde man erwarten, dass der Stabilitätswechsel erst bei gebrochenen angeregten Zuständen stattfindet, da nur in diesem Fall die Eigenwerte komplex werden. Gerade dies ist jedoch, wie die bisherige Analyse zeigt nicht der Fall. Eine Erklärung der Lücke durch höherer angeregte Zustände kann damit ausgeschlossen werden.

Die andere mögliche Erklärung ist, dass die Lücke eine Folge der Nichtlinearität selbst ist. Abbildung 5.9 zeigt die Größe der Lücke für unterschiedliche Werte für  $g$ . Man erkennt deutlich eine Änderung der Lücke mit variierendem  $g$  bzw. einer geänderten Nichtlinearität. Dies kann dann dadurch erklärt werden, dass in der Mean-Field-Näherung des Bose-Hubbard-Modells eine Renormierung des nichtlinearen Terms stattfindet. Wird die GPE explizit normunabhängig formuliert so gilt für den nichtlinearen Term:

$$g|\Psi|^2 \rightarrow \frac{g|\Psi|^2}{\int |\Psi|^2 dx} \quad (5.14)$$

Durch die Einführung des normunabhängigen Terms (5.14) ergeben sich folgende modifizierte BdGE, die in [5] ausführlich hergeleitet werden:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} u(x) = & [V(x) - \omega + \kappa^2 + 2g|\Psi_0|^2] u(x) + gv(x)\Psi_0(x)^2 \\ & + g|\Psi_0|^2\Psi_0(x) \int [v(x)\Psi_0(x) + u(x)\Psi_0^*(x)] dx \end{aligned} \quad (5.15a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} v(x) = & [V^*(x) + \omega + (\kappa^2)^* + 2g|\Psi_0|^2] v(x) + gu(x)\Psi_0(x)^2 \\ & + g|\Psi_0|^2\Psi_0^*(x) \int [v(x)\Psi_0(x) + u(x)\Psi_0^*(x)] dx \end{aligned} \quad (5.15b)$$



Die modifizierten BdGE enthalten nun einen zusätzlichen Summanden der im Folgenden mit

$$S = \int [v(x)\Psi_0(x) + u(x)\Psi_0^*(x)] dx \quad (5.16)$$

bezeichnet wird. Zur numerischen Lösung der Differentialgleichung wird das bisherige Verfahren erweitert. In einem ersten Schritt wird für das Integral  $S$  ein Wert  $S_0$  geschätzt und die Integration ausgeführt. Nach der Integration wird das Integral  $S$  berechnet und mit dem vorherigen geschätzten Wert  $S_0$  verglichen. Ist die Differenz zwischen  $S$  und  $S_0$  außerhalb der geforderten Toleranz wird der Vorgang, mit einem von der Nullstellensuche variiertem Schätzwert  $S_0$ , wiederholt. Da  $S$  im allgemeinen komplex ist, erhöht sich damit die Dimension der Nullstellensuche von neun auf elf Parameter.

Abbildung 5.10 zeigt die Real- und Imaginärteil des Stabilitätseigenwertes der in (5.15) bestimmten erweiterten BdGE. Man erkennt deutlich, dass nun der Stabilitätswechsel genau an der Bifurkation stattfindet. Der Realteil von  $\omega$  verschwindet erwartungsgemäß und der Imaginärteil von  $\omega$  ist ungleich null nach der Bifurkation. Es zeigt sich daher, dass die auftretende Lücke eine Folge des normabhängigen Spektrums der BdGE ist und nicht die Konsequenz höher angeregter Zustände. Abbildung 5.11 zeigt beispielhaft die Lösungen der normunabhängigen BdGE.

Vergleicht man die Lösungen mit Abbildung 5.8 so zeigen sich deutliche Unterschiede. Vergleicht man bspw. die Betragsquadrate der beiden Lösungen 5.11(b), so erkennt man, dass die normunabhängigen BdGE Lösungen etwas langsamer abfallen als die normabhängigen Lösungen. Die bereits normierten stationären Lösungen der GPE verändern sich erwartungsgemäß nicht.

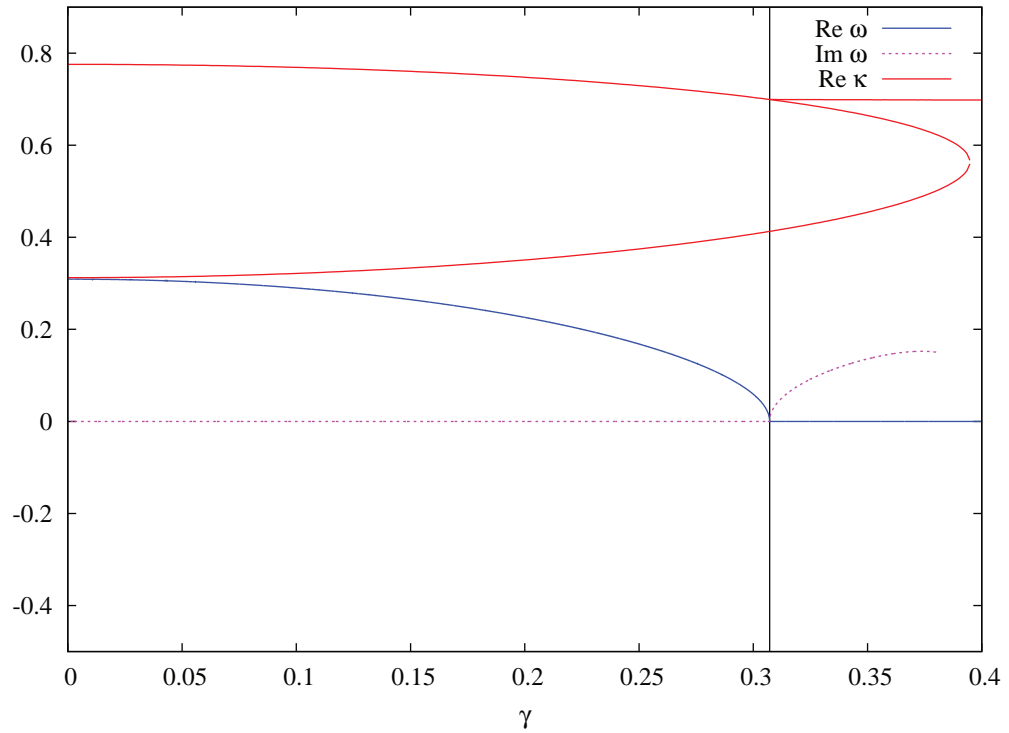
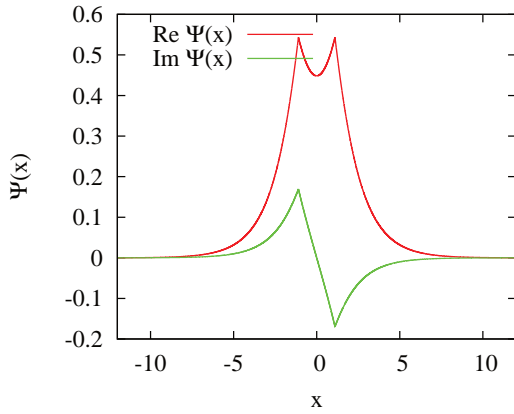
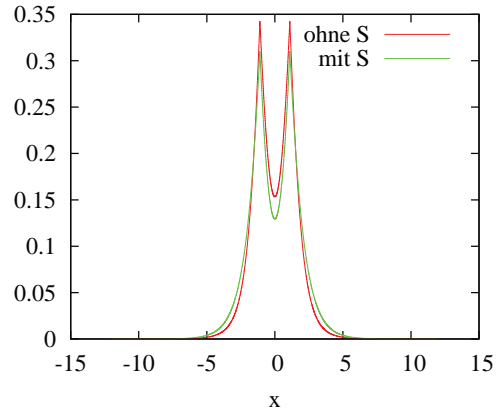


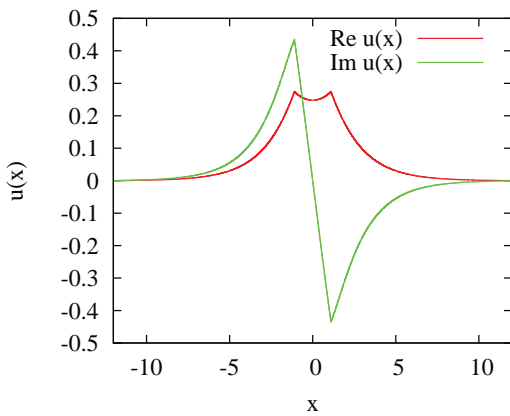
Abbildung 5.10: Real- und Imaginärteil des Stabilitätseigenwertes  $\omega$  der modifizierten BdGE (5.15), sowie der Realteil von  $\kappa$  für den Fall  $g = -1.0$ . Die schwarze senkrechte Linie markiert den Wert für  $\gamma$  an dem sich die gebrochenen Lösungen vom Grundzustand abspalten. Man erkennt, dass der Stabilitätswechsel bei Betrachtung des Stabilitätseigenwertes  $\omega$  genau an der Bifurkation stattfindet.



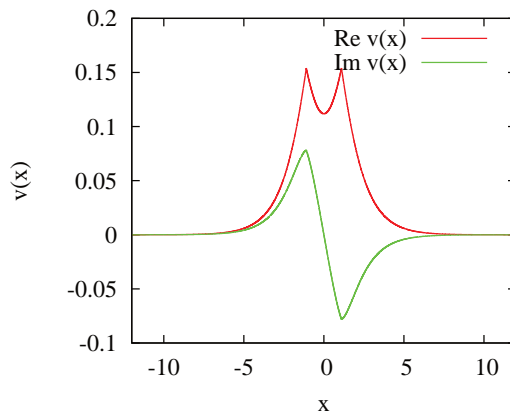
(a) Real- und Imaginärteil der Wellenfunktion  $\Psi_0$



(b) Betragsquadrat von BdGE Lösung mit und ohne Modifikation S aus (5.16)



(c) Real- und Imaginärteil von  $u(x)$



(d) Real- und Imaginärteil von  $v(x)$

Abbildung 5.11: Die Abbildung zeigt die Lösungen der normunabhängigen BdGE 5.15, sowie die dazugehörige stationäre Lösung für  $g = -0.1$  und  $\gamma = 0.2$ . Abbildung 5.11(b) zeigt den Vergleich des Betragsquadrates der normunabhängigen BdGE-Lösungen (ohne Modifikation S), sowie normunabhängigen Lösung (mit S).



## 6 Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war es, die bereits für ein BEC im ausgedehnten Doppelmuldenpotential [5] untersuchte Stabilitätslücke an einem idealisierten eindimensionalen Doppel- $\delta$ -Potential erneut zu betrachten und die Ursachen für die auftretende Lücke zu bestimmen. Zur Beschreibung des Kondensats wurde die Gross-Pitaevskii-Gleichung für eine kurzreichweitige Wechselwirkung aufgestellt und die Lösungen numerisch bestimmt. Es konnten dabei die wesentlichen Ergebnisse des ausgedehnten Doppelmuldenpotentials für das Doppel- $\delta$ -Potential und vorherige Arbeiten [5–8] bestätigt werden. Für den linearen Fall ohne Wechselwirkung zeigte sich, dass bis zu einem kritischen Wert  $\gamma_c$   $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zustände mit rein reellen Energieeigenwerten existieren. An der Bifurkation bei  $\gamma_c$  laufen beide Lösungen zusammen. Für  $\gamma > \gamma_c$  sind die Zustände gebrochen und somit nicht länger Eigenzustände des  $\mathcal{PT}$ -Operators. Für den nichtlinearen Fall zeigt sich, dass bei größer werdender Nichtlinearität, sich der Bifurkationspunkt hin zu kleineren Werten für  $\gamma$  verschiebt. Im nichtlinearen Fall existieren somit drei unterschiedliche Bereiche. Ein Bereich unterhalb des Bifurkationspunktes, in dem nur  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zustände existieren, der Bereich zwischen dem Bifurkationspunkt und  $\gamma_c$  in dem sowohl  $\mathcal{PT}$ -symmetrische als auch gebrochene Zustände anzutreffen sind, sowie der Bereich für  $\gamma > \gamma_c$ , in dem nur noch  $\mathcal{PT}$ -gebrochene Zustände existieren.

Um die Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung auf ihre Stabilität bezüglich kleiner Auslenkungen zu untersuchen, wurde mit Hilfe der Bogoliubov de Gennes-Gleichungen eine Stabilitätsanalyse durchgeführt. Es zeigt sich, dass der Stabilitätswechsel der Lösungen der GPE kurz vor oder hinter der eigentlichen Bifurkation stattfindet. Im Gegensatz zum ausgedehnten Doppelmuldenpotential kommen angeregte Zustände als Ursache für das Auftreten dieser Stabilitätslücke jedoch nicht in Frage, da für das hier untersuchte idealisierte System mit einem Doppel- $\delta$ -Potential insgesamt nur zwei  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zustände mit reellem Energieeigenwert  $\kappa$  und zwei  $\mathcal{PT}$ -gebrochene Zustände mit zueinander komplex konjugierten Eigenwerten existieren. Der nichtlineare Term  $g|\Psi|^2$  in der

GPE wurde durch den renormierten Term  $\frac{g|\Psi|^2}{\int |\Psi|^2 dx}$  ersetzt und die Stabilitätseigenwerte der veränderten BdGE erneut bestimmt. Dabei zeigte sich, dass für den normierten Fall keine Lücke mehr auftrat. Es konnte damit in dieser Arbeit gezeigt werden, dass die Ursache für die auftretende Lücke eine Folge der normabhängigen Nichtlinearität in der Gross-Pitaevskii-Gleichung ist und nicht auf die Existenz höher angeregter Zustände zurückgeführt werden kann.

# Literaturverzeichnis

- [1] Nimrod Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge University Press (2011).
- [2] C. M. Bender und S. Boettcher. Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having  $\mathcal{PT}$  symmetry. *Phys. Rev. Lett.* 80, 5213 (1998).
- [3] A. Guo, G. J. Salamo, D. Duchesne, R. Morandotti, M. Volatier-Ravat, V. Aimez, G. A. Siviloglou und D. N. Christodoulides. Observation of  $\mathcal{PT}$ -Symmetry Breaking in Complex Optical Potentials. *Phys. Rev. Lett.* 103, 03902 (2009).
- [4] E. P. Gross. Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems. *Nuovo Cimento* 20, 454 (1961).
- [5] Daniel Haag. *Numerische Behandlung von Bose-Einstein-Kondensaten im  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Doppelmuldenpotential*. Masterarbeit, Universität Stuttgart (2012).
- [6] Dennis Dast. *Variationsrechnungen zu Bose-Einstein-Kondensaten in  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Doppelmuldenpotentialen*. Masterarbeit, Universität Stuttgart (2012).
- [7] H. Cartarius und G. Wunner. Nonlinear Schrödinger equation for a  $\mathcal{PT}$ -symmetric delta-function double well. *Journal of Physics* 45, 444008 (2012).
- [8] H. Cartarius, D. Haag, D. Dast und G. Wunner. Model of a  $\mathcal{PT}$ -symmetric Bose-Einstein condensate in a delta-function double-well potential. *Phys. Rev. A* 86, 013612 (2012).
- [9] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* 261–267 (1924).

- [10] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases II. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* 3-14 (1925).
- [11] S. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik* A26, 178–181 (1924).
- [12] J. Rogel-Salazar. The Gross-Pitaevskii Equation and Bose-Einstein condensates. *arXiv cond-mat.quant-gas/1301.2073v1* (2009).
- [13] L. P. Pitaevskii und S. Stringari. *Bose–Einstein Condensation*. Oxford: Clarendon Press. (2003).
- [14] E. M. Graefe, H. J. Korsch und A. E. Niederle. Mean-Field Dynamics of a Non-Hermitian Bose-Hubbard Dimer. *Phys. Rev. Lett.* 101, 150408 (2008).
- [15] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1924, 261–267 (1924).



# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen herzlich bedanken, die mich beim Schreiben dieser Arbeit unterstützt haben.

Im besonderen Maße möchte ich mich bei Prof. Dr. Jörg Main und Dr. Holger Cartarius für die sehr gute Betreuung während des Semesters bedanken. Ich konnte mich jederzeit mit Fragen an sie wenden und mir wurde stets freundlich geholfen. Mein Dank gilt auch Robin Gutöhrlein für die gute Büroatmosphäre, sowie seine Unterstützung bei diversen Programmierarbeiten. Ich bedanke mich auch bei Daniel Haag, der stets hilfsbereit alle meine Fragen beantwortet hat. Prof. Dr. Günter Wunner danke ich für die Möglichkeit meine Bachelorarbeit am 1. Institut für Theoretische Physik schreiben zu können. Zuletzt danke ich allen Mitarbeitern des Instituts für die freundliche Aufnahme und das kollegiale Miteinander.



## **Ehrenwörtliche Erklärung**

Ich erkläre,

- dass ich diese Bachelorarbeit selbständig verfasst habe,
- dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe,
- dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist,
- dass ich die Arbeit weder vollständig noch in Teilen bereits veröffentlicht habe, es sei denn, der Prüfungsausschuss hat die Veröffentlichung vorher genehmigt
- und dass der Inhalt des elektronischen Exemplars mit dem des Druckexemplars übereinstimmt.

Stuttgart, den 16. August 2013

*Andreas Löhle*

