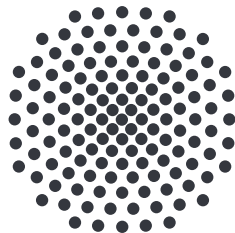


# Beschreibung $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Bose-Einstein-Kondensate mit einem Vier-Mulden-Potential und der Bogoliubov-Backreaction-Methode

Bachelorarbeit von  
**Johannes Reiff**

15. August 2016

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>Operatoren und Observablen</b>	<b>5</b>
2.1	Symmetrieeoperatoren . . . . .	5
2.1.1	Parität . . . . .	6
2.1.2	Zeitumkehr . . . . .	6
2.2	$\mathcal{PT}$ -Symmetrie . . . . .	7
<b>3</b>	<b><math>\mathcal{PT}</math>-symmetrisches Zweimuldensystem</b>	<b>9</b>
3.1	Bose-Einstein-Kondensation . . . . .	9
3.2	Zweimuldensystem im Meanfield . . . . .	10
3.3	Realisierung durch Einbettung in Viermuldensystem . . . . .	11
3.3.1	$\mathcal{PT}$ -symmetrische Variation der Systemparameter . . . . .	12
3.3.2	Wahl des Freiheitsgrads $d(t)$ und Anfangsbedingungen . . . . .	14
3.4	Numerische Lösung des Meanfield-Ansatzes . . . . .	17
3.5	Vollständige Vielteilchendynamik . . . . .	17
3.5.1	Besetzungszahldarstellung . . . . .	17
3.5.2	Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren . . . . .	18
3.5.3	Vielteilchenzustand aus Meanfield-Zustand . . . . .	19
3.5.4	Numerische Lösung der Vielteilchendynamik . . . . .	20
<b>4</b>	<b>Bogoliubov-Backreaction-Methode</b>	<b>23</b>
4.1	Zeitentwicklung der Einteilchen-Dichtematrix . . . . .	23
4.1.1	$J_l$ -Terme . . . . .	24
4.1.2	$U$ -Terme . . . . .	25
4.1.3	$\epsilon_l$ -Terme . . . . .	26
4.1.4	Ergebnis . . . . .	26
4.2	Zeitentwicklung des Kovarianztensors . . . . .	26
4.3	Bogoliubov-Backreaction-Zustand aus Meanfield-Zustand . . . . .	27
4.3.1	Einteilchen-Dichtematrix . . . . .	28
4.3.2	Kovarianztensor . . . . .	30

<b>5</b>	<b>Implementierung und Numerik</b>	<b>31</b>
5.1	Normierung der Zustände . . . . .	31
5.2	Numerische Schwierigkeiten . . . . .	32
<b>6</b>	<b>Statische Systemparameter</b>	<b>33</b>
6.1	System ohne Wechselwirkung . . . . .	33
6.2	System mit Wechselwirkung . . . . .	35
6.3	Vergleich mit vollständiger Vielteilchendynamik . . . . .	35
<b>7</b>	<b><math>\mathcal{PT}</math>-symmetrische Variation der Systemparameter</b>	<b>39</b>
7.1	Abbruch der Integration . . . . .	39
7.2	Zeitentwicklung . . . . .	40
7.3	Lebensdauer des Systems . . . . .	46
7.3.1	Variables $d(t)$ . . . . .	46
7.3.2	Konstantes $d(t)$ . . . . .	48
7.3.3	Analyse der $\mathcal{PT}$ -Bedingungen . . . . .	49
7.4	Reinheit . . . . .	50
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>53</b>
	<b>Literatur</b>	<b>57</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>61</b>

# 1 Einleitung

Nicht-hermitesche Hamiltonoperatoren mit  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie erlauben die elegante Beschreibung offener Quantensysteme. In der vorliegenden Arbeit soll die Realisierung eines  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zweimuldensystems durch die Einbettung in ein hermitesches Viermuldensystem mithilfe der Bogoliubov-Backreaction-Methode untersucht werden.

## 1.1 Motivation und Einführung in das Thema

Seit ihrer Entwicklung vor rund 90 Jahren gilt in der Quantenmechanik der Grundsatz, dass alle Observablen durch hermitesche Operatoren dargestellt werden [HNN28], was garantiert, dass alle Eigenwerte – und damit alle potentiellen Messwerte – reell sind. Wie Carl M. Bender und Stefan Boettcher in ihrem 1998 erschienen Artikel „Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having  $\mathcal{PT}$  Symmetry“ [BB98] jedoch zeigen, reicht die weniger restriktive Forderung nach  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie aus, um in bestimmten Parameterbereichen ein rein reelles Eigenwertspektrum zu erhalten. Die Verwendung nicht-hermitescher Hamiltonoperatoren in der Quantenmechanik ist jedoch bereits älter, da dies unter anderem die einfache Beschreibung offener Systeme mit komplexen Potentialen ermöglicht. So kommen nicht-hermitesche Hamiltonoperatoren beispielsweise zur eleganten Behandlung dissipativer Systeme wie beim radioaktiven Zerfall zum Einsatz (siehe [PGR96] und [Moi11]). Diese Arbeit beschränkt sich auf die Behandlung der  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie im engeren Sinne (Parität und Zeitumkehr), für eine Verallgemeinerung siehe [BM10].

Die Verwendung nicht-hermitescher Hamiltonoperatoren vereinfacht zwar die theoretische und numerische Behandlung eines offenen Quantensystems stark, vernachlässigt jedoch die Umgebung. Im Falle  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systeme ist ein ausbalancierter Zu- und Abfluss von Teilchen nötig und es stellt sich die Frage, wie ein solches System experimentell realisiert werden könnte. Eine Möglichkeit ist, das betrachtete System in ein größeres, hermitesches System einzubetten und die Systemparameter so anzupassen, dass das Verhalten des Teilsystems dem des ursprünglichen, nicht-hermiteschen Systems entspricht. [Kre15] behandelt auf diese Art ausführlich ein  $\mathcal{PT}$ -symmetrisches Zweimuldensystem in der Meanfield-Näherung, was zwar numerisch relativ einfach ist,

aber aufgrund der Wechselwirkung zwischen den Teilchen nur für große Teilchenzahlen korrekte Ergebnisse liefert.

Ziel dieser Arbeit ist es daher, jenes Zweimuldensystem unter Berücksichtigung von Vielteilcheneffekten zu untersuchen. Da die vollständige Vielteilchendynamik mit steigender Gesamtteilchenzahl numerisch schnell aufwändig wird, gleichzeitig aber auch der Übergang ins Meanfield-Verhalten untersucht werden soll, wird für die numerischen Untersuchungen auf die reduzierte Vielteilchendynamik der Bogoliubov-Backreaction-Methode (BBR) zurückgegriffen, welche höhere Momente in Form der Kovarianzen berücksichtigt.

Werden bei der BBR-Methode für die Variation der Systemparameter die Vorschriften aus der Meanfield-Näherung verwendet, so stimmen die Dynamiken für große Teilchenzahlen oder sehr kleine Wechselwirkungen gut überein. Bei kleinen bis mittleren Gesamtteilchenzahlen mit Wechselwirkung kommt es jedoch zu teils erheblichen Abweichungen. Hier können die Meanfield-Vorschriften die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie des Zweimuldensystems nur für eine begrenzte Zeit aufrecht erhalten. Wird die Gesamtteilchenzahl zu klein gewählt, so ist auch die Näherung der BBR-Methode zu grob und es kommt zu numerischen Artefakten. In diesem Bereich muss auf die vollständige Vielteilchendynamik zurückgegriffen werden.

## 1.2 Aufbau der Arbeit

Kapitel 2 beginnt mit der klassischen Annahme, alle Observablen würden durch hermitesche Operatoren beschrieben werden und motiviert anhand eines einfachen Beispiels, dass es zur Beschreibung offener Quantensysteme sinnvoll ist, nicht-hermitesche Hamiltonoperatoren einzuführen. Im Anschluss wird der Begriff der  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie erläutert und gezeigt, dass  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Eigenzustände des Hamiltonoperators stets reelle Eigenwerte besitzen.

In Kapitel 3 wird das  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zweimuldensystem, das es im weiteren Verlauf der Arbeit zu untersuchen gilt, in Meanfield-Näherung vorgestellt und die Ankopplung zweier Reservoirmulden begründet. Daraufhin werden die Variationsvorschriften der Systemparameter im Meanfield nach [Kre15] präsentiert und es wird ein kurzer Überblick über die numerische Lösung der Schrödingergleichung gegeben. Am Schluss des Kapitels findet sich eine Einführung in die vollständige Vielteilchendynamik und es wird gezeigt, dass diese für viele Aufgabenstellungen (große Mulden-/Teilchenzahl) numerisch zu aufwändig ist.

Kapitel 4 präsentiert daraufhin die Bogoliubov-Backreaction-Methode (BBR) – eine Näherung mit reduzierter Vielteilchendynamik – als mögliche Alternative, die ohne numerischen Mehraufwand zu beliebigen Teilchenzahlen skaliert werden kann. Zudem wird

hergeleitet, wie sich ein BBR-Zustand aus einem beliebigen Meanfield-Zustand präparieren lässt.

Im anschließenden Kapitel 5 wird auf die numerischen Schwierigkeiten aufmerksam gemacht, die im Laufe der Entwicklung des Simulationsprogramms zu Tage traten und es wird eine Strategie erklärt, um diese bei den folgenden Simulationen möglichst zu vermeiden.

Ein erster Vergleich der BBR-Methode mit der Meanfield-Näherung und der vollständigen Vielteilchendynamik findet sich in Kapitel 6. Hier wird insbesondere die Übereinstimmung mit der Meanfield-Näherung in den Grenzfällen  $g = 0$  und  $N \rightarrow \infty$  gezeigt.

Kapitel 7 beschäftigt sich mit den Simulationsergebnissen bei  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Variation der Systemparameter. Besonders im Fokus steht hier die Abhängigkeit der Lebensdauer des Systems (Zeit, in der die  $\mathcal{PT}$ -Bedingungen näherungsweise erfüllt sind) von der Gesamtteilchenzahl.

Schließlich fasst Kapitel 8 die Ergebnisse aus den vorhergehenden Kapiteln zusammen und gibt einen Ausblick über mögliche zukünftige Forschungsrichtungen und Anwendungen der im Rahmen dieser Arbeit vorgestellten Konzepte.





## 2 Operatoren und Observablen

Wie bereits Hilbert, von Neumann und Nordheim in ihrem 1928 erschienen Artikel „Über die Grundlagen der Quantenmechanik“ [HNN28] beschreiben, werden Observablen in der Quantenmechanik normalerweise durch hermitesche (selbstadjungierte) Operatoren dargestellt. Dies garantiert ein rein reelles Eigenwertspektrum, was für die physikalische Interpretation als messbare Größe essentiell ist. Darüber hinaus folgt aus der Hermitizität des Hamiltonoperators unmittelbar die Erhaltung der Norm der Wellenfunktion  $\Psi(x, t)$  für alle Zeiten  $t$ , welche für ein Teilchen üblicherweise auf 1 normiert wird:

$$\|\Psi(t)\| = \sqrt{\langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\Psi(x, t)|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.1)$$

Die Erhaltung der Norm bildet die Grundlage für die Interpretation des Betragsquadrats der Wellenfunktion als Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte in der Kopenhagener Deutung. Wäre die Norm zeitabhängig, so würde dies bedeuten, dass bei einer Messung auch mehr oder weniger als ein Teilchen festgestellt werden würde, was in einem abgeschlossenen System völlig unserem physikalischen Verständnis widerspräche.

Die Quantenmechanik postuliert daher, dass Observablen immer durch selbstadjungierte Operatoren dargestellt werden. Diese Annahme erscheint auf den ersten Blick plausibel. Jedoch sind auch Fälle denkbar, in denen nicht-hermitesche Hamiltonoperatoren eine physikalische Relevanz besitzen, insbesondere bei der Untersuchung offener Systeme. Betrachte dazu beispielsweise den radioaktiven  $\alpha$ -Zerfall, bei dem das  $\alpha$ -Partikel als gebundenes Teilchen im effektiven Kernpotential gesehen werden kann. Durch den Tunneleffekt ist es dem  $\alpha$ -Partikel möglich, dem Kern zu entkommen, was in einer exponentiell sinkenden Norm der Wellenfunktion innerhalb der Barrieren des Kernpotentials zum Ausdruck kommt. Das Teilsystem des Kerns, in dem sich die gebundenen Zustände befinden, kann daher nicht mehr mit einem hermiteschen Hamiltonoperator beschrieben werden. Derartige Beschreibungen von Zerfällen finden sich beispielsweise in [PGR96] und [Moi11].

### 2.1 Symmetrieoperatoren

Als Symmetrie bezeichnet man in der Physik eine Invarianz des betrachteten Systems unter Anwendung einer bestimmten Transformationsvorschrift (Symmetrieoperator). Zwei

wichtige Symmetrieoperatoren mit Relevanz für diese Arbeit sollen hier vorgestellt werden.

### 2.1.1 Parität

Als Parität bezeichnet man eine Symmetrie bezüglich der Umkehr des Raumes. Ein Zustand  $\Psi$  besitzt genau dann eine Parität, wenn er Eigenzustand zum (linearen) Paritätsoperator

$$\hat{\mathcal{P}}: \hat{\mathbf{r}} \mapsto -\hat{\mathbf{r}} \quad (2.2)$$

ist. In diesem Fall gilt

$$\hat{\mathcal{P}} |\Psi\rangle = \pm 1 \cdot |\Psi\rangle \quad (2.3)$$

Der Eigenwert zeigt an, ob der Zustand symmetrisch (+1) oder antisymmetrisch (-1) zum Ursprung ist.

Zu bemerken ist noch, dass aufgrund der Definition (in Ortsdarstellung)

$$\hat{\mathbf{p}} := -i\hbar \nabla_{\hat{\mathbf{r}}} \quad (2.4)$$

die Anwendung des Paritätsoperators ebenfalls eine Spiegelung des Impulsoperators

$$\hat{\mathbf{p}} \mapsto -\hat{\mathbf{p}} \quad (2.5)$$

zur Folge hat.

### 2.1.2 Zeitumkehr

Neben dem Paritätsoperator lässt sich ein Operator zur Umkehr der Zeit definieren. Ein Zustand  $\Psi$  ist genau dann  $\mathcal{T}$ -symmetrisch, wenn er die Eigenwertgleichung

$$\hat{\mathcal{T}} |\Psi\rangle = e^{i\phi} \cdot |\Psi\rangle \quad \text{mit} \quad \phi \in \mathbb{R} \quad (2.6)$$

erfüllt. Durch geschickte Wahl der globalen Phase kann  $\phi$  in nicht-entarteten Systemen stets zu null gewählt werden [Lit16, S. 16].

In der Quantenmechanik ist die Definition des Zeitumkehroperators formal analog zur komplexen Konjugation

$$\hat{\mathcal{T}}: i \mapsto -i, \quad (2.7)$$

woraus sich die Antilinearität des Zeitumkehroperators folgern lässt. Damit lässt sich wie beim Paritätsoperator eine Spiegelung des Impulsoperators unter Zeitumkehr

$$\hat{\mathbf{p}} \mapsto -\hat{\mathbf{p}} \quad (2.8)$$

motivieren.

## 2.2 $\mathcal{PT}$ -Symmetrie

Kombiniert man die eben behandelten Symmetrien Parität und Invarianz unter Zeitumkehr, so ist es möglich, nicht-hermitesche Hamiltonoperatoren mit rein reellen Eigenwertspektren zu konstruieren. Solche Systeme bezeichnet man als  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch. Für ihren Hamiltonoperator  $\hat{\mathcal{H}}$  gilt nach [Ben05]

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}] = 0. \quad (2.9)$$

Hieraus lässt sich nach [Das12, S. 19] die notwendige Bedingung  $V(\hat{\mathbf{r}}) = V^*(-\hat{\mathbf{r}})$  für das Systempotential herleiten:

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}\left(\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}})\right) = \hat{\mathcal{P}}\left(\frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V^*(\hat{\mathbf{r}})\right) = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V^*(-\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.10)$$

Entsprechend bezeichnet man einen Zustand  $\Psi$  als  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch, wenn er Eigenzustand zum  $\mathcal{PT}$ -Operator ist. Für den Eigenwert  $\lambda$  gilt nach [Das12, S. 22]

$$|\Psi\rangle = \hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}(\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle) = \hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}(\lambda|\Psi\rangle) = \lambda^*\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle = |\lambda|^2|\Psi\rangle \quad (2.11)$$

und damit

$$\lambda = e^{i\phi} \quad \text{mit} \quad \phi \in \mathbb{R}. \quad (2.12)$$

Dieses Ergebnis kann nun verwendet werden, um zu zeigen, dass  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Systeme reelle Eigenwerte besitzen. Betrachte hierzu die Schrödingergleichung

$$\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (2.13)$$

Durch Anwendung des  $\mathcal{PT}$ -Operators ergibt sich für nichtentartete Systeme aufgrund der Vertauschbarkeit des Hamiltonoperators mit dem  $\mathcal{PT}$ -Operator

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle = \hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}E|\Psi\rangle \stackrel{(2.9)}{\iff} \hat{\mathcal{H}}\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle = E^*\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle, \quad (2.14)$$

was erneut eine Eigenwertgleichung darstellt. Ist nun  $E$  reell und damit trivialerweise  $E = E^*$ , so folgt aus Gleichung (2.14)

$$\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \iff \hat{\mathcal{H}}\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle = E\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle. \quad (2.15)$$

Damit dies allgemein erfüllt ist, muss  $\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}|\Psi\rangle$  kollinear zu  $|\Psi\rangle$  sein, was impliziert, dass  $|\Psi\rangle$  Eigenzustand zum  $\mathcal{PT}$ -Operator ist.

Verwendet man nun die oben hergeleiteten Eigenwerte des  $\mathcal{PT}$ -Operators, so lässt sich auch die Gegenrichtung zeigen. Durch Einsetzen der Eigenwerte in Gleichung (2.14) ergibt sich

$$\hat{\mathcal{H}}e^{i\phi}|\Psi\rangle = E^*e^{i\phi}|\Psi\rangle. \quad (2.16)$$

Die Konstanten  $e^{i\phi}$  können einfach gekürzt werden, was auf die Form

$$\hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle = E^* |\Psi\rangle \quad (2.17)$$

führt. Durch Einsetzen der Schrödingergleichung (2.13) erhält man

$$E |\Psi\rangle = E^* |\Psi\rangle, \quad (2.18)$$

was für  $|\Psi\rangle \neq 0$  trivialerweise auf

$$E = E^* \quad (2.19)$$

und damit auf reelle Eigenwerte

$$E \in \mathbb{R} \quad (2.20)$$

führt.

Damit ist die Bedingung der  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie des Zustands äquivalent dazu, dass der Zustand einen rein reellen Energieeigenwert besitzt.

# 3 $\mathcal{PT}$ -symmetrisches Zweimuldensystem

Eines der einfachsten  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systeme ist ein Zweimuldensystem mit komplexem Potential  $V(\hat{\mathbf{r}}) = V^*(-\hat{\mathbf{r}})$ , in dessen erste Mulde Teilchen eingekoppelt und aus dessen zweiter Mulde Teilchen ausgekoppelt werden. Sollen zusätzlich  $\mathcal{PT}$ -symmetrische (d.h. stationäre) Zustände mit reellen Energieeigenwerten realisiert werden, so ist darauf zu achten, dass die Flüsse in das System hinein und aus ihm heraus gleich groß sind, wofür sich der englische Begriff *balanced gain and loss* durchgesetzt hat. Ein solches System wurde bereits gründlich mithilfe von komplexen Potentialen untersucht (z.B. [Gra12], [Das+14]), womit zwar berücksichtigt werden kann, dass Teilchen ein- und ausgekoppelt werden, nicht jedoch, woher diese kommen bzw. wie ein solches System experimentell realisiert werden könnte. In diesem Kapitel soll nun eine Methode vorgestellt werden, mit der genau diese Untersuchung möglich ist.

## 3.1 Bose-Einstein-Kondensation

Aufbauend auf den Arbeiten des indischen Physikers Satyendra Nath Bose [Bos24] veröffentlichte Albert Einstein 1924/5 zwei Artikel über die Statistik idealer Bose-Gase ([Ein24] und [Ein25]), die heute als *Bose-Einstein-Statistik* bekannt ist. Darin zeigte er erstmals die Besetzungswahrscheinlichkeit

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)\beta} - 1} \quad \text{mit} \quad \beta = \frac{1}{k_{\text{B}}T} \quad (3.1)$$

eines wechselwirkungsfreien Bose-Gases, wobei  $E$  die Energie des Zustands,  $\mu$  das chemische Potential,  $T$  die Temperatur und  $k_{\text{B}}$  die Boltzmann-Konstante ist. Während die Eins im Nenner bei großen Temperaturen vernachlässigbar ist und die Verteilungsfunktion  $f$  in diesem Fall in die Boltzmann-Verteilung übergeht, kommt es unterhalb einer kritischen Temperatur  $T_c$  zu einem Phasenübergang, bei dem alle Teilchen in den Grundzustand kondensieren. Bei diesem als *Bose-Einstein-Kondensation* bezeichneten Prozess beginnen die Wellenfunktionen der Bosonen sich zu überlappen, wodurch das komplette Kondensat mit einer einzigen Wellenfunktion beschrieben werden kann. Anschaulich entspricht der mittlere Teilchenabstand bei  $T = T_c$  der (thermischen) de Broglie-Wellenlänge  $\lambda_{\text{dB}}$ .

Im dreidimensionalen Raum lässt sich die kritische Temperatur über das kritische Phasenraumvolumen  $D_c$  berechnen, für das nach [SH13]

$$D := n\lambda_{\text{dB}}^3 \stackrel{!}{=} D_c = \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \quad (3.2)$$

gilt. Hierbei bezeichnet  $D$  das Phasenraumvolumen,  $n$  die Teilchendichte und  $\zeta$  die Riemannsche  $\zeta$ -Funktion.

Obwohl Einstein die Existenz von Bose-Einstein-Kondensaten (BEC) nur für wechselwirkungsfreie Bose-Gase zeigte, wurde ein solcher Phasenübergang auch bei Bosonen mit Wechselwirkung beobachtet; für eine experimentelle Realisierung ist eine Wechselwirkung zur Herstellung des thermischen Gleichgewichts sogar unabdinglich [SH13]. Erstmals experimentell nachgewiesen wurden BECs 1995 (siehe [Bra+95], [And+95]).

## 3.2 Zweimuldensystem im Meanfield

Da Bose-Einstein-Kondensate meist nur bei sehr tiefen Temperaturen vorliegen, genügt es, nur die Grundzustände der einzelnen Potentialmulden zu betrachten. Dies motiviert dazu, das Kondensat nicht mehr als kontinuierliche Welle zu beschreiben, sondern in eine Vektordarstellung überzugehen, bei der jedes Element des Zustandsvektors den Zustand einer Mulde beschreibt. Für ein Zweimuldensystem gilt damit

$$|\Psi\rangle = (\Psi_1, \Psi_2)^\top \quad \text{mit} \quad \Psi_j = \sqrt{n_j} e^{i\varphi_j}, \quad (3.3)$$

wobei  $n_j$  die Anzahl der Teilchen und  $\varphi_j$  die Phase darstellt. Lässt man nun noch eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen zu, so lässt sich der Hamiltonoperator im Meanfield nach [Gra12] schreiben als

$$\hat{\mathcal{H}}^{(2)} = \begin{pmatrix} i\Gamma + g|\Psi_1|^2/N_{12} & -J_{12} \\ -J_{12} & -i\Gamma + g|\Psi_2|^2/N_{12} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad N_{12} = n_1 + n_2, \quad (3.4)$$

wobei  $g$  die Stärke der makroskopischen Kontaktwechselwirkung (berücksichtigt die Gesamtteilchenzahl  $N = N_{12}$ ) und  $J_{12}$  die Tunnelkonstante ist.  $\Gamma$  beschreibt die Ein- und Auskopplung von Teilchen aus der Umgebung. Betrachte zum Beweis der  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie den Kommutator

$$[\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}, \hat{\mathcal{H}}] \quad \text{mit} \quad \hat{\mathcal{P}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \hat{\mathcal{T}}: i \mapsto -i. \quad (3.5)$$

Durch Einsetzen des Hamiltonoperators ergibt sich

$$\begin{aligned}
 [\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{T}}, \hat{\mathcal{H}}] &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hat{\mathcal{T}} \begin{pmatrix} i\Gamma + gn_1/N & -J_{12} \\ -J_{12} & -i\Gamma + gn_2/N \end{pmatrix} - \\
 &\quad \begin{pmatrix} i\Gamma + gn_1/N & -J_{12} \\ -J_{12} & -i\Gamma + gn_2/N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \hat{\mathcal{T}} \\
 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i\Gamma + gn_1/N & -J_{12} \\ -J_{12} & i\Gamma + gn_2/N \end{pmatrix} \hat{\mathcal{T}} - \\
 &\quad \begin{pmatrix} -J_{12} & i\Gamma + gn_1/N \\ -i\Gamma + gn_2/N & -J_{12} \end{pmatrix} \hat{\mathcal{T}} \\
 &= \begin{pmatrix} -J_{12} & i\Gamma + gn_2/N \\ -i\Gamma + gn_1/N & -J_{12} \end{pmatrix} \hat{\mathcal{T}} - \begin{pmatrix} -J_{12} & i\Gamma + gn_1/N \\ -i\Gamma + gn_2/N & -J_{12} \end{pmatrix} \hat{\mathcal{T}} \\
 &= 0 \quad \text{falls } n_1 = n_2.
 \end{aligned} \tag{3.6}$$

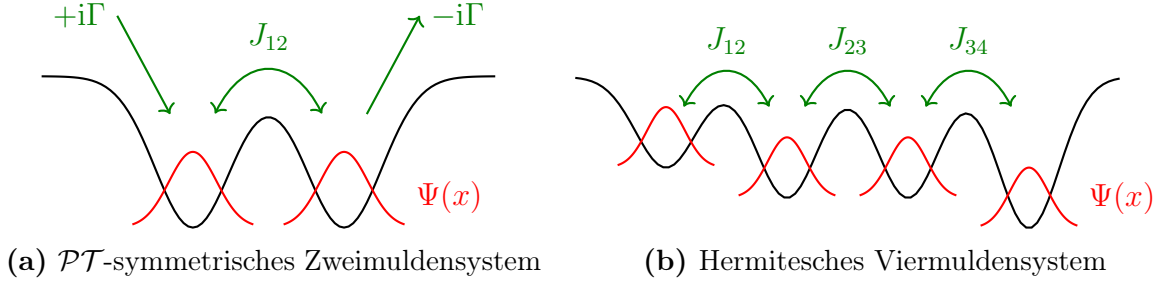
Hieraus sieht man, dass zur Realisierung von  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie im Meanfield die Bedingung  $n_1 = n_2$  zwingend erfüllt sein muss. Für stationäre Zustände müssen zudem die Phasen so angepasst werden, dass der Tunnelstrom zwischen den Systemmulden exakt den Teilchengewinn bzw. -verlust durch die Ein- und Auskoppelung ausgleicht (siehe Abschnitt 3.3.2). Setzt man diesen Hamiltonoperator in die Schrödingergleichung ein, so bezeichnet man die resultierende Gleichung aufgrund der Wechselwirkung als *Gross-Pitaevskii-Gleichung* (GPE).

Dieses System besitzt aufgrund des  $\Gamma$ -Terms ein komplexes Potential, das dem Ein- und Ankoppeln von Teilchen entspricht (siehe Abbildung 3.1a). Eine mögliche experimentelle Realisierung hiervon ist das Ankoppeln zweier Reservoirmulden, die als Quelle und Senke dienen. Hierdurch entsteht ein hermitesches Viermuldensystem, das im folgenden näher behandelt werden soll.

### 3.3 Realisierung durch Einbettung in Viermuldensystem

Eine naheliegende Möglichkeit, das oben beschriebene Zweimuldensystem zu realisieren, ist die Ankopplung weiterer Reservoirmulden auf beiden Seiten (siehe Abbildung 3.1b). Der Hamiltonoperator im Meanfield für eine solche Kette gekoppelter Potentiale (Meanfield-Grenzfall einer *Bose-Hubbard-Kette*) lautet allgemein [Kre15, S. 61]

$$\hat{\mathcal{H}}_{jk} = \begin{cases} \epsilon_j + g_j |\Psi_j|^2 / N & j = k \\ -J_{jk} & |j - k| = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad \text{mit } N = \sum_j n_j, \tag{3.7}$$



**Abbildung 3.1:** Realisierung des  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zweimuldensystems durch Einbettung in ein hermitesches Viermuldensystem.

wobei  $\epsilon_j$  die (reelle) Energie des Grundzustands der  $j$ -ten Mulde, die sog. *on-site-Energie*, darstellt. Prinzipiell sind dabei alle Parameter außer der Gesamtteilchenzahl  $N$  zeitabhängig wählbar. Der Umfang dieser Arbeit beschränkt sich auf die Betrachtung eines Viermuldensystems, analog sind jedoch auch beliebige Erweiterungen mit mehr Mulden denkbar.

Im Folgenden werden den  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systemmulden die Indizes 2 und 3 zugeordnet, während die äußeren Reservoirmulden mit 1 und 4 bezeichnet werden.

Um die Analogie zu Gleichung (3.4) zu gewährleisten, werden nun die Muldenenergien  $\epsilon_2$  und  $\epsilon_3$  zu null gewählt sowie eine identische Wechselwirkung  $g$  in allen Mulden vorausgesetzt, was in Matrixdarstellung auf den Hamiltonoperator

$$\hat{\mathcal{H}}^{(4)} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 + g|\Psi_1|^2/N & -J_{12} & 0 & 0 \\ -J_{12} & g|\Psi_2|^2/N & -J_{23} & 0 \\ 0 & -J_{23} & g|\Psi_3|^2/N & -J_{34} \\ 0 & 0 & -J_{34} & \epsilon_4 + g|\Psi_4|^2/N \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

führt.

### 3.3.1 $\mathcal{PT}$ -symmetrische Variation der Systemparameter

Gleichung (3.8) ist sehr allgemein formuliert und lässt auch nicht- $\mathcal{PT}$ -symmetrische Systeme zu. Wie in [Kre15, S. 63 ff.] gezeigt, müssen einige Bedingungen erfüllt sein, damit das Viermuldensystem dasselbe Verhalten wie das  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zweimuldensystem aufweist. Mit den Definitionen der reellen Größen

$$C_{jk} := \Psi_j \Psi_k^* + \Psi_j^* \Psi_k = 2 \operatorname{Re}\{\Psi_j \Psi_k^*\} = C_{kj} \quad \text{und} \quad (3.9a)$$

$$\tilde{j}_{jk} := i(\Psi_j \Psi_k^* - \Psi_j^* \Psi_k) = -2 \operatorname{Im}\{\Psi_j \Psi_k^*\} = -\tilde{j}_{kj} \quad (3.9b)$$



lassen sich diese Bedingungen schreiben als

$$\hbar j_{12} = 2\Gamma n_2, \quad (3.10a)$$

$$\hbar j_{34} = 2\Gamma n_3, \quad (3.10b)$$

$$J_{12}C_{13} = J_{34}C_{24} \quad \text{und} \quad (3.10c)$$

$$J_{12}\tilde{j}_{13} = J_{34}\tilde{j}_{24}. \quad (3.10d)$$

Hierbei ist der Wahrscheinlichkeitsstrom  $j_{jk}$ , der den Fluss von Teilchen zwischen den Mulden  $j$  und  $k$  beschreibt, gegeben durch

$$j_{jk} = \frac{J_{jk}\tilde{j}_{jk}}{\hbar} = -j_{kj}. \quad (3.11)$$

Die Größe  $\tilde{j}_{jk}$  kann damit als eine Art reduzierter Teilchenstrom interpretiert werden. Schwieriger gestaltet sich die Zuordnung einer physikalischen Bedeutung für  $C_{jk}$ . Für  $j = k$  ist  $C_{jk}$  proportional zur Population  $n_j$  der betreffenden Mulde, ansonsten geht  $C_{jk}$  lediglich in die Korrelation der Mulden  $j$  und  $k$  ein.

Die ersten beiden Bedingungen stellen sicher, dass die Ströme in das eingebettete Zweimuldensystem und aus ihm heraus der Ein- und Auskopplung im Fall von Gleichung (3.4) entsprechen. Eine einfache physikalische Interpretation der letzten beiden Gleichungen ist dagegen nicht möglich.

Die Gleichungen (3.10c) und (3.10d) lassen sich auch zu der komplexen Bedingung

$$J_{12}\Psi_1\Psi_3^* = J_{34}\Psi_2\Psi_4^* \quad (3.12)$$

zusammenfassen.

### Variationsvorschriften für die Tunnelkonstanten

Das Viermuldensystem aus Gleichung (3.8) besitzt bisher fünf Freiheitsgrade (zwei Muldenenergien, drei Tunnelkonstanten). Aus Analogie zum  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zweimuldensystem soll  $J_{23}$  frei gewählt werden können, was die Zahl der Freiheitsgrade auf vier reduziert. Es kann nun gezeigt werden, dass die Erfüllung der Gleichungen (3.10a) bis (3.10c) automatisch dafür sorgt, dass Gleichung (3.10d) ebenfalls erfüllt ist [Kre15, S. 70 f.] und damit nur drei der verbleibenden Freiheitsgrade gebunden werden. Der letzte Freiheitsgrad wird durch die reelle und i.A. zeitabhängige Funktion  $d(t)$  dargestellt, die zunächst beliebig gewählt werden kann. Sie wird mithilfe von Gleichung (3.10c) definiert:

$$J_{12}C_{13} = J_{34}C_{24} \iff \frac{J_{12}}{C_{24}} = \frac{J_{34}}{C_{13}} =: d(t) \quad (3.13)$$

Durch Umstellen nach  $J_{12}$  bzw.  $J_{34}$  erhält man die Variationsvorschriften für die ersten beiden Systemparameter.

### Variationsvorschriften für die Muldenenergien

Unter der Annahme, dass die zeitliche Ableitung von  $d$  linear in den Muldenenergien  $\epsilon_1$  und  $\epsilon_4$  ist und sich damit als

$$\hbar \dot{d} = D_1 \epsilon_1 + D_4 \epsilon_4 + D \quad (3.14)$$

schreiben lässt, lassen sich die Muldenenergien – wie in [Kre15, S. 72 ff.] gezeigt – mithilfe der oben aufgestellten Bedingungen und der GPE als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} M_{11} & M_{14} \\ M_{41} & M_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_4 \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

mit

$$M_{11} = C_{24}(D_1 \tilde{j}_{12} + dC_{12}), \quad (3.16a)$$

$$M_{14} = \tilde{j}_{12}(D_4 C_{24} + d\tilde{j}_{24}), \quad (3.16b)$$

$$M_{41} = \tilde{j}_{34}(D_1 C_{13} - d\tilde{j}_{13}) \quad \text{und} \quad (3.16c)$$

$$M_{44} = C_{13}(D_4 \tilde{j}_{34} - dC_{34}) \quad (3.16d)$$

sowie

$$\begin{aligned} \nu_1 = & -2\hbar\Gamma J_{23}\tilde{j}_{23} + 4\Gamma^2 n_2 - \tilde{j}_{12}[DC_{24} - d\vartheta_{24}\tilde{j}_{24} + d\eta_{24}] \\ & - dC_{24}(C_{12}\vartheta_{12} - \zeta_{12}) + 2\hbar\dot{\Gamma}n_2 \quad \text{und} \end{aligned} \quad (3.17a)$$

$$\begin{aligned} \nu_4 = & +2\hbar\Gamma J_{23}\tilde{j}_{23} - 4\Gamma^2 n_3 - \tilde{j}_{34}[DC_{13} - d\vartheta_{13}\tilde{j}_{13} + d\eta_{13}] \\ & - dC_{13}(C_{34}\vartheta_{34} - \zeta_{34}) + 2\hbar\dot{\Gamma}n_3 \end{aligned} \quad (3.17b)$$

berechnen. Hierbei wurden die Definitionen

$$\zeta_{jk} := J_{j-1,j}C_{j-1,k} + J_{j,j+1}C_{j+1,k} - J_{k-1,k}C_{j,k-1} - J_{k,k+1}C_{j,k+1}, \quad (3.18a)$$

$$\eta_{jk} := J_{j-1,j}\tilde{j}_{j-1,k} + J_{j,j+1}\tilde{j}_{j+1,k} - J_{k-1,k}\tilde{j}_{j,k-1} - J_{k,k+1}\tilde{j}_{j,k+1} \quad \text{und} \quad (3.18b)$$

$$\vartheta_{jk} := \frac{g}{N}(n_j - n_k) \quad (3.18c)$$

verwendet.

### 3.3.2 Wahl des Freiheitsgrads $d(t)$ und Anfangsbedingungen

Um den Teilchenfluss zwischen zwei Mulden anzupassen, kann entweder die Differenz der Muldenenergien oder die Tunnelkonstante variiert werden. Diese Freiheit wird durch den Parameter  $d(t)$  ausgedrückt. Im folgenden sollen zwei Möglichkeiten behandelt werden, die im weiteren Verlauf zum Einsatz kommen. Deren Herleitungen entstammen erneut [Kre15, S. 76 ff.].

### Konstantes $d(t)$

Im einfachsten Fall wird  $d(t)$  konstant gewählt, was trivialer Weise auf  $\dot{d} = 0$  und damit  $D_1 = D_4 = D = 0$  führt. Mithilfe der Gleichungen (3.3), (3.10a), (3.10b), (3.13) und der Definition

$$\beta = \frac{\Gamma}{d\sqrt{n_1 n_4}} \quad (3.19)$$

erhält man für  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Systeme die Phasen

$$2\varphi_1 = \varphi_2 + \varphi_3 - \arcsin[\beta + \sin(\varphi_3 - \varphi_2)] \quad \text{und} \quad (3.20a)$$

$$2\varphi_4 = \varphi_2 + \varphi_3 + \arcsin[\beta + \sin(\varphi_3 - \varphi_2)]. \quad (3.20b)$$

Die Wahl dieser Phasen hat zur Folge, dass der Fluss in und aus den mittleren Systemmulden genau so groß ist, wie die Ein- und Auskopplung von Teilchen im Falle des Zweimuldensystems aus Gleichung (3.4). Diese Gleichungen müssen bei der Präparation des Zustands beachtet werden, damit das zentrale Zweimuldensystem  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch ist. Danach sorgen die in Abschnitt 3.3.1 hergeleiteten Variationsvorschriften dafür, dass die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie aufrecht erhalten wird.

### Konstante Tunnelamplituden $J_{jk}$

Die Funktion  $d(t)$  kann auch so gewählt werden, dass eine der Tunnelamplituden konstant bleibt:

$$d(t) = \frac{J_{12}(t=0)}{C_{24}} \quad (3.21)$$

Eingesetzt in Gleichung (3.13) ergibt sich so  $J_{12} = J_{12}(t=0)$ . Im Allgemeinen kann dies jedoch nicht gleichzeitig für  $J_{12}$  und  $J_{34}$  realisiert werden. Um die Variation der Tunnelkonstanten trotzdem so gering wie möglich zu halten, kann der Mittelweg

$$d(t) = \frac{1}{2} \left( \frac{J_{12}(t=0)}{C_{24}} + \frac{J_{34}(t=0)}{C_{13}} \right) \quad (3.22)$$

gewählt werden. Durch Ableiten von  $d(t)$  erhält man die Größen

$$D_1 = + \frac{J_{34}(t=0)\tilde{j}_{13}}{2C_{13}^2}, \quad (3.23a)$$

$$D_4 = - \frac{J_{12}(t=0)\tilde{j}_{24}}{2C_{24}^2} \quad \text{und} \quad (3.23b)$$

$$D = \frac{J_{12}(t=0)}{2C_{24}^2} [\vartheta_{24}\tilde{j}_{24} - \eta_{24}] + \frac{J_{34}(t=0)}{2C_{13}^2} [\vartheta_{13}\tilde{j}_{13} - \eta_{13}]. \quad (3.23c)$$

Hiermit lassen sich die Phasenbeziehungen

$$\varphi_1 = \varphi_2 - \arcsin(\alpha) \quad \text{und} \quad (3.24a)$$

$$\varphi_4 = \varphi_3 + \arcsin(\alpha) \quad (3.24b)$$

mit

$$\alpha = \frac{2\Gamma}{J_{12}(t=0)\sqrt{n_1/n_2} + J_{34}(t=0)\sqrt{n_4/n_3}} \quad (3.25)$$

herleiten.

### Phasenwahl für stationäre $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zustände

Um einen stationären Zustand zu erzeugen reicht es nicht aus, nur die Systemparameter  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch anzupassen; auch der Startzustand muss passend präpariert werden, wie bereits für das Zweimuldensystem erwähnt. Bei gegebenen Populationen  $n_2$  und  $n_3$  erreicht man dies durch eine geeignete Phasenwahl, welche im Folgenden hergeleitet werden soll.

Für den (reduzierten) Tunnelstrom eines gegebenen Zustands gilt

$$\tilde{j}_{23} \stackrel{(3.9b)}{=} -2 \operatorname{Im}\{\Psi_2\Psi_3^*\} = 2 \operatorname{Im}\{\Psi_2^*\Psi_3\}. \quad (3.26)$$

Durch Einsetzen der Definition von  $\Psi_j$  ergibt sich daraus

$$\tilde{j}_{23} = 2 \operatorname{Im}\{\sqrt{n_2 n_3} e^{i(\varphi_3 - \varphi_2)}\} = 2\sqrt{n_2 n_3} \sin(\varphi_3 - \varphi_2), \quad (3.27)$$

was wiederum nach der Phasenbeziehung  $\varphi_3 - \varphi_2$  aufgelöst werden kann:

$$\varphi_3 - \varphi_2 = \arcsin\left(\frac{\tilde{j}_{23}}{2\sqrt{n_2 n_3}}\right) \quad (3.28)$$

Da der Tunnelstrom innerhalb des Zweimuldensystems gleich dem Strom von bzw. zu den Reservoirmulden sein soll, kann weiterhin folgende Bedingung aufgestellt werden:

$$\hbar j_{23} = J_{23} \tilde{j}_{23} \stackrel{!}{=} \hbar j_{12} \stackrel{(3.10a)}{=} 2\Gamma n_2 \implies \tilde{j}_{23} \stackrel{!}{=} \frac{2\Gamma n_2}{J_{23}} \quad (3.29)$$

Die mittleren Systemmulden müssen also mit der Phasenbeziehung

$$\varphi_3 - \varphi_2 \stackrel{n_2=n_3}{=} \arcsin\left(\frac{\Gamma}{J_{23}}\right) \quad (3.30)$$

präpariert werden.

## 3.4 Numerische Lösung des Meanfield-Ansatzes

Die numerische Lösung im Meanfield gestaltet sich denkbar einfach. Betrachte dazu die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle. \quad (3.31)$$

Diese lässt sich trivialer Weise nach der Ableitung des Zustands

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle \quad (3.32)$$

auffösen. Durch Diskretisierung der Ableitung erhält man einen mit Standardverfahren wie Runge-Kutta numerisch integrierbaren Ausdruck für beliebige Hamiltonoperatoren im Meanfield:

$$\Delta |\Psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle \Delta t \quad (3.33)$$

Vor jedem Integrationsschritt müssen dabei die Systemparameter (Muldenenergien und Tunnelkonstanten) nach den in Abschnitt 3.3 vorgestellten Vorschriften angepasst werden.

## 3.5 Vollständige Vielteilchendynamik

Die bisherigen Betrachtungen bezogen sich alle auf die Meanfield-Näherung, welche eine große Teilchenzahl  $N$  voraussetzt. Bei sehr kleinen Teilchenzahlen sind die Meanfield-Annahmen dagegen ungerechtfertigt. Hier muss die numerisch deutlich aufwändigere Vielteilchendynamik verwendet werden.

### 3.5.1 Besetzungszahldarstellung

Im Meanfield wird angenommen, dass sich alle Teilchen im selben Einteilchen-Zustand befinden. Dies ermöglicht die Beschreibung des Systems durch eine nichtlineare Einteilchen-Schrödingergleichung, bei der alle Teilchen mit einer einzigen Wellenfunktion beschrieben werden, die für beliebige Teilchenzahlen skaliert werden kann. Wird die makroskopische Wechselwirkung  $g$  vorgegeben, so ist die Dynamik zudem vollkommen unabhängig von der Teilchenzahl. Bei realistischen Kondensaten ist dies jedoch nur als Näherung zu verstehen. Ein einfacher Zustand von  $N$  Teilchen ohne Verschränkung kann in einem Bose-Einstein-Kondensat beispielsweise als Produkt von  $N$  im Allgemeinen unterschiedlichen Einteilchen-Wellenfunktionen  $\Psi_j$  dargestellt werden.

Die hierfür geeignete Basis

$$|i_1, \dots, i_N\rangle_+ := \left( \prod_{m=1}^M n_m! \right)^{-\frac{1}{2}} \hat{S}_+ \left( |i_1\rangle^{(1)} \otimes \dots \otimes |i_N\rangle^{(N)} \right) \equiv C \hat{S}_+ \prod_{j=1}^N |i_j\rangle^{(j)} \quad (3.34)$$

mit dem Quantenzahl-Multiindex  $i_j$  des  $j$ -ten Teilchens und der Anzahl möglicher Zustände (bzw. Multiindizes)  $M$  ergibt sich nach [Eve04, S. 8 f.] durch Anwendung des Symmetrisierungsoperators für Bosonen

$$\hat{S}_+ := \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p \hat{\mathcal{P}}_p. \quad (3.35)$$

Hierbei bezeichnet  $p$  einen Multiindex zur Beschreibung einer Permutation und  $\hat{\mathcal{P}}_p$  den dazugehörigen Permutationsoperator. Die Symmetrisierung ist dabei notwendig, da ein Bose-Einstein-Kondensat aus ununterscheidbaren Teilchen besteht und es dadurch viele mikroskopische Zustände gibt, die denselben makroskopischen Zustand beschreiben. Eine Zuordnung der Teilchen ist aufgrund der Ununterscheidbarkeit nicht möglich, es kann daher lediglich die Anzahl der Teilchen pro Zustand ermittelt werden. Diese Tatsache motiviert dazu, in eine *Besetzungszahldarstellung*, auch *Zweite Quantisierung* genannt, überzugehen, bei der nur noch die Anzahl der Teilchen in jeder Mulde betrachtet werden. Eine solche Darstellung verwendet die *Fock-Basis*

$$|n_1, \dots, n_M\rangle \equiv |i_1, \dots, i_N\rangle_+ \quad (3.36)$$

Hierbei steht  $M$  für die Anzahl der möglichen Zustände (Mulden) und  $n_j$  für die Anzahl der Teilchen im  $j$ -ten Zustand (der  $j$ -ten Mulde). Ein beliebiger Zustand kann dann als Linearkombination von Fock-Zuständen konstruiert werden.

### 3.5.2 Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

In der Besetzungszahldarstellung hat es sich als sinnvoll erwiesen (siehe [Eve04, S. 12 ff.]), *Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren* zu definieren, die es erlauben, die Besetzungszahlen eines Fock-Zustands zu manipulieren. Man definiert

$$\hat{a}_j: \hat{a}_j |n_1, \dots, n_j, \dots, n_M\rangle \mapsto \sqrt{n_j} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots, n_M\rangle \quad \text{und} \quad (3.37a)$$

$$\hat{a}_j^\dagger: \hat{a}_j^\dagger |n_1, \dots, n_j, \dots, n_M\rangle \mapsto \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots, n_M\rangle \quad (3.37b)$$

mit den Kommutatorrelationen

$$\left[ \hat{a}_j, \hat{a}_k \right] = \left[ \hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger \right] = 0 \quad \text{und} \quad (3.38a)$$

$$\left[ \hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger \right] = \delta_{jk}. \quad (3.38b)$$

Hieraus lässt sich beispielsweise der *Besetzungszahloperator*

$$\hat{n}_j := \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \quad (3.39)$$

mit

$$\hat{n}_j |\dots, n_j, \dots\rangle = \hat{a}_j^\dagger \sqrt{n_j} |\dots, n_j - 1, \dots\rangle = n_j |\dots, n_j, \dots\rangle \quad (3.40)$$

ableiten.

Mit den eben eingeführten Operatoren und  $J_j := J_{j,j+1}$  lässt sich nun der Vielteilchen-Hamiltonoperator für eine Bose-Hubbard-Kette aufstellen (siehe [Jak+98]):

$$\hat{\mathcal{H}}^{(N)} = - \sum_{j=1}^{N-1} J_j \left( \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} \right) + \frac{U}{2} \sum_{j=1}^N \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_j + \sum_{j=1}^N \epsilon_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \quad (3.41)$$

Die Stärke der mikroskopischen Kontaktwechselwirkung  $U$  wurde dabei als konstant angenommen. Sie hängt mit der makroskopischen Wechselwirkung  $g$  über die Relation

$$g = U(N - 1) \quad (3.42)$$

zusammen.

### 3.5.3 Vielteilchenzustand aus Meanfield-Zustand

Der Meanfield-Zustand eines Teilchens  $j$  lässt sich als Linearkombination der möglichen (Basis-)Zustände, die im Folgenden durch die Quantenzahl  $m$  identifiziert werden, darstellen:

$$|\Psi_j\rangle = \sum_{m=1}^M c_m^{(j)} |m\rangle^{(j)}, \quad 1 \leq j \leq N \quad (3.43)$$

Damit lässt sich jeder beliebige Vielteilchenzustand in Fock-Basis als

$$|\Psi\rangle = \sum_{(n_1, \dots, n_M)} \langle n_1, \dots, n_M | \Psi \rangle |n_1, \dots, n_M\rangle \equiv \sum_{(n_1, \dots, n_M)} c_{n_1, \dots, n_M} |n_1, \dots, n_M\rangle \quad (3.44)$$

entwickeln. Wird ein Produktzustand identischer Einteilchenzustände vorausgesetzt, so lässt sich die Konstante  $c_{n_1, \dots, n_M}$  unter Verwendung von Gleichung (3.34) durch geschicktes Sortieren und anschließendem Ausnutzen der Orthonormiertheit der Einteilchen-

**Tabelle 3.1:** Dimension des Vielteilchenzustands in Abhängigkeit von der Teilchen- und Muldenzahl.

$N$	$M$	$\dim  \Psi\rangle$
1	1	1
100	2	101
2	100	5050
10	10	92 378
20	20	68 923 264 410

Basis berechnen:

$$\begin{aligned}
 c_{n_1, \dots, n_M} &= C \left( \prod_{j_1=1}^{n_1} \langle 1 |^{(j_1)} \dots \prod_{j_M=N-n_M+1}^N \langle M |^{(j_M)} \hat{S}_+^\dagger \right) \prod_{k=1}^N |\Psi_k\rangle \\
 &= C \left( \hat{S}_+ \prod_{j_1=1}^{n_1} \langle 1 |^{(j_1)} \dots \prod_{j_M=N-n_M+1}^N \langle M |^{(j_M)} \right) \prod_{k_1=1}^{n_1} |\Psi_{k_1}\rangle \dots \prod_{k_M=N-n_M+1}^N |\Psi_{k_M}\rangle \\
 &= \frac{C}{\sqrt{N!}} \underbrace{\prod_{m=1}^M n_m!}_{(*)} \underbrace{\left( \prod_{m'=1}^M n_{m'}! \right)}_{(**)} \prod_{m''=1}^M c_{m''}^{n_{m''}} = \sqrt{N!} \prod_{m=1}^M \frac{c_m^{n_m}}{\sqrt{n_m!}}
 \end{aligned} \tag{3.45}$$

Hierbei steht der Term (\*) für die Anzahl symmetrischer Zustände und (\*\*) für die Anzahl an Permutationen, die diese Zustände unverändert lassen. Im Bezug auf das behandelte Viermuldensystem (3.7) gilt  $\Psi_j \equiv \sqrt{N} c_j$ .

### 3.5.4 Numerische Lösung der Vielteilchendynamik

Prinzipiell gestaltet sich die numerisch Lösung der vollständigen Vielteilchendynamik ähnlich zu der in Abschnitt 3.4 vorgestellten Vorgehensweise für den Meanfield-Ansatz. Eine ausführliche Behandlung findet sich in [Alp16].

Wie in [ZD10] gezeigt, besitzt ein Vielteilchenzustand jedoch die Dimension

$$\dim |\Psi\rangle = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!}, \tag{3.46}$$

was bei vielen Mulden oder großen Teilchenzahlen schnell numerisch zu aufwändig wird. Werden beide Größen gleichzeitig erhöht, so wird das System bereits bei mittleren Werten unlösbar, wie Tabelle 3.1 zeigt.



Es gibt Bereiche, vor allem bei mittleren Teilchenzahlen, in denen die vollständige Vielteilchendynamik numerisch zu aufwändig wird, die Meanfield-Näherung jedoch noch zu grob ist, um befriedigende Ergebnisse zu liefern. Hier macht es Sinn, eine reduzierte Vielteilchendynamik zu verwenden. Eine derartige Näherung soll im weiteren Verlauf behandelt werden: die *Bogoliubov-Backreaction-Methode*.



# 4 Bogoliubov-Backreaction-Methode

Wie in Abschnitt 3.5.4 gezeigt, nimmt der numerische Aufwand zur Lösung der vollständigen Vielteilchendynamik mit steigender Teilchen- und Muldenzahl rasch zu. Um größere Teilchenzahlen rechnen zu können und trotzdem Vielteilcheneffekte berücksichtigen zu können, gibt es die Möglichkeit, nicht den kompletten Vielteilchenzustand zu berechnen, sondern lediglich die Erwartungswerte der Einteilchenoperatoren in Form der *Einteilchen-Dichtematrix*  $\sigma_{jk}$  (engl. *Single-Particle Density Matrix*, SPDM). Die SPDM koppelt an die höheren Momente des *Kovarianzensors*  $\Delta_{jklm}$ , der wiederum an einen Tensor 6. Stufe koppelt. Auf diese Art ist die SPDM von unendlich vielen höheren Momenten abhängig. Je nach gewünschter Genauigkeit kann diese Entwicklung nach beliebig vielen Momenten abgebrochen werden; die *Bogoliubov-Backreaction-Methode* (BBR) berücksichtigt dabei lediglich den Kovarianztensor.

## 4.1 Zeitentwicklung der Einteilchen-Dichtematrix

Die Einteilchen-Dichtematrix ist definiert als

$$\sigma_{jk} := \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \rangle. \quad (4.1)$$

Jeder Erwartungswert eines quantenmechanischen Operators lässt sich nun mithilfe der (Vielteilchen-)Dichtematrix  $\rho$  bzw. des zugehörigen Operators

$$\hat{\rho} := \sum_m p_m |m\rangle\langle m| \quad \text{mit} \quad \sum_m p_m = 1 \quad (4.2)$$

als Spur ausdrücken:

$$\langle \hat{A} \rangle = \text{tr}(\hat{A} \hat{\rho}) \quad (4.3)$$

Hiermit lässt sich die SPDM schreiben als

$$\sigma_{jk} = \text{tr}(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{\rho}). \quad (4.4)$$

Da die Spur linear in ihren Argumenten ist, lässt sich die Ableitung der SPDM schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t} \sigma_{jk} = \text{tr} \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{\rho} \right) = \text{tr} \left( \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} \right). \quad (4.5)$$

Mithilfe der von Neumann-Gleichung (siehe [SB02, S. 15 f.]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho} = [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}] \quad (4.6)$$

kann die Zeitentwicklung des Dichteoperators berechnet werden, was mit dem Hamiltonoperator aus Gleichung (3.41) auf das Zwischenergebnis

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{jk} &= \text{tr} \left( \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}] \right) \\ &= \text{tr} \left\{ \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \left[ - \sum_{l=1}^{N-1} J_l \left( (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}) \hat{\rho} - \hat{\rho} (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sum_{l=1}^N \left( \left( \frac{U}{2} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l + \epsilon_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \right) \hat{\rho} - \hat{\rho} \left( \frac{U}{2} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l + \epsilon_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \right) \right) \right] \right\} \\ &= T_J + T_U + T_\epsilon \end{aligned} \quad (4.7)$$

führt. Dieses besitzt drei Arten von Termen, die aufgrund der Linearität der Spur separat berechnet werden können.  $T_J$  beschreibt dabei den Einfluss der Kopplung der Mulden aneinander und  $T_U$  die Kontaktwechselwirkung innerhalb einer Mulden.  $T_\epsilon$  berücksichtigt die Muldenenergien.

#### 4.1.1 $J_l$ -Terme

Der erste Summand

$$T_J = \text{tr} \left\{ \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \sum_{l=1}^{N-1} J_l \left[ \hat{\rho} (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}) - (\hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_l + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_{l+1}) \hat{\rho} \right] \right\} \quad (4.8)$$

ist nur von  $J_l$  abhängig. Durch Ausnutzen der Kommutatorregel

$$[\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger] = \delta_{jk} \implies \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j + \delta_{jk} \quad (4.9)$$

und der zyklischen Vertauschbarkeit von Operatoren unter einer Spur lässt sich dieser schreiben als

$$\begin{aligned} T_J = \text{tr} \left\{ \sum_{l=1}^{N-1} J_l \left[ -\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_{l+1} + \hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{l+1} \hat{a}_k \right. \right. \\ \left. \left. - \hat{a}_j^\dagger \delta_{k,l+1} \hat{a}_l - \hat{a}_j^\dagger \delta_{kl} \hat{a}_{l+1} + \hat{a}_{l+1}^\dagger \delta_{jl} \hat{a}_k + \hat{a}_l^\dagger \delta_{j,l+1} \hat{a}_k \right] \hat{\rho} \right\}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Wird nun die Summe für die Terme mit Kronecker-Delta ausgewertet, so lässt sich die Spur dieser Terme nach Gleichung (4.4) berechnen, was auf

$$\begin{aligned}
 T_J &= -J_{k-1}\sigma_{j,k-1} - J_k\sigma_{j,k+1} + J_j\sigma_{j+1,k} + J_{j-1}\sigma_{j-1,k} \\
 &\quad + \text{tr} \left\{ \sum_{l=1}^{N-1} J_l \left[ -\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_{l+1} + \hat{a}_{l+1}^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k + \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{l+1} \hat{a}_k \right] \hat{\rho} \right\} \\
 &= -J_{k-1}\sigma_{j,k-1} - J_k\sigma_{j,k+1} + J_j\sigma_{j+1,k} + J_{j-1}\sigma_{j-1,k}
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

führt. Im letzten Schritt wurde dabei

$$\left[ \hat{a}_j, \hat{a}_k \right] = \left[ \hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger \right] = 0 \tag{4.12}$$

ausgenutzt.

### 4.1.2 $U$ -Terme

Der zweite Summand

$$T_U = \text{tr} \left\{ \frac{U}{2} \sum_{l=1}^N \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \left( \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l \right) \right\} \tag{4.13}$$

lässt sich erneut durch zyklische Vertauschung der Spur-Argumente in die Form

$$T_U = \text{tr} \left\{ \frac{U}{2} \sum_{l=1}^N \left( \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l - \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \right) \hat{\rho} \right\} \tag{4.14}$$

bringen. Durch geschicktes Anwenden der Kommutatorregeln lässt sich der zweite Term unter der Summe so umformen, dass ein Teil dem ersten Term der Summe gleicht:

$$\sum_{l=1}^N \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k = \sum_{l=1}^N \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_l + 2\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k - 2\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_k \tag{4.15}$$

Aufgrund der unterschiedlichen Vorzeichen heben sich diese Summen auf, was auf den einfachen Zusammenhang

$$T_U = U \text{tr} \left\{ \left( \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_k - \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k \right) \hat{\rho} \right\} \tag{4.16}$$

führt. Definiert man nun den Kovarianztensor

$$\Delta_{jklm} := \left\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \right\rangle - \left\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \right\rangle \left\langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \right\rangle = \left\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \right\rangle - \sigma_{jk} \sigma_{lm}, \tag{4.17}$$

so lässt sich  $T_U$  schreiben als

$$T_U = U(\Delta_{jkkk} + \sigma_{jk} \sigma_{kk} - \Delta_{jjjk} - \sigma_{jj} \sigma_{jk}). \tag{4.18}$$

### 4.1.3 $\epsilon_l$ -Terme

Der letzte Summand

$$T_\epsilon = \text{tr} \left\{ \sum_{l=1}^N \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \left( \epsilon_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{\rho} - \hat{\rho} \epsilon_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \right) \right\} = \text{tr} \left\{ \sum_{l=1}^N \epsilon_l \left( \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l - \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \right) \hat{\rho} \right\} \quad (4.19)$$

lässt sich analog zu den beiden vorangegangenen Rechnungen durch die Umformung

$$\sum_{l=1}^N \epsilon_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k = \sum_{l=1}^N \epsilon_l \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_k + \epsilon_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k = \sum_{l=1}^N \epsilon_l \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_l + \epsilon_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k - \epsilon_k \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \quad (4.20)$$

zu

$$T_\epsilon = (\epsilon_k - \epsilon_j) \sigma_{jk} \quad (4.21)$$

vereinfachen.

### 4.1.4 Ergebnis

Kombiniert man die Ergebnisse aus den Abschnitten 4.1.1 bis 4.1.3, so erhält man die Zeitableitung der SPDM:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{jk} = & -J_{k-1} \sigma_{j,k-1} - J_k \sigma_{j,k+1} + J_j \sigma_{j+1,k} + J_{j-1} \sigma_{j-1,k} \\ & + U(\Delta_{jkkk} + \sigma_{jk} \sigma_{kk} - \Delta_{jjjk} - \sigma_{jj} \sigma_{jk}) \\ & + (\epsilon_k - \epsilon_j) \sigma_{jk} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Zu bemerken ist, dass bis zu dieser Stelle noch keinerlei Näherungen in die Rechnung eingegangen sind; durch die Kopplung an die Kovarianzen ist dies jedoch kein geschlossenes Differentialgleichungssystem. Für ein wechselwirkungsfreies Bose-Einstein-Kondensat (das heißt  $U = 0$ ) beschreibt obige Gleichung die Dynamik des Systems exakt. In diesem Fall ist Gleichung (4.22) invariant unter Variation der Teilchenzahl und für einen Meanfield-Zustand analog zur Meanfield-Näherung. Dies wird in Kapitel 6 anschaulich gezeigt.

## 4.2 Zeitentwicklung des Kovarianzensors

Prinzipiell ähnelt die Herangehensweise bei der Berechnung der Zeitentwicklung des Kovarianzensors stark der in Abschnitt 4.1 vorgestellten. Da die angewandten Rechen-techniken im wesentlichen identisch sind, die Rechnung aufgrund der größeren Anzahl an Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren jedoch deutlich komplexer ist, wird hier auf

eine ausführliche Diskussion des Rechenwegs verzichtet. Auf die entscheidende Näherung wird jedoch eingegangen.

Im Laufe der Rechnung treten die Erwartungswerte

$$\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_o \rangle \quad (4.23)$$

auf. Analog zur Definition des Kovarianztensors

$$\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \rangle \equiv \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \rangle \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \rangle + \Delta_{jklm} \quad (4.24)$$

lassen sich auch diese Erwartungswerte über ein höheres Moment  $\Xi_{jklmno}$  (Tensor 6. Stufe) ausdrücken:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_o \rangle &\equiv \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \rangle \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_o \rangle + \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_o \rangle \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \rangle + \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_o \rangle \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \rangle \\ &\quad - 2 \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \rangle \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \rangle \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_o \rangle + \Xi_{jklmno} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Die BBR-Methode schlägt nun vor, dieses Moment zu vernachlässigen indem die Näherung  $\Xi_{jklmno} \approx 0$  angewandt wird (siehe [VA01]), was bereits für mittlere Teilchenzahlen befriedigende Ergebnisse liefert (siehe [TAV07]).

Unter Anwendung der eben vorgestellten Näherung lässt sich die Zeitableitung des Kovarianztensors schreiben als

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\partial}{\partial t} \Delta_{jklm} &= i(J_{m-1} \Delta_{jkl, m-1} + J_m \Delta_{jkl, m+1} - J_l \Delta_{jk, l+1, m} - J_{l-1} \Delta_{jk, l-1, m} \\ &\quad + J_{k-1} \Delta_{j, k-1, lm} + J_k \Delta_{j, k+1, lm} - J_j \Delta_{j+1, klm} - J_{j-1} \Delta_{j-1, klm}) \\ &\quad + iU[\Delta_{jklm}(\sigma_{jj} - \sigma_{kk} + \sigma_{ll} - \sigma_{mm}) \\ &\quad + (\Delta_{jjlm} - \Delta_{kklm})\sigma_{jk} + (\Delta_{jklm} - \Delta_{jklm})\sigma_{lm}] \\ &\quad + i(\epsilon_j - \epsilon_k + \epsilon_l - \epsilon_m) \Delta_{jklm}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

## 4.3 Bogoliubov-Backreaction-Zustand aus Meanfield-Zustand

Wie in Abschnitt 3.5.3 hergeleitet wurde, lässt sich ein Vielteilchenzustand in der Fock-Basis aus einem Meanfield-Zustand über die Relation

$$|\Psi\rangle = \sum_{(n_1, \dots, n_M)} c_{n_1, \dots, n_M} |n_1, \dots, n_M\rangle \quad \text{mit} \quad c_{n_1, \dots, n_M} = \prod_{m=1}^M \sqrt{\frac{N!}{n_m!}} c_m^{n_m} \quad (4.27)$$

konstruieren. Der Meanfield-Zustand der  $j$ -ten Mulde folgt dabei der Definition

$$\Psi_j = N c_j \quad \text{mit} \quad c_j = \sqrt{\frac{n_j}{N}} e^{i\varphi} \quad (4.28)$$

Im Folgenden soll dieser Zusammenhang ausgenutzt werden, um eine BBR-Darstellung eines Meanfield-Zustands zu finden.

### 4.3.1 Einteilchen-Dichtematrix

Der Erwartungswert eines Operators  $\hat{A}$  ist definiert als

$$\langle \hat{A} \rangle := \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle. \quad (4.29)$$

Für

$$\sigma_{jk} := \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \rangle \quad (4.30)$$

ergibt sich damit unter Verwendung von Gleichung (4.27)

$$\sigma_{jk} = \left[ \sum_{(n_1, \dots, n_M)} \langle n_1, \dots, n_M | c_{n_1, \dots, n_M}^* \right] \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \left[ \sum_{(n_1, \dots, n_M)} c_{n_1, \dots, n_M} | n_1, \dots, n_M \rangle \right]. \quad (4.31)$$

Wird der Erzeugungsoperator nach links und der Vernichtungsoperator nach rechts angewendet, so ergibt sich ein Produkt mit zwei völlig analogen Faktoren:

$$\sigma_{jk} = \left[ \sum_{(n_1, \dots, n_M)} c_{n_1, \dots, n_M} \hat{a}_j | n_1, \dots, n_M \rangle \right]^\dagger \left[ \sum_{(n_1, \dots, n_M)} c_{n_1, \dots, n_M} \hat{a}_k | n_1, \dots, n_M \rangle \right] \quad (4.32)$$

Durch Anwenden der Vernichtungsoperatoren und anschließendes Ausmultiplizieren der Summen ergibt sich

$$\sigma_{jk} = \sum_{(n_1, \dots, n_M)} \sum_{(n'_1, \dots, n'_M)} c_{n_1, \dots, n_M}^* c_{n'_1, \dots, n'_M} \sqrt{n_j n'_k} \langle \dots, n_j - 1, \dots | \dots, n'_k - 1, \dots \rangle. \quad (4.33)$$

Unter Ausnutzung der Orthonormalität der Fock-Basis

$$\langle n_1, \dots, n_M | n'_1, \dots, n'_M \rangle = \delta_{n_1 n'_1} \cdots \delta_{n_M n'_M} \quad (4.34)$$

lässt sich nun eine der beiden Summen eliminieren, was auf die einfache Form

$$\sigma_{jk} = \sum_{(n_1, \dots, n_M)} c_{\dots, n_j+1, \dots, n_k-1, \dots}^* c_{n_1, \dots, n_M} \sqrt{(n_j + 1) n_k} \quad (4.35)$$



führt. Um die zweite Summe zu berechnen, werden zunächst einmal die Definitionen von  $c_{n_1, \dots, n_M}$  eingesetzt:

$$\sigma_{jk} = \sum_{(n_1, \dots, n_M)} \sqrt{\frac{N!}{\dots (n_j + 1)! \dots (n_k - 1)! \dots}} \sqrt{\frac{N!}{n_1! \dots n_M!}} \sqrt{(n_j + 1)n_k} \cdot \prod_{m=1}^M c_m^{n_m} (\dots c_j^{n_j+1} \dots c_k^{n_k-1} \dots)^* \quad (4.36)$$

Durch simple algebraische Umformungen ergibt sich

$$\sigma_{jk} = \sum_{(n_1, \dots, n_M)} n_k \frac{c_j^*}{c_k^*} \frac{N!}{n_1! \dots n_M!} \prod_{m=1}^M (|c_m|^2)^{n_m}, \quad (4.37)$$

worauf nun ein Trick angewandt wird. Um das einzelne  $n_k$  zu eliminieren, wird eine künstliche Ableitung eingebracht:

$$\sigma_{jk} = \sum_{(n_1, \dots, n_M)} n_k \frac{c_j^*}{c_k^*} \frac{N!}{n_1! \dots n_M!} \frac{|c_k|^2}{n_k} \frac{\partial}{\partial (|c_k|^2)} \prod_{m=1}^M (|c_m|^2)^{n_m} \quad (4.38)$$

Durch Anwenden des Multinomialgesetzes

$$\left( \sum_{m=1}^M x_m \right)^N = \sum_{(n_1, \dots, n_M)} \frac{N!}{n_1! \dots n_M!} \prod_{m=1}^M x_m^{n_m} \quad (4.39)$$

und anschließendem Ausführen der Ableitung erhält man das Endergebnis

$$\sigma_{jk} = c_j^* c_k \frac{\partial}{\partial (|c_k|^2)} \left( \sum_{m=1}^M |c_m|^2 \right)^N = c_j^* c_k N \underbrace{\left( \sum_{m=1}^M |c_m|^2 \right)^{N-1}}_{=1} = N c_j^* c_k, \quad (4.40)$$

wobei die Normierung des Meanfield-Zustands

$$\sum_{m=1}^M |c_m|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad (4.41)$$

verwendet wurde.

### 4.3.2 Kovarianztensor

Zur Berechnung des Kovarianztensors

$$\Delta_{jklm} := \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \rangle - \sigma_{jk} \sigma_{lm} \quad (4.42)$$

werden zunächst die Operatoren unter dem ersten Erwartungswert mithilfe der Kommutatorregeln vertauscht:

$$\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \rangle = \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_m \rangle + \langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_m \rangle \delta_{kl} \quad (4.43)$$

Der zweite Term wurde bereits in Abschnitt 4.3.1 berechnet, der erste Term ergibt vollkommen analog dazu

$$\langle \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_m \rangle = c_j^* c_k c_l^* c_m N(N-1). \quad (4.44)$$

Kombiniert man nun alle bisherigen Ergebnisse, so erhält man

$$\Delta_{jklm} = N c_j^* c_m (\delta_{kl} - c_k c_l^*). \quad (4.45)$$

# 5 Implementierung und Numerik

Für die Implementierung der BBR-Methode wurde aufgrund der hohen Anforderungen hinsichtlich Geschwindigkeit und der großen Anzahl verfügbarer Bibliotheken die Programmiersprache C++ gewählt. Für die Integration der Differentialgleichungen wurde eine Implementierung der Dormand-Prince-Methode (Runge-Kutta 5. Ordnung, wahlweise mit Schrittweitenkontrolle; siehe [DP80]) aus der Bibliothek Boost.Numeric.Odeint (siehe [AM13]) verwendet.

Für die Wahl der dimensionslosen Einheiten wurde die Konvention aus [Kre15, S. 44] übernommen.

## 5.1 Normierung der Zustände

Das Viermuldensystem soll in den folgenden Kapiteln bei verschiedenen Teilchenzahlen untersucht werden. Um numerische Unterschiede aufgrund von unterschiedlichen Größenordnungen der Zustandsvariablen, vor allem im Bezug auf die Schrittweitenkontrolle, zu verringern, werden im Folgenden alle Zustände auf die Gesamtteilchenzahl normiert. Dies führt auf die neuen Präparationsvorschriften

$$\tilde{\sigma}_{jk} = \frac{\sigma_{jk}}{N} \stackrel{(4.40)}{=} c_j^* c_k \quad \text{und} \quad (5.1a)$$

$$\tilde{\Delta}_{jklm} = \frac{\Delta_{jklm}}{N^2} \stackrel{(4.45)}{=} \frac{c_j^* c_m}{N} (\delta_{kl} - c_k c_l^*) \quad \text{mit} \quad (5.1b)$$

$$c_j = \sqrt{\frac{n_j}{N}} e^{i\varphi_j}. \quad (5.1c)$$

Hiermit lassen sich die beiden Differentialgleichungen (4.22) und (4.26), die die Dynamik der BBR-Methode vollständig beschreiben, schreiben als

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\sigma}_{jk} &= -J_{k-1} \tilde{\sigma}_{j,k-1} - J_k \tilde{\sigma}_{j,k+1} + J_j \tilde{\sigma}_{j+1,k} + J_{j-1} \tilde{\sigma}_{j-1,k} \\ &+ UN \left( \tilde{\Delta}_{jkkk} + \tilde{\sigma}_{jk} \tilde{\sigma}_{kk} - \tilde{\Delta}_{jjjk} - \tilde{\sigma}_{jj} \tilde{\sigma}_{jk} \right) \\ &+ (\epsilon_k - \epsilon_j) \tilde{\sigma}_{jk} \end{aligned} \quad (5.2)$$

und

$$\begin{aligned}
 \hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Delta}_{jklm} = & i \left( J_{m-1} \tilde{\Delta}_{jkl,m-1} + J_m \tilde{\Delta}_{jkl,m+1} - J_l \tilde{\Delta}_{jk,l+1,m} - J_{l-1} \tilde{\Delta}_{jk,l-1,m} \right. \\
 & \left. + J_{k-1} \tilde{\Delta}_{j,k-1,lm} + J_k \tilde{\Delta}_{j,k+1,lm} - J_j \tilde{\Delta}_{j+1,klm} - J_{j-1} \tilde{\Delta}_{j-1,klm} \right) \\
 & + iUN \left[ \tilde{\Delta}_{jklm} (\tilde{\sigma}_{jj} - \tilde{\sigma}_{kk} + \tilde{\sigma}_{ll} - \tilde{\sigma}_{mm}) \right. \\
 & \left. + \left( \tilde{\Delta}_{jjlm} - \tilde{\Delta}_{kklm} \right) \tilde{\sigma}_{jk} + \left( \tilde{\Delta}_{jklm} - \tilde{\Delta}_{jklm} \right) \tilde{\sigma}_{lm} \right] \\
 & + i(\epsilon_j - \epsilon_k + \epsilon_l - \epsilon_m) \tilde{\Delta}_{jklm}.
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

Effektiv sorgt dabei die Nichtlinearität der Differenzialgleichungen dafür, dass alle Wechselwirkungen mit der Teilchenzahl skaliert werden:

$$U \rightsquigarrow NU \implies g \rightsquigarrow Ng \tag{5.4}$$

## 5.2 Numerische Schwierigkeiten

Bei der Entwicklung des Simulationsprogramms wurden einige numerische Schwierigkeiten identifiziert, auf die an dieser Stelle kurz eingegangen werden soll.

Da für das  $\mathcal{PT}$ -symmetrische System in jedem Schritt die Systemparameter abhängig vom aktuellen Zustand angepasst werden, verstärken sich hier numerische Abweichungen mit der Zeit. Dadurch reichen bereits kleine Abweichungen zu Beginn der Simulation aus, um die Dynamik am Ende stark zu beeinflussen, was das System sehr instabil macht. Infolge dessen muss mit einer großen Genauigkeit gerechnet werden, um numerische Fehler so gering wie möglich zu halten und den Ergebnissen vertrauen zu können. Sofern nicht anders vermerkt, wurde für alle folgenden Diskussionen die Schrittweitenkontrolle des Integrationsalgorithmus mit einem relativen Fehler von  $10^{-16}$  und einem absoluten Fehler von  $10^{-20}$  konfiguriert. Dies führte zu Schrittweiten im Bereich von  $10^{-7}$ , die im Extremfall auf bis zu  $10^{-11}$  verringert wurden.

Zudem beeinflusste die Wahl des Parameters  $d(t)$ , der theoretisch keinerlei Einfluss auf die Dynamik haben sollte, die numerische Stabilität teils enorm. Hier spielt sowohl eine Rolle, ob  $d$  konstant gewählt oder dynamisch angepasst wird, als auch die Größenordnung, in der sich  $d$  bewegt. Für Simulationen mit konstantem  $d$  wird im folgenden der empirische Wert

$$d = 8\Gamma, \tag{5.5}$$

der zu durchweg sinnvollen Ergebnissen führte, verwendet. Insgesamt scheint ein variables  $d$  jedoch eine größere Stabilität zu erzielen. Eine nähere Diskussion findet in Kapitel 7 statt.

# 6 Statische Systemparameter

In einer ersten Untersuchung der BBR-Methode werden die Systemparameter (Muldenenergien und Tunnelamplituden) konstant gelassen. Das resultierende System ist zwar nicht  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch, jedoch eignet es sich gut, um die Dynamik mit der Meanfield-Methode zu vergleichen.

## 6.1 System ohne Wechselwirkung

Abbildung 6.1a zeigt die Populationen der mittleren Systemmulden ohne Wechselwirkung für  $N = 19$  Teilchen. Die Anfangsbedingungen wurden dabei wie folgt gewählt:

$$n_1 = 13 \qquad \qquad \qquad \varphi_1 = 0 \qquad \qquad (6.1a)$$

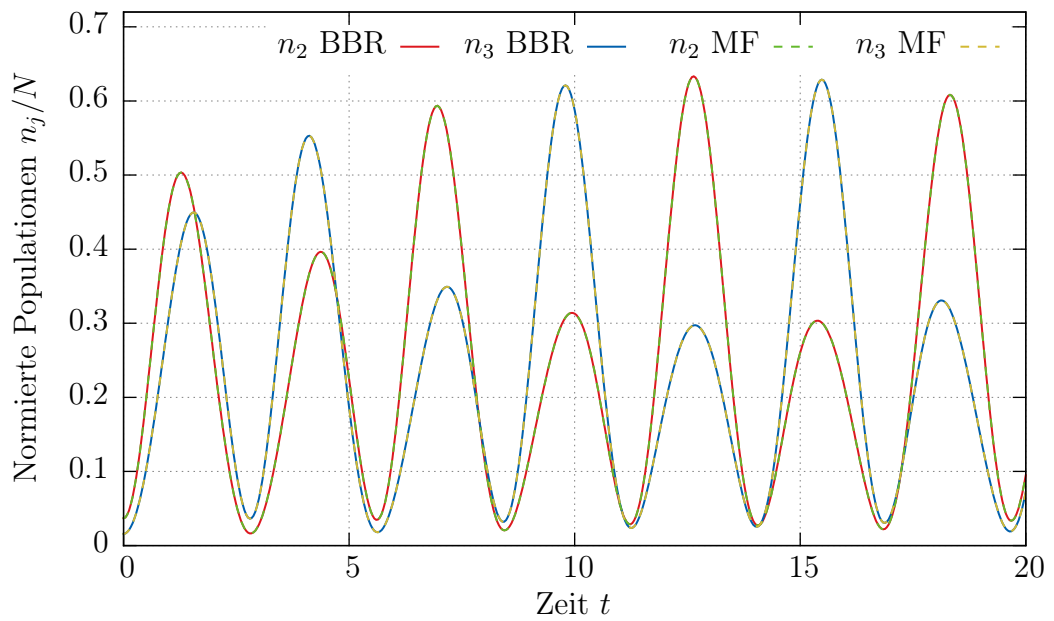
$$n_2 = 0.7 \qquad \qquad \qquad \varphi_2 = 0 \qquad \qquad (6.1b)$$

$$n_3 = 0.3 \qquad \qquad \qquad \varphi_3 = 0 \qquad \qquad (6.1c)$$

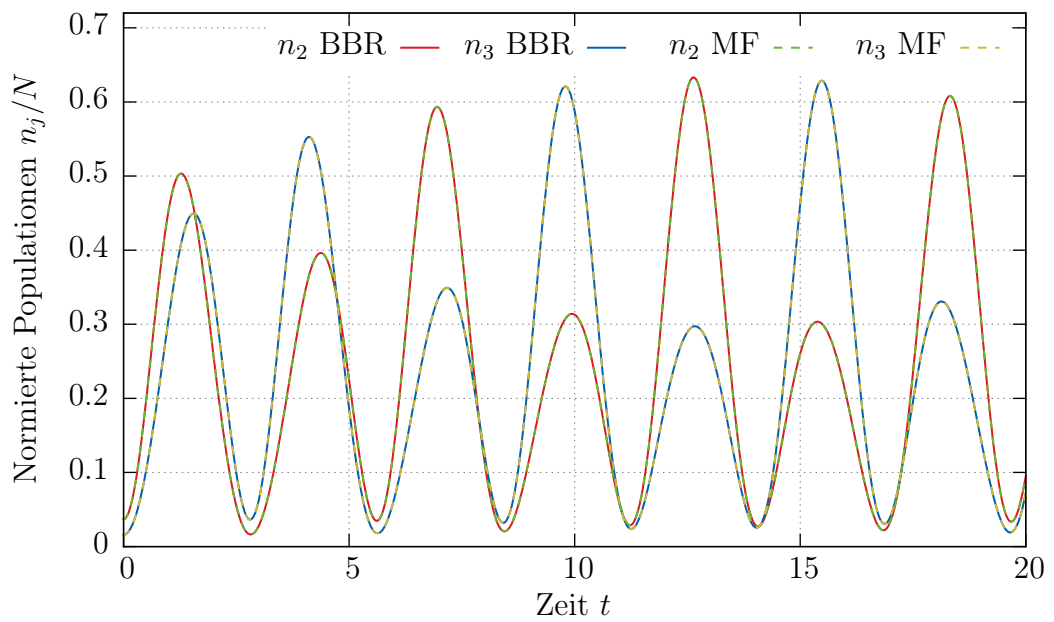
$$n_4 = 5 \qquad \qquad \qquad \varphi_4 = 0 \qquad \qquad (6.1d)$$

Zudem wurden alle Tunnelamplituden auf  $J_j = 1$  und Muldenenergien auf  $\epsilon_j = 0$  gesetzt.

Es fällt auf, dass es für die gewählten Parameter keinerlei Unterschiede zwischen der Meanfield- und der BBR-Methode gibt; die entsprechenden Kurven liegen exakt übereinander. Der Grund hierfür ist einleuchtend: Ohne Wechselwirkung beeinflussen sich die Bosonen in keinsten Weise. Dies hat zur Folge, dass jedes Teilchen für sich mit einer Einteilchen-Wellenfunktion vollständig beschrieben werden kann. Da alle Teilchen des Bose-Einstein-Kondensats identisch sind und dieselben Zustände mit derselben Wahrscheinlichkeit einnehmen, ist eine einzige Einteilchen-Wellenfunktion bereits ausreichend, um alle Teilchen gleichzeitig zu beschreiben. Ohne Wechselwirkung ist der Meanfield-Ansatz somit keine Näherung, sondern eine exakte Beschreibung der Vielteilchendynamik. Dies gilt auch für die Bogoliubov-Backreaction-Methode: Die Näherung der BBR-Methode wirkt sich, wie in Abschnitt 4.2 gezeigt, nur auf die Zeitentwicklung des Kovarianzensors aus. Da die SPDM ohne Wechselwirkung jedoch nicht an höhere Momente wie die Kovarianzen koppelt (siehe Gleichung 4.22), wird die Dynamik für  $g = 0$  auch durch die BBR-Methode exakt beschrieben.



(a)  $N = 19$  Teilchen



(b)  $N = 1900$  Teilchen

**Abbildung 6.1:** Zeitliche Entwicklung der Systemmulden-Populationen für  $N = 19$  und  $N = 1900$  Teilchen und ohne Wechselwirkung ( $g = 0$ ) für die Bogoliubov-Backreaction-Methode (BBR) und Meanfield-Näherung (MF).

Abbildung 6.1b zeigt dasselbe System wie Abbildung 6.1a, jedoch wurden alle Teilchenzahlen um den Faktor 100 skaliert ( $N = 1900$ ). Beide Systeme weisen eine identische Dynamik auf, was die im vorhergehenden Abschnitt dargelegte Argumentation bestätigt.

## 6.2 System mit Wechselwirkung

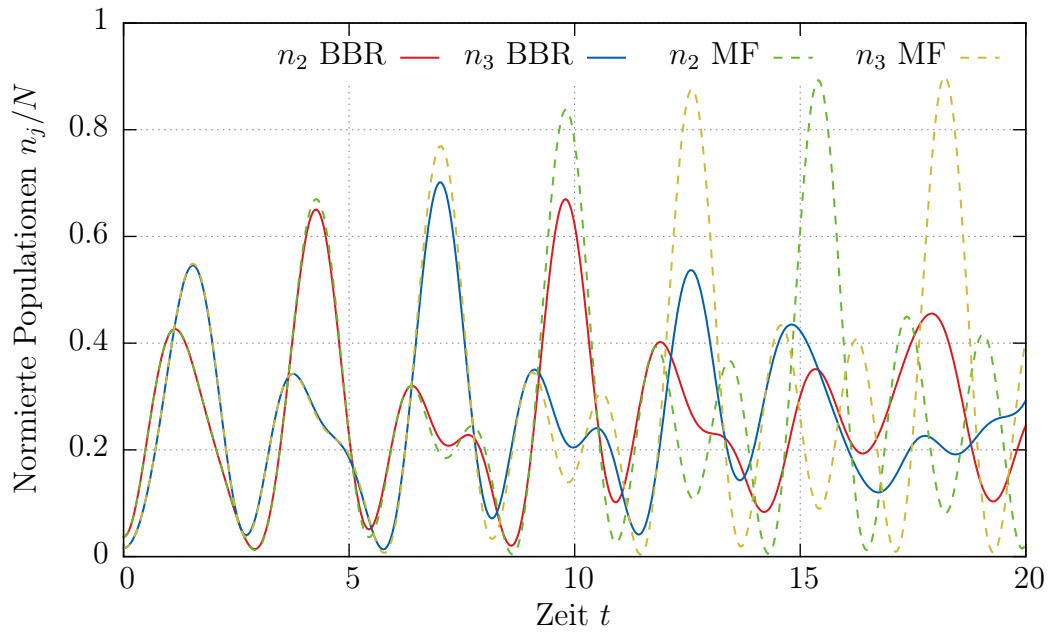
Wird nun bei ansonsten identischen Anfangsbedingungen eine Wechselwirkung zwischen den Teilchen eingestellt, so ändert sich das im vorherigen Abschnitt beschriebene Verhalten deutlich, wie Abbildung 6.2 zeigt. Stimmen die Dynamiken für kleine Zeiten noch weitgehend überein, weisen die beiden Methoden gegen Ende ein vollkommen verschiedenes Verhalten auf (Abbildung 6.2a). Werden die Teilchenzahlen erhöht, so passt sich die BBR-Methode zunehmend der Meanfield-Näherung an, während letztere invariant bleibt (Abbildung 6.2b).

Während bei einer Gesamtpopulation von wenigen hundert Teilchen zwar schon eine sehr gute qualitative Übereinstimmung in den ersten 15 bis 20 Zeiteinheiten zu erkennen ist, es jedoch durchaus noch relevante quantitative Unterschiede gibt, so sind ab mehreren tausend Teilchen auf der betrachteten Zeitskala keine Abweichungen der Meanfield-Näherung von der BBR-Methode mehr zu erkennen. Da typische, experimentell realisierte Bose-Einstein-Kondensate eine Größe von einigen Tausend bis mehreren hunderttausend Teilchen aufweisen (siehe z.B. [And+95], [Bra+95], [Zwi+03]), ist es oft gerechtfertigt, für deren Beschreibung auf die Meanfield-Näherung zurückzugreifen.

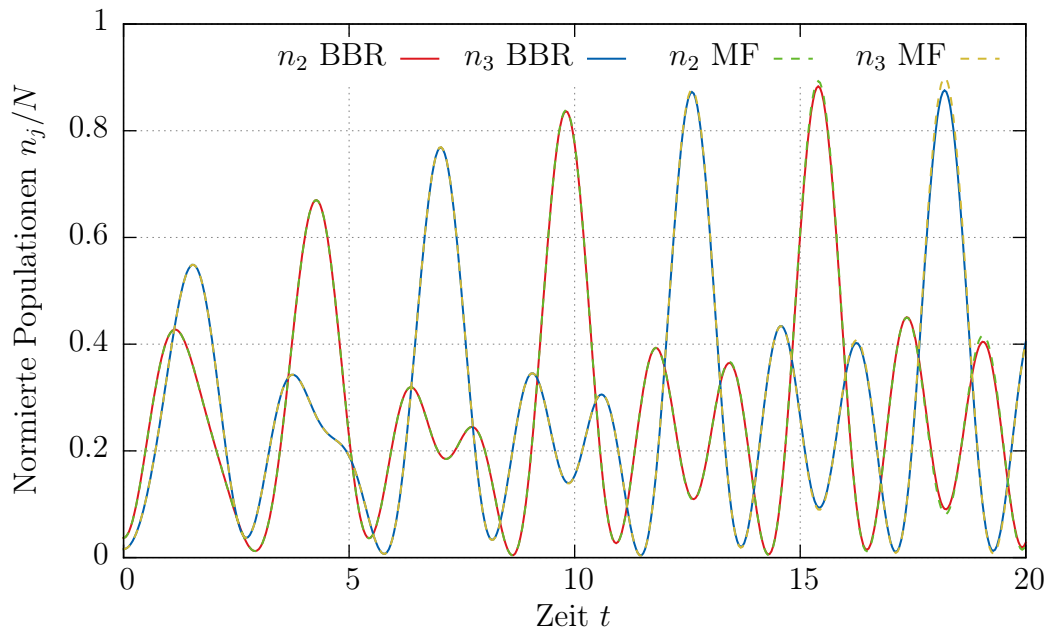
## 6.3 Vergleich mit vollständiger Vielteilchendynamik

Abbildung 6.3 zeigt einen Vergleich der BBR-Methode mit einer numerisch exakten Vielteilchenrechnung von Daniel Dizdarevic (Masterarbeit in Vorbereitung). Wie in Abbildung 6.3a zu erkennen ist, kommt es bei  $N = 19$  Teilchen anfangs zu einer sehr guten Übereinstimmung beider Methoden. Ab  $t \approx 10$  sind erste Unterschiede in der Amplitude der Schwingungen feststellbar. Stimmen die Dynamiken zunächst noch qualitativ überein, so kommt es ab  $t \gtrsim 14$  zu immer stärkeren Abweichungen, sodass hier beispielsweise die BBR-Methode je ein zusätzliches Maximum und Minimum besitzt, das die vollständige Vielteilchendynamik nicht aufweist oder umgekehrt.

Wird die Gesamtteilchenzahl auf  $N = 190$  erhöht (Abbildung 6.3b), so sind auf dem betrachteten Intervall  $t \in [0, 20]$  kaum noch Unterschiede erkennbar. Erst für  $t \gtrsim 18$  kommt es zu Abweichungen der Schwingungsamplituden; qualitativ stimmen die Kurvenverläufe selbst hier noch sehr gut überein.



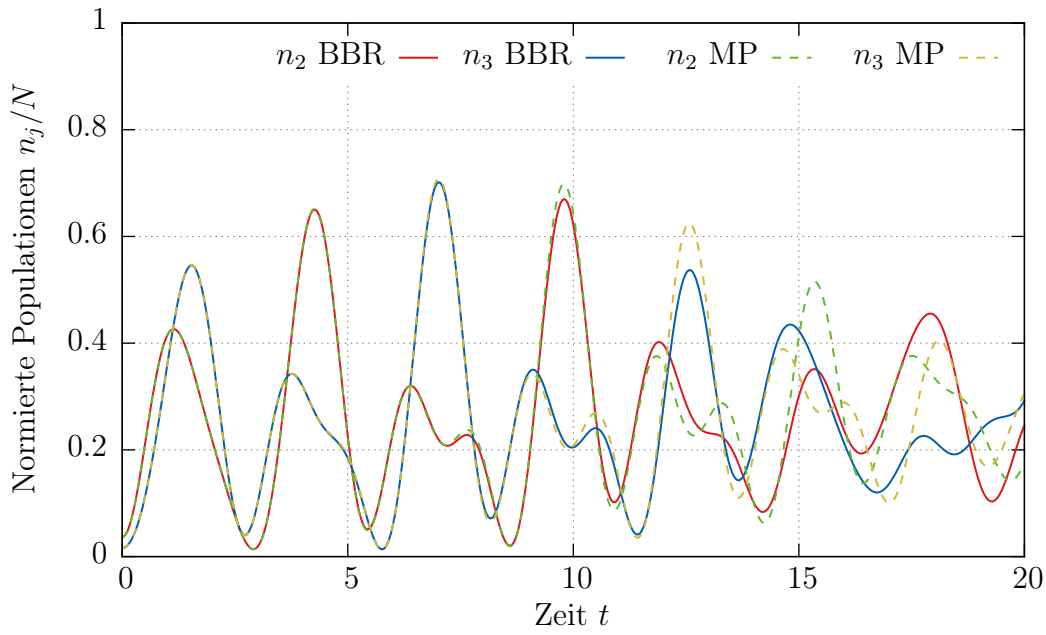
(a)  $N = 19$  Teilchen



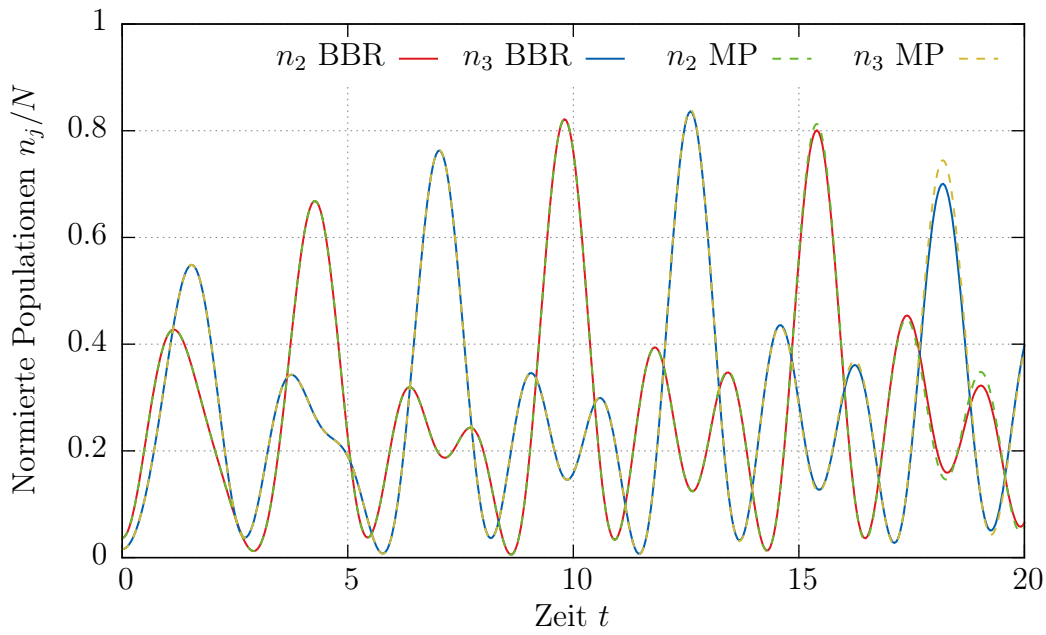
(b)  $N = 1900$  Teilchen

**Abbildung 6.2:** Zeitliche Entwicklung der Systemmulden-Populationen für  $N = 19$  und  $N = 1900$  Teilchen und eine Wechselwirkung von  $g = 1$  für die Bogoliubov-Backreaction-Methode (BBR) und Meanfield-Näherung (MF).





(a)  $N = 19$  Teilchen



(b)  $N = 190$  Teilchen

**Abbildung 6.3:** Zeitliche Entwicklung der Systemmulden-Populationen für  $N = 19$  und  $N = 190$  Teilchen und eine Wechselwirkung von  $g = 1$  für die Bogoliubov-Backreaction-Methode (BBR) und die exakte Vielteilchendynamik (MP).

Durch Vergleich der Abbildungen 6.2a und 6.3a ist ersichtlich, dass die BBR-Methode für kleine Teilchenzahlen eine deutlich bessere Approximation der vollständigen Vielteilchendynamik darstellt als die Meanfield-Näherung. Insbesondere das schnelle Abklingverhalten der Schwingung, bei dem die Wechselwirkung dafür sorgt, dass alle Mulden etwa gleich besetzt sind, wird von der BBR-Methode sehr gut reproduziert. Die Verwendung der BBR-Methode ist daher mehr als gerechtfertigt.

# 7 $\mathcal{PT}$ -symmetrische Variation der Systemparameter

Das Hauptaugenmerk bei der Untersuchung der BBR-Methode richtet sich auf ein Viermuldensystem mit  $\mathcal{PT}$ -symmetrischem Teilsystem, wie es in Kapitel 3 eingeführt wurde. Insbesondere wird im Folgenden untersucht werden, wie lange ein solches System näherungsweise  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch gehalten werden kann, wofür von nun an der Begriff Lebensdauer verwendet wird.

## 7.1 Abbruch der Integration

In der vorliegenden Arbeit werden die in Abschnitt 3.3 für die Meanfield-Näherung eingeführten Variationsvorschriften für die Systemparameter verwendet. Da die Dynamik der BBR-Methode jedoch meist nicht exakt mit der der Meanfield-Näherung übereinstimmt, garantieren diese Vorschriften nicht die Erhaltung der  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie. Zur Bestimmung der Lebensdauer muss daher eine Bedingung festgelegt werden, die bestimmt, ob ein System näherungsweise  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch ist oder nicht. Hierzu werden die Bedingungen (3.10a) bis (3.10d) verwendet:

$$\hbar j_{12} - 2\Gamma n_2 \stackrel{!}{=} 0 \quad (7.1a)$$

$$\hbar j_{34} - 2\Gamma n_3 \stackrel{!}{=} 0 \quad (7.1b)$$

$$J_{12}C_{13} - J_{34}C_{24} \stackrel{!}{=} 0 \quad (7.1c)$$

$$J_{12}\tilde{j}_{13} - J_{34}\tilde{j}_{24} \stackrel{!}{=} 0 \quad (7.1d)$$

Durch Bilden der euklidischen Norm erhält man ein Maß für die Abweichung des Systems vom entsprechenden  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zweimuldensystem:

$$\frac{1}{N} \sqrt{(\hbar j_{12} - 2\Gamma n_2)^2 + (\hbar j_{34} - 2\Gamma n_3)^2 + (J_{12}\tilde{j}_{13} - J_{34}\tilde{j}_{24})^2} =: \delta_{\mathcal{PT}} \stackrel{!}{\leq} \delta_{\mathcal{PT}}^{(\max)} \quad (7.2)$$

Hierbei wurde die Bedingung (7.1c) außer acht gelassen, da diese aufgrund der Definition der Funktion  $d(t)$  immer erfüllt ist; der Faktor  $1/N$  sorgt zusätzlich dafür, dass

$\delta_{\mathcal{PT}}$  unabhängig von der Teilchenzahl ist. Wird der Schwellwert  $\delta_{\mathcal{PT}}^{(\max)}$  zu einem Zeitpunkt  $t_{\max}$  überschritten, so wird die Integration abgebrochen und  $t_{\max}$  als Lebensdauer bezeichnet. Sofern nicht anders vermerkt, wird im Folgenden für  $\delta_{\mathcal{PT}}^{(\max)}$  ein Wert von 1 angenommen.

Bei einigen Simulationen kam es im Verlauf der Rechnung zu einer Divergenz einer oder mehrerer Muldenenergien aufgrund von numerischen Instabilitäten oder einer leeren Reservoirmulde. Dies hatte zur Folge, dass die Schrittweitenkontrolle des Integrationsalgorithmus die Schrittweite radikal verkleinerte und kurz darauf die Integration aufgrund der im vorangehenden Abschnitt gestellten Bedingung abbrach. Um im Folgenden die Simulationszeiten zu verkürzen ohne die Lebensdauer signifikant zu beeinflussen, wird daher eine zweite Abbruchbedingung aufgestellt, die ebendiese Divergenz der Muldenenergien erkennt:

$$\left| \frac{\epsilon_j(t)}{\epsilon_j(0)} \right| \stackrel{!}{\leq} 10^9 \quad \text{mit } j \in \{1, 4\} \quad (7.3)$$

Der Schwellwert  $10^9$  ist dabei empirisch so groß gewählt, dass ein versehentlicher Abbruch ausgeschlossen werden kann.

## 7.2 Zeitentwicklung

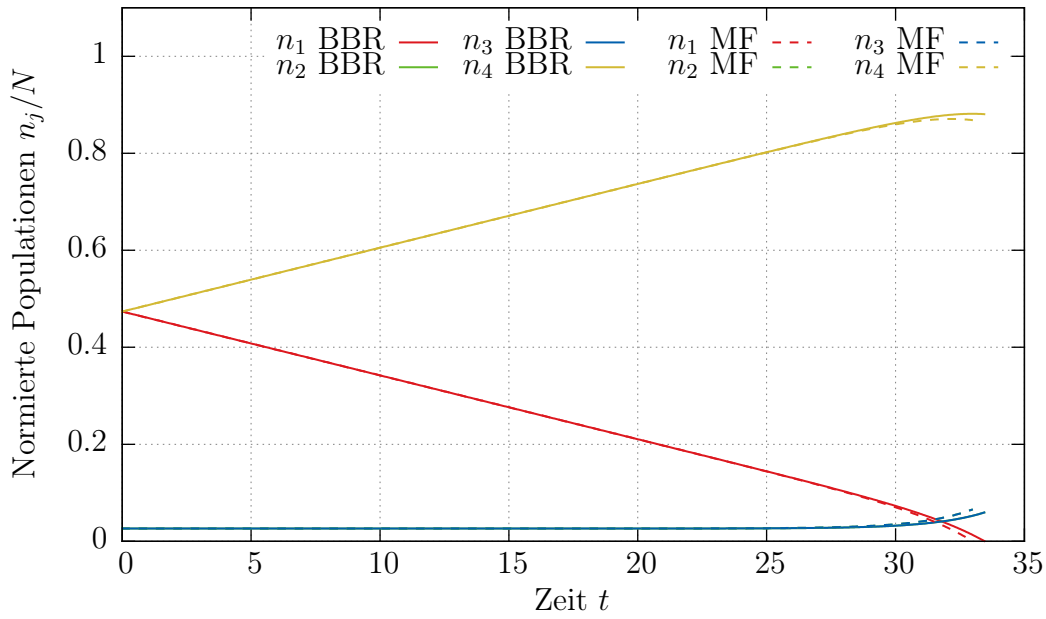
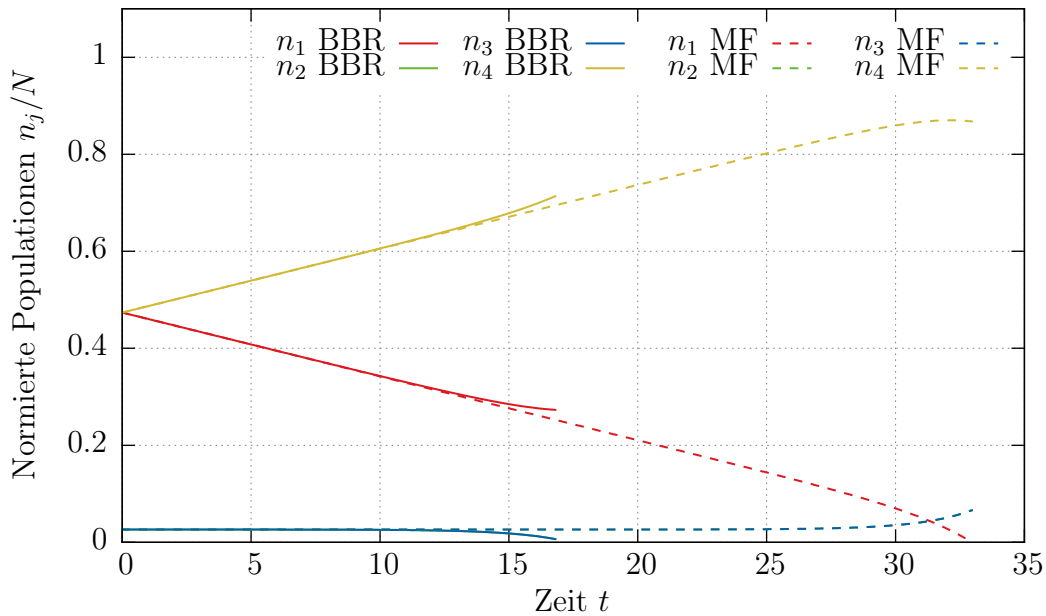
Für die folgenden Untersuchungen werden die Mulden analog zu [Kre15] mit den anfänglichen Relativpopulationen

$$\frac{n_1}{N} = \frac{18}{38}, \quad \frac{n_2}{N} = \frac{1}{38}, \quad \frac{n_3}{N} = \frac{1}{38} \quad \text{und} \quad \frac{n_4}{N} = \frac{18}{38} \quad (7.4)$$

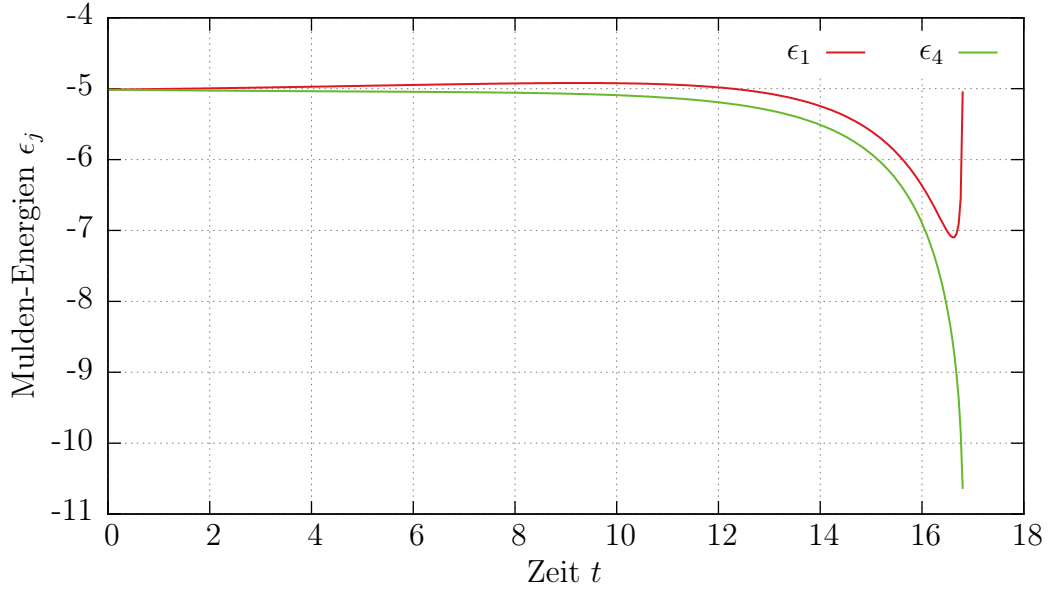
präpariert.

Abbildung 7.1a vergleicht die zeitliche Entwicklung der Muldenpopulationen für die BBR- und Meanfield-Näherung ohne Wechselwirkung. Hierbei wurde eine Gesamtteilchenzahl von  $N = 95$  gewählt und die Phasendifferenz der mittleren Systemmulden zu Beginn nach Gleichung (3.30) gewählt; für die Tunnelkonstanten wurde der Wert  $J_j = 1$  gewählt. Die Systemparameter werden so angepasst, dass das resultierende System einem  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zweimuldensystem mit  $\Gamma = 0,25$  entspricht.

Die Populationen aller Mulden weisen die meiste Zeit über einen linearen Verlauf auf, was sich gut mit der Theorie deckt, da die Flüsse in das zentrale Zweimuldensystem hinein und aus ihm heraus durch den konstanten Parameter  $\Gamma$  festgelegt werden und bei  $n_2 = n_3$  gleich sein sollten. Da durch die  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Anpassung der Systemmulden-Phasen auch der Fluss zwischen den zentralen Systemmulden auf diesen Wert gebracht wird, bleiben die Populationen  $n_2$  und  $n_3$  näherungsweise konstant. Erst gegen Ende der Integration kommt es aufgrund von numerischen Ungenauigkeiten zu

(a)  $g = 0$ (b)  $g = 0,1$ 

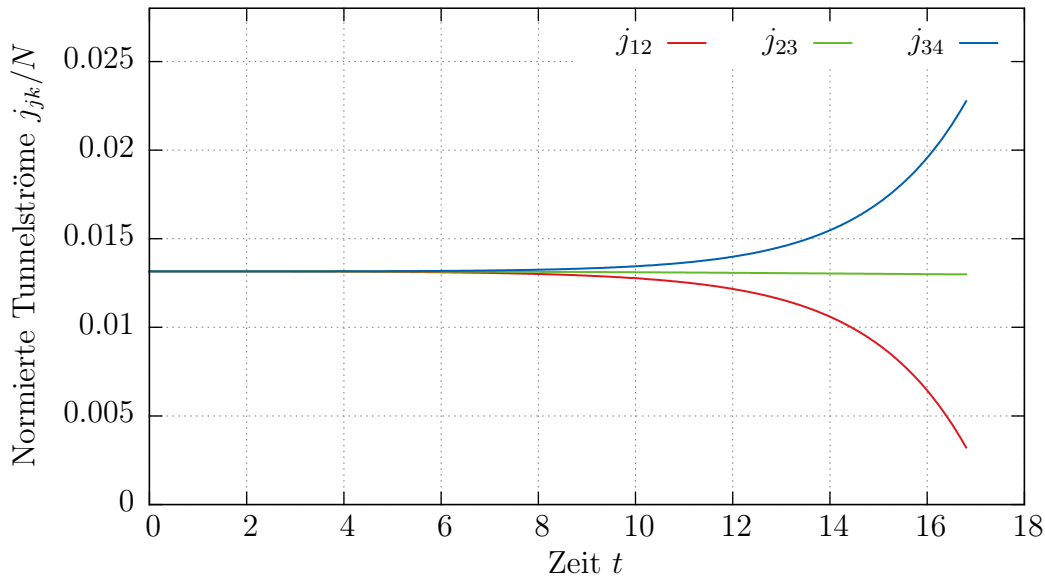
**Abbildung 7.1:** Zeitliche Entwicklung der Populationen bei einer Gesamtteilchenzahl von  $N = 95$  und den Wechselwirkungsstärken  $g = 0$  und  $g = 0,1$  für die Bogoliubov-Backreaction-Methode (BBR) und Meanfield-Näherung (MF). Die Phasen der Systemmulden wurden gemäß Gleichung (3.30) angepasst.



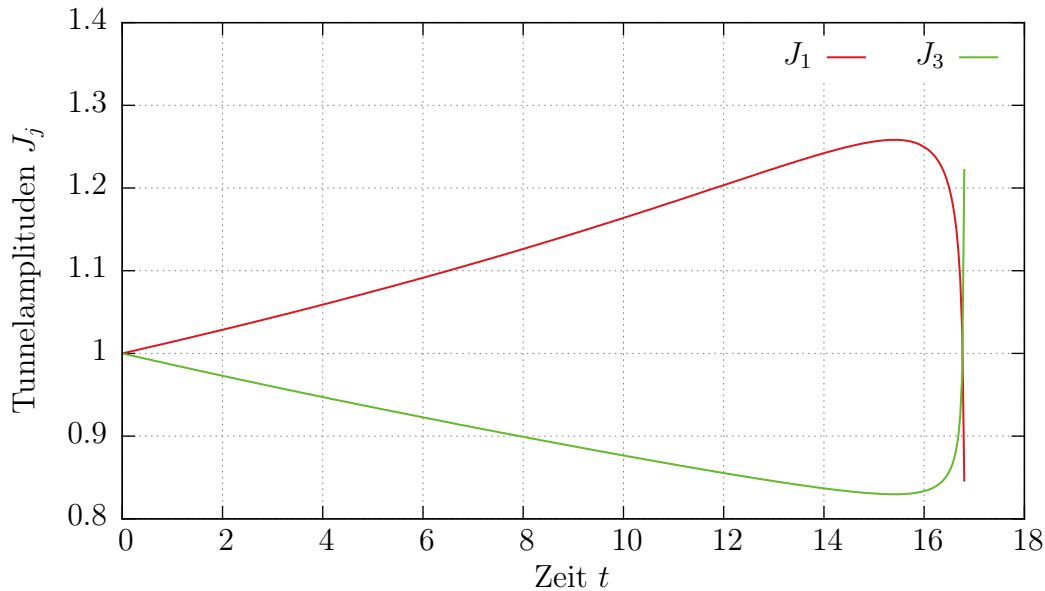
**Abbildung 7.2:** Zeitliche Entwicklung der Reservoirmulden-Energien bei einer Gesamtteilchenzahl von  $N = 95$  und der Wechselwirkungsstärke  $g = 0,1$  für die BBR-Methode. Die Phasen der Systemmulden wurden gemäß Gleichung (3.30) angepasst; die Systemparameter werden  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch variiert.

Abweichungen von diesem Verhalten. Da hier keine Wechselwirkung vorliegt, stimmt die Dynamik der BBR-Methode im Rahmen der numerischen Genauigkeit mit der Meanfield-Näherung überein. Die Abweichungen kommen lediglich dadurch zustande, dass bei der Integration durch die stetige Anpassung der Systemparameter abhängig vom aktuellen Zustand deutlich größere Instabilitäten im Vergleich zu Kapitel 6 auftreten. Grund hierfür ist, dass die Variationsvorschriften zum Erhalt der  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie davon ausgehen, dass bereits ein  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Zustand vorliegt und diese die Parameter nur so anpassen, dass ausgehend hiervon die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie auch im nächsten Schritt erhalten bleibt. Ist der aktuelle Zustand jedoch aufgrund numerischer Ungenauigkeiten nicht exakt  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch, so werden auch die Systemparameter falsch angepasst, was die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie-Abweichung weiter verstärkt.

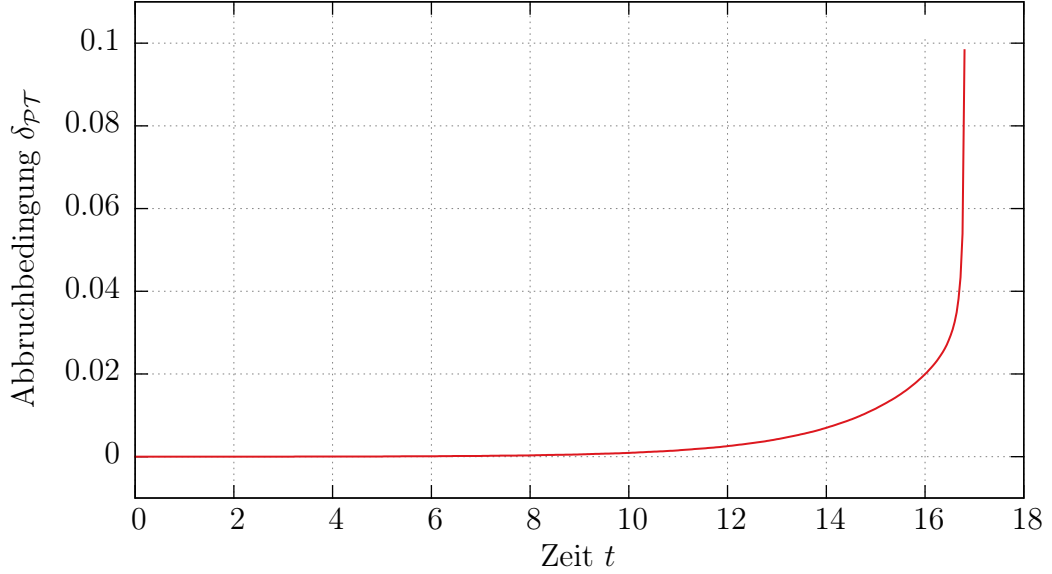
Wird nun dasselbe System mit einer Wechselwirkung von  $g = 0,1$  betrachtet (Abbildungen 7.1b und 7.2 bis 7.5), so kommt es zu Abweichungen der BBR-Dynamik vom Meanfield-Verhalten, die dazu führen, dass die Variationsvorschriften die  $\mathcal{PT}$ -Bedingungen nicht mehr exakt erfüllen. Infolgedessen nimmt – in diesem Fall – der Fluss in das System hinein nach einiger Zeit ab, was an einem Abflachen der  $n_1$ -Kurve zu sehen ist, und der Fluss aus ihm heraus zeitgleich zu (Anstieg der  $n_4$ -Kurve, siehe Abbildung 7.3). Folglich wird die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie verletzt und es kommt zum frühzeitigen Abbruch der Integration (siehe Abbildung 7.5).



**Abbildung 7.3:** Zeitliche Entwicklung der Tunnelströme  $j_{jk}$  bei einer Gesamtteilchenzahl von  $N = 95$  und der Wechselwirkungsstärke  $g = 0,1$  für die BBR-Methode. Die Phasen der Systemmulden wurden gemäß Gleichung (3.30) angepasst; die Systemparameter werden  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch variiert.



**Abbildung 7.4:** Zeitliche Entwicklung der Tunnelamplituden  $J_j$  bei einer Gesamtteilchenzahl von  $N = 95$  und der Wechselwirkungsstärke  $g = 0,1$  für die BBR-Methode. Die Phasen der Systemmulden wurden gemäß Gleichung (3.30) angepasst; die Systemparameter werden  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch variiert.



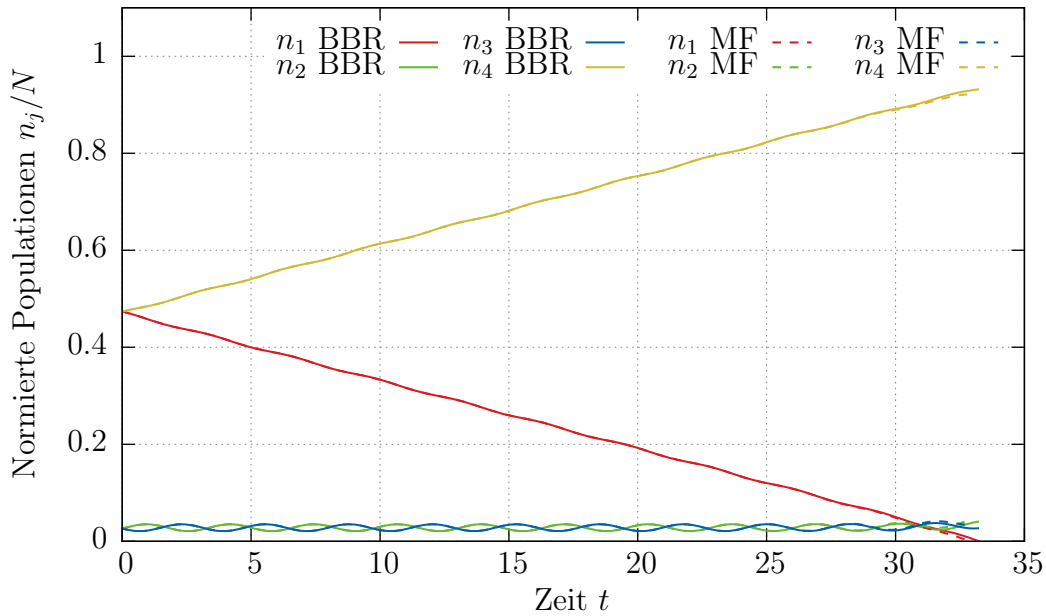
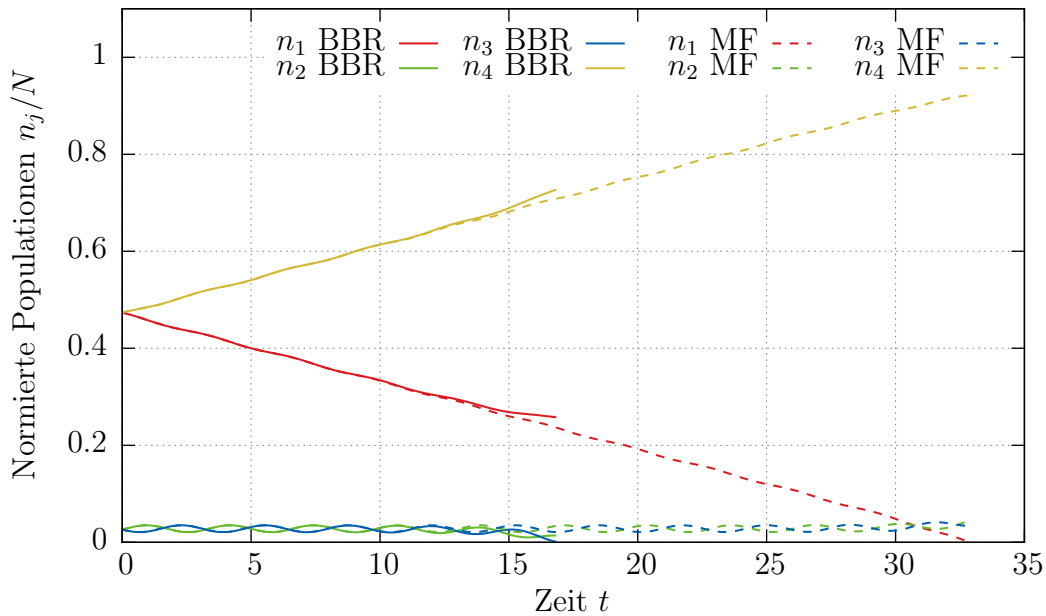
**Abbildung 7.5:** Zeitliche Entwicklung von Gleichung (7.2) bei einer Gesamtteilchenzahl von  $N = 95$  und der Wechselwirkungsstärke  $g = 0,1$  für die BBR-Methode. Die Phasen der Systemmulden wurden gemäß Gleichung (3.30) angepasst; die Systemparameter werden  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch variiert.

Zu bemerken ist noch, dass die Tunnelamplituden  $J_j$  trotz entsprechender Wahl von  $d$  nicht konstant bleiben (Abbildung 7.4). Grund hierfür ist, dass durch Anpassung eines Parameters im Allgemeinen keine zwei Größen exakt eingestellt werden können. Im vorliegenden Fall sorgt die Wahl von  $d$  zwar dafür, dass die Änderung der Tunnelkonstanten verringert wird, da sich  $J_1$  und  $J_3$  aber entgegengesetzt entwickeln ( $J_1$  steigt,  $J_3$  sinkt), kann dies nach Gleichung (3.13) nicht verhindert werden.

Abbildung 7.6 zeigt ein System, bei dem die Phasen der mittleren Systemmulden nicht  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch angepasst wurden (d.h.  $\varphi_2 = \varphi_3$ ), dessen verbleibende Parameter jedoch wie oben beschrieben präpariert wurden. Es wird hier also keine  $\mathcal{PT}$ -symmetrische stationäre Lösung untersucht, sondern ein Zustand mit oszillierender Dynamik. Die Oszillationen in  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systemen haben jedoch charakteristische Eigenschaften wie z.B. das gleichphasige Pulsen von  $n_2$  und  $n_3$  bei starken Gewinnen und Verlusten, die auch im vorliegenden Modell zur Realisierung  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Systeme auftreten (siehe [Kre15]) und rechtfertigen damit eine Betrachtung an dieser Stelle.

Der lineare Verlauf der vorhergehenden Betrachtung ist nun durch eine leichte Oszillation überlagert, die jedoch weder einen größeren Einfluss auf die Lebensdauer des Systems hat, noch die qualitative Entwicklung des Systems verändert (Anstieg von  $n_4$ , Abfall von  $n_1$ ,  $n_2$  und  $n_3$  im zeitlichen Mittel konstant). Die Überlagerung der zeitlichen Entwicklung mit einer Oszillation bei nicht-stationären Zuständen ist in sehr ähnlicher Form



(a)  $g = 0$ (b)  $g = 0,1$ 

**Abbildung 7.6:** Zeitliche Entwicklung der Populationen bei einer Gesamtteilchenzahl von  $N = 95$  und den Wechselwirkungsstärken  $g = 0$  und  $g = 0,1$  für die Bogoliubov-Backreaction-Methode (BBR) und Meanfield-Näherung (MF). Die Kondensate der inneren Systemmulden wurden phasengleich präpariert ( $\varphi_2 = \varphi_3$ ).

auch bei anderen Größen wie den Tunnelströmen  $j_{jk}$  oder den Muldenenergien  $\epsilon_{jk}$  zu beobachten.

## 7.3 Lebensdauer des Systems

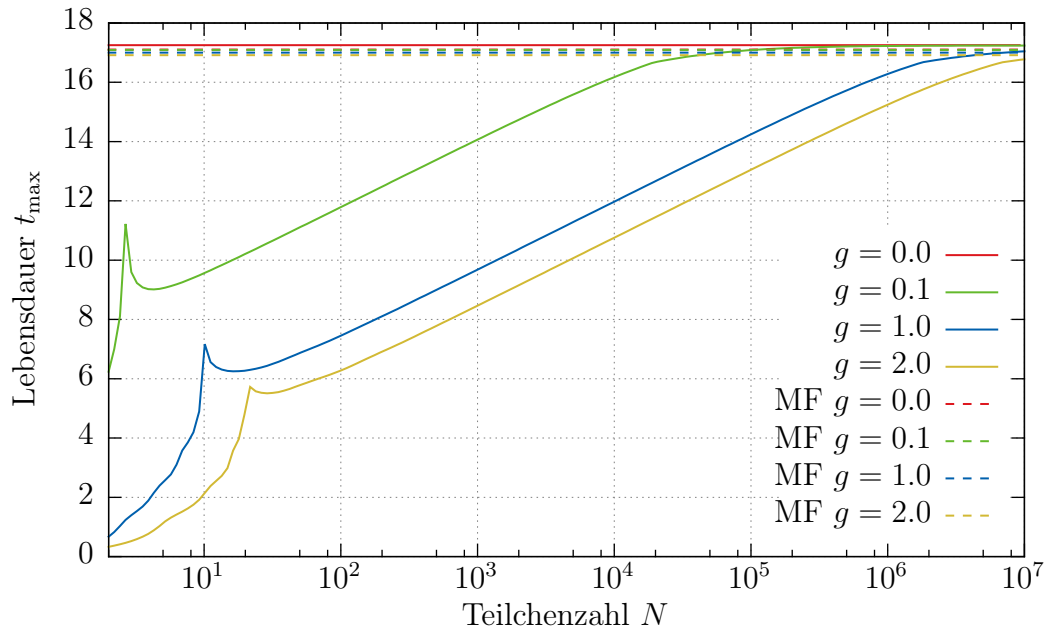
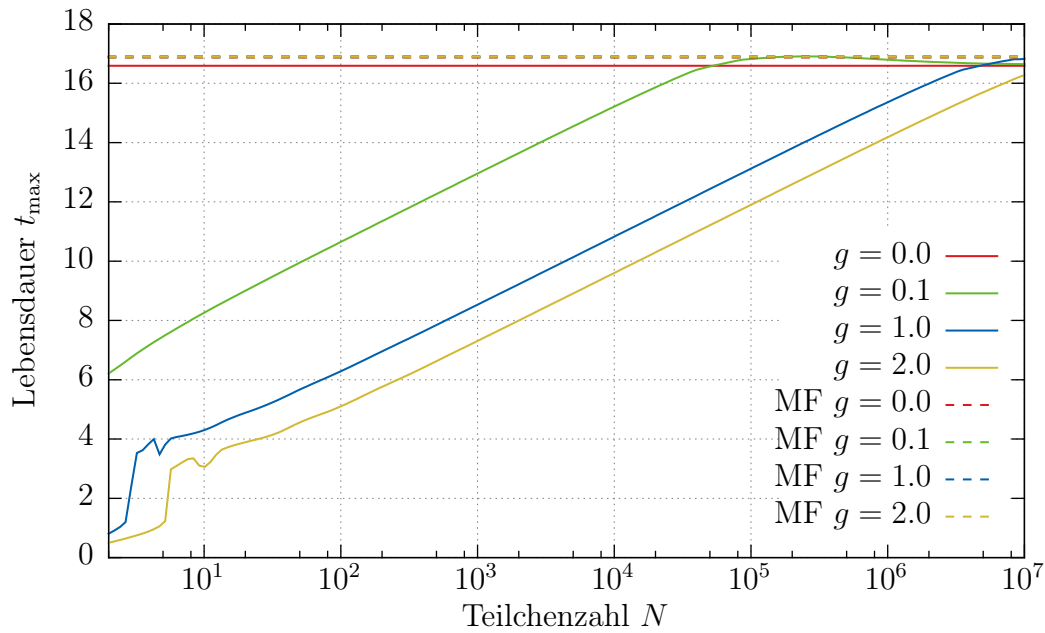
Als nächstes soll untersucht werden, wie lange die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie des inneren Teilsystems für unterschiedliche Teilchenzahlen aufrecht erhalten werden kann. Die Meanfield-Näherung ist bekanntermaßen unabhängig von der Gesamtteilchenzahl, weshalb dies trivialerweise auch für die Lebensdauer eines  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systems im Meanfield gilt. Wie im vorhergehenden Abschnitt gezeigt wurde, existieren diesbezüglich jedoch teils erhebliche Unterschiede zur BBR-Methode, weshalb die Lebensdauer nun systematisch untersucht wird.

In den folgenden Simulationen wird, wie in Abschnitt 7.2 eingeführt, ein Verhältnis von 18 : 1 zwischen Reservoir- und Systemmulden präpariert und es werden die Phasen der Systemmulden nach Gleichung (3.30) angepasst. Die initialen Tunnelkonstanten werden alle auf  $J_j = 1$  gesetzt, für die Kopplung der System- an die Reservoirmulden wird ein Wert von  $\Gamma = 0,5$  verwendet. Die Toleranz für die Erfüllung der  $\mathcal{PT}$ -Bedingungen wird auf  $\delta_{\mathcal{PT}}^{(\max)} = 0,1$  gesetzt.

### 7.3.1 Variables $d(t)$

Abbildung 7.7a zeigt die Lebensdauer für ein variables  $d$  in Abhängigkeit von der Gesamtteilchenzahl und der Stärke der makroskopischen Kontaktwechselwirkung. Wie bereits in Kapitel 6 gezeigt wurde, ist die Dynamik der Meanfield-Näherung vollkommen unabhängig von der Gesamtteilchenzahl. Auch der Einfluss der Wechselwirkung ist sehr gering. Zwar sinkt die Lebensdauer mit steigender Wechselwirkungsstärke  $g$  leicht, der Effekt ist jedoch verglichen mit den geschätzten Unsicherheiten (siehe unten) vernachlässigbar gering.

Für ein wechselwirkungsfreies Kondensat stimmt die Dynamik der BBR-Methode wie erwartet sehr gut mit der Meanfield-Näherung überein. Für  $g > 0$  lässt sich das Verhalten der BBR-Methode in drei Bereiche einteilen, die sich mit zunehmender Wechselwirkung zu höheren Teilchenzahlen verschieben. Im mittleren Bereich ist – in logarithmischer Auftragung – eine nahezu lineare Abhängigkeit von der Gesamtteilchenzahl zu beobachten, welche für alle Wechselwirkungen etwa dieselbe Steigung besitzt. Für große  $N$  geht der lineare Anstieg in eine Sättigung über (ab diesem Punkt lässt sich das Kondensat sehr gut mit der Meanfield-Näherung beschreiben). Längere Zeiten sind nicht möglich, da hier die erste Reservoirmulde vollständig entleert wird ( $n_1 = 0$ ), was dazu führt, dass der Fluss in das zentrale Zweimuldensystem nicht mehr aufrecht erhalten werden kann

(a) Variables  $d(t)$  nach Gleichung (3.22)(b) Konstantes  $d(t)$  nach Gleichung (5.5)

**Abbildung 7.7:** Zeit  $t_{\max}$  bis zum Abbruch der Simulation (Lebensdauer) in Abhängigkeit von der Teilchenzahl  $N$ . Gezeigt sind jeweils Kurven für verschiedene Wechselwirkungen (BBR- und Meanfield-Methode).

und die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie somit zusammenbricht. Je größer die Wechselwirkung  $g$  ist, desto stärker ist der Einfluss der höheren Momente auf die Dynamik und desto größer müssen dementsprechend die Teilchenzahlen sein, damit die Meanfield- und BBR-Methode eine analoge Beschreibung der Dynamik ermöglichen. Aus diesem Grund verschiebt sich die Sättigung der Lebensdauer.

Für kleine Teilchenzahlen kommt es zu einem unerwarteten Verhalten. So beginnt die Lebensdauer bei sehr kleinen Werten, steigt dann rapide an und gipfelt in einer Art Resonanz-Peak, dessen Größe mit steigender Wechselwirkung  $g$  abnimmt. Nach einem kleinen Abfall geht die Kurve in den oben beschriebenen linearen Anstieg über. Der schnelle Anstieg zu Beginn kann mit der Konfiguration des Systems erklärt werden. Da zur besseren Vergleichbarkeit mit dem Meanfield-Verhalten die makroskopische Wechselwirkungsstärke  $g$  anstatt der mikroskopischen  $U$  verwendet wird, muss letztere über die Relation

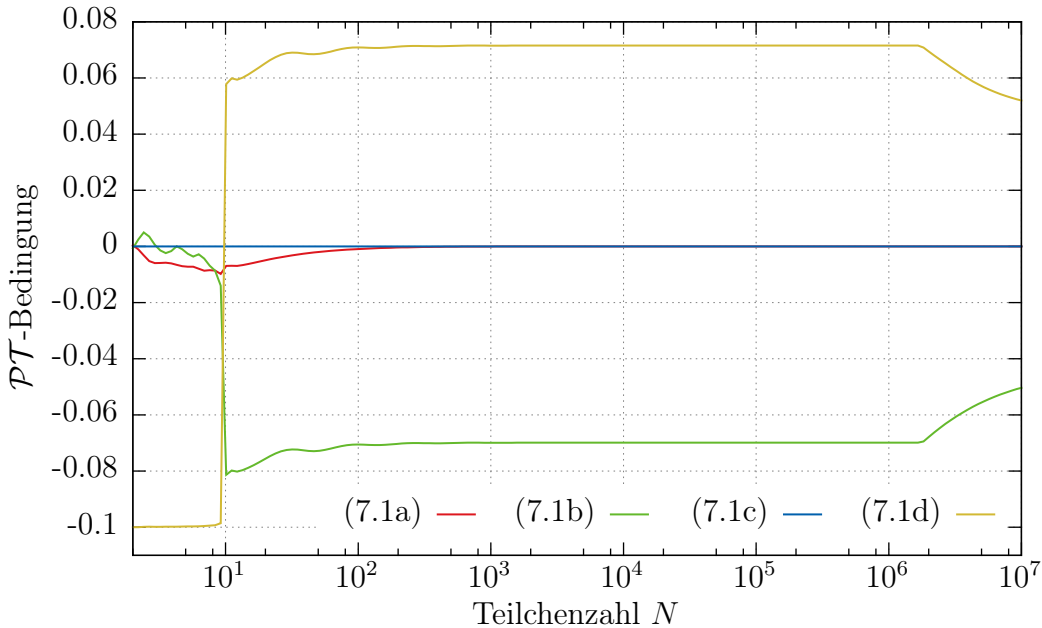
$$U = \frac{g}{N - 1} \quad (7.5)$$

berechnet werden. Diese besitzt bei  $N = 1$  eine Singularität (Polstelle), welche zu einer Divergenz der mikroskopischen Wechselwirkungsstärke führt. Aus physikalischer Sicht erscheint dies logisch: Ein einzelnes Teilchen kann nicht in Kontaktwechselwirkung mit sich selbst treten, somit verschwindet die makroskopische Wechselwirkung  $g = (N - 1)U$  für  $N \rightarrow 1$  und im Umkehrschluss muss  $U$  bei konstantem  $g$  divergieren. Dies hat erhebliche numerische Instabilitäten für sehr kleine Teilchenzahlen nahe  $N = 1$  zur Folge. Jedoch hat dies nicht nur einen Einfluss auf die unmittelbare Umgebung der Singularität. Eine sinkende Gesamtteilchenzahl  $N$  geht mit einer steigenden Wechselwirkungsstärke  $U$  einher, was dafür sorgt, dass die Abweichungen der BBR-Methode von der Meanfield-Näherung größer werden. Infolgedessen kann die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie bei kleinem  $N$  und großem  $g$  nur für eine sehr kurze Zeitspanne aufrecht erhalten werden.

Für die resonanzartigen Peaks konnte keine physikalische Begründung ermittelt werden, weshalb bei diesen von einem numerischen Artefakt ausgegangen wird.

### 7.3.2 Konstantes $d(t)$

Wird die Funktion  $d$  konstant gehalten, so sollte dies die Dynamik in keinster Weise beeinflussen. Wie Abbildung 7.7b zeigt, ist dies nicht vollständig der Fall; insbesondere fallen zwei Unterschiede auf. Am deutlichsten sind die Abweichungen bei sehr kleinen Teilchenzahlen. So treten die im vorhergehenden Abschnitt beschriebenen Peaks bei Verwendung eines konstanten  $d$  nicht mehr auf, was die Vermutung, dass es sich nur um numerische Artefakte handelt, stärkt. Der rapide Anstieg der Lebensdauer ist jedoch weiterhin beobachtbar. Die BBR-Methode liefert in diesem Bereich somit keine verlässliche Lebensdauern. Des Weiteren sind die (in logarithmischer Darstellung) linear ansteigenden Bereiche um etwa eine Zeiteinheit nach unten verschoben; auch die



**Abbildung 7.8:** Abweichung der  $\mathcal{PT}$ -Bedingungen (7.1a) bis (7.1d) bei Abbruch der Integration für das System aus Abbildung 7.7a mit  $g = 1$ .

maximale Lebensdauer liegt marginal unterhalb der für ein variables  $d$ . Dies lässt auf größere numerische Schwierigkeiten bei Verwendung eines konstanten  $d$  schließen. Beide Unterschiede können auf numerische Ungenauigkeiten zurückgeführt werden. Bei den vorliegenden Ergebnissen muss daher von einer Ungenauigkeit von etwa einer Zeiteinheit für die Lebensdauer ausgegangen werden.

### 7.3.3 Analyse der $\mathcal{PT}$ -Bedingungen

Die drei in den vorausgehenden Abschnitten eingeführten Bereiche spiegeln sich auch in den Abweichungen der  $\mathcal{PT}$ -Bedingungen bei Abbruch der Integration wieder, wie Abbildung 7.8 zeigt. Die Bedingung (7.1c) ist dabei durch die Definition (3.13) immer erfüllt und wird daher nicht weiter diskutiert.

Betrachtet wird zunächst wieder der mittlere Bereich, in dem die verbleibenden drei Bedingungen nahezu konstant sind. Im Meanfield ist die Bedingung (7.1d) automatisch erfüllt, wenn die ersten drei Bedingungen erfüllt sind, weshalb diese nicht explizit in die Variationsvorschriften für die Systemparameter eingeht. Mit der BBR-Methode ist dies nicht automatisch der Fall, was die erste Abweichung erklärt. Ebenfalls verwendet die Meanfield-Näherung für die Kopplung der Reservoirmulden an das zentrale Zweimuldensystem nur einen Parameter  $\Gamma$ . Wie in [Das+14] beschrieben, kann es jedoch

nötig sein, unterschiedliche Parameter für das Ein- und Auskoppeln zu verwenden, wenn Vielteilcheneffekte berücksichtigt werden. Dementsprechend kann mit der BBR-Methode bei Verwendung der Meanfield-Variationsvorschriften auch nur entweder die Bedingung (7.1a) oder (7.1b) erfüllt werden, was die zweite große Abweichung in Abbildung 7.8 erklärt.

Bei großen Teilchenzahlen wird die erste Reservoirmulde, wie oben bereits erwähnt, vollständig entleert. Infolgedessen divergiert die entsprechende Muldenenergie in dem Versuch, den Fluss aufrecht zu erhalten, was die zweite Abbruchbedingung (7.3) verletzt. Ohne diese Bedingung würde die Schrittweite drastisch reduziert und die  $\mathcal{PT}$ -Bedingung kurz darauf verletzt werden, was viel Rechenzeit kosten und die Lebensdauer dabei nur marginal erhöhen würde.

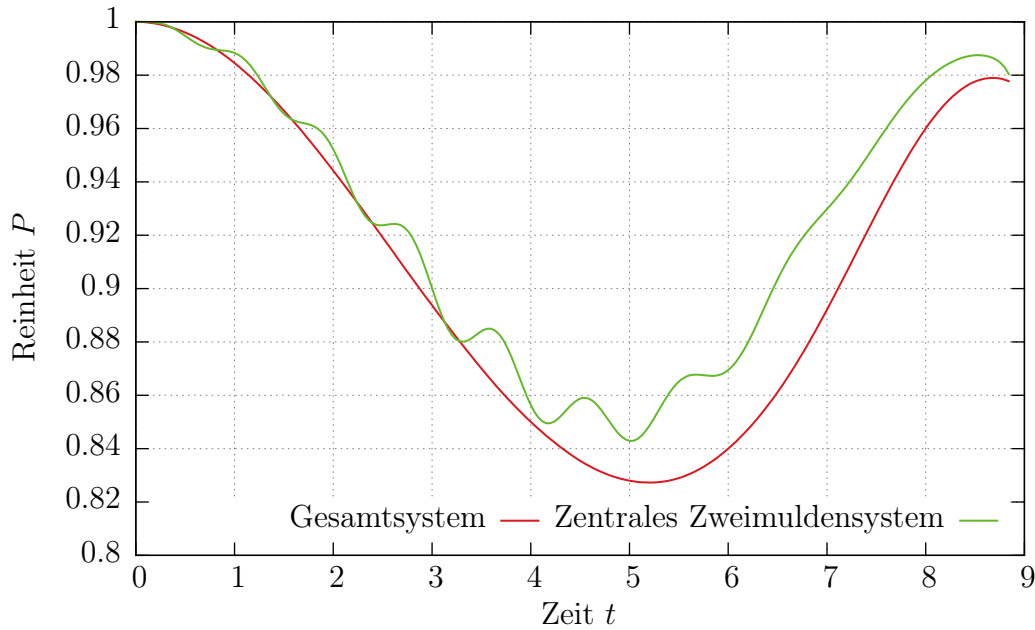
Im Bereich kleiner Gesamtteilchenzahlen (unterhalb der resonanzartigen Peaks) kann bei bestimmten Konfigurationen ein Nulldurchgang der Größen  $C_{13} = C_{31}$  bzw.  $C_{24} = C_{42}$  für die numerischen Instabilitäten verantwortlich gemacht werden. Um  $J_{12}$  bzw.  $J_{34}$  näherungsweise konstant zu halten, muss nach Gleichung (3.22) die Funktion  $d$  für  $C_{jk} \rightarrow 0$  divergieren. Dies ist numerisch äußerst instabil und führt daher zu einer Abweichung der Tunnelströme  $j_{jk}$  und damit  $\tilde{j}_{jk}$  vom gewünschten Wert. Infolgedessen kommt es zu einer Verletzung der Bedingung (7.1d), die diesen Bereich in Abbildung 7.8 dominiert. Gerade bei größeren Wechselwirkungen ist die Abweichung der Dynamik vom Meanfield-Verhalten jedoch so groß, dass die verwendeten Variationsvorschriften keine zufriedenstellende  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie mehr aufrechterhalten können und Gleichung (7.1d) einen Abbruch der Integration verursacht noch bevor ein  $C_{jk}$  null wird. Auch hier ist jedoch ein stark ansteigender Wert von  $d$  zu verzeichnen.

An dem Punkt, an dem in Abbildung 7.7a der resonanzartige Peak zu sehen ist, machen die Bedingungen (7.1b) und (7.1d) einen Sprung, was dafür spricht, dass ab hier eine andere Ursache für den Abbruch verantwortlich ist. Welche numerischen Effekte hierbei genau eine Rolle spielen, konnte im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht ermittelt werden.

## 7.4 Reinheit

Die Reinheit  $P \in [0, 1]$  (engl. *purity*) eines Bose-Einstein-Kondensats ist ein Maß dafür, wie groß die Abweichung eines Vielteilchenzustands von einem reinen Zustand (Meanfield-Zustand) ist. Sie ist definiert als [WTW03]

$$P := \left(1 - \frac{1}{M}\right)^{-1} \left[ \text{tr}(\tilde{\sigma}^2) - \frac{1}{M} \right] = \left(1 - \frac{1}{M}\right)^{-1} \left( \sum_{j=1}^M \sum_{k=1}^M \tilde{\sigma}_{jk} \tilde{\sigma}_{kj} - \frac{1}{M} \right). \quad (7.6)$$



**Abbildung 7.9:** Zeitliche Entwicklung der Reinheit für das Gesamtsystem und das zentrale Zweimulden-Teilsystem für die in Gleichung (7.7) angegebenen Parameter.

Abbildung 7.9 zeigt den zeitlichen Verlauf der Reinheit für

$$\begin{aligned}
 n_1 = 72,5, \quad n_2 = 2,5, \quad n_3 = 2,5, \quad n_4 = 72,5, \\
 \Gamma = 0,5, \quad g = 2, \quad J_{j,j+1} = 1
 \end{aligned}
 \tag{7.7}$$

sowie  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch angepasste Phasen der Systemmulden. Da zu Beginn ein Meanfield-Zustand präpariert wird, beträgt die initiale Reinheit  $P = 1$ . Diese beginnt nun aufgrund der Wechselwirkung zwischen den Teilchen zu fallen, bis es nach etwas mehr als der Hälfte der simulierten Zeit zu einem sog. *revival* kommt (siehe [Gre+02], [Das+16]). Die Reinheit steigt dabei wieder an, bis sie fast den ursprünglichen Wert erreicht hat. Je mehr die Dynamik der BBR-Methode der der Meanfield-Methode entspricht (große Teilchenzahl, kleine Wechselwirkung), desto geringer fällt die Amplitude dieser Oszillationen aus. Für  $g = 0$  oder  $N \rightarrow \infty$  befindet sich das System im Meanfield, wodurch stets ein reiner Zustand mit  $P = 1$  vorliegt. Eine Erhöhung der Wechselwirkungsstärke  $g$  hat zudem eine größere Oszillationsfrequenz zur Folge.

Da das eben beschriebene Ansteigen der Reinheit ohne eine Ein- und Auskopplung von Teilchen bei vollständigen Vielteilchenrechnungen üblicherweise nur auf sehr viel größeren Zeitskalen beobachtet wird (mehrere hundert Zeiteinheiten), liegt der Verdacht jedoch nahe, dass es sich hierbei nur um ein Artefakt der BBR-Methode handelt. Zur Bestätigung dieses Verdachts wären weitere Untersuchungen nötig, die den Rahmen dieser Arbeit übersteigen würden.





## 8 Zusammenfassung und Ausblick

Nicht-hermitesche Systeme wurden bereits gründlich mithilfe komplexer Potentiale behandelt. Die vorliegende Arbeit untersucht die Realisierung eines  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Doppelmuldenpotentials durch die Ankopplung zweier Reservoirmulden, wodurch das System in ein hermitesches Viermuldenpotential überführt wird. Zur Berechnung der Dynamik wurde hierbei die Bogoliubov-Backreaction-Methode (BBR) verwendet, da diese über die Meanfield-Näherung hinaus geht und dabei (unabhängig von der Teilchenzahl) numerisch vertretbar bleibt. Dies erlaubt es, Systeme mit Wechselwirkung bei Teilchenzahlen zu untersuchen, die durch die Meanfield-Näherung nicht mehr zufriedenstellend beschrieben werden und gleichzeitig numerisch zu aufwändig für die vollständige Vielteilchendynamik sind.

Nach einer kurzen Einführung in die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie folgte zunächst eine theoretische Behandlung des  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Zweimuldensystems im Meanfield. Hier wurden die theoretischen Ergebnisse aus [Kre15], auf denen diese Arbeit basiert, vorgestellt und mit eigenen Rechnungen ergänzt. Anschließend wurden die Grenzen der Meanfield-Näherung aufgezeigt und ein Einblick in die numerisch sehr viel aufwändigere vollständige Vielteilchendynamik gegeben. Als Mittelweg zwischen Präzision und numerischem Aufwand bietet sich die Bogoliubov-Backreaction-Methode an.

Im Laufe der Arbeit traten an mehreren Stellen numerische Probleme zu Tage. Hier ist in erster Linie der Einfluss der Funktion  $d(t)$  auf die Numerik zu nennen, die eine Freiheit der zu erfüllenden Gleichungen darstellt und die beeinflusst, ob durch Anpassung der Tunnelraten oder Muldenenergien  $\mathcal{PT}$ -symmetrische Teilchenströme erzeugt werden. Die Variation dieser Funktion zeigte, dass den Simulationsergebnissen für große Wechselwirkungen und kleine Gesamtteilchenzahlen nicht ohne weiteres vertraut werden kann. Bemerkbar machte sich dies beispielsweise in Form von resonanzartigen Peaks, die als numerische Artefakte ohne physikalischen Hintergrund identifiziert werden konnten. Darüber hinaus hatte die Gesamtteilchenzahl einen Einfluss auf die Schrittweitenkontrolle des Integrationsalgorithmus, was jedoch durch eine Normierung der Zustände behoben werden konnte.

Werden die Systemparameter (Muldenenergien und Tunnelamplituden) konstant gehalten, so ermöglicht dies einen einfachen Vergleich zwischen den drei zur Verfügung stehenden Methoden (Meanfield, BBR, vollständige Vielteilchendynamik). Hier ergab sich, wie zu erwarten war, dass alle drei Methoden zur Beschreibung der Dynamik in den

Grenzfällen einer verschwindenden Wechselwirkung oder einer unendlich großen Teilchenzahl exakt übereinstimmen. Bei kleinen Teilchenzahlen mit Wechselwirkung kam es jedoch bereits nach wenigen Zeiteinheiten zu teils erheblichen Abweichungen (vor allem der Meanfield-Näherung) von der numerisch exakten Lösung der vollständigen Vielteilchendynamik. Die BBR-Methode überzeugte hier durch ihre insgesamt sehr gute Übereinstimmung mit den Vielteilchenrechnungen.

Mit  $\mathcal{PT}$ -symmetrisch angepassten Systemparametern konnte ohne Wechselwirkung das Meanfield-Verhalten gut reproduziert werden. Die Flüsse in das zentrale Zweimuldensystem hinein und aus ihm heraus blieben dabei näherungsweise konstant, was zu einem linearen Anstieg bzw. Abfall der Reservoirmulden-Populationen und konstanten Systemmulden-Populationen führte. Mit Wechselwirkung konnte die  $\mathcal{PT}$ -Symmetrie bei Verwendung der BBR-Methode und Übernahme der Systemparameter-Variationsvorschriften aus der Meanfield-Näherung nur für eine begrenzte Zeitspanne aufrecht erhalten werden. Werden die Phasen der mittleren Systemmulden nicht so angepasst, dass ein stationärer Zustand entsteht, so entstehen charakteristische Oszillationen. Es konnte beobachtet werden, dass diese die Dynamik wenig beeinflussen und beispielsweise die Lebensdauer des Systems nur marginal verändern.

Das zentrale Ergebnis der vorliegenden Arbeit ist die Abhängigkeit der Lebensdauer des  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systems von der Gesamtteilchenzahl. In den Bereichen, in denen keine numerischen Probleme auftraten, zeigte sich – bei logarithmischer Darstellung der Teilchenzahl – ein nahezu linearer Anstieg der Lebensdauer in Abhängigkeit von der Teilchenzahl. Für große Teilchenzahlen ging diese Gerade in eine Sättigung über, die in etwa mit der Meanfield-Näherung übereinstimmt. Eine größere Wechselwirkung sorgte für kleinere Lebensdauern bei mittleren Teilchenzahlen und eine Verschiebung der Sättigung zu größeren Teilchenzahlen; die maximale Lebensdauer stimmte jedoch bei allen Wechselwirkungsstärken näherungsweise überein.

Für die numerischen Artefakte bei kleinen Teilchenzahlen konnte keine befriedigende Erklärung gefunden werden. In zukünftigen Arbeiten wäre es daher interessant, diese Gründe näher zu erforschen. Ein tieferes Verständnis der hier auftretenden Phänomene könnte helfen, diese zu vermeiden und zuverlässige Ergebnisse bei kleineren Teilchenzahlen zu erhalten. Auch wäre eine Untersuchung mithilfe der vollständigen Vielteilchendynamik von Interesse, wobei diese aufgrund des schnell mit der Teilchenzahl wachsenden numerischen Aufwands nur für Gesamtteilchenzahlen bis mehrere hundert Teilchen realisierbar sind. Dies wäre jedoch ausreichend, um in das Regime zu gelangen, in dem die BBR-Methode eine ausreichend gute Näherung darstellt.

Ein wichtiger nächster Schritt wird es sein, die Vorschriften zur  $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Anpassung der Systemparameter nicht wie in der vorliegenden Arbeit aus den Meanfield-Rechnungen zu übernehmen, sondern diese für das Vielteilchensystem neu zu formulieren. Ein möglicher Ansatz hierfür ist die Forderung nach stationären Zuständen für das Vielteilchensystem aufzustellen und daraus Bedingungen für die Systemparameter

---

abzuleiten. Dies könnte dazu führen, die Lebensdauer bei kleineren Teilchenzahlen zu steigern. Ein alternativer Ansatz besteht darin, durch Anpassung der Systemparameter in den mittleren beiden Mulden die Dynamik der Master-Gleichung mit ausbalanciertem Gewinn und Verlust [Das+14] aufzuzwingen. Wenn dies bereits für die Elemente der Einteilchendichtematrix gelänge, so würde dies auch die dort gefundenen Reinheitsoszillationen reproduzieren [Das+16].

Die Realisierung  $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Bose-Einstein-Kondensate ist keinesfalls nur eine theoretische Spielerei. Sie könnte beispielsweise dazu verwendet werden, eine Art Materie-Laser – also einen kontinuierlichen Strahl kohärenter Materie – zu erzeugen. Schaut man sich die heutige Bedeutung von Lasern in Wissenschaft und Technik an, so ist es naheliegend, dass ein solcher Materie-Laser völlig neue Forschungs- und Anwendungsgebiete eröffnen würde [Rob+08], [Dör+09].



# Literatur

- [Alp16] Kirill Alpin. „Massively parallel computations of the Bose-Hubbard model with time-dependent potentials“. Bachelorarbeit. 15. Aug. 2016.
- [AM13] Karsten Ahnert und Mario Mulansky. *Boost.Numeric.Odeint*. Version 1.55.0. 11. Nov. 2013. URL: [http://www.boost.org/doc/libs/1\\_61\\_0/libs/numeric/odeint/doc/html/index.html](http://www.boost.org/doc/libs/1_61_0/libs/numeric/odeint/doc/html/index.html).
- [And+95] M. H. Anderson u. a. „Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor“. In: *Science* 269.5221 (1995), S. 198–201. ISSN: 0036-8075. DOI: 10.1126/science.269.5221.198.
- [BB98] Carl M. Bender und Stefan Boettcher. „Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having  $\mathcal{PT}$  Symmetry“. In: *Phys. Rev. Lett.* 80 (24 Juni 1998), S. 5243–5246. DOI: 10.1103/PhysRevLett.80.5243.
- [Ben05] Carl M. Bender. „Introduction to  $\mathcal{PT}$ -symmetric quantum theory“. Englisch. In: *Contemporary Physics* 46.4 (Juli 2005), S. 277–292. ISSN: 0010-7514. DOI: 10.1080/00107500072632.
- [BM10] Carl M. Bender und Philip D. Mannheim. „ $\mathcal{PT}$  symmetry and necessary and sufficient conditions for the reality of energy eigenvalues“. In: *Physics Letters A* 374.15-16 (2010), S. 1616–1620. ISSN: 0375-9601. DOI: 10.1016/j.physleta.2010.02.032.
- [Bos24] Bose. „Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese“. In: *Zeitschrift für Physik* 26.1 (1924), S. 178–181. ISSN: 0044-3328. DOI: 10.1007/BF01327326.
- [Bra+95] C. C. Bradley u. a. „Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions“. In: *Phys. Rev. Lett.* 75 (9 Aug. 1995), S. 1687–1690. DOI: 10.1103/PhysRevLett.75.1687.
- [Das+14] Dennis Dast u. a. „Quantum master equation with balanced gain and loss“. In: *Phys. Rev. A* 90 (5 Nov. 2014), S. 052120. DOI: 10.1103/PhysRevA.90.052120.
- [Das+16] Dennis Dast u. a. „Purity oscillations in Bose-Einstein condensates with balanced gain and loss“. In: *Phys. Rev. A* 93 (3 März 2016), S. 033617. DOI: 10.1103/PhysRevA.93.033617.

- [Das12] Dennis Dast. „Variationsrechnungen zu Bose-Einstein-Kondensaten in PT-symmetrischen Doppelmuldenpotentialen“. Masterarbeit. 1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart, 25. Okt. 2012. URL: [http://itp1.uni-stuttgart.de/publikationen/abschlussarbeiten/dast\\_master\\_2012.pdf](http://itp1.uni-stuttgart.de/publikationen/abschlussarbeiten/dast_master_2012.pdf).
- [Dör+09] D. Döring u. a. „Pulsed pumping of a Bose-Einstein condensate“. In: *Phys. Rev. A* 79 (6 Juni 2009), S. 063630. DOI: 10.1103/PhysRevA.79.063630.
- [DP80] J. R. Dormand und P. J. Prince. „A family of embedded Runge-Kutta formulae“. In: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 6.1 (1980), S. 19–26. ISSN: 0377-0427. DOI: 10.1016/0771-050X(80)90013-3.
- [Ein24] Albert Einstein. „Quantentheorie des einatomigen idealen Gases“. In: *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* (1924), S. 261–267. URL: [https://www.uni-muenster.de/imperia/md/content/physik\\_ap/demokritov/mbecfornonphysicists/einstein\\_1924\\_1925.pdf](https://www.uni-muenster.de/imperia/md/content/physik_ap/demokritov/mbecfornonphysicists/einstein_1924_1925.pdf).
- [Ein25] Albert Einstein. „Quantentheorie des einatomigen idealen Gases II“. In: *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* (1925), S. 3–14. URL: [https://www.uni-muenster.de/imperia/md/content/physik\\_ap/demokritov/mbecfornonphysicists/einstein\\_1924\\_1925.pdf](https://www.uni-muenster.de/imperia/md/content/physik_ap/demokritov/mbecfornonphysicists/einstein_1924_1925.pdf).
- [Eve04] H. G. Evertz. *Fortgeschrittene Quantenmechanik*. TU Graz. 2004. URL: <https://itp.tugraz.at/LV/evertz/QM-2/qm2.pdf> (besucht am 12.07.2016).
- [Gra12] Eva-Maria Graefe. „Stationary states of a PT symmetric two-mode Bose-Einstein condensate“. In: *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 45.44 (2012), S. 444015. DOI: 10.1088/1751-8113/45/44/444015.
- [Gre+02] Markus Greiner u. a. „Collapse and revival of the matter wave field of a Bose-Einstein condensate“. In: *Nature* 419.6902 (Sep. 2002), S. 51–54. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/nature00968.
- [HNN28] D. Hilbert, J. von Neumann und L. Nordheim. „Über die Grundlagen der Quantenmechanik“. In: *Mathematische Annalen* 98.1 (1928), S. 1–30. ISSN: 1432-1807. DOI: 10.1007/BF01451579.
- [Jak+98] D. Jaksch u. a. „Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices“. In: *Phys. Rev. Lett.* 81 (15 Okt. 1998), S. 3108–3111. DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.3108.
- [Kre15] Manuel Kreibich. „Realizations of PT-symmetric Bose-Einstein condensates with time-dependent Hermitian potentials“. Diss. 1. Institut für Theoretische Physik der Universität Stuttgart, 2015. URL: [http://itp1.uni-stuttgart.de/publikationen/abschlussarbeiten/kreibich\\_doktor\\_2015.pdf](http://itp1.uni-stuttgart.de/publikationen/abschlussarbeiten/kreibich_doktor_2015.pdf).

- 
- [Lit16] Robert G. Littlejohn. *Notes 20: Time Reversal*. University of California, Berkeley. 2016. URL: <http://bohr.physics.berkeley.edu/classes/221/1011/notes/timerev.pdf> (besucht am 05.08.2016).
- [Moi11] Nimrod Moiseyev. *Non-Hermitian quantum mechanics*. Cambridge University Press, 17. Feb. 2011. ISBN: 0521889723.
- [PGR96] E. Persson, T. Gorin und I. Rotter. „Decay rates of resonance states at high level density“. In: *Physical Review E* 54.4 (Okt. 1996), S. 3339–3351. DOI: 10.1103/physreve.54.3339.
- [Rob+08] Nicholas P. Robins u. a. „A pumped atom laser“. In: *Nat Phys* 4.9 (Sep. 2008), S. 731–736. ISSN: 1745-2473. DOI: 10.1038/nphys1027.
- [SB02] F. Schwabl und W. D. Brewer. *Statistical Mechanics*. Advanced Texts in Physics. Springer Berlin Heidelberg, 2002. ISBN: 9783540431633. URL: <https://books.google.de/books?id=o-HyHvRZ4VcC>.
- [SH13] Robert P. Smith und Zoran Hadzibabic. „Effects of Interactions on Bose-Einstein Condensation of an Atomic Gas“. In: *Physics of Quantum Fluids: New Trends and Hot Topics in Atomic and Polariton Condensates*. Hrsg. von Alberto Bramati und Michele Modugno. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2013, S. 341–359. ISBN: 978-3-642-37569-9. DOI: 10.1007/978-3-642-37569-9\_16.
- [TAV07] I. Tikhonenkov, J. R. Anglin und A. Vardi. „Quantum dynamics of Bose-Hubbard Hamiltonians beyond the Hartree-Fock-Bogoliubov approximation: The Bogoliubov back-reaction approximation“. In: *Phys. Rev. A* 75 (1 Jan. 2007), S. 013613. DOI: 10.1103/PhysRevA.75.013613.
- [VA01] A. Vardi und J. R. Anglin. „Bose-Einstein Condensates beyond Mean Field Theory: Quantum Backreaction as Decoherence“. In: *Phys. Rev. Lett.* 86 (4 Jan. 2001), S. 568–571. DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.568.
- [WTW03] D. Witthaut, F. Trimborn und S. Wimberger. „Dissipation-induced coherence and stochastic resonance of an open two-mode Bose-Einstein condensate“. In: *Phys. Rev. A* 79 (3 2009-03), S. 033621. DOI: 10.1103/PhysRevA.79.033621.
- [ZD10] J. M. Zhang und R. X. Dong. „Exact diagonalization: the Bose-Hubbard model as an example“. In: *European Journal of Physics* 31.3 (2010), S. 591. DOI: 10.1088/0143-0807/31/3/016.
- [Zwi+03] M. W. Zwierlein u. a. „Observation of Bose-Einstein Condensation of Molecules“. In: *Phys. Rev. Lett.* 91 (25 Dez. 2003), S. 250401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.250401.





# Danksagung

Zum Gelingen dieser Bachelorarbeit trugen zahlreiche Personen bei, denen ich im Folgenden danken möchte.

Ich bedanke mich bei allen Mitarbeitern des 1. Instituts für Theoretische Physik der Universität Stuttgart, die mir stets mit Rat und Tat (und Kuchen) zur Seite standen. Mein Dank gilt hierbei insbesondere meinem Prüfer Prof. Dr. Jörg Main, der diese Bachelorarbeit überhaupt erst ermöglichte, und meinem Betreuer Dennis Dast, der stets bereit war, auch dumme Fragen meinerseits zu beantworten und von dem ich dadurch viel lernen konnte. Darüber hinaus danke ich Daniel Dizdarevic, der derzeit an seiner Masterarbeit zu einem ähnlichen Thema schreibt, für die gute Zusammenarbeit und den regen Gedankenaustausch sowie meinen Bürokollegen Kirill Alpin und Christoph Lohrmann für das freundliche Arbeitsklima.

Weiter danke ich meinen Kommilitoninnen und Kommilitonen für die gute Zeit der vergangenen sechs Semester und die stets interessanten Diskussionen beim Essen. Ich werde an dieser Stelle keine Namen nennen, da ich ansonsten nicht wüsste, wo ich aufhören sollte.

Nicht zuletzt danke ich natürlich noch meiner Familie, die schon früh mein Interesse an der Physik weckte und mich stets unterstützte, sowie allen anderen, die ich an dieser Stelle vergessen habe.



## Erklärung

Ich versichere,

- 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 15. August 2016

*Johannes Reiff*