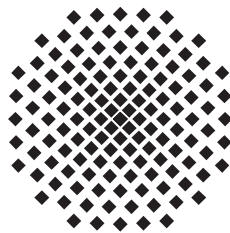


Numerische Simulationen auf Raum-Zeit-Gittern zum makroskopischen Quantentunneln bei Bose-Einstein Kondensaten mit attraktiver $1/r$ -Wechselwirkung

Diplomarbeit von
Pascal Wieland

10. August 2011

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



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

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Gross-Pitaevskii Gleichung	3
2.1.1	Stationäre Gross-Pitaevskii Gleichung - beliebige Wechselwirkung	3
2.1.2	Kurzreichweitige Wechselwirkung	5
2.1.3	Langreichweitige Wechselwirkung	5
2.1.4	Atomare Einheiten und Skalierungseigenschaft	7
2.2	Lösung der stationären Gross-Pitaevskii Gleichung	8
2.3	Zeitabhängige GPE - TDVP	11
2.4	Kanonische Variablen	15
2.5	Makroskopisches Quantentunneln	17
2.5.1	Semiklassische Näherung - kanonische Koordinaten	17
2.5.2	Imaginärzeitdynamik ohne kanonische Variablen	21
2.5.3	Die Wirkung	23
3	Gitterrechnung	27
3.1	Split-Operator-Methode	29
3.1.1	Berechnung der Wechselwirkungspotentiale	30
3.1.2	Anwendung von $e^{-\frac{1}{2}V\Delta\tau}$, bzw. $e^{\frac{1}{2}V\Delta\tau}$	34
3.1.3	Anwendung von $e^{-T\Delta\tau}$, bzw. $e^{T\Delta\tau}$	34
3.1.4	Anwendung des letzten Terms	35
3.2	Anschlussbedingungen	36
3.2.1	Reduktion der Variablenanzahl	38
3.3	Lineare Extrapolation	41
3.4	Newtonverfahren	43
3.4.1	Jacobimatrix	43
3.4.2	Übergeordnetes Newtonverfahren	45
4	Diskussion der Simulation	47
4.1	Maximaler radialer Abstand	47
4.2	Anzahl der Gitterpunkte	49
4.3	Der Wert von $\Delta\tau$ - Meanfieldenergie	51
4.3.1	1D-Nullstellensuche	52

Inhaltsverzeichnis

4.4	Potentialberechnung	53
4.5	Gefundene periodische Bahnen	53
5	Zusammenfassung und Ausblick	57
	Literaturverzeichnis	59
	Danksagung	63

1 Einleitung

Theoretisch wurden Bose-Einstein Kondensate (BEC) 1925 [1] von Albert Einstein basierend auf einer Arbeit aus dem Jahr 1924 [2] von Satyendranath Bose, in der er die Bose-Statistik aufstellte, vorhergesagt. Bose leitete in dieser Arbeit die Plancksche Strahlungsformel her, indem er die Photonen als ein Gas ununterscheidbarer Teilchen betrachtete. Ein Bose-Einstein Kondensat ist ein Vielteilchensystem von Bosonen, bei dem sich fast alle Teilchen im selben quantenmechanischen Zustand befinden. Dies hat zur Folge, dass sich das gesamte BEC mit einer Wellenfunktion beschreiben lässt und sich daher quantenmechanische Effekte, wie zum Beispiel Interferenz und Tunneleffekte, auf einer makroskopischen Skala betrachten lassen. Zur Realisierung eines BEC werden die verwendeten Bosonen in einer magnetischen Falle gehalten und stark gekühlt, da nur bei Temperatur gegen den absoluten Nullpunkt ein BEC entstehen kann, wobei die Kühlung über Laserkühlung oder Verdampfungskühlung erfolgt. Die erste experimentelle Realisierung eines BEC gelang erst im Jahr 1995 durch E. Cornell und C. Wieman [3] aus einem verdünnten Rubidiumgas und wenige Zeit später durch W. Ketterle [4] aus einem Natriumgas. Nach einem Vorschlag von O'Dell [5] kann man ein BEC durch eine Laseranordnung von 18 Lasern so präparieren, dass keine äußere Falle mehr notwendig ist und das Kondensat durch eine gravitationsartige Wechselwirkung der Teilchen stabil bleibt. Diese Wechselwirkung beruht darauf, dass durch die eingestrahelten Laser Dipole induziert werden, deren Wechselwirkungen untereinander zu dem gravitationsartigen Selbstschluss führen. Der Grundzustand dieses BEC ist allerdings nur metastabil und das BEC kann auf Grund eines makroskopischen Tunneleffekts kollabieren. Der Tunnelvorgang wird in einer ersten semiklassischen Näherung durch ein Teilchen beschrieben, das in einem Potential oszilliert. Eine quantenmechanische Betrachtung führt über ein Variationsverfahren, bei dem parametrisierte Gaußfunktionen variiert werden auf periodische Bahnen der Gaußparameter, was analog zu der Oszillation des Teilchen ist. Anstatt das Verhalten der Wellenfunktion während des Tunnelvorgangs durch die Parameter der Gaußfunktion zu beschreiben, wird in dieser Diplomarbeit ein Verfahren vorgestellt, bei dem die Wellenfunktion direkt auf einem Raum-Zeit Gitter simuliert wird. Bei dieser Simulation werden die Wellenfunktionen sowohl im Ort, als auch in der Zeit diskretisiert und anschließend mit dem Zeitentwicklungsoperator propagiert. Um die Propagation durchzuführen wird der Zeitentwicklungsoperator mit Hilfe der Split-Operator Methode in drei Faktoren aufgeteilt, da die Anwendung des Operators dadurch einfacher durchzuführen ist. Eine Bedingung ist dann, dass die propagierte Wellenfunktion gleich der Wellenfunktion am darauffolgenden Zeitschritt ist. Diese Forderung führt auf eine Gleichungssystem, dessen Nullstelle gesucht ist. Die Nullstellensuche wird mit einem

1 *Einleitung*

Newtonverfahren durchgeführt. In Kapitel 2 werden die theoretischen Grundlagen vorgestellt und beschrieben, worauf in Kapitel 3 die Vorstellung des Simulationsverfahrens folgt. Das 4. Kapitel widmet sich der Diskussion der Simulation.

2 Grundlagen

Das betrachtete Bose-Einstein-Kondensat (BEC) mit langreichweitiger $\frac{1}{r}$ -Wechselwirkung wird mit der Gross-Pitaevskii Gleichung (GPE) beschrieben:

$$\left[-\Delta_{\mathbf{r}} + 8\pi a |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 - 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\psi(\mathbf{r}', t)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] \psi(\mathbf{r}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.1)$$

Die Gleichung beschreibt ein Vielteilchensystem mit Hilfe eines Meanfield Ansatzes, in den nur Zweikörperwechselwirkungen eingehen. Im Folgenden wird die Herleitung kurz skizziert. Eine detaillierte Herleitung wird in [6] beschrieben. Zunächst wird die stationäre Lösung der GPE beschrieben, wobei die Abhängigkeit der Lösung von der Wahl der Streulänge a dargestellt wird. Anschließend folgt die Lösung der zeitabhängigen GPE, deren Imaginärzeitdynamik schließlich zum makroskopischen Quantentunneln führt.

2.1 Gross-Pitaevskii Gleichung

2.1.1 Stationäre Gross-Pitaevskii Gleichung - beliebige Wechselwirkung

Zur Beschreibung von BEC wird eine Vielteilchen-Schrödingergleichung angesetzt

$$\sum_{i=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_i} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \quad (2.2)$$

Die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen wird allgemein mit dem Wechselwirkungspotential $W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ beschrieben, $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i)$ ist das externe Potential einer Falle, in der das BEC eingeschlossen ist. Für den Grenzfall der Temperatur $T = 0$ sind alle Teilchen im Grundzustand und die Wellenfunktion $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ für das gesamte System wird als Produktansatz geschrieben:

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

Hierbei sind die $\phi(\mathbf{r}_i)$ die jeweils identischen Wellenfunktionen der einzelnen Teilchen. Zur Lösung der Vielteilchen-Schrödingergleichung wird ein Meanfield Ansatz verwendet,

bei dem ein Teilchen im mittleren Feld aller anderen Teilchen betrachtet wird. Die Wellenfunktion $\phi(\mathbf{r})$ des betrachteten Teilchens wird durch Variation so bestimmt, dass das Energiefunktional unter der Nebenbedingung der Normerhaltung minimiert wird. Die zu minimierende Meanfeldenergie ergibt sich zu:

$$\begin{aligned}
 E_{\text{mf}} &= \int d^3\mathbf{r}_1 \dots \int d^3\mathbf{r}_N \phi^*(\mathbf{r}_1) \dots \phi^*(\mathbf{r}_N) \hat{H} \phi(\mathbf{r}_1) \dots \phi(\mathbf{r}_N) \\
 &= \int d^3\mathbf{r}_1 \dots \int d^3\mathbf{r}_N \phi^*(\mathbf{r}_1) \dots \phi^*(\mathbf{r}_N) \\
 &\quad \cdot \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}_i} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N W(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right] \phi(\mathbf{r}_1) \dots \phi(\mathbf{r}_N) \\
 &= -N \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \Delta_{\mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}) + N \int d^3\mathbf{r} V_{\text{ext}} |\phi(\mathbf{r})|^2 \\
 &\quad + \frac{1}{2} N(N-1) \iint d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\phi(\mathbf{r})|^2 |\phi(\mathbf{r}')|^2. \tag{2.3}
 \end{aligned}$$

Als Lagrangeparameter für die Minimierung mit der Nebenbedingung $\int |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = 1$ wird μN verwendet. Dabei bezeichnet μ das chemische Potential und N die Teilchenzahl. Das Funktional ergibt sich also zu

$$E_{\text{mf}} - \mu N \left(\int |\phi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} - 1 \right). \tag{2.4}$$

Durch die Variation erhält man schließlich die Gleichung

$$-N \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} \phi(\mathbf{r}) + N V_{\text{ext}} \phi(\mathbf{r}) + N(N-1) \int d^3\mathbf{r}' W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\phi(\mathbf{r}')|^2 \phi(\mathbf{r}) - \mu N \phi(\mathbf{r}) = 0. \tag{2.5}$$

Mit der Annahme $N-1 \approx N$ für große Teilchenzahlen und einer Division durch N erhält man die stationäre GPE:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{ext}} + N \int d^3\mathbf{r}' W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\phi(\mathbf{r}')|^2 \right) \phi(\mathbf{r}) = \mu \phi(\mathbf{r}) \tag{2.6}$$

Der Wechselwirkungsterm $W(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ beschreibt die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen und kann aufgeteilt werden in einen kurzreichweitigen W_{sr} und in einen langreichweitigen W_{lr} Term, welche noch genauer zu bestimmen sind:

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = W_{\text{sr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + W_{\text{lr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \tag{2.7}$$

2.1.2 Kurzreichweitige Wechselwirkung

Die kurzreichweitige Wechselwirkung wird bei kalten, verdünnten Gasen durch die Streuung von zwei Teilchen dominiert. Die Energie liegt bei der Streuung in der Nähe der thermischen Energie $E = \frac{\hbar k^2}{2m} \sim k_B T$, woraus für $T \rightarrow 0$ folgt, dass $k \rightarrow 0$. In diesem Limes wird die Streuung der Teilchen durch ein Pseudopotential beschrieben, das die selbe Streuamplitude $f(\theta)$ liefert, wie das eigentliche mikroskopische Potential. Die detaillierte Herleitung und Berechnung der Streuung kann in vielen Standard Lehrbüchern der Quantenmechanik nachgelesen werden. Die gestreute Wellenfunktion kann zusammengesetzt werden aus einer einlaufenden, ebenen Welle und einem von $f(\theta)$ abhängigen gestreuten Anteil:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{r} \quad (2.8)$$

Die ebene Welle und die Streuamplitude werden nun in Legendre Polynome entwickelt, wobei im Limes $k \rightarrow 0$ nur die s-Wellen Streuung, also der Term mit $l = 0$ betrachtet wird. Für die Streuamplitude ergibt sich damit schließlich

$$f = -\frac{a}{1 + iak}, \quad (2.9)$$

wobei mit a die Streulänge bezeichnet wird. Ein Pseudopotential, das nun die selbe Streuamplitude f liefert ist durch

$$W_{\text{sr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 4\pi\hbar^2 \frac{a}{m} \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.10)$$

gegeben. Durch Einsetzen des Pseudopotentials in die GPE (2.6) ergibt sich die vorläufige Gleichung zu

$$\begin{aligned} \mu\phi(\mathbf{r}) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{ext}} + N \int d^3\mathbf{r}' \{W_{\text{sr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + W_{\text{lr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\} |\phi(\mathbf{r}')|^2 \right) \phi(\mathbf{r}) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{ext}} + 4\pi\hbar^2 N \frac{a}{m} |\phi(\mathbf{r})|^2 + N \int d^3\mathbf{r}' W_{\text{lr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |\phi(\mathbf{r}')|^2 \right) \phi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.11)$$

2.1.3 Langreichweitige Wechselwirkung

Nach einem Vorschlag von O'Dell et al. [5] kann in einem monopolen BEC eine attraktive gravitationsartige $\frac{1}{r}$ -Wechselwirkung zwischen den Teilchen erzeugt werden, indem mit Hilfe von elektromagnetischen Feldern Dipole induziert werden. Die Kopplung der Atome erfolgt dann über die induzierte Dipole. Ein interessanter Aspekt dabei ist, dass das Kondensat auf Grund der sphärisch symmetrischen $\frac{1}{r}$ -Wechselwirkung auch ohne äußere Falle stabil ist, es liegt also ein gravitationsartiger Selbsteinschluss vor. Das Wechselwirkungspotential $W_{\text{lr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ wird im folgenden hergeleitet.

Betrachtet man zwei neutrale Atome im Abstand \mathbf{r} in einem äußeren elektromagnetischen Feld der Intensität I mit einem Wellenvektor \mathbf{k} und einer Polarisation \mathbf{e} , so ergibt sich die Wechselwirkungsenergie zu

$$U(\mathbf{r}) = \left(\frac{I}{4\pi c \varepsilon_0^2} \right) \alpha^2(k) \sum_{i,j=1}^3 \mathbf{e}_i^* \mathbf{e}_j V_{ij}(k, \mathbf{r}) \cos(\mathbf{k}\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

Hierbei ist $\alpha(k)$ die anisotrope Polarisierbarkeit der Atome und V_{ij} der Dipol-Dipol-Wechselwirkungstensor:

$$V_{ij}(k, \mathbf{r}) = \frac{1}{r^3} [(\delta_{ij} - 3\hat{\mathbf{r}}_i \hat{\mathbf{r}}_j)(\cos(kr) + kr \sin(kr)) - (\delta_{ij} - \hat{\mathbf{r}}_i \hat{\mathbf{r}}_j)k^2 r^2 \cos(kr)] \quad (2.13)$$

Die Einheitsrichtungsvektoren sind mit $\hat{\mathbf{r}}_i = \mathbf{r}_i/r_i$ gegeben. Der Wechselwirkungstensor hat offensichtlich einen Anteil der proportional zu $1/r^3$ und einen der proportional zu $1/r$ ist. Nach [5] lässt sich der $1/r^3$ Anteil herausmitteln, indem drei zueinander orthogonale Laser eingestrahlt werden. Für U ergibt sich dann:

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{3Ik^2\alpha^2}{16\pi c\varepsilon_0^2} \frac{1}{r} \left[\frac{7}{3} + (\sin(\theta) \cos(\phi))^4 + (\sin(\theta) \sin(\phi))^4 + \cos^4(\theta) \right] \quad (2.14)$$

Wenn die Polarisierbarkeit α reell ist, so ist U attraktiv für jede Einstrahlrichtung (θ, ϕ) der Laserstrahlen relativ zum Abstand \mathbf{r} der Atome. Der anisotrope Anteil in (2.14) mittelt sich nun noch heraus, wenn man sechs solcher Triaden in unterschiedlicher Orientierung verwendet. Das daraus resultierende Potential hat dann die Form

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{11}{4\pi} \frac{Ik^2\alpha^2}{c\varepsilon_0^2} \frac{1}{r} =: -\frac{u}{r}. \quad (2.15)$$

Für ein kaltes, verdünntes BEC ist die Form (2.15) das gesuchte langreichweitige Wechselwirkungspotential

$$W_{\text{lr}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = -\frac{u}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.16)$$

welches in 2.11 eingesetzt auf

$$\mu\phi(\mathbf{r}) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V_{\text{ext}} + 4\pi\hbar^2 N \frac{a}{m} |\phi(\mathbf{r}')|^2 - Nu \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\phi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \phi(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

führt.

2.1.4 Atomare Einheiten und Skalierungseigenschaft

Durch die geschickte Einführung von geeigneten Einheiten lässt sich die Gleichung (2.17) noch vereinfachen und in eine dimensionslose Form bringen [7]:

$$\text{Masse :} \quad m_u = 2m \quad (2.18)$$

$$\text{Länge :} \quad a_u = \frac{2\hbar^2}{um_u} \quad \text{“Bohr-Radius”} \quad (2.19)$$

$$\text{Energie :} \quad E_u = \frac{\hbar^2}{m_u a_u^2} \quad \text{“Rydberg-Energie”} \quad (2.20)$$

$$\text{Frequenz :} \quad \omega_u = \frac{\hbar^2}{um_u} \quad (2.21)$$

Der Term V_{ext} für das Potential der äußeren Falle kann auf Grund des Selbsteinschlusses aus der Gleichung gestrichen werden. Mit den neu eingeführten Größen ergibt sich dann:

$$\mu\phi(\mathbf{r}) = \left(-\Delta_{\mathbf{r}} + 8\pi N \frac{a}{a_u} |\phi(\mathbf{r}')|^2 - 2N \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\phi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \phi(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

In die Gross-Pitaevskii Gleichung geht nun noch die Teilchenzahl N ein, welche aber durch eine Umskalierung der Größen \mathbf{r} , ϕ , a und μ eliminiert werden kann. Die skalierten Größen sind:

$$\tilde{\mathbf{r}} := N\mathbf{r} \quad \tilde{\phi} := N^{-3/2}\phi \quad (2.23)$$

$$\tilde{a} := \frac{N^2 a}{a_u} \quad \tilde{\mu} := \frac{\mu}{N^2} \quad (2.24)$$

Führt man die skalierten Einheiten ein, so ergibt sich die skalierte, stationäre Gross-Pitaevskii Gleichung, wobei die Tilden über den skalierten Größen weg gelassen werden zu:

$$\mu\phi(\mathbf{r}) = \left(-\Delta_{\mathbf{r}} + 8\pi a |\phi(\mathbf{r}')|^2 - 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\phi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \phi(\mathbf{r}) \quad (2.25)$$

Durch die Ersetzung $\mu \rightarrow i\frac{\partial}{\partial t}$ erhält man aus der stationären Gleichung die zeitabhängige, auf welche man auch gelangen würde, wenn man den skizzierten Weg ausgehend von der zeitabhängigen Vielteilchen-Schrödingergleichung gehen würde. Die zeitabhängige Gleichung lautet dann:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{r}) = \left(-\Delta_{\mathbf{r}} + 8\pi a |\phi(\mathbf{r}')|^2 - 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\phi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \phi(\mathbf{r}) \quad (2.26)$$

2.2 Lösung der stationären Gross-Pitaevskii Gleichung

Die stationäre GPE (2.25) kann mittels eines Variationsansatzes gelöst werden. Die gesuchte Wellenfunktion ist dabei diejenige, die das Energiefunktional minimiert. Das Energiefunktional ergibt sich zu [6]:

$$E[\psi] = \underbrace{-\psi^*(\mathbf{r})\Delta_{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r})}_{E_{\text{kin}}} + 4\pi a \underbrace{\int d^3\mathbf{r}|\psi(\mathbf{r})|^4}_{E_{\text{sr}}} - \underbrace{\int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\psi(\mathbf{r})|^2|\psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}_{E_{\text{lr}}} \quad (2.27)$$

Auf Grund der sphärischen Symmetrie des Wechselwirkungspotentials kann auch die Wellenfunktion eine sphärische Symmetrie aufweisen:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(|\mathbf{r}|) = \psi(r) \quad (2.28)$$

Als Ansatz für die Wellenfunktion wird eine Gaußfunktion gewählt

$$\psi(r) = Ae^{-k^2r^2/2}, \quad (2.29)$$

wobei A die Amplitude ist und k als Variationsparameter dient. Über die Normierungsbedingung lässt sich A leicht bestimmen:

$$\int d^3\mathbf{r}|\psi(r)|^2 \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.30)$$

$$4\pi A^2 \int dr e^{-k^2r^2} r^2 = \pi^{3/2} \frac{A^2}{k^3} \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.31)$$

$$\Rightarrow A = \frac{k^{3/2}}{\pi^{3/4}} \quad (2.32)$$

Mit diesem Gaußansatz lässt sich das Energiefunktional leicht variieren, da sich die Suche nach dem Minimum auf eine einfach Extremstellensuche einer Funktion $E(k)$ reduziert.

Die einzelnen Terme von $E(k)$ ergeben sich zu:

$$\begin{aligned}
 E_{\text{kin}}(k) &= -4 \frac{k^3}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty r^2 e^{-k^2 r^2/2} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) e^{-k^2 r^2/2} dr \\
 &= -4 \frac{k^3}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty r^2 (r^2 k^4 - k^2 - 2k^2) e^{-k^2 r^2} dr \\
 &= \frac{3}{2} k^2
 \end{aligned} \tag{2.33}$$

$$\begin{aligned}
 E_{\text{sr}}(k) &= 16a \frac{k^6}{\pi} \int_0^\infty r^2 e^{-2k^2 r^2} dr \\
 &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} a k^3
 \end{aligned} \tag{2.34}$$

$$E_{\text{lr}}(k) = -\frac{k^6}{\pi^3} \int d^3 \mathbf{r} \int d^3 \mathbf{r}' \frac{e^{-k^2(r^2+r'^2)}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \tag{2.35}$$

Das letzte Doppelintegral $E_{\text{lr}}(k)$ lässt sich lösen, wenn man zu Relativ- und Schwerpunktkoordinaten übergeht:

$$\mathbf{r}_{\text{rel}} := \mathbf{r} - \mathbf{r}' \quad , \quad \mathbf{r}_{\text{s}} := \mathbf{r} + \mathbf{r}' \tag{2.36}$$

Mit einer Funktionaldeterminante von $1/8$ ergibt sich durch diese Transformation:

$$\begin{aligned}
 E_{\text{lr}}(k) &= -\frac{k^6}{8\pi^3} \int d^3 \mathbf{r}_{\text{s}} \int d^3 \mathbf{r}_{\text{rel}} \frac{e^{-k^2 \frac{1}{2}(r_{\text{rel}}^2 + r_{\text{s}}^2)}}{r_{\text{rel}}} \\
 &= -\frac{16k^6}{8\pi} \int_0^\infty r_{\text{s}}^2 e^{-k^2 \frac{1}{2} r_{\text{s}}^2} dr_{\text{s}} \int_0^\infty r_{\text{rel}} e^{-k^2 \frac{1}{2} r_{\text{rel}}^2} dr_{\text{rel}} \\
 &= -\sqrt{\frac{2}{\pi}} k
 \end{aligned} \tag{2.37}$$

Die gesamte Energie ergibt sich mit den berechneten Termen zu:

$$E(k) = \frac{3}{2} k^2 + \sqrt{\frac{2}{\pi}} a k^3 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \tag{2.38}$$

Das Minimum von $E(k)$ erhält man nun als Nullstelle der Ableitung, welche gegeben ist durch

$$\frac{d}{dk} E(k) = 3\sqrt{\frac{2}{\pi}} a k^2 + 3k - \sqrt{\frac{2}{\pi}}. \tag{2.39}$$

Die Nullstellen dieses Polynoms lauten:

$$k_{\pm} = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\pm \sqrt{1 + \frac{8a}{3\pi}} - 1 \right) \quad (2.40)$$

Ob Nullstellen vorhanden sind hängt nun, mit Blick auf die Diskriminante, von a ab. Nullstellen existieren nur dann, wenn die Diskriminante einen positiven Wert annimmt, was für Werte größer der kritischen Streulänge a_{cr} der Fall ist,

$$a > a_{cr} = -\frac{3\pi}{8} \approx -1,1781 \dots \quad (2.41)$$

Einsetzen der Nullstellen k_{\pm} in das Energiefunktional $E(k)$ liefert einen maximalen $E(k_+)$ und einen minimalen $E(k_-)$ Wert:

$$E_{\pm} = E(k_{\pm}) = -\frac{4}{9\pi} \frac{1 \pm 2\sqrt{1 + 8a/3\pi}}{(1 \pm \sqrt{1 + 8a/3\pi})^2} \quad (2.42)$$

Die Energie spaltet sich abhängig von der gewählten Nullstelle in einen Zweig mit höherer Energie und einen mit niedrigerer auf, wobei die Zweige bei der kritischen Streulänge a_{cr} durch eine Tangentenbifurkation entstehen. Der Zweig mit niedriger Energie E_- wird mit einem Grundzustand, der mit höherer Energie E_+ mit einem angeregten Zustand assoziiert. In Abbildung 2.1 ist die Energie in Abhängigkeit der Streulänge dargestellt.

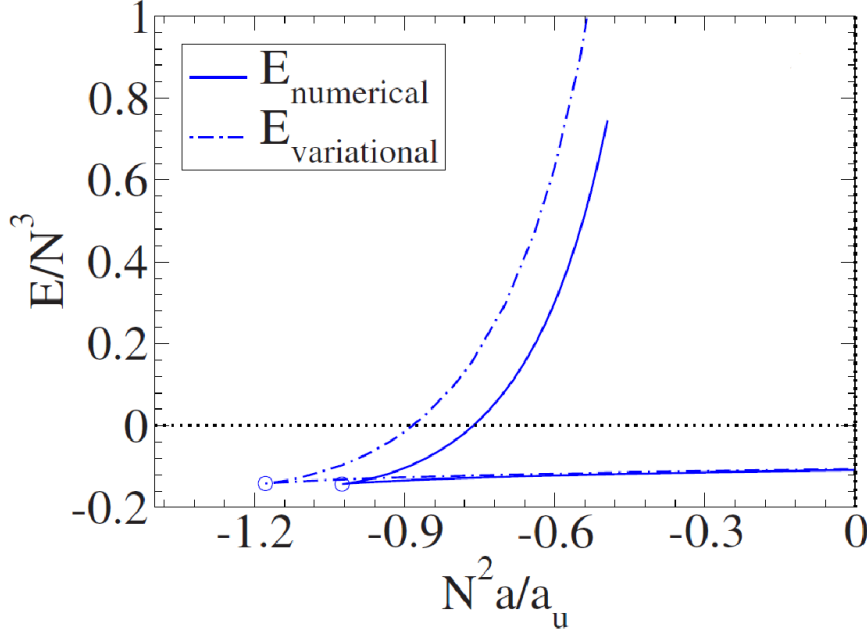


Abbildung 2.1: Tangentenbifurkation der Meanfieldenergie, aus [7]. Dargestellt sind die Ergebnisse aus numerischen Rechnungen im Vergleich zu den Ergebnissen aus analytischen Rechnung mit einem Variationsansatz.

2.3 Zeitabhängige GPE - TDVP

Die zeitabhängige Gross-Pitaevskii Gleichung

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}) = \left(-\Delta_{\mathbf{r}} + 8\pi a |\psi(\mathbf{r}')|^2 - 2 \int d^3 \mathbf{r}' \frac{|\psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \psi(\mathbf{r}) \quad (2.43)$$

wird mit einem zeitabhängigen Variationsprinzip (TDVP: Time-dependent variational principle) nach McLachlan [8] gelöst. Das Verfahren wurde entwickelt, um die zeitabhängige Schrödingergleichung zu lösen, lässt sich aber auch auf die Gross-Pitaevskii Gleichung übertragen. Bei dem Verfahren wird die Wellenfunktion über einen Satz von zeitabhängigen Parametern $\mathbf{z}(t)$ beschrieben:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}, \mathbf{z}(t)) \quad (2.44)$$

Das Ziel des Verfahrens ist es, einen Satz von gewöhnlichen Differentialgleichung für die Parameter zu erhalten, anstatt die ursprüngliche partielle Differentialgleichung lösen zu müssen. Das Variationsprinzip von McLachlan geht von einer Schrödingergleichung $i\dot{\psi} = \hat{H}\psi$ aus, deren Differenz von linker und rechter Seite minimal werden soll. Es wird dabei nach einer Wellenfunktion ϕ variiert, die nach Abschluss des Verfahrens gleich der

Zeitableitung gesetzt wird $\phi = \dot{\psi}$. Das zu minimierende Funktional I ergibt sich dann zu:

$$\begin{aligned} I &= \|\dot{\psi}(t) - \hat{H}\psi\|^2 \\ &= \langle \dot{\psi} | \dot{\psi} \rangle + i \langle \dot{\psi} | \hat{H}\psi \rangle - i \langle \hat{H}\psi | \dot{\psi} \rangle + \langle \hat{H}\psi | \hat{H}\psi \rangle \end{aligned} \quad (2.45)$$

Wird das Funktional I nach ϕ variiert ergibt sich:

$$\begin{aligned} \delta I &= \langle \delta\phi | \phi \rangle + \langle \phi | \delta\phi \rangle + i \langle \delta\phi | \hat{H}\psi \rangle - i \langle \hat{H}\psi | \delta\phi \rangle \\ &= \langle \delta\phi | \phi + i\hat{H}\psi \rangle + \langle \phi - i\hat{H}\psi | \delta\phi \rangle \end{aligned} \quad (2.46)$$

Durch die Ersetzung $\phi = \dot{\psi}(\mathbf{z}(t), \dot{\mathbf{z}}(t))$ gilt unter der Annahme, dass nur nach ϕ und damit auch nur nach den $\dot{\mathbf{z}}$ variiert wird, für $\delta\phi$:

$$\delta\phi = \delta|\dot{\psi}(\mathbf{z}, \dot{\mathbf{z}})\rangle = \left| \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \dot{\mathbf{z}}} \delta \dot{\mathbf{z}} \right\rangle = \left| \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \delta \dot{\mathbf{z}} \right\rangle \quad (2.47)$$

Durch Einsetzen von (2.47) und $\phi = \dot{\psi}$ in (2.46) ergibt sich für die Variation folgende Bedingung:

$$\delta I = \left\langle \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \delta \dot{\mathbf{z}} \middle| \dot{\psi} + i\hat{H}\psi \right\rangle + \left\langle \dot{\psi} - i\hat{H}\psi \middle| \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \delta \dot{\mathbf{z}} \right\rangle \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.48)$$

Für eine beliebige Variation $\delta \dot{\mathbf{z}}$ folgt daraus

$$\left\langle \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \middle| \dot{\psi} + i\hat{H}\psi \right\rangle = 0 \quad (2.49)$$

$$\Rightarrow \left\langle \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \middle| \dot{\psi} \right\rangle = -i \left\langle \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \middle| \hat{H}\psi \right\rangle \quad (2.50)$$

$$\Rightarrow \left\langle \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \middle| \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} \right\rangle = \underbrace{\left\langle \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \middle| \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \right\rangle}_{\text{Matrix } \mathbf{K}} \dot{\mathbf{z}} = -i \underbrace{\left\langle \frac{\partial \dot{\psi}}{\partial \mathbf{z}} \middle| \hat{H}\psi \right\rangle}_{\text{Vektor } \mathbf{h}} \quad (2.51)$$

$$\Rightarrow \mathbf{K} \dot{\mathbf{z}} = -i\mathbf{h}. \quad (2.52)$$

Damit hat man ein System von Differentialgleichung für die Variationsparameter \mathbf{z} gefunden. Mit einem Gaußansatz für $\psi(\mathbf{r}, t)$ mit geeigneten Parametern lässt sich das TDVP jetzt auf das monopolare BEC anwenden. Der Gaußansatz lautet

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \quad (2.53)$$

mit den Parametern $\mathbf{z}(t) = (A(t), \gamma(t)) \in \mathbb{C}^2$, $A = A_r + iA_i$ ist hierbei die Breite der Gaußfunktion und $\gamma = \gamma_r + i\gamma_i$ eine Phase. Mit dem Hamiltonian der GPE

$$\hat{H} = -\Delta_{\mathbf{r}} + V, \quad (2.54)$$

$$V = V_{\text{sr}} + V_{\text{lr}} = 8\pi a |\phi(\mathbf{r}')|^2 - 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\phi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.55)$$

und dem Vektor der Parameter $\mathbf{z} = (A, \gamma)$ wird nun das Bracket

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{z}} \left| \dot{\psi} + i\hat{H}\psi \right. \right\rangle &= 0 \\ \Leftrightarrow \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{z}} \left| i\dot{\psi} - \hat{H}\psi \right. \right\rangle &= 0 \end{aligned} \quad (2.56)$$

berechnet [9]. Die einzelnen Ableitungen ergeben sich mit $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, wobei x, y, z kartesische Koordinaten sind, zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} = i(r^2 \dot{A} + \dot{\gamma}) e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \quad (2.57)$$

$$-\Delta_r e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} = (-i6A + 4A^2 r^2) e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \quad (2.58)$$

$$\frac{\partial}{\partial A} e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} = i r^2 e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial}{\partial \gamma} e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} = i e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \quad (2.60)$$

Damit ergeben sich zunächst zwei Gleichungen für das Bracket (2.56)

$$\left\langle i e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \left| \left(v_0 + \frac{1}{2} v_2 r^2 - V \right) e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \right. \right\rangle = 0 \quad (2.61)$$

$$\left\langle i r^2 e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \left| \left(v_0 + \frac{1}{2} v_2 r^2 - V \right) e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \right. \right\rangle = 0, \quad (2.62)$$

wobei $v_0 := -\dot{\gamma} + i6A$ und $\frac{1}{2}v_2 := -\dot{A} - 4A^2$ gilt. Durch Umsortierung, einer Division mit der Imaginäreinheit i und den Abkürzungen $\left\langle e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \right| = \langle g|$, bzw. $\left| e^{i(A(t)r^2 + \gamma(t))} \right\rangle = |g\rangle$ ergeben sich die Gleichungen

$$\langle g|g\rangle v_0 + \frac{1}{2} \langle g|r^2|g\rangle v_2 = \langle g|V|g\rangle \quad (2.63)$$

$$\langle g|r^2|g\rangle v_0 + \frac{1}{2} \langle g|r^4|g\rangle v_2 = \langle g|r^2V|g\rangle. \quad (2.64)$$

Da die sich aus den einzelnen Brackets ergebenden Integrale analytisch lösbar sind, lässt sich das lineare Gleichungssystem für v_0 und v_2 ebenfalls analytisch lösen, wobei für die Integrale gilt [9]

$$\langle g|g\rangle = \pi^{3/2} \frac{e^{-2\gamma_i}}{(2A_i)^{3/2}}, \quad \langle g|r^2|g\rangle = \frac{3}{2} \pi^{3/2} \frac{e^{-2\gamma_i}}{(2A_i)^{5/2}}, \quad (2.65)$$

$$\langle g|r^4|g\rangle = \frac{15}{4} \pi^{3/2} \frac{e^{-2\gamma_i}}{(2A_i)^{7/2}}, \quad \langle g|V|g\rangle = \frac{\pi^{5/2} e^{-4\gamma_i}}{2A_i^{5/2}} (2aA_i + 1), \quad (2.66)$$

$$\langle g|r^2V|g\rangle = \frac{\pi^{5/2} e^{-4\gamma_i}}{16A_i^{7/2}} (6aA_i + 5). \quad (2.67)$$

Als Lösung des linearen Gleichungssystems ergibt sich schließlich

$$v_0 = \frac{\pi e^{-2\gamma_i}}{2\sqrt{2}A_i} (5 - 14aA_i) \quad (2.68)$$

$$v_2 = 2\sqrt{2}\pi e^{-2\gamma_i} \left(aA_i - \frac{1}{6} \right). \quad (2.69)$$

Mit Hilfe der Ausdrücke für v_0 und v_2 erhält man zwei Bewegungsgleichungen für die Gaußparameter

$$\dot{\gamma} = 6iA - v_0 = 6iA - \frac{\pi e^{-2\gamma_i}}{2\sqrt{2}A_i} (5 - 14aA_i) \quad (2.70)$$

$$\dot{A} = -4A^2 - v_2 = -4A^2 - 2\sqrt{2}\pi e^{-2\gamma_i} \left(aA_i - \frac{1}{6} \right). \quad (2.71)$$

Hier wurde nur der Ansatz mit einer Gaußfunktion skizziert. Dieser Ansatz liefert für die Meanfieldenergie qualitativ korrekte Ergebnisse im Vergleich zu numerisch exakteren Rechnungen (vgl. Abbildung 2.1). Es zeigt sich, dass ein Ansatz mit gekoppelten Gaußfunktionen quantitativ bessere Werte liefert [9].

2.4 Kanonische Variablen

Die in Abschnitt 2.2 beschriebenen Ergebnisse erhält man auch mit Hilfe der Bewegungsgleichungen für die Gaußparameter. Da nur eine Gaußfunktion verwendet wird, lassen sich für die Parameter kanonische Variablen finden [10]. Hierzu werden zunächst die Gleichungen (2.70) und (2.71) in ihre Real- und Imaginärteile zerlegt, $A = A_r + iA_i$ und $\gamma = \gamma_r + i\gamma_i$. Der Imaginärteil γ_i kann über die Normierung $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ zu

$$\gamma_i = -\frac{3}{4} \ln \left(\frac{2A_i}{\pi} \right) \quad (2.72)$$

bestimmt werden. Da γ_r eine Phase beschreibt kann $\gamma_r = 0$ gewählt werden, da die Phase bei der Verwendung nur einer Gaußfunktion keine Rolle spielt. Durch diese Annahmen ist die Wellenfunktion nur noch von A_r und A_i abhängig und ergibt sich zu

$$\psi = \left(\frac{2A_r}{\pi} \right)^{\frac{3}{4}} e^{i(A_r + iA_i)r^2}. \quad (2.73)$$

Die stationären Lösungen ergeben sich als Fixpunkte aus den Bewegungsgleichungen, welche man durch die Forderung $\dot{A}_r = 0$ und $\dot{A}_i = 0$ erhält. Für die Meanfieldenergie ergibt sich dann

$$E_{\text{mf}} = -\langle \psi | \Delta_r | \psi \rangle + \frac{1}{2} (\langle \psi | V_{\text{sr}} | \psi \rangle + \langle \psi | V_{\text{lr}} | \psi \rangle) \quad (2.74)$$

$$= \frac{3}{A_i} (A_i^2 + A_r^2) + 2\sqrt{\frac{A_i}{\pi}} (2aA_i - 1). \quad (2.75)$$

Durch die Einführung von kanonischen Variablen werden die Bewegungsgleichungen der Gaußparameter nun auf eine Hamiltonsche Form gebracht. Die Transformation

$$q = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{A_i}}, \quad (2.76)$$

$$p = A_r \sqrt{\frac{3}{A_i}}, \quad (2.77)$$

wobei q der Breite der Gaußfunktion entspricht, werden in die Meanfieldenergie eingesetzt und man erhält die Hamiltonfunktion

$$H(q, p) = p^2 + \frac{3a}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q^3} + \frac{9}{4} \frac{1}{q^2} - \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q}, \quad (2.78)$$

wobei gilt $E_{\text{mf}} = H(q, p)$. Dadurch ergibt sich eine Analogie zwischen den Bewegungsgleichungen für die Gaußparameter, also der Dynamik des BEC und einem klassischen Teilchen in einem eindimensionalen Potential

$$V(q) = \frac{3a}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q^3} + \frac{9}{4} \frac{1}{q^2} - \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q}. \quad (2.79)$$

Nach der Hamiltonschen Mechanik gilt:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = 2p \quad (2.80)$$

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{9a}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q^4} + \frac{9}{2} \frac{1}{q^3} - \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q^2} \quad (2.81)$$

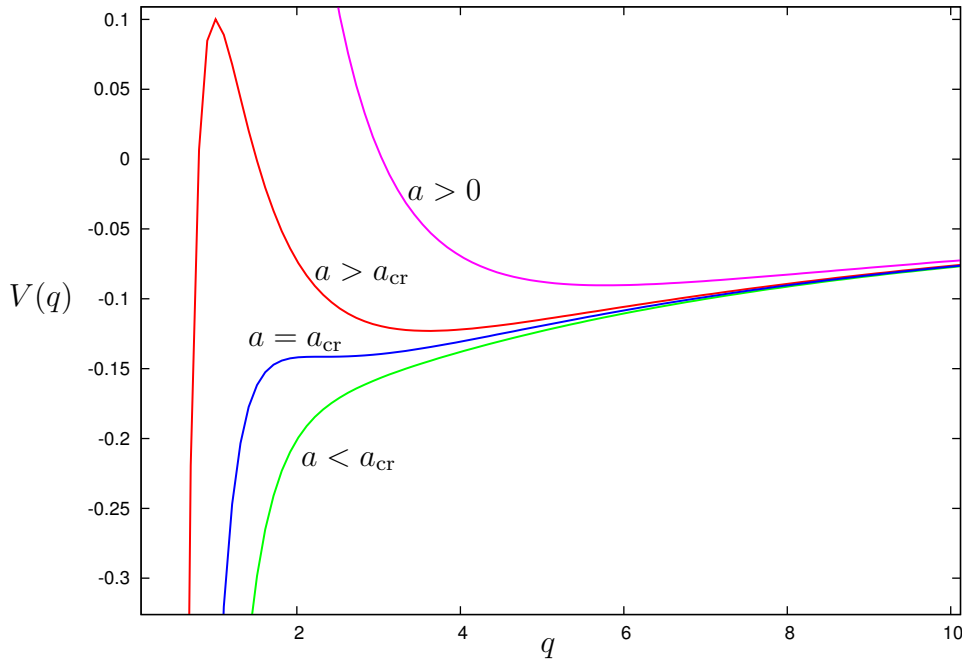
Durch Einsetzen der Rücktransformationen lässt sich die Gültigkeit der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen 2.80 und 2.81 zeigen [10], da dadurch wieder die Bewegungsgleichungen 2.70 und 2.71 für die Gaußparameter erhalten werden. Die Extremstellen des Potentials entsprechen dann dem Grundzustand, bzw. dem angeregten Zustand:

$$\frac{\partial V(q)}{\partial q} = -\frac{9a}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q^4} - \frac{9}{2} \frac{1}{q^3} + \sqrt{\frac{3}{\pi}} \frac{1}{q^2} \stackrel{!}{=} 0 \quad (2.82)$$

$$\Rightarrow q_{\max} = \frac{3}{4} \left(\sqrt{3\pi} - \sqrt{3\pi + 8a} \right) \quad (2.83)$$

$$q_{\min} = \frac{3}{4} \left(\sqrt{3\pi} + \sqrt{3\pi + 8a} \right) \quad (2.84)$$

Maxima und Minima existieren nun nur im Bereich $0 > a > a_{\text{cr}} = -\frac{3\pi}{8}$, es gibt also einen stabilen Grundzustand bei der Energie $E_{\text{mf,min}} = V(q_{\min})$ und einen instabilen angeregten Zustand bei der Energie $E_{\text{mf,max}} = V(q_{\max})$. Für Energien zwischen den extremalen Energien $E_{\text{mf,max}} > E > E_{\text{mf,min}}$ gibt es periodische Lösungen, in der klassischen Analogie schwingt das Teilchen um das Potentialminimum. Diese klassische Schwingung entspricht einer oszillierenden Breite der Gaußfunktion. Das Minimum bei $E_{\text{mf,min}}$ ist allerdings kein globales Minimum sondern nur ein lokales. Der Grundzustand ist also nur metastabil und das Teilchen kann durch den Potentialberg in den kollabierenden Bereich um $q = 0$ tunneln. Für Streulängen $a < a_{\text{cr}}$ existieren keine Extrema, das Kondensat kollabiert. Ist die Streulänge $a > 0$, so existiert nur ein Minimum, wofür ebenfalls oszillierende Lösungen existieren. In Abbildung 2.2 wird das Potentiale $V(q)$ bei unterschiedlichen Streulängen dargestellt.


 Abbildung 2.2: Das Potential $V(q)$ bei unterschiedlichen Streulängen

2.5 Makroskopisches Quantentunneln

Wie im vorherigen Abschnitt beschrieben ist der Grundzustand nicht stabil, sondern nur metastabil, da das Potential $V(q)$ nur ein lokales Minimum aufweist. Das Tunneln eines Teilchens aus dem metastabilen Grundzustand hinein in den kollabierenden Bereich wird als “makroskopisches Quantentunneln” bezeichnet. Die Tunnelrate lässt sich nach einem Vorschlag von Stoof [11] herleiten und wird im folgenden skizziert. Eine detailliertere Beschreibung findet man in [11].

2.5.1 Semiklassische Näherung - kanonische Koordinaten

Zunächst wird ein Teilchen der Masse m in einem Potential $V(q)$ betrachtet. Die Tunnelrate aus einem metastabilen Grundzustand

$$\Gamma_0 = -\frac{2}{\hbar} \text{Im}(E_0) = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{2k_B T}{\hbar} \text{Im}(\ln Z) \quad (2.85)$$

ist dabei proportional zum Imaginärteil des Logarithmus der Zustandssumme Z , $\text{Im}(E_0)$ ist der Imaginärteil der Energie des metastabilen Grundzustandes. Die Zustandssumme

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}] \quad (2.86)$$

mit $\beta = \frac{1}{k_B T}$ und $\hat{H}(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ dem Hamiltonoperator lässt sich als ein Pfadintegral über alle geschlossenen Bahnen darstellen,

$$Z = \iint d[q]d[p] \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \left[-ip \frac{dq}{d\tau} + H(q, p) \right] \right) \quad (2.87)$$

mit der periodischen Randbedingung $q(-\hbar\beta/2) = q(\hbar\beta/2)$. Die Verbindung zwischen der Spur des Zeitentwicklungsoperators und dem Pfadintegral führt zu der Verbindung zwischen der inversen Temperatur und der Imaginärzeit $\tau := i(t_2 - t_1)$:

$$\beta = \frac{1}{k_B T} = i(t_2 - t_1) \quad (2.88)$$

An p wird keine Bedingungen gestellt und das Integral über p lässt sich für den hier betrachteten Hamiltonoperator leicht berechnen, da es sich um ein Gaußintegral handelt, welches für die weitere Betrachtung keine Rolle mehr spielt. Durch die p -Integration ergibt sich folgendes Pfadintegral für die Zustandssumme mit $S[q]$ der euklidischen Wirkung:

$$\begin{aligned} Z &= \int d[q] \exp \left(-\frac{1}{\hbar} S[q] \right) \\ &= \int d[q] \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{d\tau} \right)^2 + V(q) \right] \right) \end{aligned} \quad (2.89)$$

Zur Lösung des Pfadintegrals betrachtet man nun nur die Bahnen, die die Wirkung $S[q]$ extremalisieren, da diese Bahnen den größten Beitrag zum Pfadintegral liefern. Diese Bahnen sind Lösungen der Euler-Lagrange Gleichung

$$m \frac{d^2 q}{d\tau^2} = -\frac{d(-V(q))}{dq}, \quad (2.90)$$

die die klassische Bewegung eines Teilchens mit Masse m im Potential $-V(q)$ beschreiben. Eine periodische Lösung der Euler-Lagrange Gleichung ist die stationäre Lösung $q(\tau) = q_0$ am Minimum des Potentials $dV(q_0)/dq = 0$, was analog zum Grundzustand ist. Für kleine Fluktuationen $q'(\tau)$ um das Minimum $q(\tau) = q_0 + q'(\tau)$ ergibt eine Entwicklung in den Fluktuationen bis zur zweiten Ordnung für die Zustandssumme:

$$Z \simeq e^{-\beta V(q_0)} \underbrace{\int d[q'] \exp \left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{dq'}{d\tau} \right)^2 + \frac{d^2 V(q_0)}{dq^2} q'^2 \right] \right)}_{\text{Zustandssumme des harmonischen Oszillators}} \quad (2.91)$$

Mit $m\omega_0^2 = \frac{d^2V(q_0)}{dq^2}$ ist die Zustandssumme gerade die des harmonischen Oszillators

$$\begin{aligned} Z &\simeq e^{-\beta V(q_0)} N \left\{ \det \left[\frac{m}{2\pi\hbar} \left(-\frac{d^2}{d\tau^2} + \omega_0^2 \right) \right] \right\}^{1/2} \\ &\simeq e^{-\beta V(q_0)} \frac{e^{-\beta\hbar\omega_0/2}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega_0}}, \end{aligned} \quad (2.92)$$

wobei N der Normierungsfaktor des Pfadintegrals ist. Im Limes $T \rightarrow 0$ erhält man hieraus für die Energie $E_0 \simeq V(q_0) + \hbar\omega_0/2$ und damit eine Tunnelrate von $\Gamma_0 = 0$. Um eine nicht verschwindende Tunnelrate zu erhalten, muss eine weitere Bahn, die ‘‘Bounce-Bahn‘‘ $q_b(\tau)$ berücksichtigt werden. Die Wirkung dieser Bahn unterscheidet sich nicht stark von der Wirkung der stationären Bahn q_0 und liefert deshalb ebenfalls einen nicht verschwindenden Beitrag zum Pfadintegral. Die Bounce-Bahn ist in Abbildung 2.3 schematisch dargestellt. Die Bounce-Bahn hat die Eigenschaft, dass sich das Teilchen relativ

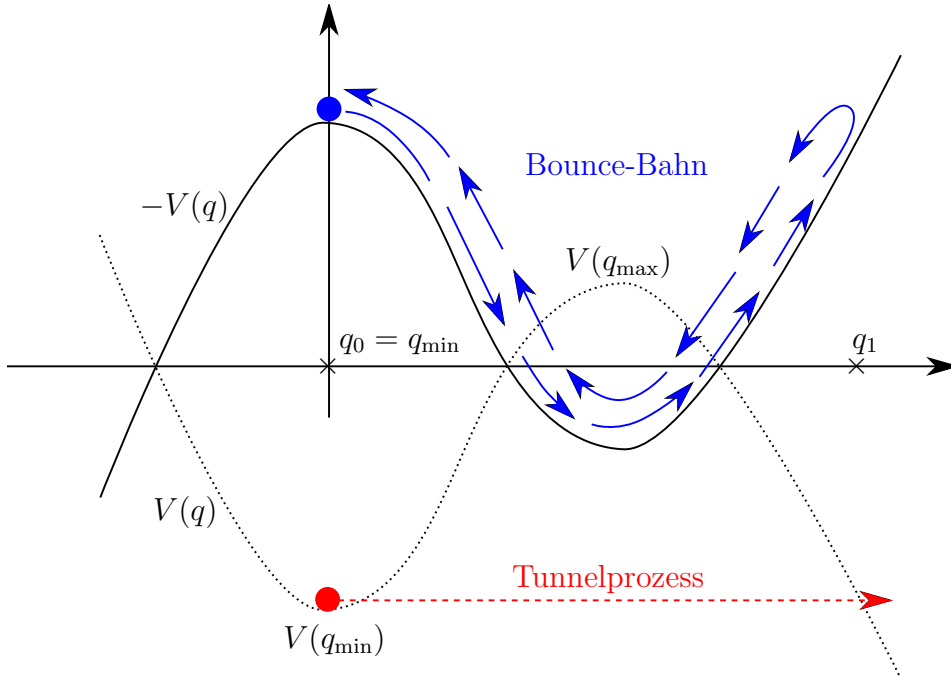


Abbildung 2.3: Das Potential $V(q)$ und das invertierte Potential $-V(q)$ mit der Bounce-Bahn, bei der das Teilchen bei q_0 startet, durch das Minimum bis zur Stelle q_1 und wieder zurück schwingt.

lange bei q_0 aufhört, durch das Minimum bis zum Umkehrpunkt bei q_1 ($V(q_0) = V(q_1)$) schwingt und sich wieder asymptotisch q_0 nähert. Im Limes $\tau \rightarrow \pm\infty$ ist das Verhalten gegeben durch $q_b \sim q_0 + (v_0/\omega_0)e^{-\omega_0|\tau|}$. Die Zeit ist dabei so gewählt, dass zum Zeitpunkt $\tau = 0$ gerade der Umkehrpunkt erreicht ist. Die ‘‘Anfangsgeschwindigkeit‘‘ v_0 ist

dabei vom Verlauf des Potentials abhängig. Entwickelt man wieder in den Fluktuationen $q'(\tau)$ um $q_b(\tau)$, $q(\tau) = q_b(\tau) + q'(\tau)$ bis zur zweiten Ordnung so ergibt sich für die Zustandssumme

$$Z \simeq e^{\beta(V(q_0) + \hbar\omega_0/2)} \left(1 + \left[\frac{\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_0^2)}{\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_b(\tau)^2)} \right]^{1/2} e^{-(S[q_b] - S[q_0])/\hbar} \right), \quad (2.93)$$

wobei ω_b durch $m\omega_b^2 = d^2V(q_b(\tau))/dq^2$ definiert ist. Nimmt man noch die Möglichkeit mehrerer Schwingungen mit, so erhält man für die Energie im Limes $T \rightarrow 0$:

$$E_0 = V(q_0) + \frac{\hbar\omega_0}{2} - \lim_{T \rightarrow 0} k_B T \left[\frac{\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_0^2)}{\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_b(\tau)^2)} \right]^{1/2} e^{-(S[q_b] - S[q_0])/\hbar} \quad (2.94)$$

Im Vergleich zu der Lösung q_0 ist zu der Energie ein weiterer Term hinzu gekommen, welcher rein imaginär ist und deshalb eine nicht verschwindende Tunnelrate liefert. Dass der letzte Term von E_0 imaginär ist lässt sich daran erkennen, dass $dq_b(\tau)/d\tau$ eine Eigenfunktion des Operators $\det(-d^2/d\tau^2 + \omega_b(\tau)^2)$ mit Eigenwert 0 ist. Da nun aber $dq_b(\tau)/d\tau$ einen Knoten hat, muss es noch einen negativen Eigenwert geben, der zu einer knotenlosen Eigenfunktion gehört, was dann dazu führt, dass der letzte Term imaginär wird. Die Auswertung des Terms kann man in [12] nachlesen. Es ergibt sich dadurch für die Energie

$$E_0 = V(q_0) + \frac{\hbar\omega_0}{2} - \frac{i}{2} \sqrt{\frac{m\omega_0 \hbar v_0^2}{\pi}} e^{-(S[q_b] - S[q_0])/\hbar} \quad (2.95)$$

und damit schließlich für die Tunnelrate:

$$\Gamma_0 = \sqrt{\frac{m\omega_0 v_0^2}{\hbar\pi}} e^{-(S[q_b] - S[q_0])/\hbar} \quad (2.96)$$

Wie zu Beginn erwähnt handelt es sich bei dieser Beschreibung um eine semiklassische Näherung, bei der ein Teilchen der Masse m in einem Potential $V(q)$ betrachtet wird. Um die Tunnelrate eines BEC zu erhalten geht man von einem feldtheoretischen Ansatz mit den Feldgrößen $\psi(\mathbf{r}, t)$ und $\pi(\mathbf{r}, t) = i\hbar\psi^*(\mathbf{r}, t)$ aus. Der Hamiltonian $H[\psi, \pi]$ ist dann über eine Hamiltondichte \mathcal{H}

$$\begin{aligned} H[\psi, \pi] &= \int d\mathbf{r} \psi^* \mathcal{H} \psi \\ &= \int d\mathbf{r} \psi^* \left(-\frac{\hbar}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + 2\pi\hbar^2 N \frac{a}{m} |\psi(\mathbf{r}')|^2 + \frac{1}{2} V_{\text{lr}} \right) \psi \end{aligned} \quad (2.97)$$

definiert. Die Hamiltondichte wird dabei so gewählt, dass durch die Bewegungsgleichungen für $\psi(\mathbf{r}, t)$ wieder die Gross-Pitaevskii Gleichung (bei diesem Ansatz geht man von der unskalierten GPE aus) erhalten wird:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) &= \frac{\delta}{\delta\pi(\mathbf{r}, t)} H[\psi, \pi] \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + 4\pi\hbar^2 N \frac{a}{m} |\psi(\mathbf{r}')|^2 + V_{\text{lr}} \right) \psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2.98)$$

Für die Zustandssumme gilt dann:

$$Z = \iint d[\psi^*]d[\psi] \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int d\tau \left(\int d\mathbf{r} \psi^* \hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \psi + H[\psi, \pi] \right) \right\} \quad (2.99)$$

Diese Zustandssumme muss nun ausgewertet werden, wobei man im Laufe der Auswertung [11] wieder zu gaußförmigen Wellenfunktionen übergeht. Der Unterschied ist aber, dass die Teilchenzahl N bei der feldtheoretischen Behandlung explizit in die Gleichungen eingeht. Für die Tunnelrate ergibt sich dann ein ähnliches Ergebnis wie bei der semiklassischen Betrachtung

$$\Gamma_0 = \sqrt{\frac{Nm\omega_0 v_0^2}{\pi \hbar}} e^{-(S[a_b] - S[a_0])N/\hbar}, \quad (2.100)$$

wobei im Vergleich zur semiklassischen Lösung der Übergang $\hbar \rightarrow \frac{\hbar}{N}$ vollzogen wird.

2.5.2 Imaginärzeitdynamik ohne kanonische Variablen

In den vorherigen Kapiteln ist man von Systemen ausgegangen, die mit kanonischen Variablen beschrieben wurden und die Bounce-Bahn in Imaginärzeit berechnet wurde, indem man die Bewegung im invertierten Potential betrachtete. Es ist aber nicht immer möglich, kanonische Variablen für ein System zu finden und daher kann die Bounce-Bahn und deren Wirkung nicht über ein klassisches Analogon berechnet werden. Ein erster Schritt um dieses Problem zu lösen ist, die Gross-Pitaevskii Gleichung in Imaginärzeit $\tau = it$ zu betrachten. Dabei geht die Gleichung über in

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi \quad \xrightarrow{\tau = it} \quad -\frac{\partial}{\partial \tau} \psi = \hat{H} \psi.$$

Für den Zeitentwicklungsoperator \hat{U} gilt dann beim Übergang $\tau = it$ [13]:

$$\hat{U} = e^{-i\hat{H}t} \quad \xrightarrow{\tau = it} \quad \hat{U} = e^{(-\hat{H} + \mu)\tau}$$

Dies alleine reicht allerdings nicht aus, da sonst die Norm N zeitabhängig wird, mit

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = e^{(-\hat{H} + \mu)\tau} \psi(\mathbf{r}, 0) \quad (2.101)$$

gilt:

$$N = \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, \tau) \psi(\mathbf{r}, \tau) \quad (2.102)$$

$$= \int d\mathbf{r} e^{(-\hat{H} + \mu)\tau} \psi^*(\mathbf{r}, 0) e^{(-\hat{H} + \mu)\tau} \psi(\mathbf{r}, 0) \quad (2.103)$$

$$= e^{2(-\hat{H} + \mu)\tau} \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, 0) \psi(\mathbf{r}, 0) \quad (2.104)$$

Da der Zeitentwicklungsoperator reell ist, bleibt bei der Berechnung der Norm der Faktor $e^{2(-\hat{H}+\mu)\tau}$ übrig. Um dieses Problem zu lösen betrachtet man die komplex konjugierte Gross-Pitaevskii Gleichung und vollzieht anschließend den Übergang zur Imaginärzeit [13]

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \bar{\psi} = \hat{H} \bar{\psi} \quad \xrightarrow{\tau = it} \quad \frac{\partial}{\partial \tau} \bar{\psi} = \hat{H} \bar{\psi}.$$

Der Zeitentwicklungsoperator \hat{U} hat dann die Form:

$$\hat{U} = e^{i\hat{H}t} \quad \xrightarrow{\tau = it} \quad \hat{U} = e^{(\hat{H}-\mu)\tau}$$

Fordert man nun noch, dass

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau = 0) = \psi^*(\mathbf{r}, \tau = 0), \quad (2.105)$$

wobei ψ^* die komplex konjugierte Wellenfunktion ist, so erhält man mit

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) = e^{(\hat{H}-\mu)\tau} \bar{\psi}(\mathbf{r}, 0) \quad (2.106)$$

für die Norm N

$$N = \int d\mathbf{r} \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \psi(\mathbf{r}, \tau) \quad (2.107)$$

$$= \int d\mathbf{r} e^{(\hat{H}-\mu)\tau} \bar{\psi}(\mathbf{r}, 0) e^{(-\hat{H}+\mu)\tau} \psi(\mathbf{r}, 0) \quad (2.108)$$

$$= \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, 0) \psi(\mathbf{r}, 0) \quad (2.109)$$

$$= \text{const}, \quad (2.110)$$

wobei die Wahrscheinlichkeitsdichte über $\rho = \bar{\psi}\psi$ definiert ist. Die so definierte Norm ist zeitunabhängig und damit brauchbar. Die Meanfieldenergie E_{mf} wird mit ψ und $\bar{\psi}$ nach

$$E_{\text{mf}} = \int d\mathbf{r} \bar{\psi} \left\{ \Delta_{\mathbf{r}} + \frac{1}{2} (V_{\text{sr}} + V_{\text{sr}}) \right\} \psi \quad (2.111)$$

berechnet

Randbedingungen

Bei dem Lösungsweg mit kanonischen Variablen wurden periodische Randbedingungen gefordert, $q(-\beta\hbar/2) = q(\beta\hbar/2)$. Überträgt man dies auf die Größen ψ und $\bar{\psi}$ so ergibt sich die Forderung, dass diese an den Rändern $-\beta\hbar/2$ und $\beta\hbar/2$ ebenfalls identisch sein sollen:

$$\psi(\beta\hbar/2) = \bar{\psi}(\beta\hbar/2) \quad ; \quad \psi(-\beta\hbar/2) = \bar{\psi}(-\beta\hbar/2) \quad (2.112)$$

Die Konvention, dass für $\tau = 0$ gerade der Umkehrpunkt erreicht sein soll und dass $\psi^*(\tau = 0) = \bar{\psi}(\tau = 0)$ ergibt noch die Bedingung, dass am Umkehrpunkt

$$\bar{\psi}(\tau = 0) = \psi(\tau = 0) \quad (2.113)$$

gilt. Mit den beiden Zeitentwicklungsoperatoren \hat{U} , \hat{U} lässt sich noch eine zeitliche Symmetrie der beiden Wellenfunktionen ψ , $\bar{\psi}$ zeigen. Es gilt:

$$\psi(-\tau) = e^{-\hat{H}(-\tau)}\psi(0) = \bar{\psi}(\tau) \quad (2.114)$$

Mit diesen Bedingungen genügt es, nur die halbe Periode zu betrachten.

2.5.3 Die Wirkung

In die Tunnelrate

$$\Gamma_0 = \sqrt{\frac{Nm\omega_0 v_0^2}{\pi\hbar}} e^{-(S[q_b] - S[q_0])N/\hbar} \quad (2.115)$$

geht die Differenz ΔS zwischen der Wirkung der stationären Bahn $S[q_0]$ und der Wirkung der Bounce-Bahn $S[q_b]$ ein,

$$\Delta S = S[q_b] - S[q_0]. \quad (2.116)$$

Diese Größe muss also bekannt sein, um Tunnelraten berechnen zu können. Mit den Feldgrößen ψ und $\bar{\psi}$ lässt sich die Wirkung über die Lagrangedichte angeben [13]:

$$\begin{aligned} S &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \left\{ \bar{\psi}\dot{\psi} - \bar{\psi}\mathcal{H}\psi \right\} \\ &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \left[\bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \frac{d}{d\tau} \psi(\mathbf{r}, \tau) + \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \Delta_{\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}, \tau) - 4\pi a \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \psi(\mathbf{r}, \tau) \right. \\ &\quad \left. + \int \frac{\bar{\psi}(\mathbf{r}', \tau) \psi(\mathbf{r}', \tau) \bar{\psi}(\mathbf{r}, \tau) \psi(\mathbf{r}, \tau)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \right] \end{aligned} \quad (2.117)$$

Damit gilt für die beiden Wirkungen $S[q_0]$ und $S[q_b]$

$$\begin{aligned}
 S[q_0] &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \left\{ \bar{\psi}_0 \dot{\psi}_0 - \bar{\psi}_0 \mathcal{H} \psi_0 \right\} \\
 &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \left\{ \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_0 \dot{\psi}_0 - \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_0 \mathcal{H} \psi_0 \right\}
 \end{aligned} \tag{2.118}$$

$$\begin{aligned}
 S[q_b] &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \left\{ \bar{\psi}_b \dot{\psi}_b - \bar{\psi}_b \mathcal{H} \psi_b \right\} \\
 &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \left\{ \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b \dot{\psi}_b - \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b \mathcal{H} \psi_b \right\}
 \end{aligned} \tag{2.119}$$

und deren Differenz

$$\Delta S = \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \left\{ \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b \dot{\psi}_b - \bar{\psi}_0 \dot{\psi}_0 - \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b \mathcal{H} \psi_b + \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_0 \mathcal{H} \psi_0 \right\}. \tag{2.120}$$

Da $\int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b \mathcal{H} \psi_b = \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_0 \mathcal{H} \psi_0$ und $\dot{\psi}_0 = 0$ ergibt sich für ΔS der einfache Ausdruck

$$\Delta S = \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b \frac{d}{d\tau} \psi_b. \tag{2.121}$$

Auf Grund der zeitlichen Symmetrie der Wellenfunktionen $\bar{\psi}(\tau) = \psi(\tau)$ lässt sich dieser Ausdruck noch so umschreiben, dass die Integration über τ nur für die halbe Periode

durchgeführt werden muss:

$$\begin{aligned}
 \Delta S &= \int_{-\hbar\beta/2}^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b(\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_b(\tau) \\
 &= \int_0^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b(\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_b(\tau) + \int_{-\hbar\beta/2}^0 d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b(\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_b(\tau) \\
 &= \int_0^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b(\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_b(\tau) - \int_0^{-\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b(\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_b(\tau) \\
 &= \int_0^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b(\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_b(\tau) - \int_0^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b(-\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_b(-\tau) \\
 &= \int_0^{\hbar\beta/2} d\tau \int d\mathbf{r} \bar{\psi}_b(\tau) \frac{d}{d\tau} \psi_b(\tau) - \psi_b(\tau) \frac{d}{d\tau} \bar{\psi}_b(\tau) \tag{2.122}
 \end{aligned}$$

3.1 Split-Operator-Methode

Ausgehend von einem Zustand $|\psi, \tau\rangle$ zu einem Zeitpunkt τ kann man mit dem Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(\tau_1, \tau)$ den Zustand $|\psi, \tau_1\rangle$ zu einem späteren Zeitpunkt τ_1 erhalten. Mit $\tau_1 - \tau = \Delta\tau$ gilt:

$$\begin{aligned} |\psi, \tau_1\rangle &= \hat{U}(\tau_1, \tau)|\psi, \tau\rangle \\ &= e^{(-\hat{H}+\mu)\Delta\tau}|\psi, \tau\rangle \\ &= e^{(-\hat{T}-\hat{V}+\mu)\Delta\tau}|\psi, \tau\rangle \end{aligned} \quad (3.7)$$

Da \hat{T} und \hat{V} nicht vertauschen gilt:

$$e^{-(\hat{T}+\hat{V})\Delta\tau} \neq e^{-\hat{T}\Delta\tau}e^{-\hat{V}\Delta\tau}$$

Eine solche Faktorisierung des Operators bietet sich allerdings an, da sich die Anwendung des Operators dann auf Multiplikationen mit, im Allgemeinen, komplexen Zahlen reduziert. Für kleine Zeitabstände $\Delta\tau$ lässt sich der Zeitentwicklungsoperator mit Hilfe der Baker-Hausdorff-Formel in solche Faktoren zerlegen. Es gilt dann näherungsweise:

$$e^{-(\hat{T}+\hat{V})\Delta\tau} \approx e^{-\frac{1}{2}\hat{V}\Delta\tau}e^{-\hat{T}\Delta\tau}e^{-\frac{1}{2}\hat{V}\Delta\tau},$$

wobei in dieser Näherung der Fehler von der Ordnung $O(\Delta\tau^3)$ ist. Bei der Anwendung des faktorisierten Operators wird ausgenutzt, dass der Impulsoperator eine Eigenbasis im Impulsraum besitzt und sich dadurch die Wirkung des Anteils $e^{-\hat{T}\Delta\tau}$ leicht im Impulsraum berechnen lässt. Die Anteile $e^{-\frac{1}{2}\hat{V}\Delta\tau}$ werden im Ortsraum berechnet. Um nun $e^{-\frac{1}{2}\hat{V}\Delta\tau}e^{-\hat{T}\Delta\tau}e^{(-\frac{1}{2}\hat{V}+\mu)\Delta\tau}\psi_\tau$ und $e^{\frac{1}{2}\hat{V}\Delta\tau}e^{\hat{T}\Delta\tau}e^{(\frac{1}{2}\hat{V}-\mu)\Delta\tau}\bar{\psi}_\tau$ explizit auf dem Gitter zu berechnen wird folgendes Schema verwendet:

1. Berechnung des Potentials $V = V(\psi_\tau, \bar{\psi}_\tau, \tau)$
2. Multiplikation von ψ_τ mit $e^{-\frac{1}{2}V\Delta\tau}$ und entsprechend $\bar{\psi}_\tau$ mit $e^{\frac{1}{2}V\Delta\tau}$
3. Fouriertransformation der Ergebnisse in den Impulsraum
4. Multiplikation mit $e^{-k^2\Delta\tau}$, bzw. $e^{k^2\Delta\tau}$
5. Rücktransformation der Ergebnisse in den Ortsraum
6. Berechnung von V , wobei die Ergebnisse aus Schritt 5 verwendet werden
7. Multiplikation mit $e^{(-\frac{1}{2}V+\mu)\Delta\tau}$, bzw. $e^{(\frac{1}{2}V-\mu)\Delta\tau}$

3.1.1 Berechnung der Wechselwirkungspotentiale

Der potentielle Anteil des Hamiltonians der GPE (2.1) lautet:

$$V(\mathbf{r}) = \underbrace{8\pi a |\psi(\mathbf{r}, t)|^2}_{V_{\text{sr}}} - 2 \underbrace{\int d^3\mathbf{r}' \frac{|\psi(\mathbf{r}', t)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}_{V_{\text{lr}}} \quad (3.8)$$

Da die Simulation auf einem Gitter durchgeführt wird, gibt es keine Funktionen, die verwendet werden können, sondern nur die Sätze der Gitterpunkte ψ_τ , bzw. $\bar{\psi}_\tau$. Ausdrücke wie $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ werden Gitterpunkt für Gitterpunkt berechnet, so dass auch das Potential zu jedem Zeitpunkt τ nur als Satz $\mathbf{V}_\tau = (V_{\tau,1}, \dots, V_{\tau,n-1})$ diskreter Werte vorliegt,

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi_\tau \bar{\psi}_\tau = (\psi_{\tau,1} \bar{\psi}_{\tau,1}, \dots, \psi_{\tau,n} \bar{\psi}_{\tau,n}). \quad (3.9)$$

Die einzelnen Schritte zur Berechnung und Diskretisierung des Potentials werde im folgenden erläutert.

V_{sr} kann ohne Probleme direkt zu jedem Zeitpunkt τ berechnet werden:

$$\begin{aligned} V_{\text{sr}}(\mathbf{r}) &\rightarrow V_{\text{sr},i} = V_{\text{sr}}(i\Delta r) \\ &= 8\pi a \psi_{\tau,i} \bar{\psi}_{\tau,i} \quad i = 1, \dots, n \end{aligned} \quad (3.10)$$

Da es sich bei dem Term V_{lr} um ein Faltungsintegral handelt, kann zur Berechnung des Integrals das Faltungstheorem verwendet werden, wonach für eine Faltung

$$f(r) * g(r) = \int dr' f(r') g(r - r') \quad (3.11)$$

gilt

$$\mathcal{F}\{f(r) * g(r)\} = \mathcal{F}\{f(r)\} \mathcal{F}\{g(r)\}, \quad (3.12)$$

wobei \mathcal{F} die Fouriertransformation bezeichnet. Es gilt also für das Integral V_{lr}

$$\int d^3\mathbf{r}' \frac{|\psi(\mathbf{r}', t)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \mathcal{F}^{-1} \left\{ \mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r}, t)|^2\} \mathcal{F}\left\{\frac{1}{|\mathbf{r}|}\right\} \right\}. \quad (3.13)$$

Berechnung von $\mathcal{F}\left\{\frac{1}{|\mathbf{r}|}\right\}$

Da das Potential radialsymmetrisch ist, wird auch eine radial symmetrische Wellenfunktion angenommen. Durch diese Annahme vereinfacht sich die Berechnung der Fourier-

transformationen. Die Transformation $\mathcal{F} \left\{ \frac{1}{|\mathbf{r}|} \right\}$ wird analytisch berechnet:

$$\begin{aligned}
 F(k) &= \mathcal{F} \left\{ \frac{1}{|\mathbf{r}|} \right\} = \mathcal{F} \left\{ \frac{1}{r} \right\} \\
 &= \int \frac{1}{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \\
 &= 2\pi \int_0^\infty \int_0^\pi r \sin(\vartheta) e^{ikr \cos(\vartheta)} d\vartheta dr \\
 u = \cos(\vartheta) &\rightarrow = 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 r e^{ikru} du dr \\
 &= \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty \sin(kr) dr
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Das divergente Integral 3.14 lässt sich komplett berechnen, indem die Regularisierung $\frac{1}{r} \rightarrow \frac{e^{-\epsilon r}}{r}$ verwendet wird. Durch die Regularisierung ergibt sich:

$$F(k) = \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty e^{-\epsilon r} \sin(kr) dr \tag{3.15}$$

$$= \frac{4\pi}{k} \frac{1}{k^2 + \epsilon^2} [e^{-\epsilon r} (-\epsilon \sin(kr) - k \cos(kr))]_0^\infty \tag{3.16}$$

Für $r \rightarrow \infty$ verschwinden die Sinus und Kosinus Terme auf Grund der fallenden Exponentialfunktion und man erhält im Limes $\epsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned}
 F(k) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{4\pi}{k} \frac{k}{k^2 + \epsilon^2} \\
 &= \frac{4\pi}{k^2}.
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

Berechnung von $\mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r}, t)|^2\}$

Die Transformation von $\mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r}, t)|^2\}$ kann nicht analytisch für jedes auf dem Gitter gegebene ψ_r berechnet werden, sondern muss jeweils einzeln berechnet werden.

$$\begin{aligned}
 \tilde{F}(k) &= \mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r}, t)|^2\} = \int |\psi(r, t)|^2 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \\
 &= 2\pi \int_0^\infty \int_0^\pi |\psi(r, t)|^2 e^{ikr \cos(\vartheta)} r^2 \sin(\vartheta) d\vartheta dr \\
 &= \frac{4\pi}{k} \int_0^\infty r |\psi(r, t)|^2 \sin(kr) dr
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

Rücktransformation $\mathcal{F}^{-1}\left\{\mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r}, t)|^2\}\mathcal{F}\left\{\frac{1}{|\mathbf{r}|}\right\}\right\}$

Mit den beiden Transformationen 3.17 und 3.18 ergibt sich für die Rücktransformation:

$$\begin{aligned}
 V_r(\mathbf{r}) &= \mathcal{F}^{-1}\left\{\mathcal{F}\{|\psi(\mathbf{r}, t)|^2\}\mathcal{F}\left\{\frac{1}{|\mathbf{r}|}\right\}\right\} \\
 &= \mathcal{F}^{-1}\left\{\tilde{F}(k) \cdot F(k)\right\} \\
 &= \frac{1}{8\pi^3} \int F(k) \tilde{F}(k) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \\
 &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \int_0^\pi F(k) \tilde{F}(k) e^{ikr \cos(\vartheta)} k^2 \sin(\vartheta) d\vartheta dk \\
 &= \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty F(k) \tilde{F}(k) k \sin(kr) dk \\
 &= \frac{2}{\pi r} \int_0^\infty \frac{4\pi}{k^2} \left(\int_0^\infty r |\psi(r, t)|^2 \sin(kr) dr \right) \sin(kr) dk
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

Für die Auswertung der Integrale auf dem Gitter gehen diese in diskrete Summen über und die kontinuierlichen Variablen k und r gehen ebenfalls in diskrete Werte über

$$\begin{aligned}
 r &\rightarrow j\Delta r \\
 k &\rightarrow i\Delta k \qquad i, j = 1, \dots, n,
 \end{aligned}$$

wobei zwischen dem Gitterabstand Δr im Ortsraum und dem Gitterabstand Δk im Impulsraum die Beziehung

$$\Delta k = \frac{\pi}{\Delta r \cdot n} \tag{3.20}$$

gilt. Der Ausdruck 3.19 für das Potential $V_{\text{lr}}(\mathbf{r})$ geht damit dann ebenfalls in diskrete Werte über $V_{\text{lr}}(\mathbf{r}) \rightarrow V_{\text{lr},l} = V_{\text{lr}}(l\Delta r), l = 1, \dots, n - 1$.

$$\begin{aligned}
 V_{\text{lr},l} &= \frac{2}{\pi l \Delta r} \sum_{i=1}^n \frac{4\pi}{(i\Delta k)^2} \left(\sum_{j=1}^n j\Delta r \cdot \psi_{\tau,j} \bar{\psi}_{\tau,j} \sin(i\Delta k \cdot j\Delta r) \Delta r \right) \sin(i\Delta k \cdot l\Delta r) \Delta k \\
 3.20 \rightarrow &= \frac{2}{nl\Delta r} \sum_{i=1}^n \frac{4\pi}{(i\Delta k)^2} \left(\sum_{j=1}^n j\Delta r \cdot \psi_{\tau,j} \bar{\psi}_{\tau,j} \sin\left(ij\frac{\pi}{n}\right) \right) \sin\left(il\frac{\pi}{n}\right) \\
 &= \frac{1}{l\Delta r} \underbrace{\left\{ \underbrace{\sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{4\pi}{(i\Delta k)^2} \left(\underbrace{\sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{j=1}^{n-1} j\Delta r \cdot \psi_{\tau,j} \bar{\psi}_{\tau,j} \sin\left(ij\frac{\pi}{n}\right)}_{\text{FFT 1}} \right)}_{\text{FFT 2}} \sin\left(il\frac{\pi}{n}\right) \right\}}_{\text{FFT 2}} \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

Im letzten Schritt gehen die Summen nur bis $n - 1$, da für $i, j = n$ die Sinusterme verschwinden, $\sin(i\pi) = 0$ und deshalb eine Summation bis $n - 1$ ausreichend ist, allerdings liegt dann auch das Potential nur bis zu einem Wert von $r = (n - 1) \cdot \Delta r$ vor. Dies hat zur Folge, dass für die weiteren Rechnungen zu jedem Zeitpunkt τ jeweils der letzte Gitterpunkt $\psi_{\tau,n}, \bar{\psi}_{\tau,n}$ nicht mehr betrachtet wird. Die Sinus-Fourierreihen FFT 1 und FFT 2 werden mit Hilfe einer FFT-Routine¹ berechnet. Zusammenfassend wird das Potential $V_{\text{lr},l}$ also berechnet, indem zunächst der Satz $j\Delta r \cdot \psi_{\tau,j} \bar{\psi}_{\tau,j}, j = 1, \dots, n - 1$ mit der FFT Routine transformiert und anschließend mit $\frac{4\pi}{(i\Delta k)^2}, i = 1, \dots, n - 1$ multipliziert wird. Das Ergebnis wird daraufhin rücktransformiert und noch durch $l\Delta r$ geteilt. Die verwendete FFT-Routine hat noch den Vorteil, dass sie mehrere Sequenzen auf einmal transformieren kann, d.h. die Potentiale $V_{\text{lr}}(\mathbf{r})$ können für alle Zeitpunkt τ auf einmal berechnet werden. Das gesamte Potential $V(\mathbf{r}) = V_{\text{sr}}(\mathbf{r}) - 2V_{\text{lr}}(\mathbf{r})$ zu einem Zeitpunkt τ erhält man nun durch punktweise Addition:

$$\begin{aligned}
 V(\mathbf{r}) \rightarrow \tilde{V}_i &= \tilde{V}(i\Delta r) \\
 &= V_{\text{sr},i} - 2V_{\text{lr},i} \quad i = 1, \dots, n \quad (3.22)
 \end{aligned}$$

Damit liegt das Potential diskret vor

$$\tilde{\mathbf{V}}_{\tau} = (\tilde{V}_{\tau,1}, \dots, \tilde{V}_{\tau,n-1}). \quad (3.23)$$

Der letzte Schritt in der Berechnung des Potentials ist die Berücksichtigung eines Offsets c . Dieser Offset ist damit begründet, dass das eigentliche Potential

$$V(\mathbf{r}) = 8\pi a |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 - 2 \int d^3\mathbf{r}' \frac{|\psi(\mathbf{r}', t)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

¹The NAG Fortran Library, Mark 21; Routine C06RAF

für $r \rightarrow \infty$ in ein $-\frac{2}{r}$ -Verlauf übergeht. Da das Potential aber nur bis zu einem radialen Abstand $r = (n - 1) \cdot \Delta r$ berechnet wird, muss der Offset hinzugefügt werden um den asymptotischen Verlauf zu garantieren. Der Offset c ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned} V((n - 1) \cdot \Delta r) + c &\stackrel{!}{=} -\frac{2}{(n - 1) \cdot \Delta r} \\ \Rightarrow c &= -\frac{2}{(n - 1) \cdot \Delta r} - V((n - 1) \cdot \Delta r) \end{aligned} \quad (3.24)$$

Schließlich ergibt sich dann das Potential zu

$$\mathbf{V}_\tau = (V_{\tau,1}, \dots, V_{\tau,n-1}) \quad (3.25)$$

$$= (\tilde{V}_{\tau,1} + c, \dots, \tilde{V}_{\tau,n-1} + c) \quad (3.26)$$

3.1.2 Anwendung von $e^{-\frac{1}{2}V\Delta\tau}$, bzw. $e^{\frac{1}{2}V\Delta\tau}$

Mit den berechneten Potentials \mathbf{V}_τ kann nun für jeden Zeitpunkt τ , jeweils für ψ_τ und $\bar{\psi}_\tau$ der erste Teil des entsprechenden Zeitentwicklungsoperators angewandt werden

$$e^{-\frac{1}{2}V_{\tau,i}\Delta\tau}\psi_{\tau,i} =: \Psi_{\tau,i} \quad (3.27)$$

$$e^{\frac{1}{2}V_{\tau,i}\Delta\tau}\bar{\psi}_{\tau,i} =: \bar{\Psi}_{\tau,i} \quad i = 1, \dots, n - 1, \quad (3.28)$$

woraus sich zu jedem Zeitpunkt τ zwei neue Sätze ergeben

$$\Psi_\tau = (\Psi_{\tau,1}, \dots, \Psi_{\tau,n-1}) \quad (3.29)$$

$$\bar{\Psi}_\tau = (\bar{\Psi}_{\tau,1}, \dots, \bar{\Psi}_{\tau,n-1}) \quad (3.30)$$

Auf Grund der Vorgehensweise bei der Berechnung des Potentials wird der Operator nur bis zum Gitterpunkt $i = n - 1$ angewandt, da für $i = n$ kein Potentialwert vorliegt.

3.1.3 Anwendung von $e^{-T\Delta\tau}$, bzw. $e^{T\Delta\tau}$

Um die kinetischen Teile

$$e^{-T\Delta\tau} = e^{\Delta_r\Delta\tau} \quad (3.31)$$

$$e^{T\Delta\tau} = e^{-\Delta_r\Delta\tau} \quad (3.32)$$

der Zeitentwicklungsoperatoren anzuwenden wird ausgenutzt, dass der Laplace-Operator Δ_r eine Eigenbasis im Impulsraum hat und daher die explizite Berechnung der Ableitungen umgangen werden kann, indem der kinetische Teil im Impulsraum berechnet wird.

$$e^{\Delta_r\Delta\tau}\psi(\mathbf{r}) \Leftrightarrow \mathcal{F}^{-1} \left\{ e^{-k^2\Delta\tau}\psi(\mathbf{k}) \right\} \quad (3.33)$$

$$e^{-\Delta_r\Delta\tau}\bar{\psi}(\mathbf{r}) \Leftrightarrow \mathcal{F}^{-1} \left\{ e^{k^2\Delta\tau}\bar{\psi}(\mathbf{k}) \right\} \quad (3.34)$$

Zunächst werden also die Sätze Ψ_τ und $\bar{\Psi}_\tau$ aus dem vorherigen Schritt für alle τ mit Hilfe der FFT-Routine in den Impulsraum transformiert

$$\mathcal{F}\{\Psi_{\tau,i}\} = \left(\sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{j=1}^{n-1} j\Delta r \cdot \Psi_{\tau,j} \sin\left(ij\frac{\pi}{n}\right) \right) \quad (3.35)$$

$$\mathcal{F}\{\bar{\Psi}_{\tau,i}\} = \left(\sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{j=1}^{n-1} j\Delta r \cdot \bar{\Psi}_{\tau,j} \sin\left(ij\frac{\pi}{n}\right) \right), \quad i = 1, \dots, n-1 \quad (3.36)$$

anschließend mit $e^{-(i\Delta k)^2\Delta\tau}$, bzw. $e^{(i\Delta k)^2\Delta\tau}$ multipliziert, das Ergebnis in den Ortsraum zurück transformiert und schließlich wieder durch $l\Delta r$ geteilt:

$$\phi_{\tau,l} := \frac{1}{l\Delta r} \underbrace{\left\{ \underbrace{\sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{i=1}^{n-1} e^{-(i\Delta k)^2\Delta\tau} \left(\underbrace{\sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{j=1}^{n-1} j\Delta r \cdot \Psi_{\tau,j} \sin\left(ij\frac{\pi}{n}\right)}_{\text{FFT 1}} \right) \sin\left(il\frac{\pi}{n}\right)}_{\text{FFT 2}} \right\}}_{\text{FFT 2}} \quad (3.37)$$

$$\bar{\phi}_{\tau,l} := \frac{1}{l\Delta r} \underbrace{\left\{ \underbrace{\sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{i=1}^{n-1} e^{(i\Delta k)^2\Delta\tau} \left(\underbrace{\sqrt{\frac{2}{n}} \sum_{j=1}^{n-1} j\Delta r \cdot \bar{\Psi}_{\tau,j} \sin\left(ij\frac{\pi}{n}\right)}_{\text{FFT 1}} \right) \sin\left(il\frac{\pi}{n}\right)}_{\text{FFT 2}} \right\}}_{\text{FFT 2}} \quad (3.38)$$

Dadurch ergeben sich wieder für alle τ jeweils zwei Sätze von Gitterpunkten:

$$\phi_\tau = (\phi_{\tau,1}, \dots, \phi_{\tau,n-1}) \quad (3.39)$$

$$\bar{\phi}_\tau = (\bar{\phi}_{\tau,1}, \dots, \bar{\phi}_{\tau,n-1}) \quad (3.40)$$

Auf Grund der verwendeten Sinus-Fourierreihen werden wieder nur die Gitterpunkte bis $i = n - 1$ berechnet, da für $i = n$ die Sinusterme verschwinden.

3.1.4 Anwendung des letzten Terms

Die ersten beiden Terme der Zeitentwicklungsoperatoren $e^{-\frac{1}{2}V\Delta\tau}$, $e^{\frac{1}{2}V\Delta\tau}$ und $e^{-\hat{T}\Delta\tau}$, $e^{\hat{T}\Delta\tau}$ wurden schon auf das Gitter angewandt, es verbleibt jeweils der letzte Term $e^{(-\frac{1}{2}V+\mu)\Delta\tau}$, bzw. $e^{(\frac{1}{2}V-\mu)\Delta\tau}$. Die Vorgehensweise ist analog zu der im Abschnitt 3.1.1 und 3.1.2: Zuerst werden jeweils mit den Sätzen ϕ_τ und $\bar{\phi}_\tau$ zu jedem Zeitpunkt τ die Potentiale \mathbf{V}_τ berechnet und diese dann verwendet um den letzten Teil der Zeitentwicklungsoperatoren anzuwenden

$$\psi_{\tau+1,i} = e^{(-\frac{1}{2}V_{\tau,i}+\mu)\Delta\tau} \phi_{\tau,i} \quad (3.41)$$

$$\bar{\psi}_{\tau+1,i} = e^{(\frac{1}{2}V_{\tau,i}-\mu)\Delta\tau} \bar{\phi}_{\tau,i}, \quad i = 1, \dots, n-1. \quad (3.42)$$

3.2 Anschlussbedingungen

Die Startwellenfunktionen, die zur Initialisierung des Gitters benötigt werden, sind die Lösungen eines TDVP, das als Ansatz eine Superposition von 3 Gaußfunktionen verwendet [14]. Da dieses aber nur ein Näherungsverfahren zur Lösung der GPE ist, sind auch die daraus resultierenden Wellenfunktionen nicht die exakten Lösungen. Die Anwendung des Zeitenwicklungsoperator $\hat{U}(\tau, \tau_0)$ auf eine Wellenfunktion zum Zeitpunkt τ_0 liefert daher im Allgemeinen nicht die selbe Wellenfunktion, wie die aus der analytischen Rechnung stammende (siehe Abb.3.2).

$$\hat{U}(\tau, \tau_0)\psi_{\tau_0, \text{Start}} = \tilde{\psi}_\tau \neq \psi_{\tau, \text{Start}} \quad (3.43)$$

Um eine stetige Lösung zu erhalten muss aber die Gleichheit gelten:

$$\hat{U}(\tau, \tau_0)\psi_{\tau_0} - \psi_\tau \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.44)$$

Da das Potential $V = V(\psi_{\tau_0}, \bar{\psi}_{\tau_0})$ von den Wellenfunktionen $\psi_{\tau_0}, \bar{\psi}_{\tau_0}$ zum Zeitpunkt

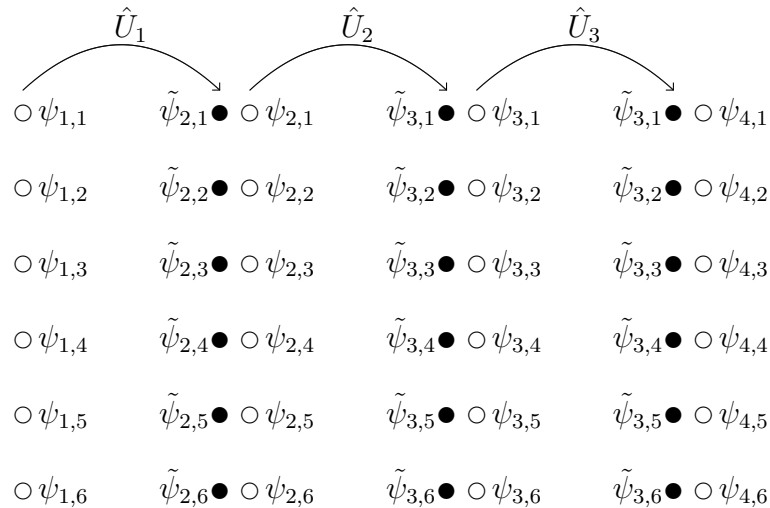


Abbildung 3.2: Die Anwendung von Zeitentwicklungsoperatoren auf Startwellenfunktionen (leere Kreise) liefert Werte (ausgefüllte Kreise), die nicht mit den Startwerten am darauf folgenden Zeitpunkt übereinstimmen. Für jeden Zeitpunkt wird der entsprechende Operator berechnet und einmal angewandt.

τ_0 abhängt, kann man Gleichung (3.44) als eine Funktion auffassen, deren Nullstelle gesucht ist:

$$\tilde{f}(\psi_{\tau_0}, \bar{\psi}_{\tau_0}) = e^{-(T+V(\psi_{\tau_0}, \bar{\psi}_{\tau_0}))\Delta\tau} \psi_{\tau_0} - \psi_\tau \quad (3.45)$$

Wendet man zu jedem Zeitpunkt den entsprechenden Zeitentwicklungsoperator auf die Wellenfunktionen an, so ergibt sich eine mehrdimensionale Funktion $\tilde{\mathbf{f}}$, deren einzelne Komponenten \tilde{f}_i allerdings nicht von allen Gitterpunkten abhängen, sondern nur von den Gitterpunkten, die zum entsprechenden Zeitpunkt gehören. Die jeweiligen Operatoren werden nur einmal auf die dazugehörigen Wellenfunktionen angewandt. Die periodischen Randbedingungen (2.112,2.113) liefern noch zwei Bedingungen an das System, die erfüllt werden müssen:

$$\boldsymbol{\psi}_1 = \bar{\boldsymbol{\psi}}_1 \quad (3.46)$$

$$\boldsymbol{\psi}_m = \bar{\boldsymbol{\psi}}_m \quad (3.47)$$

Mit der Bedingung (3.47) kann das System noch vereinfacht werden. Einerseits gelten die Forderungen

$$\hat{U}_{m-1}\boldsymbol{\psi}_{m-1} = \boldsymbol{\psi}_m \quad \text{und} \quad \hat{U}_{m-1}\bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1} = \bar{\boldsymbol{\psi}}_m \quad (3.48)$$

andererseits gilt aber auch Bedingung (3.47). Beide Bedingungen können also zu einer zusammen gefasst werden:

$$\hat{U}_{m-1}\boldsymbol{\psi}_{m-1} = \hat{U}_{m-1}\bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1} \quad (3.49)$$

Weiterhin wird noch berücksichtigt, dass auf Grund der verwendeten FFT-Routine für die letzten Punkte $\boldsymbol{\psi}_{\tau,n}$ und $\bar{\boldsymbol{\psi}}_{\tau,n}$ zu jedem Zeitpunkt τ gilt, dass

$$\boldsymbol{\psi}_{\tau,n} = 0 \quad (3.50)$$

$$\bar{\boldsymbol{\psi}}_{\tau,n} = 0. \quad (3.51)$$

Dies hat zur Folge, dass jeder Satz an Gitterpunkten $\boldsymbol{\psi}_\tau, \bar{\boldsymbol{\psi}}_\tau$ nur noch aus jeweils $n - 1$ Werten besteht. Damit ergibt sich $\tilde{\boldsymbol{f}}$ zu:

$$\begin{aligned}
 \tilde{f}_1(\boldsymbol{\psi}_1) &= \hat{U}_1(\boldsymbol{\psi}_1)\psi_{1,1} - \psi_{2,1} \\
 \tilde{f}_2(\boldsymbol{\psi}_1) &= \hat{U}_1(\boldsymbol{\psi}_1)\psi_{1,2} - \psi_{2,2} \\
 &\vdots \\
 \tilde{f}_{n-1}(\boldsymbol{\psi}_1) &= \hat{U}_1(\boldsymbol{\psi}_1)\psi_{1,n-1} - \psi_{2,n-1} \\
 \tilde{f}_n(\boldsymbol{\psi}_1) &= \hat{U}_1(\boldsymbol{\psi}_1)\psi_{1,1} - \bar{\psi}_{2,1} \\
 &\vdots \\
 \tilde{f}_{2(n-1)}(\boldsymbol{\psi}_1) &= \hat{U}_1(\boldsymbol{\psi}_1)\psi_{1,n-1} - \bar{\psi}_{2,n-1} \\
 \tilde{f}_{2(n-1)+1}(\boldsymbol{\psi}_2, \bar{\boldsymbol{\psi}}_2) &= \hat{U}_2(\boldsymbol{\psi}_2, \bar{\boldsymbol{\psi}}_2)\psi_{2,1} - \psi_{3,1} \\
 &\vdots \\
 \tilde{f}_{2(n-1)\cdot(m-2)}(\boldsymbol{\psi}_{m-2}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-2}) &= \hat{U}_{m-2}(\boldsymbol{\psi}_{m-2}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-2})\bar{\psi}_{m-2,n-1} - \bar{\psi}_{m-1,n-1} \\
 \tilde{f}_{2(n-1)\cdot(m-2)+1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1}) &= \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1})\psi_{m-1,1} \\
 &\quad - \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1})\bar{\psi}_{m-1,1} \\
 &\vdots \\
 \tilde{f}_{2(n-1)\cdot(m-2)+n-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1}) &= \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1})\psi_{m-1,n-1} \\
 &\quad - \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1})\bar{\psi}_{m-1,n-1}
 \end{aligned}$$

Die Funktion $\tilde{\boldsymbol{f}}$ ist noch nicht exakt die Funktion, deren Nullstelle gesucht ist, da bisher die Norm- und Energieerhaltung, sowie der exakte Wert von $\Delta\tau$ und μ noch nicht in die Diskussion eingegangen sind.

3.2.1 Reduktion der Variablenanzahl

Da bei der Anwendung des Zeitentwicklungsoperators $\psi(\tau, n)$ auf Grund der verwendeten FFT-Routine die letzten Gitterpunkt $\psi_{\tau,n}$ und $\bar{\psi}_{\tau,n}$ immer Der Zeitentwicklungsoperator erhält die Norm und Energie. Geht man von einer normierten Wellenfunktion bei einer gegebenen Meanfieldenergie $E_{\text{mf,Soll}}$ aus und propagiert um einen Zeitschritt, so ist auch die propagierte Wellenfunktion normiert bei gleicher Energie. Wenn alle Anschlussbedingungen erfüllt sind und die Wellenfunktion am ersten Zeitpunkt normiert ist, so bleibt die Meanfieldenergie während des Bounce erhalten und zu jedem Zeitpunkt liegt eine normierte Wellenfunktion vor. Um sicher zu stellen, dass Norm und Meanfieldenergie erhalten bleiben wird das System um zwei Variablen reduziert, $\psi_{1,1}$ und $\psi_{1,2}$. In das Newtonverfahren gehen diese beiden Variablen nicht mehr ein, sondern nur der reduzierte Satz $\tilde{\boldsymbol{\psi}}_1$ mit $n - 3$ Variablen, der durch die Normierung von $\boldsymbol{\psi}_1$ auf $\psi_{1,1}$ gegeben

ist,

$$\tilde{\psi}_{1,i} = \frac{\psi_{1,i+2}}{\psi_{1,1}}, \quad i = 1, \dots, n-3. \quad (3.52)$$

Um wieder auf den vollen Satz $\boldsymbol{\psi}_1$ mit $n-1$ Variablen zu gelangen, den man intern während eines Newtonschritts für die Berechnung und Anwendung des Operators $\hat{U}_1(\boldsymbol{\psi}_1)$ benötigt, muss man $\psi_{1,1}$, $\psi_{1,2}$ unter der Bedingung der Normierung von $\boldsymbol{\psi}_1$ auf 1 und einer vorgegebenen Meanfieldenergie aus $\tilde{\boldsymbol{\psi}}_1$ wieder zurück gewinnen. Über die Normierung wird $\psi_{1,1}$ bestimmt und $\psi_{1,2}$ dient dazu, die vorgegebene Meanfieldenergie $E_{\text{mf,Soll}}$ zu erreichen. Um auf den vollen Satz $\boldsymbol{\psi}_1$ zu kommen wird zunächst ein $\boldsymbol{\phi}$ der Dimension $n-1$ mit

$$\boldsymbol{\phi} := (\phi_1, \phi_2, \tilde{\psi}_1, \dots, \tilde{\psi}_{n-3}) \quad (3.53)$$

angesetzt, aus dem sich das gesuchte $\boldsymbol{\psi}_1$ ergibt. Folgendes Schema wird verwendet:

1. Auf Grund der Normierung von $\tilde{\boldsymbol{\psi}}_1$ auf $\psi_{1,1}$ gilt immer: $\phi_1 = 1$
2. $\boldsymbol{\phi}$ wird in Abhängigkeit von ϕ_2 auf 1 normiert:

$$N(\phi_2) = \langle \boldsymbol{\phi}(\phi_2) | \boldsymbol{\phi}(\phi_2) \rangle \stackrel{!}{=} 1 \quad (3.54)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{N(\phi_2)}} \boldsymbol{\phi}(\phi_2) = \tilde{\boldsymbol{\phi}}(\phi_2) \quad (3.55)$$

$\tilde{\boldsymbol{\phi}}(\phi_2)$ ist also auf 1 normiert.

3. Berechnung der Meanfieldenergie nach Gleichung (2.111) in Abhängigkeit von ϕ_2 :

$$\begin{aligned} E_{\text{mf}} &= E_{\text{mf}}(\phi_2) \\ &= -\langle \tilde{\boldsymbol{\phi}}(\phi_2) | \Delta_{\mathbf{r}} | \tilde{\boldsymbol{\phi}}(\phi_2) \rangle + \frac{1}{2} \langle \tilde{\boldsymbol{\phi}}(\phi_2) | V_{\text{c}} + V_{\text{lr}} | \tilde{\boldsymbol{\phi}}(\phi_2) \rangle \end{aligned} \quad (3.56)$$

4. Lösen der Gleichung $E_{\text{mf,Soll}} - E_{\text{mf}}(\phi_2) = 0$ mittels einer eindimensionalen Nullstellensuche \Rightarrow Nullstelle bei $\phi_{2,0}$
5. Einsetzen von $\phi_{2,0}$ in $\boldsymbol{\phi}(\phi_2)$: $\phi_2 = \phi_{2,0}$
6. Normieren von $\boldsymbol{\phi}(\phi_{2,0})$ auf 1 $\Rightarrow \frac{1}{\sqrt{N(\phi_{2,0})}} \boldsymbol{\phi}(\phi_{2,0}) = \boldsymbol{\psi}_1$

Damit hat man nun wieder den vollen, normierten Satz an Gitterpunkten $\boldsymbol{\psi}_1$ bei der vorgegebenen Meanfieldenergie $E_{\text{mf,Soll}}$. Für das Newtonverfahren ergibt sich also der Vektor \boldsymbol{x} der Dimension $2(n-1)(m-2) + n-1$ zu:

$$\boldsymbol{x} = (\tilde{\psi}_{1,1}, \dots, \tilde{\psi}_{1,n-3}, \psi_{2,1}, \dots, \psi_{2,n-1}, \bar{\psi}_{2,1}, \dots, \bar{\psi}_{2,n-1}, \psi_{3,1}, \dots, \bar{\psi}_{m-1,n-1}) \quad (3.57)$$

Wie im Kapitel 3.2 schon erwähnt, ist die dort aufgestellte Funktion $\tilde{\mathbf{f}}$ noch nicht exakt die, deren Nullstelle berechnet wird. Die erste von zwei Modifizierung ergibt sich durch die eben diskutierte Reduktion von $\boldsymbol{\psi}_1$ auf $\tilde{\boldsymbol{\psi}}_1$. Die zweite Modifizierung ergibt sich nun noch aus der Reduktion der Dimension von $\tilde{\mathbf{f}}$. Da sich die Dimension von \boldsymbol{x} im Vergleich zu Kapitel 3.2 um zwei verringert hat, muss auch $\tilde{\mathbf{f}}$ um zwei Dimensionen verringert werden, da das Newtonverfahren sonst nicht anwendbar ist. Es werden allerdings nicht die beiden zu $\psi_{1,1}$ und $\psi_{1,2}$ gehörigen Gleichungen

$$\tilde{f}_1(\boldsymbol{\psi}_1) = \hat{U}_1(\boldsymbol{\psi}_1)\psi_{1,1} - \psi_{2,1} \quad (3.58)$$

$$\tilde{f}_2(\boldsymbol{\psi}_1) = \hat{U}_1(\boldsymbol{\psi}_1)\psi_{1,2} - \psi_{2,2} \quad (3.59)$$

gestrichen. Werden diese Gleichungen gestrichen, so werden die Anschlussbedingungen für $\psi_{1,1}$ und $\psi_{1,2}$ bei Konvergenz des Verfahrens nicht zwangsläufig erfüllt. Dies hat zur Folge, dass zwar die Wellenfunktion $\boldsymbol{\psi}_1$ bei der vorgegebenen Energie $E_{\text{mf,Soll}}$ liegt und normiert ist, aber alle folgenden Wellenfunktionen zu späteren Zeitpunkten bei einer anderen Energie liegen und nicht normiert sind, da nur ein Teil der Wellenfunktion $\boldsymbol{\psi}_1$ durch den Zeitentwicklungsoperator propagiert wird. Daher werden zur Reduktion von $\tilde{\mathbf{f}}$ die ersten beiden Gleichungen zum Zeitpunkt $m - 1$ gestrichen:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{2(n-1)\cdot(m-2)+1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1}) &= \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1})\psi_{m-1,1} \\ &\quad - \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1})\bar{\psi}_{m-1,1} \end{aligned} \quad (3.60)$$

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{2(n-1)\cdot(m-2)+2}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1}) &= \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1})\psi_{m-1,2} \\ &\quad - \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1})\bar{\psi}_{m-1,2} \end{aligned} \quad (3.61)$$

Die daraus entstehende Funktion \mathbf{f} hat dann die passende Dimension $2(n-1)(m-2) + n - 3$.

3.3 Lineare Extrapolation

Die beschriebene Methode ist unabhängig davon, bei welcher Meanfieldenergie sie durchgeführt wird. Das Verfahren funktioniert auch bei Energien zwischen der Energie der eigentlichen Bounce-Trajektorie und der Energie beim instabilen Fixpunkt q_{Fix} . Da für die Energie der eigentlichen Bounce-Trajektorie keine Startwerte zur Verfügung stehen, sondern nur Startwerte in der Nähe des Fixpunkts vorhanden sind wird mit diesen Werten gestartet und anschließend eine lineare Extrapolation basierend auf den Daten von zwei gefundenen periodischen Bahnen durchgeführt um Startwerte für eine neue Bahn zu erhalten, die näher bei der eigentlichen Energie der Bounce-Trajektorie liegt (siehe Abbildung 3.3). Da die Periodendauer der periodischen Bahnen gegen Unendlich

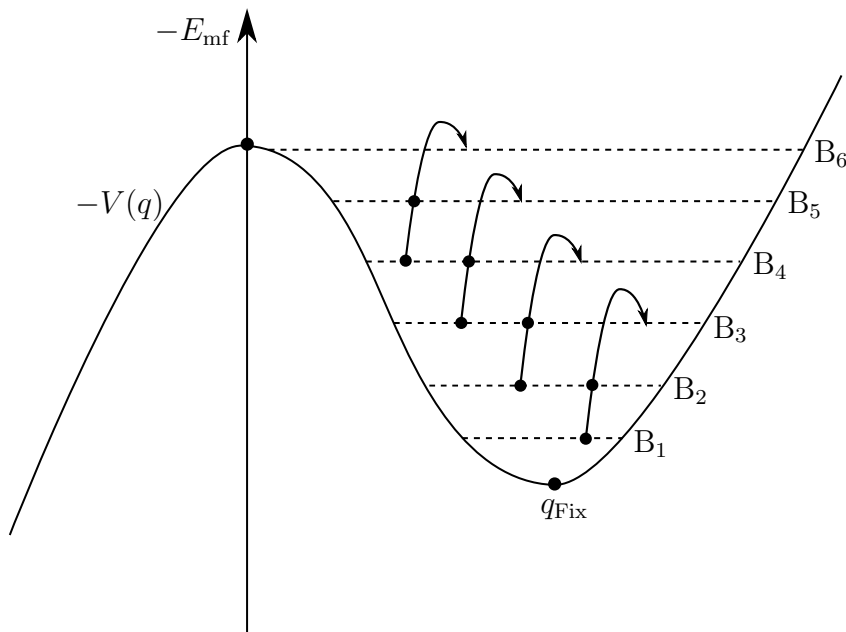


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des Potentials $V(q)$ zur Veranschaulichung der Vorgehensweise. B_i bezeichnen die periodischen Bahnen bei Energien zwischen dem instabilen Fixpunkt q_{Fix} und Energie der Bounce-Trajektorie. Von B_1 und B_2 ausgehend werden Startwerte für B_3 durch eine lineare Extrapolation generiert. Ist die Bahn B_3 gefunden, werden mit B_2 und B_3 die Startwerte für B_4 erzeugt, usw.

strebt, wenn man sich der eigentlichen Bounce-Trajektorie annähert, kann diese nicht exakt gefunden werden. Eine Rest-Energiedifferenz bleibt demnach immer vorhanden. Die lineare Extrapolation wird Gitterpunkt für Gitterpunkt berechnet. Für zwei gleiche Gitterpunkte $\psi_{\tau,j}^{E_1}$ und $\psi_{\tau,j}^{E_2}$, bzw. $\bar{\psi}_{\tau,j}^{E_1}$ und $\bar{\psi}_{\tau,j}^{E_2}$ bei verschiedenen Energien E_1 und E_2 ergibt sich für die Extrapolation zu einem neuen Gitterpunkt $\psi_{\tau,j}^E$, bzw. $\bar{\psi}_{\tau,j}^E$ bei einer

Energie E :

$$\begin{aligned}\psi_{\tau,j}^E &= \frac{\psi_{\tau,j}^{E_2} - \psi_{\tau,j}^{E_1}}{E_2 - E_1}(E - E_2) + \psi_{\tau,j}^{E_1} \\ &= \frac{\Delta\psi_{\tau,j}}{\Delta E}(E - E_2) + \psi_{\tau,j}^{E_1}\end{aligned}\quad (3.62)$$

$$\bar{\psi}_{\tau,j}^E = \frac{\Delta\bar{\psi}_{\tau,j}}{\Delta E}(E - E_2) + \bar{\psi}_{\tau,j}^{E_1}\quad (3.63)$$

Bei der Extrapolation darf die gewählte, neue Energie nicht zu weit von der vorherigen entfernt sein, da die Startwerte sonst zu stark von der Nullstelle entfernt sind und das Newtonverfahren nicht konvergiert. Analog werden auch die Startwerte für $\Delta\tau$ und μ berechnet:

$$\begin{aligned}\mu^E &= \frac{\mu^{E_2} - \mu^{E_1}}{E_2 - E_1}(E - E_2) + \mu^{E_1} \\ &= \frac{\Delta\mu}{\Delta E}(E - E_2) + \mu^{E_1}\end{aligned}\quad (3.64)$$

$$\Delta\tau^E = \frac{\Delta\tau^{E_2} - \Delta\tau^{E_1}}{E_2 - E_1}(E - E_2) + \Delta\tau^{E_1}\quad (3.65)$$

3.4 Newtonverfahren

Das mehrdimensionale Newtonverfahren zur Nullstellensuche einer Funktion $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ startet von einem Punkt \mathbf{x}_n in der Nähe der gesuchten Nullstelle. Um von \mathbf{x}_n ausgehend zum nächsten Punkt \mathbf{x}_{n+1} zu gelangen gilt:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{J}(\mathbf{x}_n)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_n) \quad (3.66)$$

Hierbei ist $\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)^{-1}$ die Inverse der Jacobimatrix. Die Jacobimatrix ist definiert als $J_{ij} = \frac{\partial f_i}{\partial x_j}$. Mit der Definition

$$\Delta \mathbf{x}_n := -\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}_n) \quad (3.67)$$

und anschließender Umformung

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_n) \Delta \mathbf{x}_n = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_n) \quad (3.68)$$

lässt sich das $\Delta \mathbf{x}_n$ als Lösung eines linearen Gleichungssystems bestimmen. Für den nächsten Punkt \mathbf{x}_{n+1} ergibt sich dann:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \Delta \mathbf{x}_n \quad (3.69)$$

Wenn das Newtonverfahren konvergiert, so liegt jedes weitere \mathbf{x}_{n+1} näher an der Nullstelle, als das vorherige \mathbf{x}_n .

3.4.1 Jacobimatrix

Die Jacobimatrix \mathbf{J}_f kann in Abhängigkeit von n und m sehr groß werden, was dazu führt, dass sie nicht komplett abgespeichert werden kann. Für $n = 100$ und $m = 100$ ergibt sich beispielsweise eine Matrix mit

$$[2(n-1)(m-2) + n - 3] \cdot [2(n-1)(m-2) + n - 3] \approx 3,8 \cdot 10^8 \quad (3.70)$$

Einträgen. Auf Grund der Struktur von \mathbf{f} ergibt sich allerdings eine Matrix mit Bandstruktur, deren Einträge größtenteils 0 sind, da zur Konstruktion von \mathbf{f} nur nächste Nachbarn betrachtet werden. Die daraus entstehende Jacobimatrix ist in Abbildung 3.4 schematisch dargestellt

Die entstehende Bandstruktur wird nun ausgenutzt, indem nur die Hauptdiagonale, sowie die oberen und unteren Nebendiagonalen abgespeichert werden. Die Anzahl k_u der oberen Nebendiagonalen beträgt $k_u = n - 3$, die Anzahl k_l der unteren $k_l = 3n - 2$. Mit $\alpha = 2(n-1)(m-2) + n - 3$ der Anzahl der Elemente auf der Hauptdiagonale ergibt sich mit den oben angenommenen beispielhaften Werten für n und m die Anzahl M der

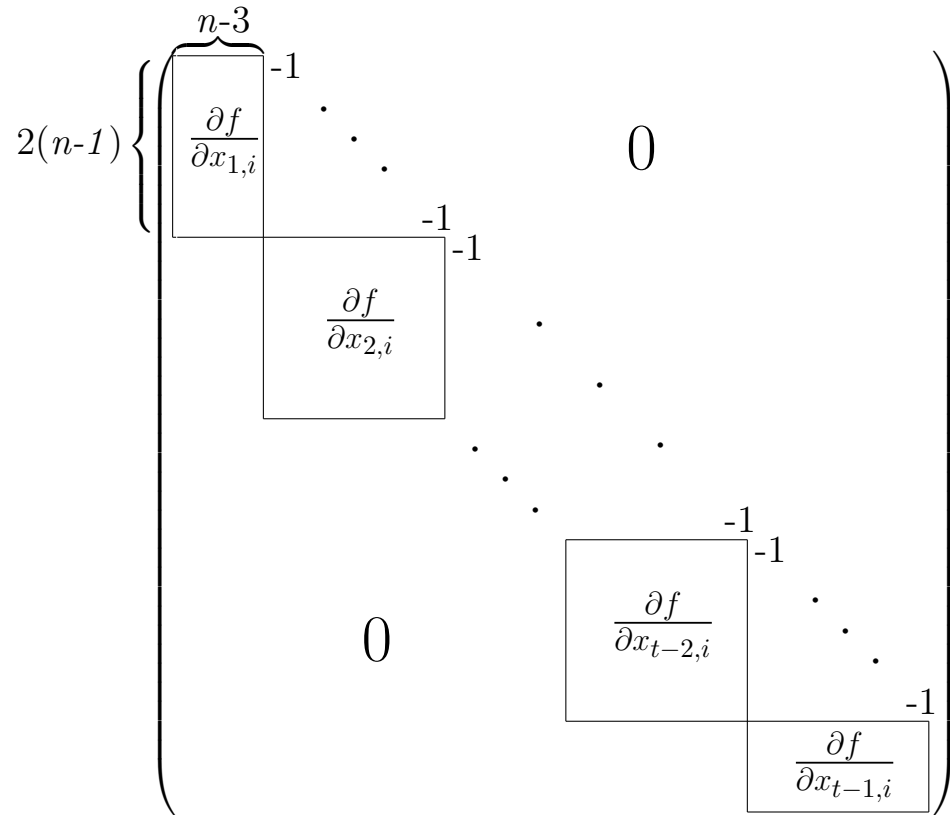


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Jacobimatrix \mathbf{J}_f .

abzuspeichernden Matrixelemente zu:

$$\begin{aligned}
 M &= \alpha + \sum_{i=1}^{k_u} (\alpha - i) + \sum_{i=1}^{k_l} (\alpha - i) \\
 &= \alpha(k_u + k_l + 1) - \frac{k_u^2 + k_u + k_l^2 + k_l}{2} \\
 &\approx 7,7 \cdot 10^6
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

Ist die Matrix an der Stelle \mathbf{x}_n aufgestellt, wird das lineare Gleichungssystem (3.68) mittels einer LU-Zerlegung² der Matrix gelöst werden. Die Lösung $\Delta \mathbf{x}_n$ führt dann nach (3.69) auf die nächste Stelle \mathbf{x}_{n+1} . Mit den neuen Werten \mathbf{x}_{n+1} wird der nächste Newtonschritt gestartet, wobei keine neue Reduktion durchgeführt werden muss, da das Verfahren mit dem reduzierten Satz $\tilde{\psi}_1$ arbeitet. Der Vorgang wird iterativ fortgesetzt, bis das Verfahren konvergiert und damit die Lösung des Gleichungssystems $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$ gefunden ist.

²The NAG Fortran Library, Mark 21; Routine F07BDF

3.4.2 Übergeordnetes Newtonverfahren

Bis einschließlich zum Zeitpunkt $m-1$ sind mit \mathbf{f} alle Anschlussbedingungen abgedeckt, nur die Randbedingung $\hat{U}_{m-1}\boldsymbol{\psi}_{m-1} = \hat{U}_{m-1}\bar{\boldsymbol{\psi}}_m$ wird für die ersten beiden Gitterpunkte nicht erfüllt. Da aber auch diese für eine korrekte, stetige Lösung erfüllt werden müssen, werden zwei weitere Parameter benötigt. Diese Parameter sind gerade das noch nicht betrachtete $\Delta\tau$ und μ , welche als Näherungswerte ebenfalls aus den analytischen Rechnungen stammen. Für die exakte Lösung müssen auch $\Delta\tau$ und μ noch angepasst werden. Sowohl die Erfüllung der beiden Randbedingungen, als auch die Bestimmung der exakten Werte von $\Delta\tau$ und μ wird mit Hilfe eines, dem eigentlichen zur Lösung von $\mathbf{f} = 0$ verwendeten Newtonverfahrens NV_f übergeordnetem Newtonverfahren NV_g erreicht. Die Funktion $\mathbf{g}(\Delta\tau, \mu)$, deren Nullstelle mit dem übergeordneten Verfahren gesucht wird, ergibt sich zu:

$$\begin{aligned} g_1(\Delta\tau, \mu) &= \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1}, \Delta\tau, \mu)\boldsymbol{\psi}_{m-1,1} \\ &\quad - \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1}, \Delta\tau, \mu)\bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1,1} \end{aligned} \quad (3.72)$$

$$\begin{aligned} g_2(\Delta\tau, \mu) &= \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1}, \Delta\tau, \mu)\boldsymbol{\psi}_{m-1,2} \\ &\quad - \hat{U}_{m-1}(\boldsymbol{\psi}_{m-1}, \bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1}, \Delta\tau, \mu)\bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1,2} \end{aligned} \quad (3.73)$$

Die Jacobimatrix hat die Form:

$$\mathbf{J}_g = \begin{pmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial \Delta\tau} & \frac{\partial g_1}{\partial \mu} \\ \frac{\partial g_2}{\partial \Delta\tau} & \frac{\partial g_2}{\partial \mu} \end{pmatrix}$$

Betrachtet man NV_f , so gehen in dieses Verfahren $\boldsymbol{\psi}_{m-1,1}$, $\bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1,1}$, $\boldsymbol{\psi}_{m-1,2}$ und $\bar{\boldsymbol{\psi}}_{m-1,1}$ als Variablen ein. Um also \mathbf{g} überhaupt aufstellen zu können muss zuerst NV_f durchgeführt werden. Zum Aufstellen der Jacobimatrix \mathbf{J}_g muss für jeden Eintrag ebenfalls das Verfahren NV_f gelöst werden.

4 Diskussion der Simulation

Die Konvergenz des Verfahrens ist sehr stark davon abhängig, wie gut die Startwerte, sowohl für die einzelnen Gitterpunkte, als auch für die Parameter μ , τ sind. Sind diese zu weit von den eigentlichen Werten entfernt, konvergiert das Verfahren nicht. Mit den zur Verfügung stehenden Startwerten konnte leider keine vollständige Bounce-Bahn berechnet werden. Alle Daten, wurden für eine Streulänge von $a = -0,9$ berechnet. Aus Startwerten für eine periodische Bahn bei einer Energie von $E_{\text{mf}} \approx -0,10377$ konnte mit dem beschriebenen Verfahren eine Lösung bestimmt werden. Ausgehend von dieser Lösung und einer stationären Wellenfunktion am instabilen Fixpunkt bei einer Energie von $E_{\text{mf,stat}} \approx -0,10358$ wurden mit Hilfe der linearen Extrapolation Startwerte für eine weitere Bahn generiert, für die das Verfahren ebenfalls konvergierte. Weitere Bahnen konnten allerdings nicht gefunden werden. Im Folgenden werden kritische Punkte diskutiert, die dazu beitragen, dass keine weitere Lösung gefunden werden konnte.

4.1 Maximaler radialer Abstand

Da zur Berechnung des langreichweitigen Potentials und des Zeitentwicklungsoperators Fouriertransformationen benötigt werden, muss darauf geachtet werden, den maximalen radialen Abstand r_{max} groß genug zu wählen, da sonst der Gitterabstand im Fourierraum Δk zu groß ist, um die Wellenfunktion im interessanten Bereich, in dem sie noch nicht auf 0 abgefallen ist gut darzustellen. Der Zusammenhang zwischen r_{max} und Δk lautet

$$\Delta k = \frac{\pi}{r_{\text{max}}}.$$

Für einen konstanten Wert an Gitterpunkten $n = 64$ zeigt Abbildung 4.1 diesen Zusammenhang. Alle weiteren Rechnungen wurden mit $r_{\text{max}} = 20$ durchgeführt, da bei diesem Wert sowohl im Orts- als auch im Fourierraum die Wellenfunktionen mit ungefähr gleich vielen Gitterpunkten im interessanten Bereich dargestellt werden.

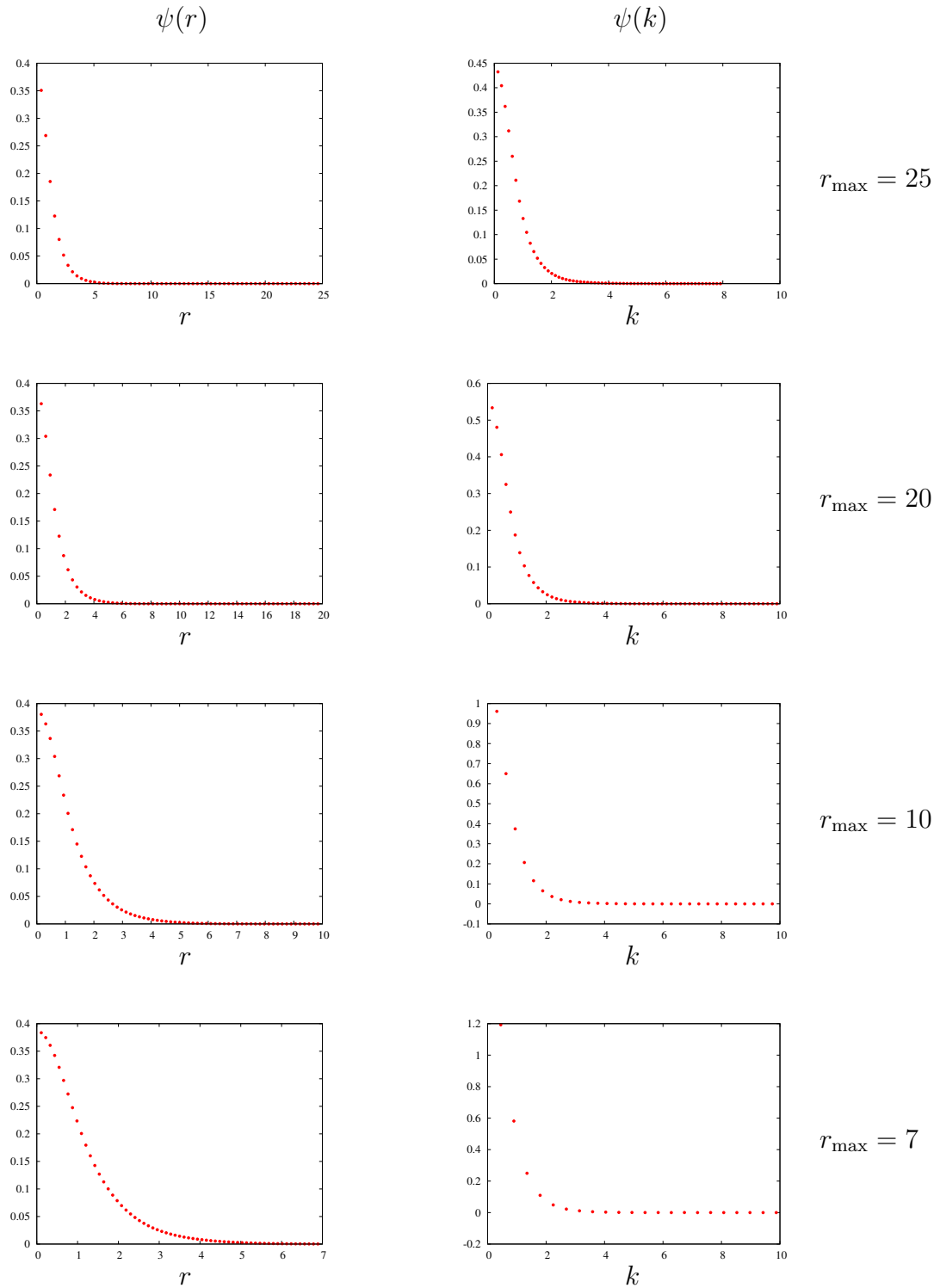


Abbildung 4.1: Zusammenhang zwischen Δk und dem maximalen radialen Abstand r_{\max} . Mit abnehmendem maximalen Abstand wird Δk größer und die Wellenfunktion wird im Fourierraum weniger genau dargestellt.

4.2 Anzahl der Gitterpunkte

Für die Fouriertransformationen wird eine FFT-Routine verwendet, welche als Vorgabe hat, dass die Anzahl der Gitterpunkte eine Potenz von 2 ist, da dann die Routine am effektivsten und schnellsten arbeitet. Dies schränkt die Anzahl der Gitterpunkte von vorne herein ein. Die Anzahl der Gitterpunkte sollte möglichst hoch sein, um bei der Diskretisierung der Wellenfunktionen so wenig wie möglich Informationen über selbige zu verlieren und dadurch die Simulation so genau wie möglich zu gestalten. Eine hohe Anzahl an Gitterpunkten resultiert in ein großes Gleichungssystem, welches mit steigender Anzahl an Gleichungen schwieriger zu lösen ist. Zusätzlich zur Komplexität des Gleichungssystems tritt noch ein numerische Problem bei der Berechnung der Exponentialfunktionen während der Operatoranwendung auf. Wie in Kapitel 3.1 beschrieben, wird im 4. Schritt der Operatoranwendung die Wellenfunktion $\bar{\psi}_\tau$ im Impulsraum zu einem Zeitpunkt τ mit einem Faktor $\alpha = e^{k_i^2 \Delta\tau}$, $k_i = i \cdot \Delta k$ multipliziert. Je höher die Anzahl n der Gitterpunkte gewählt wird, desto größere Werte nimmt also auch der Faktor α an. Von einer Gittergröße $n = 256$ und

$$\begin{aligned}\Delta\tau &\approx 0,02528, \\ r_{\max} &= 20 \\ &\Rightarrow \Delta k \approx 0,157 \\ &\Rightarrow k_{\max} \approx 40\end{aligned}$$

ausgehend ergibt sich das Problem, dass für $k \rightarrow k_{\max}$ die Wellenfunktion $\bar{\psi}_\tau$ Werte in der Größenordnung 10^{-18} (Abbildung 4.2 a.)) und der Faktor α in diesem Bereich Werte der Größenordnung 10^{17} annimmt (Abbildung 4.2 b.)). Bei der Anwendung $e^{k_i^2 \Delta\tau} \bar{\psi}_\tau$ führt dies dann dazu, dass für $k \rightarrow k_{\max}$ die Wellenfunktion $\bar{\psi}_\tau$ wieder exponentiell ansteigt (Abbildung 4.2 d.)), was aber nicht gewünscht ist und im weiteren Verlauf des Verfahrens, insbesondere bei der Rücktransformation in den Ortsraum, zu Fehlern führt. Im Vergleich dazu zeigt Abbildung 4.3 die Wellenfunktion $\alpha \cdot \bar{\psi}_\tau$ im Impulsraum auf einem Gitter mit $n = 64$ Gitterpunkten und ansonsten gleichen Werten für $\Delta\tau$, r_{\max} und Δk ($k_{\max} \approx 10$). Der exponentielle Anstieg für $k \rightarrow k_{\max}$ ist hier nicht vorhanden und die Wellenfunktion geht wie gewünscht gegen 0.

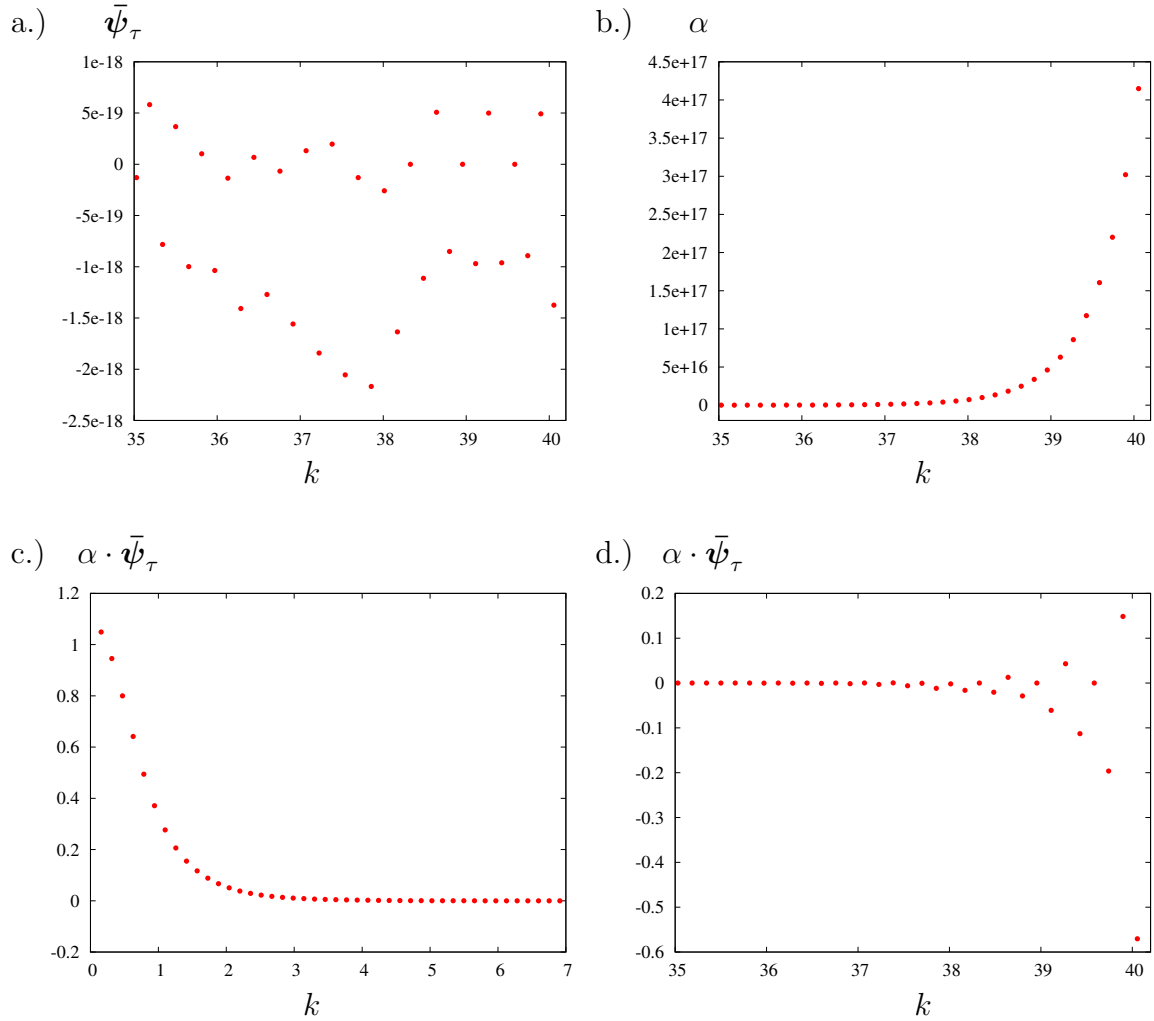


Abbildung 4.2: a.) $\bar{\psi}_\tau$ im Impulsraum bei einer Gittergröße von $n = 256$ dargestellt für $k \rightarrow k_{\max}$ vor der Anwendung von $e^{k_i^2 \Delta \tau}$. b.) Der Faktor $\alpha = e^{k_i^2 \Delta \tau}$, $k_i = i \cdot \Delta k$ mit $\Delta \tau \approx 0,02528$ und $\Delta k \approx 0,157$. c.) $\alpha \cdot \bar{\psi}_\tau$ für kleine k im Vergleich zu d.) für große k , wobei der exponentielle Anstieg hier deutlich zu erkennen ist.

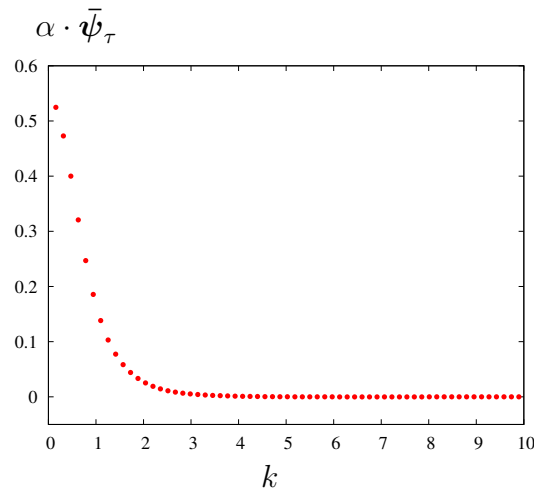


Abbildung 4.3: $\alpha \cdot \bar{\psi}_\tau$ auf einem Gitter mit $n = 64$ Gitterpunkten, $\Delta\tau \approx 0,02528$, $k_{\max} \approx 10$

4.3 Der Wert von $\Delta\tau$ - Meanfieldenergie

Bei der Zerlegung des Zeitentwicklungsoperators nach der Baker-Hausdorff-Formel wird ein Fehler der Größenordnung $O(\Delta\tau^3)$ gemacht. Dieser Fehler fließt in die Erhaltung der Meanfieldenergie während eines Bounces ein. Je kleiner $\Delta\tau$ gewählt wird desto kleiner ist die Abweichung der Meanfieldenergie zwischen den einzelnen Zeitpunkten, Abbildung 4.4 verdeutlicht dies. Beide dargestellten Energieverläufe ergeben sich aus Rechnungen, mit jeweils den gleichen Startwerten. Der Unterschied besteht allerdings darin, dass eine unterschiedliche Anzahl an Zeitpunkten zur Diskretisierung verwendet werden, woraus sich dann auch jeweils unterschiedliche Werte für $\Delta\tau$ ergeben. Zur Berechnung der grünen Kurve wurden 101 Zeitpunkte verwendet, was zu einem $\Delta\tau \approx 0,03787$ führte, die roten Kurve mit 151 Zeitpunkten ergab ein $\Delta\tau \approx 0,02523$. Beide Kurven wurden für eine vorgegebene Meanfieldenergie von $E_{\text{mf}} \approx -0,10377$ gerechnet. Die rosa Kurve gehört zu der zweiten gefundenen Bahn, welche eine Meanfieldenergie von $E_{\text{mf}} = -0,10388$ hatte. Es ist deutlich zu erkennen, dass eine Erhöhung der Anzahl der Zeitpunkte zu einer wesentlich konstanteren Energie führt. Bei der Kurve, die mit 101 Zeitpunkten gerechnet wurde, ergibt sich in der Energie eine maximale prozentuale Abweichung relativ zu der Energie beim ersten Zeitpunkt von $\approx 0,057\%$, bei der Kurve mit 151 Zeitpunkten eine Abweichung von $\approx 0,013\%$. Ein wichtiger Punkt bei dieser Betrachtung ist, dass die Rechnungen nur die halbe Periode umfassen und daher die Energie nach einer vollen Periode aufgrund der Symmetrie $\psi(\tau) = \bar{\psi}(-\tau)$ wieder den gleichen Wert annimmt wie zum ersten Zeitpunkt. Da die Anzahl der Zeitpunkte zwar beliebig gewählt werden kann, aber dann konstant ist, so führt dies im Laufe der Rechnungen dazu, dass $\Delta\tau$ mit

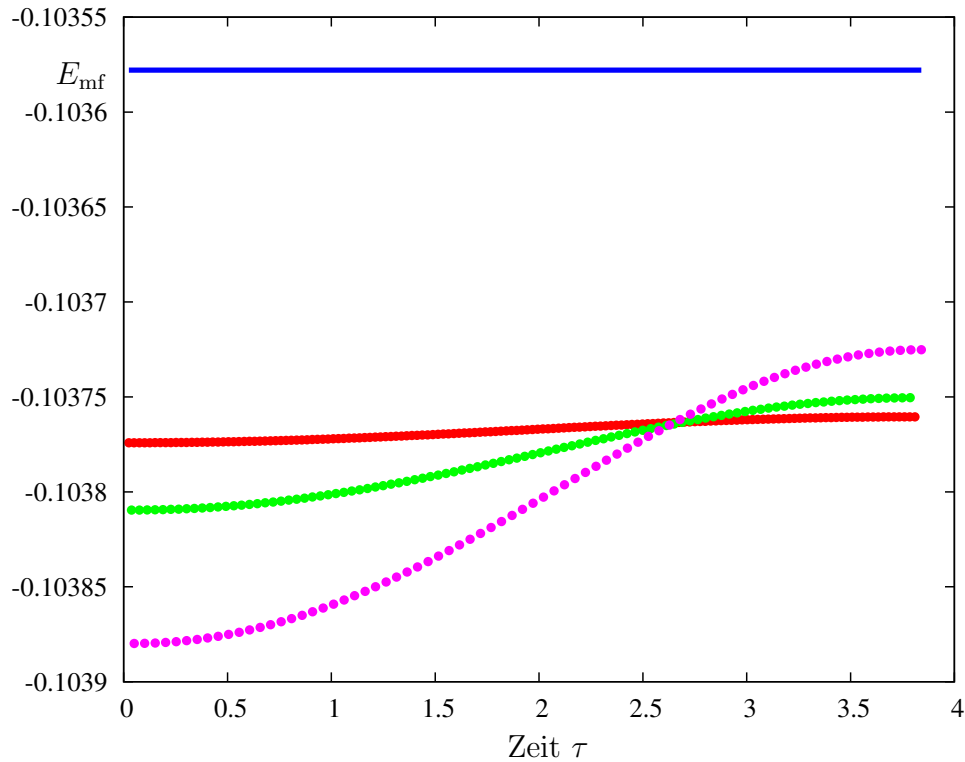


Abbildung 4.4: Zusammenhang zwischen der Erhaltung der Meanfeldenergie und der Anzahl der Zeitschritte, bzw. dem Wert von $\Delta\tau$. Dargestellt ist die halbe Periodendauer. Die grüne Kurve wurde auf einem Gitter mit 101 Gitterpunkten und $\Delta\tau \approx 3.78708 \cdot 10^{-2}$ gerechnet, die rote Kurve auf einem Gitter mit 151 Punkten und $\Delta\tau \approx 2.52336 \cdot 10^{-2}$. Die rosa Kurve wurde auf einem Gitter mit 151 Punkten und $\Delta\tau \approx 5.053952 \cdot 10^{-2}$ gerechnet. Zum Vergleich ist die Energie am instabilen Fixpunkt $E \approx -0,10358$ (blau) eingetragen.

abnehmender Energie immer größer wird und damit die Split-Operator Näherung immer schlechter wird.

4.3.1 1D-Nullstellensuche

Ein weiterer kritischer Punkt ist die Nullstellensuche zur Rückgewinnung des vollen Satzes an Gitterpunkten, welche dazu dient $\psi_{1,2}$ zu bestimmen. Das Problem hierbei ist, dass nicht immer eine Nullstelle gefunden wird und deshalb der Wert verwendet wurde, der der Nullstelle am nächsten liegt. Dies führt dazu, dass nicht exakt die Energie am ersten Zeitpunkt vorliegt, die eigentlich vorgegeben wurde.

4.4 Potentialberechnung

Die Berechnung des Potentials (vgl. Abschnitt 3.1.1) ist ein unkritischer Schritt des Verfahrens. Das Potential zu einem beliebigen Zeitpunkt τ ergibt sich wie in Abbildung 4.5 dargestellt. Zu unterschiedlichen Zeitpunkten unterscheidet sich der Verlauf des Potential qualitativ nicht, nur die Tiefe des "Topfes" verändert sich im Laufe der Zeit.

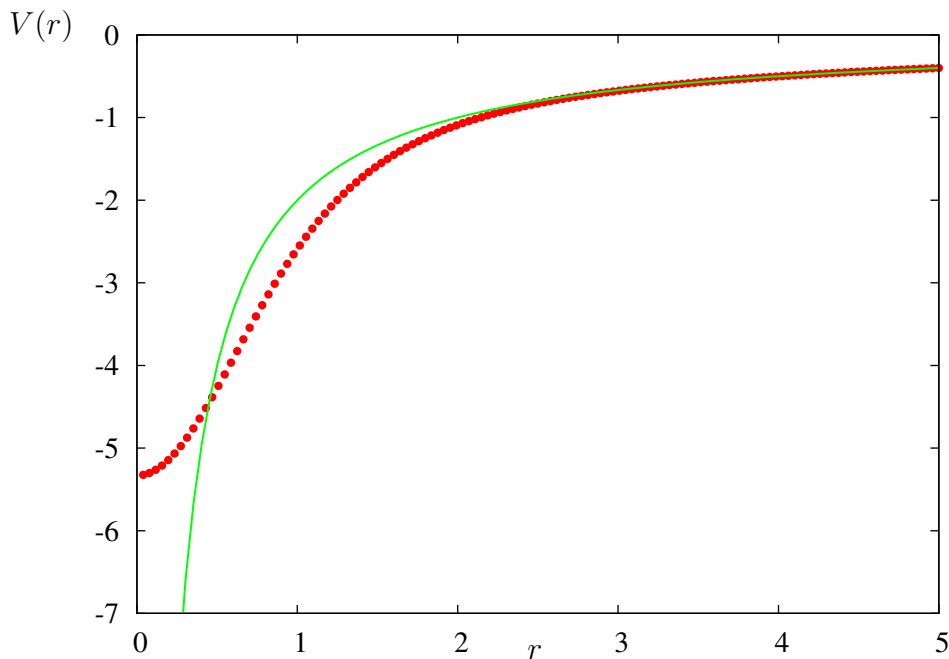


Abbildung 4.5: Das Potential (rote Punkte) zu einem beliebigen Zeitpunkt τ und ein $-\frac{2}{r}$ Potential (grün). Zur deutlicheren Darstellung wurde das Potential auf einem Gitter mit $n = 512$ Punkten berechnet.

4.5 Gefundene periodische Bahnen

Wie in Abschnitt 3.3 beschrieben können Startwerte für eine periodische Bahn, die bei einer etwas niedrigeren Energie liegt durch eine lineare Extrapolation erhalten werden, wozu allerdings zwei Bahnen zur Verfügung stehen müssen. Die erste dafür benötigte Bahn ist die stationäre Lösung am Fixpunkt, die zweite Bahn ergibt sich aus einer Rechnung mit Startwerten, die aus einem TDVP erhalten werden, die Meanfieldenergie $E_{\text{mf},1} = -0,10377$ liegt hierbei nur etwas unterhalb der stationären Lösung $E_{\text{mf,fix}} =$

-0.10358 . Gerechnet wurde mit einer Streulänge von $a = -0,9$, bei welcher die Meanfieldenergie der Bounce-Bahn bei $E_{\text{mf,b}} = -0,13393$ liegt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte für diese Bahn ist in Abbildung 4.6 dargestellt. Betrachtet man Abbildung 4.6 b.), so ist gut zu erkennen, dass die Amplitude der Dichte immer größer wird, während man sich dem Umkehrpunkt nähert. Am Umkehrpunkt ist das Maximum erreicht und die Amplitude nimmt beim Rücklauf wieder ab. Da die Norm erhalten ist, nimmt mit zunehmender Amplitude die Breite ab, was allerdings aufgrund der relativ kleinen Änderungen nicht sehr gut sichtbar ist. Man hat also während einer periodischen Bahn eine Dichte vorliegen, die zu Beginn weniger scharf lokalisiert ist, beim Umkehrpunkt stärker lokalisiert ist und anschließend wieder weniger scharf lokalisiert ist. Mit der obigen Bahn, bzw. den dazugehörigen Wellenfunktionen und der stationären Lösung wurde eine lineare Extrapolation durchgeführt um die Startwerte für die nächste Bahn zu finden. Diese Startwerte waren gut genug um das Verfahren zur Konvergenz zu bringen. Die Energie der gefundenen Bahn lag dabei bei $E_{\text{mf,2}} = -0,10388$. Das Verhalten der Wahrscheinlichkeitsdichte ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Auch hier zeichnet sich der qualitativ gleiche Verlauf wie bei der vorigen Bahn ab.

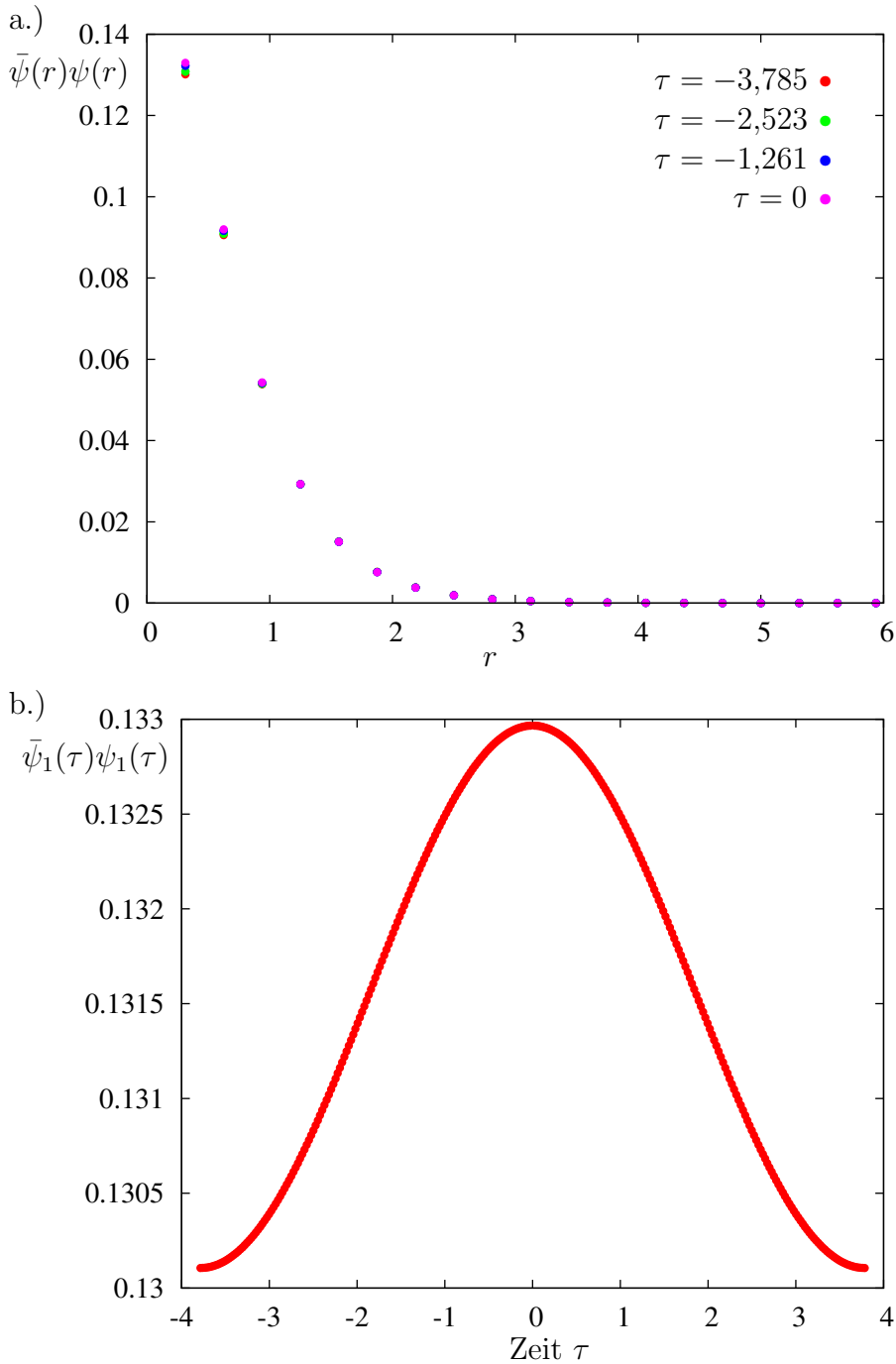


Abbildung 4.6: Der zeitliche Verlauf der Wahrscheinlichkeitsdichte bei einer Meanfield-energie $E_{mf} = -0,10377$ und einer Streulänge $a = -0,9$, das Gitter besteht aus $n = 64$ Raumpunkten und $m = 151$ Zeitpunkten. a.) Die Dichte in Abhängigkeit von r zu verschiedenen Zeiten, startend bei $\tau = -3,785$ bis zum Umkehrpunkt bei $\tau = 0$ b.) Der erste Gitterpunkt der Dichte $\bar{\psi}_{\tau,1}\psi_{\tau,1}$ wird heraus gegriffen und der zeitliche Verlauf dieses Punktes wird für die gesamte Periode dargestellt. Der Umkehrpunkt liegt bei $\tau = 0$

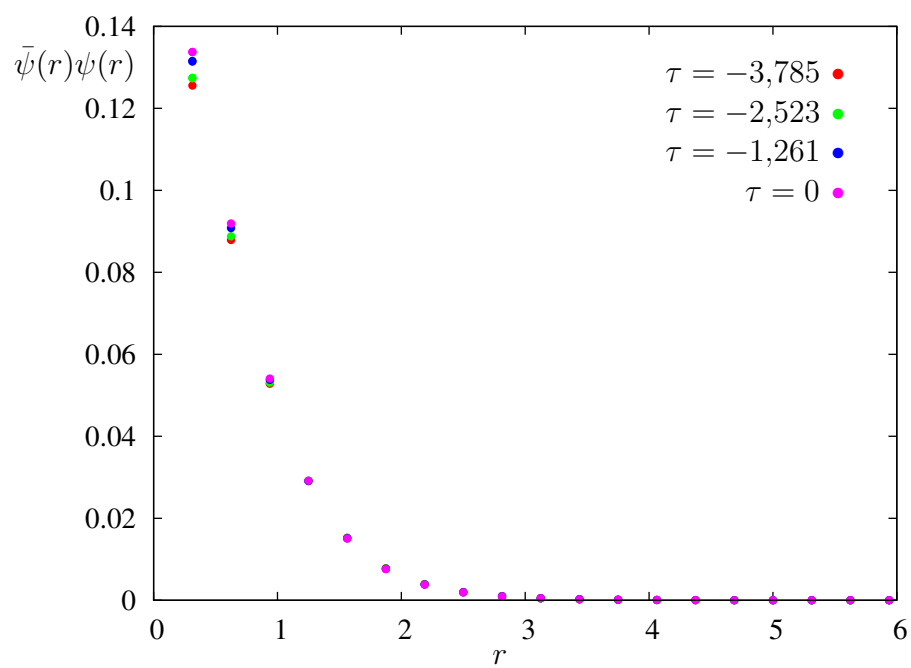


Abbildung 4.7: Die Wahrscheinlichkeitsdichte in Abhängigkeit von r für verschiedenen Zeiten

5 Zusammenfassung und Ausblick

Es wurde ein Verfahren vorgestellt, mit dessen Hilfe auf Raum-Zeit-Gittern das Verhalten der Wellenfunktionen während eines Bounce simuliert werden kann, indem man bei dem energetisch niedrigeren Fixpunkt startet und schrittweise in Richtung der Energie der Bounce-Bahn geht. Mit Hilfe dieses Verfahrens konnten für eine Streulänge von $a = -0,9$ ausgehend von der stationären Lösung am Fixpunkt periodische Bahnen gefunden werden. Die Bahn, die den geringsten energetischen Abstand zu der Energie der Bounce-Bahn hat lag bei einer Energie von $E_{mf,2} = -0,10388$, welche noch relativ weit von der eigentlichen Energie der Bounce-Bahn entfernt ist. Mit den zwei gefundenen Bahnen konnten keine weiteren Startwerte produziert werden, die gut genug für eine Konvergenz des Verfahrens sind. Dies liegt an der Instabilität des Verfahrens bezüglich der Startwerte und der beschriebenen Problematiken. Das Verfahren könnte verbessert werden, indem man vor der Addition der $\Delta \mathbf{x}_n$ -Werte überprüft wird, ob diese dazu führen der Nullstelle näher zu kommen [15]. Ist dies nicht der Fall, so wird nicht das gesamte $\Delta \mathbf{x}_n$ addiert, sondern nur ein Teil $\lambda \cdot \Delta \mathbf{x}_n$, $\lambda \in (0, 1)$. Das Problem der größer werdenden Zeitintervalle $\Delta \tau$ bei der Annäherung an die Bounce-Bahn könnte mit adaptiven Mitteln gelöst werden. Hierzu müsste während der Simulation dafür gesorgt werden, dass das Zeitintervall bei jedem Schritt Richtung Meanfieldenergie der Bounce-Bahn konstant bleibt und dementsprechend die Anzahl der Zeitpunkte geändert wird. In Hinblick auf die Extrapolation muss dann auch der vorherige Schritt in der Energie mit der neuen Anzahl an Zeitpunkten gerechnet werden. Zusätzlich zu der Einstellung der Meanfieldenergie am ersten Zeitpunkte könnte man zu jedem Zeitpunkt eine solche Einstellung vornehmen, indem man jedes ψ_τ reduziert und so eine Möglichkeit bekommt, die Meanfieldenergie konstant zu halten.

Literaturverzeichnis

- [1] A. Einstein. *Zur Quantentheorie des idealen Gases*. Albert Einstein: Akademie-Vorträge: Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften 1914-1932 (ed D. Simon). Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, FRG. doi: 10.1002/3527608958.ch29 (2006).
- [2] S. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik A Hadrons und Nuclei* 26 (1924).
- [3] C. E. Wieman, E. A. Cornell, M. H. Anderson, J. R. Ensher und M. R. Matthews. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science* 269, 198–201 (1995).
- [4] W. Ketterle, K.B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee und D. M. Kurn. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Physical Review Letters* 75, 3969–3973 (1995).
- [5] D. O’Dell, S. Giovanazzi, G. Kurizki und V.M. Akulin. Bose-Einstein Condensates with $1/r$ Interatomic Attraction: Electromagnetically Induced ‘Gravity’. *Physical Review Letters* 84, 5687–5690 (2000).
- [6] Patrick Köberle. *Bose-Einstein condensates with electromagnetically induced $1/r$ -potential*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2007).
- [7] I. Papadopoulos, P. Wagner, G. Wunner und J. Main. Bose-Einstein condensates with attractive $1/r$ interaction: The case of self-trapping. *Physical Review A* 76 (2007).
- [8] A. D. McLachlan. A variational solution of the time-dependent Schrödinger equation. *Mol. Phys.* 8, 39–44 (1964).
- [9] Stefan Rau. *Variational methods with coupled Gaussian functions for Bose-Einstein condensates with long-range interaction*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2010).
- [10] Tomaž Fabčić. *Wave packet dynamics in atomic systems and Bose-Einstein condensates*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2008).

- [11] H. T. C. Stoof. Macroscopic Quantum Tunneling of a Bose Condensate. *Journal of Statistical Physics* 87, 1353–1366 (1997).
- [12] I. H. Duru, H. Kleinert und N. Ünal. Decay rate for supercurrent in thin wire. *Journal of Low Temperature Physics* 42, 137–150 (1981).
- [13] J. A. Freire und D. P. Arovas. Collapse of a Bose condensate with attractive interactions. *Physical Review A* 59, 1461–1467 (1999).
- [14] Kai Marquardt. *Multi-shooting-Algorithmus zur Berechnung der Bounce-Trajektorie bei Bose-Einstein-Kondensaten mit attraktiver $1/r$ -Wechselwirkung*. Diplomarbeit, Universität Stuttgart (2011).
- [15] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling und B. P. Flannery. *Numerical Recipes in C, Second Edition*. Press Syndicate of the University of Cambridge (1992).

Ehrenwörtliche Erklärung

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

Stuttgart, den 10. August 2011

Pascal Wieland

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich meinen Eltern danken, die mir das Studium durch ihre emotionale und finanzielle Unterstützung erst ermöglichten. Vielen Dank! Mein Dank geht an Prof. Dr. Jörg Main und Prof. Dr. Günter Wunner für die Möglichkeit meine Diplomarbeit am 1. Institut für Theoretische Physik schreiben zu dürfen und an Prof. Dr. Udo Seifert für den Mitbericht. Ohne die tatkräftige Unterstützung von Jörg Main bei Fragen bzgl. der Programmierung wäre gerade die Anfangsphase sehr schwierig gewesen, besonderer Dank geht dabei auch an meinen Zimmerkollegen Kai Marquardt für seine Hilfe bei allerlei Fragen. Ich möchte mich bei allen Mitgliedern des ITP1 für die sehr angenehme und freundliche Arbeitsatmosphäre bedanken, ohne die mir die tägliche Arbeit um vieles schwerer gefallen wäre.