Masterarbeit

# Realisierung von *Balanced Gain and Loss* in einem Bose-Hubbard-Modell mit zeitabhängigen Potentialen

Daniel Dizdarevic

2. Dezember 2016

Prüfer: Apl. Prof. Dr. Jörg Main
Mitbericht: Jun.-Prof. Dr. Thomas Weiss

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

Sometimes the public says, "What's in it for Numero Uno? Am I going to get better television reception? Am I going to get better Internet reception?" Well, in some sense, yeah. [...] But let me let you in on a secret: We physicists are not driven to do this because of better color television. [...] That's a spin-off. We do this because we want to understand our role and our place in the universe.

Michio Kaku

# Inhaltsverzeichnis


**1. Einleitung** **7**
1.1. Motivation und Einführung in das Thema . . . 7
1.2. Aufbau der Arbeit . . . 9

**2. Grundlagen** **11**
2.1. Bose-Einstein-Kondensation . . . 11
2.1.1. Kriterium für Bose-Einstein-Kondensation . . . 11
2.1.2. Gross-Pitaevskii-Gleichung . . . 12
2.2. $\mathcal{PT}$-Symmetrie . . . 13
2.2.1. $\mathcal{PT}$-Operator . . . 13
2.2.2. Komplexe Potentiale . . . 14
2.3. $\mathcal{PT}$-symmetrisches Zweimodenmodell . . . 16
2.3.1. Stationäre Zustände . . . 16

**3. Bose-Hubbard-Modell** **19**
3.1. Optische Potentiale . . . 19
3.2. Fock-Darstellung . . . 20
3.2.1. Bose-Hubbard-Modell in einem optischen Gitter . . . 20
3.2.2. Lexikographische Fock-Basis . . . 22
3.2.3. Lexikographischer Index . . . 23
3.3. Mean-Field . . . 26
3.4. Bogoliubov-Backreaction . . . 28
3.4.1. BBGKY-Hierarchie . . . 29
3.4.2. BBR-Methode . . . 31
3.4.3. Symmetrien in der BBGKY-Hierarchie . . . 34

**4. Realisierung von *balanced gain and loss*** **37**
4.1. $\mathcal{PT}$-symmetrisches Viermodenmodell . . . 37
4.1.1. Zeitabhängige Potentiale . . . 39
4.2. Kontrollparameter im Mean-Field . . . 40
4.2.1. Bedingungen an die MF-Wellenfunktion . . . 40
4.2.2. Bedingungen an die SPDMs . . . 42
4.2.3. Anfangsbedingungen und analytische Behandlung . . . 45
4.2.4. Zusammenfassung . . . 49

4.3. Kontrollparameter im Vielteilchensystem . . . . . 50
4.3.1. MF-artige Vielteilchenzustände . . . . . 50
4.3.2. Bedingungen an die BBGKY-Hierarchie . . . . . 53
4.3.3. Modifikationen der Bedingungen an die Kontrollparameter . . . . 56
4.3.4. Einschalten der Wechselwirkung . . . . . 61
4.3.5. Reinheit . . . . . 63
4.3.6. Zusammenfassung . . . . . 64
4.4. Implementation . . . . . 65
4.4.1. Auswertung der Bewegungsgleichungen . . . . . 66
4.4.2. Integration der Bewegungsgleichungen . . . . . 67
4.4.3. Normierung und Skalierung der Kontaktwechselwirkung . . . . . 68

**5. Ergebnisse und Diskussion 71**
5.1. Konstante Potentiale . . . . . 71
5.1.1. Tunnelrate und Zeitskala . . . . . 71
5.1.2. Wechselwirkung und MQST . . . . . 74
5.1.3. Vergleich zwischen BHM, BBR und MF . . . . . 77
5.2. Zeitabhängige Potentiale zur Realisierung von BGL . . . . . 81
5.2.1. Quasistationäre Zustände . . . . . 81
5.2.2. Varianzen und adiabatisches Einschalten der Kontaktwechselwirkung 89

**6. Zusammenfassung und Ausblick 97**

**A. Stationäre Lösungen im Zweimodensystem 101**

**B. Lösungen einer linearen komplexen Gleichung 105**

**C. Beschreibung der MF-Dynamik über SPDMs 107**

**D. Analytische Parameterwahl 109**

**E. Alternative Parameterwahl für stationäre Besetzungen 115**

**Abkürzungsverzeichnis 119**

**Symbolverzeichnis 121**

**Literaturverzeichnis 123**

**Danksagung 133**

# 1. Einleitung

Symmetrie gehört zu den fundamentalen Prinzipien in der Physik und stellt ein mächtiges Konzept zur Beschreibung der Natur dar. So hat bereits Emmy Noether 1918 erkannt, dass jede globale kontinuierliche Symmetrie zu einer erhaltenen Ladung führt [1, 2]. In der allgemeinen Relativitätstheorie, in Quantenfeldtheorien und in anderen Eichtheorien treten durch den Übergang zu lokalen Symmetrie auf natürliche Weise Wechselwirkungen auf, welche an diese Ladungen koppeln [3, 4]. Auch die spontane Brechung einer solchen Symmetrie führt zu einer Vielzahl von Effekten, zu denen etwa der Higgs-Mechanismus zählt [5–7]. Neben den kontinuierlichen Symmetrien existieren auch diskrete Symmetrien wie die $\mathcal{CPT}$-Symmetrie, welche bereits aus den grundlegenden Axiomen der Quantenfeldtheorie folgt [8–11].

Vielen Bereichen der modernen Physik liegen Symmetrien zugrunde. Auch diese Arbeit beschäftigt sich mit einer Symmetrie, der sogenannten $\mathcal{PT}$-Symmetrie. Diese bezeichnet die Invarianz eines physikalischen Systems gegenüber einer antiunitären Raumzeitspiegelung, was zum Auftreten stationärer Lösungen mit vollkommen reellen Eigenwertspektren führen kann [12, 13]. Diese Eigenschaft erlaubt eine nicht-hermitesche $\mathcal{PT}$-symmetrische Formulierung der Quantentheorie, welche nicht auf der mathematischen Forderung nach hermitezität sondern auf dem physikalischen Konzept der Symmetrie beruht. Es lässt sich zeigen, dass eine solche Formulierung vollkommen äquivalent zur herkömmlichen Quantenmechanik ist [14, 15] und eine komplexe Erweiterung im Sinne einer pseudohermiteschen Quantenmechanik darstellt [16–19]. nicht-hermitesche Quanentheorien eignen sich zur Beschreibung offener Quantensysteme [20] und Resonanzphänomenen [21].

## 1.1. Motivation und Einführung in das Thema

Aufgrund der Analogie zwischen der Schrödinger-Gleichung und der Wellengleichung, konnte $\mathcal{PT}$-Symmetrie in optischen Systemen beobachtet werden [22, 23]. Darüber hinaus wurden $\mathcal{PT}$-symmetrische Systeme bereits in Form von Mikrowellenleitern [24] und elektronischen Schaltkreisen [25] realisiert. Dennoch ist eine Realisierung in einem echten Quantensystem bisher nicht gelungen. Nach einem Vorschlag von Klaiman *et al.* [26] stellt ein Bose-Einstein-Kondensat (*Bose-Einstein Condensate*, BEC) in einem optischen Doppelmuldenpotential mit *Balanced Gain and Loss* (BGL) ein potentiell

experimentell zugängliches $\mathcal{PT}$-symmetrisches Quantensystem dar [27, 28]. Dazu müssen Teilchen in einer Mulde hinzugefügt und in der anderen Mulde entfernt werden.

Da die Bose-Einstein-Kondensation erst bei geringen Temperaturen auftritt, lässt sich ein BEC mit einer ausreichend großen Anzahl an Bosonen im Mean-Field (MF) durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung (*Gross-Pitaevskii Equation*, GPE) beschreiben [29, 30]. Die GPE stellt eine nichtlineare Gleichung dar, bei der sich alle Bosonen im selben Einteilchenzustand befinden. Die Ein- und Auskopplung von Teilchen kann über ein komplexes Potential beschrieben werden, welches für BGL einen symmetrischen Real- und einen antisymmetrischen Imaginärteil besitzt [31]. Solche Systeme wurden bereits ausführlich untersucht [32–37]. Über die MF-Näherung hinaus lässt sich BGL durch Lindblad-Gleichungen beschreiben [38–41].

Im Gegensatz zu diesen nicht-hermiteschen und effektiven Theorien ist das Ziel dieser Arbeit, eine Realisierung von BGL im Rahmen einer hermiteschen Beschreibung zu liefern. Es existieren bereits Vorschläge für eine konkrete Realisierung [42–46]. Single *et al.* haben dazu Bedingungen an gebundene Wellenfunktionen hergeleitet, welche kohärenter Atomstrahlung entsprechen [43]. Es konnten so stabile $\mathcal{PT}$-symmetrische Lösungen gefunden werden, jedoch stellt dies lediglich eine effektive und damit unvollständige Beschreibung des Systems dar. Gutöhrlein *et al.* schlagen die Kopplung an ein zweites Zweimodensystem vor, das als Reservoir dient, sodass ein abgeschlossenes System vorliegt [45]. Die Kopplung zwischen den Zweimodensystemen entspricht dabei der Kopplung aus [43] und beruht nicht auf einem tatsächlichen physikalischen Prozess.

Der in dieser Arbeit verfolgte Ansatz stammt von Kreibich *et al.*, bei dem ein Zweimodensystem in ein optisches Viermodenpotential eingebettet wird, sodass ein abgeschlossenes hermitesches System vorliegt [42]. Die zusätzlichen Mulden dienen als Teilchenreservoirs und die Kopplungen sind durch Tunnelprozesse zwischen den Mulden gegeben. Um $\mathcal{PT}$-Symmetrie zu realisieren, werden Bedingungen an die Parameter des optischen Potentials gestellt, sodass diese Größen dynamisch angepasst werden können. Das erlaubt eine vollständige Beschreibung und Kontrolle der Ein- und Auskopplungen. Dabei können exakt $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Lösungen solange erzeugt werden, bis die Reservoirmulde, aus der Teilchen entnommen werden, vollständig entleert ist.

Die hier genannten Vorschläge beruhen alle auf der MF-Beschreibung eines BEC. Obwohl bereits gezeigt wurde, dass die MF-Theorie eine gute Näherung des Vielteilchenproblems darstellt [31, 47], so gilt diese nur im Grenzfall $N \to \infty$ und $T \to 0$ exakt. Die experimentellen Bedingungen für die Anwendung der MF-Theorie liegen also bestenfalls näherungsweise vor. Aus diesem Grund soll der Vorschlag von Kreibich *et al.* im Rahmen dieser Arbeit bei einer vollen Vielteilchenbeschreibung untersucht werden. Ein BEC in einem optischen Potential lässt sich durch das Bose-Hubbard-Modell (BHM) beschreiben. Die Fragestellung, die dieser Arbeit zugrunde liegt, lautet: Gibt es zusätzliche Effekte bei geringen Teilchenzahlen, wenn man über das MF hinausgeht, und lassen sich auch hier $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Zustände und BGL erreichen?

## 1.2. Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 sind wichtige Grundlagen zur Beschreibung von BECs und zur $\mathcal{PT}$-Symmetrie kurz dargestellt. An dieser Stelle wird auch das $\mathcal{PT}$-symmetrische Zweimodenmodell im MF eingeführt, das es zu realisieren gilt.

Kapitel 3 ist dem BHM gewidmet. Es werden notwendige Grundlagen zur Beschreibung eines BEC in einem optischen Potential eingeführt. Da die Anwendung des BHM enorm aufwendig ist, wird eine effiziente Behandlung im Rahmen einer lexikographischen Fock-Darstellung diskutiert. Außerdem werden Näherungen eingeführt, zu denen die MF-Näherung und die Bogoliubov-Backreaction (BBR)-Methode gehören. Hierfür wird die Schrödinger-Gleichung in der Form einer BBGKY-Hierarchie gebracht.

In Kapitel 4 werden anschließend die Bedingungen an die Kontrollparameter formuliert. Zu diesem Zweck wird zuerst die MF-Theorie betrachtet mit dem Ziel, möglichst einfache dynamische Parameter aufzustellen. Es lassen sich hierbei auch analytische Lösungen für die Zustände und Parameter finden. Die Bedingungen aus dem MF werden anschließend in die Vielteilchenbeschreibung übertragen. Dazu ist zuerst die Berechnung der Vielteilchenanfangszustände notwendig. Daran anschließend werden unterschiedliche Möglichkeiten diskutiert, die Bedingungen zu formulieren, sowie ein adiabatischer Einschaltvorgang für die Wechselwirkung vorgeschlagen. Zuletzt befasst sich dieses Kapitel mit der Implementation des Vielteilchenproblems.

In Kapitel 5 sind die numerischen Resultate dargestellt. Dabei werden zuerst grundlegende Eigenschaften des BHM in einem konstanten optischen Gitter betrachtet, sowie MF-Näherung, BBR-Methode und BHM miteinander verglichen. Im Anschluss werden zeitabhängige Potentiale zur Realisierung von BGL im BHM untersucht. Dabei werden unterschiedliche Bedingungen im Grenzfall geringer Teilchenzahlen verglichen. Im letzten Teil des Kapitels wird der Übergang zu hohen Teilchenzahlen sowie die Auswirkungen einer Vielteilchenbeschreibung diskutiert.

Das Kapitel 6 beinhaltet eine kurze Zusammenfassung dieser Arbeit und einen Ausblick.

# 2. Grundlagen

> From a certain temperature on, the molecules 'condense' without attractive forces; that is, they accumulate at zero velocity. The theory is pretty, but is there some truth in it.
>
> Albert Einstein

## 2.1. Bose-Einstein-Kondensation

Die Kondensation eines idealen Bose-Gases bei tiefen Temperaturen und ohne attraktive Kräfte wurde bereits 1924/25 von Einstein [48, 49] basierend auf den Arbeiten von Bose [50] vorhergesagt. Da Bosonen, im Gegensatz zu Fermionen, nicht dem Pauli-Prinzip unterliegen, kann eine beliebige Anzahl denselben quantenmechanischen Zustand besetzen. Bei der Bose-Einstein-Kondensation wird unterhalb einer kritischen Temperatur der Grundzustand makroskopisch besetzt, was die Beobachtung von Quanteneffekten an makroskopischen Objekten erlaubt. Die hierfür notwendigen Temperaturen liegen jedoch dicht am absoluten Nullpunkt und waren zu Einsteins Zeiten noch unzugänglich. Erst durch Laserkühlung gelang es 1995 erstmals ein BEC zu realisieren [51–53], was im Jahr 2001 mit einem Nobelpreis ausgezeichnet wurde.

### 2.1.1. Kriterium für Bose-Einstein-Kondensation

Ein Quantengas bestehend aus $N$ identischen Bosonen, die sich in einem Fallenpotential $V$ befinden, wird bei Verwendung geeigneter Einheiten durch die dimensionslose Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N) = \sum_{n=1}^{N}\left[-\frac{1}{2}\Delta_{\boldsymbol{r}_n} + V(\boldsymbol{r},t) + \frac{1}{2}\sum_{\substack{m=1\\ m\neq n}}^{N} V_{\text{int}}(\boldsymbol{r}_n,\boldsymbol{r}_m)\right]\Psi(\boldsymbol{r}_1,\ldots,\boldsymbol{r}_N) \quad (2.1)$$

beschrieben, wobei die Wechselwirkung aufgrund geringer Teilchendichten auf Zweikörperwechelwirkungen $V_{\text{int}}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ beschränkt werden kann. Alle in dieser Arbeit auftretenden Gleichungen sind stets dimensionslos mit atomaren Hartree-Einheiten formuliert, also grob gesagt mit der Konvention „$\hbar = m = 1$“.

In einem nichtwechselwirkenden Bose-Gas kann ein BEC über die Besetzung des Einteilchengrundzustandes beschrieben werden. Einteilchenenergiezustände sind jedoch in Anwesenheit von Wechselwirkung nicht mehr definiert. Die gesamte Information über die Einteilcheneigenschaften des Systems ist jedoch in der Einteilchen-Dichtematrix (*Single-Particle Density Matrix*, SPDM)

$$\sigma^{(1)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \langle \hat{a}^\dagger(\boldsymbol{r}')\hat{a}(\boldsymbol{r})\rangle \tag{2.2}$$

enthalten, wobei $\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{r})$ und $\hat{a}(\boldsymbol{r})$ die Erzeugung und Vernichtung eines Bosons am Ort $\boldsymbol{r}$ beschreiben und die Eigenschaft

$$\left[\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{r}'), \hat{a}(\boldsymbol{r})\right] = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{2.3}$$

erfüllen. Für $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$ gibt die Dichtematrix (2.2) gerade die Teilchendichte $n(\boldsymbol{r})$ am Ort $\boldsymbol{r}$ wieder, sodass sich eine reduzierte SPDM

$$\sigma^{(1)}_{\text{red}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{\sigma^{(1)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')}{N} \tag{2.4a}$$

mit

$$N = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\sigma^{(1)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) \tag{2.4b}$$

definieren lässt.

Mit der reduzierten SPDM (2.4a) kann ein allgemeines Kriterium für die Bose-Einstein-Kondensation formuliert werden [54–57]. Da der Einteilchendichteoperator hermitesch und positiv definit ist, sind alle Eigenwerte $\lambda$ der Dichtematrix reell und positiv,

$$\sigma^{(1)}_{\text{red}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \sum_m \lambda_m \chi^*_m(\boldsymbol{r}')\chi_m(\boldsymbol{r})\,, \tag{2.5}$$

wobei $\chi$ die zugehörigen Eigenfunktionen bezeichnet, also für ein nichtwechselwirkendes Gas gerade die Einteilchenzustände.

Für $T = 0$ befinden sich alle Bosonen im Grundzustand, für den entsprechenden Eigenwert gilt dann $\lambda_0 = 1$ und alle anderen Eigenwerte verschwinden. Entsprechend deutet auch für $T > 0$ die Existenz eines großen Eigenwertes der reduzierten SPDM auf ein BEC hin, der zugehörige Zustand ist dann makroskopisch besetzt. Falls trotz tiefer Temperatur mehrere Zustände makroskopische besetzt sind, so liegt ein fragmentiertes BEC vor [58–60], was etwa mehreren räumlich getrennten BECs entspricht.

### 2.1.2. Gross-Pitaevskii-Gleichung

Für sehr große Teilchenzahlen geht die Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung (2.1) bei $T = 0$ in die zeitabhängige GPE

$$i\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2}\Delta + V(\boldsymbol{r}, t) + g|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2\right)\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{2.6}$$

über [29, 30]. Die makroskopische Wellenfunktion $\psi \in \mathbb{C}$, die dem Ordnungsparameter beim Phasenübergang der Bose-Einstein-Kondensation entspricht, beschreibt den Produktzustand der identischen Einteilchengrundzustände und kann als mittleres klassisches Feld aller Teilchen aufgefasst werden, wobei die Norm $N = \|\psi\|^2$ die Gesamtteilchenzahl wiedergibt. Diese MF-Näherung gilt streng genommen nur für gänzlich reine Kondensate, also solche, bei denen sich alle Teilchen im Grundzustand befinden. Das wiederum ist jedoch nur für $T = 0$ der Fall, also gemäß des dritten Hauptsatzes der Thermodynamik unmöglich. Durch die makroskopische Besetzung des Grundzustandes für $T \to 0$ ist eine MF-Beschreibung für große Gesamtteilchenzahlen dennoch sinnvoll, was sich auch in den Folgenden Kapiteln durch Vergleich mit der Vielteilchendynamik zeigen wird.

Bei der GPE (2.6) handelt es sich um eine nichtlineare Schrödinger-Gleichung, die Stärke der Nichtlinearität wird durch den Parameter $g = NU_0$ bestimmt, wobei $U_0 = 4\pi a$ die Stärke der Kontaktwechselwirkung

$$V_{\text{int}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = U_0 \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{2.7}$$

zwischen zwei Teilchen an den Orten $\boldsymbol{r}$ und $\boldsymbol{r}'$ beschreibt. Durch Streutheorie lässt sich zeigen, dass die Gleichung (2.7) die effektive Wechselwirkung bei niedrigen Energien darstellt und dass die Eigenschaften des Gases im Wesentlichen durch die s-Wellen Streulänge $a$ bestimmt werden [61]. Für eine ausführlichere Behandlung und Diskussion der GPE sei auf [62, 63] verwiesen.

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

Die Postulate der Quantenmechanik stellen sicher, dass physikalische Größen, also die Eigenwerte entsprechender Operatoren, stets reell sind. Dies kann durch Verwendung hermitescher Operatoren mit der Eigenschaft $\mathcal{O}^\dagger = \mathcal{O}$ erreicht werden, denn für die zugehörigen Eigenwerte folgt dann unmittelbar $O^* = O$. Bender und Boettcher zeigten jedoch, dass auch nicht-hermitesche Operatoren reelle Eigenwerte besitzen können, falls diese invariant gegenüber einer Paritäts-Zeit-Umkehr sind [13]. Dies erlaubt eine $\mathcal{PT}$-symmetrische Formulierung der Quantenmechanik, welche als komplexe Erweiterung der herkömmlichen hermiteschen Quantenmechanik zu verstehen ist. Mit einer unitären Zeitentwicklung [14] lässt sich die Äquivalenz beider Formulierungen zeigen [19].

### 2.2.1. $\mathcal{PT}$-Operator

Die meisten Symmetrieoperationen sind unitär und erhalten damit das Skalarprodukt des Hilbert-Raums. Es lässt sich jedoch allgemein zeigen, dass jede Symmetrieoperation

in der Quantenmeachanik entweder unitär, der zugehörige Operator $\mathcal{U}$ ist dann linear, oder antiunitär, der zugehörige Operator $\mathcal{A}$ ist dann antilinear mit der Eigenschaft

$$\mathcal{A}(\alpha\psi_1 + \beta\psi_2) = \alpha^* \mathcal{A}\psi_1 + \beta^* \mathcal{A}\psi_2 \,, \tag{2.8}$$

sein muss [64]. Eine antiunitäre Symmetrieoperation $\mathcal{A}$ lässt sich dabei stets als Kombination einer unitären Symmetrieopeartion $\mathcal{U}$ und einer komplexen Konjugation $\mathcal{K} : \boldsymbol{i} \to -\boldsymbol{i}$ schreiben, $\mathcal{A} = \mathcal{U}\mathcal{K}$ [65].

Der Paritätsoperator $\mathcal{P}$ ist ein linearer Operator, der eine Rauminversion bewirkt. Im Ortsraum entspricht das einer Spiegelung der Ortskoordinaten am Ursprung und der Umkehr des Impulses,

$$\mathcal{P} : \quad \boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r} \,, \quad \boldsymbol{p} \to -\boldsymbol{p} \,. \tag{2.9}$$

Bei Zeitumkehr, also $t \to -t$, hingegen laufen alle Bewegungen rückwärts ab, was einer reinen Impulsumkehr entsprechen würde. Damit der Kommutator $[\hat{r}, \hat{p}] = \boldsymbol{i}$ jedoch unverändert bleibt, muss der entsprechende Zeitumkehroperator $\mathcal{T}$ noch um eine komplexe Konjugation $\mathcal{K}$ erweitert werden und stellt somit einen antilinearen Operator dar,

$$\mathcal{T} : \quad \boldsymbol{p} \to -\boldsymbol{p} \,, \quad \boldsymbol{i} \to -\boldsymbol{i} \,. \tag{2.10}$$

Die Notwendigkeit einer komplexen Konjugation bei Zeitumkehr ergibt sich darüber hinaus bereits sehr allgemein aus der unitären Zeitentwicklung eines Zustandes, da die alleinige Umkehr der Zeitkoordinate zu negativen Energien führen würde, was im Grunde der Feynman-Stückelberg-Interpretation der Dirac-Gleichung entspricht [66]. Bei der Zeitumkehr handelt es sich um die fundamentale antiunitäre Operation in der Physik und diese ist direkt mit der komplexen Natur der Quantenmechanik verknüpft [67]. So lassen sich Interferenzphänomene durch einen komplexen Formalismus mit Phasenfaktoren erfassen, wobei Phasenfaktoren gerade die Eigenwerte eines antilinearen Operators darstellen.

Die kombinierte Wirkung der Operatoren (2.9) und (2.10) entspricht einer ebenfalls antiunitären Raumzeitspiegelung,

$$\mathcal{PT} : \quad \boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r} \,, \quad \boldsymbol{i} \to -\boldsymbol{i} \,. \tag{2.11}$$

Durch zweimalige Anwendung einer derartigen Symmetrieoperation sollte der ursprüngliche Zustand wiederhergestellt werden, was bedeutet, dass die Eigenwerte $\lambda$ des antilinearen $\mathcal{PT}$-Operators die Bedingung $|\lambda|^2 = 1$ erfüllen müssen und damit wie erwartet die Form $\lambda = \exp(\boldsymbol{i}\varphi)$ besitzen.

### 2.2.2. Komplexe Potentiale

Ein System wird als $\mathcal{PT}$-symmetrisch bezeichnet, wenn der Hamilton-Operator mit dem $\mathcal{PT}$-Operator vertauscht,

$$[\mathcal{PT}, \mathcal{H}] = 0 \,. \tag{2.12}$$

Für einen allgemeinen Hamilton-Operator der Form

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\Delta_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r})\,, \tag{2.13}$$

wobei das Potential $V$ im Allgemeinen zeitabhängig sein kann, ergibt sich mit der Definition (2.11) des $\mathcal{PT}$-Operators

$$\begin{aligned}[\mathcal{PT},\mathcal{H}] &= \mathcal{PT}\Big[-\frac{1}{2}\Delta_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r})\Big] - \Big[-\frac{1}{2}\Delta_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r})\Big]\mathcal{PT} \\ &= \Big[-\frac{1}{2}\Delta_{\boldsymbol{r}} + V^*(-\boldsymbol{r})\Big]\mathcal{PT} - \Big[-\frac{1}{2}\Delta_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r})\Big]\mathcal{PT} \\ &= (V^*(-\boldsymbol{r}) - V(\boldsymbol{r}))\mathcal{PT}\,. \end{aligned} \tag{2.14}$$

Die Bedingung (2.12) an den Hamilton-Operator ist dann äquivalent zu der Bedingung an das Potential, dass

$$V(\boldsymbol{r}) = V^*(-\boldsymbol{r})\,, \tag{2.15}$$

was insbesondere für jedes symmetrische reelle Potential der Fall ist.

Wird die Forderung nach hermitezität des Hamilton-Operators $\mathcal{H}$, wonach nur reelle Potentiale $V$ erlaubt sind, durch die schwächere Forderung nach $\mathcal{PT}$-Symmetrie ersetzt, so können auch nicht-hermitesche Hamilton-Operatoren mit komplexen Potentialen $V = V_{\mathrm{r}} + \boldsymbol{i}V_{\mathrm{i}}$ verwendet werden. Das Potential muss dann einen symmetrischen Realteil und einen antisymmetrischen Imaginärteil bezüglich der Ortskoordinaten besitzen. Wie lässt sich jedoch ein komplexes Potential interpretieren?

Um diese Frage zu beantworten, wird nun die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \psi^*\psi$ am Ort $\boldsymbol{r}$ betrachtet. Die zeitliche Änderung der Norm eines Zustandes $\psi$ ist durch

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\psi\rangle = \langle\dot{\psi}|\psi\rangle + \langle\psi|\dot{\psi}\rangle = \boldsymbol{i}\langle\mathcal{H}\psi|\psi\rangle - \boldsymbol{i}\langle\psi|\mathcal{H}\psi\rangle \tag{2.16}$$

gegeben, wobei die dimensionslose Schrödinger-Gleichung $\boldsymbol{i}\partial_t|\psi\rangle = \mathcal{H}|\psi\rangle$ verwendet wurde. Für den Hamilton-Operator (2.13) ergibt sich dann im Ortsraum

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r})}{\partial t} = \frac{1}{2\boldsymbol{i}}\Big[(\Delta_{\boldsymbol{r}}\psi^*(\boldsymbol{r}))\psi(\boldsymbol{r}) - \psi^*(\boldsymbol{r})(\Delta_{\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r}))\Big] - \boldsymbol{i}(V(\boldsymbol{r}) - V^*(\boldsymbol{r}))\rho(\boldsymbol{r})\,. \tag{2.17}$$

Durch die Definitionen der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\boldsymbol{j} = (\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)/2\boldsymbol{i}$ und des Imaginärteils $V_{\mathrm{i}} = (V - V^*)/2\boldsymbol{i}$ kann die Gleichung (2.17) in der Form

$$\frac{\partial\rho(\boldsymbol{r})}{\partial t} + \nabla_{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = 2V_{\mathrm{i}}(\boldsymbol{r})\rho(\boldsymbol{r}) \tag{2.18}$$

geschrieben werden. Für ein reelles Potential, also $V_{\mathrm{i}} = 0$, entspricht (2.18) einer Kontinuitätsgleichung und die Wahrscheinlichkeit ist erhalten. Ein komplexes Potential, also

$V_\mathrm{i} \neq 0$, führt zu Wahrscheinlichkeitsqellen und -senken, also je nach Vorzeichen des Imaginärteils zu einer Zu- oder Abnahme der Wahrscheinlichkeitsdichte.

Die Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeit ist eine fundamentale Eigenschaft der hermiteschen Quantenmechanik und stellt einen grundlegenden Unterschied zur nicht-hermiteschen, jedoch $\mathcal{PT}$-symmetrischen Quantenmechanik dar. In einem Teilchenbild kann die Änderung der Gesamtwahrscheinlichkeit als Änderung der Gesamtteilchenzahl interpretiert werden. Die $\mathcal{PT}$-symmetrische Quantenmechanik bietet daher die Möglichkeit einer effektiven Beschreibung offener Quantensysteme.

## 2.3. $\mathcal{PT}$-symmetrisches Zweimodenmodell

Ein einfaches $\mathcal{PT}$-symmetrisches Modell ergibt sich aus der GPE (2.6) mit einem Doppelmuldenpotential [31, 36] und zeigt eine Reihe interessanter Phänomene [32–35]. Falls die Mulden tief genug sind, dann ist die Wellenfunktion effektiv an den Mulden lokalisiert und es kann ein Zweimodenmodell verwendet werden [37],

$$i\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g|\psi_1|^2 + i\gamma & -J \\ -J & g|\psi_2|^2 - i\gamma \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix}\,, \tag{2.19}$$

wobei $J \geq 0$ die Kopplung zwischen den beiden Mulden beschreibt und direkt mit der Barrierenhöhe zusammenhängt. Um ein $\mathcal{PT}$-symmetrisches Modell zu erhalten, wurde ein komplexes Potential mit antisymmetrischem Imaginärteil eingeführt, das mit der Rate $\gamma$ in der linken Mulde Teilchen ein- und in der rechten Mulde Teilchen auskoppelt, was in Abbildung 2.1 dargestellt ist. Die Besetzungszahlen der beiden Mulden sind jeweils durch $n_1 = |\psi_1|^2$ und $n_2 = |\psi_2|^2$ gegeben. Wie sich leicht zeigen lässt, ist das Modell (2.19) $\mathcal{PT}$-symmetrisch für $n_1 = n_2 \equiv n$, wobei die Raumspiegelung hier der Vertauschung der beiden Mulden entspricht, $\mathcal{P} : \psi_1 \leftrightarrow \psi_2$.

### 2.3.1. Stationäre Zustände

Das nichtlineare Zweimodenmodell (2.19) besitzt $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Lösungen mit den komplexen Eigenwerten $\mu$, welche gerade der Definition des chemischen Potentials für das Gesamtsystem entsprechen. Für $|\psi_1|^2 = |\psi_2|^2 = n$ lässt sich die zugehörige stationäre GPE schreiben als

$$(gn + i\gamma)\psi_1 - J\psi_2 = \mu\psi_1\,, \tag{2.20a}$$

$$(gn - i\gamma)\psi_2 - J\psi_1 = \mu\psi_2\,, \tag{2.20b}$$

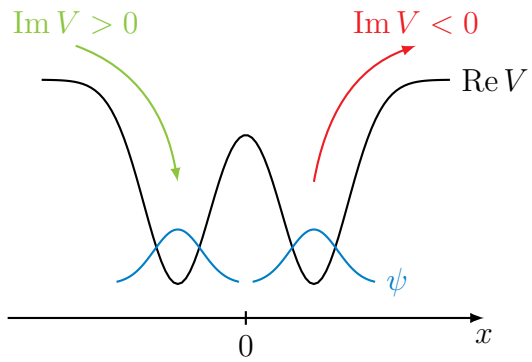



**Abbildung 2.1**: Ein komplexes Zweimuldenpotential $V$ mit einem symmetrischen Realteil und einem antisymmetrischen Imaginärteil, sodass in der linken Mulde Teilchen ein- und in der rechten Mulde Teilchen ausgekoppelt werden. Wenn die Mulden tief genug sind, so ist $\psi(x)$ nur bei den Mulden von Null verschieden, die Teilchen sind also dort lokalisiert. Die Darstellung erfolgt nach [68].

wobei der zeitabhängige Zustand dann im Allgemeinen durch $\boldsymbol{\psi}(t) = \exp(-\boldsymbol{i}\mu t)\boldsymbol{\psi}$ gegeben ist, mit den Einträgen der Wellenfunktion

$$\psi_1 = \sqrt{n}\,\mathrm{e}^{i\varphi}\,, \tag{2.21a}$$

$$\psi_2 = \sqrt{n}\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\,. \tag{2.21b}$$

Ein wichtiger Aspekt der $\mathcal{PT}$-symmetrischen Quantenmechanik ist die Existenz reeller Eigenwerte, entsprechend ist es auch in diesem Modell möglich ein rein reelles Eigenwertspektrum zu erhalten. Durch freie Wahl der globalen Phase können die Phasen der Einträge der Wellenfunktion stets antisymmetrisch wie in (2.21) gewählt werden. Die Gleichungen (2.20) sind dann bis auf das chemische Potential gerade komplex konjugiert zueinander, sodass

$$\mu = gn - J\cos(2\varphi) + \boldsymbol{i}[\gamma + J\sin(2\varphi)] = \mu^*\,, \tag{2.22}$$

wobei die Euler-Formel genutzt wurde. Diese Gleichung lässt sich nur für ein reelles chemisches Potential konsistent lösen. Es ist leicht zu erkennen, dass für

$$\gamma = -J\sin(2\varphi) \tag{2.23}$$

der Imaginärteil des chemischen Potentials verschwindet und es gilt

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{g}{2} - J\cos(2\varphi)\\ &= \frac{g}{2} - J\cos\left(\arcsin\left(-\frac{\gamma}{J}\right)\right)\\ &= \frac{g}{2} \pm \sqrt{J^2 - \gamma^2}\,,\end{aligned} \tag{2.24}$$

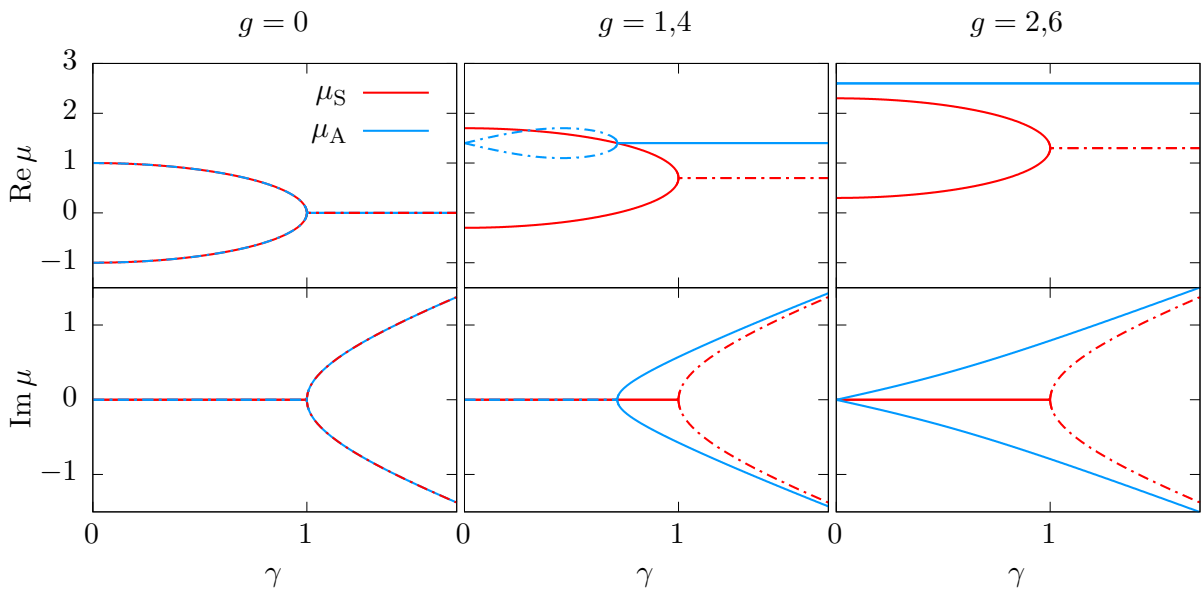



**Abbildung 2.2**: Real- und Imaginärteil des chemischen Potentials werden für unterschiedliche Werte der Nichtlinearitätsstärke $g$ und $J = 1$ entsprechend [45] als Funktion von $\gamma$ dargestellt. $\mu_S$ bezeichnet hierbei die $\mathcal{PT}$-symmetrischen Lösungen (2.24) mit (2.21), $\mu_A$ hingegen sind $\mathcal{PT}$-gebrochene Lösungen mit antisymmetrischen Besetzungszahlen. Die analytische Fortsetzung der reellen Lösungen sind gepunktet dargestellt.

wobei ausgenutzt wurde, dass $\cos(\arcsin x) = \pm\sqrt{1 - x^2}$.

Das chemische Potential (2.24) ist reell für $|\gamma| \leq J$, was dem $\mathcal{PT}$-symmetrischen Zustand entspricht. Bei $|\gamma| = J$ wird die $\mathcal{PT}$-Symmetrie gebrochen, was zu einer Bifurkation im Eigenwertspektrum führt, bei der komplexe Energien auftreten. Dies ist in Abbildung 2.2 für unterschiedliche Nichtlinearitätsstärken $g$ mit der Bezeichnung $\mu_S$ für die symmetrische Besetzung (2.21) dargestellt. Für $g > 0$ existieren auch antisymmetrische Lösungen, welche die $\mathcal{PT}$-Symmetrie bereits für $|\gamma| < J$ brechen, bei einer Nichtlinearitätsstärke von $g = 2J$ verschwindet der Bereich rein reeller Eigenwerte vollkommen. Grund hierfür ist die Nichtanalytizität der GPE [32, 37].

Eine Herleitung der symmetrischen und antisymmetrischen Lösungen in Abbildung 2.2 ist im Anhang A zu finden.

# 3. Bose-Hubbard-Modell

> I remember that when someone had started to teach me about creation and annihilation operators, that this operator creates an electron, I said, "how do you create an electron? It disagrees with the conservation of charge", and in that way, I blocked my mind from learning a very practical scheme of calculation.
>
> Richard Feynman

Das BHM wurde erstmals 1963 von Gersch und Knollman eingeführt [69] in Analogie zum fermionischen Hubbard-Modell [70]. Es wurde 1989 von Fisher *et al.* zur Untersuchung der Suprafluidität verwendet [71] und eignet sich zur Beschreibung ultrakalter Bosonen in einem optischen Gitter [72, 73]. Das fermionische Hubbard-Modell hingegen spielt eine große Rolle in der Festkörperphysik und kann entsprechend formuliert werden [74, 75].

## 3.1. Optische Potentiale

Optische Potentiale, erstmals 1968 vorgeschlagen [76], können sowohl zur Kühlung als auch zum Einfangen neutraler Atome verwendet werden [77–79] und stellen daher ein wichtiges Werkzeug zur Untersuchung ultrakalter Gase und insbesondere von BECs dar [80]. Eine optische Falle entsteht durch den dynamischen Stark-Effekt aufgrund der Wechselwirkung der Teilchen mit dem elektrischen Feld $\boldsymbol{E}$ des Laserstrahls. In Dipolnäherung ist das Wechselwirkungspotential gegen durch

$$V_{\mathrm{opt}}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{p}(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})\,, \tag{3.1}$$

wobei $\boldsymbol{p}$ das elektrische Dipolmoment bezeichnet. Für einen Einmodenlaser, dessen Frequenz $\omega_{\mathrm{L}}$ gerade der Übergangsfrequenz zwischen zwei Zuständen $|\mathrm{g}\rangle$ und $|\mathrm{e}\rangle$ entspricht, lässt sich das optische Potential (3.1) durch eine Jaynes-Cummings-Wechselwirkung der Form

$$V_{\mathrm{opt}}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{i}g(\boldsymbol{r})(\hat{\sigma}_+\hat{a}_{\mathrm{L}} - \hat{\sigma}_-\hat{a}_{\mathrm{L}}^\dagger) \tag{3.2}$$

mit den atomaren An- und Abregeoperatoren $\hat{\sigma}_+ = |\mathrm{e}\rangle\langle\mathrm{g}|$ und $\hat{\sigma}_- = |\mathrm{g}\rangle\langle\mathrm{e}|$ des Zweiniveausystems und den bosonischen Erzeugern und Vernichtern $\hat{a}_{\mathrm{L}}^\dagger$ und $\hat{a}_{\mathrm{L}}$ für Photonen des Lichtfeldes beschreiben [81]. Hierbei wurde die Drehwellennäherung (*Rotating Wave*

*Approximation*, RWA) zur Eliminierung dissipativer Anteile verwendet [82]. Die Kopplungskonstante $g$ der elektrischen Dipolwechselwirkung hängt vom Übergangsdipolmoment der Zustände $\langle \mathrm{e}|\boldsymbol{p}|\mathrm{g}\rangle$ sowie der räumlichen Modenfunktion des Lasers ab.

Das Potential (3.2) beschreibt zwei Prozesse, die Anregung in den oberen Zustand unter Absorption eines Photons, sowie die Emission eines Photons beim Übergang in den Grundzustand. Wird nun die Frequenz des Lasers stark gegenüber der Übergangsfrequenz $\omega_0$ mit $\Delta = \omega_\mathrm{L} - \omega_0$ und jenseits der Linienbreite verstimmt, so sind praktisch keine Anregungen $|\mathrm{g}\rangle \to |\mathrm{e}\rangle$ mehr möglich und die Energieverschiebung durch den dynamischen Stark-Effekt ergibt sich aus Störungstheorie zweiter Ordnung zu $V_\mathrm{dip}(\boldsymbol{r}) \propto I(\boldsymbol{r})/\Delta$, wobei $I(\boldsymbol{r})$ die Intensität des Lasers bezeichnet [83]. Auf das Atom wirkt dann eine Dipolkraft,

$$F_\mathrm{dip}(\boldsymbol{r}) = -\nabla V_\mathrm{dip}(\boldsymbol{r})\,. \tag{3.3}$$

Für einen blauverschobnen Laser mit $\Delta > 0$ ist das Potential repulsiv, die Kraft auf ein Teilchen bewegt dieses radial aus dem Fokus des Laserstrahls heraus, für einen rotverschobenen Laser mit $\Delta < 0$ hingegen ist das Potential attraktiv, daher können solche Dipolfallen als optische Pinzetten verwendet werden.

## 3.2. Fock-Darstellung

Im Folgenden soll eine kurze Einführung zur Fock-Darstellung kalter Bose-Gase in optischen Gittern erfolgen. Eine ausführliche Beschreibung optischer Gitter und eine Herleitung des BHM sind in [61, 83–86] zu finden.

### 3.2.1. Bose-Hubbard-Modell in einem optischen Gitter

Durch Überlagerung von Laserstrahlen lassen sich periodische optische Potentiale, sogenannte optische Gitter, erzeugen, welche den periodischen Potentialen in Festkörpern entsprechen. In dieser Arbeit wird ein eindimensionales Gitter betrachtet, erzeugt durch Überlagerung zweier Laserstrahlen. Es lassen sich jedoch entsprechend auch Gitter mit Dimensionen $d = 2$ und $d = 3$ durch Überlagerung von $2d$ Laserstrahlen erzeugen.

Für den einfachen Fall, dass die Strahlen zweier identischer, gegeneinander entlang der $z$-Achse ausgerichteter Laser mit Wellenlänge $\lambda_\mathrm{L}$ überlagert werden, ergibt sich eine stehende Welle mit einem periodischen Potential der Form

$$V_\mathrm{opt}(z) = V_0 \cos^2\!\left(\frac{\pi z}{d}\right), \tag{3.4}$$

wobei $V_0$ die Tiefe des Potentials und $d = \lambda_\mathrm{L}/2$ den Gitterabstand beschreiben, die Polarisationsrichtungen werden als parallel angenommen [85, 86]. Hierbei sei angemerkt,

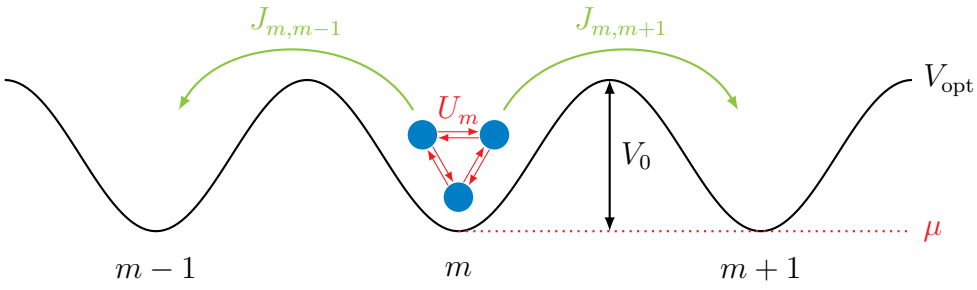



**Abbildung 3.1**: In einem ausreichend tiefen optischen Potential der Form (3.4) sind die Teilchen in den einzelnen Mulden lokalisiert und die Tunnelprozesse beschränken sich auf benachbarte Mulden mit Tunnelraten $J$. Innerhalb einer Mulde $m$ kommt es zu Wechselwirkungen $U_m$ zwischen den Teilchen. Die Tunnelprozesse liefern Beiträge zur kinetischen und die Wechselwirkungen Beiträge zur potentiellen Energie.

dass der Gitterabstand durch nichtparallele Strahlrichtungen vergrößert werden kann [87, 88].

Wie bereits in der Einleitung zu diesem Abschnitt erwähnt, entspricht ein periodisches optisches Potential (3.4) der Situation in einem Festkörper, entsprechend tritt auch hier eine Bandstruktur auf. Für BECs genügt jedoch die Beschränkung auf das niedrigste Bloch-Band, da alle Bosonen diesen Zustand einnehmen können und die Anregungen in höhere Bänder bei tiefen Temperaturen vernachlässigbar sind.

Falls die Mulden des Potentials (3.4) sehr tief sind, also $|V_0| \gg 1$, so sind die Teilchen an einzelnen Mulden, den Gitterplätzen, lokalisiert. Der Überlapp zwischen den Wellenfunktionen benachbarter Mulden ist dann sehr gering und Tunnelprozesse daher sehr unwahrscheinlich. Es lassen sich Operatoren $\hat{a}_m^\dagger$ und $\hat{a}_m$ zur Erzeugung und Vernichtung von Bosonen in der Mulde $m$ definieren. Ein Tunnelvorgang wird durch die Vernichtung eines Bosons in einer Mulde $m$ und die Erzeugung eines Bosons in einer anderen Mulde $m'$ beschrieben, also durch einen Operator $\hat{a}_{m'}^\dagger \hat{a}_m$, was einen Beitrag zur kinetischen Energie liefert. Doch wie sieht der Hamilton-Operator eines solchen Systems aus?

In Abbildung 3.1 sind Bosonen in einem periodischen Potential der Form (3.4) dargestellt, wobei Tunnelprozesse auf benachbarte Gitterplätze beschränkt sind. Der Beitrag einer Mulde $m$ zur kinetischen Energie ist durch

$$\mathcal{H}_{\text{kin}}^{(m)} = -J_{m,m-1}\hat{a}_{m-1}^\dagger \hat{a}_m - J_{m,m+1}\hat{a}_{m+1}^\dagger \hat{a}_m \tag{3.5}$$

gegeben, wobei die Tunnelraten $J$ die Wahrscheinlichkeit für den entsprechenden Vorgang beschreiben und symmetrisch sind. Die Tunnelprozesse von den Gitterplätzen $m \pm 1$ werden entsprechend $\mathcal{H}_{\text{kin}}^{(m\pm1)}$ zugeordnet.

Die potentielle Energie ist durch die Anzahl der Teilchen in einer Mulde bestimmt. Wird ein Teilchen einer Mulde hinzugefügt, so erhöht sich die potentielle Energie um

die Gitterpunktenergie, welche damit gerade der Definition des chemischen Potentials entspricht und mit $\mu$ bezeichnet werden soll. Falls sich mehr als ein Teilchen in einer Mulde befinden, dann treten Wechselwirkungen auf. Jedes der $n$ Teilchen wechselwirkt mit den restlichen $(n-1)$ Teilchen, was jeweils einen Beitrag von $U/2$ zur potentiellen Energie liefern soll. Der Faktor $1/2$ wurde eingeführt, damit $U$ gerade die gesamte Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen beschreibt. Zusammenfassend ist die potentielle Energie der Mulde $m$ durch

$$\mathcal{H}_{\text{pot}}^{(m)} = \frac{U_m}{2}\hat{n}_m(\hat{n}_m - 1) + \mu_m \hat{n}_m \tag{3.6}$$

mit dem Teilchenzahloperator $\hat{n}_m$ gegeben.

Die Summe über die kinetischen Energien (3.5) und die potentiellen Energien (3.6) aller Gitterplätze liefert den Hamilton-Operator

$$\mathcal{H}_{\text{BH}} = -\sum_{\langle m,m'\rangle} J_{mm'}\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{m'} + \frac{1}{2}\sum_m U_m \hat{n}_m(\hat{n}_m - 1) + \sum_m \mu_m \hat{n}_m \,, \tag{3.7}$$

wobei $\langle\cdot,\cdot\rangle$ die Summe über alle benachbarten Gitterplätze beschreibt. Die Parameter können natürlich im Allgemeinen auch zeitabhängig sein.

Üblicherweise wird das BHM ausgehend von der Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung (2.1) in zweiter Quantisierung hergeleitet. Dabei wird eine Basis aus stark an den Mulden lokalisierten Wannier-Funktionen eingeführt, womit sich die Gleichung (3.7) ableiten lässt. Eine Herleitung ausgehend von (2.1) ist in [89] zu finden.

### 3.2.2. Lexikographische Fock-Basis

Da die Teilchen in einem BEC ununterscheidbar sind, ist nur die Zahl der Teilchen in einer Mulde relevant für die Beschreibung des Systems. Da sich alle Bosonen bei ausreichend tiefer Temperatur im niedrigsten Bloch-Band befinden, gibt es pro Mulde des Potentials genau einen Zustand. Ein System mit $M$ Gitterplätzen lässt sich dann mit Fock-Zuständen $|n_1, \ldots, n_M\rangle$ beschreiben, wobei $n_m \in \mathbb{N}_0$ die Besetzungszahl der Mulde $m$ bezeichnet.

Die im vorhergehenden Kapitel eingeführten Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren können dann wie üblich definiert werden,

$$\hat{a}_m^\dagger |\ldots, n_m, \ldots\rangle = \sqrt{n_m + 1}\,|\ldots, n_m + 1, \ldots\rangle \,, \tag{3.8a}$$

$$\hat{a}_m |\ldots, n_m, \ldots\rangle = \sqrt{n_m}\,|\ldots, n_m - 1, \ldots\rangle \,, \tag{3.8b}$$

und erfüllen die bosonischen Kommutatorrelationen

$$[\hat{a}_m, \hat{a}_l^\dagger] = \delta_{kl} \,. \tag{3.8c}$$

Aus den Gleichungen (3.8a) und (3.8b) ist leicht ersichtlich, dass der Teilchenzahloperator durch

$$\begin{aligned}\hat{n}_m|\ldots,n_m,\ldots\rangle &= \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m|\ldots,n_m,\ldots\rangle \\ &= \hat{a}_m^\dagger \sqrt{n_m}\,|\ldots,n_m-1,\ldots\rangle \\ &= n_m|\ldots,n_m,\ldots\rangle \end{aligned} \tag{3.9}$$

gegeben ist. Die Gesamtteilchenzahl des Systems ist erhalten, da der Hamilton-Operator (3.7) invariant unter einer globalen U(1) Transformation $\hat{a}_m \to \exp(\boldsymbol{i}\varphi)\hat{a}_m$ ist und somit mit dem Gesamtteilchenzahloperator

$$\mathcal{N} = \sum_{m=1}^{M} \hat{n}_m \tag{3.10}$$

kommutiert.

Für $N$ Teilchen in $M$ Mulden lässt sich nun eine Basis aus Fock-Zuständen finden, welche die Bedingung $\sum_{m=1}^{M} n_m = N$ erfüllen. Jeder Fock-Zustand besteht dabei aus $(N+M-1)$ Elementen, welche die $N$ Teilchen umfassen, die von $(M-1)$ Potentialbarrieren getrennt werden. Die Dimension einer derartigen Basis entspricht dann dem einfachen kombinatorischen Problem die $N$ Teilchen in einem Fock-Zustand mit $(N+M-1)$ Elementen zu verteilen,

$$D(N,M) = \binom{N+M-1}{N}. \tag{3.11}$$

Hierbei sei angemerkt, dass die Verteilung der $(M-1)$ Potentialbarrieren natürlich eine äquivalente Sichtweise darstellt und zum selben Ergebnis führt.

Eine Fock-Basis lässt sich sehr effizient in lexikographischer Ordnung erzeugen [90, 91], wobei für zwei Fock-Zustände $|\psi\rangle = |n_1,\ldots,n_M\rangle$ und $|\psi'\rangle = |n'_1,\ldots,n'_M\rangle$ gilt, dass $|\psi'\rangle < |\psi\rangle$, genau dann wenn ein Index $1 \leq m \leq M$ existiert, sodass $n'_{k<m} = n_{k<m}$ und $n'_k < n_k$. Dies definiert eine totale Ordnung, wobei $|N,0,\ldots,0\rangle$ den höchsten und $|0,\ldots,0,N\rangle$ den niedrigsten Zustand darstellen.

### 3.2.3. Lexikographischer Index

Mit einer lexikographischen Fock-Basis kann nun der Hamilton-Operator (3.7) in Matrixform geschrieben werden. Der potentielle Anteil bildet dabei die Diagonale, wie leicht an den Gleichungen (3.6) und (3.9) zu erkennen ist. Der kinetische Anteil (3.5) hingegen verändert den Definitionen (3.8a) und (3.8b) entsprechend den Fock-Zustand. Da die Fock-Zustände orthogonal zueinander sind, verschwinden bereits viele Nebendiagonaleinträge, sodass die Matrix nur spärlich besetzt ist. Daher genügt es, nur die nichtverschwindenden Nebendiagonaleinträge zu berechnen. Um deren Position innerhalb

**Tabelle 3.1**: Beispiel für eine lexikographische Fock-Basis mit $N = M = 3$. Innerhalb jeder Spalte nehmen die Besetzungszahlen $n_m$, für $n_{k<m}$ fest, ab, was eine totale Ordnung darstellt.

| $\nu$ | $n_1$ | $n_2$ | $n_3$ |
|---|---|---|---|
| 1 | 3 | 0 | 0 |
| 2 | 2 | 1 | 0 |
| 3 | 2 | 0 | 1 |
| 4 | 1 | 2 | 0 |
| 5 | 1 | 1 | 1 |
| 6 | 1 | 0 | 2 |
| 7 | 0 | 3 | 0 |
| 8 | 0 | 2 | 1 |
| 9 | 0 | 1 | 2 |
| 10 | 0 | 0 | 3 |

der Matrix zu finden, wird eine Vorschrift benötigt, welche jedem Fock-Zustand seinen lexikographischen Index zuweist.

Im Folgenden soll ein Fock-Zustand $|\psi\rangle = |n_1, \ldots, n_M\rangle$ mit $\sum_{m=1}^{M} n_m = N$ betrachtet werden, der Element einer lexikographischen Basis ist. In Tabelle 3.1 ist ein Beispiel einer solchen Fock-Basis dargestellt, es ist leicht zu erkennen, dass die Besetzungszahlen $n_1$ in der ersten Spalte stets abnehmen. Die Anzahl der Zustände mit einem bestimmten $n_1$ entspricht der Anzahl der Möglichkeiten $(N - n_1)$ Teilchen auf $(M - 1)$ Gitterplätze zu verteilen und ist gerade durch $D(N - n_1, M - 1)$ aus Gleichung (3.11) gegeben. Jeder Block mit festem $n_1$ beginnt daher beim Index

$$\nu(n_1) = 1 + \sum_{\tilde{n}=0}^{N-n_1-1} D(\tilde{n}, M - 1)\,. \tag{3.12}$$

Der höchste Fock-Zustand mit $n_1 = N$ soll aus der Summe ausgeschlossen sein und wird durch $\nu = 1$ berücksichtigt.

Ein Block mit einem bestimmten $n_1$ bildet einen Unterraum mit Teilchenzahl $N' = (N - n_1)$ und $M' = (M - 1)$ Gitterplätzen, die zugehörigen Fock-Zustände sind $|\psi'\rangle = |n_2, \ldots, n_M\rangle$. Daher kann die soeben gezeigte Vorgehensweise iterativ angewandt werden, was für $m \in [1, M]$ auf weitere Unterräume mit $(N - \sum_{k=1}^{m} n_k) \equiv N_m$ Teilchen auf $(M - m) \equiv M_m$ Gitterplätzen führt, wobei $\sum_{k=1}^{m} n_k$ die Gesamtheit der auf den ersten $m$ Gitterplätzen verteilten Teilchen darstellt. Insgesamt ergibt sich der Index für einen

beliebigen Zustand zu

$$\nu(n_1, \ldots, n_M) = 1 + \sum_{m=1}^{M-1} \sum_{\tilde{n}=0}^{N_m-1} D(\tilde{n}, M_m)\,. \tag{3.13}$$

Hierbei sollte bemerkt werden, dass die Summe nur über die ersten $(M-1)$ Einträge des Fock-Zustandes läuft, da die Information über den letzten Eintrag bereits in der Nebenbedingung $\sum_{m=1}^{M} n_m = N$ enthalten ist.

Mit dem lexikographischen Index (3.13) ist es prinzipiell möglich, die Matrixeinträge des Hamilton-Operators (3.7) zu berechnen. Die Auswertung der geschachtelten Summen ist jedoch aufwendig und stellt damit einen begrenzenden Faktor für die Implementation dar. Dabei ist es gar nicht notwendig, den Index global auszuwerten, es genügt die Verschiebung des Indexes durch einen Sprungterm der Form $\hat{a}^\dagger_{m'}\hat{a}_m$ zu berechnen [89]. Für die Verschiebung $s$ zwischen einem Zustand $|\psi\rangle$ vor und $|\psi'\rangle$ nach dem Sprung eines Teilchens zwischen den Gitterplätzen $k$ und $l > k$ gilt

$$\begin{aligned} s_{k<l} &= \nu'(\ldots, n'_k, \ldots, n'_l, \ldots) - \nu(\ldots, n_k, \ldots, n_l, \ldots) \\ &= \sum_{m=k}^{l-1} \left[ \sum_{\tilde{n}=0}^{N'_m-1} D(\tilde{n}, M_m) - \sum_{\tilde{n}=0}^{N_m-1} D(\tilde{n}, M_m) \right], \end{aligned} \tag{3.14}$$

wobei $N'_m = (N - \sum_{k=1}^{m} n'_k)$ und ausgenutzt wurde, dass $\sum_m n_m = \sum_m n'_m$ sowohl für $m < k$ als auch für $m \geq l$ gilt.

Es gibt nun zwei Möglichkeiten für so einen Sprung:

1. Das Teilchen springt vom Gitterplatz $l$ zum Gitterplatz $k$, sodass $n'_k = (n_k + 1)$. Dann lässt sich die obere Grenze der ersten Summe in (3.14) umschreiben zu $(N_m - 2)$ und übrig bleibt ein Element der zweiten Summe,

$$s_{k<l} = -\sum_{m=k}^{l-1} D(N_m - 1, M_m)\,, \tag{3.15}$$

   was einer Verschiebung hin zu einem kleineren Index entspricht.

2. Das Teilchen springt vom Gitterplatz $k$ zum Gitterplatz $l$, sodass $n'_k = (n_k - 1)$. Dann lässt sich die obere Grenze der ersten Summe in (3.14) umschreiben zu $N_m$, in diesem Fall bleibt ein Element der ersten Summe übrig,

$$s_{k<l} = \sum_{m=k}^{l-1} D(N_m, M_m)\,, \tag{3.16}$$

   was einer Verschiebung hin zu einem größeren Index entspricht.

Für $k > l$ müssen lediglich die Indizes in den Gleichungen (3.15) und (3.16) vertauscht werden, sodass sich mit $\tilde{m} \equiv \min(k, l)$ und $\widetilde{M} \equiv \max(k, l)$ allgemein die lexikographische Sprungverschiebung

$$s_{kl} = \begin{cases} -\sum\limits_{m=\tilde{m}}^{\widetilde{M}-1} D(N_m - 1, M_m) & n'_{\tilde{m}} > n_{\tilde{m}} \\ \sum\limits_{m=\tilde{m}}^{\widetilde{M}-1} D(N_m, M_m) & n'_{\tilde{m}} < n_{\tilde{m}} \end{cases} \tag{3.17}$$

ergibt. Da die Sprünge im kinetischen Anteil des BHM (3.7) nur zwischen benachbarten Gitterplätzen geschehen, reduzieren sich die Summen in Gleichung (3.17) auf nur einen Binomialkoeffizienten der Form (3.11), sodass ein Sprung mit sehr wenig Aufwand ausgewertet werden kann. Jedoch können auch beliebige Sprünge, beschrieben durch Operatoren, die immer paarweise Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren enthalten, ausgewertet werden, was einer Folge sukzessiver Nächster-Nachbar-Sprünge entspricht.

## 3.3. Mean-Field

Die Auswertung des BHM ist trotz der Überlegungen aus den vorhergehenden Abschnitten sehr aufwendig und muss numerisch erfolgen. Mit den heutigen technischen Mitteln sind aber dennoch nur geringe Gesamtteilchenzahlen zugänglich, da die Dimension des Hilbertraums schnell wächst. Um das zu verdeutlichen, wird Gleichung (3.11) betrachtet,

$$D(N, M) = \frac{(N + M - 1)!}{N!(M - 1)!} = \frac{(N + 1) \cdots (N + M - 1)}{(M - 1)!} \,. \tag{3.18}$$

Im Zähler stehen $(M-1)$ Terme, sodass die Dimension ein Polynom der Ordnung $(M-1)$ in $N$ darstellt. Für $N \to \infty$ und $N \gg M$ genügt es, den führenden Term zu beachten, was ein Potenzgesetz liefert,

$$D(N, M) \sim \frac{N^{(M-1)}}{(M - 1)!} \,. \tag{3.19}$$

Für große Teilchenzahlen wächst die Dimension also polynomial mit $N$ und exponentiell mit $M$. Es ist daher sinnvoll Näherungen für das BHM einzuführen, wobei es hierfür vielfältige Möglichkeiten gibt [92, 93].

Bei der MF-Näherung, oder auch Molekularfeldnäherung, wird die Wechselwirkung zwischen den Teilchen durch ein äußeres Feld ersetzt, welches die mittlere Wirkung aller Teilchen beschreibt, was effektiv einer Einteilchennäherung entspricht.

Ein BEC in einem Potential mit $M$ Gitterplätzen besitzt entsprechend $M$ Zustände, die über alle Mulden delokalisiert sind. Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Teilchen an den Gitterplätzen lassen sich in die Basis der Kondensatzustände, beschrieben durch entpsprechende Operatoren $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$, transformieren,

$$\hat{a}_k^\dagger = \sum_{l=0}^{M-1} c_{kl}^* \hat{b}_l^\dagger \,, \tag{3.20a}$$

$$\hat{a}_k = \sum_{l=0}^{M-1} c_{kl} \hat{b}_l \,, \tag{3.20b}$$

mit $c_{k,l} \in \mathbb{C}$. Die Operatoren $\hat{b}$ und $\hat{b}^\dagger$ besitzen wiederum die Eigenschaften (3.8), wobei die zugehörigen Besetzungszahlen $n'$ nun die Kondensatzustände beschreiben und die Nummerierung bei 0, dem Grundzustand, beginnt.

Für sehr geringe Temperaturen kann angenommen werden, dass der Grundzustand, der nicht entartet sein soll, sehr viel stärker besetzt ist als die angeregten Zustände,

$$|\mathrm{g}\rangle = \left| N - \sum_{k=1}^{M-1} n'_k, n'_2, \cdots, n'_{M-1} \right\rangle . \tag{3.21}$$

Die SPDM $\sigma^{(1)}$ besitzt dann einen makroskopisch besetzten Eigenwert, der dem Grundzustand zugeordnet werden kann. Die angeregten Zustände sind mit $n'_k \equiv f_k N$ für $k \in [1, M-1]$ besetzt, wobei $f_k \ll 1$ dann gerade die entsprechenden Eigenwerte der reduzierten SPDM $\sigma^{(1)}_{\mathrm{red}} = \sigma^{(1)}/N$ beschreiben,

$$\sigma^{(1)}_{\mathrm{red}} = \begin{pmatrix} 1 - \sum_{k=1}^{M-1} f_k & & & \\ & f_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & f_{M-1} \end{pmatrix} . \tag{3.22}$$

Die Änderung durch Erzeugung und Vernichtung von Teilchen im Grundzustand ist aufgrund der großen Besetzung vernachlässigbar, denn

$$\begin{aligned} \hat{b}_0^\dagger |\mathrm{g}\rangle &= \sqrt{N + 1 - \sum_{k=1}^{M-1} n'_k} \left| N + 1 - \sum_{k=1}^{M-1} n'_k, n'_1, \ldots, n'_{M-1} \right\rangle \\ &\approx \underbrace{\sqrt{N - \sum_{k=1}^{M-1} n'_k}}_{\equiv b_0} \underbrace{\left| N - \sum_{k=1}^{M-1} n'_k, n'_1, \ldots, n'_{M-1} \right\rangle}_{|\mathrm{g}\rangle} , \end{aligned} \tag{3.23a}$$

$$\hat{b}_0 |\mathrm{g}\rangle = \sqrt{N - \sum_{k=1}^{M-1} n'_k} \left| N - 1 - \sum_{k=1}^{M-1} n'_k, n'_1, \ldots, n'_{M-1} \right\rangle \approx b_0 |\mathrm{g}\rangle \,, \tag{3.23b}$$

sodass die Operatoren durch komplexe Zahlen ersetzt werden können und der Unterschied zwischen $\hat{b}^\dagger$ und $\hat{b}$ verschwindet. Mit den Gleichungen (3.20) ergeben sich

$$\hat{a}_k^\dagger = c_{k0}^* b_0 + \sum_{l=1}^{M-1} c_{kl}^* \hat{b}_l^\dagger \equiv a_k^* + \delta\hat{a}_k^\dagger \,, \tag{3.24a}$$

$$\hat{a}_k = c_{k0} b_0 + \sum_{l=1}^{M-1} c_{kl} \hat{b}_l \equiv a_k + \delta\hat{a}_k \,, \tag{3.24b}$$

wobei $\delta\hat{a}^\dagger$ und $\delta\hat{a}$ die Quantenkorrekturen zu den komplexen Zahlen $a^*$ und $a$, welche als Mittelwerte interpretiert werden können, darstellen.

Um nun für das BHM (3.7) eine entsprechende MF-Theorie zu formulieren, werden die Heisenberg-Bewegungsgleichungen der Operatoren $\hat{a}$ aufgestellt,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{a}_k = [\hat{a}_k, \mathcal{H}_{\mathrm{BH}}] = -J_{k,k-1}\hat{a}_{k-1} - J_{k,k+1}\hat{a}_{k+1} + U_k\hat{n}_k\hat{a}_k + \mu_k\hat{a}_k \,, \tag{3.25}$$

die entsprechenden Bewegungsgleichungen für den Erzeugungsoperator ergeben sich durch Adjunktion. Für sehr tiefe Temperaturen kann wiederum angenommen werden, dass nur der Grundzustand besetzt ist und Anregungen in höhere Zustände sehr unwahrscheinlich sind, sodass $|\mathrm{g}\rangle \sim |N, 0, \ldots\rangle$ und $c_{kl} \ll c_{k0}$ für $T \to 0$. Dann können die Quantenkorrekturen in (3.24) vernachlässigt werden und es gilt $\hat{a}_k \approx a_k \equiv \psi_k$ und damit

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_k = -J_{k,k-1}\psi_{k-1} - J_{k,k+1}\psi_{k+1} + U_k n_k \psi_k + \mu_k\psi_k \,, \tag{3.26}$$

was der diskreten GPE entspricht, die aus der kontinuierlichen Gleichung (2.6) etwa mit einem Ansatz aus gekoppelten Gauß-Funktionen folgt [31, 44, 94]. Der Vektor $\boldsymbol{\psi}$ beschreibt dabei die MF-Wellenfunktion.

Es sei bemerkt, dass die Gleichung (3.26) lediglich die niedrigste Ordnung der MF-Näherung darstellt und Operatoreigenschaften in Form von Quantenkorrekturen gänzlich vernachlässigt werden. Es ist natürlich möglich, eine MF-Näherung höherer Ordnung zu formulieren, welche zusätzliche Anregungen berücksichtigt, jedoch weisen solche Theorien einige Probleme auf [92]. Da die Teilchenzahl in realistischen Kondensaten und damit in den meisten Experimenten sehr groß ist und die Bose-Einstein-Kondensation ohnehin erst bei sehr geringen Temperaturen auftritt, ist bereits die MF-Näherung in niedrigster Ordnung nützlich und erlaubt überaus erfolgreich eine einfache Beschreibung grundlegender Phänomene in diesem Gebiet.

## 3.4. Bogoliubov-Backreaction

Eine MF-Näherung beschreibt ein System bei hoher Teilchenzahl ausreichend gut, da in diesem Bereich die Einteilchendynamik dominiert. Im Grenzfall geringer Teilchenzahlen

werden jedoch die Quantenkorrekturen wichtig, die im MF vernachlässigt werden. In diesem Abschnitt sollen eine alternative Sichtweise auf das Vielteilchenproblem und eine Näherung vorgestellt werden, welche über das MF hinausgeht.

### 3.4.1. BBGKY-Hierarchie

Aus Abschnitt 3.2 ist bekannt, dass der Hamilton-Operator (3.7) die Dynamik eines BECs in einem optischen Gitter zusammen mit der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \mathcal{H}|\psi\rangle \tag{3.27}$$

beschreibt. Die Schrödinger-Gleichung erfasst jedoch lediglich die Zeitentwicklung reiner Zustände, welche Elemente des Hilbert-Raumes sind. Im Allgemeinen müssen statistische Operatoren $\hat{\rho}$ mit $\mathrm{tr}(\hat{\rho}) = 1$ zur Beschreibung eines Vielteilchensystems verwendet werden, deren Erwartungswerte $\rho = \langle\hat{\rho}\rangle$ als Dichtematrizen bezeichnet werden. Die Dynamik wird dann von der Von-Neumann-Gleichung

$$i\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = [\mathcal{H}, \hat{\rho}]\ , \tag{3.28}$$

dem quantenmechanischen Analogon der Liouville-Gleichung, beschrieben. Für reine Zustände $|\psi\rangle$ stellt die Dichtematrix einen Projektionsoperator $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ dar und die Von-Neumann-Gleichung (3.28) geht in die Schrödinger-Gleichung (3.27) über.

Die Erwartungswerte beliebiger jedoch nicht explizit zeitabhängiger Operatoren $\hat{\sigma}$ und deren Zeitableitungen lassen sich wie folgt darstellen,

$$\langle\hat{\sigma}\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\sigma}\hat{\rho})\,, \tag{3.29a}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\sigma}\rangle = \mathrm{tr}\left(\hat{\sigma}\, i\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}\right) = \mathrm{tr}(\hat{\sigma}\,[\mathcal{H}, \hat{\rho}]) = \mathrm{tr}([\hat{\sigma}, \mathcal{H}]\,\hat{\rho}) = \langle[\hat{\sigma}, \mathcal{H}]\rangle\,, \tag{3.29b}$$

wobei hierbei die Gleichung (3.28) verwendet sowie die Linearität der Spur und deren Invarianz gegenüber zyklischer Permutationen ausgenutzt wurden. Das Ergebnis (3.29b) stellt die Heisenberg-Bewegungsgleichung für eine nicht explizit zeitabhängige Matrix $\sigma = \langle\hat{\sigma}\rangle$ dar.

Wie in Kapitel 2 bereits erwähnt, sind die gesamten Einteilcheneigenschaften eines Systems in der SPDM $\sigma^{(1)}$ enthalten. Für das BHM sind die Einträge der SPDM gerade durch

$$\sigma^{(1)}_{kl} = \langle\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}\rangle = \langle\hat{a}^{\dagger}_k\hat{a}_l\rangle \tag{3.30}$$

gegeben mit dem Einteilchendichteoperator $\hat{\sigma}^{(1)}_{kl} = \hat{a}^{\dagger}_k\hat{a}_l$, welcher den kinetischen Term im BHM darstellt, und den Operatoren (3.8a) und (3.8b). Die Dynamik der SPDM

hängt lediglich von den Kommutatoren $\left[\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}, \mathcal{H}_{\mathrm{BH}}\right]$ ab, die sich mithilfe des elementaren Kommutators (3.8c) leicht berechnen lassen. Dazu kann das BHM unter Verwendung der Gleichungen (3.8c) und (3.30) umgeschrieben werden zu

$$\mathcal{H}_{\mathrm{BH}} = -\sum_{\langle m,m'\rangle} J_{mm'}\hat{\sigma}^{(1)}_{mm'} + \frac{1}{2}\sum_{m} U_m \hat{\sigma}^{(2)}_{mmmm} + \sum_{m} \mu_m \hat{\sigma}^{(1)}_{mm}\,. \tag{3.31}$$

Dabei wurden die Zweiteilchendichteoperatoren $\hat{\sigma}^{(2)}_{klmn} = \hat{a}^{\dagger}_k \hat{a}^{\dagger}_l \hat{a}_m \hat{a}_n$ eingeführt, welche entsprechend die Zweiteilcheneigenschaften des Systems und damit die Kontaktwechselwirkung beschreiben. Damit ergibt sich für den Kommutator

$$\begin{aligned}\left[\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}, \mathcal{H}_{\mathrm{BH}}\right] = {} & J_{k-1,k}\hat{\sigma}^{(1)}_{k-1,l} + J_{k+1,k}\hat{\sigma}^{(1)}_{k+1,l} - J_{l,l-1}\hat{\sigma}^{(1)}_{k,l-1} - J_{l,l+1}\hat{\sigma}^{(1)}_{k,l+1} \\ & - U_k \hat{\sigma}^{(2)}_{kkkl} + U_l \hat{\sigma}^{(2)}_{klll} - (\mu_k - \mu_l)\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}\end{aligned} \tag{3.32}$$

und durch Bildung des Erwartungswertes auch die zeitliche Änderung der SPDM $\sigma^{(1)}$. Für eine nichtverschwindende Kontaktwechselwirkungsstärke $U$ ist die Dynamik der SPDM an die der Zweiteilchendichtematrix gekoppelt, für die sich die Dynamik entsprechend ergibt,

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\sigma^{(2)}_{klmn} &= \langle\left[\hat{\sigma}^{(2)}_{klmn}, \mathcal{H}_{\mathrm{BH}}\right]\rangle = \langle\left[\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}\hat{\sigma}^{(1)}_{mn}, \mathcal{H}_{\mathrm{BH}}\right]\rangle \\ &= \langle\left[\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}, \mathcal{H}_{\mathrm{BH}}\right]\hat{\sigma}^{(1)}_{mn}\rangle + \langle\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}\left[\hat{\sigma}^{(1)}_{mn}, \mathcal{H}_{\mathrm{BH}}\right]\rangle\,. \end{aligned} \tag{3.33}$$

Hierbei taucht wiederum der Kommutator einer SPDM mit dem Hamilton-Operator (3.7) auf. Es ist leicht zu sehen, dass dieser Term nun Dreiteilchenoperatoren $\hat{\sigma}^{(3)}_{klmnrs}$ enthält.

Die vollständige Dynamik wird also durch eine Hierarchie gekoppelter Differentialgleichungen beschrieben,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}\rangle = f\Big(\langle\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}\rangle, \langle\hat{\sigma}^{(2)}_{klmn}\rangle\Big)\,, \tag{3.34a}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\sigma}^{(2)}_{klmn}\rangle = f\Big(\langle\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}\rangle, \langle\hat{\sigma}^{(2)}_{klmn}\rangle, \langle\hat{\sigma}^{(3)}_{klmnrs}\rangle\Big)\,, \tag{3.34b}$$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{\sigma}^{(3)}_{klmnrs}\rangle = f\Big(\langle\hat{\sigma}^{(1)}_{kl}\rangle, \langle\hat{\sigma}^{(2)}_{klmn}\rangle, \langle\hat{\sigma}^{(3)}_{klmnrs}\rangle, \langle\hat{\sigma}^{(4)}_{klmnrsqp}\rangle\Big)\,, \tag{3.34c}$$

$$\vdots$$

Dies entspricht der BBGKY-Hierarchie (nach Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood und Yvon) [95–99], die zur Lösung der Liouville-Gleichung verwendet wird. Es handelt sich dabei um einen Satz gekoppelter Differentialgleichungen, in der jede Ordnung an die nächsthöhere gekoppelt ist. Für ein Vielteilchensystem bricht diese Hierarchie beim $N$-Teilchendichteoperator zusammen, da dieser alle $N$ Teilchen des Systems bereits

vernichtet und jeder Dichteoperator höherer Ordnung damit verschwinden muss. Die Teilchen sind hierbei natürlich noch immer ununterscheidbar.

Wie im letzten Abschnitt gezeigt wurde, können Operatoren, welche Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren paarweise enthalten, besonders einfach und effizient ausgewertet werden. Ebenso, wie die Gleichungen (3.7) und (3.31) das BHM vollkommen äquivalent beschreiben, kann auch die BBGKY-Hierarchie mit derartigen Vielteilchenoperatoren beschrieben werden. Mit $\hat{\tilde{\sigma}}^{(2)}_{kmln} \equiv \hat{a}^\dagger_k \hat{a}_m \hat{a}^\dagger_l \hat{a}_n$ und (3.8c) ergibt sich für die Zweiteilchendichteoperatoren die Beziehung

$$\hat{\sigma}^{(2)}_{klmn} = \hat{\tilde{\sigma}}^{(2)}_{kmln} - \hat{\sigma}^{(1)}_{kn}\delta_{lm}\,, \tag{3.35}$$

womit sich der Kommutator (3.32) umschreiben lässt. Für die ersten beiden Ordnungen der entsprechenden Hierarchie folgt also

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\sigma^{(1)}_{kl} &= J_{k-1,k}\sigma^{(1)}_{k-1,l} + J_{k+1,k}\sigma^{(1)}_{k+1,l} - J_{l,l-1}\sigma^{(1)}_{k,l-1} - J_{l,l+1}\sigma^{(1)}_{k,l+1} \\ &\quad - U_k\Big(\sigma^{(2)}_{kkkl} - \sigma^{(1)}_{kl}\Big) + U_l\Big(\sigma^{(2)}_{klll} - \sigma^{(1)}_{kl}\Big) - (\mu_k - \mu_l)\sigma^{(1)}_{kl}\,, \end{aligned} \tag{3.36a}$$

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\sigma^{(2)}_{klmn} &= J_{k-1,k}\sigma^{(2)}_{k-1,lmn} + J_{k+1,k}\sigma^{(2)}_{k+1,lmn} \\ &\quad - J_{l,l-1}\sigma^{(2)}_{k,l-1,mn} - J_{l,l+1}\sigma^{(2)}_{k,l+1,mn} \\ &\quad + J_{m-1,m}\sigma^{(2)}_{kl,m-1,n} + J_{m+1,m}\sigma^{(2)}_{kl,m+1,n} \\ &\quad - J_{n,n-1}\sigma^{(2)}_{klm,n-1} - J_{n,n+1}\sigma^{(2)}_{klm,n+1} \\ &\quad - U_k\Big(\sigma^{(3)}_{kkklmn} - \sigma^{(2)}_{klmn}\Big) + U_l\Big(\sigma^{(3)}_{klllmn} - \sigma^{(2)}_{klmn}\Big) \\ &\quad - U_m\Big(\sigma^{(3)}_{klmmmn} - \sigma^{(2)}_{klmn}\Big) + U_n\Big(\sigma^{(3)}_{klmnnn} - \sigma^{(2)}_{klmn}\Big) \\ &\quad - (\mu_k - \mu_l + \mu_m - \mu_n)\sigma^{(2)}_{klmn}\,, \end{aligned} \tag{3.36b}$$

wobei der Einfachheit halber auf die spezielle Kennzeichnung der Zweiteilchenoperatoren $\tilde{\sigma}$ gegenüber der Vielteilchendichteoperatoren verzichtet wurde. Im Folgenden bezeichnet $\sigma$ stets Operationen, die paarweise Teilchen vernichten und erzeugen.

### 3.4.2. BBR-Methode

Die bereits besprochene MF-Näherung ist nur für sehr große Teilchenzahlen $N$ bei sehr geringen Temperaturen $T$ sinnvoll. Auch wenn diese Bedingungen in vielen Experimenten vorliegen, ist die Näherung dennoch enorm. Nach einem Vorschlag von Anglin und Vardi [100, 101] wird in dieser Arbeit eine weitere Näherung der exakten Vielteilchendynamik betrachtet, die BBR.

Hierbei werden die Überlegungen aus dem Abschnitt 3.3 nochmals aufgegriffen, ausgehend von den Gleichungen

$$\hat{a}^\dagger_k = a^*_k + \delta\hat{a}^\dagger_k\,, \tag{3.24a}$$

$$\hat{a}_k = a_k + \delta\hat{a}_k \,. \tag{3.24b}$$

In Gleichung (3.23a) ist zu erkennen, dass $a_k \in \mathcal{O}(\sqrt{N}\,)$ und entsprechend $a_k^* \in \mathcal{O}(\sqrt{N}\,)$. Für die angeregten Zustände gilt

$$\hat{b}_k^\dagger \Big| \ldots, n_k', \ldots \Big\rangle = \underbrace{\sqrt{n_k' + 1}}_{\sqrt{f_k N + 1} \in \mathcal{O}(\sqrt{f_k N}\,)} \Big| \ldots, n_k' + 1, \ldots \Big\rangle \,, \tag{3.38a}$$

$$\hat{b}_k \Big| \ldots, n_k', \ldots \Big\rangle = \underbrace{\sqrt{n_k'}}_{\sqrt{f_k N} \in \mathcal{O}(\sqrt{f_k N}\,)} \Big| \ldots, n_k' - 1, \ldots \Big\rangle \,, \tag{3.38b}$$

sodass $\delta\hat{a}_k \in \mathcal{O}(\sqrt{fN}\,)$ und $\delta\hat{a}_k^\dagger \in \mathcal{O}(\sqrt{fN}\,)$, wobei $\sqrt{f} = \max_k \sqrt{f_k}$. Hierbei wird nochmals deutlich, warum die Quantenkorrekturen für sehr geringe Temperaturen, bei denen $f \ll 1$ gilt, vernachlässigbar sind.

Die BBR Näherung setzt nun direkt an der BBGKY-Hierarchie (3.34) an. Hierfür werden mit (3.24) die Einteilchendichteoperatoren betrachtet,

$$\hat{\sigma}_{kl}^{(1)} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l = \underbrace{a_k^* a_l}_{\in \mathcal{O}(N)} + \underbrace{a_k^* \delta\hat{a}_l + \delta\hat{a}_k^\dagger a_l}_{\in \mathcal{O}(\sqrt{f}\,N)} + \underbrace{\delta\hat{a}_k^\dagger \delta\hat{a}_l}_{\in \mathcal{O}(fN)} \,. \tag{3.39}$$

Für $f \ll 1$ gilt insbesondere $f \ll \sqrt{f}$ und der letzte Term in (3.39) kann vernachlässigt werden, sodass

$$\hat{\sigma}_{kl}^{(1)} = \sigma_{kl} + \delta\hat{\sigma}_{kl} \tag{3.40}$$

ebenfalls durch eine komplexe Zahl $\sigma \in \mathcal{O}(N)$ und eine Quantenkorrektur $\delta\hat{\sigma}^{(1)} \in \mathcal{O}(\sqrt{f}\,N)$ dargestellt werden kann. Wird die Quantenkorrektur vernachlässigt, was die Einteilchendynamik in der BBGKY-Hierarchie entkoppelt, entspricht das der bereits betrachteten MF-Näherung, für die gilt, dass

$$\sigma_{klmn}^{(2)} = \sigma_{kl}\sigma_{mn} + \mathcal{O}(\sqrt{f}\,N) \,. \tag{3.41}$$

Hierbei muss unbedingt zwischen der Einteilchendynamik $\sigma^{(1)}$ der BBGKY-Hierarchie und der Einteilchendynamik $\sigma$ im MF unterschieden werden, wie sich nun zeigen wird.

### Einteilchendynamik

Im Rahmen der BBR-Methode kann die Einteilchendynamik ebenfalls entkoppelt werden, jedoch ohne die vollkommene Vernachlässigung der Quantenkorrekturen. Dazu soll entsprechend $\sigma^{(2)}$ durch eine Kombination der $\sigma^{(1)}$ ersetzt werden, was eine *back reaction* darstellt,

$$\sigma_{klmn}^{(2)} = f(\sigma_{kl}^{(1)}, \sigma_{mn}^{(1)}) \,. \tag{3.42}$$

Für die linke Seite dieser Gleichung gilt mit (3.40)

$$\begin{aligned}\sigma^{(2)}_{klmn} &= \langle(\sigma_{kl} + \delta\hat{\sigma}_{kl})(\sigma_{mn} + \delta\hat{\sigma}_{mn})\rangle \\ &= \underbrace{\sigma_{kl}\sigma_{mn}}_{\in\mathcal{O}(N^2)} + \underbrace{\sigma_{kl}\langle\delta\hat{\sigma}_{mn}\rangle + \langle\delta\hat{\sigma}_{kl}\rangle\sigma_{mn}}_{\in\mathcal{O}(\sqrt{f}\,N^2)} + \underbrace{\langle\delta\hat{\sigma}_{kl}\delta\hat{\sigma}_{mn}\rangle}_{\in\mathcal{O}(fN^2)}\,. \end{aligned} \tag{3.42a}$$

Wie intuitiv bereits klar ist, kann auf der rechten Seite von Gleichung (3.42) nur das triviale Produkt $f(\sigma^{(1)}_{kl}, \sigma^{(1)}_{mn}) = \alpha\sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(1)}_{mn}$ mit $\alpha \in \mathbb{R}$ stehen, sodass

$$\begin{aligned}\alpha\sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(1)}_{mn} &= \alpha\langle\sigma_{kl} + \delta\hat{\sigma}_{kl}\rangle\langle\sigma_{kl} + \delta\hat{\sigma}_{mn}\rangle \\ &= \underbrace{\alpha\sigma_{kl}\sigma_{klmn}}_{\in\mathcal{O}(N^2)} + \underbrace{\alpha\sigma_{kl}\langle\delta\hat{\sigma}_{mn}\rangle + \alpha\langle\delta\hat{\sigma}_{kl}\rangle\sigma_{mn}}_{\in\mathcal{O}(\sqrt{f}\,N^2)} + \underbrace{\alpha\langle\delta\hat{\sigma}_{k}l\rangle\langle\delta\hat{\sigma}_{m}n\rangle}_{\in\mathcal{O}(fN^2)}\,. \end{aligned} \tag{3.42b}$$

Für $f \ll \sqrt{f}$ kann wiederum der letzte Term auf beiden Seiten vernachlässigt werden und es ergibt sich mit $\alpha = 1$ die Näherung

$$\sigma^{(2)}_{klmn} = \sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(1)}_{mn} + \mathcal{O}(fN^2)\,, \tag{3.43}$$

was jedoch formal der MF-Näherung (3.41) entspricht und die Quantenkorrekturen zum Teil noch enthält. Dieser scheinbare Widerspruch lässt sich auflösen, indem man sich bewusst macht, dass die Einteilchendynamik im MF durch $\sigma_{kl} = a^*_k a_l$ beschrieben wird und nicht durch einen Operator. Dort verschwinden die Kommutatoren $[\hat{a}^\dagger_k, \hat{a}_l]$, welche jedoch die gesamten Vielteilcheneigenschaften des Systems enthalten. Das bedeutet, mit anderen Worten, dass die niedrigste Ordnung der BBGKY-Hierarchie bereits mehr Informationen enthält, als die niedrigste Ordnung der MF-Theorie.

### Mehrteilchendynamik

Durch einen entsprechenden Ansatz wie in Gleichung (3.42) ist es möglich, auch die Zweiteilchen-, Dreiteilchen- und im Allgemeinen eine Mehrteilchendynamik zu berücksichtigen. Die $n$-Teilchendynamik stellt dabei die Dynamik von $n$ Teilchen unter kontaktartigen Zweikörperwechselwirkungen dar. Mit jeder zusätzlichen Ordnung kommen weitere Quantenkorrekturen hinzu. Dies ist bis hin zur $N$-Teilchendynamik möglich, was dann der gesamten BBGKY-Hierarchie entspricht und damit die volle Vielteilchendynamik des Systems beschreibt.

Um nun Zweiteilcheneffekte zu berücksichtigen, wird also ein Ansatz

$$\sigma^{(3)}_{klmnrs} = \alpha_1\sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(1)}_{mn}\sigma^{(1)}_{rs} + \alpha_2\sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(2)}_{mnrs} + \alpha_3\sigma^{(1)}_{rs}\sigma^{(2)}_{klmn} + \alpha_4\sigma^{(1)}_{mn}\sigma^{(2)}_{klrs} \tag{3.44}$$

verwendet, wobei die Form des Ansatzes aus Gleichung (3.42a) ersichtlich ist. Auf beiden Seiten dieser Gleichung treten unter Verwendung der Näherung (3.40) Terme der

Ordnungen $\mathcal{O}(N^3)$, $\mathcal{O}(\sqrt{f}\,N^3)$, $\mathcal{O}(fN^3)$ und $\mathcal{O}(f^{3/2}N^3)$ auf, sodass die Vernachlässigung der Terme mit Ordnung $\mathcal{O}(f^{3/2}N^3)$ bereits eine besser Näherung im Vergleich zu (3.43) darstellt. Ein Koeffizientenvergleich in der Ordnung $\mathcal{O}(fN^3)$ liefert dann $\alpha_1 = -2$ und $\alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 1$, sodass

$$\sigma^{(3)}_{klmnrs} = \sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(2)}_{mnrs} + \sigma^{(1)}_{rs}\sigma^{(2)}_{klmn} + \sigma^{(1)}_{mn}\sigma^{(2)}_{klrs} - 2\sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(1)}_{mn}\sigma^{(1)}_{rs} + \mathcal{O}(f^{3/2}N^3)\,. \tag{3.45}$$

Entsprechend lassen sich stets Rückwirkungen in der Form

$$\sigma^{(N'+1)} = f(\sigma^{(1)}, \ldots, \sigma^{(N')}) + \mathcal{O}(f^{N'/2}N^{N'}) \tag{3.46}$$

finden, welche die BBGKY-Hierarchie in der $N'$-Teilchendynamik entkoppeln und die Ordnung der Näherung jeweils um einen Faktor $\sqrt{f}\,N$ verbessern. Jedoch steigt der Aufwand, dieses gekoppelte Differentialgleichungssystem zu lösen, exponentiell an.

### 3.4.3. Symmetrien in der BBGKY-Hierarchie

Aus der Definition der Einteilchendichteoperatoren $\hat{\sigma}^{(1)}_{kl} = \hat{a}^\dagger_k \hat{a}_l$ ist leicht ersichtlich, dass für die entsprechenden Erwartungswerte gilt, dass

$$\left(\sigma^{(1)}_{kl}\right)^* = \langle \hat{a}^\dagger_k \hat{a}_l \rangle^* = \langle \hat{a}^\dagger_l \hat{a}_k \rangle = \sigma^{(1)}_{lk}\,, \tag{3.47}$$

sodass für $k, l \in [1, M]$ nur $M(M+1)/2$ Einträge unabhängig sind. Außerdem zeigt die Gleichung (3.47), dass $\sigma^{(1)^*}_{kk} = \sigma^{(1)}_{kk} = n_k$ reell sein müssen, es existieren also nur $M^2$ unabhängige reelle Parameter. Auch in der Vielteilchendynamik lassen sich Symmetrien finden und diese können genutzt werden, um den Satz gekoppelter Gleichung bei der BBR-Methode zu reduzieren, was ausführlich in [102] diskutiert wird.

In der BBR Näherung (3.45) wird neben der Einteilchen- auch noch die Zweiteilchendynamik betrachtet, für die ebenfalls direkt die Symmetrie

$$\left(\sigma^{(2)}_{klmn}\right)^* = \langle \hat{a}^\dagger_k \hat{a}_l \hat{a}^\dagger_m \hat{a}_n \rangle^* = \langle \hat{a}^\dagger_n \hat{a}_m \hat{a}^\dagger_l \hat{a}_k \rangle = \sigma^{(2)}_{nmlk} \tag{3.48}$$

folgt. Genauer gesagt, in jeder Ordnung der BBGKY-Hierarchie entspricht die komplexe Konjugation einer Umkehr der Reihenfolge der Indizes, da sich durch hermitesche Konjugation die Reihenfolge der Operatoren selbst umkehrt. Darüber hinaus können noch weitere Symmetrien durch Vertauschung der Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren mit (3.8c) gefunden werden,

$$\sigma^{(2)}_{klmn} = \sigma^{(2)}_{mlkn} + \sigma^{(1)}_{kn}\delta_{ml} - \sigma_{mn}\delta_{kl}\,, \tag{3.49a}$$

$$\sigma^{(2)}_{klmn} = \sigma^{(2)}_{knml} + \sigma^{(1)}_{kn}\delta_{ml} - \sigma_{kl}\delta_{mn}\,, \tag{3.49b}$$

$$\sigma^{(2)}_{klmn} = \sigma^{(2)}_{mnkl} + \sigma^{(1)}_{kn}\delta_{ml} - \sigma_{ml}\delta_{kn}\,, \tag{3.49c}$$

welche jeweils die Vertauschung der zu den Erzeugungsoperatoren und der zu den Vernichtungsoperatoren gehörenden Indizes, sowie die Kombination beider Vertauschungen beschreiben.

Durch Ausnutzung dieser Beziehungen lässt sich die Zahl der zu lösenden Gleichungen stark reduzieren, jedoch sollte dabei beachtet werden, dass bei der BBR-Methode eine Näherung gemacht wird, welche natürlich die Dynamik verändert. Es ist ersichtlich, dass die BBR Näherungen (3.43) und (3.45) entsprechend der Eigenschaften (3.47) und (3.48) invariant gegenüber einer komplexen Konjugation sind, nicht jedoch gegenüber der Vertauschung der Indizes im Sinne von (3.49). Das kann so verstanden werden, dass eine BBR Näherung einen direkten Einfluss auf die Bewegungsgleichungen einer bestimmten Ordnung nimmt, sodass diese nicht mehr alle Symmetrien bei Vertauschung von Indizes aufweist. Diese Ordnung wiederum koppelt an die nächstkleinere, deren Dynamik sich entsprechend ändert, welche wiederum an die nächstkleinere Ordnung koppelt. Auf diese Weise pflanzt sich der durch das Abschneiden der BBGKY-Hierarchie gemachte Fehler durch die Mehrteilchendynamik fort und bewirkt zunehmende Abweichungen von der echten Vielteilchendynamik. Die Symmetrien (3.49) und deren Entsprechungen in höheren Ordnungen gelten jedoch nur in der echten Vielteilchendynamik, die Reduktion mithilfe dieser Beziehungen darf also formal nicht durchgeführt werden, da die entsprechenden Größen nun unabhängig sind. Sie kann aber dennoch Vorteile bringen, da der Dynamik somit Symmetrieeigenschaften aufgezwungen werden, welche durch die BBR Näherung verloren gegangen sind.

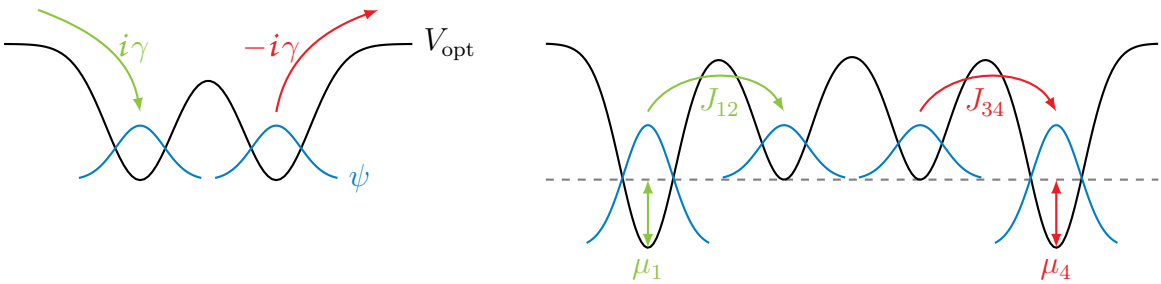
# 4. Realisierung von *balanced gain and loss*

$\mathcal{PT}$-Symmetrie wurde bereits in optischen Systemen beobachtet [22, 23], jedoch steht die Realisierung in einem echten Quantensystem noch aus, wobei bereits einige Vorschläge zur Realisierung von $\mathcal{PT}$-Symmetrie in BECs existieren [42, 43, 45]. Diese Vorschläge beziehen sich jedoch auf die MF-Theorie, wohingegen ein experimentelles System zwar näherungsweise solche Bedingungen aufweisen kann, jedoch stets ein echtes Vielteilchenproblem darstellt. Um eine entsprechende Vielteilchenbeschreibung zu dem $\mathcal{PT}$-symmetrischen Zweimodenmodell aus Abschnitt 2.3 zu finden, liegt nahe, auch im BHM (3.7) ein komplexes Potential in Form imaginärer Gitterpunktenergien einzuführen. Es zeigt sich jedoch, dass die MF-Näherung eines solchen Modells nicht der GPE (2.6) entspricht [31, 47, 103]. Die GPE ist vielmehr der Grenzfall einer Lindblad-Gleichung mit Gewinn und Verlust [104], welche selbst ein aussichtsreicher Ansatz für eine experimentelle Realisierung ist [40, 41, 105].

## 4.1. $\mathcal{PT}$-symmetrisches Viermodenmodell

Dieser Arbeit liegt die Intention zugrunde, eine Vielteilchenbeschreibung des offenen Zweimodensystems aus Abschnitt 2.3 durch Einbettung in ein größeres abgeschlossenes System zu liefern und damit $\mathcal{PT}$-Symmetrie durch BGL zu erreichen. Der zugrundeliegende Gedanke ist hierbei derselbe wie beim großkanonischen Potential in der Thermodynamik, das ebenfalls in ein viel größeres kanonisches Ensemble eingebettet wird um Teilchen- und Energieaustausch zu erlauben.

Die zusätzlichen Mulden des äußeren Systems dienen dabei als Reservoir für die inneren beiden Mulden des Zweimodensystems, welche im Folgenden als Reservoir- und Systemmulden bezeichnet werden sollen. Die Erwartung an das Reservoir ist die, dass die Kopplung, also der Teilchenaustausch mit den Systemmulden, das Reservoir selbst nicht verändert. Das Reservoir darf also kein Gedächtnis besitzen und sollte somit durch einen Markov-Prozess beschrieben werden [106]. Dafür sind im Allgemeinen große Reservoirs mit vielen Reservoirmulden notwendig, wie sie in [107, 108] untersucht wurden. Das einfachste Reservoir in einem diskreten Modell hingegen besteht nur aus einer einzelnen Mulde.




(a) Offenes Zweimodensystem (b) Abgeschlossenes Viermodensystem

**Abbildung 4.1**: Durch Einbettung in ein abgeschlossenes Viermodensystem lassen sich die Kopplung eines offenen Zweimodensystems an ein Reservoir und das Reservoir selbst kausal beschreiben [68]. Die effektive Kopplung über ein komplexes Potential (a) wird dann durch Tunnelprozesse (b) beschrieben, die durch die Parameter des optischen Potentials der Reservoirmulden selbst bestimmt sind. Die Richtung der Ströme wird dabei durch die Phasenbeziehung zwischen den Wellenfunktionen in den einzelnen Mulden bestimmt.

Damit Teilchenaustauschprozesse zwischen System und Reservoir die Reservoirmulde selbst nicht beeinflussen, muss deren Besetzungszahl sehr groß sein, wobei dann jedoch die Wahrscheinlichkeit für Tunnelprozesse vom Reservoir ins System stark zunimmt. Um dies zu kompensieren, sollten die Reservoirmulden gegenüber den Systemmulden energetisch deutlich tiefer liegen.

In der vorliegenden Arbeit soll nun dieser einfachste Fall untersucht werden, bei dem ein Zweimoden- in ein Viermodensystem eingebettet wird, sodass jeweils eine Mulde als Reservoir für die Einkopplung und eine Mulde als Reservoir für die Auskopplung dient. Anhand dieses Modells sollen grundlegende Phänomene und Eigenschaften studiert werden. Dieser Ansatz wurde im MF bereits erfolgreich untersucht [42, 44, 46, 68]. Im Gegensatz zu den eben genannten Arbeiten soll dies nun im Rahmen einer Vielteilchentheorie geschehen, wobei das Interesse insbesondere den Unterschieden zum MF gilt. Aus Kapitel 3 ist bereits bekannt, dass die MF-Näherung lediglich die Einteilchendynamik beschreibt und daher die Dynamik nur für sehr große Gesamtteilchenzahlen wiedergeben kann, sodass vor allem im Grenzfall weniger Teilchen starke Abweichungen vom MF-Verhalten zu erwarten sind.

In Abbildung 4.1 ist die Einbettung eines Zweimodenmodells in ein Viermodenmodell dargestellt. Ein offenes System wie das komplexe Zweimodenmodell (2.19) in Abbildung 4.1(a) erfasst nur die Wirkung der Kopplung mit einem Reservoir, was gerade die Ein- und Auskopplung von Teilchen und damit entsprechend Abschnitt 2.2.2 eine *effektive* Beschreibung darstellt. Durch die Einbettung in ein abgeschlossenes System wie in Abbildung 4.1(b) lässt sich der Teilchenaustausch auf Tunnelprozesse zwischen den Reservoir- und Systemmulden zurückführen, deren Ursache bekannt ist. Die explizite

Berücksichtigung des Reservoirs erlaubt somit eine *kausale* Beschreibung der Kopplung.

Tunnelprozesse hängen stets mit der Potentialbarriere selbst zusammen, so bestimmt etwa die Barrierenhöhe direkt die Wahrscheinlichkeit für einen Tunnelprozess. In einem optischen Potential ergibt sich die effektive Barrierenhöhe aus dem Verhältnis zwischen der Tunnelrate $J$, welche mit der eigentlichen Höhe der Potentialbarriere zwischen den Mulden zusammenhängt, und der Gitterpunktenergie $\mu$, welche der Potentialhöhe der Mulde selbst entspricht. Ob ein Tunnelprozess stattfindet hängt darüber hinaus vom Besetzungsunterschied zwischen den Mulden und dem Verhältnis der Wechselwirkungsstärken $U$ ab, falls sich diese unterscheiden. Da die Wechselwirkung jedoch eine Eigenschaft der im Potential gefangenen Teilchen selbst darstellt, kann die Wechselwirkungsstärke ohne zusätzliche Annahmen in allen Mulden als identisch angenommen werden. Für ein Viermodensystem mit jeweils einer Reservoirmulde lassen sich die Tunnelprozesse und damit die Kopplung des eingebetteten Zweimodensystems über die Parameter $J_{12}$ und $J_{34}$ sowie $\mu_1$ und $\mu_4$ praktisch beliebig steuern. Ziel dieses Kapitels ist es also, Bedingungen an die Parameter des optischen Potentials zu stellen, sodass $\mathcal{PT}$-Symmetrie durch BGL im eingebetteten Zweimodensystem beobachtet werden kann.

### 4.1.1. Zeitabhängige Potentiale

Die vollständige Kontrolle der Tunnelprozesse und damit der Teilchenflüsse zwischen den Reservoir- und Systemmulden geschieht über die Geometrie des optischen Potentials. Dieses geht in das BHM gerade über die Kontrollparameter $J$ und $\mu$ ein und lässt sich leicht über die erzeugenden Laser steuern, wohingegen der Systemparameter $U$ eine Eigenschaft der Teilchen selbst beschreibt. Wie in [108] gezeigt wurde, lässt sich jedoch insbesondere der Einkopplungsvorgang in einem Vielteilchensystem nicht durch konstante Parameter modellieren. Mit zeitabhängigen Parametern $J(t)$ und $\mu(t)$ hingegen ist eine Beschreibung der Kopplung im Viermodensystem möglich [42], sodass die Parameter in dieser Arbeit im Allgemeinen ebenfalls zeitabhängig sein sollen. Prinzipiell lässt sich auch die Wechselwirkungsstärke über Feshbach-Resonanzen beliebig wählen [109, 110], was in Abschnitt 4.3.4 auch ausgenutzt wird. An dieser Stelle jedoch wird $U$ als konstant angenommen, sodass

$$\mathcal{H}_{\mathrm{BH}} = -\sum_{\langle m,m'\rangle} J_{mm'}(t)\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{m'} + \frac{1}{2}\sum_m U_m \hat{n}_m(\hat{n}_m - 1) + \sum_m \mu_m(t)\hat{n}_m \,. \tag{3.7}$$

Das Ziel ist nun, die Parameter $J_{12}(t)$ und $J_{34}(t)$ sowie $\mu_1(t)$ und $\mu_4(t)$ des optischen Potentials zu jedem Zeitpunkt $t$ so zu wählen, dass sich das eingebettete Zweimodensystem effektiv $\mathcal{PT}$-symmetrisch verhält. Um dies auch für das Vielteilchensystem zu erreichen, wird zunächst die einfachere MF-Theorie betrachtet.

## 4.2. Kontrollparameter im Mean-Field

Wie zuvor erwähnt, wurde die Wahl der Kontrollparameter bereits im MF untersucht mit dem Ergebnis, dass $\mathcal{PT}$-Symmetrie bereits in einem Viermodensystem realisierbar ist [42, 44, 46, 68]. Jedoch sind die Gleichungen für die Variation der Parameter dabei sehr komplex und es tritt noch eine zusätzliche Freiheit durch die Einschränkung auf SPDMs auf, was im Anhang C ausführlich diskutiert wird. Obgleich sich die Vorgehensweise aus [46] prinzipiell auf ein Vielteilchenproblem übertragen lassen, ergeben sich hierbei Probleme aufgrund der Komplexität der resultierenden Gleichungen. Aus diesem Grund ist der vorliegende Abschnitt nochmals dem bereits untersuchten MF-System gewidmet mit dem Ziel, unter Ausnutzung der Freiheiten eine möglichst einfache Beschreibung zur Realisierung von $\mathcal{PT}$-Symmetrie zu finden. Eine Zusammenstellung der Ergebnisse dieser Untersuchung ist in Abschnitt 4.2.4 zu finden.

### 4.2.1. Bedingungen an die MF-Wellenfunktion

Wie in Abschnitt 2.2.2 gezeigt wurde, muss ein komplexes Potential bestimmte Bedingungen erfüllen, damit das System selbst eine $\mathcal{PT}$-Symmetrie aufweist. Ein optisches Gitter stellt durch eine entsprechende Wahl $\mu_2 = \mu_3 = 0$ bereits ein symmetrisches reelles Potential für das eingebette System dar, wobei die Gitterpunktenergien dabei den Energienullpunkt definieren.

Der Imaginärteil des Potentials, der die Ein- und Auskopplung von Teilchen beschreibt, muss antisymmetrisch gewählt werden, was im Zweimodenmodell (2.19) durch die imaginären Energien $\pm i\gamma$ geschieht. In einem Viermodensystem muss dies durch eine entsprechende Wahl der Parameter des *reellen* optischen Potentials erreicht werden, die Parameter des eingebetteten Systems sollen dabei noch immer beliebig wählbar sein. Die benötigten Bedingungen ergeben sich aus einem Vergleich zwischen dem offenen Zweimodensystem (2.19), beschrieben durch den Hamilton-Operator

$$\mathcal{H}_2 = \begin{pmatrix} g_2|\psi_2|^2 + i\gamma & -J_{23} \\ -J_{23} & g_3|\psi_3|^2 - i\gamma \end{pmatrix} , \tag{4.1}$$

und einem eingebetteten Zweimodensystem, wobei das Gesamtsystem im MF durch den *zeitabhängigen* Hamilton-Operator

$$\mathcal{H}_4 = \begin{pmatrix} g_1|\psi_1|^2 + \mu_1(t) & -J_{12}(t) & 0 & 0 \\ -J_{12}(t) & g_2|\psi_2|^2 & -J_{23} & 0 \\ 0 & -J_{23} & g_3|\psi_3|^2 & -J_{34}(t) \\ 0 & 0 & -J_{34}(t) & g_4|\psi_4|^2 + \mu_4(t) \end{pmatrix} \tag{4.2}$$

beschrieben wird, was der Gleichung (3.26) mit $g_k = NU_k$ entspricht. Der Klarheit halber wurde hierbei die Benennung der Parameter des Zweimodensystems (4.1) bereits an

das eingebettete Zweimodensystem angepasst. Des weiteren ist zu beachten, dass die Zeitabhängigkeit der Reservoirparameter unbedingt notwendig ist, wie in Abschnitt 4.1.1 beschrieben wurde, der Übersichtlichkeit halber wird diese jedoch im Folgenden nicht immer explizit gekennzeichnet.

Da die Hamilton-Matrix des Viermodensystems (4.2) keine entsprechende Blockstruktur besitzt, koppelt die Dynamik der Systemmulden an die der Reservoirmulden, sodass kein Hamilton-Operator zur Beschreibung des eingebetteten Systems existiert. Stattdessen muss ein Vergleich über die Dynamik selbst erfolgen, welche im MF durch die makroskopische Wellenfunktion $\boldsymbol{\psi}$ für jede Mulde separat beschrieben wird. Es gilt

$$\begin{aligned} \boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_2 &= -J_{12}\psi_1 + g_2|\psi_2|^2\psi_2 - J_{23}\psi_3 \\ &\overset{!}{=} \Big(g_2|\psi_2|^2 + \boldsymbol{i}\gamma\Big)\psi_2 - J_{23}\psi_3\,, \end{aligned} \tag{4.3a}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_3 &= -J_{23}\psi_2 + g_3|\psi_3|^2\psi_3 - J_{34}\psi_4 \\ &\overset{!}{=} -J_{23}\psi_2 + \Big(g_3|\psi_3|^2 - \boldsymbol{i}\gamma\Big)\psi_3\,, \end{aligned} \tag{4.3b}$$

wobei jeweils die erste Zeile das Viermoden- und die zweite Zeile das Zweimodensystem darstellt. Der Vergleich liefert zwei komplexe Bedingungen,

$$J_{12}\psi_1 = -\boldsymbol{i}\gamma\psi_2\,, \tag{4.4a}$$

$$J_{34}\psi_4 = \boldsymbol{i}\gamma\psi_3\,. \tag{4.4b}$$

An dieser Stelle sei bemerkt, dass es sich hierbei um einen Spezialfall von [46] handelt, wie sich im weiteren Verlauf des Kapitels zeigen wird. Für eine Erläuterung der Zusammenhänge sei auf Anhang C verwiesen.

Wird nun die Definition der MF-Wellenfunktion

$$\psi_k = \sqrt{n_k}\,\mathrm{e}^{i\varphi_k} \tag{4.5}$$

verwendet, so gehen die Bedingungen (4.4) über in

$$J_{12}\sqrt{n_1}\,\mathrm{e}^{i\varphi_1} = -\boldsymbol{i}\gamma\sqrt{n_2}\,\mathrm{e}^{i\varphi_2} = \gamma\sqrt{n_2}\,\mathrm{e}^{i(\varphi_2-\pi/2)}\,, \tag{4.6a}$$

$$J_{34}\sqrt{n_4}\,\mathrm{e}^{i\varphi_4} = \quad\boldsymbol{i}\gamma\sqrt{n_3}\,\mathrm{e}^{i\varphi_3} = \gamma\sqrt{n_3}\,\mathrm{e}^{i(\varphi_3+\pi/2)}\,. \tag{4.6b}$$

Da beide Seiten dieser Gleichungen in Euler-Darstellung vorliegen, können direkt reelle Bedingungen an die Beträge und Phasen entnommen werden. Aus den Beträgen ergibt sich die Wahl der zeitabhängigen Tunnelraten,

$$J_{12}(t) = \gamma\sqrt{\frac{n_2(t)}{n_1(t)}}\,, \tag{4.7a}$$

$$J_{34}(t) = \gamma\sqrt{\frac{n_3(t)}{n_4(t)}}\,, \tag{4.7b}$$

für die Phasen folgt sodann

$$\varphi_1 - \varphi_2 = -\frac{\pi}{2}\,, \tag{4.7c}$$

$$\varphi_4 - \varphi_3 = \frac{\pi}{2}\,. \tag{4.7d}$$

Die Tunnelraten (4.7a) und (4.7b) hängen direkt vom Kopplungsparameter $\gamma$ und vom Besetzungsverhältnis zwischen System- und Reservoirmulde ab. Um einen stetigen Teilchenfluss zu ermöglichen, muss die Tunnelrate für einen Einkopplungsprozess mit der Zeit zunehmen, da mit der Entleerung der Reservoirmulde die Wechselwirkungen zwischen den Teilchen abnimmt und damit Tunnelprozesse in das Zweimodensystem hinein unwahrscheinlicher würden. Entsprechend muss die Tunnelrate für einen Auskopplungsprozess zunehmen. Diese Bedingungen kompensieren die endliche Besetzungszahl der Reservoirmulden, sodass die Tunnelprozesse eine offene Kopplung an ein Markov-Reservoir widerspiegeln. BGL wird dadurch erreicht, dass in beiden Gleichungen bereits die selbe Kopplungsrate $\gamma$ auftaucht. Im Allgemeinen wäre ein Ansatz mit unterschiedlichen Kopplungsraten $\gamma_{\mathrm{g}}$ für Gewinn und $\gamma_{\mathrm{l}}$ für Verlust natürlich möglich, jedoch folgt für ein $\mathcal{PT}$-symmetrisches Potential sofort $\gamma_{\mathrm{g}} = -\gamma_{\mathrm{l}}$. Hierbei muss beachtet werden, dass diese Antisymmetrie des Imaginärteils in den Phasen (4.7c) und (4.7d) enthalten ist und nicht in den Tunnelraten (4.7a) und (4.7b), für die $J > 0$ gilt.

An dieser Stelle verbleiben jedoch noch zwei Probleme: Zum einen sind die Gleichungen in der Form (4.7) nicht direkt für die Verallgemeinerung auf ein Vielteilchenproblem geeignet, da dort die Wellenfunktion nicht durch die $2M$ reellen Parameter beschreiben werden kann, die hier auftreten. Zum anderen liefern diese Gleichungen nur Bedingungen an die Tunnelraten $J$, nicht jedoch Bedingungen an die Gitterpunktenergien $\mu$.

### 4.2.2. Bedingungen an die SPDMs

Für die spätere Übertragung der Bedingungen auf ein Vielteilchenproblem ist es notwendig, den zugrundeliegenden Formalismus zu ändern, also von einer MF-Beschreibung über eine vierkomponentige Wellenfunktion zu der entsprechenden Vielteilchenbeschreibung überzugehen. Eine äquivalente Formulierung erlaubt hierbei die BBGKY-Hierarchie (3.34), welche sich im MF auf die Einteilchendynamik der SPDMs $\sigma_{kl} = \psi_k^*\psi_l$ reduziert. Der Imaginärteil dieser Größe lässt sich zusammen mit der jeweiligen Tunnelrate gerade als Strom von Mulde $k$ zu Mulde $l$ identifizieren,

$$j_{kl} = -\boldsymbol{i}J_{kl}(\sigma_{kl} - \sigma_{lk})\,, \tag{4.8}$$

wobei die Symmetrie der SPDMs bezüglich einer komplexen Konjugation ausgenutzt wurde. Entsprechend sollen die Imaginärteile selbst als reduzierte Stromdichten $\widetilde{j}_{kl}$ bezeichnet werden,

$$\widetilde{j}_{kl} = -\boldsymbol{i}(\sigma_{kl} - \sigma_{lk}) = 2\,\mathrm{Im}(\sigma_{kl})\,, \tag{4.9a}$$

für die im MF außerdem gilt, dass

$$\widetilde{j}_{kl} = 2\,\mathrm{Im}(\psi_k^*\psi_l) = 2\,\mathrm{Im}\Big(\sqrt{n_k n_l}\,\mathrm{e}^{-\boldsymbol{i}(\varphi_k-\varphi_l)}\Big) = -2\sqrt{n_k n_l}\,\sin(\varphi_k - \varphi_l)\,. \tag{4.9b}$$

Die Ströme sind also direkt mit den Phasendifferenzen der jeweiligen Mulden verknüpft. Hierbei sei noch erwähnt, dass die Gültigkeit dieser Definition nicht auf benachbarte Mulden beschränkt ist. Es treten auch Nicht-nächste-Nachbarn-Ströme auf, die als effektiver Strom über mehrere Mulden hinweg interpretiert werden können.

Analog lässt sich eine Größe für den Realteil definieren,

$$c_{kl} = (\sigma_{kl} + \sigma_{lk}) = 2\,\mathrm{Re}(\sigma_{kl})\,, \tag{4.10a}$$

welche Korrelationen zwischen den Mulden $k$ und $l$ beschreiben und für die entsprechend

$$c_{kl} = 2\,\mathrm{Re}(\psi_k^*\psi_l) = 2\sqrt{n_k n_l}\,\cos(\varphi_k - \varphi_l)\,. \tag{4.10b}$$

gilt. Für $k = l$ verschwindet der Strom erwartungsgemäß und die Korrelationen entsprechen dann den doppelten Besetzungszahlen, also $\widetilde{j}_{kk} = 0$ und $c_{kk} = 2n_k$. Aufgrund der Symmetrie der SPDMs bezüglich einer komplexen Konjugation sind die Größen $c$ und $\widetilde{j}$ jeweils symmetrisch mit $c_{kl} = c_{lk}$ und antisymmetrisch mit $\widetilde{j}_{kl} = -\widetilde{j}_{lk}$.

Die Dynamik dieser Größen wird durch die dimensionslose Schrödinger-Gleichung beschrieben, sodass

$$\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\sigma_{kl} = \psi_k^*\left(\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_l\right) - \left(\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi_k\right)^*\psi_l = \psi_k^*(\mathcal{H}\boldsymbol{\psi})_l - (\mathcal{H}\boldsymbol{\psi})_k^*\psi_l\,. \tag{4.11}$$

Für das Viermodensystem gilt dann

$$\begin{aligned}\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\sigma_{kl} &= -J_{l-1,l}\sigma_{k,l-1} + (g_l n_l + \mu_l)\sigma_{k,l} - J_{l,l+1}\sigma_{k,l+1} \\ &\quad + J_{k-1,k}\sigma_{k-1,l} - (g_k n_k + \mu_k)\sigma_{k,l} + J_{k,k+1}\sigma_{k+1,l} \\ &\equiv \mathcal{Z}_{kl} - (\mu_k - \mu_l)\sigma_{kl}\end{aligned} \tag{4.12a}$$

mit der Abkürzung

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{kl} = J_{k-1,k}\sigma_{k-1,l} + J_{k+1,k}\sigma_{k+1,l} - J_{l,l-1}\sigma_{k,l-1} - J_{l,l+1}\sigma_{k,l+1} \\ - (g_k n_k - g_l n_l)\sigma_{kl}\,.\end{aligned} \tag{4.12b}$$

Entsprechend folgt mit die Definitionen (4.9a) und (4.10a)

$$\frac{\partial}{\partial t}\widetilde{j}_{kl} = \frac{\partial}{\partial t}(2\,\mathrm{Im}\,\sigma_{kl}) = -2\,\mathrm{Re}\left(\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\sigma_{kl}\right) = -\mathcal{X}_{kl} + (\mu_k - \mu_l)c_{kl}\,, \tag{4.13a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}c_{kl} = \frac{\partial}{\partial t}(2\,\mathrm{Re}\,\sigma_{kl}) = 2\,\mathrm{Im}\left(\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\sigma_{kl}\right) = \mathcal{Y}_{kl} - (\mu_k - \mu_l)\widetilde{j}_{kl}\,, \tag{4.13b}$$

mit

$$\begin{aligned}\mathcal{X}_{kl} = 2\,\mathrm{Re}\,\mathcal{Z}_{kl} &= J_{k-1,k}c_{k-1,l} + J_{k+1,k}c_{k+1,l} - J_{l,l-1}c_{k,l-1} - J_{l,l+1}c_{k,l+1} \\ &\quad - (g_k n_k - g_l n_l)c_{kl}\,,\end{aligned} \tag{4.13c}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_{kl} = 2\,\mathrm{Im}\,\mathcal{Z}_{kl} &= J_{k-1,k}\widetilde{j}_{k-1,l} + J_{k+1,k}\widetilde{j}_{k+1,l} - J_{l,l-1}\widetilde{j}_{k,l-1} - J_{l,l+1}\widetilde{j}_{k,l+1} \\ &\quad - (g_k n_k - g_l n_l)\widetilde{j}_{kl}\,,\end{aligned} \tag{4.13d}$$

sodass $\mathcal{Z}_{kl} = (\mathcal{X}_{kl} + \boldsymbol{i}\mathcal{Y}_{kl})/2$.

Mit diesen Definitionen ist nun eine Übertragung der Bedingungen (4.7) möglich. Dazu wird wiederum die Dynamik eines offenen Zweimodensystems mit der Dynamik des Viermodensystems verglichen. Das eingebettete System wird dabei durch die vier reellen Parameter $n_2$, $n_3$, $\widetilde{j}_{23}$ und $c_{23}$ beschrieben. Für die Besetzungszahlen gilt also

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}n_2 &= J_{12}\widetilde{j}_{12} - J_{23}\widetilde{j}_{23} \\ &\overset{!}{=} \left(g_2|\psi_2|^2 + \boldsymbol{i}\gamma\right)\sigma_{22} - J_{23}\sigma_{23} - \left(g_2|\psi_2|^2 - \boldsymbol{i}\gamma\right)\sigma_{22} + J_{23}\sigma_{32} \\ &= 2\gamma n_2 - J_{23}\widetilde{j}_{23}\,,\end{aligned} \tag{4.14a}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}n_3 &= J_{23}\widetilde{j}_{23} - J_{34}\widetilde{j}_{34} \\ &\overset{!}{=} \left(g_3|\psi_3|^2 - \boldsymbol{i}\gamma\right)\sigma_{33} - J_{23}\sigma_{32} - \left(g_3|\psi_3|^2 + \boldsymbol{i}\gamma\right)\sigma_{22} + J_{23}\sigma_{23} \\ &= J_{23}\widetilde{j}_{23} - 2\gamma n_3\,,\end{aligned} \tag{4.14b}$$

wobei jeweils die erste Zeile das Viermodensystem entsprechend Gleichung (4.13b) beschreibt, welches mit dem offenen Zweimodensystem verglichen wird.

Wie zu erwarten, erhöhen in einem abgeschlossenen System lediglich die Tunnelströme in eine Mulde hinein deren Besetzungszahl, verringert wird diese entsprechend durch die Tunnelströme aus der Mulde heraus. In einem offenen System treten neben Tunnelprozessen zwischen den Systemmulden noch Kopplungen auf, welche die Teilchenströme beschreiben. Es ergibt sich also ein direkter Zusammenhang zwischen der Kopplung und den Tunnelprozessen,

$$j_{12} = J_{12}\widetilde{j}_{12} = 2\gamma n_2\,, \tag{4.15a}$$

$$j_{34} = J_{34}\widetilde{j}_{34} = 2\gamma n_3\,. \tag{4.15b}$$

Diese Ergebnisse sind im MF vollkommen äquivalent zu den Gleichungen (4.7), da

$$\widetilde{j}_{12} = -2\sqrt{n_1 n_2}\,\sin(\varphi_1 - \varphi_2) \overset{(4.7c)}{=} 2\sqrt{n_1 n_2}\,, \tag{4.16a}$$

$$\widetilde{j}_{34} = -2\sqrt{n_3 n_4}\,\sin(\varphi_3 - \varphi_4) \overset{(4.7d)}{=} 2\sqrt{n_3 n_4}\,. \tag{4.16b}$$

Das gilt jedoch nur dann, wenn die Bedingungen (4.7c) und (4.7d) an die Phasendifferenzen erfüllt sind. Ist das der Fall, so folgen außerdem die Beziehungen

$$c_{12} = 2\sqrt{n_1 n_2}\,\cos(\varphi_1 - \varphi_2) \overset{(4.7c)}{=} 0\,, \tag{4.17a}$$

$$c_{34} = 2\sqrt{n_3 n_4}\,\cos(\varphi_3 - \varphi_4) \overset{(4.7d)}{=} 0\,. \tag{4.17b}$$

Falls diese Gleichungen zur Anfangszeit erfüllt sind, so lässt sich über das Verschwinden der Ableitungen sicherstellen, dass die Bedingungen (4.7c) und (4.7d) für alle Zeiten gelten. In Gleichung (4.13b) ist leicht zu erkennen, dass diese Ableitungen die zeitabhängigen Gitterpunktenergien $\mu_1(t)$ und $\mu_4(t)$ enthalten. Insgesamt ergeben sich also entsprechend die Bedingungen

$$J_{12}(t) = \frac{2\gamma n_2(t)}{\widetilde{j}_{12}(t)}\,, \tag{4.18a}$$

$$J_{34}(t) = \frac{2\gamma n_3(t)}{\widetilde{j}_{34}(t)}\,, \tag{4.18b}$$

$$\mu_1(t) = \frac{\mathcal{Y}_{12}(t)}{\widetilde{j}_{12}(t)} = -J_{23}\frac{\widetilde{j}_{13}(t)}{\widetilde{j}_{12}(t)} - (g_1 n_1(t) - g_2 n_2(t))\,, \tag{4.18c}$$

$$\mu_4(t) = -\frac{\mathcal{Y}_{34}(t)}{\widetilde{j}_{34}(t)} = -J_{23}\frac{\widetilde{j}_{24}(t)}{\widetilde{j}_{34}(t)} - (g_4 n_4(t) - g_3 n_3(t))\,. \tag{4.18d}$$

Diese Gleichungen beschreiben, wie das optische Potential der Reservoirmulden zu jedem Zeitpunkt $t$ zu wählen ist, sodass die Dynamik innerhalb der Systemmulden einem offenen Quantensystem gleicht. Die Antisymmetrie der komplexen Kopplung ist hierbei wiederum in den Bedingungen (4.18c) und (4.18d) an die Gitterpunktenergien enthalten. Zusammen mit den Bedingungen (4.18a) und (4.18b) lassen sich diese Gleichungen direkt auf das Vielteilchenproblem übertragen, was Gegenstand des Abschnitts 4.3 sein soll.

### 4.2.3. Anfangsbedingungen und analytische Behandlung

Zur Anfangszeit wird die MF-Wellenfunktion so gewählt, dass insbesondere die Bedingungen (4.7c) und (4.7d) erfüllt sind. Um $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Zustände zu beobachten, müssen zusätzliche Bedingungen an den Anfangszustand gestellt werden. In dieser Arbeit werden nur die bezüglich der Besetzungszahl symmetrischen Lösungen

aus Abschnitt 2.3.1 betrachtet, die Vorgehensweise ist jedoch prinzipiell auch auf die antisymmetrischen und damit $\mathcal{PT}$-gebrochenen Lösungen aus Anhang A übertragbar.

Unter der Annahme gleicher Wechselwirkung $g_2 = g_3 \equiv g$ folgt für die Dynamik des eingebetteten Zweimodensystems mit den Gleichungen (4.12) und (4.13)

$$\frac{\partial}{\partial t} n_2 = j_{12} - j_{23}\,, \tag{4.19a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_3 = j_{23} - j_{34}\,, \tag{4.19b}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{j}_{23} = -J_{12}c_{13} + J_{34}c_{24} - 2J_{23}(n_3 - n_2) + g(n_2 - n_3)c_{23}\,, \tag{4.19c}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{23} = J_{12}\tilde{j}_{13} - J_{34}\tilde{j}_{24} - g(n_2 - n_3)\tilde{j}_{23}\,, \tag{4.19d}$$

wobei $\tilde{j}_{22} = \tilde{j}_{33} = 0$ und $c_{22} = 2n_2$ sowie $c_{33} = 2n_3$.

Mit den Gleichungen (4.7) lässt sich leicht zeigen, dass

$$\begin{aligned} \varphi_1 - \varphi_3 &= \varphi_1 - \varphi_2 + \varphi_2 - \varphi_3 \\ &\overset{(4.7c)}{=} \varphi_2 - \varphi_3 - \frac{\pi}{2} \\ &\overset{(4.7d)}{=} \varphi_2 - \varphi_3 + \varphi_3 - \varphi_4 = \varphi_2 - \varphi_4 \end{aligned} \tag{4.20}$$

und damit

$$J_{12}c_{13} - J_{34}c_{24} = \gamma\sqrt{n_2 n_3}\left[\cos(\varphi_1 - \varphi_3) - \cos(\varphi_1 - \varphi_2)\right] = 0\,, \tag{4.21a}$$

$$J_{12}\tilde{j}_{13} - J_{34}\tilde{j}_{24} = \gamma\sqrt{n_2 n_3}\left[\sin(\varphi_1 - \varphi_3) - \sin(\varphi_1 - \varphi_2)\right] = 0\,. \tag{4.21b}$$

Hierbei sollte noch bemerkt werden, dass es sich bei den Gleichungen (4.15) und (4.21) um die Ergebnisse aus [46] handelt. Dass diese Ergebnisse sehr einfach aus den Gleichungen (4.7) folgen, der umgekehrte Weg jedoch enorm schwierig ist, zeigt nochmals die Berechtigung der hier erfolgten Betrachtungen.

Die Dynamik der Systemgrößen $\tilde{j}_{23}$ und $c_{23}$ lässt sich also mit dem Besetzungsungleichgewicht $\kappa = (n_2 - n_3)$ darstellen als

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{j}_{23} = (2J_{23} + gc_{23})\kappa\,, \tag{4.19c}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{23} = -g\tilde{j}_{23}\kappa\,. \tag{4.19d}$$

Für $\kappa = 0$ verschwinden diese Ableitungen, was wegen $n_2 = n_3$ die symmetrische stationäre Lösung des Zweimodenmodells aus Abschnitt 2.3 darstellt. Das bedeutet insbesondere, dass sich ein stationärer Strom zwischen den Systemmulden einstellt, der

jedoch nur erhalten bleibt, wenn die Besetzungszahlen $n_2(t) = n_3(t) \equiv n$ ebenfalls stationär sind. Dann folgt aus (4.19a) und (4.19b), dass $j_{12}(t) = j_{23}(t) = j_{34}(t)$.

Mit den Relationen (4.15) liefert dies die Anfangsbedingung für den Systemstrom

$$j_{23} = 2\gamma n = -2nJ_{23}\sin(\varphi_2 - \varphi_3)\,, \tag{4.22}$$

der über die Wahl der Phasen eingestellt werden kann. Wie in Abschnitt 2.3 bereits eingeführt wurde, lassen sich die Phasen durch einen globalen Phasenfaktor stets antisymmetrisch wählen, sodass $\varphi_2 = -\varphi_3 \equiv \varphi$. Die Anfangsbedingungen für die symmetrischen stationären Zustände ergeben sich zu

$$\psi_1(0) = \sqrt{n_1(0)}\,\mathrm{e}^{i(\varphi-\pi/2)}\,, \tag{4.23a}$$
$$\psi_2(0) = \sqrt{n}\,\mathrm{e}^{i\varphi}\,, \tag{4.23b}$$
$$\psi_3(0) = \sqrt{n}\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\,, \tag{4.23c}$$
$$\psi_4(0) = \sqrt{n_4(0)}\,\mathrm{e}^{-i(\varphi-\pi/2)}\,, \tag{4.23d}$$

mit

$$\varphi = -\frac{1}{2}\arcsin\left(\frac{\gamma}{J_{23}}\right). \tag{4.23e}$$

Es ist bemerkenswert, dass neben der Besetzungszahl $n$, der Tunnelrate $J_{23}$ und der Kopplungsrate $\gamma$, welche allesamt Systemgrößen darstellen, auch die Besetzungszahlen $n_1$ und $n_4$ zur Anfangszeit frei gewählt werden können. Um ein realistisches Reservoir zu beschreiben, sollten die Besetzungszahlen idealerweise sehr groß sein, sodass die Entnahme oder Abgabe einzelner Teilchen die Besetzungszahl nicht merklich verändert.

### Analytische Lösungen

Falls der Anfangszustand gemäß Gleichung (4.23) präpariert wird und die Bedingungen (4.18) zu jeder Zeit erfüllt werden, so treten stationäre Lösungen in dem eingebetteten Zweimodensystem auf,

$$n_2(t) = n\,, \tag{4.24a}$$
$$n_3(t) = n\,, \tag{4.24b}$$
$$j_{23}(t) = 2\gamma n\,. \tag{4.24c}$$

In den Reservoirmulden kann nur die Kopplung mit den Systemmulden die Besetzungszahl ändern, sodass

$$\frac{\partial}{\partial t}n_1(t) = -j_{12}(t) = -2\gamma n\,, \tag{4.25a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_4(t) = j_{34}(t) = 2\gamma n \,. \tag{4.25b}$$

Da die Besetzungszahlen $n$ der Systemmulden stationär sind, müssen die Kopplungsströme ebenfalls zeitlich konstant sein und die Besetzungszahlen im Reservoir ändern sich linear mit der Zeit,

$$n_1(t) = n_1(0) - 2\gamma n t \,, \tag{4.26a}$$
$$n_4(t) = n_4(0) + 2\gamma n t \,, \tag{4.26b}$$
$$j_{12}(t) = 2\gamma n \,, \tag{4.26c}$$
$$j_{34}(t) = 2\gamma n \,. \tag{4.26d}$$

Dieser Zustand, bei dem das eingebettete System in einem stationären Zustand vorliegt, dies jedoch aufgrund der Reservoirmulden nicht für das Gesamtsystem gilt, soll als *quasistationär* bezeichnet werden und ist in Abbildung 4.2 dargestellt. Diese Lösungen existieren solange, bis eine Reservoirmulde vollständig entleert ist. In den Gleichungen (4.7) ist direkt zu erkennen, dass dies zu einer Divergenz der jeweiligen Tunnelrate $J$ führt. Per Konstruktion kann dies hier nur bei der Reservoirmulde geschehen, aus der Teilchen entnommen werden, sodass auch der Einkopplungsstrom zum erliegen kommt und die $\mathcal{PT}$-Symmetrie zusammenbricht.

Die Bedingungen (4.18) hängen lediglich von den Besetzungszahlen und Strömen zwischen den Mulden ab, welche durch die Gleichungen (4.24) und (4.26) nun analytisch vorliegen. Für die Tunnelraten können daher sofort analytische Ausdrücke angegeben werden,

$$J_{12}(t) = \gamma \sqrt{\frac{n}{n_1(0) - 2\gamma n t}} \,, \tag{4.27a}$$
$$J_{34}(t) = \gamma \sqrt{\frac{n}{n_4(0) + 2\gamma n t}} \,. \tag{4.27b}$$

Für die Gitterpunktenergien ist dies ebenso möglich, dazu wird jeweils der erste Term in den Gleichungen (4.18c) und (4.18d) mit den Relationen (4.9b) und $n = n_2 = n_3$ sowie (4.20) und $\varphi = \varphi_2 = -\varphi_3$ umgeschrieben. Damit ergeben sich

$$\mu_1(t) = J_{23} \sin\left(2\varphi - \frac{\pi}{2}\right) - g(n_1(t) - n) = \mu - g n_1(0) + 2\gamma g n t \,, \tag{4.27c}$$
$$\mu_4(t) = J_{23} \sin\left(2\varphi - \frac{\pi}{2}\right) - g(n_4(t) - n) = \mu - g n_4(0) - 2\gamma g n t \,, \tag{4.27d}$$

mit dem chemischen Potential $\mu$ für das gesamte eingebettete Zweimodensystem entsprechend Abschnitt 2.3.1,

$$\mu = gn - \sqrt{J_{23}^2 - \gamma^2} \,. \tag{4.27e}$$

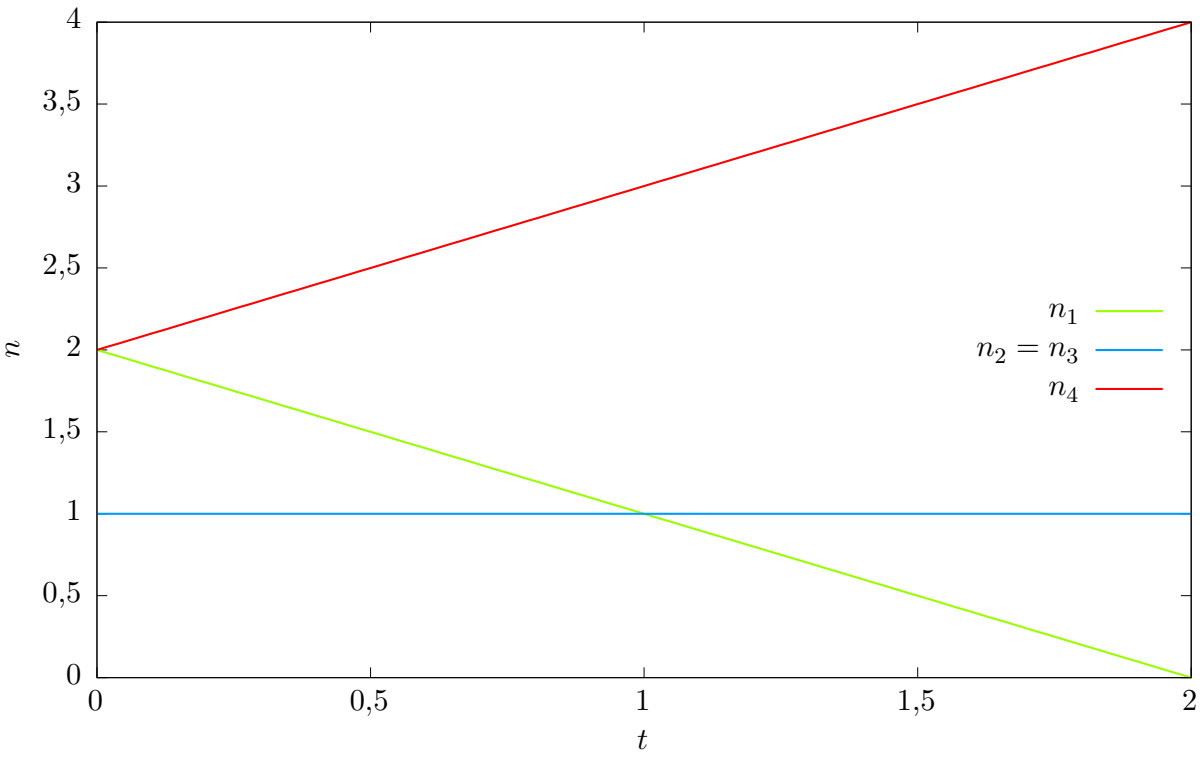



**Abbildung 4.2**: Analytische quasistationäre Lösungen für $n_2 = n_3 = n = 1$ und $n_1 = n_4 = 2$ für $\gamma = 0{,}5$. Das System bricht zusammen, wenn die linke Reservoirmulde vollständig entleert ist, da dies gemäß Gleichung (4.7a) zu einer Divergenz der entsprechenden Tunnelrate führt.

### 4.2.4. Zusammenfassung

Um eine $\mathcal{PT}$-symmetrische Ankopplung des eingebetteten Zweimodensystems zu erreichen, wird das System für $t = 0$ in einen Anfangszustand

$$\psi_1(0) = \sqrt{n_1(0)}\,\mathrm{e}^{i(\varphi-\pi/2)}\,, \tag{4.23a}$$

$$\psi_2(0) = \sqrt{n}\,\mathrm{e}^{i\varphi}\,, \tag{4.23b}$$

$$\psi_3(0) = \sqrt{n}\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\,, \tag{4.23c}$$

$$\psi_4(0) = \sqrt{n_4(0)}\,\mathrm{e}^{-i(\varphi-\pi/2)} \tag{4.23d}$$

mit

$$\varphi = -\frac{1}{2}\arcsin\left(\frac{\gamma}{J_{23}}\right) \tag{4.23e}$$

präpariert, wobei $n$ die Besetzungszahl und $g$ die Wechselwirkung der Systemmulden bezeichnet. Für alle Zeiten $t \geq 0$ werden die Parameter des optischen Potentials der

Reservoirmulden dann gemäß

$$J_{12}(t) = \frac{2\gamma n_2(t)}{\widetilde{j}_{12}(t)}\,, \tag{4.18a}$$

$$J_{34}(t) = \frac{2\gamma n_3(t)}{\widetilde{j}_{34}(t)}\,, \tag{4.18b}$$

$$\mu_1(t) = \frac{\mathcal{Y}_{12}(t)}{\widetilde{j}_{12}(t)} = -J_{23}\frac{\widetilde{j}_{13}(t)}{\widetilde{j}_{12}(t)} - (g_1 n_1(t) - g_2 n_2(t))\,, \tag{4.18c}$$

$$\mu_4(t) = -\frac{\mathcal{Y}_{34}(t)}{\widetilde{j}_{34}(t)} = -J_{23}\frac{\widetilde{j}_{24}(t)}{\widetilde{j}_{34}(t)} - (g_4 n_4(t) - g_3 n_3(t)) \tag{4.18d}$$

angepasst. Damit stellt sich ein symmetrischer stationärer Zustand im eingebetteten System ein und die Besetzung in den Reservoirmulden ändert sich zeitlich linear, was als quasistationärer Zustand bezeichnet wird. Im MF existieren analytische Lösungen, sodass auch die Wahl der Parameter analytisch erfolgen kann,

$$J_{12}(t) = \gamma\sqrt{\frac{n}{n_1(0) - 2\gamma n t}}\,, \tag{4.27a}$$

$$J_{34}(t) = \gamma\sqrt{\frac{n}{n_4(0) + 2\gamma n t}}\,, \tag{4.27b}$$

$$\mu_1(t) = \mu - g n_1(0) + 2\gamma g n t\,, \tag{4.27c}$$

$$\mu_4(t) = \mu - g n_4(0) - 2\gamma g n t\,, \tag{4.27d}$$

wobei

$$\mu = gn - \sqrt{J_{23}^2 - \gamma^2} \tag{4.27e}$$

das chemische Potential für das gesamte Zweimodensystem darstellt.

## 4.3. Kontrollparameter im Vielteilchensystem

Im MF ist nun klar, wie das Potential zu wählen ist, sodass $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Lösungen beobachtet werden können. Diese Lösungen können im MF analytisch ermittelt werden, ebenso wie die Wahl der Parameter selbst. Diese Vorgehensweise soll nun auf das Vielteilchenproblem übertragen werden.

### 4.3.1. MF-artige Vielteilchenzustände

Zu diesem Zweck muss das Vielteilchensystem in einem entsprechenden Anfangszustand (4.23) präpariert werden. Daher wird in diesem Abschnitt zuerst die Beziehung zwischen

einem MF-Zustand und einem Vielteilchenzustand untersucht. Der MF-Zustand des $n$-ten Teilchens ist dabei gegeben durch

$$|\psi_n\rangle = \sum_{m=1}^{M} \psi_m^{(n)} |m\rangle^{(n)} \,, \tag{4.28}$$

wobei $|m\rangle^{(n)}$ den Zustand des $n$-ten Teilchens am Gitterplatz $m$ mit $n \in [1, N]$ bezeichnet. Die Gesamtwellenfunktion ist ein Produktzustand solcher identischer Einteilchenzustände,

$$|\psi\rangle = \prod_{n=1}^{N} |\psi_n\rangle \,. \tag{4.29}$$

Fock-Zustände lassen sich ebenfalls als symmetrisierte Produktzustände darstellen,

$$|n_1, \ldots, n_M\rangle = \sqrt{\frac{N!}{n_1! \cdots n_M!}}\, \mathcal{S} \prod_{\tilde{n}_1=1}^{N_1} |1\rangle^{(\tilde{n}_1)} \cdots \prod_{\tilde{n}_M=N_{M-1}}^{N_M} |M\rangle^{(\tilde{n}_M)} \,, \tag{4.30}$$

wobei $N_m = \sum_{k=1}^{m} n_k$ mit $N_M = N$ und

$$\mathcal{S} = \frac{1}{N!} \sum_p \mathcal{P}_p \tag{4.31}$$

den Symmetrisierungsoperator mit den Permutationen $\mathcal{P}_p$ beschreibt.

Die MF-Wellenfunktion (4.29) lässt sich in der Fock-Basis (4.30) entwickeln,

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_M \\ N_M=N}} |n_1, \ldots, n_M\rangle \underbrace{\langle n_1, \ldots, n_M|\psi\rangle}_{\equiv\, c_{n_1,\ldots,n_M}} \,, \tag{4.32}$$

dabei wird über alle Zustände mit Gesamtteilchenzahl $N$ summiert. Für die Koeffizienten ergibt sich

$$\begin{aligned}
c_{n_1,\ldots,n_M} &= c \left[ \prod_{\tilde{n}_1=1}^{N_1} \langle 1|^{(\tilde{n}_1)} \cdots \prod_{\tilde{n}_M=N_{M-1}}^{N_M} \langle M|^{(\tilde{n}_M)} \mathcal{S}^\dagger \right] \prod_{n=1}^{N} \left[ \sum_{m=1}^{M} \psi_m^{(n)} |m\rangle^{(n)} \right] \\
&= c \left[ \prod_{\tilde{n}_1=1}^{N_1} \langle 1|^{(\tilde{n}_1)} \cdots \prod_{\tilde{n}_M=N_{M-1}}^{N_M} \langle M|^{(\tilde{n}_M)} \mathcal{S}^\dagger \right] \prod_{n_1'=1}^{N_1} \left( \sum_{m_1=1}^{M} \psi_{m_1}^{(n_1')} |m_1\rangle^{(n_1')} \right) \\
&\qquad \cdots \prod_{n_M'=N_{M-1}}^{N_M} \left( \sum_{m_M=1}^{M} \psi_{m_M}^{(n_M')} |m_M\rangle^{(n_M')} \right) \\
&= \frac{c}{N!} \left[ \frac{N!}{n_1! \cdots n_M!} \right] \left[ \prod_{m=1}^{M} n_m! \right] \psi_1^{n_1} \cdots \psi_M^{n_M}
\end{aligned} \tag{4.33}$$

mit der Normierung

$$c = \sqrt{\frac{N!}{n_1! \cdots n_M!}} \,. \tag{4.34}$$

Der erste Term in eckigen Klammern gibt die Anzahl der symmetrisierten Zustände an, der zweite Term die Anzahl der Permutationen, welche diese Zustände unverändert lassen. Insgesamt ergibt sich also für die Vielteilchenwellenfunktion

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_M \\ N_M=N}} c_{n_1,\ldots,n_M} |n_1,\ldots,n_M\rangle \,, \tag{4.35a}$$

mit den Koeffizienten

$$c_{n_1,\ldots,n_M} = \sqrt{N!} \prod_{m=1}^{M} \frac{\psi_m^{n_m}}{\sqrt{n_m!}} \,. \tag{4.35b}$$

Für jeden beliebigen MF-Zustand lässt sich mit der Relation (4.35) der entsprechende Vielteilchenzustand berechnen. Dabei werden die Einträge der *normierten* MF-Wellenfunktion mit der jeweiligen Besetzungszahl potenziert und anschließend wieder entsprechend normiert. Diese MF-artigen Vielteilchenzustände sollen als Anfangszustände im BHM dienen.

### BBGKY-Hierarchie

Für die Verwendung der BBR-Näherung müssen die entsprechenden Startparameter für das gekoppelte Differentialgleichunssystem der BBGKY-Hierarchie gefunden werden. Hierzu wird zuerst die Wirkung des Vernichtungsoperators auf den Zustand (4.35a) betrachtet,

$$\begin{aligned}
\hat{a}_k|\psi\rangle &= \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_M \\ N_M=N}} c_{n_1,\ldots,n_M} \hat{a}_k |n_1,\ldots,n_k,\ldots,n_M\rangle \\
&= \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_M \\ N_M=N}} c_{n_1,\ldots,n_M} \sqrt{n_k}\, |n_1,\ldots,n_k-1,\ldots,n_M\rangle \\
&= \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_k,\ldots,n_M \\ N_M=N}} \sqrt{\frac{N!}{n_1! \cdots (n_k-1)! \cdots n_M!}}\, \psi_1^{n_1} \cdots \psi_k^{n_k} \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots \psi_M^{n_M} |n_1,\ldots,n_k-1,\ldots,n_M\rangle \\
&= \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_k',\ldots,n_M \\ N_{m\neq k}+n_k'=N-1}} \sqrt{\frac{N!}{n_1! \cdots n_k'! \cdots n_M!}}\, \psi_1^{n_1} \cdots \psi_k^{n_k'+1} \cdots \\
&\qquad\qquad \cdots \psi_M^{n_M} \left|n_1,\ldots,n_k',\ldots,n_M\right\rangle ,
\end{aligned} \tag{4.36}$$

wobei im letzten Schritt die Ersetzung $n_k' = n_k - 1$ mit $N_{m\neq k} = \sum_{m=1\neq k}^{M} n_m$ gemacht wurde. Wird nun eine Umbenennung $n_k' \to n_k$ durchgeführt, so ergibt sich

$$\hat{a}_k|\psi\rangle = \sqrt{N}\,\psi_k \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_M \\ N_M=N-1}} \left[\prod_{m=1}^{M} \sqrt{\frac{(N-1)!}{n_m!}}\,\psi_m^{n_m}\right] |n_1,\ldots,n_M\rangle\,. \tag{4.37}$$

Der letzte Teil dieser Gleichung entspricht wiederum einer Vielteilchenwellenfunktion der Form (4.35), jedoch mit der Gesamtteilchenzahl $(N-1)$. Wird die Gesamtteilchenzahl explizit gekennzeichnet, so lässt sich die Gleichung (4.37) in der einfachen Form

$$\hat{a}_k|\psi, N\rangle = \sqrt{N}\,\psi_k|\psi, N-1\rangle \tag{4.37}$$

schreiben. Für die SPDM (3.30) folgt damit unmittelbar

$$\sigma_{kl}^{(1)} = \langle\psi, N|\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_l|\psi, N\rangle = \langle\psi, N-1|\psi_k^* N\psi_l|\psi, N-1\rangle = N\psi_k^*\psi_l\,. \tag{4.38}$$

Auf diese Weise lassen sich alle Operatoren behandeln, bei denen jeweils ein Erzeugungsoperator nach links und ein Vernichtsoperator nach rechts wirken kann. Entsprechend gilt für die Zweiteilchendichteoperatoren

$$\begin{aligned}\langle\psi, N|\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_l^\dagger\hat{a}_m\hat{a}_n|\psi, N\rangle &= N\psi_k^*\psi_n\langle\psi, N-1|\hat{a}_l^\dagger\hat{a}_m|\psi, N-1\rangle \\ &= N\psi_k^*\psi_n\langle\psi, N-2|\psi_l^*(N-1)\psi_m|\psi, N-2\rangle \\ &= N(N-1)\psi_k^*\psi_l^*\psi_m\psi_n\,.\end{aligned} \tag{4.39}$$

Wie in Kapitel 3 besprochen wurde, werden in dieser Arbeit jedoch Zweiteilchenoperatoren der Form $\sigma_{klmn}^{(2)} = \langle\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_l\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_l\rangle$ verwendet, da diese sehr effizient ausgewertet werden können. Mit Gleichung (3.32) lassen sich diese jedoch in die Zweiteilchendichteoperatoren überführen, sodass sich gemäß Gleichung (3.35) die entsprechenden Startparameter der Zweiteilchenoperatoren ergeben,

$$\sigma_{klmn}^{(2)} = \langle\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_m^\dagger\hat{a}_k\hat{a}_n\rangle + \langle\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_n^\dagger\rangle\delta_{lm} = N(N-1)\psi_k^*\psi_l\psi_m^*\psi_n + N\psi_k^*\delta_{lm}\psi_n\,. \tag{4.40}$$

Entsprechend lassen sich die Anfangswerte für die gesamte BBGKY-Hierarchie berechnen. In der BBR-Methode (3.45) ist der Anfangszustand bereits durch die Gleichungen (4.38) und (4.40) für beliebige MF-Zustände gegeben.

### 4.3.2. Bedingungen an die BBGKY-Hierarchie

Mit den Ergebnissen aus Abschnitt 4.3.1 lässt sich ein Vielteilchensystem in einen entsprechenden MF-Zustand (4.23) präparieren. Lassen sich die Gleichungen (4.18) oder (4.27) nun direkt auf ein Vielteilchenproblem anwenden?

Die Antwort auf diese Frage ist nein, wie andere Untersuchungen bereits gezeigt haben [111]. Hierbei wurde versucht, entsprechende Gleichungen zur Wahl der Parameter aus [68] im Rahmen der BBR-Methode direkt anzuwenden um BGL zu erreichen. Ohne Wechselwirkung zwischen den Teilchen ist dies zwar möglich, da hierbei effektiv eine Einteilchenbeschreibung vorliegt. Bereits geringe Wechselwirkungsstärken führen jedoch insbesondere bei geringen Teilchenzahlen zu Instabilitäten und starken Abweichungen von den quasistationären Zuständen. Dieses Verhalten ist auch in den Abbildungen in Anhang D zu sehen, bei denen die analytischen Gleichungen (4.27) verwendet werden. Grund für die Abweichungen ist die Vernachlässigung aller Quantenkorrekturen und damit aller Vielteilcheneigenschaften bei der Anpassung der Parameter mithilfe von MF-Gleichungen, sodass sich bereits nach kurzer Zeit die Dynamik von dem gewünschten Verhalten stark unterscheidet. Ziel dieses Abschnittes ist nun, durch eine entsprechende Wahl der Parameter unter Berücksichtigung der Vielteilcheneigenschaften die Einteilchendynamik so anzupassen, dass sich nach Möglichkeit ebenfalls die im MF beobachteten $\mathcal{PT}$-symmetrischen quasistationären Zustände durch BGL einstellen.

Ausgehend von den SPDMs aus Abschnitt 3.4.1 soll nun also die Vorgehensweise aus dem MF auf das Vielteilchenproblem übertragen werden. Für die in Abschnitt 4.2.2 eingeführte Notation ist dies durch Verwendung der BBGKY-Hierarchie möglich, sodass

$$i\frac{\partial}{\partial t}\sigma_{kl}^{(1)} = \mathcal{Z}_{kl}^{(1)} - (\mu_k - \mu_l)\sigma_{kl}^{(1)}\,, \tag{4.41a}$$

mit

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{kl}^{(1)} = {} & J_{k-1,k}\sigma_{k-1,l}^{(1)} + J_{k+1,k}\sigma_{k+1,l}^{(1)} - J_{l,l-1}\sigma_{k,l-1}^{(1)} - J_{l,l+1}\sigma_{k,l+1}^{(1)} \\ & - U_k\Big(\sigma_{kkkl}^{(2)} - \sigma_{kl}^{(1)}\Big) + U_l\Big(\sigma_{klll}^{(2)} - \sigma_{kl}^{(1)}\Big)\,.\end{aligned} \tag{4.41b}$$

In Analogie zu den Defitionen (4.9a) und (4.10a) lassen sich die Größen $c$ und $\tilde{j}$ für den zweifachen Real- und Imaginärteil entsprechend einführen,

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{kl}^{(1)} = -\mathcal{X}_{kl}^{(1)} + (\mu_k - \mu_l)c_{kl}^{(1)}\,, \tag{4.42a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}c_{kl}^{(1)} = \mathcal{Y}_{kl}^{(1)} - (\mu_k - \mu_l)\tilde{j}_{kl}^{(1)}\,, \tag{4.42b}$$

mit

$$\begin{aligned}\mathcal{X}_{kl}^{(1)} = {} & J_{k-1,k}c_{k-1,l}^{(1)} + J_{k+1,k}c_{k+1,l}^{(1)} - J_{l,l-1}c_{k,l-1}^{(1)} - J_{l,l+1}c_{k,l+1}^{(1)} \\ & - U_k\Big(c_{kkkl}^{(2)} - c_{kl}^{(1)}\Big) + U_l\Big(c_{klll}^{(2)} - c_{kl}^{(1)}\Big)\,,\end{aligned} \tag{4.42c}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{Y}_{kl}^{(1)} = {} & J_{k-1,k}\tilde{j}_{k-1,l}^{(1)} + J_{k+1,k}\tilde{j}_{k+1,l}^{(1)} - J_{l,l-1}\tilde{j}_{k,l-1}^{(1)} - J_{l,l+1}\tilde{j}_{k,l+1}^{(1)} \\ & - U_k\Big(\tilde{j}_{kkkl}^{(2)} - \tilde{j}_{kl}^{(1)}\Big) + U_l\Big(\tilde{j}_{klll}^{(2)} - \tilde{j}_{kl}^{(1)}\Big)\,.\end{aligned} \tag{4.42d}$$

Im Prinzip lässt sich die gesamte BBGKY-Hierarchie in dieser Form darstellen. Der Übersichtlichkeit halber geschieht dies dieser Stelle jedoch nur für die erste Ordnung, die im Folgenden von Interesse ist.

Die Einteilchendynamik ist für $k = l$ identisch mit der im MF, sodass die Gleichungen (4.18a) und (4.18b) auch für das Vielteilchenproblem gelten. Für $k \neq l$ hingegen koppelt die Einteilchendynamik an die Zweiteilchendynamik, was bereits einen enormen Unterschied zum MF darstellt. Um die Unterschiede zwischen den Gleichungen (4.12b) und (4.41b) besser zu verstehen, werden die Kovarianzen

$$\Delta_{klmn} = \sigma^{(2)}_{klmn} - \sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(1)}_{mn} \tag{4.43}$$

eingeführt [40, 41, 105, 111], welche eine Verallgemeinerung der Definition der Varianz darstellen. Damit ergibt sich

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}^{(1)}_{kl} = {} & J_{k-1,k}\sigma^{(1)}_{k-1,l} + J_{k+1,k}\sigma^{(1)}_{k+1,l} - J_{l,l-1}\sigma^{(1)}_{k,l-1} - J_{l,l+1}\sigma^{(1)}_{k,l+1} \\ & - (U_k n_k - U_l n_l)\sigma^{(1)}_{kl} - U_k\Big(\Delta_{kkkl} - \sigma^{(1)}_{kl}\Big) + U_l\Big(\Delta_{klll} - \sigma^{(1)}_{kl}\Big)\,.\end{aligned} \tag{4.44}$$

Für gleiche Wechselwirkungsstärken $U_k = U_l$ sind alle Vielteilcheneigenschaften allein in den Kovarianzen enthalten, welche im MF-Grenzfall verschwinden, wie die Relation (3.41) zeigt. Dadurch wird die Einteilchendynamik von der Mehrteilchendynamik für beliebige Wechselwirkungsstärken $U$ entkoppelt. Kovarianzen höherer Ordnung lassen sich entsprechend definieren [111] und bieten den Vorteil, dass eine BBR-Näherung dann einfach der Vernachlässigung aller Kovarianzen in einer bestimmten Ordnung entspricht.

Phasen stellen charakteristische Größen im MF dar, in einer Vielteilchenbeschreibung hingegen sind diese im Allgemeinen gar nicht definiert. Daher lassen sich die Bedingungen (4.7c) und (4.7d) in einem Vielteilchenproblem nicht direkt umsetzen. Vielteilchenzustände können jedoch durchaus MF-Zuständen entsprechen, sodass die Gleichungen (4.17) auch hier genutzt werden können, um Bedingungen an die Gitterpunktenergien zu stellen. Unter der Annahme, das System befinde sich zur Anfangszeit in einem MF-artigen Zustand, lassen sich die Parameter wiederum entsprechend der Forderungen $\dot{c}_{12} = 0$ und $\dot{c}_{34} = 0$ mit $c_{12}(0) = 0$ und $c_{34}(0) = 0$ wählen.

Die entsprechenden zeitabhängigen Vielteilchenparameter ergeben sich also zu

$$J_{12}(t) = \frac{2\gamma n_2(t)}{\widetilde{j}^{(1)}_{12}(t)}\,, \tag{4.45a}$$

$$J_{34}(t) = \frac{2\gamma n_3(t)}{\widetilde{j}^{(1)}_{34}(t)}\,, \tag{4.45b}$$

$$\mu_1(t) = \frac{\mathcal{Y}^{(1)}_{12}(t)}{\widetilde{j}^{(1)}_{12}(t)} = -J_{23}\frac{\widetilde{j}^{(1)}_{13}(t)}{\widetilde{j}^{(1)}_{12}(t)} - U_1\left(\frac{\widetilde{j}^{(2)}_{1112}(t)}{\widetilde{j}^{(1)}_{12}(t)} - 1\right) + U_2\left(\frac{\widetilde{j}^{(2)}_{1222}(t)}{\widetilde{j}^{(1)}_{12}(t)} - 1\right), \tag{4.45c}$$

$$\mu_4(t) = -\frac{\mathcal{Y}_{34}^{(1)}(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} = -J_{23}\frac{\widetilde{j}_{24}^{(1)}(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} + U_3\left(\frac{\widetilde{j}_{3334}^{(2)}(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} - 1\right) - U_4\left(\frac{\widetilde{j}_{3444}^{(2)}(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} - 1\right). \tag{4.45d}$$

Die Bedingungen (4.45c) und (4.45d) sind jedoch nur solange gültig, solange sich das System in einem MF-artigen Zustand befindet. Da die Bedingungen (4.45) jedoch darauf ausgerichtet sind, lediglich in dem eingebetteten Zweimodensystem eine MF-artige Kopplung zu realisieren, ist zu erwarten, dass dieser Zustand bereits vor der vollständigen Entleerung einer Reservoirmulde verlorengeht.

### 4.3.3. Modifikationen der Bedingungen an die Kontrollparameter

Bisher wurde gezeigt, dass sich in einem Vielteilchensystem ebenfalls Bedingungen in Analogie zum MF formulieren lassen. Wie sich in Kapitel 5 zeigt, stellen die Gleichungen (4.45) bereits eine deutliche Verbesserung im Vergleich zu den MF-Gleichungen (4.18) dar, wie sie in [111] und Anhang D dar. Da die Vielteilchendynamik jedoch bei weitem mehr Freiheitsgrade beinhaltet als die einfache MF-Beschreibung, so treten zusätzliche Effekte insbesondere bei geringen Teilchenzahlen auf. Diese führen dazu, dass sich trotz entsprechender Präparation des Anfangszustandes und der Anpassung der Parameter keine $\mathcal{PT}$-symmetrischen stationären Lösungen in den mittleren Mulden einstellen.

Bereits aus den Gleichungen (4.41) und (4.42) wird klar, dass es deutliche Unterschiede zwischen MF und Vielteilchenbeschreibung gibt und dass im Allgemeinen keine analytischen Lösungen mehr gefunden werden können, abgesehen von dem Fall verschwindender Wechselwirkung [41]. Einer dieser Unterschiede besteht darin, dass sich im Vielteilchensystem für die Wahl $n_2 = n_3$ kein stationärer Strom $j_{23}$ zwischen den eingebetteten Mulden einstellt, was direkt aus einem Vergleich der Gleichungen (4.42c) und (4.13c) ersichtlich ist. Das ist bereits in der niedrigsten Ordnung der BBR Näherung der Fall, da etwa in Gleichung (4.44) noch immer zusätzliche Terme auftauchen können, selbst wenn die Kovarianzen vernachlässigt werden. Diese zusätzlichen Terme verschwinden nur dann, wenn die Wechselwirkung in allen Mulden dieselbe ist und die Kovarianzen damit sämtliche Vielteilcheneigenschaften enthalten. Für eine höhere BBR Näherung jedoch treten in der Einteilchendynamik immer Abweichungen im Vergleich zum MF auf. Dieselben Überlegungen gelten natürlich auch für die Korrelation $c_{23}$ zwischen den mittleren Mulden.

Aus diesen Überlegungen wird deutlich, dass die Wahl der Parameter in einem Vielteilchensystem nicht mehr eindeutig ist, in dem Sinne, dass eine entsprechende Wahl des Anfangszustandes und der zeitabhängigen Parameter für die Realisierung von BGL nicht genügen und damit keine $\mathcal{PT}$-symmetrischen stationären Lösungen auftreten können. Vielmehr müssen hierfür zusätzliche Forderungen durch Modifikation der Gleichungen (4.45) verwendet werden, die im MF äquivalent zu den Gleichungen (4.18) sind. Die Forderungen nach $\mathcal{PT}$-symmetrischen stationären Zuständen sind nun nicht mehr äquivalent

und können zu vollkommen unterschiedlichen Ergebnissen führen. Im Folgenden werden zwei mögliche Modifikationen der bisherigen Bedingungen diskutiert.

### Stationärer Strom

Eine naheliegende Forderung stellt $\dot{\sigma}_{23}^{(1)} = 0$ dar, da sowohl $\tilde{j}_{23}^{(1)}$ als auch $c_{23}^{(1)}$ durch die Wahl $n_2 = n_3$ keinen stationären Größen mehr entsprechen. Real- und Imaginärteil dieser komplexen Gleichung entsprechen dann den Forderungen nach dem Verschwinden der Ableitungen von $c_{23}^{(1)}$ und $\tilde{j}_{23}^{(1)}$. Da der Anfangszustand aus dem MF bereits eindeutig bestimmt ist, können nur die vier Parameter $J_{23}$, $J_{34}$, $\mu_1$ und $\mu_4$ frei gewählt werden, sodass keine zusätzlichen Forderungen ohne Vernachlässigung anderer Bedingungen gestellt werden können. Wie jedoch zuvor besprochen sind die Bedingungen (4.7c) und (4.7d) an die Phasen in einem Vielteilchensystem nur solange sinnvoll, wie sich das Gesamtsystem in einem MF-artigen Zustand befindet. Durch die Selbstwechselwirkung der Teilchen in den einzelnen Mulden geht die Reinheit in einem Vielteilchensystem jedoch zwangsläufig verloren [41, 112], sodass auch der Zusammenhang zwischen den Größen $c_{kl}^{(1)}$ und der Phasenbeziehung zwischen den Mulden $k$ und $l$ verschwindet und die Bedingungen (4.45c) und (4.45d) an Bedeutung verlieren. Die Bedingungen (4.45a) und (4.45b) hingegen definieren sehr scharf die Beziehung zwischen Tunnel- und Kopplungsprozessen. Es erscheint daher notwendig, die Bedingungen an die Gitterpunktenergien zu modifizieren.

Wie im Folgenden noch gezeigt wird, lässt sich die Forderung $\dot{\sigma}_{23}^{(1)} = 0$ in der Form

$$\alpha\mu_1 + \beta\mu_4 = \Omega\,, \tag{4.46}$$

mit $\alpha, \beta, \Omega \in \mathbb{C}$ schreiben, wobei Real- und Imaginärteil jeweils Geraden im Parameterraum $(\mu_1, \mu_4)$ darstellen. Die Gitterpunktenergien ergeben sich dann als Lösungen dieser komplexen Gleichung, die in Anhang B zu finden sind. Hierbei muss jedoch beachtet werden, dass Real- und Imaginärteil dieser Gleichungen im MF äquivalente Forderungen darstellen und daher abhängig sind. Obwohl diese Abhängigkeit für einen beliebigen Vielteilchenzustand im Allgemeinen nicht besteht, so wird das hier betrachtete System jedoch in einem MF-artigen Vielteilchenzustand präpariert. Das bedeutet, dass die Lösungsgeraden zur Anfangszeit identisch sind und für kurze Zeiten zumindest noch sehr ähnlich verlaufen. Die Lösung, die sich als Schnittpunkt dieser Geraden ergibt, kann also praktisch eine beliebige Größenordnung besitzen und stellt damit keine sinnvolle Wahl dar. Aus diesem Grund kann nur eine der beiden reellen Forderungen verwendet werden, sodass sich diese Bedingung auf eine reelle Gleichung mit $\alpha, \beta, \Omega \in \mathbb{R}$ reduziert, welche natürlich wiederum eine Gerade im Parameterraum $(\mu_1, \mu_4)$ darstellt. Dies entspricht einem Freiheitsgrad, der jedoch nur im MF tatsächlich existiert, und bei einem Vielteilchenproblem daher nur eine *Quasifreiheit* darstellt. Da auf diese Weise nur eine Forderung exakt erfüllt werden kann, soll die reelle Gleichung (4.46) der Erhaltung des Stroms $\tilde{j}_{23}^{(1)}$ entsprechen. Mit einem stationären Strom zwischen den Systemmulden sollten sich mit

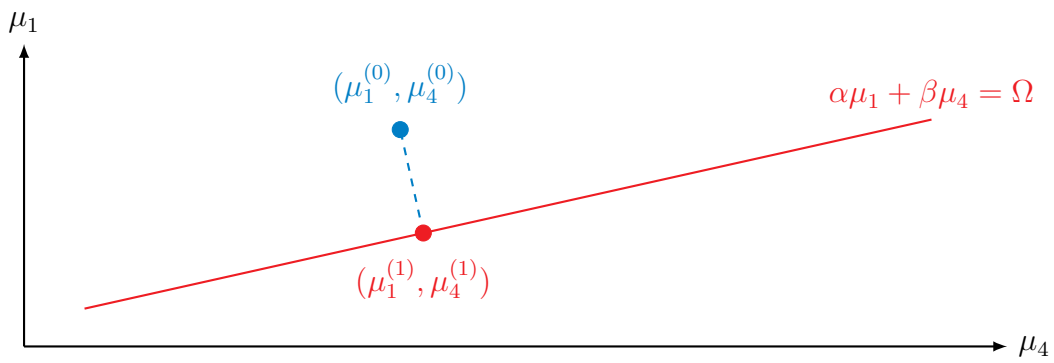



**Abbildung 4.3**: Eine zusätzliche Forderung der Form $\alpha\mu_1 + \beta\mu_4 = \Omega$ stellt eine Gerade im Parameterraum der chemischen Potentiale $\mu_1$ und $\mu_4$ dar. Die modifizierten Parameter $\mu_1^{(1)}$ und $\mu_4^{(1)}$ werden so gewählt, dass die ursprünglichen Lösungen $\mu_1^{(0)}$ und $\mu_4^{(0)}$ noch bestmöglich erfüllt sind.

dem entsprechenden Anfangszustand ebenfalls stationäre Besetzungszahlen $n_2$ und $n_3$ einstellen, falls $j_{12}(t) = j_{23}(t) = j_{34}(t)$ für alle Zeiten $t$ gilt.

Um eine zusätzliche reelle Bedingung exakt berücksichtigen zu können, sollen die ursprünglichen Bedingungen (4.45c) und (4.45d) nun *aufgeweicht* werden. Das bedeutet, dass anstatt einen beliebigen Punkt auf der Lösungsgeraden unter Ausnutzung der Quasifreiheit auszuwählen, die Lösung $(\mu_1^{(1)}, \mu_4^{(0)})$ gesucht wird, welche wie in Abbildung 4.3 zu sehen der ursprünglichen Lösungen $(\mu_1^{(0)}, \mu_4^{(0)})$ am nächsten kommt. Die gesuchten modifizierten Gitterpunktenergien $\mu_1^{(1)}$ und $\mu_4^{(1)}$ entsprechen dann wie in Abbildung 4.3 dargestellt dem Schnittpunkt der Geraden (4.46) mit der Normalen, welche durch die ursprüngliche Lösung verläuft. Die Normale ist durch

$$\beta\left(\mu_1 - \mu_1^{(0)}\right) - \alpha\left(\mu_4 - \mu_4^{(0)}\right) = 0 \tag{4.47}$$

gegeben. Die neue Lösung lässt sich leicht berechnen und liefert

$$\mu_1^{(1)} = \frac{\alpha\Omega + \beta^2\mu_1^{(0)} - \alpha\beta\mu_4^{(0)}}{\alpha^2 + \beta^2}\,, \tag{4.48a}$$

$$\mu_4^{(1)} = \frac{\beta\Omega + \alpha^2\mu_4^{(0)} - \alpha\beta\mu_1^{(0)}}{\alpha^2 + \beta^2}\,. \tag{4.48b}$$

Die zusätzliche Forderung (4.46) kann also durch eine Korrektur der Parameter (4.45c) und (4.45d) berücksichtigt werden, sodass $\mu_{1/4}^{(1)} = \mu_{1/4}^{(0)} + \Delta\mu_{1/4}$, wobei die Korrektur aus (4.48) folgt,

$$\Delta\mu_1 = \frac{\alpha\Omega - \alpha^2\mu_1^{(0)} - \alpha\beta\mu_4^{(0)}}{\alpha^2 + \beta^2}\,, \tag{4.49a}$$

$$\Delta\mu_4 = \frac{\beta\Omega - \beta^2\mu_4^{(0)} - \alpha\beta\mu_1^{(0)}}{\alpha^2 + \beta^2}\,. \tag{4.49b}$$

Nun müssen noch die Parameter $\alpha$, $\beta$ und $\Omega$ in Gleichung (4.46) bestimmt werden. Da diese Bedingung zur Fixierung der Größen $\tilde{j}_{23}^{(1)}$ und $c_{23}^{(1)}$ dienen soll, entspricht sie gerade der Forderung $\dot{\sigma}_{23}^{(1)} = -\boldsymbol{i}\mathcal{Z}_{23}^{(1)} = 0$. Hierbei treten jedoch keine Gitterpunktenergien $\mu_1$ und $\mu_4$ auf, daher wird wiederum die Idee aus Abschnitt 4.2.2 aufgegriffen. Falls zur Anfangszeit gilt, dass $\mathcal{Z}_{23}^{(1)} = 0$, so lässt sich dies durch die Forderung

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{Z}_{23}^{(1)}(t) = 0 \tag{4.50}$$

für alle Zeiten $t$ sicherstellen.

Es gilt

$$\begin{aligned}\boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{Z}_{23}^{(1)} = \boldsymbol{i}\left[\frac{\partial}{\partial t}J_{12}\right]\sigma_{13}^{(1)} - \boldsymbol{i}\left[\frac{\partial}{\partial t}J_{34}\right]\sigma_{24}^{(1)} + J_{23}(\mathcal{Z}_{33} - \mathcal{Z}_{22})\\ + J_{12}\Big(\mathcal{Z}_{13} - \mu_1\sigma_{13}^{(1)}\Big) - J_{34}\Big(\mathcal{Z}_{24} + \mu_4\sigma_{24}^{(1)}\Big)\\ - U_2\Big(\mathcal{Z}_{2223}^{(2)} - \mathcal{Z}_{23}^{(1)}\Big) + U_3\Big(\mathcal{Z}_{2333}^{(2)} - \mathcal{Z}_{23}^{(1)}\Big)\,,\end{aligned} \tag{4.51}$$

wobei ausgenutzt wurde, dass $\mu_2 = \mu_3 = 0$. Die Tunnelraten $J_{12}$ und $J_{34}$ sind durch (4.45a) und (4.45b) gegeben, für die Ableitungen folgt

$$\frac{\partial}{\partial t}J_{12} = J_{12}\left(\frac{1}{n_2}\frac{\partial}{\partial t}n_2 - \frac{1}{\tilde{j}_{12}^{(1)}}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{12}^{(1)}\right) = J_{12}\left(\frac{\mathcal{Y}_{22}^{(1)}}{2n_2} + \frac{\mathcal{X}_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}} - \mu_1\frac{c_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}}\right), \tag{4.52a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}J_{34} = J_{34}\left(\frac{1}{n_3}\frac{\partial}{\partial t}n_3 - \frac{1}{\tilde{j}_{34}^{(1)}}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{34}^{(1)}\right) = J_{34}\left(\frac{\mathcal{Y}_{22}^{(1)}}{2n_2} + \frac{\mathcal{X}_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{34}^{(1)}} + \mu_4\frac{c_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{34}^{(1)}}\right). \tag{4.52b}$$

Für stationäre Zustände gilt $\dot{n}_2 = \mathcal{Y}_{22}^{(1)} = 0$ und $\dot{n}_3 = \mathcal{Y}_{33}^{(1)} = 0$, sodass die entsprechenden Terme in (4.54c) verschwinden sollten und daher vernachlässigbar sind.

Werden (4.51) und (4.52) nun in die Forderung (4.50) eingesetzt, so ergibt sich wie erwartet eine komplexe Gleichung der Form (4.46), die linear in $\mu_1$ und $\mu_4$ ist. Die Parameter lauten

$$\tilde{\alpha} = J_{12}\sigma_{13}^{(1)}\left(1 + \boldsymbol{i}\frac{c_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}}\right), \tag{4.53a}$$

$$\tilde{\beta} = J_{34}\sigma_{24}^{(1)}\left(1 + \boldsymbol{i}\frac{c_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{24}^{(1)}}\right), \tag{4.53b}$$

$$\begin{aligned}\tilde{\Omega} = {} & \mathrm{i} J_{12}\sigma_{13}^{(1)}\frac{\mathcal{X}_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}} - \mathrm{i} J_{34}\sigma_{24}^{(1)}\frac{\mathcal{X}_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{34}^{(1)}} \\ & + J_{12}\mathcal{Z}_{13}^{(1)} - J_{34}\mathcal{Z}_{24}^{(1)} + J_{23}\Big(\mathcal{Z}_{33}^{(1)} - \mathcal{Z}_{22}^{(1)}\Big) \\ & - U_2\Big(\mathcal{Z}_{2223}^{(2)} - \mathcal{Z}_{23}^{(1)}\Big) + U_3\Big(\mathcal{Z}_{2333}^{(2)} - \mathcal{Z}_{23}^{(1)}\Big)\,.\end{aligned} \tag{4.53c}$$

Wie zuvor diskutiert, sind Real- und Imaginärteil der Gleichung (4.46) im MF nicht unabhängig, sodass nur eine reelle Gleichung verbleibt. Hierzu sollen die Imaginärteile der Parameter (4.53) verwendet werden, da diese gemäß (4.42a) mit dem Strom zusammenhängen, denn $\dot{\mathcal{X}}_{23}^{(1)} = 2\,\mathrm{Im}(\mathrm{i}\dot{\mathcal{Z}}_{23}^{(1)})$. Damit gilt

$$\alpha = 2\,\mathrm{Im}\,\tilde{\alpha} = J_{12}\left(\tilde{j}_{13}^{(1)} + c_{13}^{(1)}\frac{c_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}}\right), \tag{4.54a}$$

$$\beta = 2\,\mathrm{Im}\,\tilde{\beta} = J_{34}\left(\tilde{j}_{24}^{(1)} + c_{13}^{(1)}\frac{c_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{24}^{(1)}}\right), \tag{4.54b}$$

$$\begin{aligned}\Omega = 2\,\mathrm{Im}\,\tilde{\Omega} = {} & J_{12}c_{13}^{(1)}\frac{\mathcal{X}_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}} - J_{34}c_{24}^{(1)}\frac{\mathcal{X}_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{34}^{(1)}} \\ & + J_{12}\mathcal{Y}_{13}^{(1)} - J_{34}\mathcal{Y}_{24}^{(1)} + J_{23}\Big(\mathcal{Y}_{33}^{(1)} - \mathcal{Y}_{22}^{(1)}\Big) \\ & - U_2\Big(\mathcal{Y}_{2223}^{(2)} - \mathcal{Y}_{23}^{(1)}\Big) + U_3\Big(\mathcal{Y}_{2333}^{(2)} - \mathcal{Y}_{23}^{(1)}\Big)\,.\end{aligned} \tag{4.54c}$$

Hierbei sei angemerkt, dass diese Größen im Allgemeinen natürlich zeitabhängig sind, was jedoch der Übersichtlichkeit halber an dieser Stelle nicht explizit gekennzeichnet wird.

### Stationäre Besetzungszahlen

Die Gleichungen (4.45) beschreiben die Kopplung eines eingebetteten Zweimodensystems mit den Reservoirmulden für beliebige Kopplungsstärken, sodass die Forderung nach $\mathcal{PT}$-symmetrischen stationären Lösungen lediglich über die Wahl von $\gamma$ und die Präparation des Anfangszustandes umgesetzt wird. Eine andere Möglichkeit besteht nun darin, die Erhaltung der Besetzungen in den Systemmulden explizit zu fordern, was zum Ausschluss der $\mathcal{PT}$-gebrochenen Lösungen und der zugehörigen Werte für $\gamma$ führt.

Eine solche Forderung lässt sich nicht über die Gitterpunktenergien realisieren, weshalb stattdessen die Gleichungen (4.45a) und (4.45b) durch neue Bedingungen an die Tunnelraten ersetzt werden müssen. Diese Bedingungen lauten

$$j_{12} = j_{23}\,, \tag{4.55a}$$

$$j_{34} = j_{23}\,, \tag{4.55b}$$

was für die Tunnelraten

$$J_{12}(t) = J_{23}\frac{\tilde{j}_{23}^{(1)}(t)}{\tilde{j}_{12}^{(1)}(t)}\,, \tag{4.56a}$$

$$J_{34}(t) = J_{23}\frac{\tilde{j}_{23}^{(1)}(t)}{\tilde{j}_{34}^{(1)}(t)} \tag{4.56b}$$

liefert. Die Gleichungen (4.56) stimmen im MF mit den ursprünglichen Bedingungen aufgrund der Anfangsbedingung (4.22) für stationäre Zustände überein. Die Kopplungskonstante $\gamma$ geht nur noch über den Anfangszustand in das System ein, sodass wiederum das zeitlich lineare Verhalten der Reservoirbesetzungen verloren geht.

Wie zuvor garantiert diese Parameterwahl keine stationären Ströme, sodass auch hier die Gitterpunktenergien entsprechend modifiziert werden können. Die Gleichungen (4.52) sind nun nicht mehr gültig, stattdessen müssen die Ableitungen von (4.56) verwendet werden,

$$\frac{\partial}{\partial t}J_{12} = J_{12}\left(\frac{1}{\tilde{j}_{23}^{(1)}}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{23}^{(1)} - \frac{1}{\tilde{j}_{12}^{(1)}}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{12}^{(1)}\right) = J_{12}\left(-\frac{\mathcal{X}_{23}^{(1)}}{\tilde{j}_{23}^{(1)}} + \frac{\mathcal{X}_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}} - \mu_1\frac{c_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}}\right), \tag{4.57a}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}J_{34} = J_{34}\left(\frac{1}{\tilde{j}_{23}^{(1)}}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{23}^{(1)} - \frac{1}{\tilde{j}_{34}^{(1)}}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{34}^{(1)}\right) = J_{34}\left(-\frac{\mathcal{X}_{23}^{(1)}}{\tilde{j}_{23}^{(1)}} + \frac{\mathcal{X}_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{34}^{(1)}} + \mu_4\frac{c_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{34}^{(1)}}\right). \tag{4.57b}$$

Diese unterschieden sich von den Ableitungen (4.52) jedoch lediglich um einen Term, der hier wiederum vernachlässigt werden kann, da $\mathcal{X}_{23}^{(1)} = 0$ dem Verschwinden der Ableitung (4.42a) und damit wie gefordert einem stationären Strom zwischen den Systemmulden entspricht. Die Parameter (4.54) können daher ohne Abänderungen auch hier verwendet werden.

### 4.3.4. Einschalten der Wechselwirkung

Die Anfangsbedingungen im Vielteilchensystem basieren auf dem Anfangszustand im MF, der durch Gleichung (4.23) gegeben ist. Dieser Anfangszustand ist unabhängig von der Parameterwahl und gilt daher insbesondere auch im Fall verschwindender Wechselwirkung. Ohne Wechselwirkung entkoppelt die BBGKY-Hierarchie und das Verhalten des Systems lässt sich über die Einteilchendynamik charakterisieren. Das bedeutet, dass die Teilchen einander nicht spüren und sich somit gleich verhalten. Diese Tatsache wird auch aus einem Vergleich der Gleichungen (4.12b) und (4.41b) für $U = 0$ klar. Das bedeutet wiederum, dass der Anfangszustand als Zustand des Systems ohne Wechselwirkung angesehen werden kann. Wenn im ersten Zeitschritt nun eine Wechselwirkung auftaucht, so verändert dies die Eigenschaften des Vielteilchensystems unmittelbar, was sich auf die weitere Zeitentwicklung auswirkt.

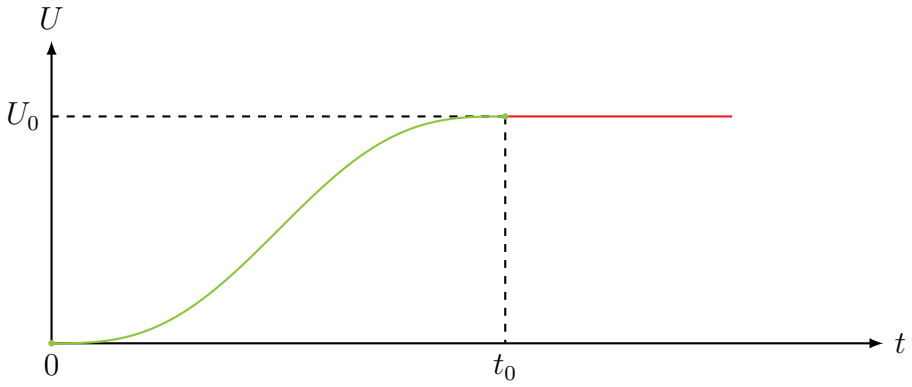



**Abbildung 4.4**: Ein adiabatischer Einschaltvorgang der Wechselwirkung kann durch Feschbach-Resonanzen erreicht werden. Die Wechselwirkung wird dabei stetig auf den gewünschten Wert $U_0$ zur Zeit $t_0$ erhöht, sodass ein sprunghafter Anstieg vermieden wird.

Eine einfache Möglichkeit einen Sprung der Wechselwirkung zwischen dem Anfangszuständen und den weiteren Zuständen zu vermeiden ist in Abbildung 4.4 dargestellt. Dazu wird in der Anfangsphase ein adiabatischer Einschalvorgang eingefügt, in der die Wechselwirkungsstärke $U$ stetig auf den gewünschten Wert $U_0$ bei der Zeit $t_0$ erhöht wird. Über Feshbach-Resonanzen ist die Wechselwirkung praktisch beliebig einstellbar [110], sodass $U$ nun ebenfalls zeitabhängig sein soll. Als mögliche Einschaltfunktion wird in dieser Arbeit

$$U(t) = \begin{cases} U_0\left(\frac{t}{t_0} - \frac{1}{2\pi}\sin\left(2\pi\frac{t}{t_0}\right)\right) & 0 \leq t \leq t_0 \\ U_0 & t_0 < t \end{cases} \tag{4.58}$$

verwendet, da diese Funktion stetig in den ersten beiden Ableitungen ist,

$$\frac{\partial}{\partial t}U(t)\bigg|_{\substack{t=0\\t=t_0}} = \frac{U_0}{t}\left(1 - \cos\left(2\pi\frac{t}{t_0}\right)\right)\bigg|_{\substack{t=0\\t=t_0}} = 0\,, \tag{4.59a}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}U(t)\bigg|_{\substack{t=0\\t=t_0}} = \frac{2\pi U_0}{t_0^2}\sin\left(2\pi\frac{t}{t_0}\right)\bigg|_{\substack{t=0\\t=t_0}} = 0\,. \tag{4.59b}$$

Da die Wechselwirkungsstärke nun zeitabhängig ist, tauchen in der Gleichung (4.51) aus Abschnitt 4.3.3 zusätzliche Terme auf, welche eine Korrektur zu $\Omega$ aus Gleichung (4.54c) darstellen,

$$\Delta\Omega = -\left(\tilde{j}^{(2)}_{2223} - \tilde{j}^{(1)}_{23}\right)\frac{\partial}{\partial t}U_2 + \left(\tilde{j}^{(2)}_{2333} - \tilde{j}^{(1)}_{23}\right)\frac{\partial}{\partial t}U_3\,. \tag{4.60}$$

### 4.3.5. Reinheit

Wie in Abschnitt 4.3.1 diskutiert, werden MF-artige Anfangszustände für die Vielteilchenbeschreibungen verwendet, was einem reinen Vielteilchenzustand entspricht. Für die Verwendung der Gleichungen (4.45) ist ein reiner Zustand absolut notwendig. Durch Kopplung der Einteilchendynamik an die Mehrteilchendynamik wird dieser Zustand jedoch über kurz oder lang verloren gehen. Um diesen Prozess zu charakterisieren, lässt sich eine Größe für die Reinheit des Systems definieren [105]. Dazu wird das Kriterium für Bose-Einstein-Kondensation aus Abschnitt 2.1.1 aufgegriffen.

Die reduzierte SPDM (2.5) besitzt für ein reines ideales BEC mit entsprechender Sortierung der Basiszustände die Form

$$\sigma_{red}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} . \tag{4.61}$$

Falls die SPDM mehr als einen von Null verschiedenen Eigenwert besitzt, so liegt bereits kein reines BEC im eigentlichen Sinne vor. Der am unreinste Zustand in einem $M$-Modenmodell besitzt eine reduzierte SPDM der Form

$$\sigma_{red}^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{M} & & \\ & \frac{1}{M} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} , \tag{4.62}$$

was bei ausreichend hoher Teilchenzahl in jeder Mulde einem fraktionierten BEC entspricht.

In einem $M$-Modenmodell ist die Größe

$$P_M = \frac{M \operatorname{tr}\left(\sigma_{\text{red}}^{(1)} \cdot \sigma_{\text{red}}^{(1)}\right) - 1}{M - 1} \tag{4.63}$$

auf den Zahlenbereich $[0, 1]$ beschränkt, und kann als Maß für die Reinheit verwendet werden. Für ein reines Kondensat ist die reduzierte SPDM idempotent bezüglich der Matrixmultiplikation, sodass $P_M = 1$. Für ein gänzlich unreines Kondensat hingegen gilt

$$\operatorname{tr}\left(\sigma_{\text{red}}^{(1)} \cdot \sigma_{\text{red}}^{(1)}\right) = \operatorname{tr} \begin{pmatrix} \frac{1}{M^2} & & \\ & \frac{1}{M^2} & \\ & & \ddots \end{pmatrix} = M \frac{1}{M^2} = \frac{1}{M} , \tag{4.64}$$

sodass $P_M = 0$.

### 4.3.6. Zusammenfassung

Um BGL auch in einem Vielteilchensystem zu realisieren, muss der Anfangszustand aus dem MF in die Vielteilchenbeschreibung übertragen werden. Für das BHM geschieht dies über die Vielteilchenwellenfunktion

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{n_1,\ldots,n_M \\ N_M=N}} c_{n_1,\ldots,n_M} |n_1,\ldots,n_M\rangle \,, \tag{4.35a}$$

mit den Koeffizienten

$$c_{n_1,\ldots,n_M} = \sqrt{N!} \prod_{m=1}^{M} \frac{\psi_m^{n_m}}{\sqrt{n_m!}} \,, \tag{4.35b}$$

die Anfangsparameter der BBR-Methode ergeben sich entsprechend,

$$\sigma_{kl}^{(1)} = N\psi_k^*\psi_l \,, \tag{4.38}$$

$$\sigma_{klmn}^{(2)} = N(N-1)\psi_k^*\psi_l\psi_m^*\psi_n + N\psi_k^*\delta_{lm}\psi_n \,. \tag{4.40}$$

Nun lassen sich wiederum entsprechende Bedingungen an die Kontrollparameter formulieren, um eine MF-artige Kopplung des eingebetteten Zweimodensystems an die Reservoirmulden zu realisieren. Diese lauten im Allgemeinen

$$J_{12}(t) = \frac{2\gamma n_2(t)}{\widetilde{j}_{12}^{(1)}(t)} \,, \tag{4.45a}$$

$$J_{34}(t) = \frac{2\gamma n_3(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} \,, \tag{4.45b}$$

$$\mu_1(t) = \frac{\mathcal{Y}_{12}^{(1)}(t)}{\widetilde{j}_{12}^{(1)}(t)} = -J_{23}\frac{\widetilde{j}_{13}^{(1)}(t)}{\widetilde{j}_{12}^{(1)}(t)} - U_1\left(\frac{\widetilde{j}_{1112}^{(2)}(t)}{\widetilde{j}_{12}^{(1)}(t)} - 1\right) + U_2\left(\frac{\widetilde{j}_{1222}^{(2)}(t)}{\widetilde{j}_{12}^{(1)}(t)} - 1\right) , \tag{4.45c}$$

$$\mu_4(t) = -\frac{\mathcal{Y}_{34}^{(1)}(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} = -J_{23}\frac{\widetilde{j}_{24}^{(1)}(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} + U_3\left(\frac{\widetilde{j}_{3334}^{(2)}(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} - 1\right) - U_4\left(\frac{\widetilde{j}_{3444}^{(2)}(t)}{\widetilde{j}_{34}^{(1)}(t)} - 1\right) . \tag{4.45d}$$

Die Wahl der Bedingungen ist hierbei nicht eindeutig, im Spezialfall stationärer Lösungen etwa können andere Bedingungen an die Tunnelraten gestellt werden,

$$J_{12}(t) = J_{23}\frac{\widetilde{j}_{23}(t)}{\widetilde{j}_{12}(t)} \,, \tag{4.56a}$$

$$J_{34}(t) = J_{23}\frac{\widetilde{j}_{23}(t)}{\widetilde{j}_{34}(t)} \,. \tag{4.56b}$$

Im Gegensatz zum MF sind diese Bedingungen jedoch in keinem Fall ausreichend, um quasistationäre Lösungen zu erhalten, da die Effektivität der Bedingungen stark von der

Reinheit (4.63) des Vielteilchensystems abhängt. Da die Reinheit durch Wechselwirkungen zwangsläufig abnimmt, können die Gitterpunktenergien um

$$\Delta\mu_1 = \frac{\alpha\Omega - \alpha^2\mu_1^{(0)} - \alpha\beta\mu_4^{(0)}}{\alpha^2+\beta^2}\,, \tag{4.49a}$$

$$\Delta\mu_4 = \frac{\beta\Omega - \beta^2\mu_4^{(0)} - \alpha\beta\mu_1^{(0)}}{\alpha^2+\beta^2}\,, \tag{4.49b}$$

korrigiert werden, um einen stationären Strom zu erzwingen, wobei

$$\alpha = J_{12}\left(\tilde{j}_{13}^{(1)} + c_{13}^{(1)}\frac{c_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}}\right), \tag{4.54a}$$

$$\beta = J_{34}\left(\tilde{j}_{24}^{(1)} + c_{24}^{(1)}\frac{c_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{24}^{(1)}}\right), \tag{4.54b}$$

$$\begin{aligned}\Omega = {} & J_{12}c_{13}^{(1)}\frac{\mathcal{X}_{12}^{(1)}}{\tilde{j}_{12}^{(1)}} - J_{34}c_{24}^{(1)}\frac{\mathcal{X}_{34}^{(1)}}{\tilde{j}_{34}^{(1)}} \\ & + J_{12}\mathcal{Y}_{13}^{(1)} - J_{34}\mathcal{Y}_{24}^{(1)} + J_{23}\left(\mathcal{Y}_{33}^{(1)} - \mathcal{Y}_{22}^{(1)}\right) \\ & - U_2\left(\mathcal{Y}_{2223}^{(2)} - \mathcal{Y}_{23}^{(1)}\right) + U_3\left(\mathcal{Y}_{2333}^{(2)} - \mathcal{Y}_{23}^{(1)}\right).\end{aligned} \tag{4.54c}$$

Der MF-Anfangszustand entspricht einem Zustand des Vielteilchensystems ohne Wechselwirkungen, also für $U = 0$. Für den Zustand verändern sich die Eigenschaften des Systems dann sprunghaft für $U \neq 0$ zur Zeit $t = 0$. Um das System adiabatisch in einen Zustand mit Wechselwirkung $U_0$ zu überführen, wird die Wechselwirkung als zeitabhängig angenommen mit

$$U(t) = \begin{cases} U_0\left(\frac{t}{t_0} - \frac{1}{2\pi}\sin\left(2\pi\frac{t}{t_0}\right)\right) & 0 \leq t \leq t_0 \\ U_0 & t_0 < t \end{cases}, \tag{4.58}$$

wobei dann wiederum der Parameter $\Omega$ durch

$$\Delta\Omega = -\left(\tilde{j}_{2223}^{(2)} - \tilde{j}_{23}^{(1)}\right)\frac{\partial}{\partial t}U_2 + \left(\tilde{j}_{2333}^{(2)} - \tilde{j}_{23}^{(1)}\right)\frac{\partial}{\partial t}U_3\,, \tag{4.60}$$

korrigiert werden muss.

## 4.4. Implementation

Der vorliegende Abschnitt soll kurz die grundlegende numerische Vorgehensweise darstellen, Aufbau und Ablauf des Programms sind schematisch in Abbildung 4.5 zu sehen.

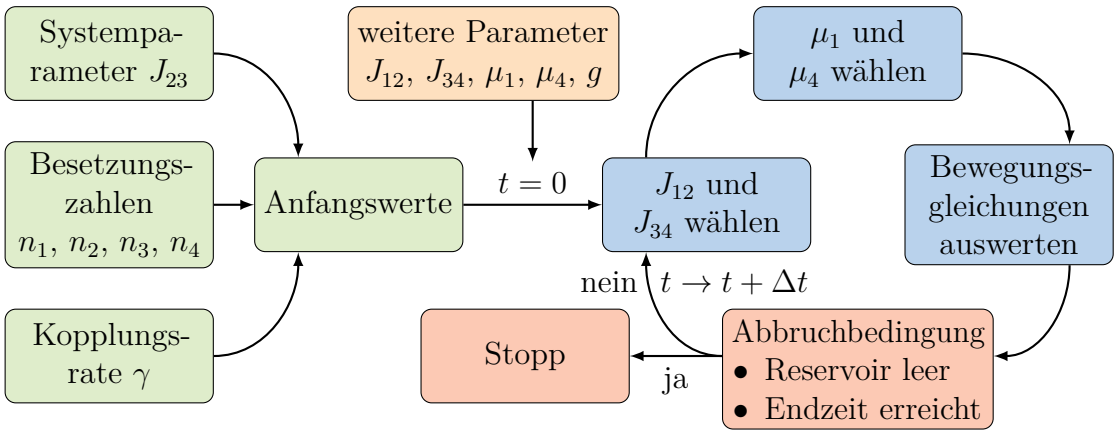



**Abbildung 4.5**: Aufbau und Ablauf des Programms sind prinzipiell für alle in dieser Arbeit betrachteten Systeme gleich. Für das MF werden die Bewegungsgleichungen aus Abschnitt 3.3 und die Parameter aus Abschnitt 4.2.4 verwendet. Für das Vielteilchensystem sind die entsprechenden Parameter in Abschnitt 4.3.6 zusammengefasst. Die vollständige Vielteilchendynamik ist dann durch das BHM aus Abschnitt 3.2 gegeben, für die BBR-Näherung hingegen werden die Bewegungsgleichungen aus Abschnitt 3.4 verwendet. Die Abbruchbedingungen sollten zusätzlich noch Integrationsprobleme abfangen und sind daher im Allgemeinen abhängig von der verwendeten Integrationsmethode.

In jedem Zeitschritt der Integration müssen die Parameter des reellen optischen Potentials angepasst werden. Die Anfangsbedingungen und die Wahl der Parameter wurden in den Abschnitten 4.2 und 4.3 bereits ausführlich diskutiert, eine Zusammenfassung ist jeweils für das MF unter Abschnitt 4.2.4 und für das Vielteilchensystem unter Abschnitt 4.3.6 zu finden. Die Integration umfasst jedoch neben der Wahl der Parameter auch die Auswertung der jeweiligen Bewegungsgleichungen und bildet somit den Kern des Programms.

### 4.4.1. Auswertung der Bewegungsgleichungen

Das BHM (3.7) kann entsprechend [91] behandelt werden. Dazu wird zuerst eine lexikographische Fock-Basis erzeugt, mit der sich dann die von Null verschiedenen Einträge der Hamilton-Matrix berechnen lassen. Hierbei wird jedoch keine Bisektion verwendet, wie in [91] vorgeschlagen, sondern die lexikographische Sprungverschiebung (3.17) aus Abschnitt 3.2.3. Da viele Einträge der Hamilton-Matrix des BHM verschwinden, ist es sinnvoll, die Matrixmultiplikation direkt auszuführen, ohne die Matrixeinträge explizit zu speichern [89].

Die Behandlung eines vollen Vielteilchenproblems ist dennoch enorm aufwendig und der zugängliche Teilchenzahlbereich ist dementsprechend gering. Jedoch ist dieses Problem hochgradig parallelisierbar, denn der Hamilton-Operator lässt sich zeilenweise auswerten, wobei jede Zeile unabhängig von den anderen behandelt werden kann. Die Auswertung des Hamilton-Operators lässt sich also auf $D$ parallele Prozesse übertragen, wobei die Dimension durch (3.11) gegeben ist, sodass sich die Rechenzeit eines Integrationsschrittes prinzipiell auf die Auswertung einer einzelnen Zeile der Hamilton-Matrix reduziert.

Eine zentrale Prozessoreinheit (*Central Processing Unit*, CPU) ist für eine derartige Aufgabe nur bedingt geeignet, da diese nur wenige Kerne besitzt, die jeweils jedoch komplexe Aufgaben erledigen können. Eine Grafikprozessoreinheit (*Graphics Processing Unit*, GPU) hingegen besitzt viele Kerne, die ihrerseits wiederum nur für primitive Aufgaben ausgelegt sind. GPUs spielen in der Numerik eine immer größere Rolle, da sich viele Probleme und Algorithmen parallelisieren lassen und moderne Grafikkarten eine große Anzahl an Kernen und damit eine enorme Rechenleistung besitzen. Eine GPU lässt sich über die von NVIDIA entwickelte Programmierschnittstelle CUDA ansteuern und nutzen. Hierbei muss jedoch beachtet werden, dass GPUs eine von CPUs vollkommen verschiedene Architektur aufweisen und daher andere Programmierkonzepte notwendig sind, dies wurde bereits in [89] behandelt. Für Details zur Konzeption und Verwendung von CUDA sei auf die Literatur [113, 114] und auf die CUDA-Dokumentation [115] verwiesen.

Eine Parallelisierung des Vielteilchenproblems bringt starke Verbesserungen mit sich, es lassen sich hiermit Teilchenzahlen bis $N \sim 200$ sinnvoll behandeln (NVIDIA Tesla C2075). Um größere Teilchenzahlen zu untersuchen wird die BBR-Näherung aus Abschnitt 3.4 in Form des gekoppelten Differentialgleichungssystems (3.36) mit (3.46) verwendet. Obwohl sich prinzipiell auch die Auswertung der BBR-Methode durch CUDA parallelisieren lässt, ist der Aufwand bei einem Viermodensystem relativ gering und insbesondere unabhängig von der Gesamtteilchenzahl, da die Anzahl der Gleichungen selbst nur durch die Anzahl der Potentialmulden bestimmt wird.

### 4.4.2. Integration der Bewegungsgleichungen

Durch die Zeitabhängigkeit der Parameter stellt die Integration ein absolut nichttriviales Problem dar. Hinzu kommt noch die hohe Dimensionalität von Vielteilchenproblemen, was insbesondere für das BHM gilt. Aus diesen Grund wird für die Integration ein möglichst effizienter Algorithmus benötigt.

Unter allen Verfahren zur Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen gehören die Runge-Kutta (RK)-Verfahren sicherlich zu den effizientesten. Das weithin bekannte und viel genutzte klassische vierstufige RK-Verfahren liefert eine hohe Genauigkeit, bei möglichst geringem Aufwand. Das `RK4`-Verfahren benötigt genau vier Auswertungen der

Bewegungsgleichungen, ebensoviele wie die Ordnung des Verfahrens. Bei höheren Ordnungen steigt die Zahl der Auswertungen stärker an und damit auch der Aufwand. Mithilfe eingebetteter RK-Formeln [116–119] lassen sich Algorithmen mit einer dynamischen Schrittweite realisieren [120]. Eine Schrittweitensteuerung dient hierbei nicht nur der Einhaltung von Fehlertoleranzen sondern kann auch die Integrationszeit stark reduzieren. Viele Bibliotheken zur Integration gewöhnlicher Differentialgleichungen wie die in dieser Arbeit verwendete `RKSUITE` [121] stellen heutzutage RK-Verfahren mit Schrittweitensteuerung zur Verfügung. Obwohl diese Implementationen hoch optimiert sind, weisen diese in Verbindung mit CUDA einem enormen Nachteil auf. Um auf einer GPU zu rechnen, muss entsprechender Speicherplatz auf der Grafikkarte verwendet werden. Kopiervorgänge zwischen CPU- und GPU-Speicher sind jedoch aufwendig, insbesondere bei großen Datenmengen, und die Dimension der Fock-Basis bei der Auswertung des BHM ist im Allgemeinen sehr groß. Wenn die Auswertung nun auf einer GPU, die Integration hingegen auf einer CPU geschieht, so sind pro Integrationsschritt zwei Kopiervorgänge notwendig.

Zu diesem Zeitpunkt existiert noch keine GPU Implementation eines solchen Algorithmus. Der Grund hierfür ist der, dass sich ein RK-Schritt nicht parallelisieren lässt und die einzelnen Rechenoperationen auf einer CPU im Vergleich zu einer GPU stets schneller ablaufen. Durch eine CUDA-Implementation könnten höhere Teilchen- oder auch Muldenzahlen untersucht werden, was zur jetzigen Zeit durch enorm lange Rechenzeiten schlichtweg unzweckmäßig ist. Prinzipiell lassen sich eingebette RK-Verfahren jedoch problemlos mit CUDA implementieren, etwa ein RK-Fehlberg-Verfahren der Ordnung $\mathcal{O}(5)$ [117] mit Cash-Karp-Konstanten [122]. Jedoch eignet sich ein solcher Algorithmus nur für einfache Probleme [120] und liefert nicht die benötigte Effizienz. Ein aussichtsreicher Kandidat für eine entsprechende Implementierung stellt der Dormand-Prince-Algorithmus der Ordnung $\mathcal{O}(8)$ (`DoPr853`) dar [120], der jedoch bereits merklich komplexer und aufwendiger zu implementieren ist. In dieser Arbeit wird daher, wie bereits erwähnt, die `RKSUITE` verwendet, welche dennoch eine sehr effiziente Auswertung der Bewegungsgleichungen erlaubt.

### 4.4.3. Normierung und Skalierung der Kontaktwechselwirkung

Mit einer normierten Wellenfunktion im MF und im BHM oder normierten Parametern in der BBR-Methode zu rechnen, bringt zwei Vorteile mit sich. Zum einen ist die Größe der Zahlen von der Gesamtteilchenzahl unabhängig, sodass sich die Genauigkeit leicht durch eine absolute Zahl an Dezimalstellen beschreiben lässt. Zum anderen bringt insbesondere die Normierung auf Eins numerische Vorteile mit sich, da etwa Effekte wie die Stellenauslöschung in dieser Größenordnung meist unproblematisch sind. Das ist insbesondere wichtig in Verbindung mit einer Schrittweitensteuerung.

Die MF-Wellenfunktion skaliert mit $\sqrt{N}$ und kann daher einfach normiert werden. Hierfür

lassen sich etwa normierte Besetzungszahlen

$$\tilde{n}_k = \frac{n_k}{N} \tag{4.65}$$

einführen. Mit der Normierung der MF-Wellenfunktion ergibt sich mit den Gleichungen (4.35) auch eine normierte Vielteilchenwellenfunktion. Im BHM lässt sich die Wellenfunktion ebenfalls mit $\sqrt{N}$ normieren, dies gilt jedoch nicht für die gesamte BBGKY-Hierarchie. Aus Abschnitt 3.4.2 ist bekannt, dass die Einteilchendynamik von der Ordnung $\mathcal{O}(N)$ ist, die Zweiteilchendynamik hingegen besitzt die Ordnung $\mathcal{O}(N^2)$. Da in der hier verwendeten BBR-Näherung (3.45) keine weiteren Terme auftauchen, genügt es, die ersten beiden Ordnungen entsprechend zu normieren.

Hierbei muss jedoch unbedingt beachtet werden, dass all diese Bewegungsgleichungen nichtlineare Wechselwirkungsterme enthalten, sodass jeweils die Wechselwirkungsstärke entsprechend angepasst werden muss. Eine Skalierung der Kontaktwechselwirkung ist darüber hinaus notwendig, um insbesondere die einzelnen Viermodensysteme mit dem Zweimodensystem aus Abschnitt 2.3 vergleichen zu können.

Das $\mathcal{PT}$-symmetrische Zweimodensystem (2.19) wird in der Literatur stets für normierte Besetzungszahlen $n_1 = n_2 = 1/2$ betrachtet, sodass die Gesamtteilchenzahl auf $N = 1$ normiert ist. Die Normierung lässt sich ohne Beschränkung der Allgemeinheit stets wählen, da alle Größen des Zweimodensystems entsprechend skalieren. Ein Viermodensystem hingegen lässt sich zwar ebenso normieren, die Teilchenzahl des eingebetteten Systems jedoch hängt nun mit der Teilchenzahl des gesamten Systems über den Besetzungsunterschied zwischen System- und Reservoirmulden zusammen.

Um die Kontaktwechselwirkung für beliebige Besetzungszahlen der Systemmulden mit dem Zweimodenmodell (2.19) vergleichen zu können, muss

$$g_{\mathrm{MF}} = \frac{N}{N_2} g \,, \tag{4.66}$$

mit $N_2 \equiv n_2 + n_3$ gewählt werden. Dabei bezeichnet $g$ die Nichtlinearitätsstärke des normierten Zweimodenmodells. Der Faktor $N$, der wiederum bei der Definition der Nichtlinearitätsstärke im MF auftritt, muss im Allgemeinen durch einen Faktor $(N-1)$ ersetzt werden, also

$$g = (N-1)U_0 \,. \tag{4.67}$$

Dies rührt daher, dass für den MF-Übergang bereits eine sehr große Anzahl an Teilchen benötigt wird, sodass $(N-1) \sim N$ für $N \gg 1$. Anschaulich lässt sich dies auch so verstehen, dass bei einem einzelnen Teilchen, also $N = 1$, keine Wechselwirkung auftreten darf. Für die Kontaktwechselwirkungsstärke $U$ im BHM gilt also insgesamt

$$U = \frac{g_{\mathrm{MF}}}{N-1} \,. \tag{4.68}$$

Hier sei noch angemerkt, dass für eine effektive Beschreibung eigentlich nur die Gesamtteilchenzahl im eingebetteten System von Interesse ist, sodass $g = (N_2 - 1)U$ wie in [40]. Das würde jedoch bedeuten, dass die Teilchen in den Reservoirmulden für $N_2 = 1$ ebenfalls keine Wechselwirkung und somit wiederum nur eine Einteilchendynamik wie im MF erfahren würden. Da dies nicht gewollt ist, wird stets die Gesamtteilchenzahl verwendet.

Für die BBR-Näherung schließlich muss beachtet werden, dass die Einteilchen- und Zweiteilchenmatrizen jeweils unterschiedlich skaliert werden. Dies gilt jedoch sehr allgemein, so skaliert die nächsthöhere Ordnung in der BBGKY-Hierarchie stets mit einem zusätzlichen Faktor $N$. Für die normierte Einteilchen- und Zweiteilchendynamik (3.36) der BBGKY-Hierarchie folgt damit

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\sigma^{(1)}_{kl} &= J_{k-1,k}\sigma^{(1)}_{k-1,l} + J_{k+1,k}\sigma^{(1)}_{k+1,l} - J_{l,l-1}\sigma^{(1)}_{k,l-1} - J_{l,l+1}\sigma^{(1)}_{k,l+1} \\ &\quad - U_k\Big(N\sigma^{(2)}_{kkkl} - \sigma^{(1)}_{kl}\Big) + U_l\Big(N\sigma^{(2)}_{klll} - \sigma^{(1)}_{kl}\Big) \\ &\quad - (\mu_k - \mu_l)\sigma^{(1)}_{kl}\,, \end{aligned} \tag{4.69a}$$

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\sigma^{(2)}_{klmn} &= J_{k-1,k}\sigma^{(2)}_{k-1,lmn} + J_{k+1,k}\sigma^{(2)}_{k+1,lmn} \\ &\quad - J_{l,l-1}\sigma^{(2)}_{k,l-1,mn} - J_{l,l+1}\sigma^{(2)}_{k,l+1,mn} \\ &\quad + J_{m-1,m}\sigma^{(2)}_{kl,m-1,n} + J_{m+1,m}\sigma^{(2)}_{kl,m+1,n} \\ &\quad - J_{n,n-1}\sigma^{(2)}_{klm,n-1} - J_{n,n+1}\sigma^{(2)}_{klm,n+1} \\ &\quad - U_k\Big(N\sigma^{(3)}_{kkklmn} - \sigma^{(2)}_{klmn}\Big) \\ &\quad + U_l\Big(N\sigma^{(3)}_{klllmn} - \sigma^{(2)}_{klmn}\Big) \\ &\quad - U_m\Big(N\sigma^{(3)}_{klmmmn} - \sigma^{(2)}_{klmn}\Big) \\ &\quad + U_n\Big(N\sigma^{(3)}_{klmnnn} - \sigma^{(2)}_{klmn}\Big) \\ &\quad - (\mu_k - \mu_l + \mu_m - \mu_n)\sigma^{(2)}_{klmn}\,. \end{aligned} \tag{4.69b}$$

# 5. Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die numerischen Resultate der Systeme aus Kapitel 3 mit den Überlegungen aus Kapitel 4 gezeigt und diskutiert. Dazu wird zuerst der Einfluss der Kontrollparameter und das grundlegende Verhalten des BHM, sowie der MF und BBR-Näherungen untersucht. In Abschnitt 5.2 werden dann die zeitabhängigen Potentiale aus Kapitel 4 zur Realisierung von BGL betrachtet.

## 5.1. Konstante Potentiale

Zuerst werden zeitlich konstante Potentiale betrachtet, um die grundlegenden Eigenschaften des Viermodenmodells zu verstehen. Zu diesem Zweck sollen im Folgenden insbesondere die Tunnelraten $J$ und die Wechselwirkung $g$ näher untersucht werden. Die Gitterpunktsenergie $\mu_k$ entspricht wie bereits erwähnt der Definition des chemischen Potentials der Mulde $k$. Falls sich die chemischen Potentiale benachbarter Mulden unterscheiden, so werden Teilchen bevorzugt in die Mulde mit geringerem chemischen Potential tunneln, sofern sich dort nicht bereits so viele Teilchen aufhalten, dass die Selbstwechselwirkung den Energiegewinn überwiegt. In dem später betrachteten eingebetteten Zweimodensystem dürfen sich die chemischen Potentiale der Systemmulden aufgrund der Symmetrie des Potentials nicht unterscheiden und können durch Verschiebung der Gesamtenergie stets auf Null gesetzt werden. Die chemischen Potentiale der Reservoirmulden hingegen sind jeweils durch die Gleichungen aus den Abschnitten 4.2 und 4.3 festgelegt, sodass keine Freiheiten verbleiben. Daher ist es hier nicht nötig, das chemische Potential weiter zu beachten.

### 5.1.1. Tunnelrate und Zeitskala

Die Tunnelraten $J_{kl}$ charakterisieren den kinetischen Term des BHM (3.7). Für den trivialen Fall einer verschwindenden Tunnelrate $J_{kl} = 0$ treten keine Tunnelprozesse zwischen den Mulden $k$ und $l$ auf, sodass deren Besetzungszahlen erhalten bleiben. Interessanter ist natürlich der Fall $J_{kl} \neq 0$, bei dem die Tunnelrate jeweils die Wahrscheinlichkeit für einen Tunnelprozess und damit die Geschwindigkeit des Teilchenflusses zwischen zwei Mulden bezeichnet. Dabei sollte beachtet werden, dass es sich hierbei

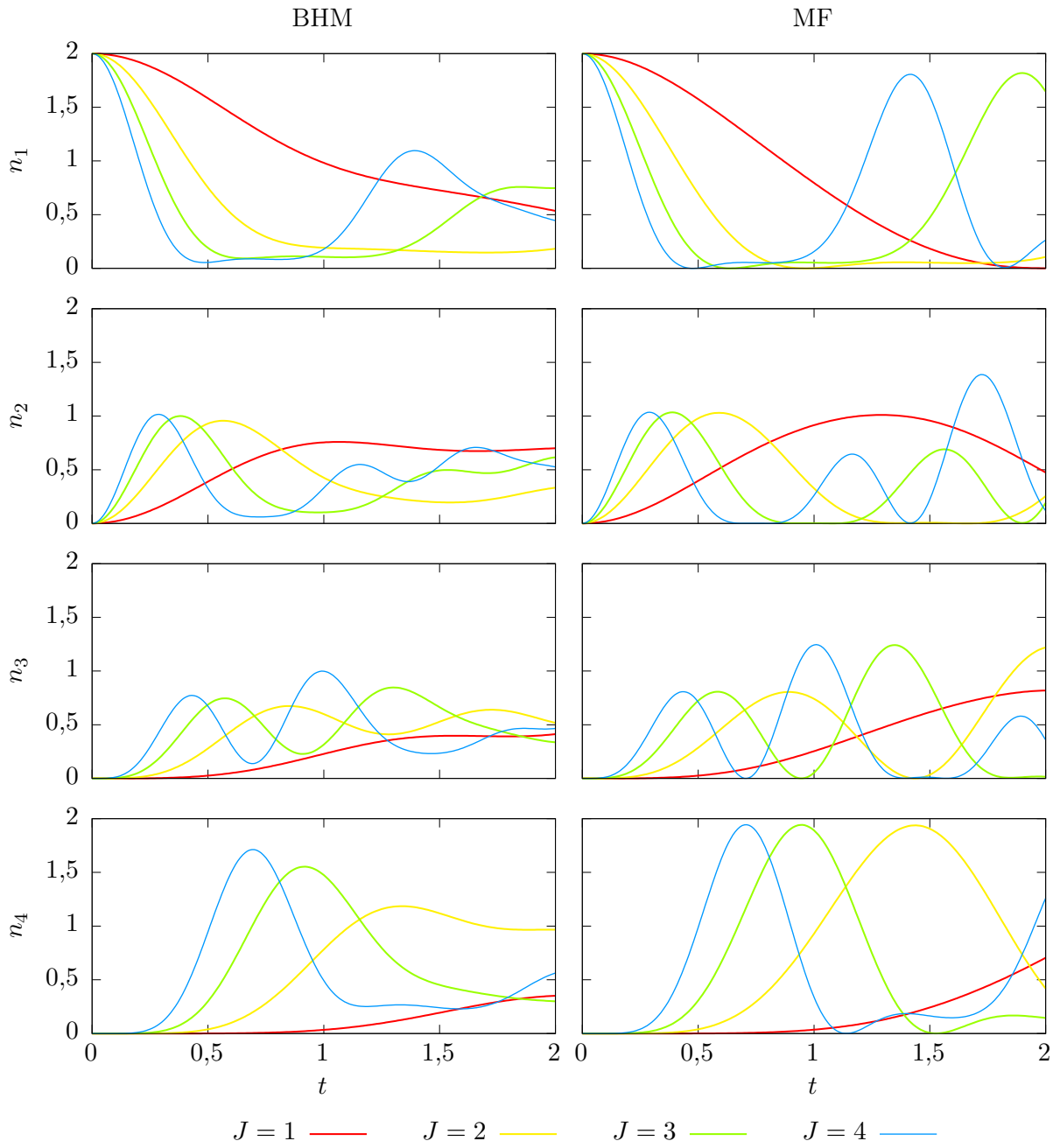



**Abbildung 5.1**: Besetzungszahlen für unterschiedliche Tunnelraten $J$ im BHM (links) und im MF (rechts) mit den Anfangswerten $n_1(0) = 2$, $n_2(0) = n_3(0) = n_4(0) = 0$ sowie einer Wechselwirkungstärke $g = 1$ in allen Mulden. Mit steigenden Tunnelraten $J = J_{12} = J_{23} = J_{34}$ entleert sich die erste Mulde zunehmend rascher und entsprechend läuft die gesamte Dynamik schneller ab. Eine quantitative Änderung der Besetzungszahlen durch die Zunahme der kinetischen Energie sind insbesondere im BHM, bei genauerer Betrachtung jedoch auch im MF zu erkennen.

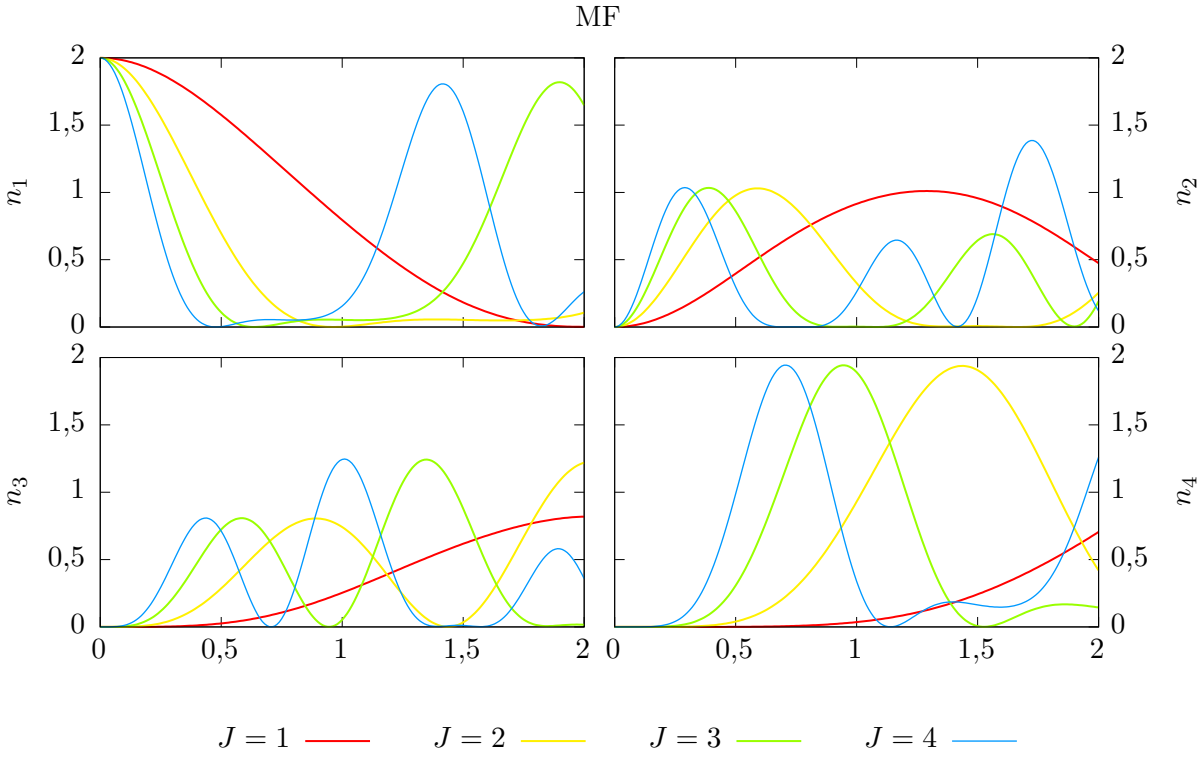



**Abbildung 5.2**: Besetzungszahlen im MF für unterschiedliche Tunnelraten $J$ wie in Abbildung 5.1, jedoch mit der Wechselwirkungsstärke $g = 0$. Ohne Wechselwirkung beschreibt die Einteilchendynamik das System bereits vollständig, sodass auf die Darstellung der Vielteilchendynamik verzichtet werden kann. Hierbei ist keine quantitative Änderung der Besetzungszahlen zu erkennen, da sich die Gesamtenergie auf den kinetischen Anteil reduziert. Mit steigenden Tunnelraten $J$ reduziert sich also lediglich die Zeitskala, auf der Teilchenaustauschprozesse geschehen.

nicht um die Geschwindigkeit des Tunnelprozesses selbst handelt, denn Tunnelprozesse geschehen stets instantan, sondern um die Übergangsrate von Teilchen. Daher bestimmt die Tunnelrate die Zeitskala, auf der Teilchenaustauschprozesse und damit die gesamte Dynamik ablaufen. In Abbildung 5.1 ist die Auskopplung von Teilchen aus einer gefüllten Mulde mit $n_1(0) = 2$ in ein ansonsten leeres System mit $g = 1$ für das BHM (links) und dessen MF-Näherung (rechts) dargestellt. Dabei erfolgt die Skalierung der Wechselwirkung auch hier gemäß Abschnitt 4.4.3, jedoch wird auf den Faktor $N_2$ verzichtet, da im Falle eines konstanten Potentials nicht zwischen System- und Reservoirmulden unterschieden werden soll. Ein Vergleich zeigt, dass die Einteilchendynamik bereits das grundlegende Verhalten des Systems für kurze Zeiten wiedergibt. Neben der Zeitskala, auf der die Tunnelprozesse ablaufen, treten jedoch auch quantitative Änderungen der Besetzungszahlen bei unterschiedlichen Tunnelraten auf. Grund hierfür ist die Zunahme der kinetischen Energie, da die Dynamik durch die Summe aller Energiebeiträge und

deren Verhältnisse bestimmt wird. Dies wird in Abbildung 5.2 deutlich. Hier ist die Konfiguration aus Abbildung 5.1 ohne Wechselwirkungen dargestellt, sodass $\mu_k = g_k = 0$, wobei $k$ alle Mulden bezeichnet. Die Vielteilchendynamik reduziert sich dabei auf die Einteilchendynamik, die vollständig durch die MF-Näherung beschrieben wird. Es ist zu erkennen, dass die Wahl der Tunnelraten nun lediglich die Zeitskala, nicht jedoch die Besetzungszahlen selbst verändert.

### 5.1.2. Wechselwirkung und MQST

Im Gegensatz zu den restlichen Parametern tritt die Wechselwirkungsstärke in Verbindung mit einem nichtlinearen Term im BHM (3.7) und ebenso in der GPE (3.26) auf. In der BBGKY-Hierarchie bestimmt sie die Kopplung zwischen den einzelnen Ordnungen, die ebenfalls als nichtlinear interpretiert werden kann in Bezug auf die Bewegungsgleichungen, in denen der jeweilige Kopplungsterm auftaucht. In Abbildung 5.3 ist die Dynamik eines Viermodensystems in Anwesenheit unterschiedlicher Wechselwirkungsstärken $g$ dargestellt. Auch hier stimmt die Vielteilchendynamik mit der MF-Dynamik für $g = 0$ überein. Für $g \neq 0$ zeigen sich jedoch wie zuvor große Unterschiede, wobei die MF-Näherung auch hier das Verhalten auf kurzen Zeitskalen qualitativ richtig beschreiben kann. Mit zunehmender Wechselwirkungsstärke nimmt diese Zeit jedoch stark ab, was insbesondere an der Besetzungszahl $n_4$ in Abbildung 5.3 zu sehen ist. Für sehr starke Wechselwirkungen stellt sich ein Zustand ein, bei dem sich die Besetzungszahlen in den einzelnen Mulden nicht mehr stark ändern. Dieser Effekt wird als MQST bezeichnet [123–126] und ist eine Konsequenz der nichtlinearen Natur der betrachteten Systeme [127].

Die Kopplung zweier in benachbarten Mulden lokalisierter BECs weist große Ähnlichkeit mit der Situation in einem Supraleiter auf, sodass auch hier Josephson-Effekte auftreten. Im Gegensatz zu den harmonischen Josephson-Oszillationen in einem Supraleiter sind in einem Vielteilchensystem jedoch auch anharmonische Josephson-Effekte zu finden [123, 127]. MQST ist ein solcher nichtlinearer Josephson-Effekt, bei dem die Tunnelprozesse ab einem kritischen Wert der Kontaktwechselwirkungsstärke $g$ unterdrückt werden, da die Selbstwechselwirkungsenergie der Bosonen die kinetische Energie übersteigt. Das System geht in einen isolierenden Zustand über und bildet damit einen Mott-Isolator [71, 86]. Im Allgemeinen entscheidet das Verhältnis $g/J$ darüber, ob ein suprafluides Bose-Gas, was einem über alle Mulden delokalisierten BEC entspricht, oder ein isolierendes Bose-Glas vorliegt, bei dem in jeder Potentialmulde ein eigenständiges BEC mit ganzzahliger Gesamtteilchenzahl lokalisiert ist [61, 86]. Die SPDM für einen Mott-Isolator besitzt dann $M$ gleiche Eigenwerte und gemäß des Kriteriums aus Abschnitt 2.1.1 liegt damit kein BEC für das Gesamtsystem vor. Hierbei muss noch angemerkt werden, dass sich strenggenommen nur in ausreichend ausgedehnten Mulden mit makroskopischen Besetzungszahlen eigenständige BECs ausbilden können.

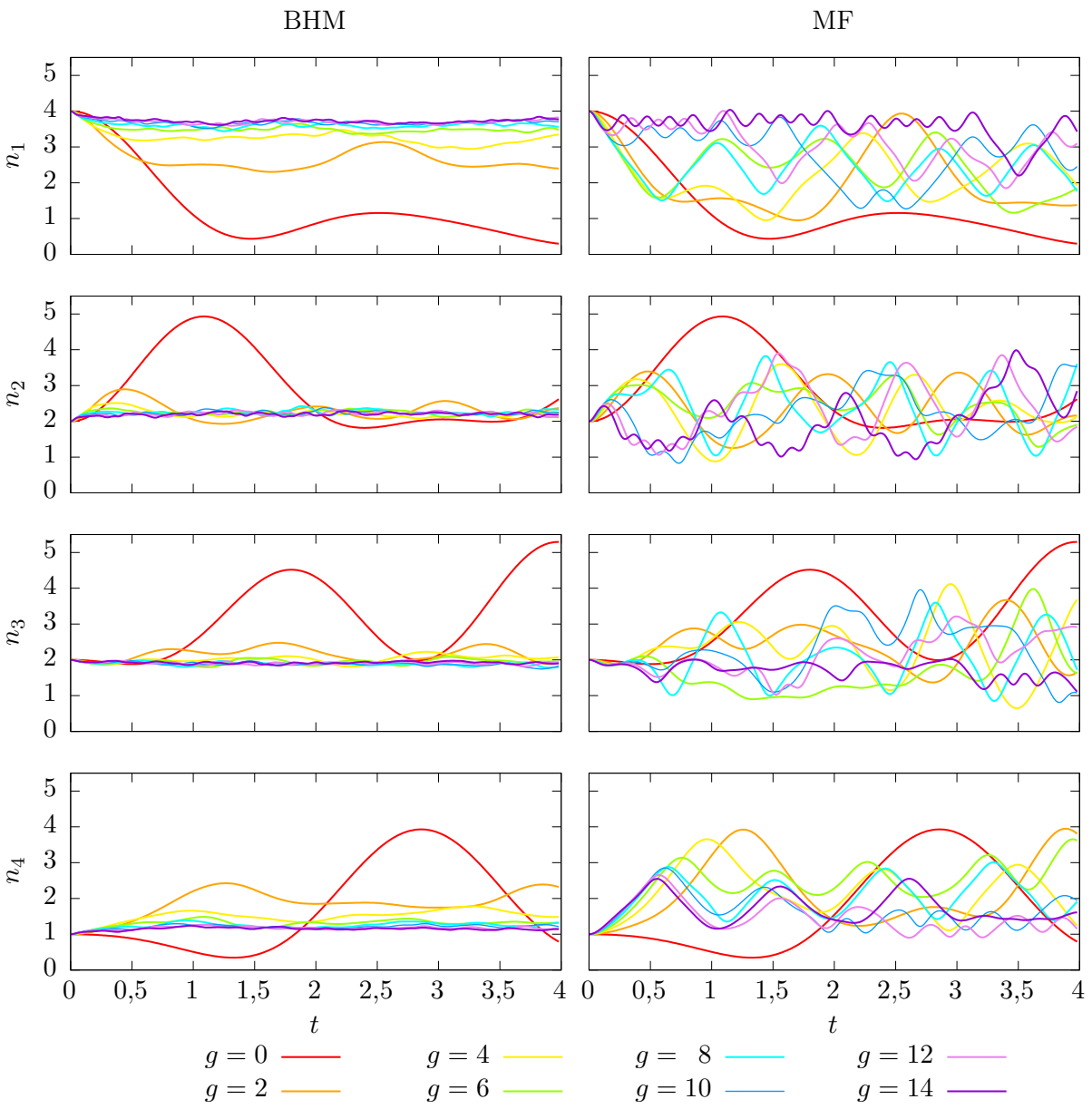



**Abbildung 5.3**: Besetzungszahlen für unterschiedliche Wechselwirkungsstärken $g$ mit $n_1(0) = 4$, $n_2(0) = n_3(0) = 2$ und $n_4(0) = 1$, den Gitterpunktenergien $\mu_k = 0$ und den Tunnelraten $J = 1$ zwischen allen Mulden. Der Vergleich zwischen BHM (links) und MF (rechts) liefert wie erwartet eine vollkommene Übereinstimmung für $g = 0$. Für $g \neq 0$ hingegen zeigen sich bereits auf einer kurzen Zeitskala deutliche Unterschiede, wobei das qualitative Verhalten übereinstimmt. Bei sehr starken Wechselwirkungen kommt es zum makroskopischer Quanteneinschluss (*Macroscopic Quantum Self-Trapping*, MQST), sodass Tunnelprozesse unterdrückt werden und ein Mott-Isolator entsteht.

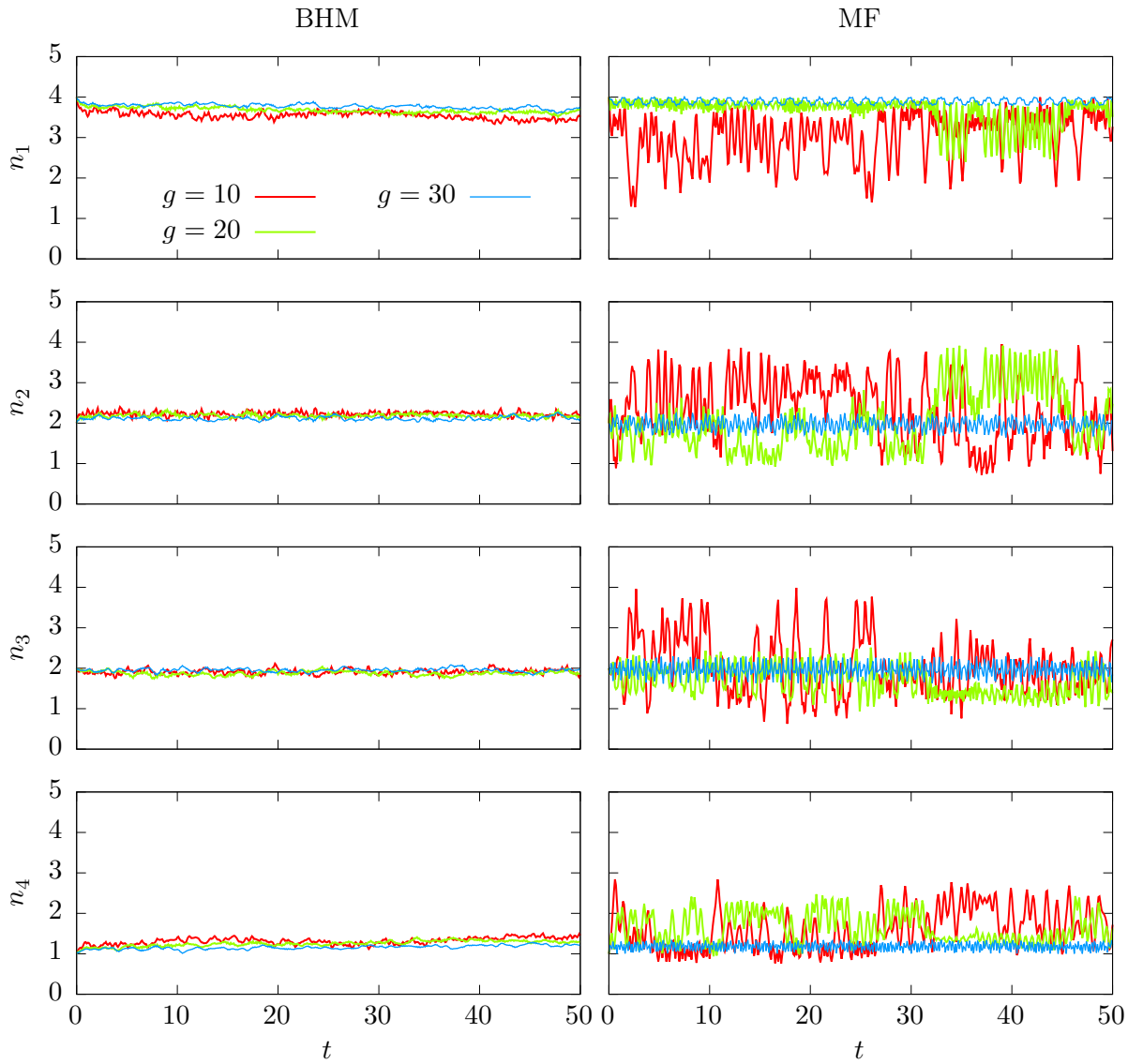



**Abbildung 5.4**: MQST auf einer längeren Zeitskala für starke Wechselwirkungen. Die Wahl der übrigen Parameter und der Anfangszustand entsprechen der Abbildung 5.3. Auch für längere Zeitskalen weißt das BHM bereits bei einer Wechselwirkungsstärke $g = 10$ MQST auf. Im MF hingegen sind deutlich stärkere Wechselwirkungen notwendig, damit sich ein isolierender Zustand einstellt.

Im Allgemeinen lässt sich dieses Verhalten so beschreiben, dass im Grenzfall $g/J \to 0$ die Besetzungszahlen durch Tunnelprozesse variiert werden können und eine perfekte Phasenkorrelation zwischen Teilchen in unterschiedlichen Mulden herrscht. Für $J/g \to 0$ hingegen gibt es keine Tunnelprozesse mehr, sei dies aufgrund einer hohen Barriere zwischen den Mulden oder aufgrund starker Selbstwechselwirkung der Fall, sodass die

Besetzungszahlen fixiert sind und keine Phasenkorrelationen mehr zwischen den einzelnen Mulden existieren. Im MF wird dieser Effekt, insbesondere im Zusammenhang mit Zweimodensystemen, als MQST bezeichnet, im BHM hingegen wird für Mehrmodensysteme vom Mott-Isolator gesprochen.

In Abbildung 5.4 zeigt sich jedoch, dass auf längerer Zeitskala insbesondere im MF noch stärkere Selbstwechselwirkungsenergien für MQST notwendig sind, wohingegen der isolierende Zustand im BHM bereits bei geringeren Wechselwirkungen vorliegt. Dies ist eine Konsequenz der Beschränkung auf die Einteilchendynamik im MF, bei der lediglich Zweiteilchenwechselwirkungen beachtet werden. In der Vielteilchendynamik kommen jedoch weitere Wechselwirkungsprozesse zwischen mehreren Teilchen vor, wie in Abschnitt 3.4.2 bereits besprochen wurde. Sowohl im BHM, bei dem der Parameter $U$ gemäß der Beziehung (4.68) praktisch unabhängig von $N$ ist, als auch in der GPE, bei der $g_{\mathrm{MF}}$ durch die Beziehung (4.66) linear von $N$ abhängt, wächst die Wechselwirkungsenergie quadratisch mit der Gesamtteilchenzahl an, sodass MQST bereits bei geringeren Werten des makroskopischen Parameters $g$ auftritt. Bei ausreichend großer Teilchenzahl müssen beide Systeme übereinstimmen, da dort das MF eine adequate Näherung darstellt. Nichtsdestotrotz zeigt sich hierbei, dass die MF-Beschreibung für endliche Gesamtteilchenzahlen zwar ähnliche Ergebnisse liefert, jedoch im Grenzfall weniger Teilchen versagt, da dort die Vielteilcheneigenschaften wichtig werden. Dies ist insbesondere für stark wechselwirkende Teilchen der Fall, da diese die Kopplung von Einteilchen- und Mehrteilchendynamik darstellt.

### 5.1.3. Vergleich zwischen BHM, BBR und MF

Der Abschnitt 5.1.2 hat neben dem grundlegenden Verhalten der Systeme bei verschiedener Parameterwahl vor allem auch die Unterschiede zwischen der Einteilchenbeschreibung im MF und der Vielteilchenbeschreibung im BHM aufgezeigt. Für spätere Zwecke sollen daher nun alle verwendeten Methoden verglichen werden, also auch unter Einbeziehung der BBR-Näherung bei der Beschreibung der Vielteilchendynamik. Ähnliche Untersuchungen sind auch in [89, 111] zu finden.

Abbildung 5.5 zeigt die Besetzungszahlen für die Anfangswerte $n_1(0) = 40$, $n_2(0) = n_3(0) = 20$ und $n_4(0) = 10$ im Bereich einer sehr schwachen Wechselwirkung $g = 0{,}01$, bei der noch kein MQST auftritt. Dabei ist die Zeitentwicklung jeweils für das BHM, die BBR-Methode und die MF-Näherung dargestellt, welche im gesamten Bereich bereits gut übereinstimmen. Bei genauerer Betrachtung ist zu erkennen, dass die BBR-Näherung hier bereits zu jedem Zeitpunkt die exakte Vielteilchendynamik wiedergibt, wohingegen die MF-Lösung zunehmend Abweichungen zeigt. Ein Nachteil der BBR-Methode besteht jedoch darin, dass die Gesamtenergie hierbei im Gegensatz zur MF-Näherung nicht mehr erhalten ist. Dieses Verhalten wird insbesondere bei stärkeren Wechselwirkungen deutlich, wie in Abbildung 5.6 für $g = 0{,}1$ zu sehen ist. Obwohl nach einiger Zeit

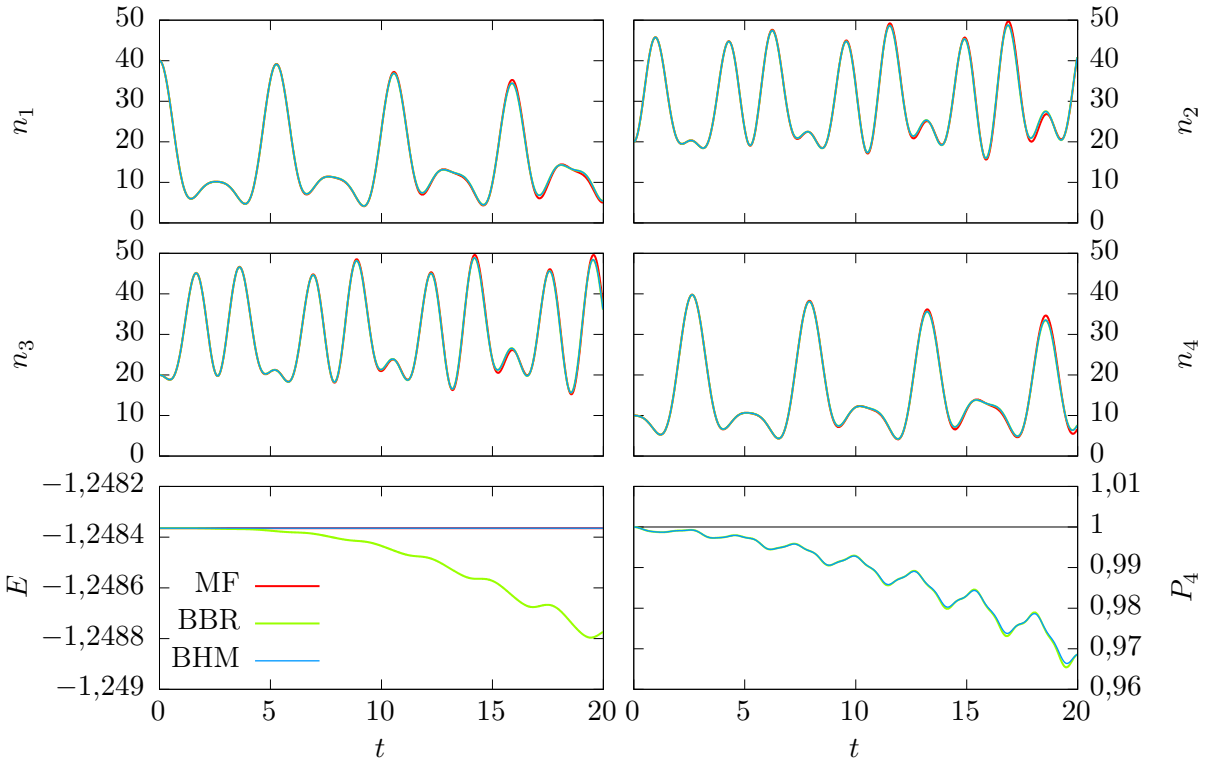



**Abbildung 5.5**: Anharmonische Josephson-Oszillationen für $n_1(0) = 40$, $n_2(0) = n_3(0) = 20$ und $n_4(0) = 10$ sowie den Tunnelraten $J_{12} = J_{23} = J_{34} = 1$ bei einer schwachen Wechselwirkung $g = 0{,}01$. Dargestellt sind die Dynamik und die Gesamtenergie im MF sowie für die volle Vielteilchendynamik und die BBR-Näherung. Für letztere Systeme wird außerdem die Reinheit (4.63) dargestellt. Es tritt kein MQST auf und die Dynamik aller Mulden stimmt über die gesamte Dauer gut überein. Es ist zu erkennen, dass die BBR-Näherung die Vielteilchendynamik bereits sehr gut wiedergibt, wobei jedoch die Gesamtenergie nicht exakt erhalten ist.

keine der Näherungen das Vielteilchenproblem korrekt beschreiben kann, zeigt sich auch hier, dass die BBR-Näherung die Vielteilchendynamik deutlich besser widerspiegelt und Vielteilcheneffekte wie die zeitliche Abnahme der Maximalbesetzung in der ersten Mulde in Abbildung 5.6 erfassen kann. Nach dieser Zeitdauer sind die Abweichungen für beide Näherungen jedoch so groß, dass kein sinnvoller Vergleich mit der exakten Dynamik mehr möglich ist.

Grund für die großen Abweichungen zum MF ist wohl die von der Wechselwirkungsstärke abhängige Abnahme der Reinheit, da die MF-Theorie nur für gänzlich reine Kondensate gültig ist. Neben der Abnahme der Reinheit fallen in den Abbildungen 5.5 und 5.6 vor allem die Reinheitsoszillationen auf, die bereits in Zweimodensystemen mit BGL beobach-

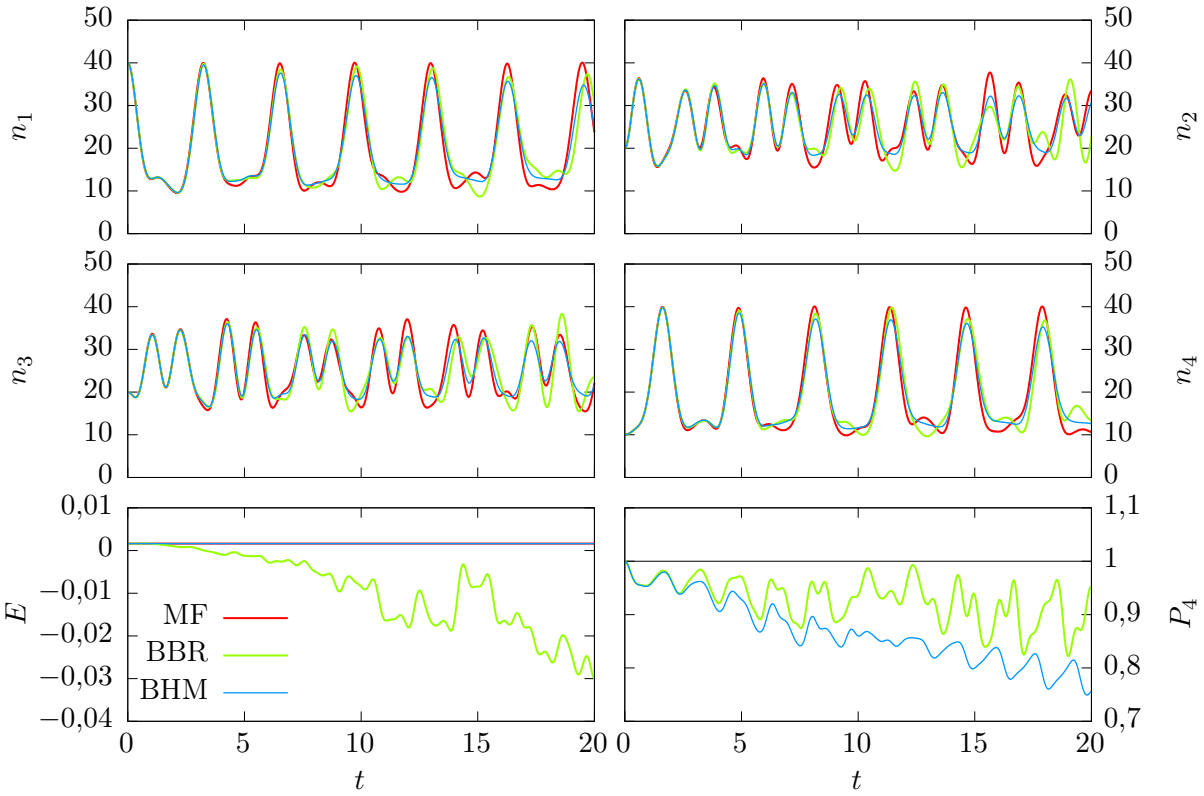



**Abbildung 5.6**: Wie Abbildung 5.5 jedoch für eine stärkere Wechselwirkung $g = 0{,}1$. Die Teilchen sind noch immer beweglich, die Tunnelprozesse werden jedoch zunehmend unterdrückt und die Dynamik stimmt mit den Näherungen nur noch auf einer kurzen Zeitskala überein. Die BBR-Methode beschreibt die echte Vielteilchendynamik hierbei wiederum deutlich länger als die MF-Näherung, auf lange Sicht liefert jedoch keine Näherung quantitativ richtige Ergebnisse.

tet wurden [105]. Während diese Reinheitsoszillationen in einem Zweimodensystem nur bei Teilchenaustausch mit der Umgebung zustandekommen, so treten diese hier bereits in einem abgeschlossenen Viermodensystem auf. Bei starken Wechselwirkungen sind wiederum große Abweichungen zwischen der Reinheit des BHM und der BBR-Methode festzustellen. Hierfür ist wohl der mit der Wechselwirkungsstärke zunehmende Energieverlust bei der BBR-Näherung verantwortlich, da die BBR-Dynamik zunehmend von der echten Vielteilchendynamik abweicht.

Des weiteren sollte noch beachtet werden, dass sowohl die BBR als auch die MF-Näherung die Änderung der Besetzungszahlen für eine größere Muldenpopulation besser beschreiben, das Verhalten ist hierbei eher harmonisch. Für eine geringe Muldenpopulation hingegen ist die exakte Dynamik vollkommen anharmonisch. Dieses Verhalten ist der Tatsache geschuldet, dass beide Näherungen für den Grenzfall großer Gesamtteilchenzahlen eingeführt wurden und für $N = 90$ daher eigentlich ungeeignet sind. Dies macht sich wiederum

mit steigender Wechselwirkung bemerkbar, da die Vielteilcheneigenschaften in Form anharmonischer Beiträge zunehmend wichtig werden.

### Gesamtenergie

Wie die bisherige Diskussion gezeigt hat, stellt die Übereinstimmung der Gesamtenergien zumindest für die BBR-Methode ein Maß für die Zeitskalar dar, auf der diese Näherung verwendet werden kann. Darüber hinaus enthalten die Abbildungen 5.5 und 5.6 jedoch noch weitere Informationen. So ist die anfängliche Übereinstimmung aller Energien eine Bestätigung der Überlegungen zur Skalierung aus Abschnitt 4.4.3. Die MF- und BHM-Energie sind in einem konstanten Potential erhalten und es kommt zu einer Energieverschiebung aufgrund der stärkeren Wechselwirkung. Die BBR-Methode hingegen erhält die Gesamtenergie nicht, sondern fällt oszillierend ab. Der Energieverlust ist dabei wie bereits erwähnt umso größer, je stärker die Wechselwirkung gewählt wird, die Oszillationen werden dabei zunehmend anharmonisch. An dieser Stelle sollte noch erwähnt werden, dass die Gesamtenergie für zeitabhängige Potentiale nicht mehr erhalten sein wird, da die Änderung der Parameter des optischen Potentials mit einem Energieaustausch verbunden ist.

Die Energie des BHM ergibt sich als Erwartungswert des Hamilton-Operators (3.7),

$$E_{\mathrm{BH}} = \langle \mathcal{H}_{\mathrm{BH}} \rangle \,. \tag{5.1}$$

Diese Energie lässt sich bei der Integration direkt durch eine Vektor-Vektor-Multiplikation $\langle \psi | \dot{\psi} \rangle = -\boldsymbol{i} E_{\mathrm{BH}}$ berechnen. Für die BBR-Methode hingegen ist die Energie entsprechend durch Einsetzen der Definition (3.7) gegeben, sodass

$$E_{\mathrm{BBR}} = -\sum_{\langle m,m' \rangle} J_{mm'} \sigma^{(1)}_{mm'} + \frac{1}{2} \sum_m U_m \Big( N \sigma^{(2)}_{mmmm} - \sigma^{(1)}_{mm} \Big) + \sum_m \mu_m \sigma^{(1)}_{mm} \,. \tag{5.2}$$

An dieser Stelle sollte beachtet werden, dass sich diese Energie exakt im Rahmen der BBR-Näherung (3.45) berechnen lässt. Exakt ist dabei so zu verstehen, dass keine zusätzlichen Näherungen in (5.2) erforderlich sind, da ohnehin nur Einteilchen- und Zweiteilchenmatrizen auftauchen.

Im MF ergibt sich die Energie schließlich durch die Näherungen $\hat{a}^\dagger_m = \psi^*_m$, $\hat{a}_m = \psi_m$ und $(N-1) \sim N$ für $N \gg 1$, sodass

$$E_{\mathrm{MF}} = -\sum_{\langle m,m' \rangle} J_{mm'} \psi^*_m \psi_{m'} + \frac{1}{2} \sum_m g_{\mathrm{MF},m} |\psi_m|^4 + \sum_m \mu_m |\psi_m|^2 \,. \tag{5.3}$$

Hierbei ist wiederum zu beachten, dass sich die MF-Energie um einen Faktor 2 im Wechselwirkungsanteil von der GPE (3.26) unterscheidet, deren Energieeigenwert das chemische Potential darstellt.

## 5.2. Zeitabhängige Potentiale zur Realisierung von BGL

Nachdem nun einige grundlegende Eigenschaften des Viermodensystems mit konstanten Potentialen insbesondere im Rahmen der Vielteilchenbeschreibung diskutiert wurden, sollen in diesem Abschnitt zeitabhängige Potentiale zur Realisierung von BGL gemäß Abschnitt 4.1.1 betrachtet werden. Es stellt sich nun die Frage, ob und wenn ja wie gut sich BGL und im speziellen auch $\mathcal{PT}$-Symmetrie in einem Vielteilchensystem realisieren lassen. Dabei ist beispielsweise die Zeitdauer von Interesse, über die sich so ein stabiler Zustand aufrecht erhalten lässt, da Abweichungen gegenüber der MF-Dynamik zu erwarten sind, wobei an dieser Stelle noch vollkommen unklar ist, in welcher Form und Stärke diese auftreten. Zudem existieren nun mehrere Möglichkeiten für die Parameterwahl, denen gänzlich unterschiedliche Forderungen zugrundeliegen und die es zu untersuchen gilt.

### 5.2.1. Quasistationäre Zustände

Um $\mathcal{PT}$-symmetrische quasistationäre Zustände in einem Viermodensystem beobachten zu können, müssen die Kontrollparameter dynamisch gewählt werden. Im MF ist deren Zeitabhängigkeit durch die Gleichungen (4.18) gegeben, für welche die analytischen Lösungen (4.27) existieren. Hierbei ist zu beachten, dass die Tunnelrate $J_{12}(t)$ umgekehrt proportional zur Besetzungszahl der ersten Reservoirmulde ist und im Grenzfall $n_1(t) \to 0$ divergiert, sodass die Integration nach der Zeit

$$T = \frac{1}{2\gamma} \frac{n_1(0)}{n} \tag{5.4}$$

zusammenbricht. Die Zeit $T$, über die ein $\mathcal{PT}$-symmetrischer stationärer Zustand aufrecht erhalten werden kann hängt also vom Besetzungsverhältnis zwischen der linken Reservoir- und der linken Systemmulde sowie der Kopplungsrate $\gamma$ ab. Die Tunnelrate $J_{34}(t)$ hingegen nimmt über diese Zeit hinweg stetig ab, da $n_4(t)$ per Konstruktion monoton anwächst.

Wie aus Abschnitt 4.3 bereits hervorgeht, ist die Parameterwahl aus dem MF nicht direkt auf ein Vielteilchenproblem anwendbar, selbst wenn derselbe Anfangszustand vorliegt. Da im MF nur die Einteilchendynamik berücksichtigt wird, entspricht dies der Ignoranz der Vielteilchennatur des Systems und führt im Grenzfall geringer Teilchenzahlen zu großen Abweichungen [111]. Eine ähnliche Untersuchung ist im Anhang D zu finden, wo die Möglichkeit einer analytischen Parameterwahl bei einer experimentellen Realisierung diskutiert wird. Während sich die Zustände für große Teilchenzahlen erwartungsgemäß den MF-Lösungen annähern, so zeigen sich bei geringen Teilchenzahlen wiederum die angesprochenen Probleme. Die Zeit bis zum Zusammenbruch des Systems stimmt dabei mit dem MF überein, aufgrund der Divergenz von $J_{12}(t)$ bei $t = T$. Es stellt sich nun die Frage, ob sich durch Anpassung der Parameter unter Einbeziehung der Vielteilcheneigenschaften eine Verbesserung für geringe Teilchenzahlen erzielen lässt.

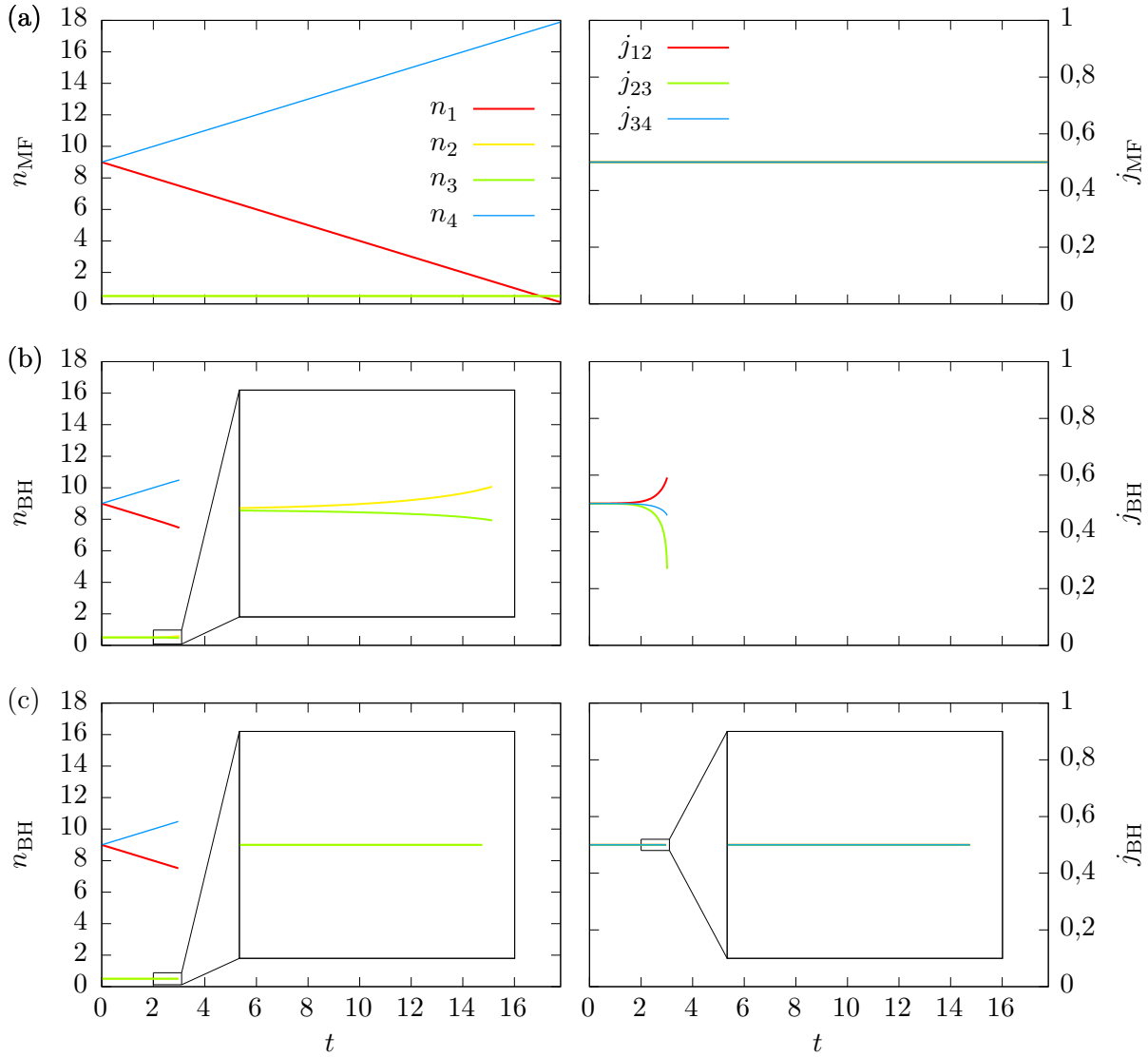



**Abbildung 5.7**: Dynamik für eine symmetrische Besetzung $n_2(0) = n_3(0) = 0{,}5$ und $n_1(0) = n_4(0) = 9$ mit der Kopplungsrate $\gamma = 0{,}5$ und der Tunnelrate $J_{23} = 1$ bei einer schwachen Wechselwirkung $g = 0{,}1$. Für das MF liegt im eingebetteten Zweimodensystem ein vollkommen stationärer Zustand vor (a). In einem Vielteilchensystem hingegen ist der Strom durch die Bedingungen (4.45) nicht erhalten (b), sodass die zusätzliche Forderung (4.49) verwendet werden muss (c). Obwohl die Zustände nun denen im MF gleichen, bricht das System deutlich früher zusammen.

Die folgenden Abbildungen zeigen den Weg zur Realisierung von BGL in einem Vielteilchensystem ausgehend vom MF. Jede Abbildung ist dabei in drei Abschnitte unterteilt, damit Unterschiede und Veränderungen leicht zu erkennen sind. Der Übersichtlichkeit halber wird der Aufbau dieser Abbildungen kurz erläutert.

(a) Dynamik und Parameter im MF dienen als Referenz für die Vielteilchenrechnungen. Dabei wird das System bei $t = 0$ in einen Anfangszustand (4.23) präpariert. Für $t \geq 0$ werden die Parameter dann entweder gemäß der dynamischen Gleichungen (4.18) oder gemäß der analytischen Gleichungen (4.27) gewählt.

(b) Im BHM existieren entsprechende dynamische Gleichungen (4.45) für die Parameter. Der MF-Anfangszustand lässt sich mit Gleichung (4.35) in die Vielteilchenbeschreibung übertragen. Dies genügt jedoch nicht für eine Realisierung von BGL.

(c) Um BGL zu erreichen wird der Strom im BHM durch die Korrekturen (4.49) zu den Gitterpunktenergien festgehalten.

Um unerwünschte Effekte durch die endliche Größe des Reservoirs nach Möglichkeit zu vermeiden, wird ein großer Besetzungsunterschied zwischen Reservoir und System verwendet, sodass die Vielteilcheneigenschaften der Systemmulden im Vordergrund stehen. Die symmetrische Anfangsbesetzung ist durch $n_2(0) = n_3(0) = 0{,}5$ und $n_1(0) = n_4(0) = 9$ gegeben. Hierbei handelt es sich natürlich um einen Extremfall, da sich lediglich *ein einzelnes Teilchen* im System befindet, dessen Aufenthaltswahrscheinlichkeit gleichmäßig über beide Systemmulden verteilt ist, wobei sich dabei bereits die charakteristischen Vielteilcheneffekte zeigen. Während die Besetzungszahl im MF lediglich eine Norm darstellen, so ist eine derartige Besetzung in einem Vielteilchensystem eher kontraintuitiv. An dieser Stelle sollte jedoch beachtet werden, dass es sich bei den Observablen in einem Vielteilchenproblem lediglich um Erwartungswerte und nicht um den tatsächlichen Zustand des Systems handelt. Was das genau bedeutet und welche Folgen das nach sich zieht wird anschließend in Abschnitt 5.2.2 diskutiert. Außerdem soll lediglich der Bereich schwacher Wechselwirkung mit $g = 0{,}1$ betrachtet werden, sodass kein MQST auftritt. Hierbei sollte beachtet werden, dass die Wechselwirkungsstärke nun mit der Teilchenzahl $N_2$ der mittleren Mulden wie in Abschnitt 4.4.3 beschrieben skaliert wird, sodass die Wechselwirkungsenergie pro Teilchen konstant ist. Da die Tunnelraten vor allem die Zeitskala der Dynamik bestimmen, wird im Folgenden stets die Tunnelrate $J_{23} = 1$ zwischen den mittleren Mulden betrachtet.

Abbildung 5.7 zeigt die Besetzungszahlen und Ströme für die Kopplungsrate $\gamma = 0{,}5$. Die MF-Dynamik in Abbildung 5.7(a) stimmt mit den analytischen Lösungen aus Abschnitt 4.2.3 und den Ergebnissen aus [68] überein. Das System bricht zusammen, wenn sich die linke Reservoirmulde vollständig entleert hat. In einem Vielteilchensystem hingegen reicht eine entsprechende Anpassung der Kontrollparameter mit den selben Anfangsbedingungen nicht aus, um einen quasistationären Zustand zu realisieren. Wie in Abbildung 5.7(b) zu sehen ist, liegen weder stationäre Besetzungszahlen in dem mittleren Mulden vor noch

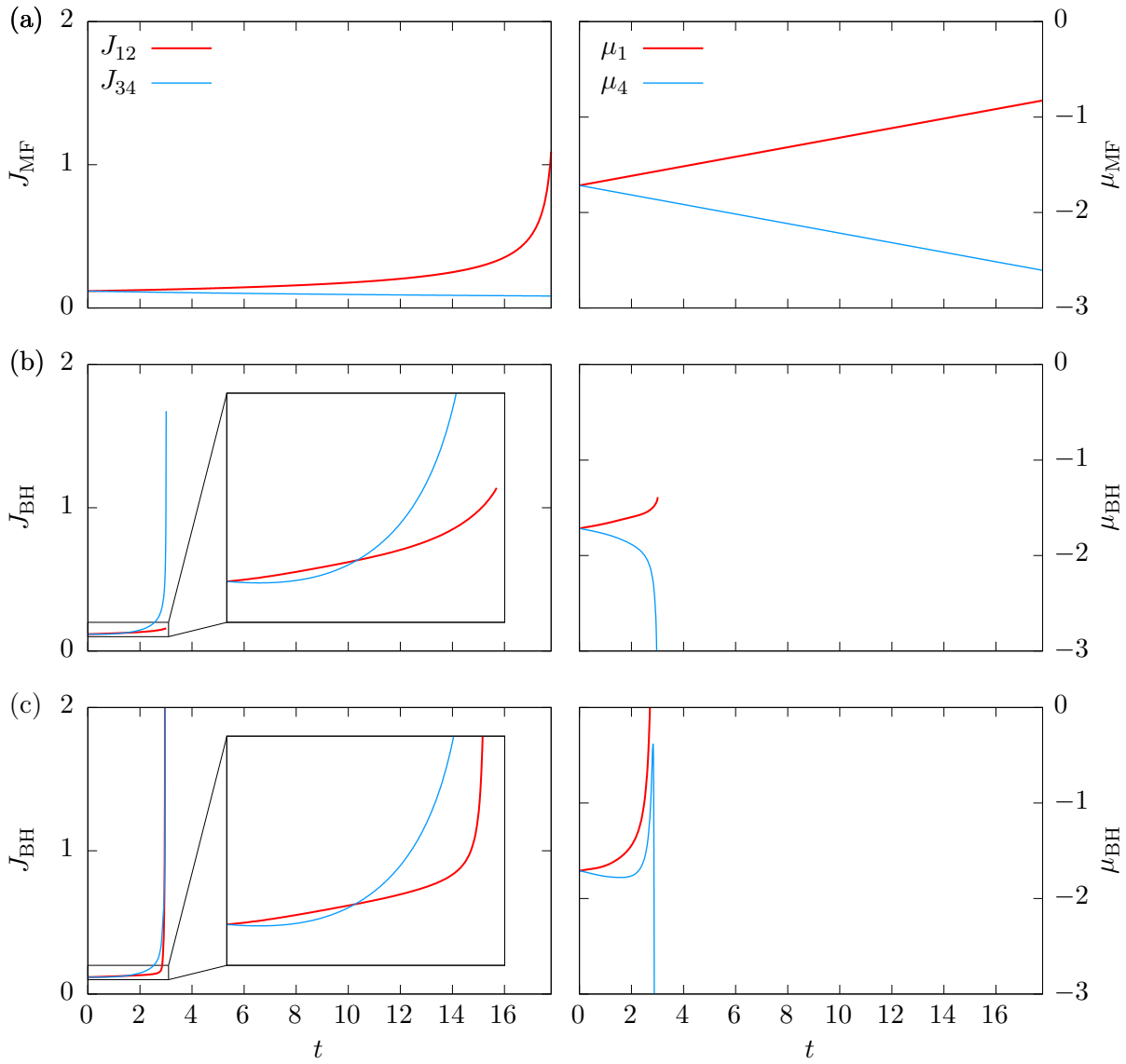



**Abbildung 5.8**: Die Zeitentwicklung der Kontrollparameter $J_{12}(t)$, $J_{34}(t)$, $\mu_1(t)$ und $\mu_4(t)$ für die Zustände aus Abbildung 5.7. Im MF geschieht der Zusammenbruch bei vollständiger Entleerung der linken Reservoirmulde, was zu einer Divergenz in $J_{12}$ führt (a). Im BHM hingegen tritt bereits deutlich früher eine Divergenz in $J_{34}$ (b). Das Festhalten des Stroms mit der Bedingung (4.49) führt schließlich zur Divergenz beider Tunnelraten (c).

ist der Strom zwischen diesen Mulden erhalten. Nach vergleichsweise kurzer Zeit kommt es sogar zu Divergenzen in den Strömen, was zu einem frühzeitigen Zusammenbruch führt. Es wäre nun zu erwarten, dass der Zusammenbruch der Vielteilchendynamik vermieden oder zumindest verzögert werden kann, wenn der Strom $j_{23}$ festgehalten wird. Wie in Abbildung 5.7(c) zu sehen ist führt dies nicht nur zur Erhaltung aller Ströme, sondern stabilisiert durch $j_{12}(t) = j_{23}(t) = j_{34}(t)$ gemäß Gleichungen (4.14) nun auch die Besetzungszahlen $n_2(t) = n_3(t)$. Obwohl die Vielteilchendynamik in Abbildung 5.7(c) nun augenscheinlich der MF-Dynamik in Abbildung 5.7(a) gleicht, kommt es dennoch zu einem Zusammenbruch. Bei genauer Betrachtung zeigt ein Vergleich mit der Abbildung 5.7(b), dass der Zusammenbruch durch die zusätzliche Forderung sogar früher eintritt. Der Grund für den Abbruch ist hierbei jedoch noch nicht zu erkennen. Hierzu ist eine Betrachtung der zeitabhängigen Kontrollparameter erforderlich.

Die zeitabhängigen Kontrollparameter sind in Abbildung 5.8 dargestellt. Für das MF in Abbildung 5.8(a) tritt nur eine Divergenz in $J_{12}$ verursacht durch $n_1(t) \to 0$ auf. Im Gegensatz dazu sind für das BHM bereits große Unterschiede zu erkennen, wie eine zusätzliche Divergenz in der Tunnelrate $J_{34}$ und einem nichtlinearen Verlauf der Gitterpunktenergien. Diese weisen dabei insbesondere bei der zusätzlichen Modifikation ein komplexes Verhalten mit mehreren Umkehrpunkten auf. Die Divergenzen der Gitterpunktenergien beim Zusammenbruch der Dynamik lassen sich über die Gleichungen (4.45c) und (4.45d) auf die Divergenzen der Tunnelraten zurückführen. Dabei ist bemerkenswert, dass die Tunnelrate $J_{34}$ in Abbildung 5.8(b) für den Zusammenbruch verantwortlich ist, wohingegen ebendieser Parameter im MF monoton auf Null abfällt. Dieses Verhalten ändert sich auch durch das Festhalten des Stroms in Abbildung 5.8(c) nicht. In diesem Fall lässt sich jedoch ein rapider Anstieg der Tunnelrate $J_{12}$ verzeichnen. Da die Ströme in der Abbildung 5.7(c) erhalten sind, müssen die entsprechenden reduzierten Stromdichten $\widetilde{j}_{12}$ und $\widetilde{j}_{34}$ also auf Null abfallen. Dies stellt jedoch keine Konsequenz dar, sondern entspricht vielmehr der Ursache für die Divergenzen der Tunnelraten, da diese den Gleichungen (4.45a) und (4.45b) entsprechend dynamisch an den Zustand des Systems angepasst werden.

Die übrigen Observablen, also die reduzierten Stromdichten $\widetilde{j}$ und die Korrelationen $c$, sind in Abbildung 5.9 dargestellt. Bereits im MF ist die Divergenz der Tunnelrate $J_{12}$ mit einem Abfall der Einkopplungsstromdichte $\widetilde{j}_{12}$ auf Null verknüpft. Im BHM in Abbildung 5.9(b) hingegen besitzt die Auskopplungsstromdichte $\widetilde{j}_{34}$ einen Umkehrpunkt und fällt anschließend schnell auf Null ab, was zum frühzeitigen Zusammenbruch der Dynamik führt. Ebenso wie die Besetzungszahlen $n_2$ und $n_3$ sind auch die Größen $\widetilde{j}_{23}$ und $c_{23}$ durch die Parameterwahl (4.45) nicht erhalten. Die Korrelationen $c_{12}$ und $c_{34}$ hingegen verschwinden zu jedem Zeitpunkt wie gefordert. Durch die Modifikation dieser Bedingungen weichen diese Korrelationen jedoch schnell von Null ab, wie Abbildung 5.9(c) zeigt. Zudem fallen nun beide Kopplungsstromdichten auf Null ab, was wiederum die Divergenzen in beiden Tunnelraten verursacht. Die Stromdichte $\widetilde{j}_{23}$ ist hingegen erhalten entspricht für $J_{23} = 1$ gerade dem Strom $j_{23}$. Im Gegenzug ist jedoch $c_{23}$ nicht

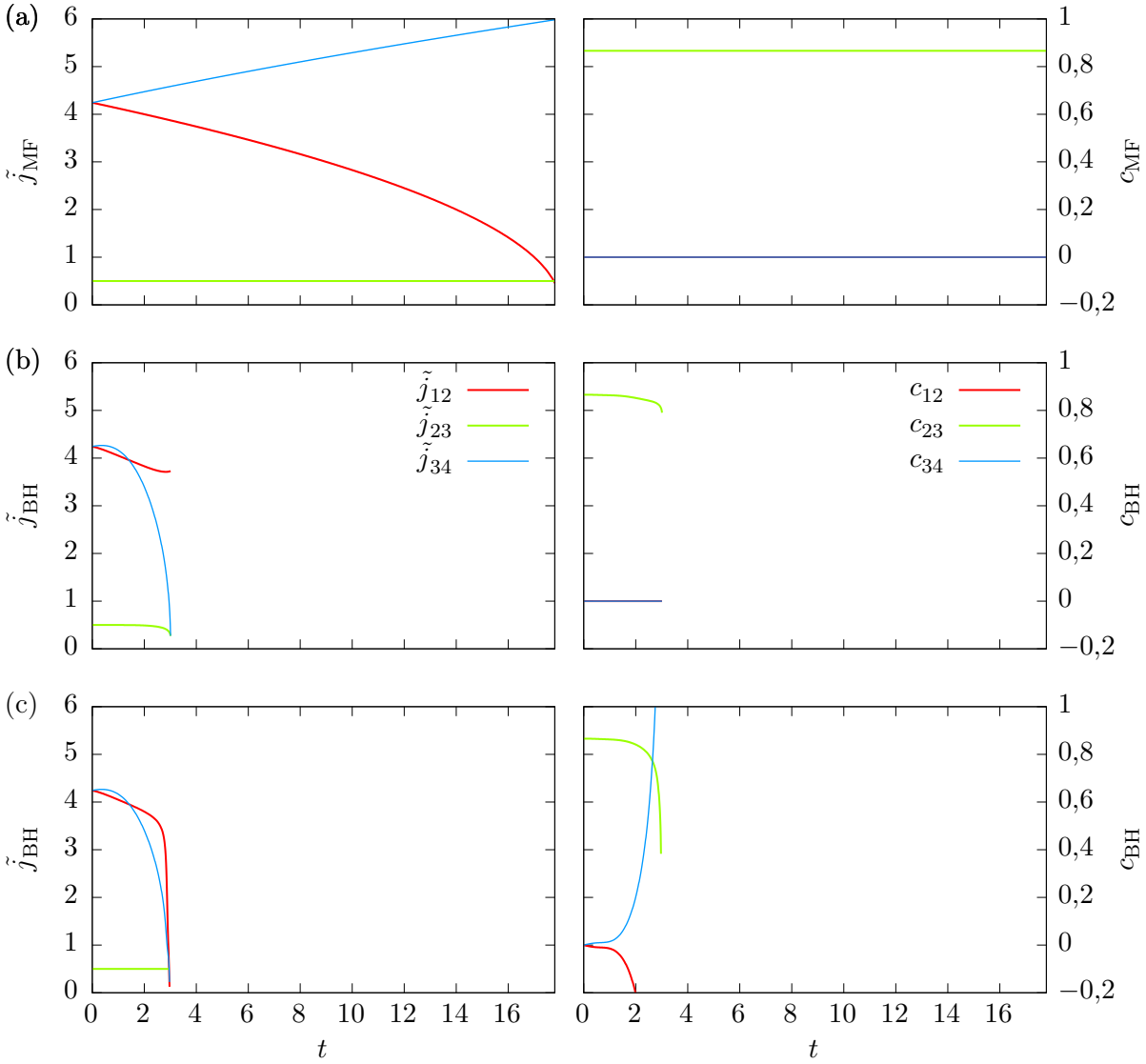



**Abbildung 5.9**: Die Zeitentwicklung der Observablen für die Zustände aus Abbildung 5.7. Die Unterschiede zwischen MF und Vielteilchendynamik werden hier insbesondere durch Betrachtung der Ströme deutlich, da ein Abfall von $\tilde{j}_{34}$ auf Null für den frühzeitigen Zusammenbruch des Vielteilchensystems verantwortlich ist. Anhand der Größe $c_{23}$ ist außerdem zu erkennen, dass sowohl in (b) als auch in (c) keine stationären Lösungen in den inneren Mulden vorliegen.

erhalten, sodass auch hier kein $\mathcal{PT}$-symmetrischer quasistationärer Zustand vorliegt. Vielmehr verstärkt das Festhalten des Stroms sogar die zeitliche Änderung von $c_{23}$. Nur für kurze Zeiten stellt sich ein nahezu stationärer Zustand für die eingebetteten Mulden ein, der jedoch zunehmend verlorengeht. Der Strom $\widetilde{j}_{34}$ fällt in den Abbildungen 5.9(b) und 5.9(c) gleichermaßen auf Null ab. In der Abbildung 5.9(c) ist das jedoch zusätzlich für $\widetilde{j}_{12}$ der Fall. Dieser schnelle Abfall führt zu einem geringefügig früheren Zusammenbruch des Vielteilchensystems und stellt ein Artefakt der Korrektur (4.49) dar, die sich insbesondere auch bei den Gitterpunktenergien selbst in Abbildung 5.8(c) zeigt. Grund hierfür ist wohl in erster Linie wieder der Abfall von $\widetilde{j}_{34}$. Dessen Ursache bleibt jedoch ungeklärt, da durch die Kopplungen der Ein- und Mehrteilchendynamik keine analytischen Betrachtungen mehr möglich sind. Es handelt sich hierbei um ein zutiefst vielteilchentheoretisches Phänomen, das nur bei einer nichtverschwindenden Wechselwirkungsstärke auftritt.

Zusammenfassend lässt sich also sagen, dass sich die Vielteilchendynamik im Grenzfall sehr geringer Systembesetzungszahlen stark von der MF-Dynamik unterscheidet, welche das mittlere Verhalten aller Teilchen bei sehr hohen Besetzungszahlen darstellt. Da keine stationären Zustände im eingebetteten Zweimodensystem beobachtet werden, liegt auch keine exakte $\mathcal{PT}$-Symmetrie vor. Dennoch lässt sich durch die Bedingungen (4.49) BGL insofern realisieren, dass sich stationäre Besetzungen und ein konstanter Strom in den mittleren Mulden einstellen, was eine natürliche Definition von BGL darstellt. Im Gegensatz zum MF sind also die Realisierung von BGL und das Auftreten von $\mathcal{PT}$-Symmetrie in einem Vielteilchensystem im Allgemeinen nicht mehr verknüpft. Dieser Umstand lässt sich auf die Bedingungen an die Kontrollparameter zurückführen, die zwar Vielteilcheneigenschaften in Form von Zweiteilchengrößen in den Gleichungen (4.45) berücksichtigen, jedoch lediglich aus Forderungen an die Einteilchendynamik gewonnen wurden. Für die Mehrteilchendynamik wären entsprechende Forderungen notwendig, die sich in einem Viermodensystem jedoch aufgrund der begrenzten Anzahl an Parametern nicht umsetzen lassen. Dass der in Abbildung 5.7(c) gezeigte Zustand mit BGL den $\mathcal{PT}$-symmetrischen stationären Zuständen aus dem MF dennoch bereits sehr nahe kommen, zeigt ein Vergleich mit Anhang E. Dort werden die Bedingungen (4.45) an die Tunnelraten zur Realisierung von BGL durch die Bedingungen (4.56) für stationäre Besetzungszahlen ersetzt. Die Dynamik in Abbildung E.1 unterscheidet sich dann grundlegend von der Dynamik in den Abbildungen 5.7(b), 5.8(b) und 5.9(b), wobei sich auch hier keine stationären Zustände einstellen. Um wiederum den Strom festzuhalten, lassen sich die Gitterpunktenergien auch hier durch die Korrektur (4.49) ergänzen. Ein Vergleich der Abbildung E.2 zeigt dann jedoch eine große Übereinstimmung mit den Abbildungen 5.7(c), 5.8(c) und 5.9(c). Die Tatsache, dass unterschiedliche Parameterwahlen zu ähnlichen Ergebnissen führen, kann dahingehend interpretiert werden, dass dieser Zustand eine Annäherung an den $\mathcal{PT}$-symmetrischen MF-Zustand entspricht, der das gemeinsame Ergebnis unterschiedlicher Parameterwahlen darstellt.

Obwohl sich also die Forderungen nach $\mathcal{PT}$-symmetrischen Lösungen an die Einteil-

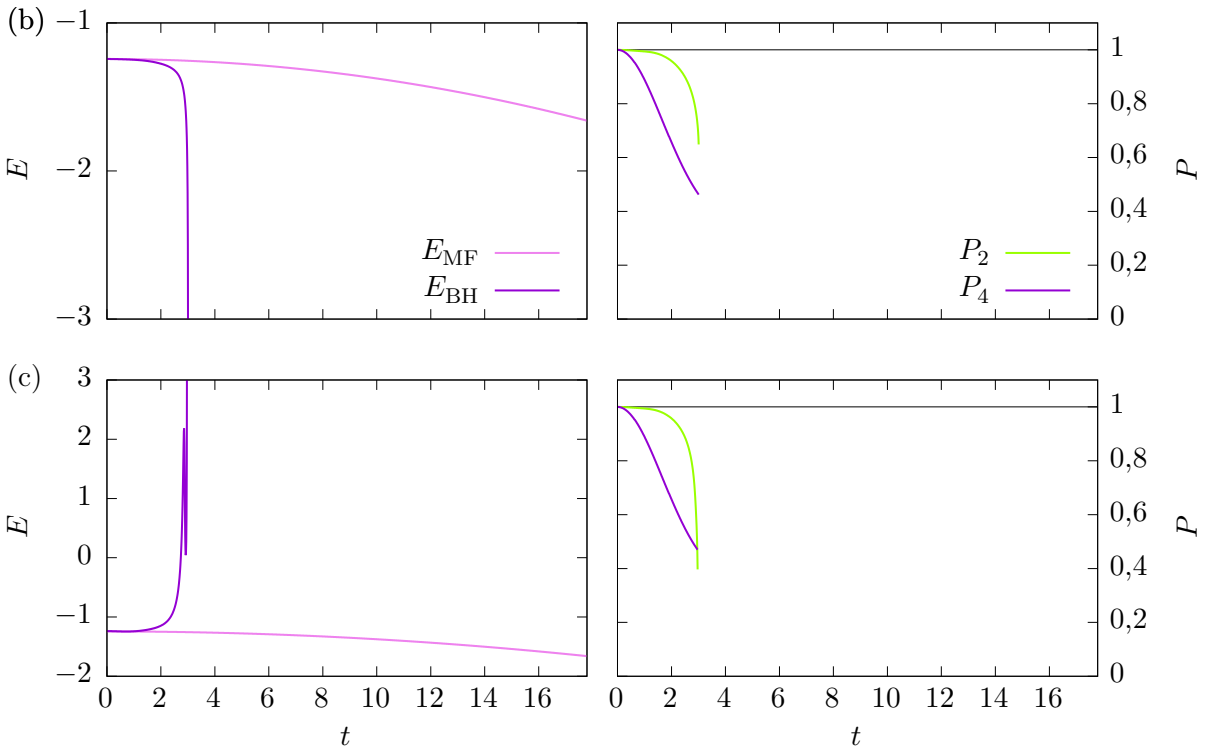



**Abbildung 5.10**: Für die Zustände aus den Abbildungen 5.7(b) und 5.7(c) sind jeweils die Energien (5.3) und (5.1) sowie die Reinheiten $P_4$ für das Gesamtsystem und $P_2$ für das eingebettete Zweimodensystem dargestellt. Die Zeitskala entspricht der Zeit $T$ bis zur Entleerung der linken Reservoirmulde im MF. Es ist gut zu erkennen, wie sich das Vielteilchensystem durch Wechselwirkungen zunehmend von einem reinen Zustand und damit vom MF entfernt.

chendynamik auch unter Berücksichtigung der Kopplung umsetzen lässt, so sind diese Zustände nicht stabil, was zu einem frühzeitigen Zusammenbruch führt. Diese Instabilität ist eine Konsequenz der Entfernung von einem reinen Zustand, bei dem die Einteilcheneigenschaften dominieren. Dieser Vorgang ist in Abbildung 5.10 in der Reinheit zu erkennen. Während die Reinheit $P_4$ des Gesamtsystems schnell abnimmt, so bleibt die Reinheit $P_2$ des eingebetteten Systems für eine gewisse Zeit erhalten und fällt dann exponentiell ab. Dass die Reinheit in einem Vielteilchensystem mit Wechselwirkung zwangsläufig abnehmen muss, lässt sich so verstehen, dass die kohärenten reinen Produktzustände der Einteilchendynamik durch Kopplung mit der Mehrteilchendynamik zerstört werden [112] zugunsten der unreinen und nichtkohärenten Vielteilchenzustände, für die es bei weitem mehr Realisierungsmöglichkeiten gibt. Mit dieser Dekohärenz gehen auch die im MF bestehenden Phasenbeziehungen verloren und die Bedingungen (4.7c) und (4.7d) sind nicht mehr mit den Korrelationen $c_{12}$ und $c_{34}$ verknüpft. So ist es selbst unter sorgfältiger Berücksichtigung der Vielteilcheneigenschaften in Form der Gleichungen (4.45) nicht

möglich, die Reinheit des Systems im Grenzfall sehr weniger Teilchen zu erhalten und somit stabile $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Zustände zu erzeugen. Grund hierfür ist nicht zuletzt, dass die Bedingungen nur auf die Erhaltung der Reinheit des eingebetteten Systems abzielen und das Reservoir unbeachtet bleibt. Daher nimmt insbesondere die Reinheit $P_4$ des Gesamtsystems in Abbildung 5.10 deutlich schneller ab als die Reinheit $P_2$ der mittleren Mulden. Mit dem exponentiellen Abfall der Reinheit $P_2$ ist auch eine exponentielle Abweichung der Energien im MF und im BHM zu verzeichnen.

### 5.2.2. Varianzen und adiabatisches Einschalten der Kontaktwechselwirkung

In den letzten Abschnitten war die Teilchenzahl in den Systemmulden auf Eins normiert, um einen Vergleich mit [68] zu ermöglichen. Das bedeutet jedoch, dass ein Teilchen jeweils auf die inneren Mulden verteilt sein müsste, was in einem Vielteilchensystem auf Schwierigkeiten bei der Interpretation führt. Hierbei muss beachtet werden, dass es sich bei den Besetzungszahlen und bei allen anderen in der BBGKY-Hierarchie auftretenden Größen um Erwartungswerte handelt. So beschreibt $n_k$ nicht die tatsächliche Besetzung der Mulde $k$, die natürlich zu jedem Zeitpunkt ganzzahlig ist, sondern das Ergebnis der Messung des Besetzungszahloperators $\hat{n}_k$. Diese Erwartungswerte besitzen eine gewisse Unschärfe, die sich über die Varianz

$$\mathrm{Var}(\langle\mathcal{O}\rangle) = \left\langle(\mathcal{O} - \langle\mathcal{O}\rangle)^2\right\rangle = \langle\mathcal{O}^2\rangle - \langle\mathcal{O}\rangle^2 \tag{5.5}$$

beschreiben lässt.

Für die Besetzungszahlen ergibt sich die Varianz direkt aus den Einteilchendichteoperatoren, sodass

$$\mathrm{Var}(\hat{n}_k) = \langle\hat{n}_k^2\rangle - n_k^2 = \langle\hat{\sigma}_{kk}^{(1)}\hat{\sigma}_{kk}^{(1)}\rangle - \left(\sigma_{kk}^{(1)}\right)^2 = \sigma_{kkkk}^{(2)} - \left(\sigma_{kk}^{(1)}\right)^2 . \tag{5.6}$$

Ebenso lassen sich die Varianzen der übrigen Observablen berechnen. Zu diesem Zweck werden gemäß der Definitionen (4.10a) und (4.9a) nun der Strom- und der Korrelationsoperator eingeführt,

$$\hat{\tilde{j}}_{kl}^{(1)} = -\boldsymbol{i}\left(\hat{\sigma}_{kl}^{(1)} - \hat{\sigma}_{lk}^{(1)}\right), \tag{5.7a}$$

$$\hat{c}_{kl}^{(1)} = \hat{\sigma}_{kl}^{(1)} + \hat{\sigma}_{lk}^{(1)} . \tag{5.7b}$$

Für die zugehörigen Varianzen folgt entsprechend

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}\left(\hat{\tilde{j}}_{kl}^{(1)}\right) &= \langle\left(\hat{\tilde{j}}_{kl}^{(1)}\right)^2\rangle - \langle\hat{\tilde{j}}_{kl}^{(1)}\rangle^2 \\ &= -\langle\left(\hat{\sigma}_{kl}^{(1)} - \sigma_{lk}^{(1)}\right)^2\rangle + \langle\hat{\sigma}_{kl}^{(1)} - \sigma_{lk}^{(1)}\rangle^2 \\ &= \Delta_{kllk} + \Delta_{lkkl} - \Delta_{klkl} - \Delta_{lklk} ,\end{aligned} \tag{5.8a}$$

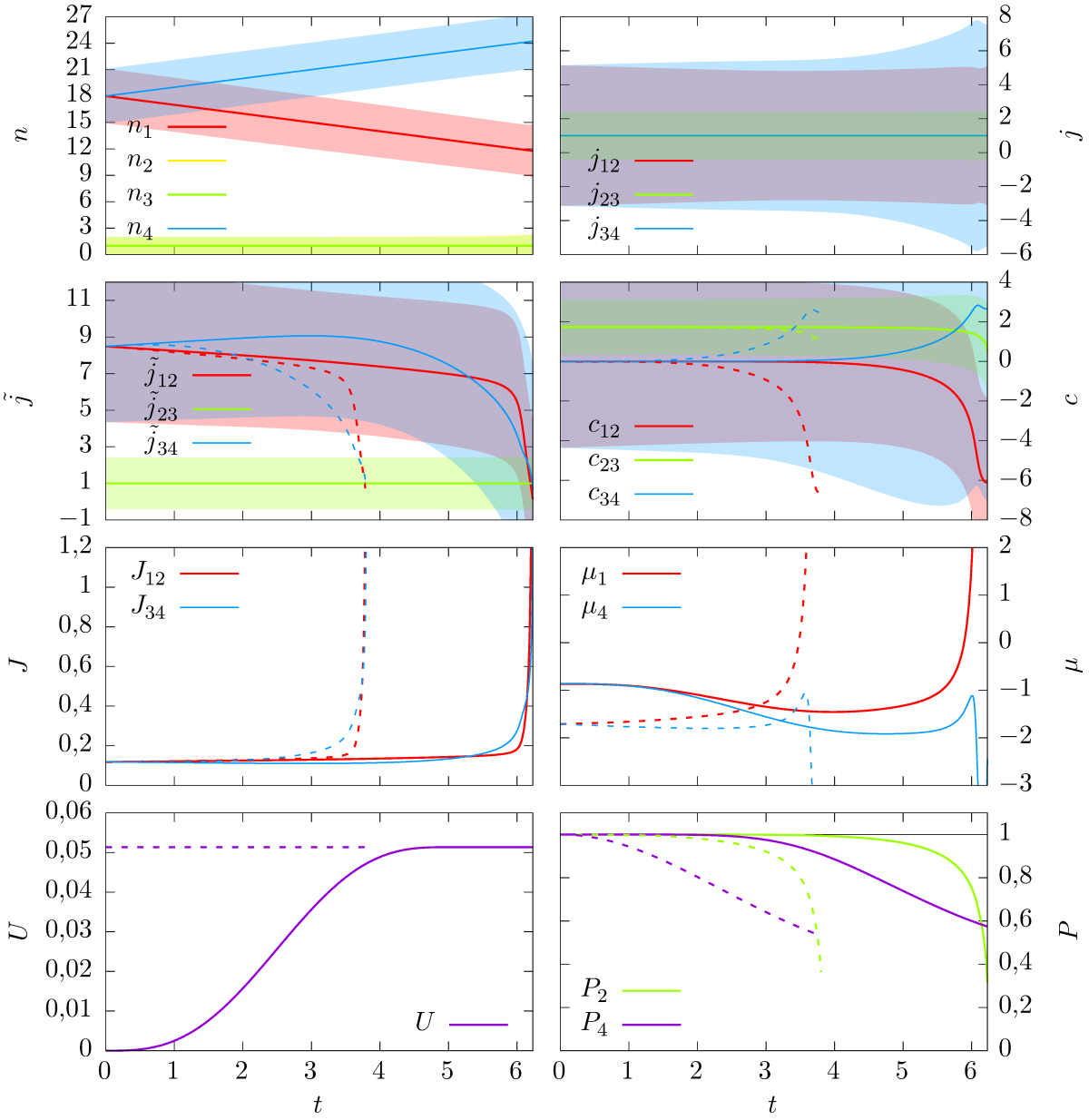



**Abbildung 5.11**: Dynamik im BHM mit der doppelten Anfangsbesetzung aus Abbildung 5.7, der Kopplungsstärke $\gamma = 0{,}5$ und der Tunnelrate $J_{23} = 1$ bei einer schwachen Wechselwirkung $g = 0{,}1$. Die Parameter werden gemäß der Gleichungen (4.45) mit der Korrektur (4.49) gewählt. Wenn die Wechselwirkung $U$ im Vielteilchensystem für $t \leq 5$ adiabatisch eingeschaltet wird (durchgezogen), so ergeben sich im Vergleich zu einer konstanten Wechselwirkungsstärke (gestrichelt) deutlich stabilere Zustände. Für die durchgezogenen Linien ist außerdem zu jeder Observablen die zugehörige Standardabweichung eingezeichnet.

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}\Big(\hat{c}_{kl}^{(1)}\Big) &= \langle\Big(\hat{c}_{kl}^{(1)}\Big)^2\rangle - \langle\hat{c}_{kl}^{(1)}\rangle^2 \\ &= \langle\Big(\hat{\sigma}_{kl}^{(1)} + \sigma_{lk}^{(1)}\Big)^2\rangle - \langle\hat{\sigma}_{kl}^{(1)} + \sigma_{lk}^{(1)}\rangle^2 \\ &= \Delta_{kllk} + \Delta_{lkkl} + \Delta_{klkl} + \Delta_{lklk}\,, \end{aligned} \tag{5.8b}$$

mit den Kovarianzen (4.43) aus Abschnitt 4.3.2.

Um die angesprochenen Interpretationsschwierigkeiten zu vermeiden, werden ganzzahlige Vielfache der symmetrischen Anfangsbesetzung aus Abbildung 5.7 betrachtet. Außerdem soll die Wechselwirkung nun wie in Abschnitt 4.3.4 diskutiert adiabatisch eingeschaltet werden. In Abbildung 5.11 ist ein System mit Gesamtteilchenzahl $N = 38$ für das Parameterwahl aus Abbildung 5.7(c) mit den Gleichungen (4.45) und (4.49) verwendet wird, da die so realisierten Zustände den gewünschten quasistationären Zuständen sehr nahe kommen und durch unterschiedliche Parameterwahl erreicht werden können. Im Vergleich zu anderen Parameterwahlen bringen die Gleichungen (4.45) zudem den Vorteil mit sich, dass sie lediglich zur Modellierung der Kopplung dienen, jedoch keine Bedingungen an den Zustand selbst darstellen. Das bedeutet, dass mit ihrer Hilfe auch $\mathcal{PT}$-gebrochene Zustände durch eine entsprechende Wahl der Kopplungskonstente $\gamma$ zugänglich sein sollten. Für $N = 38$ befindet sich also jeweils ein Teilchen in jeder Systemmulde und deren Besetzungen bleiben indirekt über die Forderung nach Stationarität des Stromes $j_{23}$ erhalten. Neben den Observablen selbst ist in Abbildung 5.11 und den folgenden Abbildungen stets noch die zugehörige Standardabweichung

$$\sigma_X = \sqrt{\mathrm{Var}(X)} \tag{5.9}$$

eingezeichnet, welche die Streuung der Messungen um den Erwartungswert beschreibt.

Da $N = 38$ noch immer dem Grenzfall geringer Teilchenzahlen zuzuordnen ist, unterscheiden sich die Observablen, Parameter und sonstige Größen nicht merklich von der Situation aus dem vorherigen Abschnitt. Jedoch ist festzustellen, dass ein adiabatischer Einschaltvorgang eine deutliche Verbesserung gegenüber einer konstanten Wechselwirkungsstärke $U$ darstellt, welche ebenfalls in Abbildung 5.11 dargestellt ist. Dass BGL über einen längeren Zeitraum hinweg aufrecht erhalten werden kann, liegt dabei an der fehlenden Kopplung zwischen der Einteilchendynamik und der Mehrteilchendynamik zu Beginn, die dann langsam an Bedeutung gewinnt. Die einzigen Größen, welche direkt von der Wechselwirkungsstärke abhängen und sich dadurch qualitativ unterschieden, sind die Gitterpunktenergien $\mu_1$ und $\mu_4$, was insbesondere aus den analytischen Lösungen (4.27) im MF ersichtlich ist. Interessant sind nun die Varianzen, welche zeigen, dass die betrachteten Erwartungswerte eine große Unsicherheit beinhalten. Das gilt insbesondere für die mit dem Reservoir verknüpften Größen. Hierbei sollte erwähnt werden, dass die Varianzen bereits zur Anfangszeit von Null verschieden sind.

Um das zu verstehen, können die Varianzen (5.6), (5.8a) und (5.8b) zur Anfangszeit mit den Gleichungen (4.38) und (4.40) berechnet werden. Dazu genügt es, die Kovarianzen

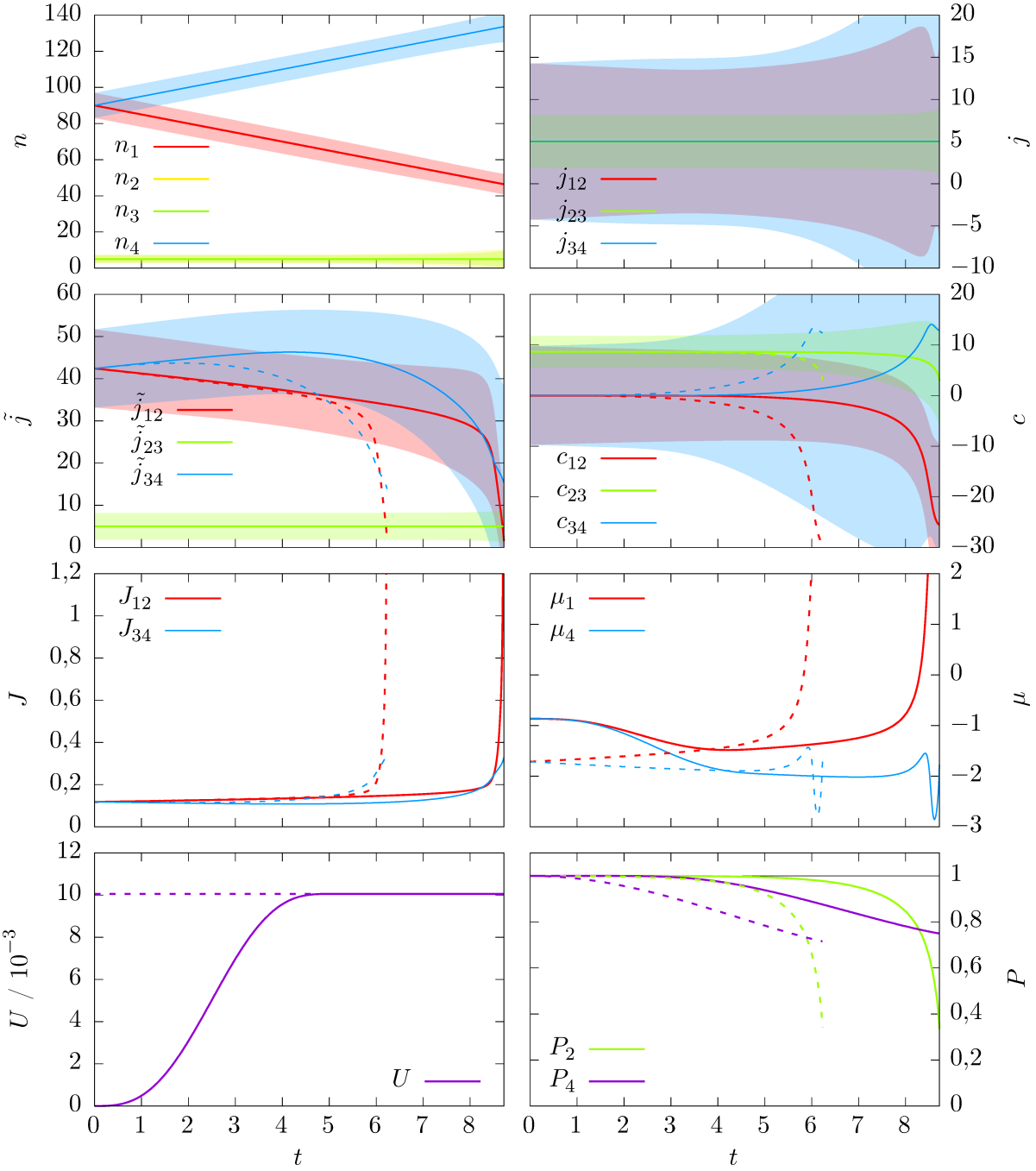



**Abbildung 5.12**: System entsprechend Abbildung 5.11 mit $N = 190$ Teilchen beschrieben durch das BHM, die Besetzung entspricht dabei dem Zehnfachen der Besetzung aus Abbildung 5.7. Durch die größere Teilchenzahl verzögert sich der Zeitpunkt des Zusammenbruchs und die Auswirkungen des abrupten Einschaltens der Wechselwirkung nimmt ab.

(4.43) auszuwerten,

$$\begin{aligned}\Delta_{klmn} &= \sigma^{(2)}_{klmn} - \sigma^{(1)}_{kl}\sigma^{(1)}_{mn} \\ &= N\psi^*_k(\delta_{lm} - \psi_l\psi^*_m)\psi_n \\ &= \sigma^{(1)}_{kn}\left(\delta_{ml} - \frac{1}{N}\sigma^{(1)}_{ml}\right). \end{aligned} \tag{5.10}$$

Mit einigen Umformungen folgen dann die Gleichungen

$$\mathrm{Var}(\hat{n}_k) = n_k\left(1 - \frac{n_k}{N}\right), \tag{5.11a}$$

$$\mathrm{Var}\left(\hat{\tilde{j}}^{(1)}_{kl}\right) = (1-\delta_{kl})(n_k+n_l) - \frac{2}{N}n_kn_l + \frac{1}{2N}\left[\left(c^{(1)}_{kl}\right)^2 - \left(\tilde{j}^{(1)}_{kl}\right)^2\right], \tag{5.11b}$$

$$\mathrm{Var}\left(\hat{c}^{(1)}_{kl}\right) = (1+\delta_{kl})(n_k+n_l) - \frac{2}{N}n_kn_l - \frac{1}{2N}\left[\left(c^{(1)}_{kl}\right)^2 - \left(\tilde{j}^{(1)}_{kl}\right)^2\right], \tag{5.11c}$$

wobei die hier auftretenden Besetzungszahlen nicht normiert sind. Für einen beliebigen Anfangszustand verschwinden die Varianzen (5.11) offensichtlich nicht, die zugehörigen Erwartungswerte sind also stets unscharf. Dieses Ergebnis steht in starkem Kontrast zur MF-Näherung, bei der sämtliche Varianzen aufgrund der Eigenschaft (3.41) verschwinden. Damit entspricht also bereits der Anfangszustand in einem Vielteilchensystem nur im Mittelwert vieler Realisierungen dem gewollten MF-Zustand.

Für eine größere Gesamtteilchenzahl in Abbildung (5.12) ist zu erkennen, dass sich der Zeitpunkt des Zusammenbruchs verzögert und der Unterschied zwischen den Systemen mit konstanter Wechselwirkung und einem adiabatischen Einschaltvorgang abnimmt. Außerdem werden die relativen Varianzen kleiner, was insbesondere an den Besetzungszahlen zu erkennen ist, da die Varianzen hier auf die Gesamtteilchenzahl $N$ bezogen sind. Gleichzeitig wächst die Varianz für die mit der rechten Reservoirmulde verbundenen Größen $j_{23}$, $\tilde{j}_{23}$ und $c_{23}$ stark an. Die reduzierte Stromdichte $\tilde{j}_{34}$ ist jedoch gerade für den Zusammenbruch des Vielteilchensystems verantwortlich, sodass ein Zusammenhang mit dem starken Anstieg der Varianz naheliegt. Dieses Verhalten kann als eine Reaktion des Vielteilchensystems auf die Variation der Parameter gedeutet werden, durch die dem System ein unnatürliches Verhalten aufgezwungen werden soll. Dies zeigt sich insbesondere beim Übergang zu Systemen mit hohen Gesamtteilchenzahlen, wie sie in den Abbildungen 5.13 und 5.14 dargestellt sind. Darüber hinaus ist dieses Verhalten insbesondere auch für die analytische Parameterwahl in Anhang D zu beobachten. Zur Beschreibung solch hoher Teilchenzahlen kann nun die BBR-Methode verwendet werden, welche die Vielteilchendynamik dann auf der relevanten Zeitskala für die verwendete Wechselwirkung bereits akkurat beschreibt. Obwohl sich der realisierte Zustand zunehmend einem quasistationären Zustand im MF annähert, so nimmt auch die Reaktion des Vielteilchensystems in Form der Varianzen $\sigma_{j_{23}}$ und $\sigma_{c_{23}}$ zu. Der für geringe Teilchenzahlen charakteristische Abfall der Stromdichte $\tilde{j}_{34}$ auf Null tritt auch bei höheren Teilchenzahln wie in Abbildung 5.13 noch auf, dieser wird jedoch durch das adiabatische

Einschalten der Wechselwirkung verzögert. Im Übergang zu sehr hohen Gesamtteilchenzahlen verschiebt sich der Umkehrpunkt über den Zeitpunkt $T$ hinaus, bei dem bereits die linke Reservoirmulde entleert ist, sodass die Dynamik bereits qualitativ mit dem MF übereinstimmt. Im MF besitzt $\widetilde{j}_{34}$ für die quasistationären Lösungen ebenfalls eine negative Krümmung und der Umkehrpunkt liegt immer jenseits von $T$.

Hierbei sollten noch einige Bemerkungen gemacht werden. Zum einen zeigt sich in Abbildung 5.14 sehr deutlich, dass der adiabatische Einschaltvorgang keinen Einfluss auf den Endzustand nimmt, da die zeitabhängigen Gitterpunktenergien $\mu_1$ und $\mu_4$ nach Erreichen der Wechselwirkungsstärke $U_0$ zum Zeitpunkt $t_0$ vollkommen mit dem Fall konstanter Wechselwirkungstärke übereinstimmt. Bei $N = 19000$ Teilchen stimmen auch die übrigen Größen bereits sehr gut überein und die relativen Varianzen sind klein, was insbesondere für die eingebetteten Systemgrößen gilt. Außerdem ist zu erkennen, dass die Reinheit des Systems bei hohen Teilchenzahlen nahezu erhalten ist. Darüber hinaus zeigt die Betrachtung der Reinheit, dass der adiabatische Einschaltvorgang noch immer einen Einfluss auf die Entwicklung des Systems hat und zu stabileren Zuständen führt. Obwohl nun bereits ein sehr reines System vorliegt, sind noch immer starke Abweichungen der Korrelationsgrößen $c_{12}$ und $c_{34}$ von Null zu erkennen. Das bedeutet, dass sich für endliche Teilchenzahlen nie quasistationäre Zustände über den gesamten Zeitraum einstellen werden. Die realisierten Zustände nähern sich dabei mit steigender Teilchenzahl den quasistationären Zuständen beliebig genau an.

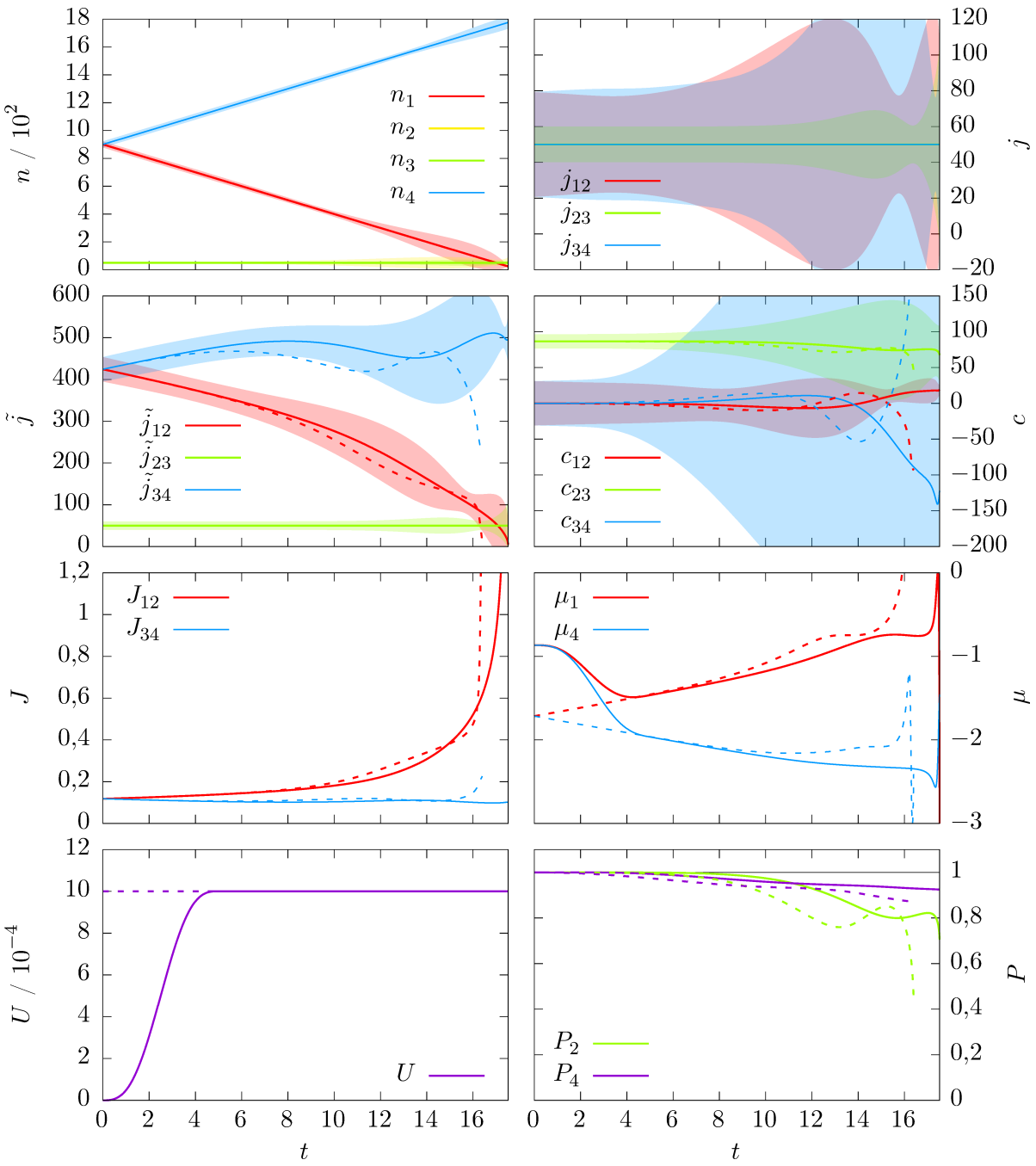



**Abbildung 5.13**: System entsprechend Abbildung 5.11 mit $N = 1900$ Teilchen beschrieben mithilfe der BBR-Methode, die Anfangsbesetzung entspricht dem Einhundertfachen der symmetrischen Besetzung aus Abbildung (5.7).

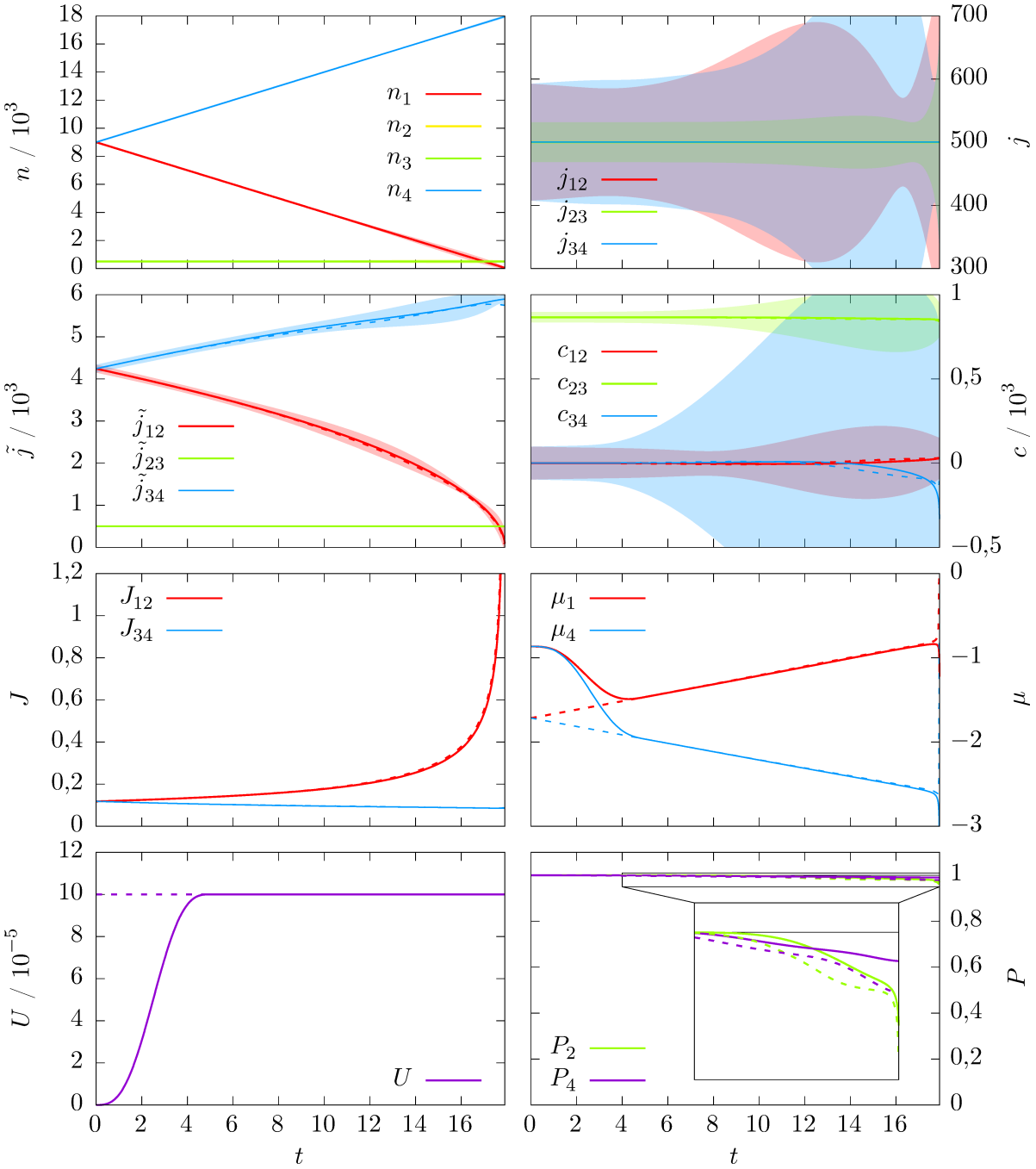



**Abbildung 5.14**: System entsprechend Abbildung 5.11 mit $N = 19000$ Teilchen beschrieben mithilfe der BBR-Methode, die Anfangsbesetzung entspricht dem Eintausendfachen der symmetrischen Besetzung aus Abbildung (5.7).

# 6. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde untersucht, ob sich ein $\mathcal{PT}$-symmetrisches Zweimodenmodell durch Einbettung in ein BHM mit einem optischen Viermodenpotential beschreiben lässt. Dazu müssen die Tunnelraten $J_{12}$ und $J_{34}$ sowie die Gitterpunktenergien $\mu_1$ und $\mu_4$ der äußeren Mulden dynamisch so variiert werden, dass BGL in den mittleren Mulden vorliegt.

Zu diesem Zweck wurde zuerst ein Viermodensystems in MF-Näherung betrachtet, für das bereits gezeigt wurde, dass eine Einbettung möglich ist und die Realisierung eines $\mathcal{PT}$-symmetrieschen Systems darstellt [42]. Die Gleichungen für die dynamischen Parameter sind jedoch kompliziert und lassen sich nur schwer in eine Vielteilchenbeschreibung übertragen. In Abschnitt 4.2 wurden einfachere Bedingungen (4.18) durch einen Vergleich der Zwei- und Viermodendynamik aufgestellt, die vollkommen äquivalent zu den Ergebnissen aus [42] sind. Dabei zeigt sich, dass nicht nur eine Variation der Tunnelraten notwendig ist um die Ein- und Auskopplungsströme zu steuern, sondern im MF auch eine fest definierte Phasenbeziehung zwischen den inneren und äußeren Mulden aufrecht erhalten werden muss. Dies konnte über die Gitterpunktenergien erfolgreich umgesetzt werden. Mit diesen Bedingungen lassen sich analytische Gleichungen für die Kontrollparameter aufstellen, mit denen sich BGL und $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Zustände in den inneren Mulden einstellen. Der Zustand bleibt solange stabil, bis die zur Einkopplung verwendete Reservoirmulde vollständig entleert ist, was dann zur Divergenz einer Tunnelrate führt.

Um entsprechende Gleichungen in einem Vielteilchensystem zu finden, wurde die Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung in Form einer BBGKY-Hierarchie verwendet, welche die Kopplung der Einteilchen an die Mehrteilchendynamik über die Wechselwirkung beschreibt. Ein Vergleich der Einteilchendynamik der Zwei- und Viermodensysteme liefert die Gleichungen (4.45). Es zeigt sich hierbei, dass die Tunnelraten äquivalent zum MF gewählt werden können. Für die Gitterpunktenergien ergeben sich ähnliche Gleichungen, welche jedoch Korrekturen in Form von Zweiteilchengrößen enthalten. Ein MF-artiger Anfangszustand lässt sich durch Präparation des BHM in einen reinen Produktzustand realisieren. Durch dynamische Anpassung der Parameter stellen sich jedoch im Gegensatz zum MF bei geringen Teilchenzahlen keine exakt stationären Lösungen ein. Auf diese Weise lässt sich kein BGL erreichen, da weder die Besetzungszahlen der inneren Mulden noch der Strom zwischen den Mulden erhalten bleibt. Durch numerische Rechnungen in Kapitel 5 konnte gezeigt werden, dass diese Zustände nach kurzer Zeit zusammenbrechen.

Der Grund hierfür ist ein Abfall der Einkopplungsstromdichte auf Null, was ebenfalls zur Divergenz einer Tunnelrate führt. Durch Wechselwirkungen zwischen den Bosonen geht die Reinheit des eingebetteten Systems zunehmend verloren, was schließlich zum Zusammenbruch führt.

Um BGL zu realisieren wurde zusätzlich die Erhaltung des Stroms zwischen den mittleren Mulden gefordert. Da keine weiteren freien Kontrollparameter vorhanden sind, war es notwendig, die Gitterpunktenergien zu modifizieren. Die Wahl der Gitterpunktenergien dient der Erhaltung der Phasenbeziehung zwischen System und Reservoirmulden. In einem Vielteilchensystem liegen im Allgemeinen jedoch keine kohärenten Zustände vor, sodass sich Phasenbeziehungen zwischen den einzelnen Mulden nicht mehr definieren lassen. Die Gitterpunktenergien wurden daher so angepasst, dass diese möglichst gut die ursprüngliche Bedingung erfüllen, jedoch exakt die Erhaltung des Stroms garantieren. Die numerischen Resultate zeigen, dass sich damit BGL erreichen lässt, da sowohl die Besetzungszahlen der mittleren Mulden als auch der Strom zwischen diesen Mulden erhalten ist.

Zuletzt wurde noch untersucht, ob sich stabilere Zustände durch adiabatisches Einschalten der Wechselwirkung erzeugen lassen, da der MF-artige Anfangszustand einem Zustand des Systems ohne Wechselwirkungen entspricht. Dabei zeigt sich, dass der adiabatische Einschaltvorgang die weitere Dynamik nicht verändert. Der Zusammenbruch des Systems wird jedoch verzögert, sodass über einen längeren Zeitraum stabile Zustände mit BGL vorliegen. Da es sich bei den Observablen in einem Vielteilchensystem um Erwartungswerte handelt, besitzen diese eine gewisse Varianz. Dabei hat sich gezeigt, dass diese Varianzen bereits im Anfangszustand von Null verschieden und für geringe Teilchenzahlen bereits relativ groß sind. Um größere Teilchenzahlen zu untersuchen, wurde die BBR-Methode verwendet, welche im Gegensatz zur MF-Näherung auch die Zweiteilchendynamik beinhaltet. Für steigende Gesamtteilchenzahlen nähert sich das System dem Verhalten im MF an, sodass näherungsweise $\mathcal{PT}$-symmetrische Lösungen beobachtet werden. Die relativen Varianzen für die Observablen der mittleren Mulden nehmen dabei deutlich ab. Für die mit der Auskopplunsmulde verknüpften Varianzen hingegen ist ein starker Anstieg zu verzeichnen, der als Reaktion des Vielteilchensystems auf die Variation der Parameter gedeutet werden kann. Diese Reaktion ist umso stärker, je größer die Teilchenzahl ist und umso besser die Reinheit erhalten bleibt.

Im Rahmen dieser Arbeit konnte noch nicht geklärt werden, welche physikalische Bedeutung der Abfall der Auskopplungsstromdichte bei der Realisierung von BGL besitzt. Da dieser Effekt nur in Anwesenheit von Wechselwirkungen auftritt, liegen keine analytischen Lösungen für Observablen vor. Für ein tieferes Verständnis wäre daher eine störungstheoretische Behandlung des Vielteilchenproblems sinnvoll. Darüber hinaus wurden in dieser Arbeit lediglich $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Lösungen bei einem Kopplungsparameter $\gamma = 0{,}5$ betrachtet. Die $\mathcal{PT}$-gebrochenen Lösungen aus dem MF sollten hier ebenfalls zugänglich sein, sodass sich hier eine weitere Untersuchung anbietet. Um nicht nur die

Einteilchendynamik berücksichtigen zu können, wäre die Hinzunahme weiterer Mulden notwendig, sodass weitere freie Kontrollparameter zur Verfügung stehen. Untersuchungen für größere Systeme wurden bereits in [46] durchgeführt, sodass auch hier wieder der Grenzfall geringer Teilchenzahlen bei einer Vielteilchenbeschreibung von Interesse ist.

# A. Stationäre Lösungen im Zweimodensystem

Betrachtet wird das Zweimodensystem

$$\begin{pmatrix} g|\psi_1|^2 + \boldsymbol{i}\gamma & -J \\ -J & g|\psi_2|^2 - \boldsymbol{i}\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{2.19}$$

aus Abschnitt 2.3 mit der normierten MF Wellenfunktion $\|\boldsymbol{\psi}\|^2 = 1$. Durch eine Energieverschiebung $\tilde{\mu} = \mu - g/2$ lässt sich die stationäre GPE in die Form

$$\begin{pmatrix} c\kappa + \boldsymbol{i}\gamma & -J \\ -J & -(c\kappa + \boldsymbol{i}\gamma) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \tilde{\mu} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{A.1}$$

mit der Abkürzung $c = g/2$ und dem Besetzungsungleichgewicht $\kappa = (|\psi_1|^2 - |\psi_2|^2)$ bringen, wobei ausgenutzt wurde, dass $g/2 = g/2(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2)$.

Durch Multiplikation der ersten Zeile mit ${\psi_1}^*$, der zweiten Zeile mit ${\psi_2}^*$ und anschließender Addition, lässt sich das chemische Potential berechnen,

$$\tilde{\mu}(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) = (c\kappa + \boldsymbol{i}\gamma)\kappa - J({\psi_1}^*\psi_2 + \psi_1{\psi_2}^*)\,. \tag{A.2}$$

Mit dem Ansatz

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{1+\kappa}{2}}\,\mathrm{e}^{i\varphi}\,, \tag{A.3a}$$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{1-\kappa}{2}}\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\,, \tag{A.3b}$$

der für $\kappa = 0$ dem symmetrischen MF Ansatz entspricht und für $\kappa \neq 0$ antisymmetrisch ist, folgt für das chemische Potential (A.2),

$$\tilde{\mu} = (c\kappa + \boldsymbol{i}\gamma)\kappa - J\sqrt{1-\kappa^2}\,\cos(2\varphi)\,. \tag{A.4}$$

Es ist zu bemerken, dass die Phasen im Ansatz (A.3) durch die Freiheit der globalen Phase stets antisymmetrisch gewählt werden können.

Um die Lösungen für $\kappa$ und $\varphi$ zu berechnen, wird der Ansatz (A.3) in die stationäre GPE (A.1) eingesetzt und $\mu$ eleminiert,

$$(c\kappa + \boldsymbol{i}\gamma) - J\sqrt{\frac{1-\kappa}{1+\kappa}}\,\mathrm{e}^{-i2\varphi} = -J\sqrt{\frac{1+\kappa}{1-\kappa}}\,\mathrm{e}^{i2\varphi} - (c\kappa + \boldsymbol{i}\gamma)\,, \tag{A.5}$$

sodass sich durch Aufspaltung in Real- und Imaginärteil und einigen Umformungen die Gleichungen

$$c\kappa\sqrt{1-\kappa^2} + J\kappa\cos(2\varphi) = 0\,, \tag{A.6a}$$

$$\gamma\sqrt{1-\kappa^2} + J\sin(2\varphi) = 0\,, \tag{A.6b}$$

ergeben.

Hierbei ist nun eine Fallunterscheidung notwendig:

1. Für den symmetrischen Fall mit $\kappa = 0$ verschwindet die Gleichung (A.6a) und (A.6b) liefert die Phase

$$\varphi = -\frac{1}{2}\arcsin\left(\frac{\gamma}{J}\right). \tag{A.7}$$

   Mit der Gleichung (A.4) ergibt sich unter Berücksichtigung der Energieverschiebung zu Beginn das chemische Potential des Zweimodenmodells für den symmetrischen Fall,

$$\mu_\mathrm{S} = \frac{g}{2} - J\cos\left(\arcsin\left(\frac{\gamma}{J}\right)\right) = \frac{g}{2} \pm \sqrt{J^2-\gamma^2}\,, \tag{A.8}$$

   das für $|\gamma| \leq J$ reell ist.

2. Für den antisymmetrischen Fall mit $\kappa \neq 0$ darf die Gleichung (A.6a) durch $\kappa$ dividiert werden, sodass die trigonometrischen Funktionen nun denselben Vorfaktor besitzen. Durch Quadrierung und Addition dieser Terme lässt sich die Phase $\varphi$ eleminieren,

$$J^2\Big(\cos^2(2\varphi) + \sin^2(2\varphi)\Big) = J^2 = \Big(c^2+\gamma^2\Big)\Big(1-\kappa^2\Big)\,. \tag{A.9}$$

   Für $\kappa$ folgen dann direkt die beiden Lösungen

$$\kappa = \pm\sqrt{1 - \frac{J^2}{c^2+\gamma^2}}\,. \tag{A.10}$$

   Werden diese Lösungen wiederum in die Gleichungen (A.6) eingesetzt, so ergeben sich

$$\sin(2\varphi) = -\frac{\gamma}{\sqrt{c^2+\gamma^2}}\,, \tag{A.11a}$$

$$\cos(2\varphi) = -\frac{c}{\sqrt{c^2+\gamma^2}}\,, \tag{A.11b}$$

und eine Division liefert dann die zugehörige Phase,

$$\varphi = \frac{1}{2}\arctan\left(\frac{\gamma}{c}\right). \tag{A.12}$$

Mit den Ergebnissen (A.10) und (A.12) ergibt sich dann mit einigen Umformungen das chemische Potential des Zweimodenmodells für den antisymmetrischen Fall,

$$\mu_{\mathrm{A}} = g \pm \gamma\sqrt{\frac{4J^2}{g^2+4\gamma^2}-1}\,, \tag{A.13}$$

das für $|\gamma| \leq \sqrt{J^2 - g^2/4}$ reell ist.

Die symmetrischen und antisymmetrischen Lösungen (A.8) und (A.13) sind in Abbildung 2.2 dargestellt.

# B. Lösungen einer linearen komplexen Gleichung

Gegeben sei eine lineare komplexe Gleichung der Form

$$\alpha x + \beta y = \Omega \tag{B.1}$$

mit $\alpha, \beta, \Omega \in \mathbb{C}$ und $x, y \in \mathbb{R}$.

Diese Gleichung lässt sich als reelle Matrixgleichung schreiben,

$$\begin{pmatrix} \operatorname{Re}\alpha & \operatorname{Re}\beta \\ \operatorname{Im}\alpha & \operatorname{Im}\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname{Re}\Omega \\ \operatorname{Im}\Omega \end{pmatrix} , \tag{B.2}$$

sodass die Lösungen direkt durch Inversion der Koeffizientenmatrix berechnet werden können,

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{\operatorname{Re}\alpha \operatorname{Im}\beta - \operatorname{Im}\alpha \operatorname{Re}\beta} \begin{pmatrix} \operatorname{Im}\beta & -\operatorname{Re}\beta \\ -\operatorname{Im}\alpha & \operatorname{Im}\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \operatorname{Re}\Omega \\ \operatorname{Im}\Omega \end{pmatrix} . \tag{B.3}$$

Da $(\operatorname{Re} a \operatorname{Im} b - \operatorname{Im} a \operatorname{Re} b) = \operatorname{Im}(a^* b)$ ergeben sich für die Lösungen

$$x = \frac{\operatorname{Im}(\Omega^* \beta)}{\operatorname{Im}(\alpha^* \beta)} , \tag{B.4a}$$

$$y = \frac{\operatorname{Im}(\Omega^* \alpha)}{\operatorname{Im}(\beta^* \alpha)} . \tag{B.4b}$$

# C. Beschreibung der MF-Dynamik über SPDMs

Die Einbettung eines Zweimodenmodells in ein abgeschlossenes Viermodensystem wurde bereits im MF untersucht [42, 44, 46, 68]. Mit dem Ziel einer experimentellen Realisierung wurden dort Bedingungen an das System lediglich unter Betrachtung von Observablen gestellt. Dies stellt eine Einschränkung der zugrundeliegenden Beschreibung dar. Die Konsequenzen und die Beziehungen zu den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit werden im Folgenden diskutiert.

Die Einteilchendynamik wird durch die SPDMs beschrieben, welche im MF durch $\sigma_{kl} = \psi_k^* \psi_l$ gegeben sind. Diese Größen sind gerade die experimentell zugänglichen Observablen und enthalten die Einträge der MF-Wellenfunktion immer paarweise, jeweils mit einer komplexen Konjugation. Eine globaler Phasenfaktor $\exp(\boldsymbol{i}\Phi)$ entfällt also stets, denn

$$\tilde{\sigma}_{kl} = \tilde{\psi}_k^* \tilde{\psi}_l = \left(\mathrm{e}^{i\Phi}\psi_k\right)^* \mathrm{e}^{i\Phi}\psi_l = \psi_k^* \mathrm{e}^{-i\Phi}\mathrm{e}^{i\Phi}\psi_l = \psi_k^*\psi_l = \sigma_{kl}\,. \tag{C.1}$$

Die SPDMs sind also invariant gegenüber einer beliebigen globalen Phase, insbesondere kann diese auch zeitabhängig sein, also $\Phi = \Phi(t)$. Die Schrödinger-Gleichung ist ebenfalls invariant bezüglich einer beliebigen Konstanten globalen Phase, für eine zeitabhängige Phase $\Phi(t)$ gilt jedoch

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\boldsymbol{\psi}} = \mathcal{H}\tilde{\boldsymbol{\psi}} \\ \Leftrightarrow \quad & \boldsymbol{i}\mathrm{e}^{i\Phi}\left(\boldsymbol{i}\dot{\Phi}\boldsymbol{\psi} + \dot{\boldsymbol{\psi}}\right) = \mathcal{H}\mathrm{e}^{i\Phi}\boldsymbol{\psi} \\ \Leftrightarrow \quad & \boldsymbol{i}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\psi} = \left(\mathcal{H} + \dot{\Phi}\right)\boldsymbol{\psi}\,. \end{aligned} \tag{C.2}$$

Für eine nichttriviale Zeitabhängigkeit der Phase besitzt etwa das stationäre Zweimodenmodell (2.20) einen zeitabhängigen Energieeigenwert $\tilde{\mu} = (\mu + \dot{\Phi})$, was keine echten stationären Zustände erlaubt. In einem Experiment wäre ein solcher Zustand zuerst einmal ununterscheidbar von einem echten stationären Zustand, dazu bedurfte es eines Interferenzexperimentes. In [68] zeigt sich dies in Form eines zusätzlichen Freiheitsgrades, welcher eine direkte Konsequenz der Einschränkung der MF-Beschreibung auf physikalische Observablen der Form $\sigma_{kl} = \psi_k^*\psi_l$ darstellt.

Um die Zusammenhänge mit den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit zu verstehen, müssen die Abschnitte 4.2.2 und 4.2.3 betrachtet werden. Dort wird gezeigt, dass die komplexen Gleichungen

$$J_{12}\psi_1 = -\boldsymbol{i}\gamma\psi_2\,, \tag{4.4a}$$

$$J_{34}\psi_4 = \boldsymbol{i}\gamma\psi_3 \tag{4.4b}$$

erfüllt sein müssen, damit die Dynamik der eingebetteten Größen $\psi_2(t)$ und $\psi_3(t)$ mit dem Zweimodensystem (2.19) übereinstimmen und $\mathcal{PT}$-Symmetrie überhaupt realisiert werden kann. Eine äquivalente Formulierung im Rahmen der SPDMs ist durch die Gleichungen

$$J_{12}\widetilde{j}_{12} = 2\gamma n_2\,, \tag{4.15a}$$

$$J_{34}\widetilde{j}_{34} = 2\gamma n_3\,, \tag{4.15b}$$

$$J_{12}c_{13} = J_{34}c_{24}\,, \tag{4.21a}$$

$$J_{12}\widetilde{j}_{13} = J_{34}\widetilde{j}_{24} \tag{4.21b}$$

gegeben. Im MF sind jedoch nur drei dieser Gleichungen unabhängig [44], sodass die zusätzliche Freiheit auftritt, die bereits oben beschrieben wurde. Diese Freiheit tritt in den Gleichungen (4.4a) und (4.4b) nicht auf sondern lediglich bei der Beschränkung auf die observablen SPDMs.

Um dieses unterbestimmte Gleichungssystem für die Kontrollparameter zu lösen wird in [46] eine beliebige zeitabhängige Funktion

$$d(t) = \frac{J_{12}(t)}{c_{24}(t)} \tag{C.3}$$

eingeführt. Mit der Lösung $J_{12} = \gamma\sqrt{n_2/n_1}$ aus Abschnitt 4.2.1 und der Definition $c_{24} = 2\sqrt{n_2 n_4}\,\cos(\varphi_2-\varphi_4)$ aus Abschnitt 4.2.2 ergibt sich für $\mathcal{PT}$-symmetrische stationäre Zustände

$$\begin{aligned} d(t) &= \frac{\gamma}{2\sqrt{n_1(t)n_4(t)}\,\cos(\varphi_2-\varphi_4)} \\ &\overset{(4.20)}{=} \frac{\gamma}{2\sqrt{n_1(t)n_4(t)}\,\sin(2\varphi)} \\ &\overset{(2.23)}{=} -\frac{J_{23}}{2\sqrt{n_1(t)n_4(t)}}\,. \end{aligned} \tag{C.4}$$

Zum Schluss sei noch angemerkt, dass dieser Freiheitsgrad in der vorliegenden Arbeit nicht auftaucht, da nicht die *Vorgehensweise* zur Bestimmung der Gleichungen (4.4a) und (4.4b) auf ein Vielteilchenproblem *übertragen* werden, was auf die Gleichungen (4.15a), (4.15b), (4.21a) und (4.21b) führt. Vielmehr werden die *Bedingungen* aus dem MF selbst in Abschnitt 4.2 quasi *übersetzt* unter der Voraussetzung, dass sich das Vielteilchensystem stets in einem MF-artigen Zustand befindet.

# D. Analytische Parameterwahl

Für eine dynamische Parameterwahl, wie sie in der vorliegenden Arbeit untersucht wird, muss der Zustand des Systems zu jedem Zeitpunkt bekannt sein. In einem realen Experiment ist dies natürlich nicht möglich, sodass der Zustand des Systems in regelmäßigen Zeitintervallen gemessen und die Parameter entsprechend angepasst werden müssen. Die Intervalllänge hängt dabei nicht nur von der Dauer einer Messung selbst ab, sondern auch von der Dauer der Auswertung dieser Messung.

Die experimentelle Realisierung eines $\mathcal{PT}$-symmetrischen Viermodensystems ist also absolut nichttrivial. Aus diesem Grund soll in diesem Abschnitt eine analytische Parameterwahl wie in Abschnitt 4.2.3 betrachtet werden, da hierfür keine Kenntnis des momentanen Zustandes erforderlich ist. Die Parameter sind hierbei gegeben durch

$$J_{12}(t) = \gamma\sqrt{\frac{n}{n_1(0) - 2\gamma n t}}\,, \tag{4.27a}$$

$$J_{34}(t) = \gamma\sqrt{\frac{n}{n_4(0) + 2\gamma n t}}\,, \tag{4.27b}$$

$$\mu_1(t) = \mu - g n_1(0) + 2\gamma g n t\,, \tag{4.27c}$$

$$\mu_4(t) = \mu - g n_4(0) - 2\gamma g n t\,, \tag{4.27d}$$

mit

$$\mu = gn - \sqrt{J_{23}^2 - \gamma^2}\,. \tag{4.27e}$$

Diese analytischen Lösungen gelten nur im MF-Grenzfall exakt und berücksichtigen keine Vielteilchenkorrekturen zur Einteilchendynamik, was in einem Vielteilchensystem insbesondere bei sehr geringen Teilchenzahlen unzureichend ist [111]. Im Gegensatz zu der eben genannten Arbeit sind die Parameter hier jedoch unabhängig vom Zustand, sodass sich Abweichungen und Fehler nicht durch die Parameterwahl verstärken. Dadurch ist kein frühzeitiger Abbruch der Integration zu erwarten, sodass die Integrationszeit stets der im MF entspricht.

Im Folgenden ist eine analytische Parameterwahl für unterschiedliche Gesamtteilchenzahlen dargestellt, die stets Vielfache der Anfangsbesetzung $n_1(0) = n_4(0) = 9$ und $n_2(0) = n_3(0) = 0{,}5$ darstellen. Das System besitzt die Tunnelraten $J = 1$, eine konstante schwache Wechselwirkung $g = 0{,}1$ und das Zweimodensystem ist über $\gamma = 0{,}5$ an die Reservoirmulden gekoppelt.

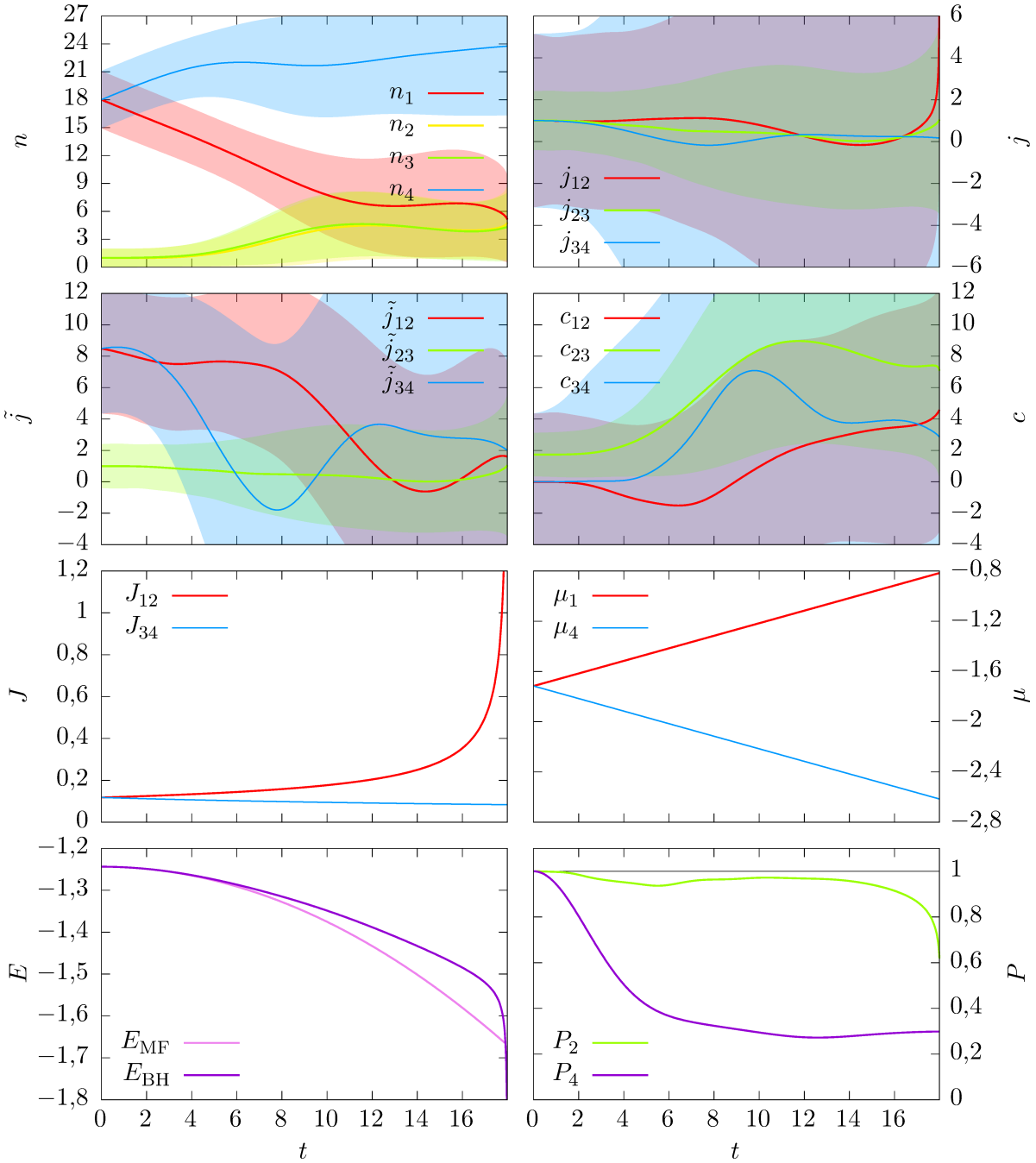



**Abbildung D.1**: Analytische Parameterwahl für $N = 38$ im BHM für die Tunnelraten $J = 1$ für eine schwache Wechselwirkung $g = 0{,}1$ und der Kopplungsrate $\gamma = 0{,}5$.

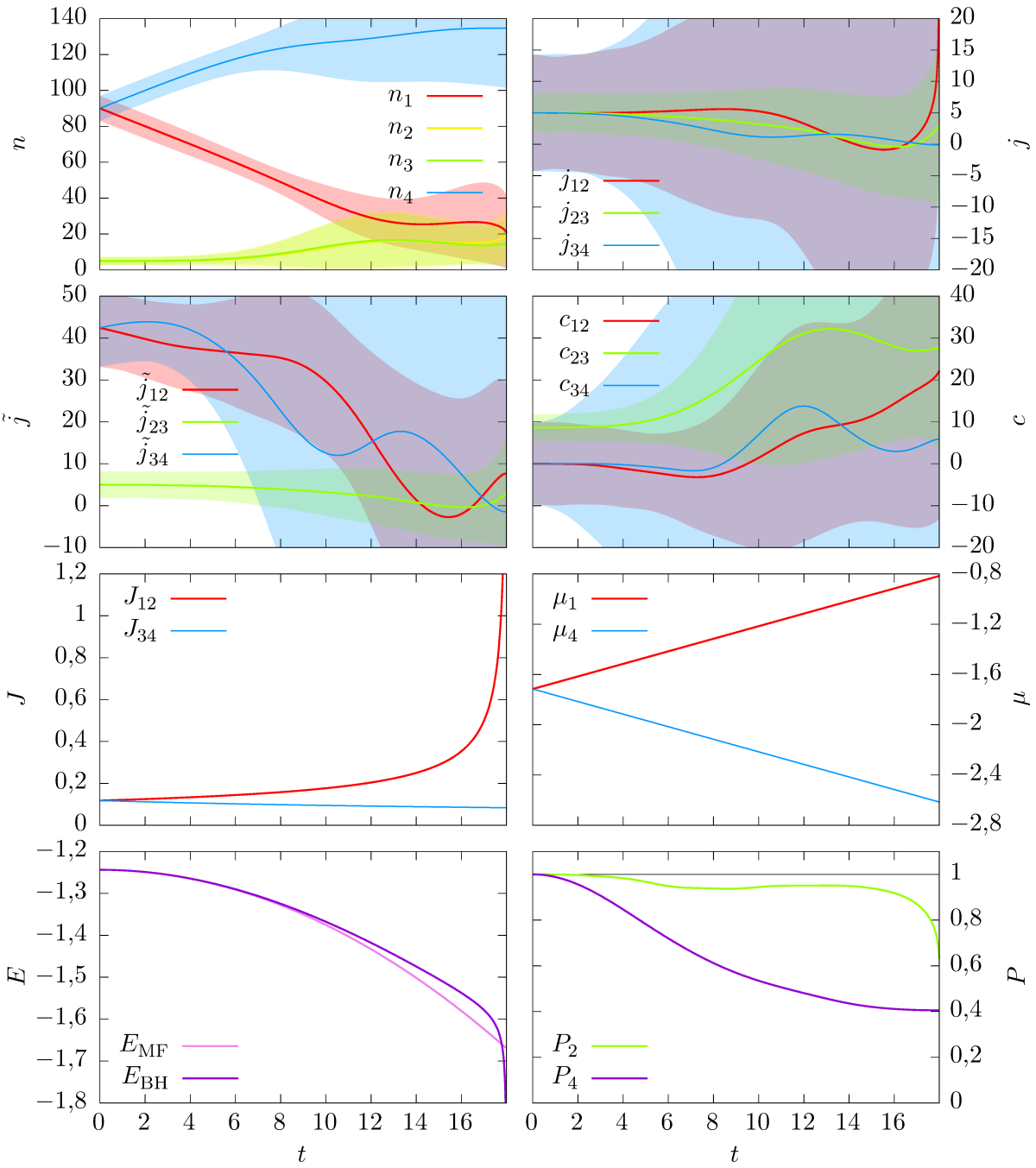



**Abbildung D.2**: Analytische Parameterwahl wie in Abbildung D.1 für $N = 190$ im BHM.

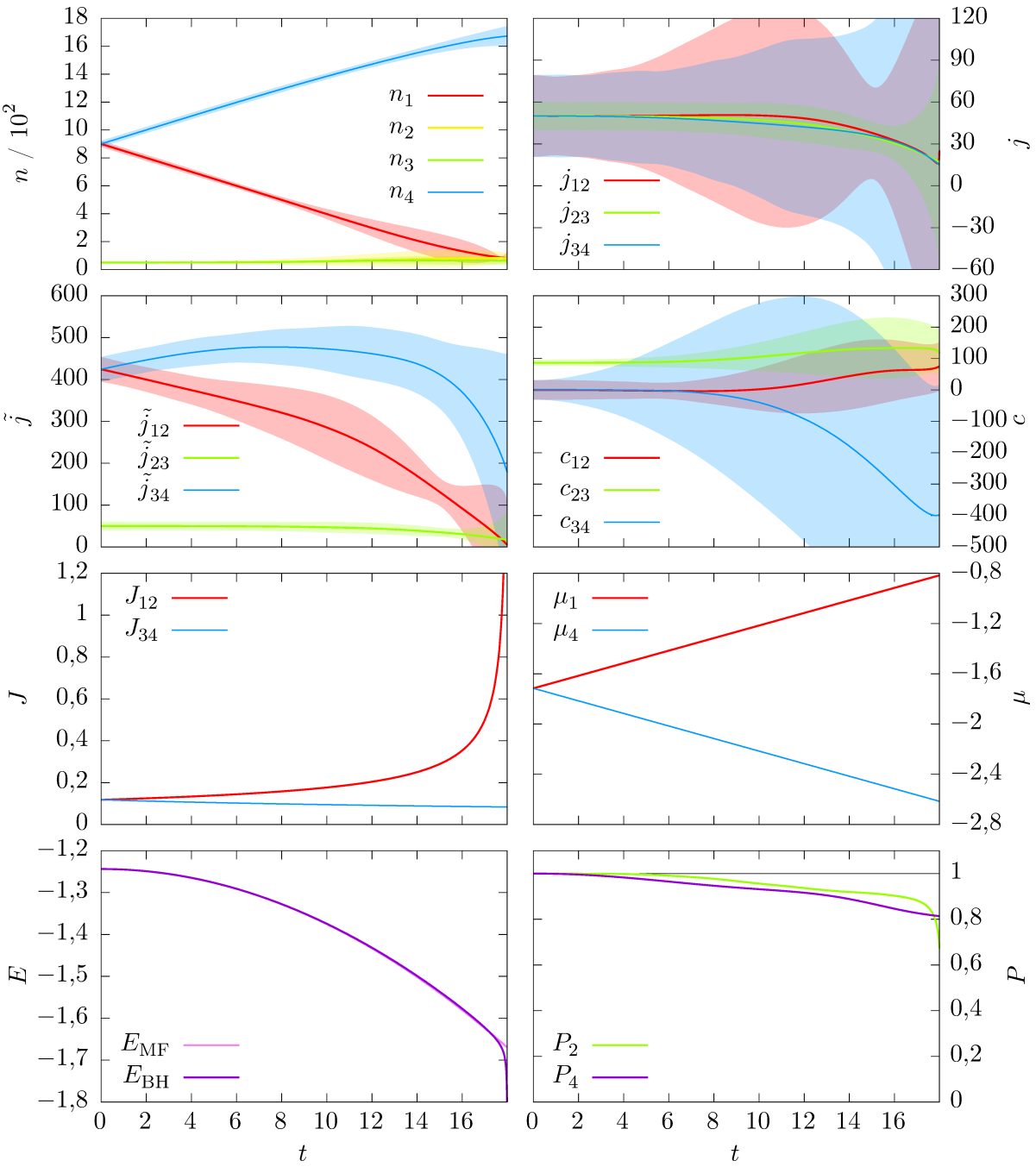



**Abbildung D.3**: Analytische Parameterwahl wie in Abbildung D.1 für $N = 1900$ in der BBR-Methode.

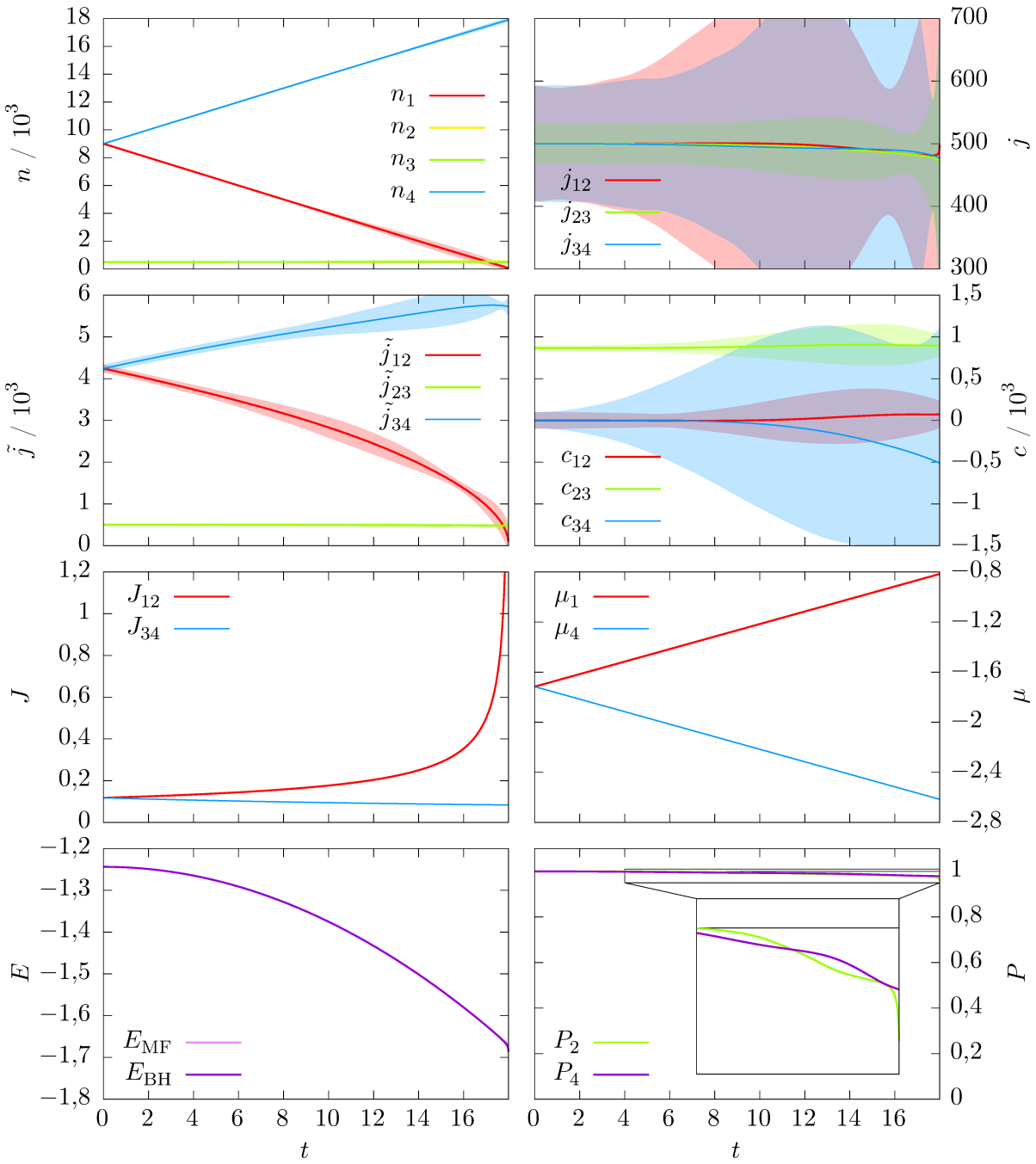



**Abbildung D.4**: Analytische Parameterwahl wie in Abbildung D.1 für $N = 19000$ in der BBR-Methode.

# E. Alternative Parameterwahl für stationäre Besetzungen

Aus Kapitel 5 ist bereits hervorgegangen, dass die Wahl der Parameter in einem Vielteilchensystem zu gänzlich unterschiedlichen Zuständen führen können, wohingegen der quasistationäre Zustand im MF eindeutig ist. Unter diesem Gesichtspunkt soll hier noch eine alternative Parameterwahl für die $\mathcal{PT}$-symmetrischen stationären Zustände untersucht werden, bei der die Tunnelraten (4.56) verwendet werden.

Eine Übersicht der relevanten Größen des so realisierten Systems ist in Abbildung E.1 für die in Abschnitt 5.2.1 zu finden. Ein Vergleich mit den Abbildungen dort zeigt sofort, dass hierbei ein vollkommen unterschiedlicher Zustand vorliegt, bei dem die Besetzungszahlen $n_2(t) = n_3(t)$ erhalten sind. Die Ströme $j_{12}(t) = j_{23}(t) = j_{34}(t)$ hingegen stimmen zwar zu jedem Zeitpunkt überein, sind dabei jedoch nicht für alle Zeiten erhalten. Im Gegensatz zu der bisherigen Parameterwahl (4.45) ist die Änderung der Besetzungszahlen im Reservoir nicht mehr linear, da dies nun keinen Teil der Forderungen mehr darstellt. Auch in diesem Fall liegt nur zu Beginn ein quasistationärer Zustand vor, von dem sich das System dann zunehmend entfernt, was insbesondere an den Größen $j_{23}$ und $c_{23}$ zu erkennen ist. Der Abbruch wird wiederum durch einen Abfall der reduzierten Stromdichte $\widetilde{j}_{34}$ auf Null verursacht, was auch in der Gleichung (4.56b) zur Divergenz der Tunnelrate $J_{34}$ führt. Der Zeitpunkt des Abbruchs tritt im Vergleich zur Abbildung 5.7 etwas später ein. Ein genauerer Vergleich mit der Abbildung 5.8 zeigt, dass die Wahl der Parameter über einen längeren Zeitraum hinweg recht gut mit dem Verhalten im MF übereinstimmt, obwohl die Reinheit dasselbe Verhalten wie zuvor aufweist.

Um für die gesamte Dauer stationäre Ströme zu erzwingen, lassen sich auch hier die Gitterpunktenergien gemäß der Gleichungen (4.49) modifizieren, was in Abbildung E.2 dargestellt ist. Hierbei stellt sich wieder ein Zustand mit BGL ein, der sowohl stationäre Besetzungszahlen $n_2(t) = n_3(t)$ sowie stationäre Ströme $j_{12}(t) = j_{23}(t) = j_{34}(t)$ aufweist, jedoch ein nichtstationäres Verhalten in $c_{34}$. Durch einen Vergleich mit den Abbildungen 5.7(c), 5.8(c), 5.9(c) und 5.10(c) zeigt sich eine große Übereinstimmung zu der Parameterwahl mit den Gleichungen (4.45a) und (4.45b), obwohl die Motivation hinter den Forderungen an die Tunnelraten sehr unterschiedlich sind und entsprechend ohne zusätzliche Forderungen auch zu einer sehr unterschiedlichen Dynamik führen. Die Tatsache, dass unterschiedliche Parameterwahlen auch in einem Vielteilchensystem zu einem sehr ähnlichen Ergebnis führen, ist ein Zeichen dafür, dass der so realisierte

Zustand dem gewünschten $\mathcal{PT}$-symmetrischen stationären Zuständen bereits sehr nahe kommt und damit eine Realisierung von BGL darstellt. Jedoch ist dieser Zustand nicht stabil und wird durch Wechselwirkungen der Teilchen untereinander schnell zerstört, sodass der Zusammenbruch im Vergleich zur Abbildung E.1 wiederum früher geschieht.

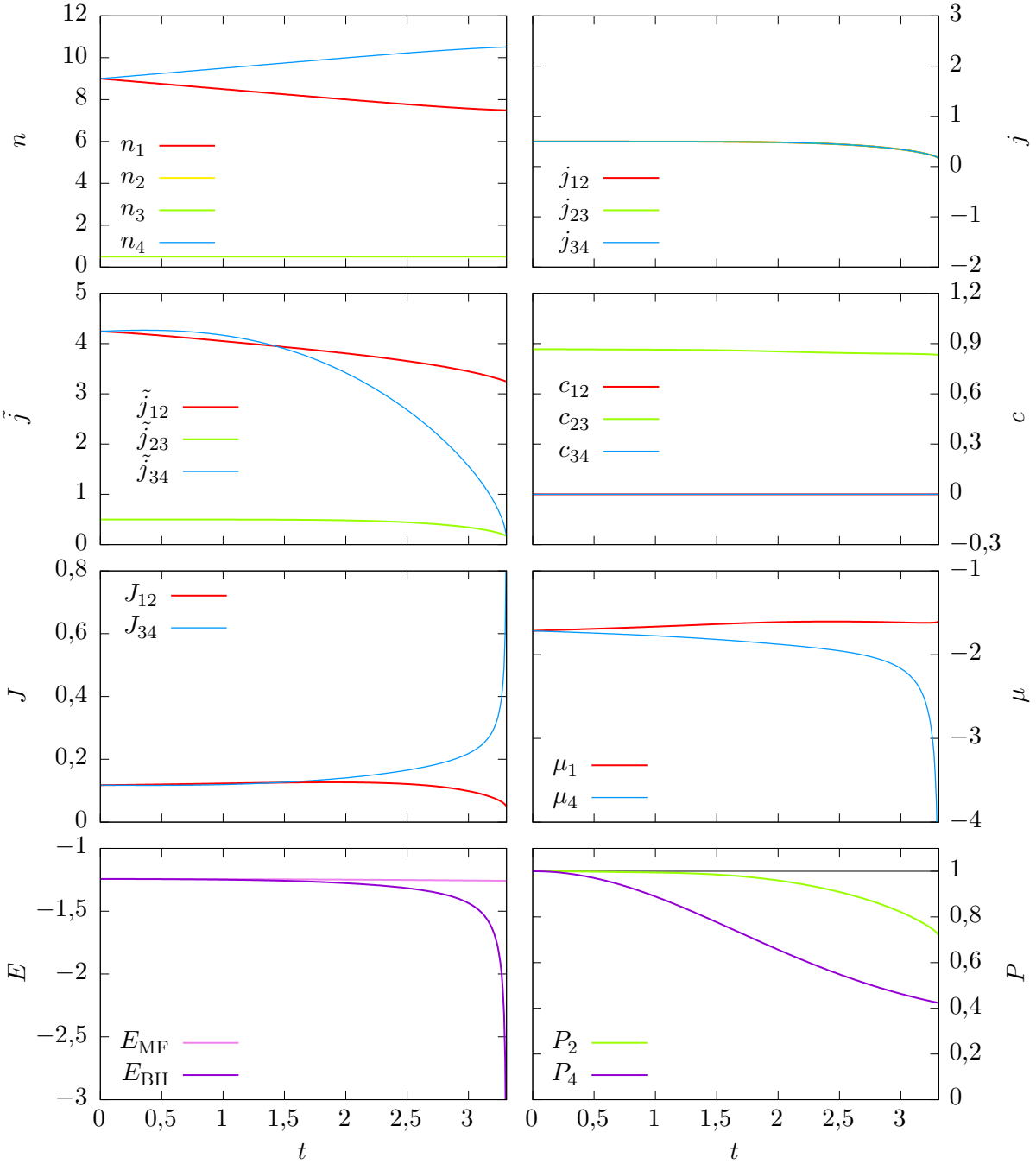



**Abbildung E.1**: Forderung nach stationären Besetzungszahlen durch die Verwendung der Bedingungen (4.56) an die Tunnelraten für die symmetrische Anfangsbesetzung aus Abbildung 5.7 mit der Tunnelrate $J_{23} = 1$ bei einer schwachen Wechselwirkung $g = 0{,}1$. Der Zusammenbruch des Systems erfolgt durch den Abfall des Stroms $\tilde{j}_{23}$ auf Null und der daraus folgenden Divergenz der Tunnelrate $J_{34}$.

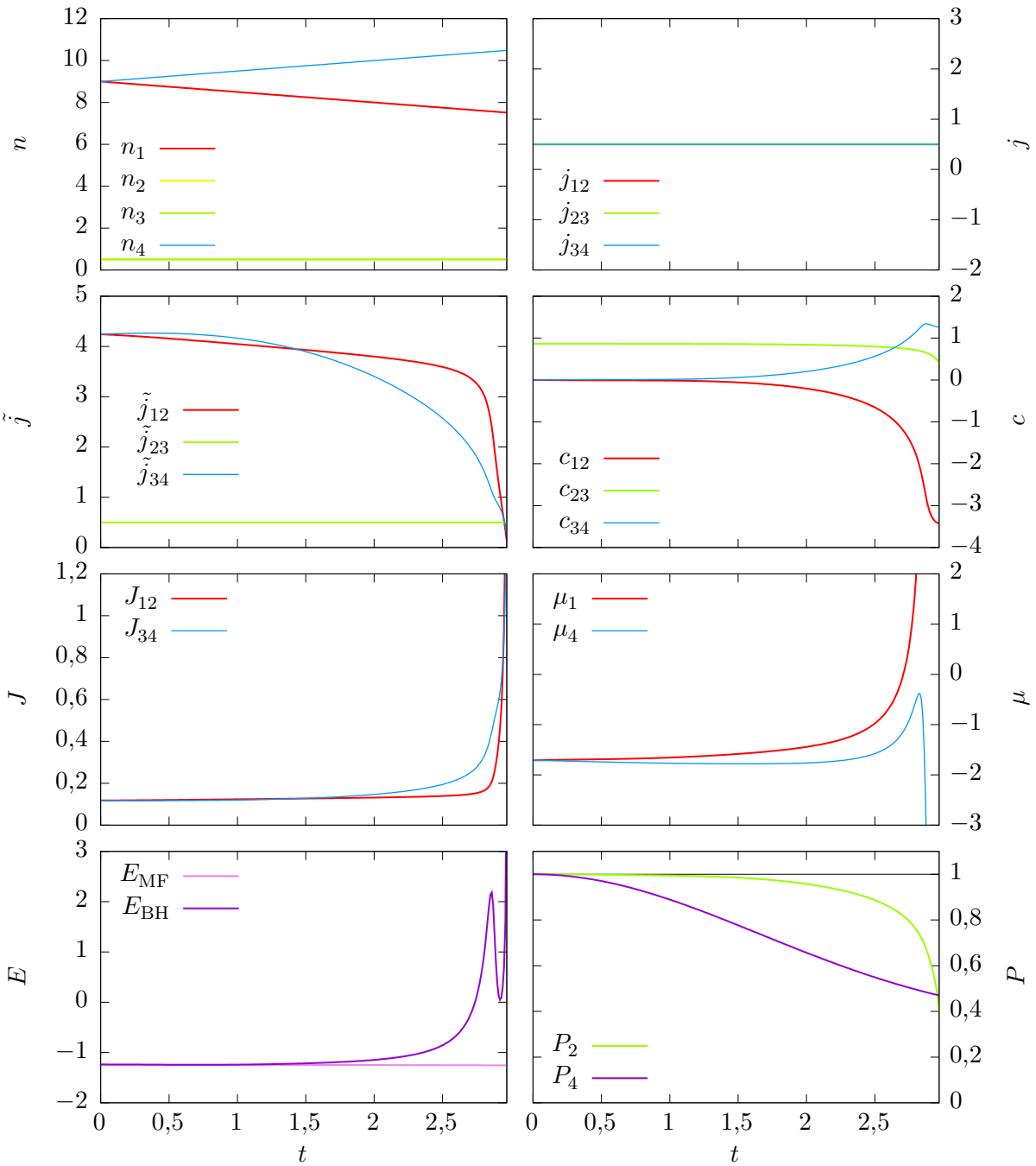



**Abbildung E.2**: Das System aus Abbildung E.1 kann ebenfalls durch die Forderung nach Erhaltung des Stroms $j_{23}$ ergänzt werden. Die Lösungen gleichen nun der Lösung aus 5.7(c), was sich insbesondere durch einen Vergleich der Kontrollparameter in Abbildung 5.8(c) und der Observablen in Abbildung 5.9(c) offenbart.

# Abkürzungsverzeichnis

| | |
|---|---|
| BBR | Bogoliubov-Backreaction |
| BEC | Bose-Einstein-Kondensat (*Bose-Einstein Condensate*) |
| BGL | *Balanced Gain and Loss* |
| BHM | Bose-Hubbard-Modell |
| CPU | zentrale Prozessoreinheit (*Central Processing Unit*) |
| GPE | Gross-Pitaevskii-Gleichung (*Gross-Pitaevskii Equation*) |
| GPU | Grafikprozessoreinheit (*Graphics Processing Unit*) |
| MF | Mean-Field |
| MQST | makroskopischer Quanteneinschluss (*Macroscopic Quantum Self-Trapping*) |
| RK | Runge-Kutta |
| RWA | Drehwellennäherung (*Rotating Wave Approximation*) |
| SPDM | Einteilchen-Dichtematrix (*Single-Particle Density Matrix*) |

# Symbolverzeichnis

| | |
|---|---|
| $c$ | Korrelationsgröße |
| $E$ | Energie |
| $g$ | makroskopische Wechselwirkung |
| $\gamma$ | Kopplungsrate |
| $J$ | Tunnelrate |
| $j$ | Stromdichte |
| $\widetilde{j}$ | reduzierte Stromdichte |
| $\mu$ | chemisches Potential |
| $N$ | Gesamtteilchenzahl im Viermodensystem |
| $N_2$ | Teilchenzahl des eingebetteten Zweimodensystems |
| $P$ | Reinheit |
| $U$ | Kontaktwechselwirkung |
| $\sigma^{(n)}$ | $n$-Teilchendichtematrix |

# Literaturverzeichnis


[1] E. Noether. Invarianten beliebiger Differentialausdrücke. *Gött. Nachr., Math. Phys. Klasse* Seiten 37–44 (1918).

[2] E. Noether. Invariante Variationsprobleme. *Gött. Nachr., Math. Phys. Klasse* Seiten 235–257 (1918).

[3] C. W. Misner, K. S. Thorne und J. A. Wheeler. *Gravitation.* W. H. Freeman (1973).

[4] M. Kaku. *Quantum Field Theory: A Modern Introduction.* Oxford University Press (1993).

[5] P. W. Higgs. Broken Symmetries and the Masses of Gauge Bosons. *Phys. Rev. Lett.* 13, 508–509 (1964).

[6] F. Englert und R. Brout. Broken Symmetry and the Mass of Gauge Vector Mesons. *Phys. Rev. Lett.* 13, 321–323 (1964).

[7] G. S. Guralnik, C. R. Hagen und T. W. B. Kibble. Global Conservation Laws and Massless Particles. *Phys. Rev. Lett.* 13, 585–587 (1964).

[8] J. Schwinger. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev.* 82, 914–927 (1951).

[9] J. S. Bell. Time Reversal in Field Theory. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 231, 479–495 (1955).

[10] W. Pauli. *Niels Bohr and the Development of Physics: Essays Dedicated to Niels Bohr on the Occasion of His Seventieth Birthday.* McGraw-Hill (1955).

[11] G. Lüders. Proof of the TCP Theorem. *Ann. Phys.* 2, 1–15 (1957).

[12] F. G. Scholtz, H. B. Geyer und F. J. W. Hahne. Quasi-Hermitian operators in quantum mechanics and the variational principle. *Annals of Physics* 213, 74–101 (1992).

[13] C. M. Bender und S. Boettcher. Real Spectra in Non-Hermititan Hamiltonians Having $\mathcal{PT}$ Symmetry. *Phys. Rev. Lett.* 80, 5243–5246 (1998).

[14] C. M. Bender. Making Sense of Non-Hermititan Hamiltonians. *Rep. Prog. Phys.* 70 (2007).

[15] A. Mostafazadeh. Pseudo-Hermiticity versus $PT$ symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian. *J. Math. Phys.* 43, 205–214 (2002).

[16] C. M. Bender, D. C. Brody und H. F. Jones. Complex Extension of Quantum Mechanics. *Phys. Rev. Lett.* 89, 270401 (2002).

[17] A. Mostafazadeh. Pseudo-Hermiticity versus $PT$-symmetry. II. A complete characterization of non-Hermitian Hamiltonians with a real spectrum. *J. Math. Phys.* 43, 2814–2816 (2002).

[18] A. Mostafazadeh. Pseudo-Hermiticity versus $PT$-symmetry III: Equivalence of pseudo-Hermiticity and the presence of antilinear symmetries. *J. Math. Phys.* 43, 3944–3951 (2002).

[19] A. Mostafazadeh. Exact $PT$-symmetry is equivalent to Hermiticity. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 36, 7081–7091 (2003).

[20] H. B. Geyer, F. G. Scholtz und K. G. Zloshchastiev. *Description of open quantum systems in non-Hermitian quantum mechanics*, Seiten 250–252 (2008).

[21] N. Moeseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Oxford University Press (2011).

[22] A. Guo, G. J. Salamo, D. Duchesne, R. Morandotti, M. Volatier-Ravat, V. Aimez, G. A. Siviloglou und D. N. Christodoulides. Observation of $\mathcal{PT}$-Symmetry Breaking in Complex Optical Potentials. *Phys. Rev. Lett.* 103, 093902 (2009).

[23] C. E. Rüter, K. G. Makris, R. El-Ganainy, D. M. Christodoulides, M. Segev und D Kip. Observation of parity-time symmetry in optics. *Nat. Phys.* 6, 192 (2010).

[24] S. Bittner, B. Dietz, U. Günther, H. L. Harney, M. Miski-Oglu, A. Richter und F. Schäfer. $\mathcal{PT}$ Symmetry and Spontaneous Symmetry Breaking in a Microwave Billiard. *Phys. Rev. Lett.* 108, 024101 (2012).

[25] J. Schindler, A. Li, M. C. Zheng, F. M. Ellis und T. Kottos. Experimental study of active $LRC$ circuits with $\mathcal{PT}$ symmetries. *Phys. Rev. A* 84, 040101 (2011).

[26] S. Klaiman, U. Günther und N. Moiseyev. Visualization of Branch Points in $\mathcal{PT}$-Symmetric Waveguides. *Phys. Rev. Lett.* 101, 080402 (2008).

[27] Y. Shin, G. B. Jo, M. Saba, T. A. Pasquini, W. Ketterle und D. E. Pritchard. Optical Weak Link between Two Spatially Separated Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 95, 170402 (2005).

[28] R. Gati, M. Albiez, J. Fölling, B. Hemmerling und M. K. Oberthaler. Realization

of a single Josephson junction for Bose–Einstein condensates. *Appl. Phys. B* 82, 207–210 (2006).

[29] E. P. Gross. Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems. *Nuovo Cimento* 20, 454 (1961).

[30] L. P. Pitaevskii. Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas. *Sov. Phys. JETP* 13, 451 (1961).

[31] E. M. Graefe, H. J. Korsch und A. E. Niederle. Mean-Field Dynamics of a Non-Hermitian Bose-Hubbard Dimer. *Phys. Rev. Lett.* 101, 150408 (2008).

[32] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, G. Wunner, R. Eichler und J. Main. A Bose-Einstein condensate in a $\mathcal{PT}$ symmetric double well. *Fortschr. Phys.* 61, 124–139 (2013).

[33] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. Eigenvalue structure of a Bose-Einstein condensate in a $\mathcal{PT}$-symmetric double well. *J. Phys. A* 46, 375301 (2013).

[34] D. Haag, D. Dast, A. Löhle, H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. Nonlinear quantum dynamics in a $\mathcal{PT}$-symmetric double well. *Phys. Rev. A* 89, 023601 (2014).

[35] D. Dizdarevic, D. Dast, D. Haag, J. Main, H. Cartarius und G. Wunner. Cusp bifurcation in the eigenvalue spectrum of $\mathcal{PT}$-symmetric Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 91, 033636 (2015).

[36] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, G. Wunner, R. Eichler und J. Main. *Description of Bose-Einstein Condensates in $\mathcal{PT}$-Symmetric Double Wells*, Seiten 129–144. Springer International Publishing (2015).

[37] E. M. Graefe. Stationary states of a PT symmetric two-mode Bose–Einstein condensate. *J. Phys. A* 45, 444015 (2012).

[38] F Trimborn, D Witthaut und S Wimberger. Mean-field dynamics of a two-mode Bose–Einstein condensate subject to noise and dissipation. *J. Phys. B* 41, 171001 (2008).

[39] D. Witthaut, F. Trimborn, H. Hennig, G. Kordas, T. Geisel und S. Wimberger. Beyond mean-field dynamics in open Bose-Hubbard chains. *Phys. Rev. A* 83, 063608 (2011).

[40] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius und G. Wunner. Quantum master equation with balanced gain and loss. *Phys. Rev. A* 90, 052120 (2014).

[41] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. Bose-Einstein condensates

with balanced gain and loss beyond mean-field theory. *Phys. Rev. A* 94, 053601 (2016).

[42] M. Kreibich, J. Main, H. Cartarius und G. Wunner. Hermitian four-well potential as a realization of a $\mathcal{PT}$-symmetric system. *Phys. Rev. A* 87, 051601 (2013).

[43] F. Single, H. Cartarius, G. Wunner und J. Main. Coupling approach for the realization of a $\mathcal{PT}$-symmetric potential for a Bose-Einstein condensate in a double well. *Phys. Rev. A* 90, 042123 (2014).

[44] M. Kreibich, J. Main, H. Cartarius und G. Wunner. Realizing $\mathcal{PT}$-symmetric non-Hermiticity with ultracold atoms and Hermitian multiwell potentials. *Phys. Rev. A* 90, 033630 (2014).

[45] R. Gutöhrlein, J. Schnabel, I. Iskandarov, H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. Realizing $\mathcal{PT}$-symmetric BEC subsystems in closed Hermitian systems. *J. Phys. A* 48, 335302 (2015).

[46] M. Kreibich, J. Main, H. Cartarius und G. Wunner. Tilted optical lattices with defects as realizations of $\mathcal{PT}$ symmetry in Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 93, 023624 (2016).

[47] E. M. Graefe, H. H. Korsch und A. E. Niederle. Quantum-classical correspondence for a non-Hermitian Bose-Hubbard dimer. *Phys. Rev. A* 82, 013629 (2010).

[48] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1924, 261–267 (1924).

[49] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases II. *Sitzungsberichte der preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1925, 3–14 (1925).

[50] S. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik A* 26, 178–181 (1924).

[51] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science* 269, 198–201 (1995).

[52] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett und R. G. Hulet. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions. *Phys. Rev. Lett.* 75, 1687–1690 (1995).

[53] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969–3973 (1995).

[54] O. Penrose. CXXXVI. On the quantum mechanics of helium II. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 42, 1373–1377 (1951).

[55] L. D. Landau und E. M. Lifshitz. *Statisticheskaya Fizika.* Fizmatgiz, Moscow (1951).

[56] O. Penrose und L. Onsager. Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium. *Phys. Rev.* 104, 576–584 (1956).

[57] C. N. Yang. Concept of Off-Diagonal Long-Range Order and the Quantum Phases of Liquid He and of Superconductors. *Rev. Mod. Phys.* 34, 694–704 (1962).

[58] P. Nozières und D. Saint James. Particle vs. pair condensation in attractive Bose liquids. *J. Phys. France* 43, 1133–1148 (1982).

[59] O. E. Alon, A. I. Streltsov und L. S. Cederbaum. Fragmentation of Bose–Einstein condensates in multi-well three-dimensional traps. *Physics Letters A* 347, 88–94 (2005).

[60] E. J. Mueller, T.-L. Ho, M. Ueda und G. Baym. Fragmentation of Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 74, 033612 (2006).

[61] C. J. Pethick und H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases.* Cambridge University Press (2008).

[62] J. Rogel-Salazar. The Gross-Pitaevskii Equation and Bose-Einstein condensates. *Eur. J. Phys.* 34, 247 (2013).

[63] L. P. Pitaevskii und S. Stringari. *Bose-Einstein Condensation.* International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press (2003).

[64] E. P. Wigner. *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren.* Wissenschaft (Braunschweig). J. W. Edwards (1931).

[65] E. Wigner. Über die Operation der Zeitumkehr in der Quantenmechanik. *Gött. Nachr. (Math. Naturw. Klasse)* 31, 546–559 (1932).

[66] R. P. Feynman und S. Weinberg. *Elementary Particles and the Laws of Physics: The 1986 Dirac Memorial Lectures.* Cambridge University Press (1987).

[67] E. Fabri. Time reversal and complex numbers in quantum theory. *Nuovo Cimento* 13, 326–343 (1959).

[68] M. Kreibich. *Realizations of $\mathcal{PT}$-symmetric Bose-Einstein condensates with time-dependent Hermitian potentials.* Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2015).

[69] H. A. Gersch und G. C. Knollman. Quantum Cell Model for Bosons. *Phys. Rev.* 129, 959–967 (1963).

[70] J. Hubbard. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. *Proc. R. Soc. Lond. A* 276, 238–257 (1963).

[71] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein und D. S. Fisher. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Phys. Rev. B* 40, 546–570 (1989).

[72] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner und P. Zoller. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 81, 3108–3111 (1998).

[73] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hansch und I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature* 415, 39–44 (2002).

[74] W. Hofstetter, J. I. Cirac, P. Zoller, E. Demler und M. D. Lukin. High-Temperature Superfluidity of Fermionic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* 89, 220407 (2002).

[75] W. V. Liu, F. Wilczek und P. Zoller. Spin-dependent Hubbard model and a quantum phase transition in cold atoms. *Phys. Rev. A* 70, 033603 (2004).

[76] V. S. Letokhov. Narrowing of the Doppler Width in a Standing Wave. *JETP Lett.* 7, 272 (1968).

[77] S. Chu. Nobel Lecture: The manipulation of neutral particles. *Rev. Mod. Phys.* 70, 685–706 (1998).

[78] C. N. Cohen-Tannoudji. Nobel Lecture: Manipulating atoms with photons. *Rev. Mod. Phys.* 70, 707–719 (1998).

[79] W. D. Phillips. Nobel Lecture: Laser cooling and trapping of neutral atoms. *Rev. Mod. Phys.* 70, 721–741 (1998).

[80] O. Morsch und M. Oberthaler. Dynamics of Bose-Einstein condensates in optical lattices. *Rev. Mod. Phys.* 78, 179–215 (2006).

[81] E. T. Jaynes und F. W. Cummings. Comparison of quantum and semiclassical radiation theories with application to the beam maser. *Proc. IEEE* 51, 89–109 (1963).

[82] M. Orszag. *Quantum Optics: Including Noise Reduction, Trapped Ions, Quantum Trajectories, and Decoherence.* Springer International Publishing (2016).

[83] U. Masahito. *Fundamentals and new frontiers of Bose-Einstein condensation.* World Scientific, Singapore (2010).

[84] H.J. Metcalf und P. van der Straten. *Laser Cooling and Trapping.* Graduate Texts in Contemporary Physics. Springer New York (2001).

[85] D. Jaksch und P. Zoller. The cold atom Hubbard toolbox. *Ann. Phys.* 315, 52–79 (2005). Special Issue.

[86] Immanuel Bloch, Jean Dalibard und Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.* 80, 885–964 (2008).

[87] S. Peil, J. V. Porto, B. Laburthe Tolra, J. M. Obrecht, B. E. King, M. Subbotin, S. L. Rolston und W. D. Phillips. Patterned loading of a Bose-Einstein condensate into an optical lattice. *Phys. Rev. A* 67, 051603 (2003).

[88] Z. Hadzibabic, S. Stock, B. Battelier, V. Bretin und J. Dalibard. Interference of an Array of Independent Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 93, 180403 (2004).

[89] K. Alpin. *Massively parallel computations of the Bose-Hubbard model with time-dependent potentials.* Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2016).

[90] P. J. Cameron. *Combinatorics: Topics, Techniques, Algorithms.* Cambridge University Press (1994).

[91] J. M. Zhang und R. X. Dong. Exact diagonalization: the Bose–Hubbard model as an example. *European Journal of Physics* 31, 591 (2010).

[92] I. Tikhonenkov, J. R. Anglin und A. Vardi. Quantum dynamics of Bose-Hubbard Hamiltonians beyond the Hartree-Fock-Bogoliubov approximation: The Bogoliubov back-reaction approximation. *Phys. Rev. A* 75, 013613 (2007).

[93] P. Pisarski, R. M. Jones und R. J. Gooding. Application of a multisite mean-field theory to the disordered Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. A* 83, 053608 (2011).

[94] E. J. Heller. Frozen Gaussians: A very simple semiclassical approximation. *J. Chem. Phys.* 75, 2923 (1981).

[95] J. Yvon. *La théorie statistique des fluides et l'équation d'état.* Actualités scientifiques et industrielles. Hermann & cie (1935).

[96] N. N. Bogoliubov. Kinetic Equations. *J. Phys. USSR* 10, 265–274 (1946).

[97] M. Born und H. S. Green. A General Kinetic Theory of Liquids. I. The Molecular Distribution Functions. *Proc. R. Soc. Lond. A* 188, 10–18 (1946).

[98] J. G. Kirkwood. The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes I. General Theory. *The Journal of Chemical Physics* 14, 180–201 (1946).

[99] J. G. Kirkwood. The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes II. Transport in Gases. *The Journal of Chemical Physics* 15, 72–76 (1947).

[100] A. Vardi und J. R. Anglin. Bose-Einstein Condensates beyond Mean Field Theory: Quantum Backreaction as Decoherence. *Phys. Rev. Lett.* 86, 568–571 (2001).

[101] J. R. Anglin und A. Vardi. Dynamics of a two-mode Bose-Einstein condensate beyond mean-field theory. *Phys. Rev. A* 64, 013605 (2001).

[102] T. Mielich. *Bogoliubov-Backreaction-Methode für Bose-Hubbard-Ketten.* Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2016).

[103] E. M. Graefe und C. Liverani. Mean-field approximation for a Bose–Hubbard dimer with complex interaction strength. *J. Phys. A* 46, 455201 (2013).

[104] D. Witthaut, F. Trimborn und S. Wimberger. Dissipation Induced Coherence of a Two-Mode Bose-Einstein Condensate. *Phys. Rev. Lett.* 101, 200402 (2008).

[105] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius und G. Wunner. Purity oscillations in Bose-Einstein condensates with balanced gain and loss. *Phys. Rev. A* 93, 033617 (2016).

[106] H. P. Breuer und F. Petruccione. *The Theory of Open Quantum Systems.* Oxford University Press (2007).

[107] K. Rapedius. Closed system approach to open systems: tunnelling decay of interacting cold bosons in an optical lattice. *J. Phys. B* 46, 125301 (2013).

[108] F. Dangel. *Mikroskopische Beschreibung eines Einkoppelprozesses für $\mathcal{PT}$-symmetrische Bose-Einstein-Kondensate.* Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2015).

[109] H. Feshbach. Unified theory of nuclear reactions. *Ann. Phys.* 5, 357–390 (1958).

[110] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne und E. Tiesinga. Feshbach resonances in ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.* 82, 1225–1286 (2010).

[111] J. Reiff. *Beschreibung $\mathcal{PT}$-symmetrischer Bose-Einstein-Kondensate mit einem Vier-Mulden-Potential und der Bogoliubov-Backreaction-Methode.* Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2016).

[112] J. Ruostekoski und D. F. Walls. Bose-Einstein condensate in a double-well potential as an open quantum system. *Phys. Rev. A* 58, R50–R53 (1998).

[113] J. Sanders und E. Kandrot. *CUDA by Example: An Introduction to General-purpose GPU Programming.* Addison-Wesley (2011).

[114] J. Cheng, M. Grossman und T. McKercher. *Professional CUDA C Programming.* EBL-Schweitzer. Wiley (2014).

[115] CUDA Toolkit Documentation. `http://docs.nvidia.com/cuda/`.

[116] E. Fehlberg. New High-Order Runge-Kutta Formulas with an Arbitrarily Small Truncation Error. *Z. angew. Math. Mech.* 46, 1–16 (1966).

[117] E. Fehlberg. Low order Runge-Kutta formulas with step control for heat transfer problems. *NASA Techn. Rep.* 315 (1969).

[118] J. R. Dormand und P. J. Prince. 10.1016/0771-050X(80)90013-3. *J. Comput. Appl. Math.* 6, 19–26 (1980).

[119] L. F. Shampine. Some practical Runge-Kutta formulas. *Math. Comp.* 46, 135–150 (1986).

[120] W. H. Press. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing.* Cambridge University Press (2007).

[121] R. W. Brankin, I. Gladwell und L. F. Shampine. *RKSUITE: A Suite of Explicit Runge-Kutta Codes*, Seiten 41–53. WORLD SCIENTIFIC (1993).

[122] J. R. Cash und A. H. Karp. A Variable Order Runge-Kutta Method for Initial Value Problems with Rapidly Varying Right-hand Sides. *ACM Trans. Math. Softw.* 16, 201–222 (1990).

[123] Juha Javanainen. Oscillatory exchange of atoms between traps containing Bose condensates. *Phys. Rev. Lett.* 57, 3164–3166 (1986).

[124] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni und S. R. Shenoy. Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates: Josephson effects, $\pi$ oscillations, and macroscopic quantum self-trapping. *Phys. Rev. A* 59, 620–633 (1999).

[125] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani und M. K. Oberthaler. Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a Single Bosonic Josephson Junction. *Phys. Rev. Lett.* 95, 010402 (2005).

[126] M. Abbarchi, A. Amo, V. G. Sala, D. D. Solnyshkov, H. Flayac, L. Ferrier, I. Sagnes, E. Galopin, A. Lemaître, G. Malpuech und J. Bloch. Macroscopic quantum self-trapping and Josephson oscillations of exciton polaritons. *Nat. Phys.* 9, 275–279.

[127] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi und S. R. Shenoy. Quantum Coherent Atomic Tunneling between Two Trapped Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 79, 4950–4953 (1997).

# Danksagung

Leider läßt sich eine wahrhafte Dankbarkeit mit Worten nicht ausdrücken.

Johann Wolfgang von Goethe

Es gibt viele Menschen, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben und denen ich zu tiefstem Dank verpflichtet bin. Allen voran möchte ich mich bei meinen Eltern Annemarie und Rudi bedanken, die mich immer unterstützt und an mich geglaubt haben und ohne die ich heute nicht der Mensch wäre, der ich bin. Mein großer Dank gilt natürlich auch Herrn Apl. Prof. Dr. Jörg Main, der mir nicht nur mit seinem fachlichen Wissen, den zahlreichen Ideen und Anregungen, seinem Auge fürs Detail und den interessanten Diskussion stets zur Seite gestanden hat, sondern mich auch stets an seinem schier grenzenlosen Optimismus teilhaben ließ. Ebenso möchte ich mich bei Robin Gutöhrlein bedanken, der mir oft bei programmiertechnischen Fragen geholfen hat und von dem ich sehr viel gelernt habe. Dasselbe gilt für Dennis Dast und Daniel Haag, mit denen ich viele Diskussionen geführt habe und die immer Zeit für meine Fragen und Probleme hatten. Ich bedanke mich auch bei Dr. Manuel Kreibich, der mir das Thema dieser Arbeit sozusagen vererbt hat und mich nicht nur zu Beginn auf den richtigen Weg gebracht hat, sondern aus dessen Arbeiten und Programmen ich mir auch den einen oder anderen Trick abschauen konnte. Des weiteren möchte ich mich bei Kirill Alpin bedanken, auf dessen genialer Idee die Numerik meiner Arbeit aufbaut. Ich möchte mich auch herzlich bei Sebastian Erfort, Matthias Feldmaier, Jacob Fuchs, Frank Schweiner, Lukas Oberreiter, Niklas Liebermann, Andrej Junginger und Johannes Reiff für die gute Atmosphäre im Büro und im Ferienlager bedanken, für die interessanten, witzigen, teilweise auch anregenden und hilfreichen Gespräche und sonstige Unterstützung. Außerdem gilt mein Danke auch Herrn Priv.-Doz. Dr. Holger Cartarius, der nicht nur für mich, sondern auch für viele andere seit Studienbeginn eine Ansprechperson und ein Vorbild war und ohne den ich wohl nie an dieses großartige Institut gekommen wäre. Das führt mich dazu, dass ich nicht zuletzt meinen Dank auch Herrn Prof. Dr. Wunner schulde, da ich Teil des ITP1 sein durfte. Vielen Dank auch an alle weiteren Mitarbeiter für die tolle Arbeitsatmosphäre, die interessanten und witzigen Kaffeerunden und die vielen schönen Erlebnisse in den letzten Jahren. Zuletzt möchte mich auch bei Herrn Jun.-Prof. Dr. Thomas Weiss dafür bedanken, dass er den Mitbericht zu dieser Arbeit so gewissenhaft übernommen hat.

**Erklärung**

Ich versichere,

- dass ich diese Masterarbeit selbständig verfasst habe,
- dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe,
- dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist,
- und dass das elektronische Exemplar mit den anderen Exemplaren übereinstimmt.

Stuttgart, den 2. Dezember 2016