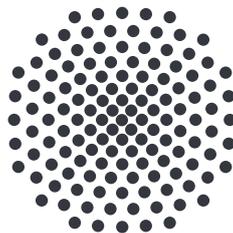


Dynamik von \mathcal{PT} -symmetrischen und symmetriebrechenden Zweimodenmodellen, eingebettet in ein zeitabhängiges Viermoden-Bose-Hubbard-System

Masterarbeit von
Tina Mathea

02. November 2017

Erster Prüfer: Apl. Prof. Dr. rer. nat. Jörg Main
Zweiter Prüfer: Prof. Dr. sc. nat. Hans Peter Büchler



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

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	5
1.1. Motivation und Einführung in das Thema	6
1.2. Aufbau der Arbeit	8
2. \mathcal{PT}-symmetrische Quantensysteme	11
2.1. Eigenschaften \mathcal{PT} -symmetrischer Systeme	11
2.2. Bose-Einstein-Kondensat in einem \mathcal{PT} -symmetrischen Doppelmuldenpotential	13
2.3. Grundlegende Idee: Einbettung in ein hermitesches Viermuldensystem . .	14
3. Mean-Field-Beschreibung des Viermuldensystems	17
3.1. 4×4 -Matrixmodell	17
3.2. Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter im Mean-Field	18
4. Vielteilchenbeschreibung	23
4.1. Bose-Hubbard-Modell mit zeitabhängigen Parametern	23
4.2. Bogoliubov-Backreaction-Näherung	25
4.2.1. Äquivalente Formulierung des Bose-Hubbard-Modells über eine BBGKY-Hierarchie	25
4.2.2. Backreaction	28
4.2.3. Symmetrien der BBR-Näherung	28
4.2.4. Bestimmung von Anfangswerten für die BBR-Methode	30
4.2.5. Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter im Vielteilchensystem . .	31
5. Dynamik \mathcal{PT}-brechender Zustände	35
5.1. Dynamik im Mean-Field	35
5.1.1. Anfangszustände	35
5.1.2. Zeitliche Änderung der Besetzungszahlen	36
5.1.3. Grenzfall verschwindender Wechselwirkung, $g = 0$	37
5.1.4. Zeitlicher Verlauf der Systemgrößen	42
5.2. Dynamik im Vielteilchensystem	43

6. Dynamik unreiner Anfangszustände	49
6.1. Herleitung der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter	49
6.1.1. Dynamik der Einteilchendichtematrix im Zweimulden- und Vier- muldensystem	50
6.1.2. Zeitabhängigkeit der Tunnelraten	51
6.1.3. Zeitabhängigkeit der Onsite-Energien	51
6.2. Grenzfall reiner Anfangszustände	54
6.3. Unreine Anfangszustände	55
6.3.1. Nebenbedingungen	56
6.3.2. Konstruktion unreiner Anfangszustände	57
6.3.3. Numerische Bestimmung unreiner Zustände	59
6.4. Diskussion der numerischen Ergebnisse	62
6.4.1. Dynamik der Elemente erster Ordnung	62
6.4.2. Dynamik der Elemente zweiter Ordnung	65
7. Zusammenfassung und Ausblick	71
A. Stationäre Lösungen des offenen Zweimuldensystems	75
A.1. Lösung der zeitunabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung	75
A.2. Bifurkationsdiagramm	78
B. Dynamik \mathcal{PT}-symmetrischer Zustände im Mean-Field	81
C. Herleitung der Näherungsformel der BBR-Methode	85
C.1. Abschneiden der BBGKY-Hierarchie nach der ersten Ordnung	86
C.2. Abschneiden der BBGKY-Hierarchie nach der zweiten Ordnung	87
D. Definition der Reinheit	89
E. Erläuterungen zur Implementierung	91
E.1. Normierung der BBR-Methode	91
E.2. Lexikographische Fock-Basis	92
E.3. Lexikographische Sprungindizes	92
Literaturverzeichnis	95
Danksagung	101

1. Einleitung

Die Energieniveaus und die Zeitentwicklung eines Quantensystems werden durch den Hamiltonoperator \hat{H} bestimmt. Der Standardformalismus der Quantenmechanik fordert die Hermitizität von \hat{H} , welche garantiert, dass die zugehörigen Energieeigenwerte reell sind und die Teilchenzahl sowie die Gesamtenergie im System erhalten sind. Obwohl die Forderung nach Hermitizität durchaus ihre Berechtigung hat, kann es dennoch sinnvoll sein, nicht-hermitesche Hamiltonoperatoren zu verwenden, was folgendes Beispiel illustriert:

Ein charakteristisches Merkmal offener Quantensysteme sind Resonanzzustände, welche quasistationäre Zustände darstellen, die nach einer gewissen Zeit zerfallen. Die Ionisation von Atomen und Molekülen in äußeren Feldern oder auch die Autoionisation von mehrfach angeregten Atomen stellen typische Beispiele für quantenmechanische Resonanzphänomene dar. Phänomenologisch lässt sich die Instabilität eines solchen Niveaus durch die sogenannte Lebensdauer τ charakterisieren. Die Norm eines solchen Zustands $|\psi\rangle$ ist dann durch $\langle\psi|\psi\rangle \propto \exp(-\tau t/\hbar)$ gegeben. Formal lässt sich dieses Zeitverhalten mithilfe einer komplexen Energie $\tilde{E} = E - i\tau/2$ erzeugen, welche nicht Eigenwert eines hermiteschen Operators sein kann.

Dies führt auf den Formalismus der nicht-hermiteschen Quantenmechanik (NHQM) [1], welche keinen Widerspruch zur herkömmlichen Quantenmechanik darstellt, sondern eine zu dieser äquivalente Beschreibung für geschlossene Systeme liefert und eine Erweiterung auf offene Systeme erlaubt [2]. NHQM lässt sich nicht nur auf Resonanzphänomene, sondern auch auf eine Vielzahl weiterer Bereiche anwenden¹ und stellt somit ein mächtiges Werkzeug zur eleganten Lösung von Problemen dar, insbesondere solcher, die sich mit hermitescher Quantenmechanik nur mit sehr großem Aufwand lösen lassen.

Es lässt sich zeigen, dass auch nicht-hermitesche Hamiltonoperatoren reelle Energieeigenwerte besitzen können, falls \hat{H} mit dem Produkt aus Paritätsoperator \mathcal{P} und Zeitumkehroperator \mathcal{T} vertauscht, d.h. wenn $[\hat{H}, \mathcal{PT}] = 0$ gilt [3, 4]. Dies führt auf die \mathcal{PT} -symmetrische Quantenmechanik, welche sich sehr gut zur effektiven Beschreibung offener Quantensysteme mit ausgeglichenem Gewinn- und Verlustverhältnis für die Wahrscheinlichkeitsdichte eignet.

¹Eine Übersicht über mögliche Anwendungen ist beispielsweise in [1] zu finden.

1.1. Motivation und Einführung in das Thema

Die \mathcal{PT} -symmetrische Quantenmechanik wurde von Bender und Boettcher 1998 eingeführt [3, 4] und motivierte Mostafazadeh zur Einführung des allgemeineren Konzepts der Pseudo-Hermitizität [5, 6]. In diesem Sinne stellt \mathcal{PT} -Symmetrie eine komplexe Erweiterung der hermiteschen Quantenmechanik dar [7]. Obwohl der Hamiltonoperator im Allgemeinen nicht hermitesch ist, können für bestimmte Parameterbereiche rein reelle Eigenwerte auftreten, d.h. mit diesem Formalismus lassen sich auch stationäre Zustände beschreiben. Dabei stellt Pseudo-Hermitizität eine notwendige Bedingung für das Auftreten reeller Eigenwerte dar, \mathcal{PT} -Symmetrie des Hamiltonoperators ist dafür weder notwendig noch hinreichend [8].

Die erste experimentelle Beobachtung bzw. Realisierung von \mathcal{PT} -Symmetrie gelang in optischen Systemen [9, 10]. Guo et al. [9] verwendeten dabei ein passives System mit optischem Verlust, Rüter et al. [10] hingegen realisierten \mathcal{PT} -Symmetrie in einem System bestehend aus zwei Wellenleitern mithilfe eines komplexen Brechungsindex, welcher zu Gewinnen und Verlusten der Feldstärke im System führt. Obwohl vielfache weitere Realisierungen in optischen Systemen gelangen [11–14], konnte \mathcal{PT} -Symmetrie in einem Quantensystem bis heute allerdings nicht erzeugt werden.

Der Formalismus der \mathcal{PT} -Symmetrie kann als effektive Beschreibung eines Quantensystems mit Gewinn und Verlust dienen. Nach einem Vorschlag von Klaيمان [11] könnte daher ein Bose-Einstein-Kondensat in einer Doppelmulde ein geeignetes System zur Realisierung von \mathcal{PT} -Symmetrie in einem Quantensystem darstellen. Kohärentes Ein- und Auskoppeln von Teilchen stellt dabei einen \mathcal{PT} -symmetrischen Zustand her [15].

Besonderes Augenmerk muss auf die Kontaktwechselwirkung zwischen den Bosonen gelegt werden [11], da sie sich auf die \mathcal{PT} -symmetrischen Eigenschaften auswirkt und selbige sogar zerstören kann. Es konnte jedoch gezeigt werden [16], dass in diesem System trotz der Nichtlinearität \mathcal{PT} -symmetrische stationäre Zustände auftreten, die zu reellen Energien gehören und man bei entsprechender Wahl der Parameter eine stabile Dynamik erhält.

Das Doppelmuldensystem wurde im Rahmen eines Mean-Field-Ansatzes mithilfe der Gross-Pitaevskii-Gleichung (GPE) schon vielfach untersucht [16–23]. Das Ein- und Auskoppeln von Teilchen wird dabei effektiv durch komplexe Potentiale beschrieben. Graefe et al. [17–19] untersuchten das System unter Vernachlässigung der Ausdehnung der Wellenfunktion in einer Zweimodennäherung, in welcher grundlegende Eigenschaften des Systems analytisch zugänglich sind. Ausgedehnte Systeme wurden mithilfe von gaußschen Variationsansätzen untersucht, außerdem wurden Stabilitätsanalysen durchgeführt [22, 24]. Dabei hat sich gezeigt, dass ein Bose-Einstein-Kondensat in einer dreidimensionalen Doppelmulde mit Gewinn und Verlust stationäre Zustände mit reellen Energieeigenwerten aufweist und es somit möglich wäre, in diesem Quantensystem \mathcal{PT} -Symmetrie zu beobachten. Innerhalb des Mean-Field-Limits wurden außerdem exzeptionelle Punkte und Bifurkationen [16, 23, 25] erfolgreich untersucht.

Obwohl die Mean-Field-Näherung bei tiefen Temperaturen und hohen Teilchenzahlen

eine gute Näherung darstellt [17, 19], handelt es sich bei dem beschriebenen System eigentlich um ein Vielteilchensystem, bei dem Quanteneffekte eine wichtige Rolle spielen, welche bei der Mean-Field-Beschreibung nicht berücksichtigt werden können. Eine mögliche Vielteilchenbeschreibung eines \mathcal{PT} -symmetrischen Bose-Einstein-Kondensats wurde von Graefe et al. [19] gegeben, wobei Gewinn und Verlust in einem nichthermiteschen Bose-Hubbard-Dimer mithilfe komplexer Onsite-Energien beschrieben wurden. Da dieses Vorgehen nicht auf die bekannte GPE führt, wurde von Dast et al. [26–29] eine Vielteilchenbeschreibung auf Grundlage einer Mastergleichung in Lindblad-Form zur Untersuchung der Vielteilcheneffekte des Systems verwendet.

Alle oben genannten Ansätze stellen effektive und nichthermitesche Theorien dar. Wird allerdings ein hermitesches, geschlossenes System gefunden, dessen Teile sich wie das offene System verhalten, so ist eine experimentelle Realisierung von \mathcal{PT} -Symmetrie in diesem Quantensystem möglich. Um ein solches abgeschlossenes System zu konstruieren, wird bei dem von Kreibich et al. [30–32] verfolgten Ansatz das Zweimodenmodell in ein größeres, hermitesches System, beispielsweise ein Viermuldensystem, eingebettet. Die zusätzlichen Mulden dienen dabei als Teilchenreservoir und sind über Tunnelprozesse aneinander gekoppelt. Ein optisches Viermuldenpotential stellt dabei eine Miniallösung dar und stellt vier reelle Parameter bereit, deren Zeitabhängigkeit so gewählt werden kann, dass sich \mathcal{PT} -Symmetrie in zwei der Mulden einstellt. Es hat sich gezeigt [30], dass sich auf diese Art und Weise im Mean-Field \mathcal{PT} -Symmetrie in den inneren beiden Mulden einstellen lässt.

Da in dem beschriebenen System Vielteilcheneffekte eine wichtige Rolle spielen, stellt sich die Frage, ob sich das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimodensystems auch im Viermulden-Vielteilchensystem einstellen lässt. Dies wurde in einem ersten Ansatz von Dizdarevic [33] untersucht, da dazu aber insbesondere Produktzustände aus Einteilchenzuständen als Anfangszustände für die Dynamik und Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter auf Grundlage des Mean-Field-Verhaltens gewählt wurden, gelang dies nicht vollständig. Mithilfe dieses Ansatzes konnte lediglich die Stationarität der Besetzungszahlen und die des Stroms erreicht werden, für die Phasenkorrelation ließ sich das gewünschte Verhalten nicht einstellen. Diese Restriktionen werden in dieser Arbeit aufgehoben.

In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, dass es möglich ist, das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände in der Einteilchendynamik des Vielteilchensystems zu realisieren, sofern die Zeitabhängigkeit der verfügbaren Kontrollparameter und die Anfangszustände entsprechend gewählt werden. Dabei wird der Ansatz der Einbettung von Kreibich et al. weiterverfolgt, der Fokus liegt dabei auf einer Vielteilchenbeschreibung mit dem Bose-Hubbard-Modell und der Bogoliubov-Backreaction-Methode.

Um das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände im Viermulden-Vielteilchensystem zu realisieren, werden, ausgehend vom offenen Zweimuldensystem in der Mean-Field-Beschreibung, Zeitabhängigkeiten für die Kontrollparameter im Vielteilchensystem formuliert. Es wird gezeigt, dass Zustände, die sich zum einen nicht als Produkt von Einteilchenzuständen darstellen lassen und zum anderen gewisse Nebenbedingungen erfül-

len, passende Anfangszustände zur Berechnung der Dynamik darstellen. Die numerische Auswertung der Bewegungsgleichungen zeigt, dass die so bestimmten Zustände in der Dynamik das gewünschte Verhalten aufweisen und sich somit auf diese Art und Weise die Einteilchendynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände im Vielteilchensystem einstellen lässt. Die hier vorgestellte Methode der Wahl der Anfangszustände bietet dabei Freiheiten für weitere Nebenbedingungen und ließe sich daher auch auf größere Systeme anwenden.

1.2. Aufbau der Arbeit

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in zwei Teile: Im **ersten Teil** wird die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Eigenzustände des offenen Zweimuldensystems im hermiteschen Viermuldensystem untersucht. Im **zweiten Teil** liegt der Fokus auf einer Vielteilchenbeschreibung des Systems. Es wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem sich das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Systems im Viermulden-Vielteilchensystem realisieren lässt.

Die Arbeit ist folgendermaßen aufgebaut: In Kapitel 2 werden die für das behandelte Thema relevanten Aspekte der \mathcal{PT} -Symmetrie zusammengefasst. Außerdem wird das dieser Arbeit zugrunde liegende Quantensystem, ein in ein Viermuldensystem eingebettetes Zweimodenmodell für Bose-Einstein-Kondensate in optischen Gittern, eingeführt.

In Kapitel 3 wird die Mean-Field-Beschreibung des Viermuldensystems auf Grundlage der sogenannten Gross-Pitaevskii-Gleichung eingeführt. Diese liefert eine gute Beschreibung des Systems bei tiefen Temperaturen und hohen Teilchenzahlen. Genau genommen stellt das System aber ein Vielteilchensystem dar, in dem Quanteneffekte eine wichtige Rolle spielen. In dieser Arbeit soll der Fokus daher auf einer Vielteilchenbeschreibung des Systems liegen, mit dem Ziel, das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems im Vielteilchensystem zu realisieren. In Kapitel 4 werden dazu Grundlagen für eine Vielteilchenbeschreibung mithilfe des Bose-Hubbard-Modells und der Bogoliubov-Backreaction-Methode gelegt.

Kapitel 5 befasst sich mit der Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände des offenen Zweimuldensystems, welche in der Mean-Field-Näherung und in der Vielteilchenbeschreibung untersucht wird. Dazu werden passende Anfangszustände bestimmt und der Grenzfall verschwindender Wechselwirkung analytisch untersucht.

In Kapitel 6 wird ein Verfahren entwickelt, mit dem sich das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände in der Einteilchendynamik des Vielteilchensystems erreichen lässt. Ausgehend vom offenen Zweimuldensystem werden dazu zunächst Gleichungen für die Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter hergeleitet, welche die Berechnung der Dynamik unreiner Anfangszustände, d.h. Zustände, die sich nicht als Produkt von Einteilchenzuständen darstellen lassen, erlauben. Es wird eine Methode vorgestellt, wie sich unreine, aber physikalische Anfangszustände finden lassen, welche zur Realisierung der

gewünschten Dynamik im Vielteilchensystem geeignet sind. Das Kapitel endet mit der Diskussion der numerisch bestimmten Dynamik dieser Zustände im Vielteilchensystem.

Kapitel 7 beinhaltet schließlich eine Zusammenfassung der vorliegenden Arbeit und einen Ausblick.

2. \mathcal{PT} -symmetrische Quantensysteme

In diesem Kapitel werden die für die vorliegende Arbeit relevanten Aspekte der \mathcal{PT} -Symmetrie zusammengefasst und das dieser Arbeit zugrunde liegende Quantensystem eingeführt.

Abschnitt 2.1 stellt dabei allgemeine Eigenschaften \mathcal{PT} -symmetrischer Quantensysteme zusammen. In Abschnitt 2.2 wird eine mögliche Realisierung eines \mathcal{PT} -symmetrischen Quantensystems, nämlich ein System bestehend aus einem Bose-Einstein-Kondensat in einer optischen Doppelmulde mit ausgeglichenem Gewinn und Verlust (*balanced gain and loss*), diskutiert. Dieses offene Quantensystem kann durch Einbettung in ein hermitesches Viermuldensystem mithilfe einer entsprechenden Zeitabhängigkeit von Kontrollparametern simuliert werden. Die grundlegende Idee dabei wird in Abschnitt 2.3 erläutert. Das in Abschnitt 2.3 dargestellte Viermuldensystem stellt die Grundlage der vorliegenden Arbeit dar und wird in einer Vielteilchenbeschreibung untersucht.

2.1. Eigenschaften \mathcal{PT} -symmetrischer Systeme

In diesem Abschnitt werden die für diese Arbeit relevanten Eigenschaften \mathcal{PT} -symmetrischer Quantensysteme zusammengefasst. Der Abschnitt ist bewusst kurz gehalten, da Eigenschaften \mathcal{PT} -symmetrischer Systeme in der Literatur bereits ausführlich diskutiert worden sind. Für eine vertiefende Diskussion sei an dieser Stelle auf [2–4] verwiesen.

Ein lineares Quantensystem wird als \mathcal{PT} -symmetrisch bezeichnet, wenn der Hamiltonoperator \hat{H} mit dem Produkt aus Paritätsoperator \mathcal{P} und Zeitumkehroperator \mathcal{T} vertauscht, d.h. es gilt

$$\left[\hat{H}, \mathcal{PT} \right] = 0. \quad (2.1)$$

Die Wirkungen des Paritätsoperators \mathcal{P} und des Zeitumkehroperators \mathcal{T} sind dabei wie folgt definiert:

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

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

Der Paritätsoperator ändert das Vorzeichen des Orts- und des Impulsoperators und stellt einen linearen Operator dar, der Zeitumkehroperator lässt den Ortsoperator invariant, ändert das Vorzeichen des Impulsoperators und bewirkt zusätzlich eine komplexe Konjugation und ist somit antilinear. Mithilfe der Gleichungen (2.2) können Aussagen über die Form des Potentials V eines \mathcal{PT} -symmetrischen Systems gemacht werden. Besteht

der Hamiltonoperator aus einem kinetischen Energieoperator und einem Potentialanteil, besitzt also die Form

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}), \quad (2.3)$$

so folgt mit Gleichung (2.2)

$$\mathcal{PT}\hat{H} = \mathcal{PT} \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{x}}) \right) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V^*(-\hat{\mathbf{x}}). \quad (2.4)$$

Um Gleichung (2.1) zu erfüllen, d.h. damit \mathcal{PT} -Symmetrie vorliegt, muss der Realteil des Potentials eine symmetrische Funktion in der Ortskoordinate sein, der Imaginärteil hingegen antisymmetrisch, d.h. es muss

$$\operatorname{Re} V(\hat{\mathbf{x}}) = \operatorname{Re} V(-\hat{\mathbf{x}}), \quad (2.5a)$$

$$\operatorname{Im} V(\hat{\mathbf{x}}) = -\operatorname{Im} V(-\hat{\mathbf{x}}) \quad (2.5b)$$

gelten. Im Folgenden soll erläutert werden, wie sich ein komplexes Potential physikalisch interpretieren lässt.

In hermiteschen Systemen ist die Gesamtwahrscheinlichkeit erhalten. In Form einer Kontinuitätsgleichung lässt sich diese Aussage darstellen als

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (2.6)$$

mit der Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t)$, der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi(\mathbf{x}, t)|^2$ und der Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ mit

$$\mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi(\mathbf{x}, t)\nabla\psi^*(\mathbf{x}, t) - \psi^*(\mathbf{x}, t)\nabla\psi(\mathbf{x}, t)). \quad (2.7)$$

Betrachtet wird nun ein nichthermitescher Hamiltonoperator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \operatorname{Re} V(\mathbf{x}) + i \operatorname{Im} V(\mathbf{x}) \quad (2.8)$$

in Ortsdarstellung. Die zugehörige Kontinuitätsgleichung lautet

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) = \frac{2}{\hbar} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \operatorname{Im} V(\mathbf{x}). \quad (2.9)$$

Für ein rein reelles Potential verschwindet die rechte Seite von Gleichung (2.9) und man erhält die Kontinuitätsgleichung (2.6). Somit ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in nichthermiteschen Systemen im Gegensatz zu hermiteschen Systemen nicht erhalten. Gleichung (2.9) erlaubt daher eine physikalische Interpretation eines komplexen Potentials: Ein positiver Imaginärteil beschreibt eine Quelle für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit, ein negativer Imaginärteil hingegen eine Senke. Folglich ist mit dem Formalismus der \mathcal{PT} -Symmetrie eine elegante Beschreibung offener Systeme möglich.

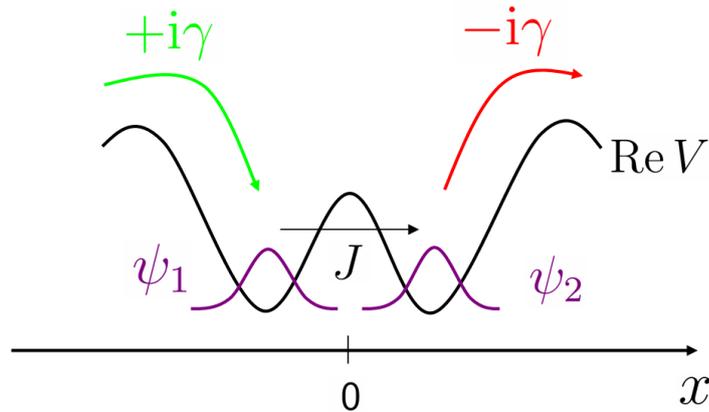


Abbildung 2.1.: Bose-Einstein-Kondensat in einem \mathcal{PT} -symmetrischen Doppelmuldenpotential (Darstellung nach [34]) als offenes Quantensystem. Teilchen werden links mit der Rate γ eingekoppelt und rechts mit derselben Rate ausgekoppelt (*balanced gain and loss*).

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass in der \mathcal{PT} -symmetrischen Quantenmechanik Hermitizität im Allgemeinen nicht gegeben ist, da die Forderung nach \mathcal{PT} -Symmetrie schwächer ist als die Forderung nach Hermitizität. Damit sind auch die Eigenschaften, die aus der Hermitizität folgen, nicht mehr gegeben. So kann beispielsweise der Hamiltonoperator komplexe Eigenwerte besitzen und die Norm eines Zustands muss im Allgemeinen nicht mehr erhalten sein, da keine unitäre Zeitentwicklung vorliegen muss.

2.2. Bose-Einstein-Kondensat in einem \mathcal{PT} -symmetrischen Doppelmuldenpotential

In optischen Systemen ist es bereits gelungen, \mathcal{PT} -Symmetrie experimentell zu realisieren [9, 10]. Ein entsprechendes Experiment zur Realisierung von \mathcal{PT} -Symmetrie in einem Quantensystem steht aber noch aus. Ein Vorschlag für ein Quantensystem, in welchem dies gelingen könnte, ist ein Bose-Einstein-Kondensat in einem optischen Doppelmuldenpotential mit ausgeglichenem Gewinn und Verlust [11]. In diesem Abschnitt wird dieses System in der Mean-Field-Beschreibung [15] eingeführt. Es liegt allen Betrachtungen in dieser Arbeit zugrunde.

Das betrachtete System (siehe Abbildung 2.1) stellt ein offenes Quantensystem dar: In die linke Mulde werden Teilchen eingekoppelt, in der rechten Mulde werden Teilchen ausgekoppelt. Der Gewinn und Verlust von Teilchen in den jeweiligen Mulden kann durch Verwendung von komplexen Potentialen modelliert werden [35]. Der Parameter γ charakterisiert dabei die Einkopplungs- bzw. Auskopplungsrate und ist eine reelle Zahl. Sie soll hier positiv angenommen werden; ein negatives Vorzeichen würde ein Vertauschen

der beiden Mulden bewirken. Um ein \mathcal{PT} -symmetrisches System zu erhalten, muss nach Gleichung (2.5) die Einkopplungsrate gleich der Auskopplungsrate sein.

Die Bosonen können durch die Barriere zwischen den beiden Mulden tunneln, was durch die Tunnelrate J beschrieben wird, welche mit der Höhe der Barriere zusammenhängt. J wird positiv und reell gewählt und um Vergleichbarkeit mit anderen Arbeiten [15, 19, 26, 27, 30] zu gewährleisten, wird $J = 1$ gesetzt.

Die Dynamik eines Bose-Einstein-Kondensats in einem Potential V kann für tiefe Temperaturen im Rahmen eines Mean-Field-Ansatzes durch eine nichtlineare Schrödingergleichung, der sogenannten Gross-Pitaevskii-Gleichung (GPE), beschrieben werden [15]:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}, t) + g|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.10)$$

Der Parameter g bezeichnet die makroskopische Wechselwirkungsstärke, wobei $g < 0$ eine anziehende Wechselwirkung und $g > 0$ eine abstoßende Wechselwirkung beschreibt, und hängt mit der s-Wellenstrelänge a und der Masse m der Teilchen zusammen über $g = 4\pi\hbar^2 a/m$.

Sind die Mulden tief genug, so kann eine Zweimodennäherung der GPE verwendet werden [15]. Es ergibt sich eine \mathcal{PT} -symmetrische Gross-Pitaevskii-Gleichung, die sich in Matrixform darstellen lässt als

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g|\psi_1|^2 + i\gamma & -J \\ -J & g|\psi_2|^2 - i\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

Der Mean-Field-Zustand des Systems (2.11) wird durch einen Vektor $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \psi_2)^T$ mit der Mean-Field-Wellenfunktion ψ_i in der Mulde i charakterisiert. Die Anzahl der Teilchen n_i in der Mulde i ist durch das Betragsquadrat $n_i = |\psi_i|^2$ gegeben.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass in Gleichung (2.11) das reduzierte Plancksche Wirkungsquantum \hbar gleich eins gesetzt wurde. Diese Konvention soll in der gesamten Arbeit beibehalten werden.

Die Lösungen der zeitunabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.11) werden in den folgenden Kapiteln für die Ermittlung von Startwerten für die Dynamikrechnungen benötigt. Sie sind in Anhang A dargestellt. Hier findet sich auch ein Bifurkationsdiagramm, welches die Lösungsstruktur aufzeigt und Bereiche \mathcal{PT} -symmetrischer Lösungen und \mathcal{PT} -brechender Lösungen trennt. Die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Lösungen wird in Kapitel 5 dieser Arbeit untersucht.

2.3. Grundlegende Idee: Einbettung in ein hermitesches Viermuldensystem

Das Zweimodenmodell (2.11) für ein Bose-Einstein-Kondensat stellt ein offenes System dar und ist nichthermitesch. Um eine experimentelle Realisierung eines \mathcal{PT} -symmetrischen Quantensystems zu ermöglichen, kann ein hermitesches System konstruiert werden,

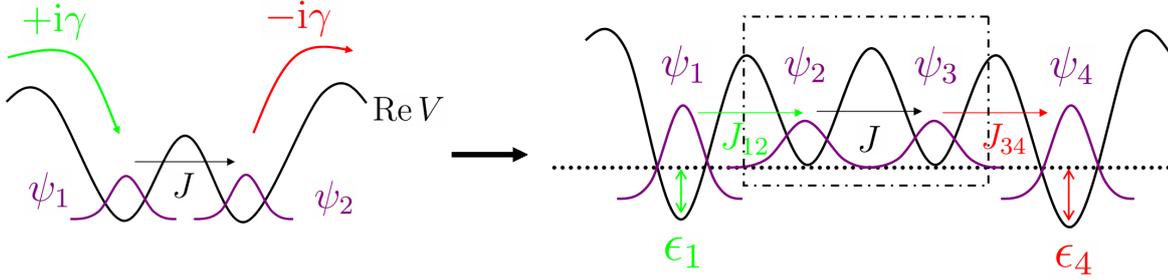


Abbildung 2.2.: Einbettung des offenen Zweimuldensystems (rechts) in ein hermitesches Viermuldensystem (links). Die vier freien, reellen Parameter J_{12} , J_{34} , ϵ_1 und ϵ_4 im Viermuldensystem sollen zeitlich so variiert werden, dass die Dynamik der inneren beiden Mulden des Viermuldensystems identisch mit der Dynamik des offenen Zweimuldensystems ist.

wobei sich ein Teil dieses hermiteschen Systems wie das offene Quantensystem verhält, welches, wie im vorherigen Abschnitt beschrieben, \mathcal{PT} -Symmetrie aufweist. Die Idee von Kreibich et al. [30–32] ist es nun, die Dynamik des offenen, nichthermiteschen Zweimuldensystems durch Einbettung in ein größeres, aber hermitesches System zu simulieren. Dies kann bereits unter Verwendung zweier zusätzlicher Mulden, die als Teilchenreservoir dienen, erreicht werden [30] (siehe Abbildung 2.2). Dazu wird das offene Zweimuldensystem in ein hermitesches Viermuldensystem eingebettet, die Dynamik des offenen Zweimuldensystems (links in Abbildung 2.2) soll dabei identisch sein mit der Dynamik der inneren Mulden des Viermuldensystems (rechts in Abbildung 2.2).

Im offenen Zweimuldensystem werden Teilchen auf der einen Seite ein-, auf der anderen Seite ausgekoppelt. Dies wird durch den positiven bzw. negativen Imaginärteil des Potentials beschrieben. Das Viermuldensystem besitzt vier freie, reelle Parameter, durch welche dieses Verhalten eingestellt werden kann, nämlich die Tunnelraten J_{12} und J_{34} und die Gitterpunktenergien (Onsite-Energien) ϵ_1 und ϵ_4 . Diese vier Kontrollparameter werden zeitlich so variiert, dass die inneren beiden Mulden des Viermuldensystems dieselbe Dynamik aufweisen wie die Mulden des offenen Zweimuldensystems.

Die Kopplung der inneren Mulden 2 und 3 (im Folgenden auch als Systemmulden oder eingebettete Mulden bezeichnet) an die äußeren Mulden 1 und 4 (im Folgenden auch Reservoirmulden) erfolgt durch Tunnelprozesse, welche durch die Tunnelraten J_{12} und J_{34} beschrieben werden. Diese führen zu einem Tunnelstrom zwischen den Mulden. Durch zeitliche Anpassung der Tunnelraten lassen sich so Ströme erzeugen, die zu \mathcal{PT} -symmetrischen Zuständen in den inneren beiden Mulden führen [30, 34]. Um \mathcal{PT} -Symmetrie in den inneren beiden Mulden zu erreichen, muss nach Gleichung (2.5) $\epsilon_2 = \epsilon_3$ gelten. Es soll im Folgenden $\epsilon_2 = \epsilon_3 = 0$ angenommen werden, d.h. die inneren beiden Mulden markieren den energetischen Nullpunkt. Die Tunnelrate J_{23} zwischen den Mulden 2 und 3 soll der Tunnelrate im offenen Zweimuldensystem entsprechen und frei

wählbar sein, d.h. es ist $J_{23} = J = 1$ nach der Konvention aus Abschnitt 2.2.

Das hier eingeführte Viermudensystem soll Gegenstand der vorliegenden Arbeit sein. Es existieren mehrere mögliche Ansätze zur Beschreibung dieses Systems: Zum einen kann das System mithilfe einer Mean-Field-Näherung beschrieben werden, bei der die Wechselwirkung zwischen den Teilchen durch ein äußeres Feld ersetzt wird, welches den Einfluss aller Teilchen auf das Verhalten des Gesamtsystems beschreibt. Dies entspricht einer Einteilchenbeschreibung, die Dynamik wird durch die Mean-Field-Wellenfunktion ψ wiedergegeben. Zum anderen, und darauf soll der Fokus in dieser Arbeit liegen, kann eine darüber hinausgehende Vielteilchenbeschreibung verwendet werden, mit welcher auch Vielteilcheneffekte berücksichtigt werden können. Ziel ist es, eine Methode zu finden, mit der das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimudensystems im Vielteilchensystem simuliert werden kann.

Im folgenden Kapitel soll nun die Mean-Field-Beschreibung des Systems eingeführt werden. Das Mean-Field-Verhalten des Viermudensystems wurde bereits in zahlreichen Arbeiten untersucht [30, 32–34, 36], weshalb hier nur die Aspekte zusammengefasst werden sollen, die für die vorliegende Arbeit relevant sind.

3. Mean-Field-Beschreibung des Viermuldensystems

In diesem Kapitel wird die Mean-Field-Beschreibung des Viermuldensystems auf Grundlage der Gross-Pitaevskii-Gleichung eingeführt. Genau genommen stellt die Beschreibung eines Bose-Einstein-Kondensats in einem Potential ein Vielteilchenproblem dar, jedoch liefert die Mean-Field-Beschreibung bei tiefen Temperaturen und großen Teilchenzahlen eine gute Näherung [17, 19].

In [30] wurde gezeigt, dass durch Vergleich der Dynamik der Mulden des offenen Zweimuldensystem mit der Dynamik der inneren beiden Mulden des Viermuldensystems Gleichungen für die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter im Mean-Field hergeleitet werden können. Werden die Kontrollparameter zeitlich entsprechend gewählt, so lässt sich in den inneren beiden Mulden \mathcal{PT} -Symmetrie realisieren.

In Abschnitt 3.1 wird das 4×4 -Matrixmodell zur Beschreibung des Viermuldensystems eingeführt und in Abschnitt 3.2 wird eine Zusammenfassung der Herleitung der Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter gegeben. Diese Gleichungen werden später in der Arbeit dazu verwendet, um zu zeigen, dass sich auch die \mathcal{PT} -brechenden Eigenzustände des Zweimodenmodells in einem hermiteschen Viermuldensystem realisieren lassen.

3.1. 4×4 -Matrixmodell

Die Gross-Pitaevskii-Gleichung für das in Abschnitt 2.3 eingeführte Viermuldensystem lässt sich in einem 4×4 -Modell zusammenfassen. Für die Dynamik des Systems im Mean-Field ergibt sich

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 |\psi_1|^2 + \epsilon_1 & -J_{12} & 0 & 0 \\ -J_{12} & g_2 |\psi_2|^2 + \epsilon_2 & -J_{23} & 0 \\ 0 & -J_{23} & g_3 |\psi_3|^2 + \epsilon_3 & -J_{34} \\ 0 & 0 & -J_{34} & g_4 |\psi_4|^2 + \epsilon_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Damit das Verhalten des offenen Zweimuldensystems (2.11) durch das Viermuldensystem simuliert werden kann, ist es, wie schon erwähnt, nötig, dass die Kontrollparameter J_{12} , J_{34} , ϵ_1 und ϵ_4 zeitabhängig sind. Die Zeitabhängigkeiten der Größen wurde in Gleichung (3.1) und wird im Folgenden der Übersichtlichkeit halber unterdrückt.

Für das Zweimuldensystem gibt die Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.11) die Dynamik wieder. Damit nachher ein Vergleich der Gleichungen (2.11) und (3.1) leichter fällt, soll

Gleichung (2.11) hier nochmals mit der Bezeichnung der Indizes im Viermuldensystem angegeben werden:

$$i\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g|\psi_2|^2 + i\gamma & -J_{23} \\ -J_{23} & g|\psi_3|^2 - i\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_3 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Damit ein \mathcal{PT} -symmetrisches System vorliegt, muss das Potential die Gleichungen (2.5) erfüllen. Für den Hamiltonoperator in Gleichung (3.1) bedeutet das, dass $\epsilon_2 = \epsilon_3 = 0$ gelten muss. Der Einfachheit halber wird im Folgenden die Annahme getroffen, dass $g_1 = g_2 = g_3 = g_4 \equiv g$.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass kein Hamiltonoperator zur separaten Beschreibung der inneren Mulden des Viermuldensystems existiert, da die Reservoirmulden durch die Tunnelprozesse, beschrieben durch die Tunnelraten J_{12} und J_{34} , an die Systemmulden koppeln. Im Folgenden soll nun die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter diskutiert werden.

3.2. Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter im Mean-Field

Ziel ist es nun, dass die inneren beiden Mulden des Viermuldensystems (3.1) dieselbe Dynamik aufweisen wie die Mulden des offenen Systems in Gleichung (3.2). Dazu werden die Parameter des optischen Viermuldenpotentials zeitlich variiert, also ist die Zeitabhängigkeit der freien Parameter J_{12} , J_{34} , ϵ_1 und ϵ_4 zu bestimmen. Der folgende Abschnitt orientiert sich an [33] und gibt eine Zusammenfassung der Herleitung der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter¹. Besonderes Augenmerk soll dabei auf die Annahmen, die in diese Herleitung eingehen, gelegt werden, da in Kapitel 6 neue Zeitabhängigkeiten formuliert werden, die auf anderen Annahmen beruhen. Die Gleichungen, die später in dieser Arbeit hergeleitet werden, erlauben es, im Vielteilchensystem mehr Nebenbedingungen zu erfüllen als die in diesem Kapitel vorgestellten Gleichungen und neben der Dynamik reiner Anfangszustände auch die Zeitentwicklung unreiner Anfangszustände im System zu bestimmen.

Beziehungen zwischen den Phasen Die Mean-Field-Wellenfunktion in Mulde i lässt sich eindeutig durch die Teilchenzahl n_i und die zugehörige Phase φ_i festlegen und lässt sich darstellen als

$$\psi_i(t) = \sqrt{n_i(t)} e^{i\varphi_i(t)}. \quad (3.3)$$

Wird nun die Dynamik der Wellenfunktionen der inneren beiden Mulden des Viermuldensystems mit derjenigen des offenen Zweimuldensystems verglichen, d.h. wird gefordert,

¹In [33] wurde für den Freiheitsgrad, der in [30] auftritt, eine spezielle Wahl getroffen. Das Vorhandensein eines Freiheitsgrades wird in Kapitel 6 nochmals aufgegriffen und diskutiert.

dass

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_{2,M=2} \stackrel{!}{=} i \frac{\partial}{\partial t} \psi_{2,M=4} \quad (3.4a)$$

und

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_{3,M=2} \stackrel{!}{=} i \frac{\partial}{\partial t} \psi_{3,M=4} \quad (3.4b)$$

gelten sollen, so folgen mit Gleichung (3.3) die Relationen

$$\varphi_1 - \varphi_2 = -\frac{\pi}{2} \quad (3.5a)$$

und

$$\varphi_4 - \varphi_3 = \frac{\pi}{2}. \quad (3.5b)$$

Dies bedeutet, dass die Phasendifferenzen zwischen den Mulden 1 und 2 bzw. 3 und 4 zeitlich konstant den Wert $-\pi/2$ bzw. $\pi/2$ besitzen müssen, d.h. es existiert eine feste Phasenbeziehung.

Zeitabhängigkeit der Tunnelraten Nun sollen zuerst die Zeitabhängigkeiten der Tunnelraten bestimmt werden. Dazu wird gefordert, dass sich die zeitliche Änderung der Besetzungszahlen n_2 und n_3 der inneren Mulden im offenen System und im hermiteschen System gleich verhalten sollen, d.h. es soll gelten

$$i \frac{\partial}{\partial t} n_{2,M=2} \stackrel{!}{=} i \frac{\partial}{\partial t} n_{2,M=4}, \quad (3.6a)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} n_{3,M=2} \stackrel{!}{=} i \frac{\partial}{\partial t} n_{3,M=4}. \quad (3.6b)$$

Aus den Forderungen (3.6) folgen unter Verwendung der Gleichungen (3.2) und (3.1) direkt Ausdrücke für die Zeitabhängigkeiten der Tunnelraten. Sie lauten

$$J_{12} = \frac{2\gamma n_2}{\tilde{j}_{12}} \quad (3.7a)$$

und

$$J_{34} = \frac{2\gamma n_3}{\tilde{j}_{34}}, \quad (3.7b)$$

wobei die reduzierte Stromdichte

$$\tilde{j}_{kl} = i(\psi_l^* \psi_k - \psi_k^* \psi_l) \quad (3.8)$$

eingeführt wurde. Es wird dabei die von Kreibich [34] eingeführte Notation verwendet. In dieser Notation ist der Strom j_{kl} von Mulde k zu Mulde l gegeben durch

$$j_{kl} = iJ_{kl}(\psi_l \psi_k^* - \psi_k^* \psi_l) = \tilde{j}_{kl} J_{kl} = -j_{lk}. \quad (3.9)$$

Die Definition (3.8) wird später zur Beschreibung des Vielteilchensystems verallgemeinert.

Zeitabhängigkeit der Onsite-Energien Ebenfalls in Anlehnung an [34] sollen Korrelationen zwischen den Mulden k und l mit c_{kl} bezeichnet werden und sind gegeben durch

$$c_{kl} = \psi_k^* \psi_l + \psi_k \psi_l^*. \quad (3.10)$$

Wertet man die Korrelationen (3.10) für die Mean-Field-Wellenfunktion (3.3) aus, so erhält man für die Korrelationen zwischen jeweils einer Reservoiremulde und einer inneren Mulde unter Verwendung von Gleichung (3.5)

$$c_{12} = 2\sqrt{n_1 n_2} \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \stackrel{(3.5)}{=} 0 \quad (3.11a)$$

und

$$c_{34} = 2\sqrt{n_3 n_4} \cos(\varphi_3 - \varphi_4) \stackrel{(3.5)}{=} 0, \quad (3.11b)$$

d.h. die Korrelationen c_{12} und c_{34} müssen verschwinden, wenn für die Phasendifferenzen die Gleichungen (3.5) erfüllt sein sollen. Dass die Gleichungen (3.11) erfüllt sind, kann durch eine entsprechende Wahl des Anfangszustands sichergestellt werden, d.h. der Anfangszustand muss so gewählt werden, dass $c_{12}(0) = 0$ und $c_{34}(0) = 0$ gelten. Nun sollen für die Phasendifferenzen für alle Zeiten t die Gleichungen (3.5) gelten und somit die Relationen (3.11) für alle t erfüllt sein, d.h. es muss gefordert werden, dass die Ableitungen der Gleichungen (3.11) nach der Zeit ebenfalls verschwinden:

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{12}(t) \stackrel{!}{=} 0, \quad (3.12a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{34}(t) \stackrel{!}{=} 0. \quad (3.12b)$$

Einsetzen von Gleichung (3.1) führt schließlich auf die Ausdrücke

$$\epsilon_1 = -J_{23} \frac{\tilde{j}_{13}}{\tilde{j}_{12}} - (g_1 n_1 - g_2 n_2) \quad (3.13a)$$

und

$$\epsilon_4 = -J_{23} \frac{\tilde{j}_{24}}{\tilde{j}_{34}} - (g_4 n_4 - g_3 n_3) \quad (3.13b)$$

für die Onsite-Energien. Es soll angemerkt werden, dass die Gleichungen (3.7) und (3.13) nur im Rahmen der Mean-Field-Beschreibung gelten. In Abschnitt 4.2.5 werden entsprechende Ausdrücke für das Vielteilchensystem angegeben.

Anfangsbedingungen Die Gleichungen (3.2) sowie (3.1) stellen partielle Differentialgleichungen dar, für deren Lösung Anfangsbedingungen benötigt werden. Um \mathcal{PT} -Symmetrie in der Dynamik zu erreichen, muss schon der Anfangszustand \mathcal{PT} -symmetrisch

sein. Im Viermuldensystem lassen sich $\frac{\partial}{\partial t}c_{23}$ und $\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{23}$ mithilfe von Gleichung (3.1) schreiben als

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{23} = (2J_{23} + gc_{23})(n_2 - n_3) \quad (3.14a)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial t}c_{23} = -g\tilde{j}_{23}(n_2 - n_3). \quad (3.14b)$$

Die \mathcal{PT} -symmetrische Lösung des offenen Zweimuldenmodells liegt dann vor, wenn $n_2 = n_3 = n$ gilt (siehe Anhang A), d.h. mit den Gleichungen (3.14) folgen $\frac{\partial}{\partial t}\tilde{j}_{23} = 0$ und $\frac{\partial}{\partial t}c_{23} = 0$. Ist zur Anfangszeit $t = 0$ also Gleichbesetzung und \mathcal{PT} -Symmetrie gegeben, so ändern sich die Größen n_2 , n_3 , \tilde{j}_{23} und c_{23} auch in der Dynamik des Viermuldensystems nicht. Die Anfangszustände in den inneren beiden Mulden sind dann durch die stationären Lösungen (A.12) des Zweimuldensystems gegeben und der Anfangszustand $\boldsymbol{\psi}(0)$ zur Berechnung der Dynamik des Viermuldensystems lautet unter Verwendung von Gleichung (3.5)

$$\boldsymbol{\psi}(0) = \begin{pmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_2(0) \\ \psi_3(0) \\ \psi_4(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{n_1(0)}e^{i(\varphi_{s,g}(0) - \frac{\pi}{2})} \\ \sqrt{n(0)}e^{i\varphi_{s,g}(0)} \\ \sqrt{n(0)}e^{-i\varphi_{s,g}(0)} \\ \sqrt{n_4(0)}e^{-i(\varphi_{s,g}(0) - \frac{\pi}{2})} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

mit

$$\varphi_{s,g}(0) = -\frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{\gamma}{J}\right), \quad (3.16)$$

wobei der Index s die symmetrische Lösung bezeichnet und der Index g den Grundzustand. Die Anfangsbesetzungen $n_1(0)$ und $n_4(0)$ der Reservoirmulden lassen sich dabei frei wählen, ebenso wie die Besetzung $n(0)$ in den inneren beiden Mulden.

Es lässt sich also festhalten, dass im Mean-Field mithilfe der Zeitabhängigkeiten (3.7) und (3.13) der Kontrollparameter und des Anfangszustands (3.15) \mathcal{PT} -Symmetrie in den inneren beiden Mulden des Viermuldensystems realisiert werden kann. Die Mean-Field-Dynamik des \mathcal{PT} -symmetrischen Zustands (3.15) ist in Anhang B dargestellt, außerdem werden an dieser Stelle auch analytische Lösungen für die Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter gegeben.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass die Eigenzustände (A.12) auf die Anzahl der Teilchen im System normiert sind, wohingegen in Gleichung (3.15) direkt die Anfangsbesetzung $n(0)$ eingeht. Die Normierung hier nicht zu verwenden hat später bei der Betrachtung des Vielteilchensystems den Vorteil, dass die Teilchenzahl in den einzelnen Mulden direkt festgelegt werden kann. In den numerischen Ergebnissen in Kapitel 5 wird im Nachhinein aber wieder auf die Teilchenzahl in den inneren beiden Mulden normiert, sodass sich die Resultate leicht mit Ergebnissen anderer Arbeiten vergleichen lassen.

4. Vielteilchenbeschreibung

Die in Kapitel 3 eingeführte Mean-Field-Beschreibung des Viermuldensystems berücksichtigt keine Vielteilcheneffekte. Das System stellt aber ein Vielteilchensystem dar, in dem Vielteilcheneffekte eine Rolle spielen. Folglich ist eine Vielteilchenbeschreibung zur Erfassung aller auftretenden Effekte notwendig. Um später über die Mean-Field-Näherung hinausgehen zu können, werden in diesem Kapitel die Grundlagen für eine Vielteilchenbeschreibung gelegt. In Abschnitt 4.1 wird das Bose-Hubbard-Modell, welches zur Beschreibung von Bosonen in optischen Gittern verwendet werden kann, eingeführt. Da der korrespondierende Hilbertraum rasch mit der Teilchenzahl wächst (siehe Gleichung (4.4)), empfiehlt sich die Verwendung von Näherungsmethoden zur Bestimmung der Vielteilchendynamik. In dieser Arbeit wird die Bogoliubov-Backreaction-Methode verwendet, die in Abschnitt 4.2 diskutiert wird. Am Ende dieses Kapitels wird auf die Bestimmung der Kontrollparameter im Vielteilchensystem eingegangen.

4.1. Bose-Hubbard-Modell mit zeitabhängigen Parametern

Das Bose-Hubbard-Modell wurde von Jaksch et al. [37] zur Beschreibung ultrakalter Bosonen in optischen Gittern eingeführt und von experimenteller Seite [38–41] erfolgreich untersucht.

Der Hamiltonoperator des Bose-Hubbard-Modells kann ausgehend vom Hamiltonoperator für wechselwirkende Bosonen in zweiter Quantisierung hergeleitet werden. Die Feldoperatoren werden dazu in einer Basis bestehend aus Wannier-Funktionen entwickelt und es wird dabei verwendet, dass bei tiefen Temperaturen die s-Wellenstreuung dominiert. Für eine ausführliche Herleitung sei auf [37] verwiesen.

In dieser Arbeit wird ein dynamisches Bose-Hubbard-Modell mit zeitabhängigen Parametern verwendet, da die Parameter zur Realisierung von \mathcal{PT} -Symmetrie eine Zeitabhängigkeit aufweisen müssen, was bereits am Mean-Field-Grenzfall deutlich wurde. Der Hamiltonian des dynamischen Bose-Hubbard-Modells hat also die Form

$$\hat{H}_{\text{BH}} = - \sum_{\langle m, m' \rangle} J_{m, m'}(t) \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_{m'} + \frac{1}{2} \sum_m U_m \hat{n}_m (\hat{n}_m - 1) + \sum_m \epsilon_m(t) \hat{n}_m, \quad (4.1)$$

wobei \hat{a}_m^\dagger den Erzeugungsoperator bezeichnet und ein Boson am Gitterplatz m erzeugt und \hat{a}_m den Vernichtungsoperator darstellt und ein Boson am Gitterplatz m vernichtet.

4. Vielteilchenbeschreibung

Der Operator \hat{n}_m bezeichnet den Besetzungszahloperator mit $\hat{n}_m = \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_m$ und liefert die Anzahl der Teilchen am Gitterplatz m . Da Bosonen ununterscheidbar sind und sich bei genügend tiefen Temperaturen im niedrigsten Bloch-Band befinden, wird ein Zustand vollständig durch die Anzahl der Teilchen in den einzelnen Mulden charakterisiert. Für eine Vielteilchenbeschreibung bietet sich daher die Verwendung einer Fock-Basis an, für vier Mulden ist ein Basiszustand $|n_1, n_2, n_3, n_4\rangle$ festgelegt über die Besetzungszahlen n_i mit $i = 1, \dots, 4$ in den vier Mulden. Die Wirkung der Operatoren lautet dann

$$\hat{a}_m^\dagger |\dots, n_m, \dots\rangle = \sqrt{n_m + 1} |\dots, n_m + 1, \dots\rangle \quad (4.2a)$$

und

$$\hat{a}_m |\dots, n_m, \dots\rangle = \sqrt{n_m} |\dots, n_m - 1, \dots\rangle. \quad (4.2b)$$

Für die Operatoren (4.2) gelten die bosonischen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_l^\dagger] = \delta_{kl}, \quad (4.3a)$$

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_l] = 0 \quad (4.3b)$$

und

$$[\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_l^\dagger] = 0. \quad (4.3c)$$

Der erste Term in Gleichung (4.1) beschreibt das Tunneln eines Bosons von einem Gitterplatz auf den Benachbarten. Die Tunnelrate zwischen den Mulden k und l wird mit J_{kl} bezeichnet. Es wird nur über benachbarte Gitterplätze summiert, d.h. Nicht-nächster-Nachbar-Sprünge werden vernachlässigt. Die Onsite-Wechselwirkung zwischen mehreren Teilchen am selben Gitterplatz wird durch den zweiten Term beschrieben, wobei U die mikroskopische Kontaktwechselwirkung darstellt. Der dritte Term in Gleichung (4.1) bestimmt schließlich die Onsite-Energie.

Die Berechnung der Dimension D des zum Fock-Raum $|n_1, \dots, n_M\rangle$ zugehörigen Hilbertraums lässt sich auf ein einfaches kombinatorisches Problem zurückführen und ergibt sich aus der Gesamtteilchenzahl N_{ges} im System und der Anzahl M der Mulden über

$$D(N_{\text{ges}}, M) = \binom{N_{\text{ges}} + M - 1}{N_{\text{ges}}}. \quad (4.4)$$

Für $N_{\text{ges}} \rightarrow \infty$ und $N_{\text{ges}} \gg M$ liefert die Betrachtung des führenden Terms in Gleichung (4.4) den Ausdruck [33]

$$D(N_{\text{ges}}, M) \sim \frac{N_{\text{ges}}^{(M-1)}}{(M-1)!}, \quad (4.5)$$

d.h. für große Teilchenzahlen wächst der Hilbertraum exponentiell mit der Anzahl der Mulden M und polynomial mit der Gesamtteilchenzahl N_{ges} . Der Hilbertraum wird also schnell sehr groß, was später bei der Wahl der numerischen Methoden berücksichtigt

werden muss. Für das in dieser Arbeit betrachtete Viermuldensystem mit $M = 4$ ergibt sich beispielsweise schon für $N_{\text{ges}} = 22$ Teilchen im Gesamtsystem nach Gleichung (4.4) eine Dimension des Hilbertraums von $D = 2300$, d.h. zur Reduktion des numerischen Aufwands empfiehlt sich die Verwendung von Näherungen. Im Folgenden soll die Bogoliubov-Backreaction-Näherung eingeführt werden.

4.2. Bogoliubov-Backreaction-Näherung

Wie schon erwähnt, wächst die Dimension des Hilbertraums rasch mit der Teilchenzahl (siehe Gleichung (4.4)), weshalb es sich anbietet, eine Näherung zur Bestimmung der Vielteilchendynamik zu verwenden. Es wurde dafür die Bogoliubov-Backreaction-Methode nach Anglin und Vardi [42, 43] ausgewählt, welche bereits für ein geschlossenes Zweimoden-Bose-Hubbard-System [42, 43], Bose-Hubbard-Ketten [44] und andere Systeme [45] Anwendung fand. Bei der Auswertung der Dynamik mithilfe der BBR-Methode hängt der numerische Aufwand nicht von der verwendeten Teilchenzahl ab, sondern die Teilchenzahl geht nur als Parameter in die Berechnung ein. Das Verfahren führt auf einen Satz gekoppelter Differentialgleichungen, welche beispielsweise mit Runge-Kutta-Algorithmen integriert werden können. Im Folgenden sollen die Grundlagen dieser Methode diskutiert werden. In Unterabschnitt 4.2.1 wird eine äquivalente Formulierung des Bose-Hubbard-Modells über eine BBGKY-Hierarchie gegeben, in Unterabschnitt 4.2.2 wird die Näherungsmethode vorgestellt und auf die Wahl der Anfangszustände und der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter eingegangen.

4.2.1. Äquivalente Formulierung des Bose-Hubbard-Modells über eine BBGKY-Hierarchie

Mithilfe der Von-Neumann-Gleichung

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

welche die Zeitentwicklung des Dichteoperators $\hat{\rho}$ angibt, und des Hamiltonoperators (4.1) des Bose-Hubbard-Modells lässt sich die sogenannte BBGKY-Hierarchie (Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon-Hierarchie) herleiten. Sie beschreibt die volle Vielteilchendynamik des Systems und stellt ein gekoppeltes Differentialgleichungssystem mit N_{ges} Ordnungen dar, wobei N_{ges} die Teilchenzahl im Gesamtsystem bezeichnet.

Für das betrachtete System lassen sich die Dichteoperatoren $\hat{\sigma}'_{kl}, \hat{\sigma}'_{klmn}, \hat{\sigma}'_{klmnr}, \dots$ bei

Verwendung einer Fock-Basis darstellen als

$$\hat{\sigma}'_{kl} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l, \quad (4.7a)$$

$$\hat{\sigma}'_{klmn} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n, \quad (4.7b)$$

$$\hat{\sigma}'_{klmnr s} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_r \hat{a}_s \quad (4.7c)$$

⋮

Die Erwartungswerte dieser Dichteoperatoren sollen mit $\langle \hat{\sigma}'_{kl} \rangle = \langle \psi | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l | \psi \rangle \equiv \sigma'_{kl}$, $\langle \hat{\sigma}'_{klmn} \rangle = \langle \psi | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_n | \psi \rangle \equiv \sigma'_{klmn}, \dots$ bezeichnet werden und stellen die Elemente der Dichtematrizen dar.

In den Dichteoperatoren (4.7) befinden sich alle Erzeuger auf der linken Seite und alle Vernichter auf der rechten Seite. Um später die Dynamik effizient bestimmen zu können (siehe dazu Anhang E.3), empfiehlt es sich, Operatoren zur Beschreibung der Dynamik zu verwenden, in welchen Erzeuger-Vernichter-Paare auftreten. Im Folgenden werden mit $\hat{\sigma}$ stets Operatoren gekennzeichnet, die Teilchen paarweise erzeugen und vernichten, d.h. es gelten insbesondere

$$\hat{\sigma}_{kl} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l, \quad (4.8a)$$

$$\hat{\sigma}_{klmn} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n, \quad (4.8b)$$

$$\hat{\sigma}_{klmnr s} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_r^\dagger \hat{a}_s. \quad (4.8c)$$

Die zugehörigen Erwartungswerte sollen mit $\langle \hat{\sigma}_{kl} \rangle = \langle \psi | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l | \psi \rangle \equiv \sigma_{kl}$, $\langle \hat{\sigma}_{klmn} \rangle = \langle \psi | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n | \psi \rangle \equiv \sigma_{klmn}, \dots$ bezeichnet werden. Die Vielteilchenoperatoren (4.8) ergeben sich aus den Vielteilchendichteoperatoren (4.7) mithilfe der Vertauschungsrelation (4.3a). So lässt sich beispielsweise der Zweiteilchenoperator $\hat{\sigma}_{klmn}$ über

$$\hat{\sigma}_{klmn} = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n = \hat{\sigma}'_{kmln} - \delta_{lm} \hat{\sigma}_{kn} \quad (4.9)$$

aus dem Zweiteilchendichteoperator $\hat{\sigma}'_{kmln}$ in Gleichung (4.7b) bestimmen.

An dieser Stelle soll Folgendes angemerkt werden: Um die Termini so einfach wie möglich zu halten, werden in dieser Arbeit in Anlehnung an [33] die Operatoren (4.8) als Ein-, Zwei-, und Dreiteilchendichteoperatoren bezeichnet und nicht, wie ansonsten üblich, die Operatoren (4.7). Analog werden die zugehörigen Erwartungswerte σ_{kl} , σ_{klmn} und $\sigma_{klmnr s}$ als Elemente der Ein-, Zwei- und Dreiteilchendichtematrizen bezeichnet. Im Folgenden werden nun Bewegungsgleichungen für die Elemente der Dichtematrizen hergeleitet.

Werden die Erzeuger und Vernichter in Gleichung (4.1) durch die Operatoren $\hat{\sigma}_{kl}$ und $\hat{\sigma}_{klmn}$ ersetzt, so führt das auf den Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{\text{BH}} = - \sum_{\langle m, m' \rangle} J_{mm'} \hat{\sigma}_{mm'} + \frac{1}{2} \sum_m U_m (\hat{\sigma}_{mmmm} - \hat{\sigma}_{mm}) + \sum_m \epsilon_m \hat{\sigma}_{mm}, \quad (4.10)$$

welcher natürlich dieselbe Dynamik wie der Hamiltonoperator (4.1) liefert. Die Dynamik der Einteilchendichtematrix kann mithilfe des Hamiltonoperators (4.10) und der Von-Neumann-Gleichung (4.6) bestimmt werden:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\sigma}_{kl} \rangle = \left\langle \left[\hat{\sigma}_{kl}, \hat{H} \right] \right\rangle. \quad (4.11)$$

Nach Auswertung der Gleichungen (4.11) ergeben sich für die Einteilchendynamik

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{kl} &= J_{k-1,k} \sigma_{k-1,l} + J_{k+1,k} \sigma_{k+1,l} - J_{l,l-1} \sigma_{k,l-1} - J_{l,l+1} \sigma_{k,l+1} \\ &\quad - U_k (\sigma_{kkkl} - \sigma_{kl}) + U_l (\sigma_{kl ll} - \sigma_{kl}) - (\epsilon_k - \epsilon_l) \sigma_{kl} \\ &= Z_{kl} - (\epsilon_k - \epsilon_l) \sigma_{kl}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

wobei die Abkürzung Z_{kl} eingeführt wurde, mit

$$\begin{aligned} Z_{kl} &= J_{k-1,k} \sigma_{k-1,l} + J_{k+1,k} \sigma_{k+1,l} - J_{l,l-1} \sigma_{k,l-1} - J_{l,l+1} \sigma_{k,l+1} \\ &\quad - U_k (\sigma_{kkkl} - \sigma_{kl}) + U_l (\sigma_{kl ll} - \sigma_{kl}). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Für die spätere Verwendung werden an dieser Stelle auch noch die Abkürzungen X_{kl} und Y_{kl} eingeführt, welche den doppelten Real- bzw. Imaginärteil von Z_{kl} darstellen, d.h.

$$X_{kl} = 2 \operatorname{Re}(Z_{kl}) \quad (4.14a)$$

und

$$Y_{kl} = 2 \operatorname{Im}(Z_{kl}). \quad (4.14b)$$

In Gleichung (4.12) kommen neben den Elementen der Einteilchendichtematrix auch Elemente zweiter Ordnung vor, d.h. die Dynamik der Einteilchendichtematrizen koppelt durch den Wechselwirkungsterm an die Dynamik der Zweiteilchendichtematrizen. Die Zeitableitung der Zweiteilchendichtematrix koppelt wiederum an die Dynamik der Dreiteilchendichtematrix. Allgemein lässt sich zeigen, dass die m -te Ordnung an die $(m+1)$ -te Ordnung koppelt, was insgesamt die sogenannte BBGKY-Hierarchie [42, 43] ergibt:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\sigma}_{kl} \rangle = f(\langle \hat{\sigma}_{kl} \rangle, \langle \hat{\sigma}_{klmn} \rangle), \quad (4.15a)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\sigma}_{klmn} \rangle = f(\langle \hat{\sigma}_{kl} \rangle, \langle \hat{\sigma}_{klmn} \rangle, \langle \hat{\sigma}_{klmnrs} \rangle), \quad (4.15b)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \langle \hat{\sigma}_{klmnrs} \rangle = f(\langle \hat{\sigma}_{kl} \rangle, \langle \hat{\sigma}_{klmn} \rangle, \langle \hat{\sigma}_{klmnrs} \rangle, \langle \hat{\sigma}_{klmnrspq} \rangle) \quad (4.15c)$$

⋮

Die zweite Ordnung dieser Hierarchie soll für die spätere Verwendung an dieser Stelle explizit angegeben werden. Für die Dynamik der Elemente zweiter Ordnung ergibt sich

$$\begin{aligned}
 i \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{klmn} = & J_{k-1,k} \sigma_{k-1,lmn} + J_{k+1,k} \sigma_{k+1,lmn} - J_{l,l-1} \sigma_{k,l-1,mn} - J_{l,l+1} \sigma_{k,l+1,mn} \\
 & + J_{m-1,m} \sigma_{kl,m-1,m} + J_{m+1,m} \sigma_{kl,m+1,n} - J_{n,n-1} \sigma_{klm,n-1} - J_{n,n+1} \sigma_{klm,n+1} \\
 & - U_k (\sigma_{kkklmn} - \sigma_{klmn}) + U_l (\sigma_{klmlln} - \sigma_{klmn}) - U_m (\sigma_{klmnmn} - \sigma_{klmn}) \\
 & + U_n (\sigma_{klmnnn} - \sigma_{klmn}) - (\epsilon_k - \epsilon_l + \epsilon_m - \epsilon_n) \sigma_{klmn}. \tag{4.16}
 \end{aligned}$$

Bei einer Gesamtteilchenzahl N_{ges} im System besitzt das Gleichungssystem (4.15) N_{ges} Ordnungen, wobei jede Ordnung bei vier Mulden 4^n Differentialgleichungen liefert, mit η der Anzahl der Indizes. Die Anzahl der zu lösenden gekoppelten Differentialgleichungen steigt mit der Ordnung und somit mit der Gesamtteilchenzahl im System rasch an. Um das Differentialgleichungssystem handhabbar zu machen und ein geschlossenes System zu erhalten, wird die BBGKY-Hierarchie nach einer bestimmten Ordnung m abgeschnitten und die Elemente der Ordnung $(m + 1)$ werden durch die Elemente der niedrigeren Ordnungen genähert. Für $m = 2$ führt dies auf die sogenannte Bogoliubov-Backreaction-Näherung.

4.2.2. Backreaction

Die BBGKY-Hierarchie beschreibt die Vielteilchendynamik des Systems vollständig und ist äquivalent zu einer Beschreibung mit Gleichung (4.1). Eine Näherung der vollen Vielteilchendynamik ist durch die BBR-Näherung gegeben. Dafür wird die BBGKY-Hierarchie nach der zweiten Ordnung abgeschnitten und die auftretenden Elemente dritter Ordnung durch Elemente der ersten und der zweiten Ordnung ausgedrückt. Somit können Zweiteilcheneffekte in der Dynamik berücksichtigt werden, während die in Kapitel 3 diskutierte Mean-Field-Theorie nur Einteilcheneffekte einbezieht.

Die Elemente der Dreiteilchendichtematrizen in Gleichung (4.16) können näherungsweise als eine Kombination der Elemente der Ein- und Zweiteilchendichtematrizen ausgedrückt werden [42, 43, 46], was eine „Backreaction“ darstellt¹:

$$\hat{\sigma}_{klmnr s} = \hat{\sigma}_{kl} \hat{\sigma}_{mnr s} + \hat{\sigma}_{rs} \hat{\sigma}_{klmn} + \hat{\sigma}_{mn} \hat{\sigma}_{klrs} - 2 \hat{\sigma}_{kl} \hat{\sigma}_{mn} \hat{\sigma}_{rs}. \tag{4.17}$$

Somit bilden die Gleichungen (4.12) und (4.16) mit (4.17) ein geschlossenes Differentialgleichungssystem für σ_{kl} und σ_{klmn} . Für vier Mulden erhält man auf diese Art und Weise 272 zu lösende gekoppelte Differentialgleichungen.

4.2.3. Symmetrien der BBR-Näherung

In einem System mit M Mulden liefern die Differentialgleichungen (4.12) M^2 und die Differentialgleichungen (4.16) M^4 komplexe Gleichungen. Es zeigt sich, dass nicht al-

¹Eine Zusammenfassung der Herleitung der Näherungsformel (4.17) ist in Anhang C zu finden. Für eine weiterführende Diskussion sei an dieser Stelle auf [42, 43, 46] verwiesen.

le diese Gleichungen unabhängig voneinander sind, sondern dass gewisse Symmetrien existieren. Um später den numerischen Aufwand zu reduzieren, sollen diese Symmetrien kurz diskutiert werden.

Für die Elemente der Einteilchendichtematrix gilt offensichtlich

$$\sigma_{kl} = \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle = \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \rangle^* = \sigma_{lk}^*, \quad (4.18)$$

die Diagonalelemente sind überdies rein reell, d.h. es gilt $\sigma_{kk}^* = \sigma_{kk} = n_k$. Somit verbleiben M^2 reelle Einträge.

Die Elemente zweiter Ordnung erfüllen

$$\sigma_{klmn} = \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \rangle = \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_m \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \rangle = \sigma_{nmkl}^*, \quad (4.19)$$

außerdem lassen sich unter Verwendung der Vertauschungsrelation (4.3a) zusätzlich die Symmetrien

$$\sigma_{klmn} = \sigma_{mlkn} + \sigma_{kn} \delta_{ml} - \sigma_{mn} \delta_{kl}, \quad (4.20a)$$

$$\sigma_{klmn} = \sigma_{knml} + \sigma_{kn} \delta_{ml} - \sigma_{kl} \delta_{mn} \quad (4.20b)$$

und

$$\sigma_{klmn} = \sigma_{mnkl} + \sigma_{kn} \delta_{ml} - \sigma_{ml} \delta_{kn} \quad (4.20c)$$

finden. Die Symmetrien in den Gleichungen (4.20) sind allerdings nur in der echten Vielteilchendynamik vorhanden, die BBR-Näherung bricht diese Symmetrien durch die Näherung der Elemente dritter Ordnung. Dieses Verhalten wurde in [47] ausführlich untersucht. Sie werden daher nicht bei der Berechnung der Dynamik ausgenutzt, spielen aber dennoch bei der Konstruktion von unreinen Zuständen eine wichtige Rolle.

An dieser Stelle bietet es sich an, analog zu [26, 27, 44–46], die Kovarianzen Δ_{klmn} einzuführen, da sich mit ihnen die Symmetrien, die sich mithilfe der Vertauschungsrelationen ergeben, übersichtlich zusammenfassen lassen. Die Kovarianzen sind gegeben durch

$$\Delta_{klmn} = \sigma_{klmn} - \sigma_{kl} \sigma_{mn}. \quad (4.21)$$

Zusammen mit den Elementen der Einteilchendichtematrix beschreiben die Kovarianzen das System äquivalent zur Darstellung mit σ_{klmn} . Die Differentialgleichungen (4.16) können mithilfe der Definition (4.21) für die Kovarianzen umformuliert werden. Es ergeben sich für die Dynamik der Kovarianzen die Gleichungen [45, 46]

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \Delta_{klmn} = & J_{k-1,k} \Delta_{k-1,lmn} + J_{k+1,k} \Delta_{k+1,lmn} - J_{l,l-1} \Delta_{k,l-1,mn} - J_{l,l+1} \Delta_{k,l+1,mn} \\ & + J_{m-1,m} \Delta_{kl,m-1,n} + J_{m+1,m} \Delta_{kl,m+1,n} - J_{n,n-1} \Delta_{klm,n-1} - J_{n+1,n} \Delta_{klm,n+1} \\ & - (\epsilon_k - \epsilon_l + \epsilon_m - \epsilon_n - U_k + U_l - U_m + U_n) \Delta_{klmn} \\ & - (\Delta_{klmn} (U_k \sigma_{kk} - U_l \sigma_{ll} + U_m \sigma_{mm} - U_n \sigma_{nn})) \\ & + U_k \Delta_{kkmn} \sigma_{kl} - U_l \Delta_{llmn} \sigma_{kl} + U_m \Delta_{klmm} \sigma_{mn} - U_n \Delta_{klnn} \sigma_{mn}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

wobei in dieser Darstellung die Näherung (4.17) schon enthalten ist. Die Gleichungen (4.12) und (4.22) stellen dann einen zu den Gleichungen (4.12) und (4.16) äquivalenten Satz gekoppelter Differentialgleichungen dar.

Für die Kovarianzen lassen sich zwei Symmetrien finden [35]. Die erste Symmetrie lautet, analog zu Gleichung (4.19),

$$\Delta_{klmn} = \Delta_{nmlk}^*. \quad (4.23)$$

Die zweite Symmetrie gilt wieder nur für die echte Vielteilchendynamik. Sie lässt sich mithilfe der Vertauschungsrelationen (4.3) finden und ergibt sich zu

$$\begin{aligned} \Delta_{klmn} &= \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \rangle - \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \rangle \\ &= \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle - \delta_{kn} \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l \rangle + \delta_{lm} \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_n \rangle - \langle \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n \rangle \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \rangle \\ &= \Delta_{mnkl} - \delta_{kn} \sigma_{ml} + \delta_{lm} \sigma_{kn}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Die Anzahl der unabhängigen Elemente bestimmt sich folgendermaßen: Außer für den Fall $k = m$ und $l = n$ lässt sich mit der Symmetrie (4.24) zu jedem Element eines finden, welches vom ersten abhängig ist. Für M^2 Elemente gilt $k = m$ und $l = n$, d.h. $(M^4 - M^2)/2$ Kovarianzen lassen sich durch andere Elemente ausdrücken. Somit verbleiben unter Ausnutzung der Symmetrie (4.24) $M^4 - (M^4 - M^2)/2 = (M^4 + M^2)/2$ komplexe Elemente. Mithilfe der Symmetrie (4.23) folgt, dass jedes der verbliebenen Elemente entweder reell ist, oder ein komplex konjugiertes Gegenstück besitzt, d.h. die Anzahl der unabhängigen Elemente reduziert sich auf $(M^4 + M^2)/2$ reelle Elemente.

Die Anfangswerte, die zur Lösung der Differentialgleichungen (4.12) und (4.16) verwendet werden, müssen die Symmetrien (4.18), (4.19) und (4.20) erfüllen. Dies muss insbesondere beachtet werden, wenn man unreine Anfangszustände wählen will, was in Kapitel 6 untersucht wird.

4.2.4. Bestimmung von Anfangswerten für die BBR-Methode

Zur Lösung der Differentialgleichungen (4.12) und (4.16) werden Anfangsbedingungen für die Elemente der Ein- und Zweiteilchendichtematrizen benötigt. Es wird hier ein Vorschlag von Dast [26] aufgegriffen, wobei dazu der Erwartungswert der entsprechenden Operatoren mit dem Vielteilchenzustand eines reinen Kondensats ausgewertet wird. Man erhält so einen reinen² Anfangszustand für das Vielteilchensystem, welcher aus den Mean-Field-Koeffizienten konstruiert wird. In dieser Arbeit wird in Kapitel 6 eine Methode entwickelt, geeignete unreine Zustände für das Vielteilchensystem zu konstruieren, mit welchen sich das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems in der ersten Ordnung der Hierarchie des Vielteilchensystems realisieren lässt.

²Zur in dieser Arbeit verwendeten Definition der Reinheit eines Zustands siehe Anhang D.

Der Mean-Field-Zustand eines Kondensats in einem Bose-Hubbard-System ist gegeben durch M Mean-Field-Koeffizienten ψ_i mit $\boldsymbol{\psi} = (\psi_1, \dots, \psi_M)^T$, wobei M wieder die Anzahl der Mulden darstellt. Ein reines Kondensat bei einer festen Gesamtteilchenzahl N_{ges} kann als Produkt identischer Einteilchenzustände dargestellt werden. Der entsprechende Vielteilchenzustand $|\boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}}\rangle$ ist der Produktzustand

$$|\boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{ges}}!}} \left(\sum_{j=1}^M \psi_j \hat{a}_j^\dagger \right)^{N_{\text{ges}}} |0\rangle. \quad (4.25)$$

Wertet man nun den Erwartungswert von $\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l$ für das reine Kondensat (4.25) aus, so ergeben sich für die Anfangswerte der Momente erster Ordnung

$$\sigma_{kl} = \langle \boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}} | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l | \boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}} \rangle = N_{\text{ges}} \psi_k^* \psi_l, \quad (4.26)$$

wobei die Relation

$$\hat{a}_k | \boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}} \rangle = \sqrt{N_{\text{ges}}} \psi_k | \boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}} - 1 \rangle \quad (4.27)$$

verwendet wurde. Für die zweiten Momente ergeben sich analog

$$\begin{aligned} \sigma_{klmn} &= \langle \boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}} | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n | \boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}} \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}} | \hat{a}_k^\dagger (\hat{a}_m^\dagger \hat{a}_l + \delta_{lm}) \hat{a}_n | \boldsymbol{\psi}, N_{\text{ges}} \rangle \\ &= N_{\text{ges}} (N_{\text{ges}} - 1) \psi_k^* \psi_l \psi_m^* \psi_n + N_{\text{ges}} \delta_{lm} \psi_k^* \psi_n. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Im folgenden Abschnitt werden nun Ausdrücke für die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter im Vielteilchensystem gegeben.

4.2.5. Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter im Vielteilchensystem

In Abschnitt 3.2 wurde bestimmt, wie die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter aussehen muss, um im Mean-Field in den inneren beiden Mulden \mathcal{PT} -Symmetrie zu realisieren. Wie schon erwähnt, gelten die dort bestimmten Gleichungen nur im Rahmen der Mean-Field-Beschreibung. Für eine Vielteilchenbeschreibung mit der BBR-Methode lassen sich ähnliche Gleichungen finden [33]. In Abschnitt 5.2 wird mithilfe der hier dargestellten Gleichungen die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände untersucht. Für eine ausführliche Betrachtung der Herleitung der Zeitabhängigkeiten sei auf [33] verwiesen, hier sollen nur die für diese Arbeit relevanten Aspekte zusammengefasst werden. Als Vorbereitung sollen zuerst die Ausdrücke (3.8) und (3.10) für den reduzierten Strom und die Korrelation zwischen den Mulden auf die Vielteilchenbeschreibung verallgemeinert werden.

Strom und Korrelation im Vielteilchensystem Die Ausdrücke (3.8) und (3.10) für die reduzierte Stromdichte und die Korrelation können im Vielteilchensystem unter Verwendung der Elemente der Einteilchendichtematrix verallgemeinert werden [33]. Im Vielteilchensystem ergibt sich die reduzierte Stromdichte \tilde{j}_{kl} zu

$$\tilde{j}_{kl} = -i(\sigma_{kl} - \sigma_{lk}) = 2 \operatorname{Im}(\sigma_{kl}) \quad (4.29)$$

und die Korrelation c_{kl} zu

$$c_{kl} = \sigma_{kl} + \sigma_{lk} = 2 \operatorname{Re}(\sigma_{kl}), \quad (4.30)$$

d.h. die Elemente der Einteilchendichtematrix lassen sich schreiben als

$$\sigma_{kl} = \frac{1}{2} (c_{kl} + i\tilde{j}_{kl}). \quad (4.31)$$

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass sich die Elemente der Einteilchendichtematrix im Mean-Field-Grenzfall als Produkt der Mean-Field-Koeffizienten ψ_i darstellen lassen. Es ist in diesem Fall nämlich

$$\sigma_{kl} = \psi_k^* \psi_l, \quad (4.32)$$

und damit liefern die Gleichungen (4.29) und (4.30) die schon in Abschnitt 3.2 eingeführten Ausdrücke (3.8) und (3.10).

Zeitabhängigkeit der Tunnelraten Um die Zeitabhängigkeit der Tunnelraten zu bestimmen, wird, ähnlich wie in Abschnitt 3.2, die Dynamik der Besetzungszahlen im offenen Zweimuldensystem nach Gleichung (3.2) mit der Dynamik nach Gleichung (4.12) verglichen. Für die Zeitabhängigkeiten der Tunnelraten folgen auf diese Art und Weise

$$J_{12}(t) = \frac{2\gamma n_2(t)}{\tilde{j}_{12}} \quad (4.33a)$$

und

$$J_{34}(t) = \frac{2\gamma n_3(t)}{\tilde{j}_{34}}. \quad (4.33b)$$

Zeitabhängigkeit der Onsite-Energien Im Vielteilchensystem sind die Phasen φ_i mit $i = 1, \dots, 4$, anders als im Mean-Field-System, wo sie charakteristische Größen darstellen, nicht definiert. Die Forderungen $c_{12}(0) = 0$, $c_{34}(0) = 0$ und auch $\frac{\partial}{\partial t} c_{12} = 0$ und $\frac{\partial}{\partial t} c_{34} = 0$ lassen sich daher nicht direkt auf das Vielteilchensystem übertragen. Hat man bei $t = 0$ im Vielteilchensystem allerdings einen reinen (d.h. Mean-Field-artigen) Zustand wie in den Gleichungen (4.26) und (4.28) vorliegen, für welchen dann wieder $c_{12}(0) = 0$ und $c_{34}(0) = 0$ gilt, dann lassen sich dieselben Forderungen stellen wie in Abschnitt 3.2.

Wird wieder gefordert, dass die zeitlichen Ableitungen dieser Größen verschwinden sollen, so erhält man für die Zeitabhängigkeiten der Onsite-Energien im Vielteilchensystem

$$\epsilon_1(t) = -J_{23} \frac{\tilde{j}_{13}(t)}{\tilde{j}_{12}(t)} - U_1 \left(\frac{\tilde{j}_{1112}(t)}{\tilde{j}_{12}(t)} - 1 \right) + U_2 \left(\frac{\tilde{j}_{1222}(t)}{\tilde{j}_{12}(t)} - 1 \right) \quad (4.34a)$$

und

$$\epsilon_4(t) = -J_{23} \frac{\tilde{j}_{24}(t)}{\tilde{j}_{34}(t)} + U_3 \left(\frac{\tilde{j}_{3334}(t)}{\tilde{j}_{34}(t)} - 1 \right) - U_4 \left(\frac{\tilde{j}_{3444}(t)}{\tilde{j}_{34}(t)} - 1 \right). \quad (4.34b)$$

Es wurde dabei, in Analogie zu Gleichung (4.29), die Abkürzung

$$\tilde{j}_{klmn} = -i(\sigma_{klmn} - \sigma_{nmlk}) = 2 \operatorname{Im} \sigma_{klmn} \quad (4.35)$$

verwendet.

Die so bestimmten Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter werden im Folgenden dazu verwendet, die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände in der Vielteilchenbeschreibung zu untersuchen.

5. Dynamik \mathcal{PT} -brechender Zustände

In diesem Kapitel wird die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände des offenen Zweimuldensystems im hermiteschen Viermuldensystem sowohl in der Mean-Field-Beschreibung als auch in der Vielteilchenbeschreibung untersucht. In Abschnitt 5.1 wird gezeigt, dass sich diese Zustände im hermiteschen Viermuldensystem im Mean-Field-Limit mithilfe einer entsprechenden Wahl der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter realisieren lassen. Dazu werden zunächst passende Anfangszustände ermittelt. Mit diesen wird dann die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände im Mean-Field numerisch bestimmt und mit der Dynamik des offenen Zweimuldensystems verglichen. In Abschnitt 5.2 wird dies dann in einer Vielteilchenbeschreibung mit der BBR-Methode untersucht, wobei nach einem Vorschlag von Dast [26] reine Anfangszustände verwendet werden. Es zeigt sich, dass diese Beschreibung für große Teilchenzahlen in den Mean-Field-Grenzfall übergeht, sich das Verhalten der \mathcal{PT} -brechenden Zustände im Vielteilchensystem auf diese Art und Weise jedoch nicht realisieren lässt. Dadurch wird schließlich der in Kapitel 6 verfolgte Ansatz motiviert, bei welchem *unreine* Anfangszustände zur Bestimmung der Vielteilchendynamik verwendet werden.

5.1. Dynamik im Mean-Field

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass sich im Mean-Field die \mathcal{PT} -brechenden Zustände (A.19) des offenen Zweimuldensystems in einem hermiteschen Viermuldensystem realisieren lassen. Dazu werden in Unterabschnitt 5.1.1 zunächst passende Anfangszustände bestimmt. Anders als bei der Betrachtung der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände (A.12) und (A.13) lässt sich für die \mathcal{PT} -brechenden Zustände selbst im Mean-Field-Limit im Allgemeinen keine analytische Lösung für die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter angeben. Für den Grenzfall einer verschwindenden makroskopischen Kontaktwechselwirkung g lässt sich jedoch eine analytische Lösung finden, welche in Unterabschnitt 5.1.3 hergeleitet wird. In Unterabschnitt 5.1.4 wird anschließend die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände im Mean-Field für $g > 0$ numerisch bestimmt.

5.1.1. Anfangszustände

Zunächst sollen passende Anfangszustände für die Berechnung der Dynamik gefunden werden, mit welchen sich die \mathcal{PT} -brechenden Zustände (A.19) im Mean-Field realisieren lassen. Bei der Herleitung der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter in Abschnitt 3.2

wurde keine Annahme über die Art der Anfangszustände gemacht; es wurde lediglich eine Mean-Field-Wellenfunktion der Form $\psi_i = \sqrt{n_i}e^{i\varphi_i}$ angesetzt. Die Gleichungen (3.7) und (3.13) für die Tunnelraten und die Onsite-Energien gelten damit allgemein, sind also auch auf die \mathcal{PT} -brechenden Zustände anwendbar.

Bei der Wahl des Anfangszustands muss sichergestellt werden, dass die Bedingungen (3.5) an die Phasendifferenzen erfüllt sind. Außerdem müssen die Anfangswerte in den inneren Mulden identisch mit jenen des offenen Zweimuldensystems sein. Unter Verwendung der Gleichungen (3.5) und (A.19) folgen für die Anfangszustände zur Berechnung der Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände

$$\boldsymbol{\psi}(0) = \begin{pmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_2(0) \\ \psi_3(0) \\ \psi_4(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{n_1(0)}e^{i(\varphi_a - \frac{\pi}{2})} \\ \sqrt{n(0)}(1 + \kappa)e^{i\varphi_a} \\ \sqrt{n(0)}(1 - \kappa)e^{-i\varphi_a} \\ \sqrt{n_4(0)}e^{-i(\varphi_a - \frac{\pi}{2})} \end{pmatrix} \quad (5.1)$$

mit der Phase

$$\varphi_a = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{2\gamma}{g}\right) - \frac{\pi}{2} \quad (5.2)$$

und dem Besetzungszahlgleichgewicht κ mit

$$\kappa = \pm \sqrt{1 - \frac{J^2}{\left(\frac{g}{2}\right)^2 + \gamma^2}}. \quad (5.3)$$

Im offenen Zweimuldensystem spaltet der \mathcal{PT} -symmetrische Zustand höherer Energie (angeregter Zustand $\boldsymbol{\psi}_{s,e}$) am Bifurkationspunkt in zwei \mathcal{PT} -brechende Zustände mit $\kappa > 0$ und $\kappa < 0$ auf (siehe Bifurkationsdiagramm in Abbildung A.1). Abhängig davon, welcher Zweig betrachtet werden soll, muss in Gleichung (5.3) das passende Vorzeichen für κ gewählt werden.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass der Zustand (5.1) nicht, wie der Zustand (A.19) des offenen Zweimuldensystems, auf die Anzahl der Teilchen in den inneren Mulden normiert ist. Dies hat denselben Grund wie in Abschnitt 3.2: Bei der Berechnung der Dynamik im Vielteilchensystem ist es in der nicht normierten Darstellung einfacher, die Teilchenzahl in den einzelnen Mulden festzulegen. Die numerischen Resultate werden, um die Vergleichbarkeit mit anderen Arbeiten zu gewährleisten, anschließend entsprechend normiert.

5.1.2. Zeitliche Änderung der Besetzungszahlen

Das Viermuldensystem stellt ein geschlossenes System dar. Daher ist die Änderung der Besetzungszahl in einer Mulde i die Summe des Tunnelstroms $j_{i-1,i}$ in die Mulde hinein und des Stroms $-j_{i,i+1}$ aus der Mulde heraus. Diese Änderung der Besetzungszahl muss gleich der Änderung der Besetzungszahl im offenen Zweimuldensystem sein. Im offenen

System ändert sich die Besetzungszahl in einer Mulde sowohl durch den Tunnelprozess zwischen den beiden Mulden als auch durch die Kopplung an die Umgebung, welche durch den Imaginärteil $\pm i\gamma$ des Potentials beschrieben wird.

Betrachtet man die Änderung der Besetzungszahlen im Viermuldensystem (links in Gleichung (5.4)) und im Zweimuldensystem (rechts in Gleichung (5.4)), so erhält man

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{1,M=4} = -j_{12} \stackrel{!}{=} -2\gamma n_2, \quad (5.4a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{2,M=4} = j_{12} - j_{23} \stackrel{!}{=} 2\gamma n_2 - 2\gamma\sqrt{n_2 n_3}, \quad (5.4b)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{3,M=4} = j_{23} - j_{34} \stackrel{!}{=} -2\gamma n_3 + 2\gamma\sqrt{n_2 n_3} \quad (5.4c)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{4,M=4} = j_{34} \stackrel{!}{=} 2\gamma n_3. \quad (5.4d)$$

Um analytische Ausdrücke für die Zeitabhängigkeit der Tunnelraten (3.7) zu finden, müssen $n_1(t)$, $n_2(t)$, $n_3(t)$ und $n_4(t)$ analytisch bekannt sein, für die Zeitabhängigkeit der Onsite-Energien (3.13) zusätzlich die Zeitabhängigkeit der Elemente \tilde{j}_{13} , \tilde{j}_{12} , \tilde{j}_{24} und \tilde{j}_{34} . Für $g \neq 0$ ist das Differentialgleichungssystem (5.4) nicht geschlossen lösbar, außerdem sind $\psi_2(t)$ und $\psi_3(t)$ des offenen Zweimuldensystems nicht analytisch zugänglich und somit natürlich auch nicht $\psi_1(t)$ und $\psi_4(t)$. Für $g = 0$ ist es jedoch möglich, eine analytische Lösung für die Tunnelraten und die Onsite-Energien wie in den Gleichungen (B.4) und (B.5) anzugeben, was im folgenden Abschnitt dargestellt ist.

5.1.3. Grenzfall verschwindender Wechselwirkung, $g = 0$

In diesem Unterabschnitt wird das Gleichungssystem (5.4) für den Grenzfall $g = 0$ gelöst und damit analytische Gleichungen für die Zeitabhängigkeit der Tunnelraten und der Onsite-Energien angegeben. Das Gleichungssystem (5.4) ist in diesem Fall geschlossen lösbar, da $\psi_2(t)$ und $\psi_3(t)$ des offenen Zweimuldensystems für diesen Fall analytisch bestimmt werden können.

Der Hamiltonoperator für das offene Zweimuldensystem lautet für den Grenzfall $g = 0$ nach Gleichung (2.11)

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} i\gamma & -J \\ -J & -i\gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sqrt{J^2 - \gamma^2} & 0 \\ 0 & \sqrt{J^2 - \gamma^2} \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

Für $g = 0$ ist der Hamiltonoperator nicht explizit zeitabhängig, die Zeitentwicklung ist daher durch $\psi(t) = \psi(0)e^{iE_i t/\hbar}$ gegeben, wobei E_i die Eigenwerte bezeichnen. Die Eigenwerte lassen sich leicht durch Diagonalisierung der Matrix (5.5) oder auf dem in

Anhang A.1 gezeigten Weg bestimmen. Damit ist die Zeitentwicklung der Wellenfunktion für $g = 0$ gegeben durch

$$\boldsymbol{\psi}(0) = \begin{pmatrix} \psi_2(0) \\ \psi_3(0) \end{pmatrix} e^{\pm i\sqrt{J^2 - \gamma^2}t} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1+\kappa}{2}} e^{i\varphi_a} \\ \sqrt{\frac{1-\kappa}{2}} e^{-i\varphi_a} \end{pmatrix} e^{\text{Im}(\mu t)}, \quad (5.6)$$

wobei $\psi_2(0)$ und $\psi_3(0)$ die Eigenzustände (A.19) der zeitunabhängigen GPE darstellen und μ_a die zugehörigen Eigenwerte (A.18) bezeichnen. Folglich ist die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion, und damit auch die der Besetzungszahlen, exponentiell.

Die Zeitabhängigkeit der Besetzungszahlen lässt sich nach den Gleichungen (5.4) einfach durch Integration bestimmen. Es folgen die Zeitabhängigkeiten

$$n_1(t) = -\text{sgn}(\kappa) \frac{\gamma n_2(0)}{\sqrt{\gamma^2 - J^2}} \left(e^{2\text{sgn}(\kappa)\sqrt{\gamma^2 - J^2}t} - 1 \right) + n_1(0), \quad (5.7a)$$

$$n_2(t) = n_2(0) e^{2\text{sgn}(\kappa)\sqrt{\gamma^2 - J^2}t}, \quad (5.7b)$$

$$n_3(t) = n_3(0) e^{2\text{sgn}(\kappa)\sqrt{\gamma^2 - J^2}t} \quad (5.7c)$$

und

$$n_4(t) = \text{sgn}(\kappa) \frac{\gamma n_3(0)}{\sqrt{\gamma^2 - J^2}} \left(e^{2\text{sgn}(\kappa)\sqrt{\gamma^2 - J^2}t} - 1 \right) + n_4(0). \quad (5.7d)$$

Für den Grenzfall $g = 0$ zeigen die Besetzungszahlen in den Systemmulden einen exponentiellen Verlauf, d.h. je nach Vorzeichen von κ werden sie exponentiell gefüllt oder geleert. Die Reservoirmulden zeigen ebenfalls ein exponentielles Verhalten und füllen bzw. leeren sich nach den Gleichungen (5.7a) und (5.7d). Der zeitliche Verlauf der Besetzungszahlen ist in den Abbildungen 5.1(a) ($\kappa > 0$) und 5.2(a) ($\kappa < 0$) dargestellt.

Für die Zeitableitung von \tilde{j}_{23} und c_{23} gelten nach den Gleichungen (3.14) für $g = 0$

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{j}_{23} = 2J_{23}(n_2 - n_3) \quad (5.8a)$$

und

$$\frac{\partial}{\partial t} c_{23} = 0. \quad (5.8b)$$

Anders als für die \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände ist der Strom zwischen den Mulden 2 und 3 nicht zeitlich konstant. Für $g = 0$ ergibt sich unter Verwendung der Gleichungen (5.7) für die Zeitabhängigkeit von \tilde{j}_{23}

$$\tilde{j}_{23}(t) = \frac{J}{\text{sgn}(\kappa)\sqrt{\gamma^2 - J^2}} (n_2(0) - n_3(0)) \left(e^{2\text{sgn}(\kappa)\sqrt{\gamma^2 - J^2}t} - 1 \right) + \sqrt{1 + \kappa}\sqrt{1 - \kappa}. \quad (5.9)$$

Für die Korrelation c_{23} erhält man $c_{23}(t) = \text{const.} = 0$. Der zeitliche Verlauf beider Größen ist in den Abbildungen 5.1(b) ($\kappa > 0$) und 5.2(b) ($\kappa < 0$) dargestellt.

Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter Unter Verwendung der Zeitabhängigkeit der Besetzungszahlen (5.7) folgen mit den Gleichungen (3.7) und der Phasendifferenzen (3.5) für die Zeitabhängigkeiten der Tunnelraten für $g = 0$

$$J_{12}(t) = \gamma \sqrt{\frac{n_2(t)}{n_3(t)}} = \sqrt{\frac{\gamma n_2(0) \operatorname{Im} \mu e^{2 \operatorname{Im} \mu t}}{n_2(0) (1 - e^{2 \operatorname{Im} \mu t}) + n_1(0)}} \quad (5.10a)$$

und

$$J_{34}(t) = \gamma \sqrt{\frac{n_3(t)}{n_4(t)}} = \sqrt{\frac{\gamma n_3(0) \operatorname{Im} \mu e^{2 \operatorname{Im} \mu t}}{n_3(0) (e^{2 \operatorname{Im} \mu t} - 1) + n_4(0)}}. \quad (5.10b)$$

Für die Zeitabhängigkeiten der Onsite-Energien folgen mit den Gleichungen (3.13) und (3.5)

$$\epsilon_1(t) \stackrel{g=0}{=} -J_{23} \frac{\tilde{j}_{13}}{\tilde{j}_{12}} = -J_{23} \cos(2\varphi_a) \sqrt{\frac{n_3}{n_2}} \stackrel{(5.2)}{=} 0 \quad (5.11)$$

und

$$\epsilon_4(t) \stackrel{g=0}{=} -J_{23} \frac{\tilde{j}_{24}}{\tilde{j}_{34}} = -J_{23} \cos(2\varphi_a) \sqrt{\frac{n_2}{n_3}} \stackrel{(5.2)}{=} 0, \quad (5.12)$$

d.h. die Onsite-Energien sind zeitlich konstant gleich null. Damit können die \mathcal{PT} -brechenden Zustände in den inneren Mulden allein durch zeitliche Anpassung der Tunnelraten eingestellt und aufrecht erhalten werden.

Die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter ist in den Abbildungen 5.1(c) und 5.1(d) ($\kappa > 0$) und 5.2(c) und 5.2(d) ($\kappa < 0$) dargestellt.

Zeitabhängigkeit der Phasen Wertet man die erste Zeile des 4×4 -Matrixmodells (3.1) aus und löst nach ϵ_1 auf, so erhält man

$$\epsilon_1(t) = -\frac{\partial}{\partial t} \varphi_1(t) - g n_1(t). \quad (5.13)$$

Vergleicht man dies mit Gleichung (3.13a), so ergibt sich für die zeitliche Ableitung von φ_1 nach der Zeit

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi_1(t) = 0, \quad (5.14)$$

d.h. es ist $\varphi_1(t) = \text{const.} = \varphi_a - \pi/2$. Auf dieselbe Art und Weise erhält man analog $\varphi_2(t) = \text{const.} = \varphi_a$, $\varphi_3(t) = \text{const.} = -\varphi_a$ und $\varphi_4(t) = \text{const.} = -\varphi_a + \pi/2$. Folglich sind für $g = 0$ die Phasen zeitlich konstant. Die Zeitabhängigkeit der Phasen ist in den Abbildungen 5.1(e) ($\kappa > 0$) und 5.2(e) ($\kappa < 0$) dargestellt.

5. Dynamik \mathcal{PT} -brechender Zustände

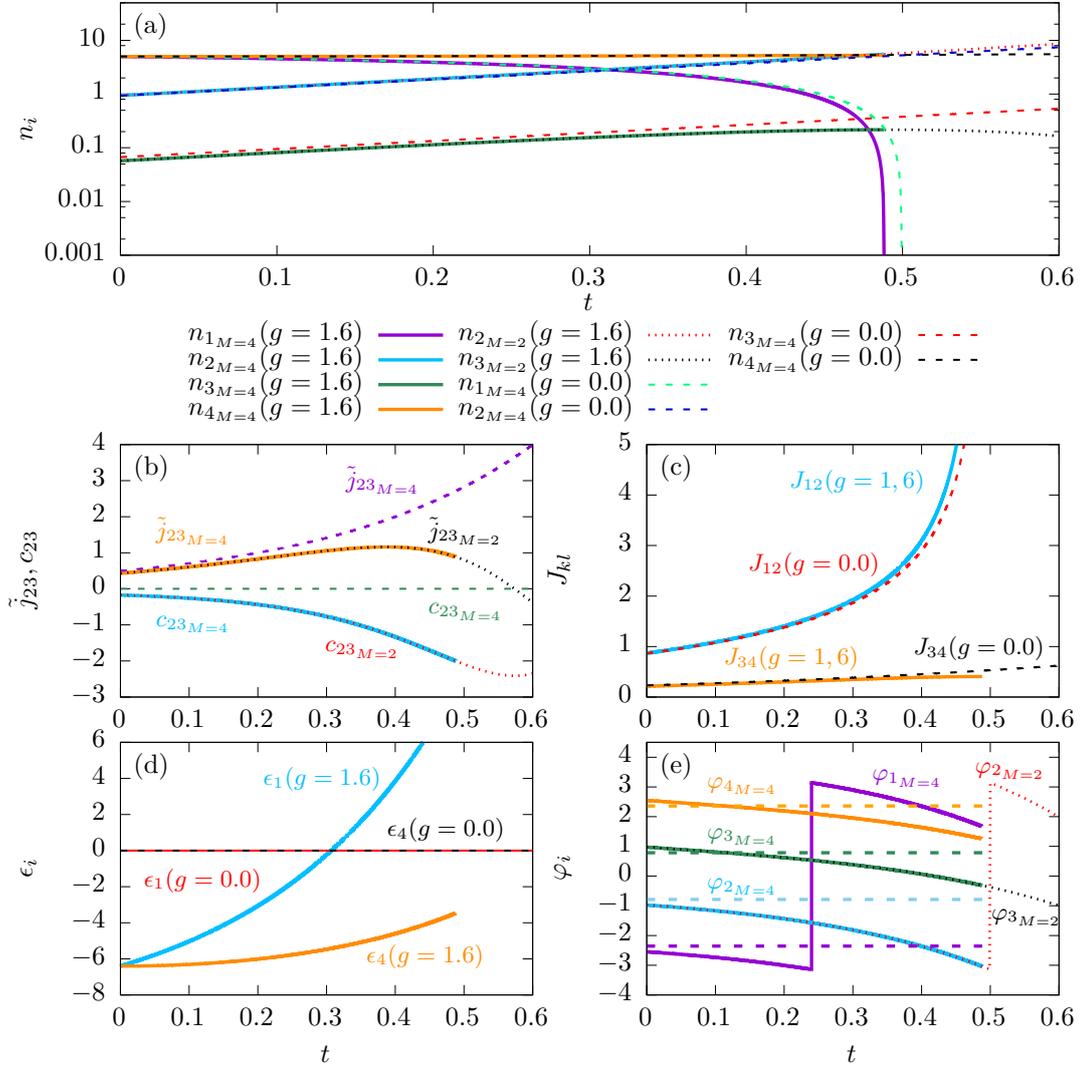


Abbildung 5.1.: Dynamik des Viermulden- (durchgezogene Linien) und des Zweimulden-systems (gepunktet) für die Systemparameter $g = 1.6$, $\gamma = 2.0$, $n = 1$, $n_1(0) = n_4(0) = 10$ und $\kappa > 0$, zum Vergleich analytische Lösung für $g = 0$ (gestrichelt). Dargestellt sind (a) die Besetzungszahlen n_i , (b) die reduzierte Stromdichte \tilde{j}_{23} und die Korrelation c_{23} , (c) die Tunnelraten J_{12} und J_{34} , (d) die Onsite-Energien ϵ_1 und ϵ_4 und (e) die Phasen φ_i in Abhängigkeit der Zeit. Es wurde auf die Teilchenzahl in den inneren Mulden normiert.

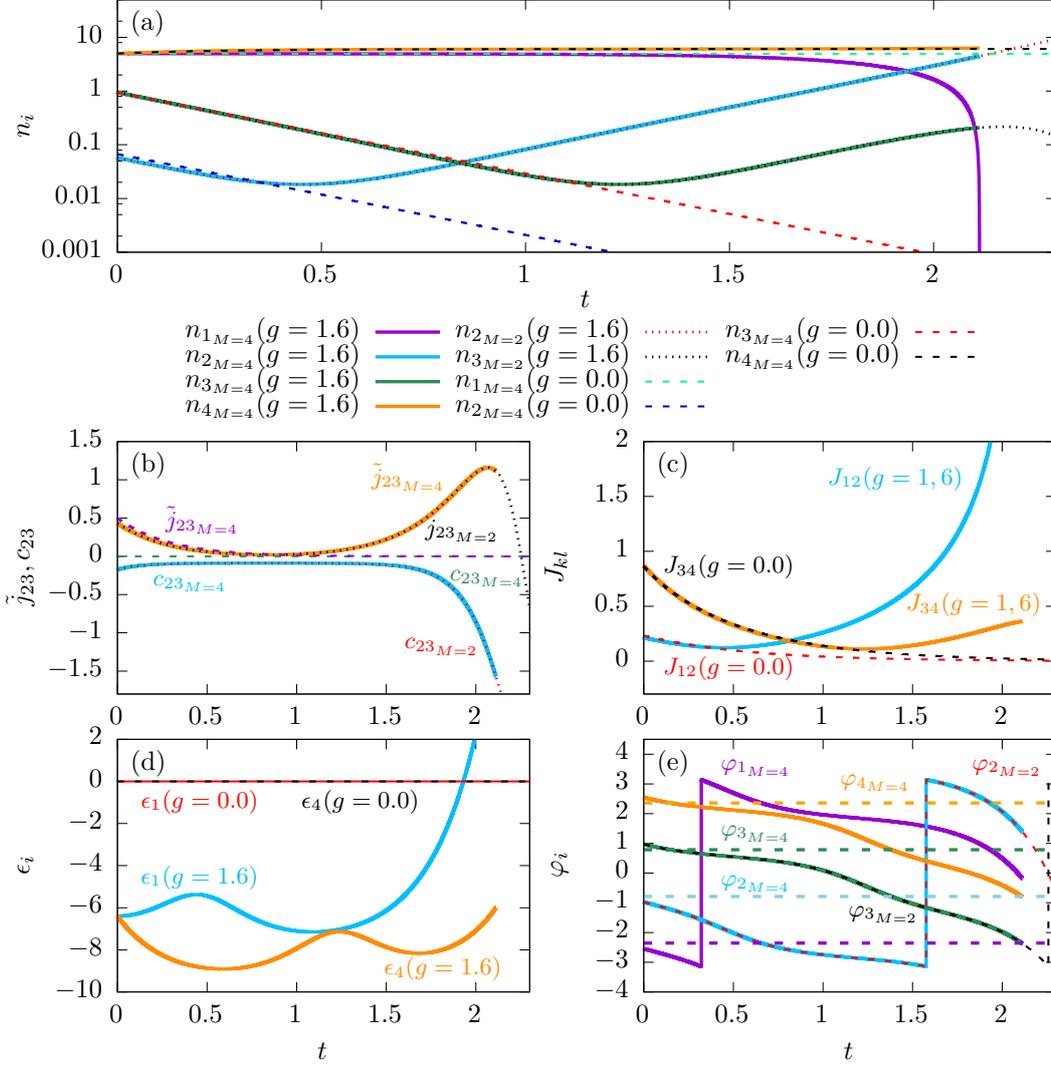


Abbildung 5.2.: Dynamik des Viermulden- (durchgezogene Linien) und des Zweimulden-systems (gepunktet) für die Systemparameter $g = 1.6$, $\gamma = 2.0$, $n = 1$, $n_1(0) = n_4(0) = 10$ und $\kappa < 0$, zum Vergleich analytische Lösung für $g = 0$ (gestrichelt). Dargestellt sind (a) die Besetzungszahlen n_i , (b) die reduzierte Stromdichte \tilde{j}_{23} und die Korrelation c_{23} , (c) die Tunnelraten J_{12} und J_{34} , (d) die Onsite-Energien ϵ_1 und ϵ_4 und (e) die Phasen φ_i in Abhängigkeit der Zeit. Es wurde auf die Teilchenzahl in den inneren Mulden normiert.

5.1.4. Zeitlicher Verlauf der Systemgrößen

Wie in Unterabschnitt 5.1.2 gezeigt wurde, ist es nicht möglich, analytische Ausdrücke für die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter für den Fall einer nicht verschwindenden makroskopischen Wechselwirkungsstärke g zu finden. In diesem Abschnitt wird anhand numerischer Rechnungen gezeigt, dass sich im Mean-Field-Limit im Viermuldensystem die \mathcal{PT} -brechenden Zustände des offenen Zweimuldensystems realisieren lassen.

In Abbildung 5.1 bzw. 5.2 ist die Dynamik des Systems für die beiden \mathcal{PT} -brechenden Zustände mit $\kappa > 0$ bzw. $\kappa < 0$ für die Systemparameter $g = 1.6$ und $\gamma = 2.0$ dargestellt¹. Für die Besetzungszahlen wurden $n(0) = 1$ und $n_1(0) = n_4(0) = 10$ gewählt und anschließend auf die Anzahl der Teilchen in den inneren beiden Mulden normiert, um Vergleichbarkeit mit dem Zweimuldensystem zu gewährleisten. Zusätzlich sind die analytischen Lösungen für $g = 0$ aus Unterabschnitt 5.1.3 dargestellt.

Die Dynamik des Zweimuldensystems ist vollständig charakterisiert durch die Zeitabhängigkeiten $n_2(t)$, $n_3(t)$, $c_{23}(t)$ und $\tilde{j}_{23}(t)$. Die Abbildungen 5.1(a) und 5.1(b) ($\kappa > 0$) und 5.2(a) und 5.2(b) ($\kappa < 0$) zeigen, dass sich in den inneren Mulden des Viermuldensystems durch die Anpassung der Kontrollparameter mit den Zeitabhängigkeiten (3.7) und (3.13) exakt die Zustände des offenen Zweimuldensystems einstellen, da der zeitliche Verlauf der Größen im Viermuldensystem exakt denen im Zweimuldensystem entspricht. Die zentrale Aussage dieses Abschnitts lautet also: Im Mean-Field-Limit lassen sich die \mathcal{PT} -brechenden Zustände (A.19) des Zweimuldensystems im Viermuldensystem unter Verwendung der Gleichungen (3.7) und (3.13) realisieren.

Für $g > 0$ entleeren oder füllen sich die beiden inneren Mulden, je nach Vorzeichen von κ , für kleine t exponentiell. Das System bricht zusammen, wenn die linke Reservoirmulde entleert ist². Wie in den Abbildungen 5.1(c) bzw. 5.2(c) dargestellt, divergiert die Tunnelrate J_{12} sobald sich in der linken Reservoirmulde keine Teilchen mehr befinden, was die Ursache für den Zusammenbruch darstellt. Je nach Vorzeichen von κ lässt sich das System länger ($\kappa < 0$) oder kürzer ($\kappa > 0$) aufrecht erhalten.

In den Abbildungen 5.1(d) bzw. 5.2(d) ist der zeitliche Verlauf der Onsite-Energien dargestellt. Wie schon erwähnt, lassen sich die \mathcal{PT} -brechenden Zustände im Fall einer verschwindenden Wechselwirkung nur mithilfe der Zeitabhängigkeit der Tunnelraten einstellen, für $g > 0$ sind Onsite-Energien, die von null verschieden sind, nötig. Daraus folgt, wie in den Abbildungen 5.1(e) bzw. 5.2(e) dargestellt, dass die Phasen für $g = 0$ zeitlich konstant sind und für $g > 0$ dieselbe Zeitabhängigkeit wie im offenen Zweimuldensystem aufweisen. Die Phasendifferenzen besitzen dabei immer den Wert $\pm\pi/2$, Sprünge zwischen beiden Werten sind möglich.

Insgesamt lässt sich als Ergebnis dieses Abschnitts festhalten, dass sich unter Verwendung der Zeitabhängigkeiten (3.7) und (3.13) für die Kontrollparameter die Dynamik

¹Der Parameter γ ist entsprechend dem Bifurkationsdiagramm A.1 so zu wählen, dass man sich im Bereich der \mathcal{PT} -brechenden Lösungen befindet.

²Man vergleiche dazu die Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des Zweimuldensystems in Abbildung B.1.

der \mathcal{PT} -brechenden Zustände des offenen Zweimuldensystems im Viermuldensystem im Mean-Field realisieren lässt.

5.2. Dynamik im Vielteilchensystem

In diesem Abschnitt wird die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände in der Vielteilchenbeschreibung untersucht. Zu deren Berechnung wird dabei die BBR-Näherung verwendet, d.h. für vier Mulden müssen die 272 gekoppelten Differentialgleichungen (4.12) und (4.16) numerisch gelöst werden. Um dies effizient durchzuführen, wurde die Programmiersprache C++ verwendet, die Integrationen wurden mit einer hinsichtlich dessen optimierten Fortran-Bibliothek durchgeführt. Details zur Implementierung sind in Anhang E.1 zu finden.

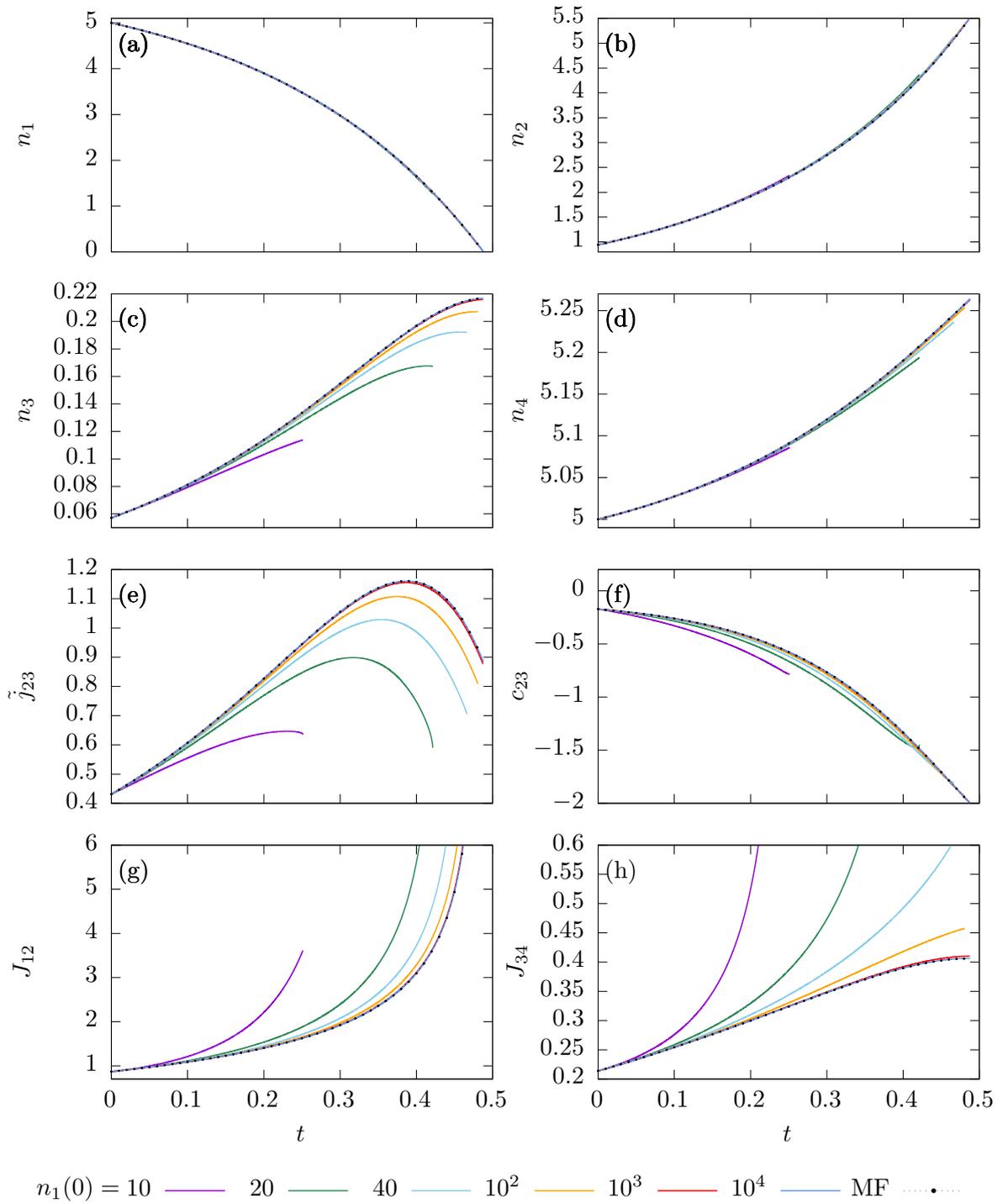
Die in Unterabschnitt 4.2.5 hergeleiteten Gleichungen der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter im Vielteilchensystem gelten nur für Mean-Field-artige (d.h. reine) Zustände. Nach einem, auch in Unterabschnitt 4.2.4 verwendeten, Vorschlag von Dast [26] werden als Anfangswerte für die BBR-Methode der in Gleichung (4.26) dargestellte Ausdruck für die erste Ordnung und der Ausdruck (4.28) für die zweite Ordnung gewählt. Damit die Ergebnisse der Rechnung für das Vielteilchensystem mit den Ergebnissen im Mean-Field verglichen werden können, ist es nötig, den Wert für die mikroskopische Kontaktwechselwirkung U so zu wählen, dass zwischen der makroskopischen Wechselwirkungsstärke g und U der Zusammenhang [26]

$$U = \frac{g}{N_2 - 1} \quad (5.15)$$

besteht, wobei N_2 die Anzahl der Teilchen in den inneren beiden Mulden bezeichnet.

Die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände im Vielteilchensystem, berechnet mithilfe der BBR-Näherung, ist in Abbildung 5.3 für $\kappa > 0$ und in Abbildung 5.4 für $\kappa < 0$ dargestellt. Die verschiedenen Kurven zeigen die Dynamik für verschiedene Gesamtteilchenzahlen N_{ges} im System, das Verhältnis zwischen $n_1(0) = n_4(0)$ und $n(0)$ ist dabei konstant und $n_1(0)/n(0) = 10$, d.h. in den Reservoirmulden befinden sich zum Anfangszeitpunkt zehnmal so viele Teilchen wie in den inneren Mulden. Zum Vergleich ist die entsprechende Dynamik im Mean-Field aufgetragen.

Es zeigt sich, dass der zeitliche Verlauf der Besetzungszahlen vor allem für geringe Gesamtteilchenzahlen teilweise stark vom gewünschten Verhalten (gestrichelt in den Abbildungen 5.3(a-d) bzw. 5.4(a-d)) abweicht. Ein Vergleich der charakteristischen Größen $n_2(t)$ und $n_3(t)$ (siehe Abbildungen 5.3(b-c) bzw. 5.4(b-c)) und $\tilde{j}_{23}(t)$ sowie $c_{23}(t)$ (siehe Abbildungen 5.3(e-f) bzw. Abbildungen 5.4(e-f)) des Viermuldensystems in der Vielteilchenbeschreibung mit denen des Zweimuldensystems (Mean-Field, gestrichelt) zeigt, dass der zeitliche Verlauf nicht übereinstimmt. Folglich lässt sich das Verhalten der \mathcal{PT} -brechenden Zustände des offenen Zweimuldensystems im Viermulden-Vielteilchensystem auf die oben beschriebene Art und Weise nicht realisieren.



Teil 1 von Abbildung 5.3. Beschreibung siehe Seite 45.

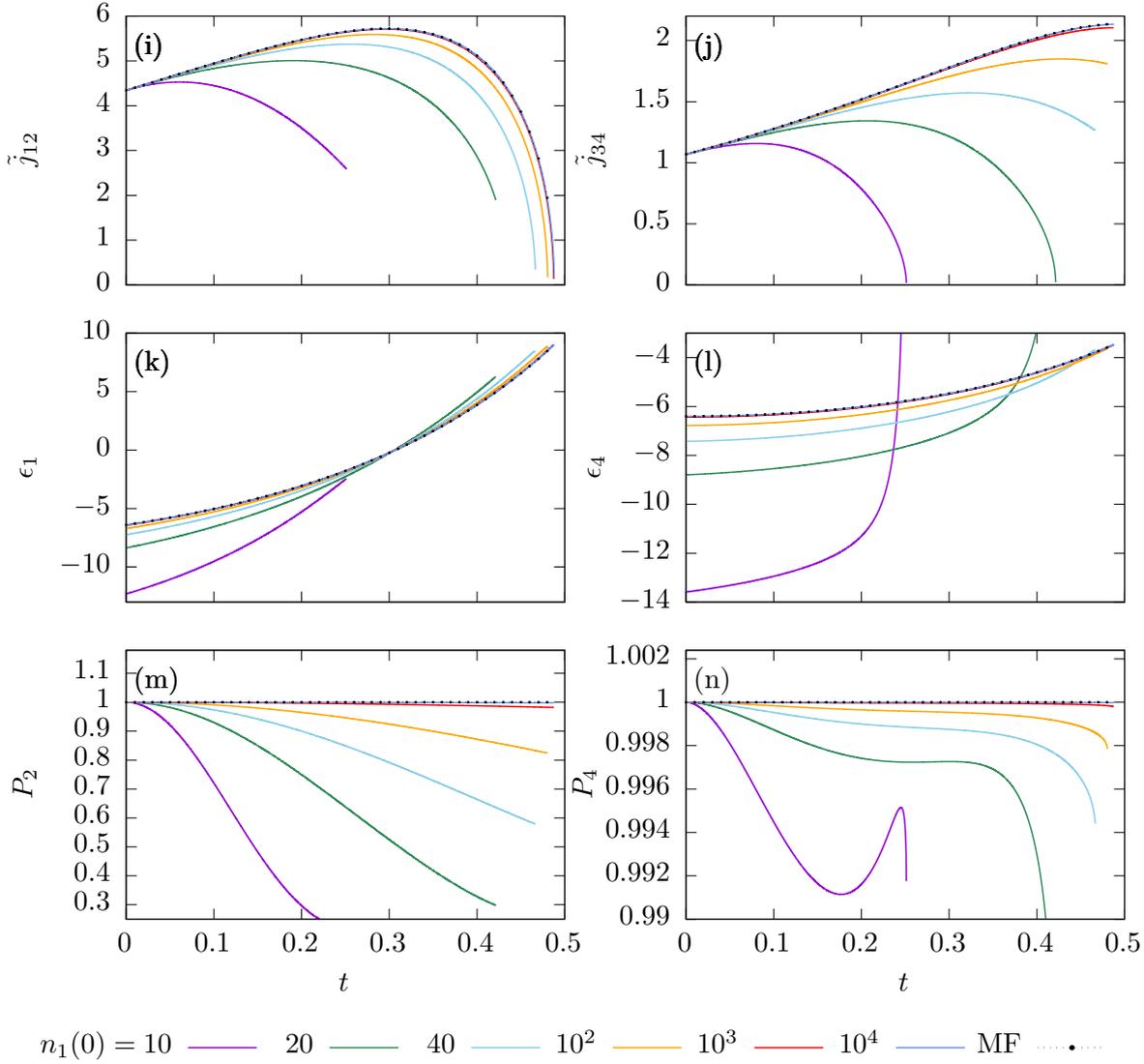
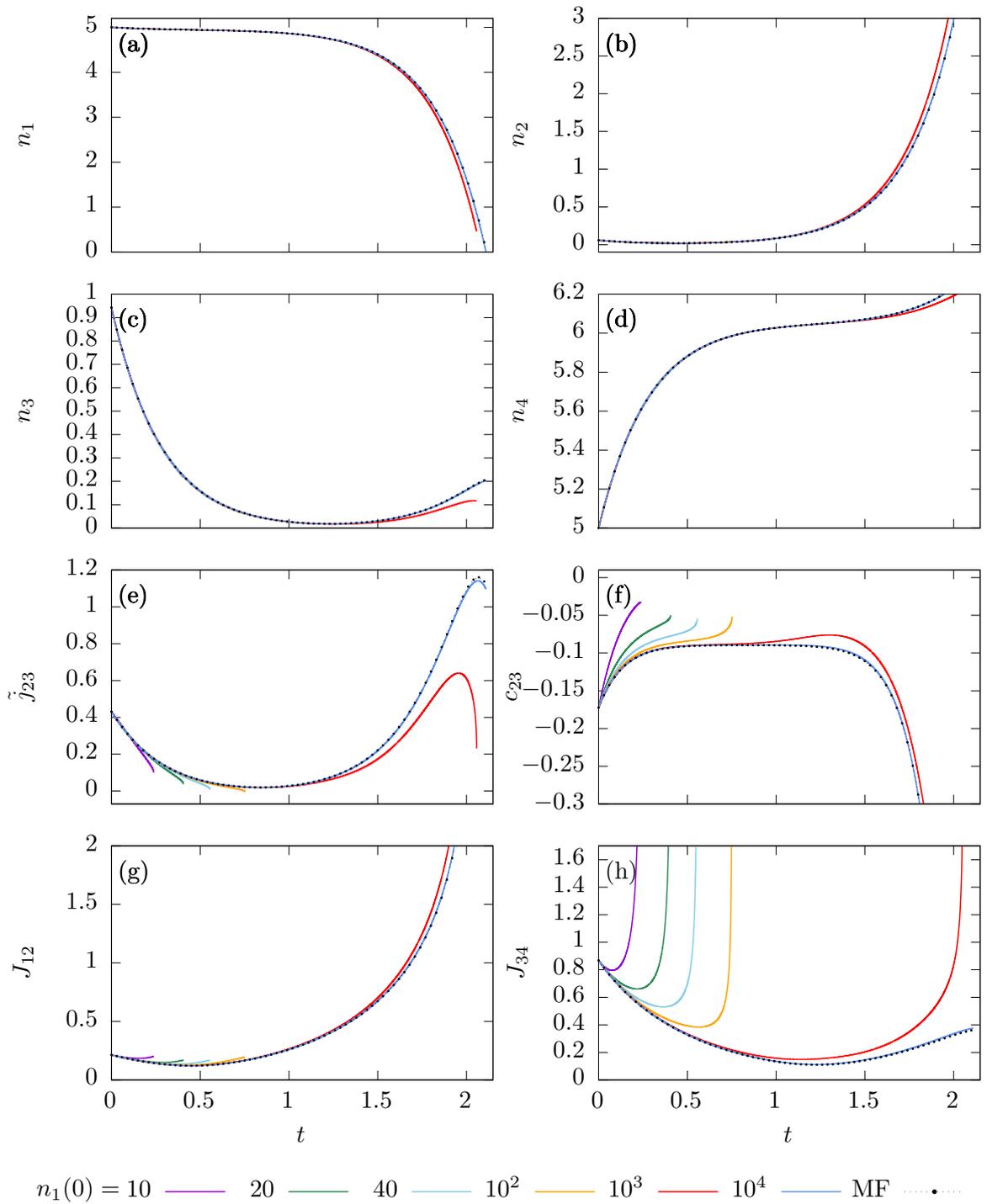


Abbildung 5.3.: Dynamik des \mathcal{PT} -brechenden Zustands mit $\kappa > 0$ im Vielteilchensystem, berechnet mit der BBR-Methode, den Anfangswerten (4.26) und (4.28) und den Zeitabhängigkeiten (4.33) und (4.34) der Kontrollparameter. Die verschiedenen Kurven zeigen die Dynamik für verschiedene Gesamtteilchenzahlen N_{ges} im System, mit $n_1(0) = n_4(0)$ und festem Verhältnis $n_1(0)/n(0) = 10$ zwischen der Teilchenzahl in den Reservoirmulden zu der Teilchenzahl in Systemmulden. Es sind die Zeitabhängigkeiten (a-d) der Besetzungszahlen n_i , (e-f) der Elemente \tilde{j}_{23} und c_{23} , (g-h) der Tunnelraten, (i-j) der Elemente \tilde{j}_{12} , \tilde{j}_{34} , (k-l) der Onsite-Energien und (m-n) der Reinheiten P_2 und P_4 dargestellt. Teil 1 dieser Abbildung befindet sich auf Seite 44.



Teil 1 von Abbildung 5.4. Beschreibung siehe Seite 47.

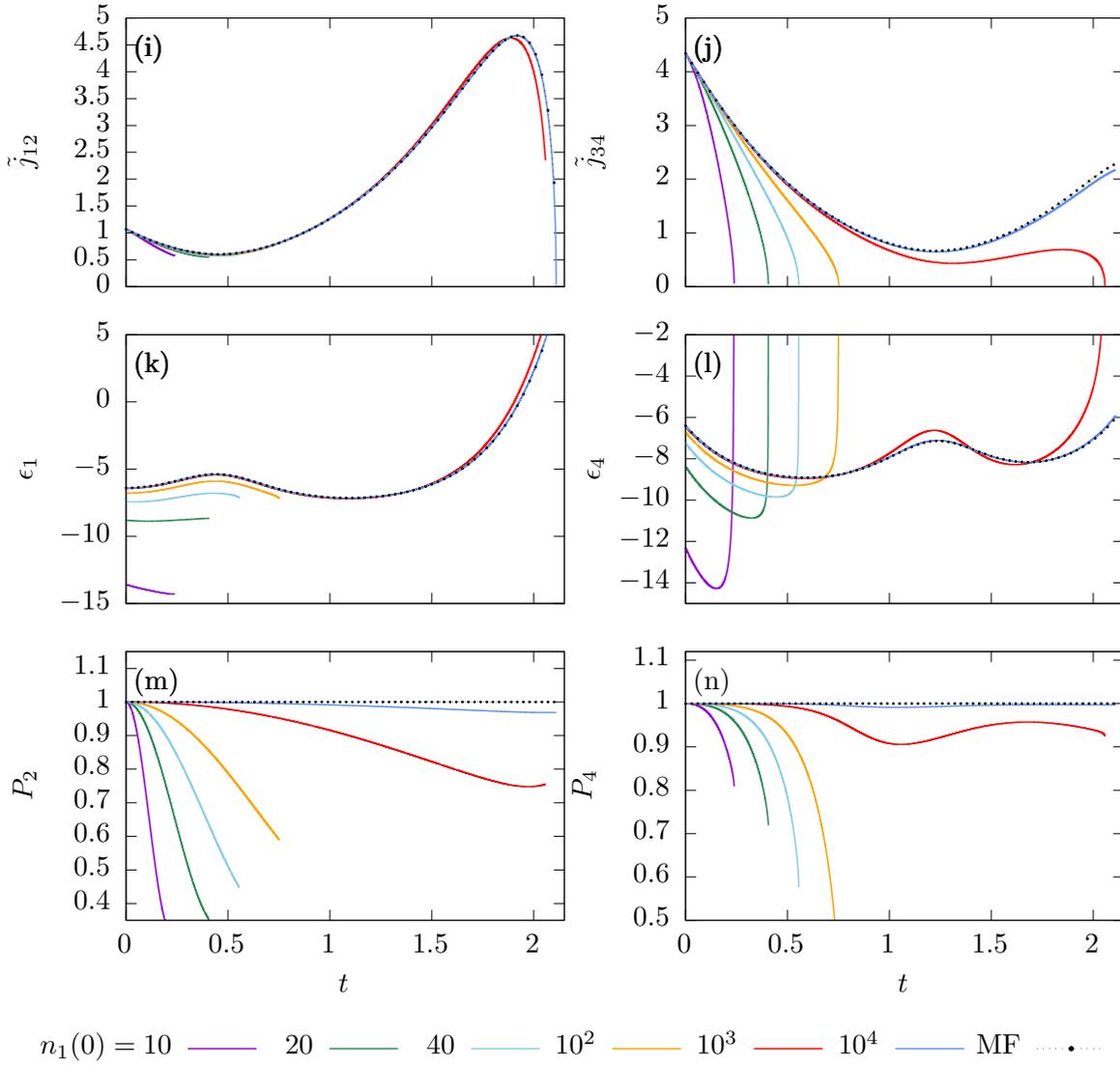


Abbildung 5.4.: Dynamik des \mathcal{PT} -brechenden Zustands mit $\kappa < 0$ im Vielteilchensystem, berechnet mit der BBR-Methode, den Anfangswerten (4.26) und (4.28) und den Zeitabhängigkeiten (4.33) und (4.34) der Kontrollparameter. Die verschiedenen Kurven zeigen die Dynamik für verschiedene Gesamtteilchenzahlen N_{ges} im System, mit $n_1(0) = n_4(0)$ und festem Verhältnis $n_1(0)/n(0) = 10$ zwischen den Teilchenzahlen in den Reservoirmulden zu der Teilchenzahl in Systemmulden. Es sind die Zeitabhängigkeiten (a-d) der Besetzungszahlen n_i , (e-f) der Elemente \tilde{j}_{23} und c_{23} , (g-h) der Tunnelraten, (i-j) der Elemente \tilde{j}_{12} , \tilde{j}_{34} , (k-l) der Onsite-Energien und (m-n) der Reinheiten P_2 und P_4 dargestellt. Teil 1 dieser Abbildung befindet sich auf Seite 46.

Anders als im Mean-Field bricht das System in der Vielteilchenbeschreibung schon vor der Entleerung der linken Reservoirmulde zusammen (siehe Abbildung 5.3(a) bzw. 5.4(a)). Je geringer die Gesamtteilchenzahl im System, desto kleiner ist der Zeitbereich, in dem das System aufrecht erhalten werden kann.

Wie aus den Abbildungen 5.3(g-h) bzw. 5.4(g-h) hervorgeht, divergiert, je nach Gesamtteilchenzahl, entweder die Tunnelrate J_{12} (größere Gesamtteilchenzahlen) oder J_{34} (kleinere Gesamtteilchenzahlen). Dies ist darauf zurückzuführen, dass entweder \tilde{j}_{12} (kleinere Gesamtteilchenzahlen) oder \tilde{j}_{34} (größere Gesamtteilchenzahlen) gegen null geht (siehe Abbildungen 5.3(i-j) bzw. 5.4(i-j)). Aus demselben Grund divergieren auch ϵ_1 und ϵ_4 (siehe Abbildungen 5.3(k-l) bzw. 5.4(k-l)). Deutlich erkennbar ist, dass die Dynamik für große Gesamtteilchenzahlen N_{ges} in den Mean-Field-Grenzfall übergeht.

Durch den Einfluss der Kontaktwechselwirkung U nimmt die Reinheit des Zustands im Laufe der Zeit ab, wie die Abbildungen 5.3(m-n) bzw. 5.4(m-n) zeigen. Die gewählten Anfangszustände (4.26) bzw. (4.28) sind reine Zustände. Besonders für geringe Teilchenzahlen nimmt deren Reinheit schnell ab, was wiederum zur Folge hat, dass die Anpassungen (4.34) eigentlich nicht mehr verwendet werden können, da sie nur für reine Zustände Gültigkeit besitzen. Somit erhält man Abweichungen vom gewünschten Verhalten, da die Annahmen, die zu den Gleichungen (4.34) geführt haben, schon nach kurzer Zeit nicht mehr erfüllt sind. Es zeigt sich, dass die Verwendung reiner Anfangszustände und daraus folgend auch die Verwendung der Zeitabhängigkeiten (4.34) nicht dazu geeignet sind, das Verhalten des offenen Zweimuldensystems im Vielteilchensystem einzustellen.

Als Ergebnis dieses Abschnitts lässt sich festhalten, dass sich das Verhalten der \mathcal{PT} -brechenden Zustände des offenen Zweimuldensystems im Vielteilchensystem mithilfe der Zeitabhängigkeiten (4.33) und (4.34) und reiner Anfangszustände (4.26) bzw. (4.28) nicht realisieren lässt. In [33] wurde auf ähnliche Art und Weise versucht, die \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des Zweimuldensystems im Vielteilchensystem einzustellen. Durch Korrekturen zu den Gleichungen (4.34) lässt sich zwar erreichen, dass die Besetzungszahlen n_2 und n_3 und der Strom j_{23} stationär bleiben, für die Korrelation c_{23} lässt sich das korrekte Verhalten jedoch nicht mehr erzeugen.

Dies legt den Schluss nahe, dass eine vollkommen andere Herangehensweise nötig ist, um das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des Zweimuldensystems und auch das der \mathcal{PT} -brechenden Zustände im Vielteilchensystem zu realisieren. Im folgenden Kapitel wird eine Methode entwickelt, mit der sich dies für die \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände unter Verwendung *unreiner* Anfangszustände und Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter, die sich von den bisher verwendeten Gleichungen unterscheiden, erreichen lässt.

6. Dynamik unreiner Anfangszustände

In diesem Kapitel wird ein Verfahren vorgestellt, mit dem sich die Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems im Vielteilchensystem einstellen lässt.

In Kapitel 5 wurde gezeigt, dass sich die \mathcal{PT} -brechenden Zustände des offenen Zweimuldensystems im Vielteilchensystem mithilfe der bisher verwendeten Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter und reinen Anfangszuständen nicht einstellen lassen, dasselbe gilt für die \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände [33]. In letzterem Fall lässt sich im Vielteilchensystem auf diese Art und Weise lediglich die Stationarität der Besetzungszahlen n_2 und n_3 und die der reduzierten Stromdichte \tilde{j}_{23} erreichen, für die Korrelation c_{23} lässt sich das gewünschte Verhalten nicht mehr erzeugen. Grob gesagt bedeutet dies, dass eine der vier Bedingungen aufgegeben werden musste.

Insgesamt legt dies den Schluss nahe, dass eine vollkommen andere Herangehensweise nötig ist, um das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände im Vielteilchensystem zu realisieren. Aufgrund der im Vielteilchensystem vorhandenen Kontaktwechselwirkung stellen reine Zustände als Anfangszustände keine ideale Wahl dar. In dieser Arbeit wird daher der Ansatz verfolgt, *unreine* Anfangszustände zur Realisierung der Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände im Vielteilchensystem zu verwenden.

Die Zeitabhängigkeiten (4.34) für die Onsite-Energien gelten nur für reine Zustände. In Abschnitt 6.1 werden daher zunächst, ausgehend vom Zweimuldensystem in der Mean-Field-Beschreibung, Gleichungen für die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter hergeleitet, mit welchen sich auch die Dynamik unreiner Anfangszustände bestimmen lässt. Die Gleichungen beinhalten auch den Grenzfall reiner Zustände, der in Abschnitt 6.2 kurz diskutiert wird. Da ein unreiner Zustand sehr viele Freiheitsgrade besitzt, drängt sich die Frage auf, wie passende *physikalische* unreine Anfangszustände konstruiert werden können, die in der Dynamik das gewünschte Verhalten zeigen. Dies wird in Abschnitt 6.3 erläutert. In Unterabschnitt 6.3.3 wird das wesentliche Vorgehen bei der Implementierung zusammengefasst und Abschnitt 6.4 beinhaltet schließlich eine Diskussion der numerischen Ergebnisse.

6.1. Herleitung der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter

Wie schon erwähnt, gelten die Zeitabhängigkeiten (4.34) für die Onsite-Energien nur für reine Zustände, da dies, wie in Unterabschnitt 4.2.5 dargestellt, explizit in deren Herlei-

tung eingeht. Sofern der betrachtete Anfangszustand im Laufe der Zeit an Reinheit verliert, führt dies natürlich zu einer Abweichung vom gewünschten Verhalten. Zur Behandlung unreiner Anfangszustände sind daher andere Gleichungen nötig. Da keine der bisher diskutierten Ergebnisse weiterhin verwendet werden können, empfiehlt es sich, noch einmal an den Ausgangspunkt zurückzukehren. Ausgangspunkt zur Bestimmung der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter ist somit das offene Zweimuldensystem in der Mean-Field-Beschreibung. Zur Beschreibung des Viermulden-Vielteilchensystems wird wieder die BBR-Näherung verwendet. Im Folgenden wird die Dynamik des offenen Systems in der Mean-Field-Beschreibung mit der Dynamik des Viermuldensystems in der Vielteilchenbeschreibung verglichen, wodurch Terme für die Zeitabhängigkeit der Tunnelraten und der Onsite-Energien gefunden werden können.

6.1.1. Dynamik der Einteilchendichtematrix im Zweimulden- und Viermuldensystem

Ziel ist es weiterhin, dass das offene Zweimuldensystem und die inneren beiden Mulden des Viermuldensystems dieselbe Dynamik aufweisen, d.h. das Verhalten des offenen Systems soll sich durch Hinzunahme der Reservoirmulden simulieren lassen können. Durch Vergleich der Dynamik können Forderungen an die einstellbaren Parameter $J_{12}(t)$ und $J_{34}(t)$, wie auch an $\epsilon_1(t)$ und $\epsilon_4(t)$, gestellt werden.

Die Dynamik des Vielteilchensystems wird durch die Ein- und Zweiteilchendichtematrizen beschrieben, die des offenen Zweimuldensystems hingegen durch Mean-Field-Wellenfunktionen. Will man die Dynamik vergleichen, muss man die Dynamik der Einteilchendichtematrizen für das offene System bestimmen. In diesem Abschnitt soll die Dynamik der Einteilchendichtematrizen für beide Systeme zur späteren Verwendung explizit dargestellt werden.

In der BBR-Näherung wird die Dynamik in der niedrigsten Ordnung durch die Einteilchendichtematrix σ_{kl} beschrieben. Im Mean-Field lassen sich deren Koeffizienten als Produkt der Mean-Field-Koeffizienten ψ_i darstellen, d.h. es ist $\sigma_{kl} = \psi_k^* \psi_l$ und somit gilt für die Zeitableitung der Elemente der Einteilchendichtematrix

$$\dot{\sigma}_{kl} = \dot{\psi}_k^* \psi_l + \psi_k^* \dot{\psi}_l. \quad (6.1)$$

Grundlage zur Beschreibung der Dynamik des offenen Zweimuldensystems im Mean-Field ist die Gross-Pitaevskii-Gleichung (3.2). Mit ihr ergeben sich für das offene Zweimuldensystem

$$\dot{\sigma}_{22} = 2\gamma\sigma_{22} - 2J_{23} \text{Im}(\sigma_{23}), \quad (6.2)$$

$$\dot{\sigma}_{23} = -iJ_{23}(\sigma_{33} - \sigma_{22}) + i g \sigma_{23} (|\psi_2|^2 - |\psi_3|^2) \quad (6.3)$$

und

$$\dot{\sigma}_{33} = -2\gamma\sigma_{33} + 2J_{23} \text{Im}(\sigma_{23}). \quad (6.4)$$

Dieselben Größen sind für das Viermulden-Vielteilchensystem durch Gleichung (4.12) gegeben. Man erhält

$$\dot{\sigma}_{22} = 2J_{12} \operatorname{Im}(\sigma_{12}) - 2J_{23} \operatorname{Im}(\sigma_{23}), \quad (6.5)$$

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{23} = & -iJ_{23}(\sigma_{33} - \sigma_{22}) + iJ_{34}\sigma_{24} - iJ_{12}\sigma_{13} \\ & + iU_2(\sigma_{2223} - \sigma_{23}) - iU_3(\sigma_{2333} - \sigma_{23}) \end{aligned} \quad (6.6)$$

und

$$\dot{\sigma}_{33} = 2J_{23} \operatorname{Im}(\sigma_{23}) - 2J_{34} \operatorname{Im}(\sigma_{34}). \quad (6.7)$$

6.1.2. Zeitabhängigkeit der Tunnelraten

Zunächst sollen Ausdrücke für die Zeitabhängigkeit der Tunnelraten J_{12} und J_{34} bestimmt werden, welche direkt aus Vergleich der Terme in Gleichung (6.2) mit denen in Gleichung (6.5) bzw. aus Vergleich der Gleichungen (6.4) und (6.7) folgen. Man findet so

$$J_{12}(t) = \frac{2\gamma n_2(t)}{\tilde{j}_{12}(t)} \quad (6.8a)$$

und

$$J_{34}(t) = \frac{2\gamma n_3(t)}{\tilde{j}_{34}(t)}. \quad (6.8b)$$

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass sich diese Gleichungen nicht von denen in Abschnitt 4.2.5 unterscheiden und auch für unreine Anfangszustände gelten.

6.1.3. Zeitabhängigkeit der Onsite-Energien

Um das Viermulden-System vollständig festzulegen, müssen nun noch Ausdrücke für die Zeitabhängigkeit der beiden Onsite-Energien ϵ_1 und ϵ_4 gefunden werden. Im Folgenden wird erläutert, wie diese aus Vergleich der Gleichungen (6.3) und (6.6) gewonnen werden können.

Werden die Gleichungen (6.3) und (6.6) verglichen, so folgt, dass die Summe der Terme, die σ_{13} und σ_{24} enthalten, verschwinden muss¹, d.h. es muss

$$-J_{12}\sigma_{13} + J_{34}\sigma_{24} = 0 \quad (6.9)$$

gelten. Die Forderung (6.9) stellt dabei eine komplexe Gleichung dar, aus der zwei reelle Größen, nämlich die beiden Onsite-Energien ϵ_1 und ϵ_4 , bestimmt werden können.

¹Anschaulich ist dies so zu verstehen, dass die Reservoirmulden im offenen Zweimuldensystem nicht vorhanden sind und diese folglich in der GPE (3.2) nicht auftreten. Die Terme in den Gleichungen (6.3) und (6.6), welche die Wechselwirkung (beschrieben durch g bzw. U) enthalten, entsprechen sich jeweils und werden daher nicht weiter berücksichtigt.

Durch eine geeignete Wahl der Anfangswerte für σ_{kl} kann die Forderung (6.9) für den Anfangszeitpunkt $t = 0$ erfüllt werden. Um sicherzustellen, dass die Forderung (6.9) für alle Zeiten t erfüllt bleibt, muss die Ableitung von Gleichung (6.9) nach der Zeit verschwinden, d.h. es muss

$$-\left(\frac{\partial}{\partial t} J_{12}\right) \sigma_{13} - J_{12} \dot{\sigma}_{13} + \left(\frac{\partial}{\partial t} J_{34}\right) \sigma_{24} + J_{34} \dot{\sigma}_{24} = 0 \quad (6.10)$$

gelten². Der Übersichtlichkeit halber sollen zunächst die Zeitableitungen von J_{12} , J_{34} , σ_{13} und σ_{24} separat aufgeführt werden. Dazu müssen die Ableitungen von σ_{kl} , \tilde{j}_{kl} und c_{kl} bestimmt werden, welche sich mit Gleichung (4.12) und den Abkürzungen (4.13) und (4.14) zu

$$\dot{\sigma}_{kl} = -iZ_{kl} + i(\epsilon_k - \epsilon_l) \sigma_{kl}, \quad (6.11)$$

$$\dot{\tilde{j}}_{kl} = -X_{kl} + (\epsilon_k - \epsilon_l) c_{kl} \quad (6.12)$$

und

$$\dot{c}_{kl} = Y_{kl} - (\epsilon_k - \epsilon_l) \tilde{j}_{kl} \quad (6.13)$$

ergeben. Unter Verwendung der Beziehungen (6.8a), (6.8b), (4.31) und (6.11)-(6.13) ergibt sich für die einzelnen Terme in Gleichung (6.10)

$$\frac{\partial}{\partial t} J_{12} = J_{12} \left(-\frac{iX_{22}}{2n_2} + \frac{Y_{22}}{2n_2} + \frac{X_{12}}{\tilde{j}_{12}} - \frac{c_{12}\epsilon_1}{\tilde{j}_{12}} \right), \quad (6.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} J_{34} = J_{34} \left(-\frac{iX_{33}}{2n_3} + \frac{Y_{33}}{2n_3} + \frac{X_{34}}{\tilde{j}_{34}} - \frac{c_{34}\epsilon_4}{\tilde{j}_{34}} \right), \quad (6.15)$$

$$\dot{\sigma}_{13} = \frac{1}{2} (-iX_{13} + Y_{13} + i\epsilon_1 c_{13} - \epsilon_1 \tilde{j}_{13}) \quad (6.16)$$

und

$$\dot{\sigma}_{24} = \frac{1}{2} (-iX_{24} + Y_{24} - i\epsilon_4 c_{24} + \epsilon_4 \tilde{j}_{24}). \quad (6.17)$$

Werden die Gleichungen (6.14)-(6.17) in die Forderung (6.10) eingesetzt, Real- und Imaginärteil getrennt und anschließend die resultierenden Terme sortiert, so erhält man ein lineares Gleichungssystem in ϵ_1 und ϵ_4 , welches die Form

$$\alpha_r \epsilon_1 + \beta_r \epsilon_4 = \Omega_r, \quad (6.18a)$$

$$\alpha_i \epsilon_1 + \beta_i \epsilon_4 = \Omega_i \quad (6.18b)$$

²Bemerkung: Die einfachste Möglichkeit, Gleichung (6.10) zu erfüllen, wäre, die triviale Lösung von Gleichung (6.9) zu verwenden und $\dot{\sigma}_{13} = 0$ und $\dot{\sigma}_{24} = 0$ zu fordern. Auf diese Art und Weise lassen sich jedoch keine Gleichungen für die Onsite-Energien ϵ_1 und ϵ_4 ableiten.

besitzt. Die zugehörigen Koeffizienten sind durch

$$\alpha_r = \frac{1}{2} J_{12} \left(\frac{c_{12} c_{13}}{\tilde{j}_{12}} + \tilde{j}_{13} \right), \quad (6.19)$$

$$\beta_r = \frac{1}{2} J_{34} \left(\frac{c_{34} c_{24}}{\tilde{j}_{34}} + \tilde{j}_{24} \right), \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} \Omega_r = & \frac{1}{2} J_{12} \left(\frac{Y_{22} c_{13}}{2n_2} + \frac{X_{12} c_{13}}{\tilde{j}_{12}} + \frac{X_{22} \tilde{j}_{13}}{2n_2} + Y_{13} \right) \\ & - \frac{1}{2} J_{34} \left(\frac{Y_{33} c_{24}}{2n_3} + \frac{X_{34} c_{24}}{\tilde{j}_{34}} + \frac{X_{33} \tilde{j}_{24}}{2n_3} + Y_{24} \right), \end{aligned} \quad (6.21)$$

$$\alpha_i = \frac{1}{2} J_{12} \left(\frac{c_{12} \tilde{j}_{13}}{\tilde{j}_{12}} - c_{13} \right), \quad (6.22)$$

$$\beta_i = \frac{1}{2} J_{34} \left(\frac{c_{34} \tilde{j}_{24}}{\tilde{j}_{34}} - c_{24} \right) \quad (6.23)$$

und

$$\begin{aligned} \Omega_i = & \frac{1}{2} J_{12} \left(-\frac{X_{22} c_{13}}{2n_2} + \frac{Y_{22} \tilde{j}_{13}}{2n_2} + \frac{X_{12} \tilde{j}_{13}}{\tilde{j}_{12}} - X_{13} \right) \\ & - \frac{1}{2} J_{34} \left(-\frac{X_{33} c_{24}}{2n_3} + \frac{Y_{33} \tilde{j}_{24}}{2n_3} + \frac{X_{34} \tilde{j}_{24}}{\tilde{j}_{34}} - X_{24} \right) \end{aligned} \quad (6.24)$$

gegeben.

Das Gleichungssystem (6.18) stellt ein zweidimensionales, lineares Gleichungssystem dar. Ein solches lineares Gleichungssystem besitzt genau dann eine eindeutige Lösung, wenn die Determinante d der Koeffizientenmatrix ungleich null ist. Diese Determinante ist für das System (6.18) gegeben durch

$$d = \alpha_r \beta_i - \beta_r \alpha_i. \quad (6.25)$$

Ist $d \neq 0$, so besitzt das Gleichungssystem (6.18) eine eindeutige Lösung, andernfalls unendlich viele Lösungen oder keine Lösung³. Für den Fall, dass $d \neq 0$ gilt, ist die eindeutige Lösung des Gleichungssystems (6.18) gegeben durch

$$\epsilon_1 = \frac{\beta_i \Omega_r - \beta_r \Omega_i}{\alpha_r \beta_i - \beta_r \alpha_i}, \quad (6.26a)$$

³Bemerkung: Falls $d = 0$ gilt, so hängt die Anzahl der Lösungen von den Werten der Nebendeterminanten ab. Haben alle Nebendeterminanten den Wert null, so besitzt das Gleichungssystem unendlich viele Lösungen, ansonsten keine Lösung.

$$\epsilon_4 = -\frac{(\alpha_i \Omega_r - \alpha_r \Omega_i)}{\alpha_r \beta_i - \beta_r \alpha_i}. \quad (6.26b)$$

Somit sind Ausdrücke für die Zeitabhängigkeit der Onsite-Energien ϵ_1 und ϵ_4 durch die Gleichungen (6.26) mit den Koeffizienten (6.19) - (6.24) gegeben, sofern die Determinante der Koeffizientenmatrix ungleich null ist. Unter dieser Bedingung existiert eine eindeutige Vorschrift zur Bestimmung der Onsite-Energien des Viermulden-Vielteilchensystems. Wie im Folgenden erläutert werden wird, ist die Eindeutigkeit der Onsite-Energien für unreine Anfangszustände gegeben, für den Grenzfall reiner Anfangszustände werden die Gleichungen (6.18) linear abhängig und es existieren unendlich viele Lösungen für ϵ_1 und ϵ_4 .

6.2. Grenzfall reiner Anfangszustände

Im Grenzfall reiner Anfangszustände sind die Elemente der Einteilchendichtematrix in der Form $\sigma_{kl} = \psi_k^* \psi_l$ darstellbar. Wie bereits oben erwähnt, besitzt ein lineares Gleichungssystem genau dann eine eindeutige Lösung, wenn die Determinante der Koeffizientenmatrix ungleich null ist. Wertet man den Nenner in den Gleichungen (6.26a) und (6.26b) für den Spezialfall reiner Zustände aus, so erhält man als Resultat einer länglichen Rechnung, die hier nicht dargestellt werden soll, dass

$$\alpha_r \beta_i - \beta_r \alpha_i = 0, \quad (6.27)$$

gilt, d.h. die Determinante verschwindet. Wertet man zudem die Zähler in den Gleichungen (6.26a) und (6.26b) für reine Zustände aus, so erhält man

$$\beta_i \Omega_r - \beta_r \Omega_i = 0 \quad (6.28a)$$

und

$$\alpha_i \Omega_r - \alpha_r \Omega_i = 0. \quad (6.28b)$$

Somit ist $\alpha_i/\alpha_r = \beta_i/\beta_r = \Omega_i/\Omega_r$. Das lineare Gleichungssystem (6.18) wird folglich für den Fall reiner Zustände linear abhängig, d.h. statt einer eindeutigen Lösung existieren nun unendlich viele Lösungen für ϵ_1 und ϵ_4 . Die Eindeutigkeit der Lösungen geht also im Grenzfall reiner Zustände verloren. Es verbleibt eine Gleichung der Form

$$A\epsilon_1 + B\epsilon_4 = C, \quad (6.29)$$

jedoch verbleiben zwei daraus zu bestimmende reelle Parameter ϵ_1 und ϵ_4 . Daraus ergibt sich, dass nun eine zeitabhängige Funktion $F(t)$ zur Verfügung steht, die frei gewählt werden kann. Es gibt im Grenzfall reiner Anfangszustände demnach unendlich viele Möglichkeiten, die Onsite-Energien zu wählen. Eine mögliche Wahl wäre z.B.

$$\epsilon_1 = \frac{-F(t) + \frac{1}{2}\Omega_r}{\alpha_r} \quad (6.30a)$$

und

$$\epsilon_4 = \frac{F(t) + \frac{1}{2}\Omega_r}{\beta_r}, \quad (6.30b)$$

d.h. in diesem Fall wurden ϵ_1 und ϵ_4 symmetrisch gewählt. Ein anderer Vorschlag wäre die Wahl

$$\epsilon_1 = \frac{-F_2(t) + \Omega_{12}}{\alpha_r} \quad (6.31a)$$

und

$$\epsilon_4 = \frac{F_2(t) + \Omega_{34}}{\beta_r}, \quad (6.31b)$$

wobei $\Omega_{12} + \Omega_{34} = \Omega_r$ mit

$$\Omega_{12} = \frac{1}{2}J_{12} \left(\frac{Y_{22}c_{13}}{2n_2} + \frac{X_{12}c_{13}}{\tilde{j}_{12}} + \frac{X_{22}\tilde{j}_{13}}{2n_2} + Y_{13} \right) \quad (6.32)$$

und

$$\Omega_{34} = -\frac{1}{2}J_{34} \left(\frac{Y_{33}c_{24}}{2n_3} + \frac{X_{34}c_{24}}{\tilde{j}_{34}} + \frac{X_{33}\tilde{j}_{24}}{2n_3} + Y_{24} \right). \quad (6.33)$$

Die vorhandene Freiheit wurde in diesem Fall mit $F_2(t)$ bezeichnet.

Um die Zeitabhängigkeit der Onsite-Energien für den Grenzfall reiner Anfangszustände berechnen zu können, ist es nötig, die Freiheit $F(t)$ festzulegen. Die einfachste Möglichkeit ist, die Zeitabhängigkeit außer Acht zu lassen und $F = \text{const.}$, im Speziellen $F = 0$, zu wählen. Der Spezialfall reiner Anfangszustände und die verschiedenen Möglichkeiten der Wahl des Freiheitsgrades wurden bereits durch Kreibich ausführlich untersucht [34]. Das zentrale Ergebnis dieser Arbeit ist es, dass sobald unreine Zustände betrachtet werden, eine eindeutige Lösung für die Zeitabhängigkeit der Onsite-Energien existiert; der in [34] betrachtete Mean-Field-Fall stellt also einen Spezialfall der hier gezeigten Gleichungen dar. Wie noch erläutert werden wird, lassen sich mithilfe der oben hergeleiteten Gleichungen und passenden unreinen Anfangszuständen das Verhalten der Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände im Vielteilchensystem realisieren. Im Folgenden wird diskutiert, wie solche Anfangszustände bestimmt werden können.

6.3. Unreine Anfangszustände

Die Gleichungen (6.26) bieten, anders als die zuvor verwendeten Ausdrücke (4.34), die Möglichkeit, die Dynamik eines zum Zeitpunkt $t = 0$ unreinen Zustands zu berechnen. Die Werte für die Onsite-Energien sind für einen solchen unreinen Zustand eindeutig bestimmt, wodurch die zahlreichen Probleme, welche sich in [34] bei Betrachtung von reinen Zuständen ergeben haben, nicht auftreten.

Anders als für einen reinen Zustand ist die Anzahl der Freiheitsgrade für einen unreinen Zustand nicht mehr überschaubar. Unter Ausnutzung der Symmetrien (4.18) und (4.23) sowie (4.24) ergeben sich für $M = 4$ Mulden eine Gesamtzahl von 152 Freiheitsgraden für einen Anfangszustand der BBR-Näherung⁴. Nun stellt sich die Frage, wie man einen unreinen, aber physikalischen Anfangszustand finden kann, mit dem zusätzlich die Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des Zweimuldensystems im Vielteilchensystem realisiert werden kann. Um diese Frage zu beantworten, wird in Unterabschnitt 6.3.1 zunächst auf die zu erfüllenden Nebenbedingungen zur Realisierung von \mathcal{PT} -Symmetrie eingegangen. In Unterabschnitt 6.3.2 wird dann erläutert, wie physikalische unreine Zustände konstruiert werden können und wie sich die Nebenbedingungen erfüllen lassen. Unterabschnitt 6.3.3 zeigt schließlich eine Möglichkeit der numerischen Bestimmung ebensolcher Zustände auf.

6.3.1. Nebenbedingungen

Die Dynamik im Vielteilchensystem soll wie in Abschnitt 5.2 mithilfe der BBR-Methode bestimmt werden. Dazu ist es nötig, Anfangswerte für alle Elemente σ_{kl} und σ_{klmn} der Dichtematrizen zur Verfügung zu haben. Um in der Dynamik die Eigenschaften der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Systems zu erreichen, müssen diese Elemente bzw. der gewählte Anfangszustand einige Nebenbedingungen erfüllen. Die zu fordernden Nebenbedingungen ergeben sich aus dem offenen Zweimuldensystem im Mean-Field und sollen im Folgenden dargestellt werden.

Wie schon in Unterabschnitt 6.1.3 erwähnt, stellt Gleichung (6.9) eine komplexe Bedingung dar, die es zu erfüllen gilt. Da sie direkt aus dem Vergleich des offenen Systems mit dem Vielteilchensystem folgt (siehe Unterabschnitt 6.1.3), stellt sie sicher, dass die Elemente σ_{13} und σ_{24} die richtigen Anfangswerte besitzen. Diese komplexe Bedingung liefert also die beiden reellen Bedingungen

$$-J_{12} \operatorname{Re}(\sigma_{13}) + J_{34} \operatorname{Re}(\sigma_{24}) \stackrel{!}{=} 0 \quad (6.34a)$$

und

$$-J_{12} \operatorname{Im}(\sigma_{13}) + J_{34} \operatorname{Im}(\sigma_{24}) \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.34b)$$

Für den \mathcal{PT} -symmetrischen Zustand des offenen Zweimuldensystems gilt außerdem die Gleichheit der Anfangsbesetzungen in den Systemmulden. Demnach soll also

$$n_2 \stackrel{!}{=} n_3 \quad (6.35)$$

gelten. Die Elemente σ_{22} und σ_{33} der Einteilchendichtematrix müssen also denselben Wert besitzen, sprich

$$\operatorname{Re} \sigma_{22} \stackrel{!}{=} \operatorname{Re} \sigma_{33}. \quad (6.36)$$

⁴Die erste Ordnung der BBR-Näherung besitzt 16 unabhängige reelle Parameter und die zweite Ordnung 136 voneinander unabhängige Größen.

Um in der ersten Ordnung die \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände zu erhalten, müssen auch die reduzierte Stromdichte \tilde{j}_{23} und die Korrelation c_{23} den korrekten Wert besitzen. Die Werte sollen genau denen des offenen Zweimuldensystems gleichen, d.h. man erhält die Nebenbedingungen

$$\tilde{j}_{23} \stackrel{!}{=} 2\sqrt{n_2 n_3} \frac{\gamma}{J} \quad (6.37a)$$

und

$$c_{23} \stackrel{!}{=} 2\sqrt{n_2 n_3} \sqrt{1 - \frac{\gamma^2}{J^2}}. \quad (6.37b)$$

Ausgedrückt mit Elementen der Einteilchendichtematrizen heißt das

$$\text{Im } \sigma_{23} \stackrel{!}{=} \sqrt{\text{Re } \sigma_{22} \text{ Re } \sigma_{33}} \frac{\gamma}{J} \quad (6.38a)$$

und

$$\text{Re } \sigma_{23} \stackrel{!}{=} \sqrt{\text{Re } \sigma_{22} \text{ Re } \sigma_{33}} \sqrt{1 - \frac{\gamma^2}{J^2}}. \quad (6.38b)$$

Die Gleichungen (6.34)-(6.38) stellen fünf reelle Bedingungen an die Elemente der Einteilchendichtematrizen. Aufgrund der Vielzahl von Freiheitsgraden können alle diese Nebenbedingungen von mehr als einem Zustand erfüllt werden. Wählt man irgendeinen Satz von Werten für alle σ_{kl} und σ_{klmn} , die die Bedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen, so erhält man nicht unbedingt einen geeigneten Anfangszustand. Die Elemente σ_{klmn} sind auch im Fall unreiner Zustände nicht vollkommen unabhängig von den Elementen erster Ordnung, da Gleichung (4.20) erfüllt sein muss, und können daher nicht einfach beliebig gewählt werden. Zudem müssen die Symmetrien (4.18) für die Elemente erster Ordnung und die Symmetrien (4.19) für die zweite Ordnung erfüllt sein. Aus diesem Grund muss nun eine Methode entwickelt werden, *physikalische* Anfangszustände zu finden, welche außerdem die Bedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen. Eine solche Methode wird im folgenden Abschnitt vorgestellt.

6.3.2. Konstruktion unreiner Anfangszustände

Im Grenzfall reiner Zustände sind die Anfangswerte für alle Elemente σ_{kl} und σ_{klmn} durch die Gleichungen (4.26) und (4.28) gegeben. Gesucht ist nun ein Verfahren, das die Elemente der Ein- und Zweiteilchendichtematrizen für unreine, physikalische Zustände liefert, die außerdem die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen. Das Verfahren soll viele der Freiheitsgrade festlegen, d.h. die Symmetrien (4.18), (4.19) und (4.20) sollen automatisch erfüllt sein, aber dennoch sollen noch genügend Freiheiten vorhanden sein, um die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen zu können. Es stellt sich nun die Frage, wie aus der Vielzahl möglicher Zustände ein passender Zustand ausgewählt werden kann.

Die grundlegende Idee dazu ist folgende: Um einen unreinen, aber physikalischen Zustand festzulegen, wird die Tatsache ausgenutzt, dass sich jeder (physikalische) Zustand $|\psi\rangle$ des Systems im Fockraum darstellen lässt. Ist ein beliebiger Fock-Zustand $|\psi\rangle$ gegeben, so lassen sich die Elemente der Einteilchen- und Zweiteilchendichtematrizen leicht berechnen, indem die Erwartungswerte $\sigma_{kl} = \langle\psi|\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_l|\psi\rangle$ und $\sigma_{klmn} = \langle\psi|\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_l^\dagger\hat{a}_m\hat{a}_n|\psi\rangle$ gebildet werden.

Ein beliebiger Zustand eines Systems bestehend aus M Mulden besitzt in Fock-Darstellung die Form

$$|\psi, N_{\text{ges}}\rangle = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_M \\ n_1 + \dots + n_M = N_{\text{ges}}}} c_{n_1, \dots, n_M} |n_1, \dots, n_M\rangle, \quad (6.39)$$

d.h. für das betrachtete Viermuldensystem mit $M = 4$ erhält man

$$|\psi, N_{\text{ges}}\rangle \stackrel{M=4}{=} \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3, n_4 \\ n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = N_{\text{ges}}}} c_{n_1, n_2, n_3, n_4} |n_1, n_2, n_3, n_4\rangle. \quad (6.40)$$

Bei gegebenen Koeffizienten c_{n_1, n_2, n_3, n_4} sind auch die Elemente der Dichtematrizen bekannt. Die Anzahl der zu bestimmenden Koeffizienten c_{n_1, n_2, n_3, n_4} ist dabei gleich der Dimension D des Hilbert-Raumes. Die fünf Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) aus Unterabschnitt 6.3.1 reichen bei Weitem nicht aus, um alle Koeffizienten festzulegen.

Eine Möglichkeit, die große Anzahl der Koeffizienten c_{n_1, n_2, n_3, n_4} festzulegen, aber trotzdem noch genügend Freiheiten zur Erfüllung der Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) zur Verfügung zu haben, ist folgende: Man geht von dem bekannten \mathcal{PT} -symmetrischen Mean-Field-Zustand (3.15) aus. Dieser Zustand ist rein und daher sind die Gleichungen (6.26) nicht anwendbar, da das Gleichungssystem (6.18) in diesem Fall linear abhängig ist und somit keine eindeutige Lösung existiert. Im Vielteilchensystem mit M Mulden lässt sich dieser Zustand mithilfe von Gleichung (4.25) für ein reines Kondensat und dem Multinomialtheorem darstellen als [35]:

$$\begin{aligned} |\psi, N_{\text{ges}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{ges}}!}} \sum_{\substack{n_1, \dots, n_M \\ n_1 + \dots + n_M = N_{\text{ges}}}} \frac{N_{\text{ges}}!}{n_1! \dots n_M!} \psi_1^{n_1} \dots \psi_M^{n_M} \hat{a}_1^{n_1} \dots \hat{a}_M^{n_M} |0\rangle \\ &= \sum_{\substack{n_1, \dots, n_M \\ n_1 + \dots + n_M = N_{\text{ges}}}} \underbrace{\sqrt{\frac{N_{\text{ges}}!}{n_1! \dots n_M!}} \psi_1^{n_1} \dots \psi_M^{n_M}}_{=c_{n_1, \dots, n_M}} |n_1, \dots, n_M\rangle, \end{aligned} \quad (6.41)$$

wobei ψ_1, \dots, ψ_M die Mean-Field-Koeffizienten in der Mulde M bezeichnen. Für $M = 4$ Mulden lautet der Zustand dann

$$|\psi, N_{\text{ges}}\rangle = \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3, n_4 \\ n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = N_{\text{ges}}}} \underbrace{\sqrt{\frac{N_{\text{ges}}!}{n_1! n_2! n_3! n_4!}} \psi_1^{n_1} \psi_2^{n_2} \psi_3^{n_3} \psi_4^{n_4}}_{=c_{n_1, n_2, n_3, n_4}} |n_1, n_2, n_3, n_4\rangle. \quad (6.42)$$

Um einen unreinen Zustand zu erhalten, wird der reine Vielteilchenzustand (6.41) bzw. (6.42) mit gaußverteilten⁵ Zufallszahlen z_{n_1, \dots, n_M} ausgelenkt, d.h. es wird eine kleine Störung auf den Zustand aufgebracht. Der betrachtete Zustand hat für M Mulden nun die Form

$$|\psi, N_{\text{ges}}\rangle = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_M \\ n_1 + \dots + n_M = N_{\text{ges}}}} z_{n_1, \dots, n_M} \sqrt{\frac{N_{\text{ges}}!}{n_1! \dots n_M!}} \psi_1^{n_1} \dots \psi_M^{n_M} |n_1, \dots, n_M\rangle, \quad (6.43)$$

wobei mit z_{n_1, \dots, n_M} die zum Basisvektor $|n_1, \dots, n_M\rangle$ zugehörige Zufallszahl bezeichnet. Für den Fall $M = 4$ erhält man also

$$|\psi, N_{\text{ges}}\rangle = \sum_{\substack{n_1, n_2, n_3, n_4 \\ n_1 + n_2 + n_3 + n_4 = N_{\text{ges}}}} z_{n_1, n_2, n_3, n_4} \sqrt{\frac{N_{\text{ges}}!}{n_1! n_2! n_3! n_4!}} \psi_1^{n_1} \psi_2^{n_2} \psi_3^{n_3} \psi_4^{n_4} |n_1, n_2, n_3, n_4\rangle. \quad (6.44)$$

Der Zustand (6.43) bzw. (6.44) besitzt folglich weiterhin D Freiheitsgrade, mithilfe welcher die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllt werden können. Da die Zufallszahlen insgesamt nur eine Störung des reinen Zustands beschreiben, können diese im Nachhinein so angepasst werden, dass der resultierende Zustand die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllt. Es können mit dieser Methode prinzipiell weit mehr Nebenbedingungen erfüllt werden, als nur die fünf oben genannten. Wie die so konstruierten unreinen Anfangszustände numerisch bestimmt werden können, wird im folgenden Abschnitt diskutiert.

An dieser Stelle soll schließlich noch angemerkt werden, dass die Erwartungswerte der Dichteoperatoren $\sigma_{kl} = \langle \psi | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l | \psi \rangle$ und $\sigma_{klmn} = \langle \psi | \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \hat{a}_m^\dagger \hat{a}_n | \psi \rangle$ stets die korrekte Symmetrie besitzen, nämlich die, die die Gleichungen (4.18), (4.19) und (4.20) fordern. Dies folgt direkt aus den Symmetrien der hier eingehenden Operatoren, welche unabhängig vom verwendeten Zustand $|\psi\rangle$ sind. Bei der Wahl der Zustände $|\psi\rangle$ muss dies daher nicht zusätzlich berücksichtigt werden, anders als wenn die σ_{kl} und σ_{klmn} direkt gewählt worden wären, d.h. die Elemente erster und zweiter Ordnung der Dichtematrix besitzen automatisch die richtigen Abhängigkeiten.

6.3.3. Numerische Bestimmung unreiner Zustände

In diesem Abschnitt wird ein Verfahren vorgestellt, wie die in Unterabschnitt 6.3.2 beschriebenen Anfangszustände für die BBR-Methode numerisch gefunden werden können.

Zunächst wird dazu eine lexikographische Fock-Basis erzeugt, in welcher sich der Zustand (6.44) darstellen lässt. Details zum Erzeugen einer solchen Basis sind in [48] und in Anhang E.2 zu finden. Als Anfangswerte für die BBR-Methode sollen die Erwartungswerte der Dichteoperatoren mit dem Zustand (6.44) bestimmt werden. Die Operatoren,

⁵Gaußverteilt um den Mittelwert $m = 1$ mit der Breite d , die frei wählbar bleiben soll. Die Breite der Verteilung ist ein Maß für die Stärke der Störung des Zustands.

von welchen die Erwartungswerte berechnet werden sollen, bestehen aus Paaren von Erzeugern und Vernichtern. Solche Erwartungswerte können in der in [49] vorgeschlagenen Methode mithilfe von sogenannten Sprungindizes sehr effizient ausgewertet werden. Die Effizienz dieser Methode ist hier von Vorteil, da die Erwartungswerte sehr oft berechnet werden müssen, um passende Zufallszahlen z_{n_1, n_2, n_3, n_4} zu finden, die alle Nebenbedingungen erfüllen. Für Details zu dieser Methode sei auf Anhang E.3 und [49] verwiesen.

Aus einer Gaußverteilung mit einer festen Breite d um den Mittelwert $m = 1$ werden zufällig D komplexe Zufallszahlen ausgewählt, die die Startwerte $z_{n_1, n_2, n_3, n_4} \Big|_{\text{Start}}$ für den Zustand (6.44) darstellen. Je größer der Wert von d , desto stärker werden die Mean-Field-Koeffizienten ausgelenkt, d.h. d gibt die Stärke der Störung des Originalzustands an.

Die Werte $\delta_i(\mathbf{z})$ stellen ein Maß dafür dar, wie gut die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) für den aktuellen Satz \mathbf{z} Zufallszahlen erfüllt sind:

$$\delta_1(\mathbf{z}) = -J_{12} \operatorname{Re}(\sigma_{13}) + J_{34} \operatorname{Re}(\sigma_{24}) \stackrel{!}{=} 0, \quad (6.45a)$$

$$\delta_2(\mathbf{z}) = -J_{12} \operatorname{Im}(\sigma_{13}) + J_{34} \operatorname{Im}(\sigma_{24}) \stackrel{!}{=} 0, \quad (6.45b)$$

$$\delta_3(\mathbf{z}) = n_2 - n_3 \stackrel{!}{=} 0, \quad (6.45c)$$

$$\delta_4(\mathbf{z}) = \tilde{j}_{23} - 2\sqrt{n_2 n_3} \frac{\gamma}{J} \stackrel{!}{=} 0, \quad (6.45d)$$

$$\delta_5(\mathbf{z}) = c_{23} - 2\sqrt{n_2 n_3} \sqrt{1 - \frac{\gamma^2}{J^2}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (6.45e)$$

Damit $\delta_i(\mathbf{z}) = 0$ für $i = 1, \dots, 5$ gilt, müssen die Zufallszahlen z_{n_1, n_2, n_3, n_4} angepasst werden. Es hat sich herausgestellt, dass numerisch ein Minimierungsverfahren zum gewünschten Ergebnis führt. Dazu wird die Summe $\delta(\mathbf{z})$ der Quadrate der Werte für $\delta_i(\mathbf{z})$ gebildet mit

$$\delta(\mathbf{z}) = \sum_i \delta_i(\mathbf{z})^2 \stackrel{!}{=} 0, \quad (6.46)$$

welche im Laufe des Verfahrens immer näher an den Wert null gebracht werden soll. Dazu wird eine Zufallszahl z_i aus dem Satz \mathbf{z} ausgewählt. Diese Zufallszahl besitzt zu diesem Zeitpunkt einen bestimmten Wert z_s . Es werden anschließend die Werte $\delta(\mathbf{z}) \Big|_{z_i=z_s}$, $\delta(\mathbf{z}) \Big|_{z_i=z_s+h}$ und $\delta(\mathbf{z}) \Big|_{z_i=z_s-h}$ bestimmt, h bezeichnet dabei die Breite des betrachteten Intervalls und ist fest, aber frei wählbar. Diese drei Punkte⁶ definieren eine Parabel $p(z_i)$ der Form

$$p(z_i) = \frac{1}{2}a(z_i - z_s)^2 + b(z_i - z_s) + c \quad (6.47)$$

⁶Um die Parabel genauer zu bestimmen, könnten ebenso mehr Punkte verwendet und anschließend ein Fit durchgeführt werden. Da die Rechenzeit aber primär durch die Anzahl der berechneten Erwartungswerte gegeben ist, werden an dieser Stelle nur drei Punkte verwendet, was bezüglich der Genauigkeit für den Zweck ausreichend ist.

mit den Parametern

$$a = \frac{p(z_s - h) + p(z_s + h) - 2p(z_s)}{h^2}, \quad (6.48a)$$

$$b = \frac{p(z_s + h) - p(z_s - h)}{2h} \quad (6.48b)$$

und

$$c = p(z_s). \quad (6.48c)$$

Der Tiefpunkt z_{TP} dieser Parabel befindet sich bei

$$z_{\text{TP}} = z_s - \frac{b}{a}. \quad (6.49)$$

Falls der Tiefpunkt z_{TP} im Intervall $[z_s - h, z_s + h]$ liegt, so wird der aktuelle Wert z_s der gewählten Zufallszahl z_i durch den neuen Wert $z_{\text{neu}} = z_{\text{TP}}$ ersetzt. Gilt $z_{\text{TP}} < z_s - h$, so wird z_s durch $z_{\text{neu}} = z_s - h$ ersetzt und anders herum wenn $z_{\text{TP}} > z_s + h$, so wird z_s durch $z_{\text{neu}} = z_s + h$ ersetzt. Anschließend wird $\delta(\mathbf{z}) \Big|_{z_i=z_{\text{neu}}}$ ausgewertet. Falls

$\delta(\mathbf{z}) \Big|_{z_i=z_{\text{neu}}} < \delta(\mathbf{z}) \Big|_{z_i=z_s}$ gilt, wird die Änderung der Zufallszahl z_i akzeptiert, andernfalls wird eine neue Zufallszahl gewählt. Die gesamte Prozedur wird so lange wiederholt, bis eine hinreichende Genauigkeit erreicht ist, d.h. wenn $\delta(\mathbf{z})$ numerisch null ist. Ist dies der Fall, werden die Erwartungswerte der Dichteoperatoren mit dem so bestimmten Zustand ausgewertet und die Bewegungsgleichungen der BBR-Methode integriert.

Das eben beschriebene Vorgehen liefert demnach Anfangszustände, deren Dynamik untersucht werden kann. An dieser Stelle soll noch einmal erwähnt werden, dass mit diesem Verfahren prinzipiell noch weitere Nebenbedingungen erfüllt werden könnten und zwar so viele, wie Freiheitsgrade verfügbar sind. Da jede Zufallszahl sowohl einen Real- als auch einen Imaginärteil besitzt, ergibt dies $2D$ verfügbare Freiheitsgrade. Allerdings muss Folgendes angemerkt werden: Eigentlich sollte der numerische Aufwand nicht mit der Anzahl der Bedingungen ansteigen, wie es zum Beispiel bei Verwendung eines Newton-Verfahrens der Fall wäre, sondern davon unabhängig sein. Dadurch sollte es sich grundsätzlich einfach gestalten, Bedingungen hinzuzufügen oder wegzulassen. Es hat sich jedoch gezeigt, dass das numerische Verhalten der Methode in großem Maße von der Wahl des Parameters h abhängt und auch der Wert von d einen Einfluss besitzen kann. Obwohl ein Satz Zufallszahlen \mathbf{z} gesucht wird, für den (6.46) erfüllt sein soll, kann jedoch vorkommen, dass das Verfahren bei einem fest gewähltem Wert für h für einen bestimmten Satz Startwerte $z_{n1,n2,n3,n4} \Big|_{\text{Start}}$ in ein lokales Minimum hinein läuft, welches mit dem gewählten Wert für die Intervallbreite nicht mehr verlassen werden kann. Dieses Verhalten ist bei vorgegebenem h wesentlich abhängig von der Anzahl der Bedingungen, weswegen sich zusätzliche Bedingungen nicht ohne jeglichen Aufwand hinzufügen lassen.

6.4. Diskussion der numerischen Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die numerisch erhaltenen Ergebnisse diskutiert. Es wird gezeigt, dass sich mithilfe der Anpassungen (6.8) und (6.26) der Kontrollparameter die Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des Zweimuldensystems in der ersten Ordnung der Hierarchie des Vielteilchensystems realisieren lässt, sofern die Anfangszustände unrein sind und die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen. Dabei ist eine kleine Auslenkung des reinen Mean-Field-Zustands bereits ausreichend, um einen passenden unreinen Zustand zu erzeugen, welcher in der Dynamik dasselbe Verhalten zeigt, wie die \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Systems.

Zunächst werden in Unterabschnitt 6.4.1 die Elemente erster Ordnung untersucht und in Unterabschnitt 6.4.2 schließlich die Elemente zweiter Ordnung.

6.4.1. Dynamik der Elemente erster Ordnung

Die Ergebnisse der numerischen Rechnungen zeigen, dass sich die Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems in der ersten Ordnung der Hierarchie im Vielteilchensystem realisieren lässt. In Abbildung 6.1 ist die Dynamik der Besetzungszahlen n_i , der Elemente \tilde{j}_{23} und c_{23} , der Kontrollparameter und die der Reinheit im Vielteilchensystem dargestellt. Für die Systemparameter wurden $\gamma = 0.5$ und $U = 0.1$ gewählt. Der reine Mean-Field-Zustand wurde nach Gleichung (6.44) mit gaußverteilten Zufallszahlen der Breite $d = 0.008$ ausgelenkt. Die Bestimmung eines Vielteilchenzustands (6.44), dessen Erwartungswerte mit den Dichteoperatoren die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen, ist numerisch sehr aufwendig und wurde deshalb für eine relativ geringe Teilchenzahl von $N_{\text{ges}} = 22$ durchgeführt⁷.

Abbildung 6.1(a) zeigt die Besetzungszahlen n_i in den einzelnen Mulden in Abhängigkeit der Zeit. Wie im offenen Zweimuldensystem sind die Besetzungszahlen in den inneren beiden Mulden n_2 und n_3 zeitlich konstant und stets gleich groß. Die Reservoirmulden hingegen leeren bzw. füllen sich linear, so wie es auch schon im Mean-Field-Grenzfall beobachtet wurde (siehe Abbildung B.1 in Anhang B). Bei Betrachtung der Besetzungszahlen liefert dieses Vorgehen demnach genau das gewünschte Verhalten.

Der zeitliche Verlauf der reduzierten Stromdichte \tilde{j}_{23} und der Korrelation c_{23} im Vielteilchensystem ist in Abbildung 6.1(b) aufgetragen (durchgezogene Linien). Die theore-

⁷Die große Dimension des Hilbertraums stellt einen limitierenden Faktor bei der numerischen Bestimmung des Anfangszustands dar, da die entsprechenden Erwartungswerte mit den Dichteoperatoren bei der Minimierung sehr oft ausgewertet werden müssen. Die hier betrachtete Gesamtteilchenzahl im System liegt daher bei $N_{\text{ges}} = 22$ Teilchen. Die BBR-Näherung ist jedoch umso genauer, desto größerer die Teilchenzahl ist. Die Abweichungen von der echten Vielteilchendynamik sind von der Ordnung $\mathcal{O}(N_{\text{ges}}^3 f^{3/2})$. Um genauere Ergebnisse zu erhalten, kann die Dynamik mithilfe des Bose-Hubbard-Modells bestimmt werden. Da sich das System in den Ergebnissen in Abbildung 6.1 nur für einen relativ kurzen Zeitbereich aufrecht erhalten lässt, z.B. verglichen mit dem Mean-Field-Fall in Abbildung B.1 oder im Vielteilchensystem in den Abbildungen 5.3 und 5.4, spielen die Abweichungen durch Näherung der exakten Dynamik keine wesentliche Rolle.

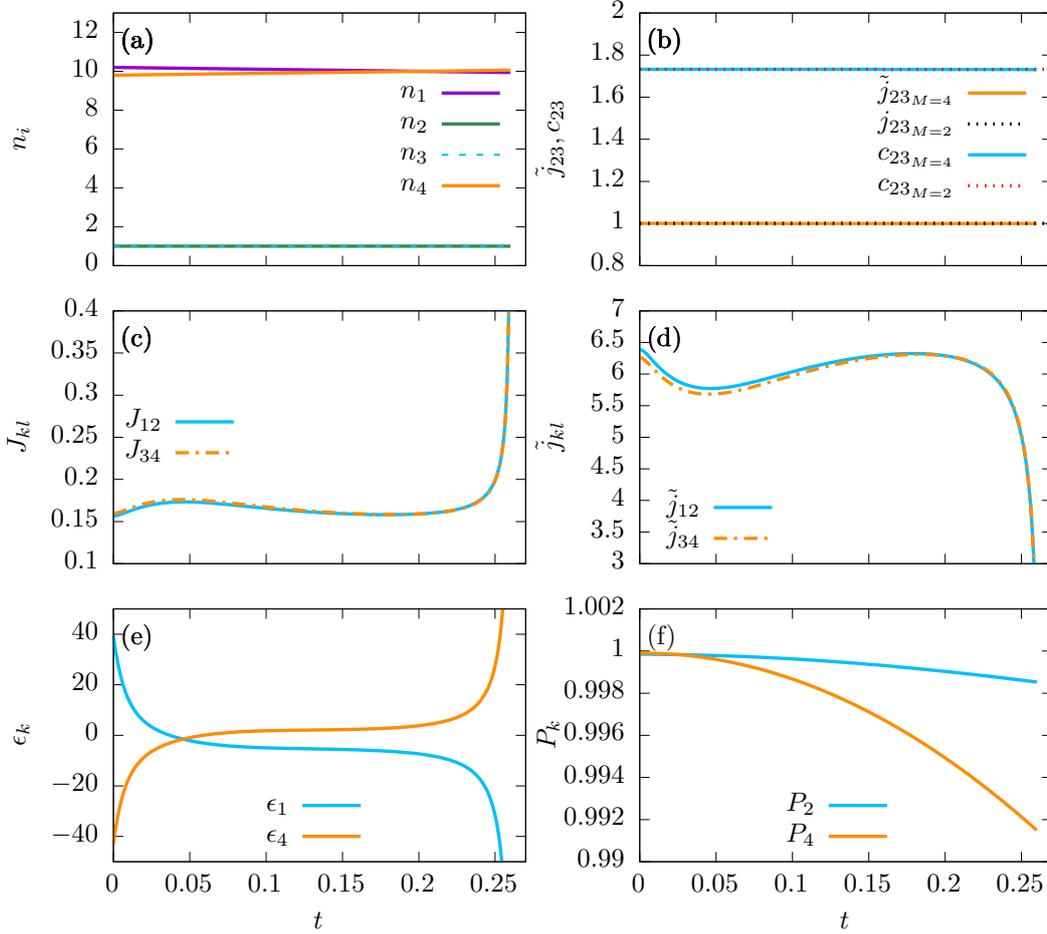


Abbildung 6.1.: Dynamik eines unreinen Anfangszustands der Form (6.44) im Vielteilchensystem mit $N_{\text{ges}} = 22$, berechnet mit der BBR-Methode und den Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter (6.8) und (6.26) für die Parameter $\gamma = 0.5$, $U = 0.1$ und $d = 0.008$. Es sind die Zeitabhängigkeiten (a) der Besetzungszahlen n_i , (b) der Elemente \tilde{j}_{23} und c_{23} , (c) der Tunnelraten, (d) der Elemente \tilde{j}_{12} und \tilde{j}_{34} , (e) der Onsite-Energien und (f) der Reinheit dargestellt. In (a) wurde dabei nicht auf die Besetzungszahl in den mittleren beiden Mulden normiert. Man erhält in der Dynamik das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems.

tischen Werte im Zweimuldensystem sind für die gewählten Parameter gepunktet dargestellt. Es zeigt sich, dass das in Abschnitt 6.3 dargestellte Verfahren dazu geeignet ist, die korrekten Werte für die reduzierte Stromdichte \tilde{j}_{23} und die Korrelation c_{23} im Vielteilchensystem einzustellen. In der Dynamik bleibt der Wert beider Größen zeitlich konstant.

Das zentrale Ergebnis dieses Abschnitts lautet also wie folgt: Da die Besetzungszahlen in den Systemmulden sowie die reduzierte Stromdichte \tilde{j}_{23} und die Korrelation c_{23} im Vielteilchensystem zeitlich konstant sind, lässt sich im Vielteilchensystem das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems in der ersten Ordnung der Hierarchie erreichen. Dazu müssen die Anpassungen (6.8) und (6.26) für die Kontrollparameter verwendet werden und unreine Anfangszustände der Form (6.44) zur Bestimmung der Erwartungswerte der Dichtematrizen gewählt werden, welche die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen. Dies unterscheidet sich wesentlich von dem Ergebnis in [33], da mit dem hier dargestellten Verfahren die komplette Dynamik der ersten Ordnung der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems im Vielteilchensystem eingestellt werden kann. In [33] hingegen konnte nur die Stationarität der Besetzungszahlen n_2 und n_3 und die der reduzierten Stromdichte \tilde{j}_{23} erreicht werden, d.h. die Bedingung an die Stationarität der Korrelation c_{23} musste aufgegeben werden und ließ sich nicht erfüllen.

Abbildung 6.1(c) zeigt die Zeitabhängigkeit der Tunnelraten J_{12} und J_{34} . Wie auch schon bei der Untersuchung der Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände im Vielteilchensystem in Abschnitt 5.2 (siehe Abbildung 5.3 bzw. 5.4) divergieren die Tunnelraten nach einer gewissen Zeit. Auch hier liegt der Grund für dieses Verhalten in der Dynamik der reduzierten Stromdichten \tilde{j}_{12} und \tilde{j}_{34} , welche in Abbildung 6.1(d) dargestellt ist. Die Steigung der zeitlichen Verläufe dieser beiden Größen ist zu diesem Zeitpunkt sehr groß und die Größen gehen gegen null. Da \tilde{j}_{12} und \tilde{j}_{34} in den Gleichungen (6.8) im Nenner in die Berechnung der Tunnelraten eingehen, divergieren diese wenn \tilde{j}_{12} und \tilde{j}_{34} gegen null streben. Aus demselben Grund divergieren zu diesem Zeitpunkt auch die Onsite-Energien ϵ_1 und ϵ_4 (siehe Abbildung 6.1(e)), da auch in den Gleichungen (6.26) die Größen \tilde{j}_{12} und \tilde{j}_{34} im Nenner auftreten.

Die Reinheit P_2 , bezogen auf das eingebettete System, und die Reinheit P_4 , bezogen auf das Gesamtsystem, sind in Abbildung 6.1(f) dargestellt. In der Dynamik sind P_4 und P_2 in guter Näherung konstant. Beide Werte liegen sehr nah an eins, d.h. der verwendete Zustand ist nur sehr wenig von einem vollkommen reinen Zustand entfernt. Dies bedeutet, dass bereits eine sehr geringe Auslenkung aus dem vollkommen reinen Mean-Field-Zustand genügt und sich bereits mit einem solchen Zustand das gewünschte Verhalten in der ersten Ordnung erreichen lässt. Selbst für geringe Auslenkungen besitzt das Gleichungssystem (6.18) die eindeutige Lösung (6.26).

Wie in Abbildung 6.1 ersichtlich ist, kann das System, anders als im Mean-Field-Grenzfall in Abbildung B.1, nicht bis zur Entleerung der linken Reservoirmulde aufrecht erhalten werden. Das System bricht dann zusammen, wenn die Tunnelraten J_{12} und J_{34} und die Onsite-Energien ϵ_1 und ϵ_4 divergieren, was durch den Abfall der Größen \tilde{j}_{12} und

\tilde{j}_{34} verursacht wird. Der Zeitpunkt des Zusammenbruchs hängt dabei wesentlich vom gewählten Anfangszustand ab. In Abbildung 6.2 ist die Dynamik der Besetzungszahlen n_i , der Elemente \tilde{j}_{23} und c_{23} , der Kontrollparameter und die der Reinheit für einen Zustand mit denselben Parametern ($\gamma = 0.5$, $U = 0.1$ und $d = 0.008$) wie in Abbildung 6.1 dargestellt. Lediglich die Zufallszahlen besitzen andere Werte. Es zeigt sich, dass für den Zustand in Abbildung 6.2 das System nur ungefähr halb so lange aufrecht erhalten werden kann wie für den Zustand in Abbildung 6.1.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass der Zeitpunkt des Zusammenbruchs unter anderem auch von der gewählten Breite d der Gaußverteilung abhängt, was hier jedoch nicht diskutiert werden soll.

6.4.2. Dynamik der Elemente zweiter Ordnung

Im vorherigen Abschnitt wurde gezeigt, dass sich das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des Zweimuldensystems im Vielteilchensystem in der ersten Ordnung realisieren lässt. In diesem Abschnitt wird nun das Verhalten der zweiten Ordnung untersucht. Es ist allerdings nicht zu erwarten, dass sich im Vielteilchensystem dieses Verhalten auch in der zweiten Ordnung der BBR-Näherung einstellt, da erstens keine Bedingungen an die Anfangswerte der zweiten Ordnung gestellt wurden und zweitens mit den vier verfügbaren reellen Kontrollparametern J_{12} , J_{34} , ϵ_1 und ϵ_4 nur die vier reellen Größen der ersten Ordnung zeitlich kontrolliert werden können.

Die Zweiteilchendichtematrix besitzt insgesamt 256 Elemente; wie in Unterabschnitt 4.2.3 diskutiert, sind diese nicht alle unabhängig voneinander. Es ist allerdings nur die Dynamik derjenigen Elemente interessant, welche nur die Indizes 2 und 3 besitzen, da sich die Frage stellt, ob sich die mittleren beiden Mulden des hermiteschen Systems so wie das offene System verhalten. Es existieren 16 Elemente, die nur Indizes 2 und 3 besitzen, also sind 32 reelle Größen zu untersuchen. Unter Ausnutzung der Symmetrien (4.19) und (4.20) lässt sich diese Anzahl noch erheblich reduzieren. Es bleiben neun reelle Größen übrig. Bei den voneinander unabhängigen Elementen, aus denen sich die Restlichen mithilfe der Symmetrien (4.19) und (4.20) berechnen lassen, handelt es sich um $\text{Re}(\sigma_{2222})$, $\text{Re}(\sigma_{2223})$, $\text{Im}(\sigma_{2223})$, $\text{Re}(\sigma_{2233})$, $\text{Re}(\sigma_{2323})$, $\text{Im}(\sigma_{2323})$, $\text{Re}(\sigma_{2333})$, $\text{Im}(\sigma_{2333})$ und $\text{Re}(\sigma_{3333})$ ⁸.

In Abbildung 6.3 ist die Zeitabhängigkeit der voneinander unabhängigen Elemente σ_{klmn} der Zweiteilchendichtematrix dargestellt. Die durchgezogenen Linien zeigen den zeitlichen Verlauf der Elemente im Vielteilchensystem, die gestrichelten Linien stellen deren Dynamik im offenen Zweimuldensystem dar. Die Elemente zweiter Ordnung im

⁸Bei Betrachtung der Kovarianzen Δ_{klmn} in Gleichung (4.21) bleiben unter Ausnutzung der Symmetrien (4.23) und (4.24), wie in Abschnitt 4.2.3 erläutert, $(2^4 - 2^2)/2 = 10$ reelle Größen übrig. Bei den voneinander unabhängigen Elementen, aus denen sich in diesem Fall die Restlichen berechnen lassen, handelt es sich um $\text{Re}(\Delta_{2222})$, $\text{Re}(\Delta_{2223})$, $\text{Im}(\Delta_{2223})$, $\text{Re}(\Delta_{2233})$, $\text{Re}(\Delta_{2323})$, $\text{Im}(\Delta_{2323})$, $\text{Re}(\Delta_{2333})$, $\text{Im}(\Delta_{2333})$ und $\text{Re}(\Delta_{3333})$.

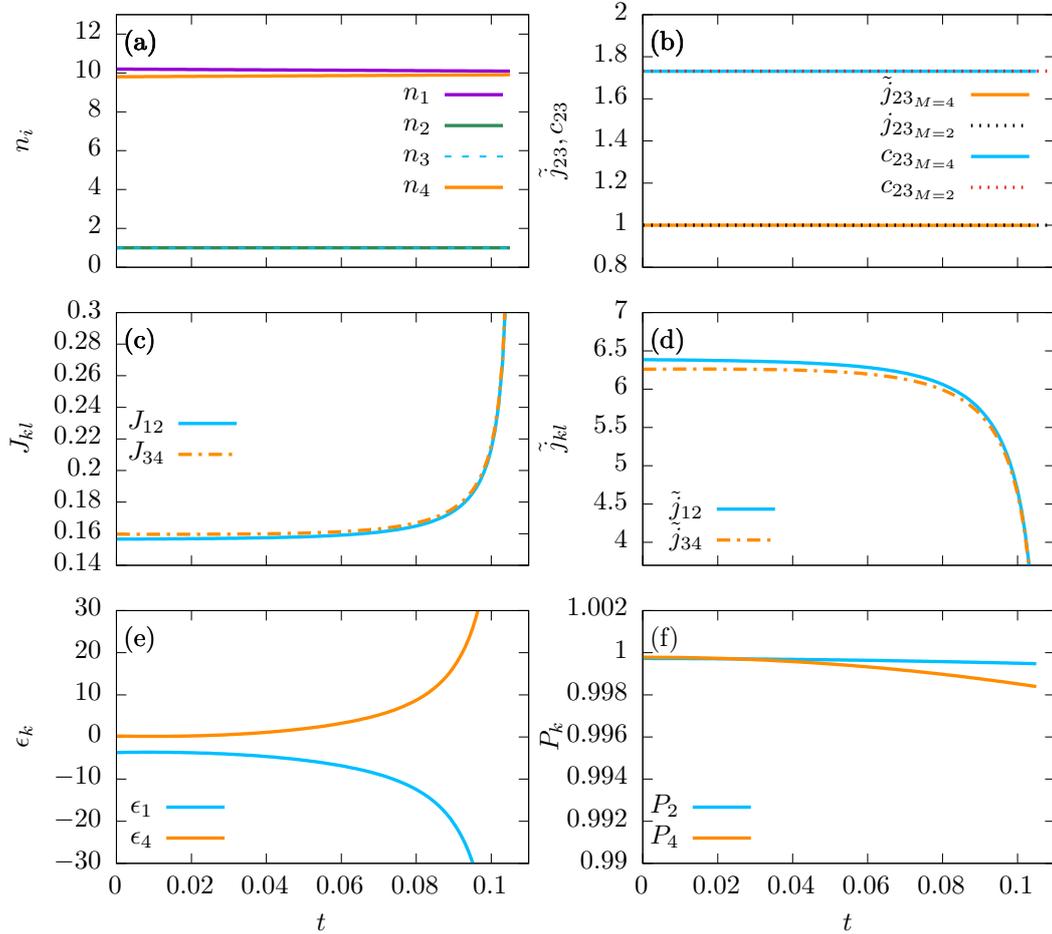
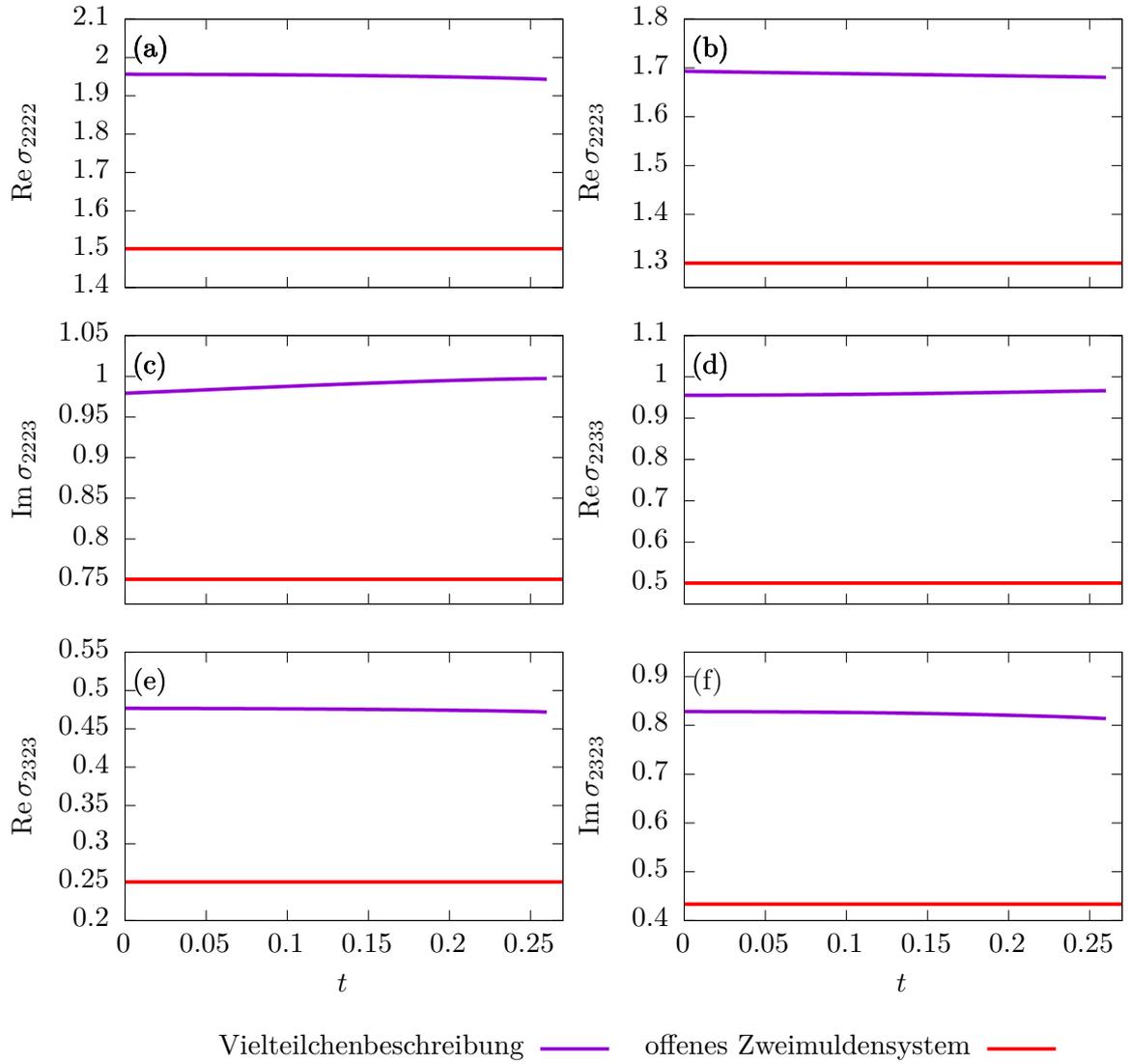


Abbildung 6.2.: Dynamik wie in Abbildung 6.1 für die Parameter $\gamma = 0.5$, $U = 0.1$ und $d = 0.008$, mit anderen Zufallszahlen für die Auslenkung des Mean-Field-Zustands. Es sind die Zeitabhängigkeiten (a) der Besetzungszahlen n_i , (b) der Elemente \tilde{j}_{23} und c_{23} , (c) der Tunnelraten, (d) der Elemente \tilde{j}_{12} und \tilde{j}_{34} , (e) der Onsite-Energien und (f) der Reinheit dargestellt. Das System kann im Vergleich mit Abbildung 6.1 nur ungefähr halb so lange aufrecht erhalten werden.

offenen System sind dabei natürlich zeitlich konstant, da in diesem System in allen Ordnungen \mathcal{PT} -Symmetrie vorliegt.

Aus Abbildung 6.3 ist ersichtlich, dass die Elemente zweiter Ordnung im Vielteilchensystem nicht mit denen im offenen Zweimuldensystem übereinstimmen. Das entspricht, wie oben bereits erwähnt, genau der Erwartung, da an die Anfangswerte der zweiten Ordnung keine Bedingungen gestellt wurden, weswegen sich die Werte im Vielteilchensystem und im offenen Zweimuldensystem zum Zeitpunkt $t = 0$ unterscheiden. Die Werte liegen dabei dennoch in derselben Größenordnung und weisen dasselbe Vorzeichen auf. Dies legt den Schluss nahe, dass sich auch für die Momente zweiter Ordnung prinzipiell passende Werte einstellen ließen. Dieses Vorgehen wäre in dem in dieser Arbeit behandelten Viermuldensystem allerdings nicht besonders zielführend: Angenommen, die Elemente der Zweiteilchendichtematrix bzw. die Kovarianzen besäßen die korrekten Anfangswerte, nämlich dieselben Werte bei $t = 0$ wie die entsprechenden Größen im offenen Zweimuldensystem. Damit ist dann allerdings nicht automatisch garantiert, dass die Dynamik der Momente zweiter Ordnung mit der des offenen Systems übereinstimmt, d.h. dass die Elemente zeitlich konstant bleiben. Will man das Verhalten des offenen Zweimuldensystems simulieren, so stellt das hermitesche Viermuldensystem eine Minimallösung dar, da es nur vier reelle Parameter bereitstellt, mit welchen das Verhalten des offenen Systems eingestellt werden kann. Wie in Anhang B und Kapitel 5 gezeigt, reichen diese vier reellen Parameter im Mean-Field-Grenzfall aus, um das gewünschte Verhalten zu erzielen. Im Vielteilchensystem ist dies nicht der Fall: Die Gleichungen (6.8) und (6.26) wurden so bestimmt, dass sich das hermitesche System in der ersten Ordnung so wie das offene System verhält. Damit wurde erreicht, dass die vier reellen Größen n_2 , n_3 , \tilde{j}_{23} und c_{23} , welche das Verhalten des Systems in der ersten Ordnung charakterisieren, in der Dynamik dasselbe Verhalten wie das offene System zeigen, sprich zeitlich konstant bleiben. Mit den vier reellen Parametern können folglich die vier reellen Größen der ersten Ordnung im Vielteilchensystem, also die Einteilchendynamik, angepasst werden. Da man im Viermuldensystem nur vier Parameter zur Verfügung hat, lässt sich keine Kontrolle über das Verhalten von Elementen höherer Ordnung gewinnen. Die Realisierung des Verhaltens der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände in der Einteilchendynamik ist das Maximum dessen, was sich mithilfe des Viermuldensystems erreichen lässt. Unter Hinzunahme weiterer Reservoirmulden ließe sich auch in höheren Ordnungen das Verhalten des offenen Systems einstellen. Die in dieser Arbeit vorgestellte Methode zur Bestimmung geeigneter unreiner Anfangszustände wäre auch für ein System mit mehreren Reservoirmulden geeignet, in dem man dann auch in höheren Ordnungen das gewünschte Verhalten erzielen könnte, da sich auch Bedingungen für höhere Ordnungen erfüllen ließen. Es wären dann jedoch andere Zeitabhängigkeiten für die Kontrollparameter nötig, welche dann natürlich auch mehr an der Zahl wären.

Als Ergebnis dieses Kapitels lässt sich Folgendes festhalten: Es wurde ein Verfahren gefunden, mit dem sich das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems im Vielteilchensystem in der ersten Ordnung mithilfe der Zeitabhängigkeiten (6.8) und (6.26) der Kontrollparameter realisieren lässt. Dazu wurden unreine



Teil 1 von Abbildung 6.3. Beschreibung siehe Seite 69.

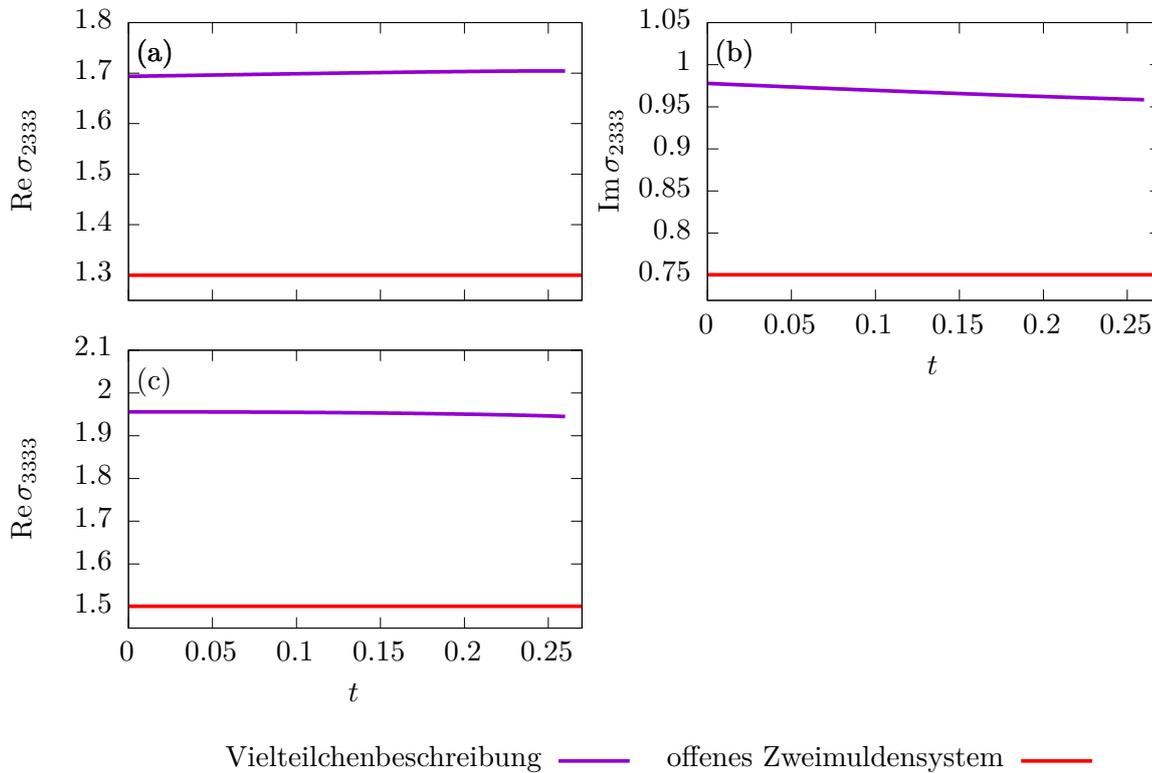


Abbildung 6.3.: Dynamik der voneinander unabhängigen Elemente zweiter Ordnung im Vielteilchensystem. Die korrespondierenden Elemente erster Ordnung dieses Zustand sind in Abbildung 6.1 dargestellt. Es liegt keine \mathcal{PT} -Symmetrie in der zweiten Ordnung der Vielteilchenbeschreibung vor. Teil 1 dieser Abbildung befindet sich auf Seite 68.

Anfangszustände verwendet. Dies unterscheidet sich wesentlich von dem Ergebnis in [33], wo nur die Stationarität der Besetzungszahlen n_2 und n_3 und die zeitliche Konstanz von \tilde{j}_{23} erreicht werden konnte. Für höhere Ordnungen lässt sich im Viermuldensystem das gewünschte Verhalten nicht erzeugen, da das System nur vier reelle Parameter bereitstellt. Um dies zu erreichen, wären mehr verfügbare Freiheitsgrade nötig, welche beispielsweise durch ein System mit mehr Mulden bereitgestellt werden würde.

7. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde die Dynamik eines Bose-Einstein-Kondensats in einem \mathcal{PT} -symmetrischen Zweimodensystem, welches in ein hermitesches Viermuldensystem mit zeitabhängigen Parametern eingebettet ist, untersucht. Es wurde gezeigt, dass sich im Viermulden-Vielteilchensystem das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimodensystems in der ersten Ordnung der Vielteilchenbeschreibung realisieren lässt. Die Vielteilchendynamik wurde dabei mithilfe der Bogoliubov-Backreaction-Methode bestimmt, welche eine Näherung der exakten Vielteilchendynamik darstellt.

Im **ersten Teil** der Arbeit wurde die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Eigenzustände des offenen Zweimuldensystems im hermiteschen Viermuldensystem sowohl im Mean-Field-Limit als auch in der Vielteilchenbeschreibung untersucht.

Um die Dynamik im Mean-Field zu bestimmen, wurde die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung gelöst, die sich für das betrachtete System in einem 4×4 -Matrixmodell zusammenfassen lässt. Um passende Anfangszustände zu finden, wurden Beziehungen zwischen den Phasen der Mean-Field-Wellenfunktion ausgenutzt, die sich aus dem Vergleich der Dynamik des Viermuldensystems mit der des offenen Zweimuldensystems ergeben. Für den Grenzfall einer verschwindenden Wechselwirkung ist die Lösung der Dynamik analytisch zugänglich. Die numerische Auswertung der Dynamik für eine nicht verschwindende Wechselwirkung ergab, dass sich die Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände mithilfe einer entsprechenden Wahl der Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter in den inneren beiden Mulden des Viermuldensystems im Mean-Field einstellen lässt.

Zur Untersuchung der Dynamik der \mathcal{PT} -brechenden Zustände im Vielteilchensystem wurden nach einem Vorschlag von Dast [26] reine Anfangszustände, d.h. Zustände, die sich als Produkt der Einteilchenzustände darstellen lassen, gewählt. Für die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter im Vielteilchensystem wurde ein in [33] vorgestellter Vorschlag aufgegriffen. Es ergab sich, dass sich auf diese Art und Weise das Verhalten der \mathcal{PT} -brechenden Zustände des offenen Zweimuldensystems im Vielteilchensystem nicht realisieren lässt. Dies gilt ebenso für die Realisierung der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände [33].

Da das Viermuldensystem vier reelle Größen zur Verfügung stellt, mithilfe derer das Verhalten des offenen Zweimuldensystems simuliert werden kann, stehen prinzipiell genügend Parameter zur Verfügung, um das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände sowie auch der \mathcal{PT} -brechenden Zustände des Zweimuldensystems zumindest in der ersten Ordnung im Vielteilchensystem zu realisieren. Ein reiner Zustand stellt jedoch aufgrund der im System vorhandenen Kontaktwechselwirkung keine ideale Wahl für einen An-

fangszustand zur Bestimmung der Dynamik im Vielteilchensystem dar. Dadurch wird die Verwendung *unreiner* Anfangszustände zur Realisierung des Verhaltens der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des Zweimuldensystems im Vielteilchensystem motiviert.

Im **zweiten Teil** der Arbeit wurde ein Verfahren vorgestellt, mit welchem sich das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Systems im Viermulden-Vielteilchensystem in der ersten Ordnung der Hierarchie realisieren lässt.

Ausgangspunkt der Betrachtungen war dabei das Verhalten des offenen Zweimuldensystems, welches in der Mean-Field-Näherung durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung beschrieben wird. Ausgehend davon wurden durch Vergleich der Dynamik des offenen Systems mit der Dynamik der inneren beiden Mulden des Viermulden-Vielteilchensystems Zeitabhängigkeiten für die Kontrollparameter gefunden, in welche, anders als in [33], keinerlei Annahmen über die Anfangszustände eingehen. Die Zeitabhängigkeit der Tunnelraten (6.8) ergab sich dabei direkt aus dem Vergleich der Dynamik, für die Onsite-Energien ließ sich ein lineares Gleichungssystem bestimmen, welches für unreine Zustände, d.h. Zustände, die sich nicht als Produkt der Einteilchenzustände darstellen lassen, die eindeutige Lösung (6.26) liefert. Die Werte für die Onsite-Energien sind für einen solchen unreinen Zustand eindeutig bestimmt, wodurch die zahlreichen Probleme, welche sich in [34] bei Betrachtung von reinen Zuständen ergeben haben, nicht auftreten. Für reine Anfangszustände sind die Gleichungen des Gleichungssystems jedoch linear abhängig und man erhält die in [30, 32, 34] hergeleiteten und im ersten Teil dieser Arbeit verwendeten Gleichungen. Sie stellen dabei einen Grenzfall der allgemeineren Betrachtungen dieser Arbeit dar.

Um in der Vielteilchendynamik das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems zu realisieren, wurden unreine Anfangszustände konstruiert, welche die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen, die sich aus dem Vergleich mit dem offenen System ergeben. Unreine Zustände besitzen eine große Anzahl an Freiheitsgraden, jedoch lassen sich die Elemente der Ein- und Zweiteilchendichtematrix nicht komplett unabhängig voneinander wählen, da sie die Symmetrien (4.20) erfüllen müssen. Um einen passenden Anfangszustand für die BBR-Methode zu finden, wurde daher zunächst ein entsprechender Fock-Zustand konstruiert und anschließend die Erwartungswerte mit den Dichteoperatoren ausgewertet. Die so bestimmten Elemente erfüllen automatisch die Symmetrien (4.18), (4.19) und (4.20).

Um einen passenden Fock-Zustand zu finden, wurde der bekannte Mean-Field-Zustand (6.42) des Systems zugrunde gelegt und mit gaußverteilten Zufallszahlen ausgelenkt, d.h. es wurde eine kleine Störung auf den Zustand aufgebracht. Der Vorteil dieses Vorgehens ist, dass viele der vorhandenen Freiheitsgrade festgelegt werden, aber dennoch genügend Freiheitsgrade verblieben, mit welchen die Nebenbedingungen erfüllt werden können. Somit erhält man einen unreinen Zustand, dessen Auslenkung durch einen einzigen Parameter, nämlich die Breite der Gaußverteilung, charakterisiert wird. Die Zufallszahlen wurden anschließend mithilfe eines Minimierungsverfahrens so angepasst, dass die resultierenden Elemente der Einteilchendichtematrix die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38)

erfüllen.

Die auf diese Art und Weise konstruierten Zustände wurden schließlich für die Berechnung der Dynamik des Vielteilchensystems mithilfe der BBR-Methode verwendet. Es zeigte sich, dass sich mit der in dieser Arbeit vorgestellten Methode das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems in der ersten Ordnung der Hierarchie des Vielteilchensystems realisieren lässt. Die Auswertung der numerischen Ergebnisse ergab, dass sowohl die Besetzungszahlen n_2 und n_3 in den mittleren beiden Mulden als auch der Strom j_{23} und die Korrelation c_{23} zwischen den beiden inneren Mulden zeitlich konstant sind. Dies unterscheidet sich wesentlich von dem Ergebnis in [33], da auch die Forderung an die Korrelation c_{23} erfüllt werden konnte, die in [33] unter Verwendung reiner Anfangszustände und Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter basierend auf dem Mean-Field-Verhalten nicht erfüllt werden konnte.

In dem in dieser Arbeit verwendeten Viermuldensystem kann nicht erwartet werden, dass sich das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände auch in der zweiten Ordnung im Vielteilchensystem einstellt. Die Untersuchung der Dynamik der Momente zweiter Ordnung, welche nur die Indizes zwei und drei besitzen, zeigte, dass sie von der Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Systems abweicht. Dies entsprach der Erwartung und hat zwei Ursachen: Zum einen wurden an die Momente zweiter Ordnung keine Nebenbedingungen gestellt und zum anderen wurde mithilfe der Zeitabhängigkeiten (6.8) und (6.26) nur die Einteilchendynamik des Systems angepasst. Dies bedeutet, dass selbst wenn entsprechende Nebenbedingungen an die Momente zweiter Ordnung gestellt worden wären, würde die Dynamik Abweichungen vom Verhalten des offenen Zweimuldensystems zeigen. Das liegt daran, dass das betrachtete Viermuldensystem, welches eine Minimallösung zur Realisierung von \mathcal{PT} -Symmetrie durch Einbettung in ein hermitesches System darstellt [30], nur vier reelle Parameter zur Verfügung hat, mit welchen das Verhalten des offenen Systems simuliert werden kann. Mit ihnen können somit maximal die vier Größen n_2 , n_3 , \tilde{j}_{23} und c_{23} der ersten Ordnung angepasst werden.

Mithilfe des in dieser Arbeit vorgestellten Verfahrens lässt sich demnach das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems in der ersten Ordnung der Hierarchie der Beschreibung des Vielteilchensystems mithilfe unreiner Anfangszustände der Form (6.44), welche die Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) erfüllen, und der Zeitabhängigkeiten (6.8) und (6.26) der Kontrollparameter realisieren. Durch Ersetzung der Nebenbedingungen (6.34)-(6.38) durch passende andere ließe sich mit diesem Verfahren analog unter Verwendung derselben Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter auch das Verhalten der \mathcal{PT} -brechenden Zustände in der Einteilchendynamik des Vielteilchensystems einstellen. Die in dieser Arbeit zur Bestimmung der Dynamik des Vielteilchensystems verwendete BBR-Methode stellt eine Näherung der kompletten Vielteilchendynamik dar. Um genauere Ergebnisse insbesondere für geringe Teilchenzahlen zu erhalten, kann in weiteren Untersuchungen eine Auswertung der Dynamik mithilfe des Bose-Hubbard-Modells erfolgen.

Die hier vorgestellte Methode bietet die Möglichkeit, weitere Nebenbedingungen an

den Anfangszustand zu stellen, da noch viele bisher ungenutzte Freiheitsgrade zur Verfügung stehen. Damit könnten prinzipiell Bedingungen an Elemente höherer Ordnungen erfüllt werden, wobei numerische Schwierigkeiten nicht ausgeschlossen werden können. Um das gewünschte Verhalten in höheren Ordnungen auch in der Dynamik zu erzielen, müsste hierzu ein System bestehend aus mehr als nur vier Mulden verwendet werden, um zusätzliche Parameter zur Verfügung zu haben, mit welchen dann auch das Verhalten höherer Ordnung in der Dynamik kontrolliert werden kann. Somit könnte auf diese Art und Weise das Verhalten der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems auch in höheren Ordnungen des Vielteilchensystems realisiert werden.

A. Stationäre Lösungen des offenen Zweimuldensystems

In diesem Anhang werden die stationären Lösungen des Zweimodenmodells (2.11) angegeben und die Lösungsstruktur anhand eines Bifurkationsdiagramms erläutert.

A.1. Lösung der zeitunabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung für das offene Zweimuldensystem aus Abschnitt 2.2 ist gegeben durch

$$\begin{pmatrix} g|\psi_1|^2 + i\gamma & -J \\ -J & g|\psi_2|^2 - i\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad (2.11)$$

mit dem Eigenwert μ , welcher zugleich das chemische Potential des Systems darstellt. Gesucht sind nun die Eigenzustände und die zugehörigen Eigenwerte. Die folgende Herleitung orientiert sich dabei an den Ausführungen in [15].

Mithilfe einer Energieverschiebung $\tilde{\mu}$ mit

$$\tilde{\mu} = \mu - \frac{g}{2} = \mu - c, \quad (A.1)$$

wobei $c = g/2$, erhält man aus Gleichung (2.11) eine GPE der Form

$$\begin{pmatrix} c\kappa + i\gamma & -J \\ -J & -c\kappa - i\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \tilde{\mu} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}. \quad (A.2)$$

Hierbei wurde das Besetzungsungleichgewicht κ eingeführt mit

$$\kappa = |\psi_1|^2 - |\psi_2|^2 \quad (A.3)$$

und zudem vorausgesetzt, dass die Wellenfunktion normiert ist, d.h. dass $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 = 1$ gilt. Multiplikation der ersten Zeile von Gleichung (A.2) mit ψ_1^* und der zweiten Zeile mit ψ_2^* und anschließende Addition beider Zeilen führt auf einen Ausdruck für das chemische Potential $\tilde{\mu}$:

$$\tilde{\mu} = (c\kappa + i\gamma)\kappa - J(\psi_1^*\psi_2 + \psi_1\psi_2^*). \quad (A.4)$$

A. Stationäre Lösungen des offenen Zweimuldensystems

Ein allgemeiner Ansatz¹ zur Lösung von Gleichung (A.2), welcher die Normierung bereits enthält, lautet

$$\psi_1 = \sqrt{\frac{1+\kappa}{2}} e^{i\varphi}, \quad (\text{A.5a})$$

$$\psi_2 = \sqrt{\frac{1-\kappa}{2}} e^{-i\varphi}. \quad (\text{A.5b})$$

Setzt man den Ansatz (A.5) in Gleichung (A.4) ein, so lautet der Ausdruck für das chemische Potential nun

$$\tilde{\mu} = (c\kappa + i\gamma)\kappa - J\sqrt{1-\kappa^2} \cos(2\varphi). \quad (\text{A.6})$$

Einsetzen des Ansatzes (A.5) in Gleichung (A.2) führt nach Elimination von $\tilde{\mu}$ auf

$$2(c\kappa + i\gamma) + J \left(\sqrt{\frac{1+\kappa}{1-\kappa}} e^{2i\varphi} - \sqrt{\frac{1-\kappa}{1+\kappa}} e^{-2i\varphi} \right) = 0. \quad (\text{A.7})$$

Wird Gleichung (A.7) in Real- und Imaginärteil aufgeteilt, liefert dies das Gleichungssystem

$$c\kappa + \frac{\kappa}{\sqrt{1-\kappa^2}} J \cos(2\varphi) = 0, \quad (\text{A.8a})$$

$$\gamma + \frac{J}{\sqrt{1-\kappa^2}} \sin(2\varphi) = 0. \quad (\text{A.8b})$$

An der Struktur von Gleichung (A.8a) erkennt man, dass zwei verschiedene Fälle unterschieden werden müssen, nämlich die Fälle $\kappa = 0$ und $\kappa \neq 0$, welche im Folgenden betrachtet werden.

\mathcal{PT} -symmetrische Lösungen ($\kappa = 0$):

Für $\kappa = 0$ ist Gleichung (A.8a) stets erfüllt und liefert keine weitere Aussage. Zur Bestimmung der Phase verbleibt nur Gleichung (A.8b), welche für $\kappa = 0$ den Ausdruck

$$\sin(2\varphi) = -\frac{\gamma}{J} \quad (\text{A.9})$$

liefert. Das Argument des Sinus ist 2φ , was der Phasendifferenz von ψ_1 und ψ_2 im Ansatz (A.5) entspricht. Diese Größe besitzt nur im Intervall $[-\pi, +\pi]$ eine physikalische Bedeutung, d.h. die Gleichung (A.9) liefert zwei relevante Lösungen, nämlich

$$\varphi_{s,g} = -\frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{\gamma}{J}\right) \quad (\text{A.10a})$$

¹Bemerkung: Durch Multiplikation mit einer globalen Phase können die Phasen stets antisymmetrisch gewählt werden.

und

$$\varphi_{s,e} = \frac{1}{2} \arcsin\left(\frac{\gamma}{J}\right) - \frac{\pi}{2}. \quad (\text{A.10b})$$

Der Index s steht dabei für die symmetrische Lösung, der Index g bezeichnet den energetisch tiefer gelegenen Grundzustand (unterer Ast im Bifurkationsdiagramm in Abbildung A.1) und der Index e den energetisch höher gelegenen angeregten Zustand (oberer Ast im Bifurkationsdiagramm in Abbildung A.1). Die zu diesen beiden Lösungen gehörenden Eigenwerte sind gegeben durch

$$\mu_s = \frac{g}{2} \pm \sqrt{J^2 - \gamma^2}. \quad (\text{A.11})$$

Zusammengefasst ergeben sich die \mathcal{PT} -symmetrischen Eigenzustände des Systems zu

$$\psi_{s,g} = \begin{pmatrix} \sqrt{n}e^{i\varphi_{s,g}} \\ \sqrt{n}e^{-i\varphi_{s,g}} \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

für den Grundzustand und zu

$$\psi_{s,e} = \begin{pmatrix} \sqrt{n}e^{i\varphi_{s,e}} \\ \sqrt{n}e^{-i\varphi_{s,e}} \end{pmatrix} \quad (\text{A.13})$$

für den angeregten Zustand.

\mathcal{PT} -gebrochene Lösungen ($\kappa \neq 0$):

Für $\kappa \neq 0$ lässt sich Gleichung (A.8a) durch κ dividieren. Somit verbleiben für den \mathcal{PT} -brechenden Fall zwei Gleichungen zur Bestimmung von φ und κ . Quadrieren der Gleichungen (A.8), anschließende Addition und Auflösen nach κ liefert

$$\kappa = \pm \sqrt{1 - \frac{J^2}{c^2 + \gamma^2}}. \quad (\text{A.14})$$

Um φ zu berechnen, wird Gleichung (A.14) in die Gleichungen (A.8) eingesetzt. Man erhält

$$c\sqrt{\frac{J^2}{c^2 + \gamma^2}} = -J \cos(2\varphi) \quad (\text{A.15a})$$

und

$$\gamma\sqrt{\frac{J^2}{c^2 + \gamma^2}} = -J \sin(2\varphi). \quad (\text{A.15b})$$

Division der beiden Gleichungen (A.15) führt auf

$$\tan(2\varphi) = \frac{\gamma}{c}. \quad (\text{A.16})$$

Da das Argument 2φ des Tangens wieder die Phasendifferenz zwischen ψ_1 und ψ_2 darstellt und im Intervall $[-\pi, +\pi]$ liegen muss, ist hier der entsprechende Zweig des Arkustangens auszuwählen. Wie in Abschnitt 2.2 erwähnt, sollen in dieser Arbeit positive Werte von g und γ betrachtet werden. Unter dieser Voraussetzung erhält man für die Phase

$$\varphi_a = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{\gamma}{c}\right) - \frac{\pi}{2}, \quad (\text{A.17})$$

wobei der Index a die antisymmetrische Lösung bezeichnet. Um das chemische Potential für die \mathcal{PT} -brechende Lösung zu finden, werden die Gleichungen (A.14) und (A.17) in Gleichung (A.4) eingesetzt. Man erhält

$$\mu_a = g \pm i\gamma \sqrt{\frac{J^2}{c^2 + \gamma^2} - 1} = g \mp i\gamma\kappa, \quad (\text{A.18})$$

d.h. der zur \mathcal{PT} -brechenden Lösung zugehörigen Eigenwerte sind komplex. Insgesamt ergeben sich die \mathcal{PT} -brechenden Eigenzustände zu

$$\psi_a = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{\kappa+1}{2}} e^{i\varphi_a} \\ \sqrt{\frac{\kappa-1}{2}} e^{-i\varphi_a} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.19})$$

A.2. Bifurkationsdiagramm

Stellt man den Wert des chemischen Potentials (A.11) bzw. (A.18) über dem Parameter γ dar, so erhält man den im Bifurkationsdiagramm in Abbildung A.1 dargestellten Verlauf. Für $J = 1$ fallen die \mathcal{PT} -symmetrische Lösung (A.11) (angeregter Zustand) und die beiden \mathcal{PT} -brechenden Lösungen (A.18) am sogenannten Tripelpunkt γ_t [50] bei

$$\gamma_t = \sqrt{1 - \frac{g^2}{4}} \quad (\text{A.20})$$

zusammen. Der Tripelpunkt stellt einen exzeptionellen Punkt dar.

Für $\gamma < \gamma_t$ existieren im System nur die beiden \mathcal{PT} -symmetrischen Lösungen, die zugehörigen Eigenwerte sind rein reell. Zwischen $\gamma = \gamma_t$ und $\gamma = 1$ findet man sowohl \mathcal{PT} -symmetrische als auch \mathcal{PT} -brechende Lösungen und für $\gamma > 1$ existieren nur \mathcal{PT} -brechende Lösungen.

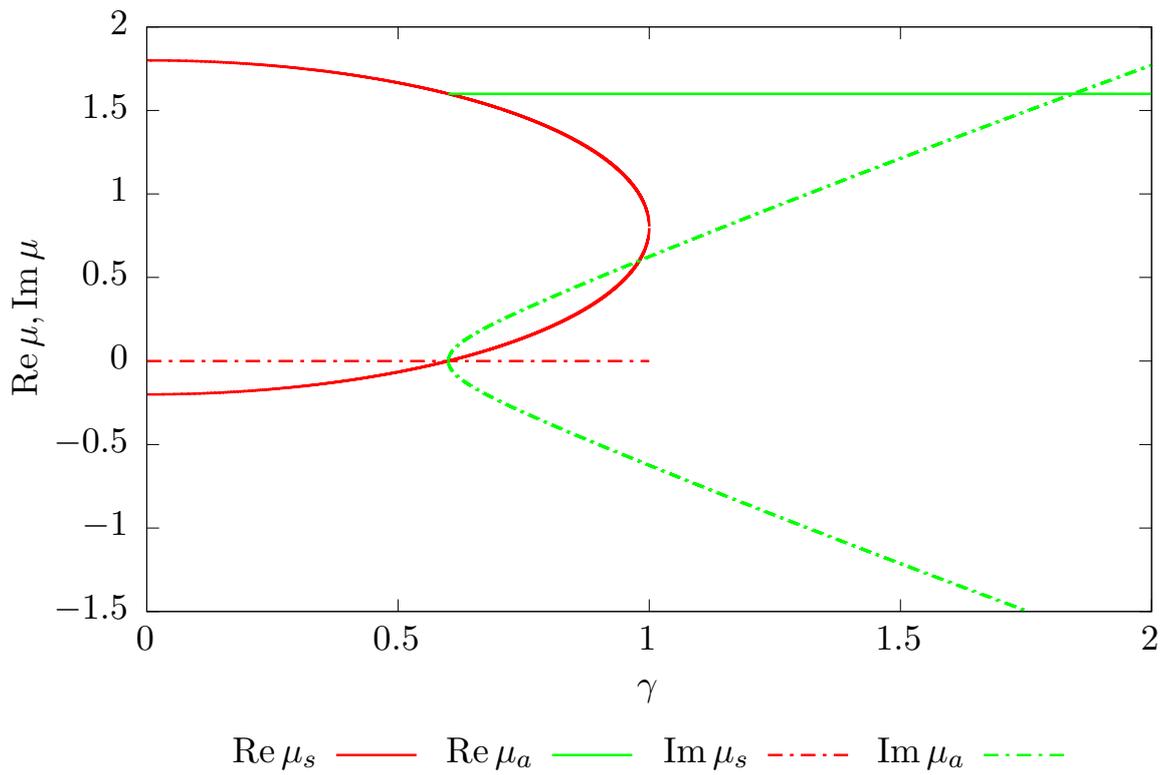


Abbildung A.1.: Bifurkationsdiagramm für $g = 1.6$. Dargestellt sind Real- und Imaginärteil der chemischen Potentiale (A.11) und (A.18). Der Tripelpunkt befindet sich bei $\gamma_t = 0.6$.

B. Dynamik \mathcal{PT} -symmetrischer Zustände im Mean-Field

In diesem Anhang wird die Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände des offenen Zweimuldensystems im hermiteschen Viermuldensystem bestimmt. Dabei werden die in [33] gegebenen Gleichungen verwendet. Die Betrachtungen erfolgen im Mean-Field-Limit mit dem Anfangszustand (3.15) und den Zeitabhängigkeiten (3.7) und (3.13) der Kontrollparameter.

Im Folgenden werden analytische Ausdrücke für die Zeitabhängigkeit der Kontrollparameter zur Berechnung der Dynamik der \mathcal{PT} -symmetrischen Zustände in der Mean-Field-Beschreibung gegeben und die Dynamik bestimmt. Für eine ausführlichere Behandlung sei auf [30, 33] verwiesen.

Da das hermitesche Viermuldensystem ein geschlossenes System darstellt, ergibt sich die zeitliche Änderung der Besetzungszahlen aus den Tunnelströmen in die jeweilige Mulde hinein und aus der jeweiligen Mulde heraus (siehe auch Abschnitt 5.1.2). Es folgen

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{1,M=4} = -j_{12} = -2\gamma n_2, \quad (\text{B.1a})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{2,M=4} = j_{12} - j_{23} = 0, \quad (\text{B.1b})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{3,M=4} = j_{23} - j_{34} = 0 \quad (\text{B.1c})$$

und

$$\frac{\partial}{\partial t} n_{4,M=4} = j_{34} = 2\gamma n_3, \quad (\text{B.1d})$$

wobei verwendet wurde, dass für den Strom zwischen den mittleren beiden Mulden mithilfe von Gleichung (3.14a) für den \mathcal{PT} -symmetrischen Anfangszustand (3.15)

$$\tilde{j}_{23} = 2\gamma n(0) \quad (\text{B.2})$$

folgt. Damit ergibt für die Zeitabhängigkeit der Besetzungszahlen zu

$$n_1(t) = n_1(0) - 2\gamma n t, \quad (\text{B.3a})$$

$$n_2(t) = n(0), \quad (\text{B.3b})$$

$$n_3(t) = n(0) \quad (\text{B.3c})$$

und

$$n_4(t) = n_4(0) + 2\gamma n t. \quad (\text{B.3d})$$

Die Gleichungen (B.3) zeigen, dass die Anzahl der Teilchen in den inneren beiden Mulden zeitlich konstant ist und sich die Reservoirmulden linear leeren bzw. füllen. Gleichung (3.14a) liefert, dass der Strom j_{23} zwischen den beiden inneren Mulden stationär ist und nach Gleichung (3.14b) bleibt auch die Korrelation c_{23} konstant. Es liegt also \mathcal{PT} -Symmetrie im eingebetteten System vor. Die dazu erforderlichen Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter lassen sich für diesen Fall in analytischer Form angeben. Die Gleichungen (3.7) für die Zeitabhängigkeit der Tunnelraten ergeben für den \mathcal{PT} -symmetrischen Anfangszustand (3.15) die analytischen Ausdrücke

$$J_{12}(t) = \gamma \sqrt{\frac{n(0)}{n_1(0) - 2\gamma n(0)t}} \quad (\text{B.4a})$$

und

$$J_{34}(t) = \gamma \sqrt{\frac{n(0)}{n_4(0) + 2\gamma n(0)t}}. \quad (\text{B.4b})$$

Für die Zeitabhängigkeiten der Onsite-Energien lassen sich ebenfalls analytische Lösungen finden. Mithilfe der Gleichungen (3.13) ergeben sich

$$\epsilon_1(t) = gn(0) - J \cos(2\varphi) - gn_1(0) + 2g\gamma n(0)t = \mu_s - gn_1(0) + 2g\gamma n(0)t \quad (\text{B.5a})$$

und

$$\epsilon_4(t) = gn(0) - J \cos(2\varphi) - gn_4(0) - 2g\gamma n(0)t = \mu_s - gn_4(0) - 2g\gamma n(0)t, \quad (\text{B.5b})$$

wobei μ_s das chemische Potential (A.11) des offenen Zweimuldensystems darstellt.

In Abbildung B.1 ist die Dynamik des \mathcal{PT} -symmetrischen Anfangszustands (3.15) mit den Zeitabhängigkeiten (3.7) und (3.13) der Kontrollparameter dargestellt.

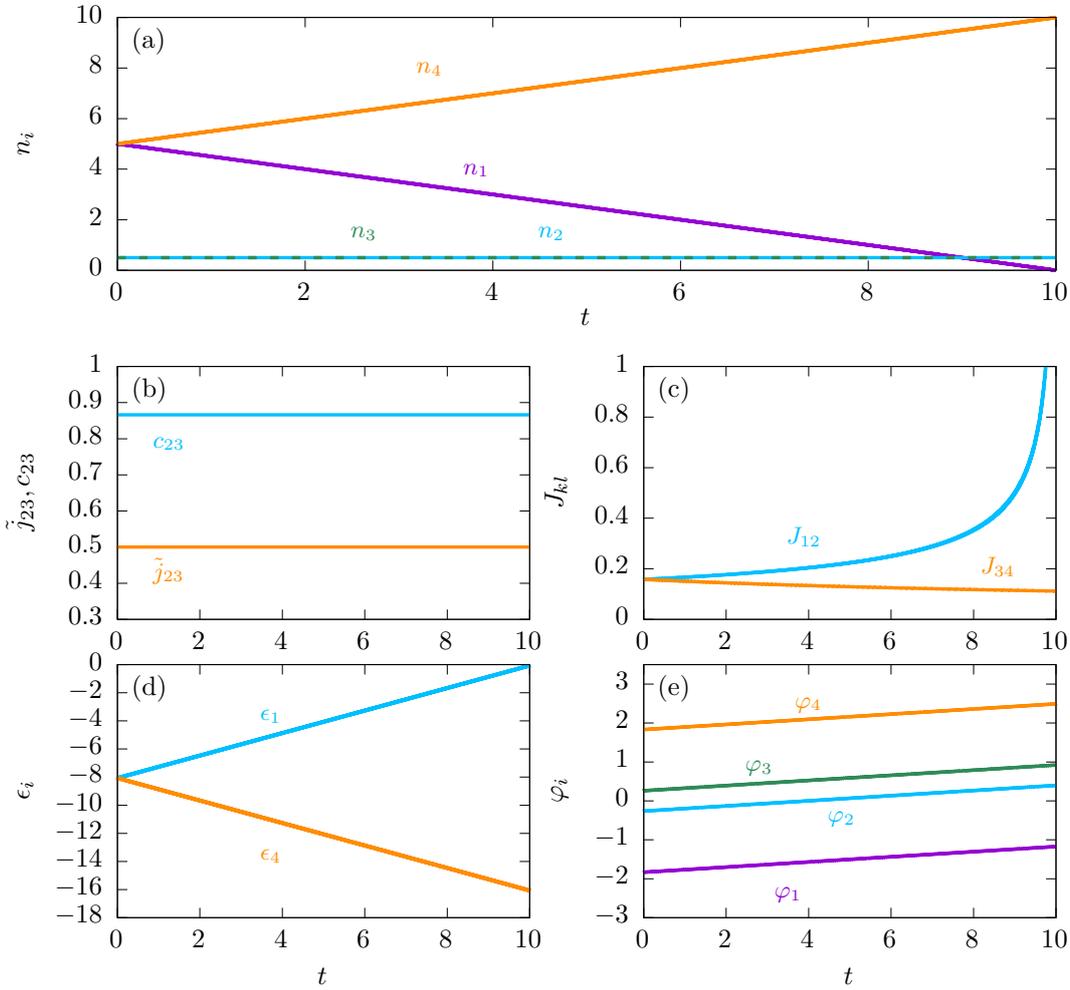


Abbildung B.1.: Mean-Field-Dynamik des \mathcal{PT} -symmetrischen Zustands (3.15) für die Parameter $g = 1.6$ und $\gamma = 0.5$, berechnet durch Lösung des 4×4 Matrixmodells (3.1) mit den Zeitabhängigkeiten (3.7) und (3.13) der Kontrollparameter. Es ist die Dynamik der (a) Besetzungszahlen n_i in den einzelnen Mulden, (b) der Größen \tilde{j}_{23} und c_{23} , (c) der Tunnelraten J_{kl} , (d) der Onsite-Energien ϵ_k und (e) der Phasen φ_k dargestellt. Im Mean-Field lässt sich folglich \mathcal{PT} -Symmetrie in den mittleren beiden Mulden realisieren.

C. Herleitung der Näherungsformel der BBR-Methode

In diesem Anhang wird eine Herleitung der Näherungsformel (4.17) für die Elemente σ_{klmnr} der Dreiteilchendichtematrix, welche in [42, 43, 46] verwendet wird, gegeben. Die hier dargestellte Herleitung orientiert sich dabei an den Ausführungen in [35]. Es wird angegeben, wie die bei der Näherung vernachlässigten Terme mit der Teilchenzahl skalieren.

Für ein Erzeuger-Vernichter-Paar wird im Folgenden, in Anlehnung an [35], die Abkürzung

$$\hat{A}_j = \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \quad (\text{C.1})$$

verwendet, um die folgenden Gleichungen übersichtlicher zu gestalten. Der Index j steht dabei für ein Paar (k, l) .

Dichtematrizen lassen sich stets diagonalisieren (siehe dazu auch Anhang D). Ist die Einteilchendichtematrix $\hat{\sigma}$ in der Basis $|\phi_i\rangle$ diagonal, so lässt sie sich mit den entsprechenden Eigenwerten λ_i darstellen als

$$\hat{\sigma} = \sum_i \lambda_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i|. \quad (\text{C.2})$$

Die Basisvektoren sollen dabei so angeordnet sein, dass für die korrespondierenden Eigenwerte $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots$ gilt. Die Größe f soll im Folgenden den Anteil der Teilchen darstellen, die sich nicht im Kondensatzustand befinden. Der größte Eigenwert ist dann gegeben durch $\lambda_1 = N_{\text{ges}}(1 - f)$, für alle anderen Eigenwerte gilt folglich $\lambda_j \leq f N_{\text{ges}}$.

Der Operator, der ein Teilchen in der Basis $|\phi_i\rangle$ vernichtet, soll mit \hat{b}_j bezeichnet werden, der Erzeuger mit \hat{b}_j^\dagger , wobei $\hat{b}_j^\dagger|0\rangle = |\phi_j\rangle$ gilt. Das Erzeuger-Vernichter-Paar \hat{A}_j lässt sich in dieser Basis darstellen als

$$\hat{A}_j = \sum_{r,s} a_{rs}^j \hat{b}_r^\dagger \hat{b}_s, \quad (\text{C.3})$$

wobei die Koeffizienten a_{rs}^j für die folgenden Betrachtungen nicht bekannt sein müssen.

Nun wird angenommen, dass sich die Mehrzahl der Bosonen im Kondensatzustand befindet, d.h. es ist $f \ll 1$ und $(1 - f)N_{\text{ges}} \approx N_{\text{ges}}$. Wird die Wirkung der Erzeuger und Vernichter auf einen Zustand mit $(1 - f)N_{\text{ges}}$ Bosonen im Kondensatzustand betrachtet,

so ergeben sich

$$\begin{aligned}\hat{b}_1^\dagger|(1-f)N_{\text{ges}}, \dots\rangle &= \sqrt{(1-f)N_{\text{ges}} + 1}|(1-f)N_{\text{ges}} + 1, \dots\rangle \\ &\approx \sqrt{N_{\text{ges}}}|(1-f)N_{\text{ges}} + 1, \dots\rangle\end{aligned}\quad (\text{C.4a})$$

und

$$\begin{aligned}\hat{b}_1|(1-f)N_{\text{ges}}, \dots\rangle &= \sqrt{(1-f)N_{\text{ges}}}|(1-f)N_{\text{ges}} - 1, \dots\rangle \\ &\approx \sqrt{N_{\text{ges}}}|(1-f)N_{\text{ges}} - 1, \dots\rangle.\end{aligned}\quad (\text{C.4b})$$

Wird ein einzelnes Teilchen in den Kondensatzustand eingebracht oder ausgekoppelt, so wirkt sich dies nicht wesentlich auf den Zustand des Systems aus, sofern sich eine größere Anzahl Teilchen im Kondensatzustand befindet. Somit kann die Operatornatur von \hat{b}_1^\dagger bzw. \hat{b}_1 vernachlässigt werden und die Gleichungen (C.4) liefern die Ersetzungsvorschriften

$$\hat{b}_1^\dagger \rightarrow \sqrt{N_{\text{ges}}}, \quad (\text{C.5a})$$

$$\hat{b}_1 \rightarrow \sqrt{N_{\text{ges}}}. \quad (\text{C.5b})$$

Mithilfe der Ersetzungen (C.5) lässt sich Gleichung (C.3) schreiben als

$$\hat{A}_j = a_{11}^j N_{\text{ges}} + \sum_{r,s \neq 1,1} a_{rs}^j \hat{b}_r^\dagger \hat{b}_s \equiv A_j + \delta \hat{A}_j, \quad (\text{C.6})$$

d.h. besteht nun aus einer c-Zahl der Ordnung $\mathcal{O}(N_{\text{ges}})$ und dem Operator $\delta \hat{A}_j$ mit der Ordnung $\mathcal{O}(N_{\text{ges}} \sqrt{f})^1$.

C.1. Abschneiden der BBGKY-Hierarchie nach der ersten Ordnung

In diesem Abschnitt wird die BBGKY-Hierarchie nach der ersten Ordnung abgeschnitten und die Elemente zweiter Ordnung werden durch die Elemente der ersten Ordnung genähert. Dies soll als Vorbereitung für die Herleitung der BBR-Näherung in Abschnitt C.2 dienen.

Um die Momente zweiter Ordnung durch die Elemente erster Ordnung auszudrücken, muss eine Funktion g bestimmt werden, die

$$\langle \hat{A}_j \hat{A}_k \rangle \approx g \left(\langle \hat{A}_j \rangle, \langle \hat{A}_k \rangle \right), \quad (\text{C.7})$$

¹Alle Zustände, der Kondensatzustand ausgenommen, sind mit maximal $f N_{\text{ges}}$ Teilchen besetzt. Die größten Beiträge in $\delta \hat{A}_j$ werden von denjenigen Termen geliefert, die entweder \hat{b}_1^\dagger oder \hat{b}_1 enthalten. Die führende Ordnung besitzt demnach die Größenordnung $\sqrt{N_{\text{ges}}} \sqrt{f N_{\text{ges}}} = N_{\text{ges}} \sqrt{f}$.

erfüllt. Mit der Näherung (C.6) folgt für die linke Seite der Gleichung (C.7)

$$\langle \hat{A}_j \hat{A}_k \rangle = A_j A_k + A_j \langle \delta \hat{A}_k + A_k \rangle \delta \hat{A}_j + \delta \hat{A}_j \delta \hat{A}_k. \quad (\text{C.8})$$

Für die Form der Funktion g gibt es in diesem Fall nur eine Möglichkeit, nämlich

$$g \left(\langle \hat{A}_j \rangle, \langle \hat{A}_k \rangle \right) = \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \rangle. \quad (\text{C.9})$$

Die Terme, die in Gleichung (C.9) gegenüber Gleichung (C.8) vernachlässigt werden, sind von der Größenordnung $\mathcal{O}(N_{\text{ges}}^2 f)$, d.h.

$$\langle \hat{A}_j \hat{A}_k \rangle = \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \rangle + \mathcal{O}(N_{\text{ges}}^2 f) \approx \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \rangle. \quad (\text{C.10})$$

In dieser Näherung werden folglich die Kovarianzen (4.21) vernachlässigt, was der Mean-Field-Näherung entspricht.

C.2. Abschneiden der BBGKY-Hierarchie nach der zweiten Ordnung

In diesem Abschnitt wird die BBGKY-Hierarchie nach der zweiten Ordnung abgeschnitten, wodurch man die BBR-Methode erhält. Die Elemente dritter Ordnung werden dabei durch eine Kombination der Elemente erster und zweiter Ordnung genähert. Es gilt also wieder eine Funktion g zu finden, welche

$$\langle \hat{A}_j \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle \approx g \left(\langle \hat{A}_a \hat{A}_b \rangle, \langle \hat{A}_c \rangle \right) \quad (\text{C.11})$$

mit $a, b, c \in \{j, k, l\}$ liefert. Die linke Seite von Gleichung (C.11) liefert

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_j \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle &= A_j \langle \delta \hat{A}_k \delta \hat{A}_l \rangle + A_k \langle \delta \hat{A}_j \delta \hat{A}_l \rangle + A_l \langle \delta \hat{A}_j \delta \hat{A}_k \rangle \\ &+ A_j A_k \langle \delta \hat{A}_l \rangle + A_j A_l \langle \delta \hat{A}_k \rangle + A_k A_l \langle \delta \hat{A}_j \rangle \\ &+ A_j A_k A_l + \langle \delta \hat{A}_j \delta \hat{A}_k \delta \hat{A}_l \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

Der letzte Term $\langle \delta \hat{A}_j \delta \hat{A}_k \delta \hat{A}_l \rangle$ in Gleichung (C.12) besitzt die kleinste Größenordnung. Die Funktion g soll diesen Summanden daher nicht erzeugen, sondern er wird vernachlässigt. Ein entsprechender Ansatz dafür lautet

$$\begin{aligned} g \left(\langle \hat{A}_a \hat{A}_b \rangle, \langle \hat{A}_c \rangle \right) &= \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle + \langle \hat{A}_k \rangle \langle \hat{A}_j \hat{A}_l \rangle + \langle \hat{A}_l \rangle \langle \hat{A}_j \hat{A}_k \rangle \\ &+ \eta \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \rangle \langle \hat{A}_l \rangle, \end{aligned} \quad (\text{C.13})$$

mit einem noch zu bestimmenden Faktor η . Wird die Näherung (C.6) in den Ansatz (C.13) eingesetzt, so ergibt sich $\eta = -2$. Aufgrund des Vernachlässigen des Summanden

C. Herleitung der Näherungsformel der BBR-Methode

$\langle \delta \hat{A}_j \delta \hat{A}_k \delta \hat{A}_l \rangle$, welcher in der führenden Ordnung die Größenordnung $\mathcal{O}(f^{3/2} N_{\text{ges}})$ besitzt, erhält man

$$\begin{aligned} \langle \hat{A}_j \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle &= \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle + \langle \hat{A}_k \rangle \langle \hat{A}_j \hat{A}_l \rangle + \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle - 2 \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \rangle \langle \hat{A}_l \rangle + \mathcal{O}(N_{\text{ges}}^3 f^{3/2}) \\ &\approx \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle + \langle \hat{A}_k \rangle \langle \hat{A}_j \hat{A}_l \rangle + \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \hat{A}_l \rangle - 2 \langle \hat{A}_j \rangle \langle \hat{A}_k \rangle \langle \hat{A}_l \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.14})$$

Es zeigt sich, dass das Abschneiden der BBGKY-Hierarchie nach der zweiten Ordnung (=BBR-Methode) eine Verbesserung um den Faktor $f^{1/2}$ gegenüber des Abschneidens nach der ersten Ordnung darstellt.

D. Definition der Reinheit

In diesem Anhang wird die in dieser Arbeit verwendete Definition der Reinheit erläutert. Zunächst werden dazu einige Eigenschaften des Dichteoperators zusammengefasst, wie sie beispielsweise in [51, 52] zu finden sind.

Ein Quantensystem befindet sich in einem Zustand, der als *rein* bezeichnet wird, wenn es mit einem Zustandsvektor $|\psi\rangle$ aus dem Hilbertraum beschrieben werden kann. Das System befindet sich dann mit der Wahrscheinlichkeit $p = 1$ in diesem Zustand. Der Dichteoperator ist dann einfach die Projektion $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ auf den Zustand $|\psi\rangle$.

Ein *Zustandsgemisch* hingegen besteht aus reinen Zuständen ψ_i mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung p_i mit $\sum_i p_i = 1$. Der Dichteoperator ist dann gegeben durch

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|. \quad (\text{D.1})$$

Er hat folgende Eigenschaften:

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger \quad \text{selbstadjugiert,} \quad (\text{D.2})$$

$$\langle\psi|\hat{\rho}|\psi\rangle \geq 0 \quad \text{positiv definit,} \quad (\text{D.3})$$

$$\text{tr } \hat{\rho} = 1 \quad \text{normiert.} \quad (\text{D.4})$$

Aufgrund der Eigenschaft (D.2) kann der Dichteoperator immer diagonalisiert werden,

$$\hat{\rho} = \sum_u \rho_u |\rho_u\rangle\langle\rho_u|, \quad (\text{D.5})$$

wobei alle Eigenwerte ρ_u wegen der Eigenschaft (D.3) positiv sind und wegen der Normierung (D.4) zwischen null und eins liegen. Dabei gilt $\sum_u \rho_u = 1$. Die Eigenwerte haben demnach die Bedeutung von Wahrscheinlichkeiten. Im Falle eines reinen Zustands existiert ein Eigenwert, welcher den Wert eins besitzt, alle übrigen sind gleich null. Befindet sich das System in einem gemischten Zustand, so ist dies nicht der Fall.

Die Reinheit P eines Quantensystems wird daher oftmals definiert als die Spur des Quadrats der Dichtematrix ρ [51]

$$P = \text{tr}(\rho^2). \quad (\text{D.6})$$

Bei dieser Definition nimmt P Werte zwischen $1/D$ und 1 an, wenn mit D die Dimension des Systems bezeichnet wird.

D. Definition der Reinheit

Die reduzierte Einteilchendichtematrix $\sigma_{1,\text{red}}$ ergibt sich aus der Einteilchendichtematrix σ_1 , welche sich aus dem Einteilchendichteoperator in Gleichung (4.8a) berechnet, über

$$\sigma_{1,\text{red}} = \frac{\sigma_1}{\text{tr } \sigma_1}, \quad (\text{D.7})$$

wobei $\text{tr } \sigma_1 = \sum_i \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle = \sum_i \langle \hat{n}_i \rangle$ ist. Die Reinheit der reduzierten Einteilchendichtematrix ist nach (D.6) gegeben durch

$$P' = \text{tr } \sigma_{1,\text{red}}^2. \quad (\text{D.8})$$

In dieser Arbeit wird eine davon abweichende Definition für die Reinheit verwendet, welche in [28, 35] vorgeschlagen wird. Der Ausdruck (D.6) wird dabei so modifiziert, dass P Werte zwischen null und eins annimmt, nämlich

$$P_M = \frac{M \text{tr} (\sigma_{\text{red}} \cdot \sigma_{\text{red}}) - 1}{M - 1}. \quad (\text{D.9})$$

Für ein reines Bose-Einstein-Kondensat nimmt die reduzierte Einteilchendichtematrix die Form

$$\sigma_{1,\text{red}} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & \ddots \end{pmatrix} \quad (\text{D.10})$$

an. Der unreinste Zustand, in dem sich das System befinden kann, ist bei M Mulden gegeben durch

$$\sigma_{1,\text{red}} = \begin{pmatrix} 1/M & & \\ & 1/M & \\ & & \ddots \end{pmatrix}. \quad (\text{D.11})$$

Für $P = 1$ liegt dann ein gänzlich reiner Zustand mit einer reduzierten Einteilchendichtematrix der Form (D.10) vor, der sich als Produktzustand von Einteilchenzuständen darstellen lässt [35]. Für $P = 0$ ist der Zustand, in dem sich das System befindet, maximal unrein und die reduzierte Einteilchendichtematrix nimmt die Form (D.11) an.

E. Erläuterungen zur Implementierung

E.1. Normierung der BBR-Methode

Bei Beschreibung des Vielteilchensystems mithilfe des Bose-Hubbard-Modells wächst der Hilbertraum gemäß Gleichung (4.4) mit der Teilchenzahl. Bei höheren Teilchenzahlen stößt man schnell an die Grenzen der Numerik. Die BBR-Methode bietet den Vorteil, dass der numerische Aufwand nicht mit der Teilchenzahl skaliert, sondern diese nur als Parameter eingeht.

Die numerische Auswertung der Bewegungsgleichungen (4.12) und (4.16) kann durch Normierung der Elemente der Dichtematrizen verbessert werden. Liegen alle Größen in der Größenordnung eins, so treten weniger Probleme mit numerischen Effekten wie beispielsweise der Stellenauslöschung auf.

Wie in Anhang C bei der Herleitung der Näherungsformel für die BBR-Methode gezeigt, besitzen die Elemente σ_{kl} der Einteilchendichtematrix die Ordnung $\mathcal{O}(N_{\text{ges}})$ und die Elemente σ_{klmn} der Zweiteilchendichtematrix die Ordnung $\mathcal{O}(N_{\text{ges}}^2)$. Um Elemente der Größenordnung eins zu erhalten, werden die Elemente σ_{kl} mit N_{ges} normiert, die Elemente σ_{klmn} hingegen mit N_{ges}^2 ,

$$\sigma_{kl,\text{norm.}} = \frac{\sigma_{kl}}{N_{\text{ges}}}, \quad (\text{E.1})$$

$$\sigma_{klmn,\text{norm.}} = \frac{\sigma_{klmn}}{N_{\text{ges}}^2}. \quad (\text{E.2})$$

Da die nächsthöhere Ordnung stets mit einem Faktor N_{ges} skaliert, ergeben sich für die normierten Differentialgleichungen der BBR-Methode

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{kl} &= J_{k-1,k} \sigma_{k-1,l} + J_{k+1,k} \sigma_{k+1,l} - J_{l,l-1} \sigma_{k,l-1} - J_{l,l+1} \sigma_{k,l+1} \\ &\quad - U_k (N_{\text{ges}} \sigma_{kkkl} - \sigma_{kl}) + U_l (N_{\text{ges}} \sigma_{kl ll} - \sigma_{kl}) - (\epsilon_k - \epsilon_l) \sigma_{kl} \end{aligned} \quad (\text{E.3})$$

in der ersten Ordnung und

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} \sigma_{klmn} &= J_{k-1,k} \sigma_{k-1,lmn} + J_{k+1,k} \sigma_{k+1,lmn} - J_{l,l-1} \sigma_{k,l-1,mn} - J_{l,l+1} \sigma_{k,l+1,mn} \\ &\quad + J_{m-1,m} \sigma_{kl,m-1,m} + J_{m+1,m} \sigma_{kl,m+1,n} - J_{n,n-1} \sigma_{klm,n-1} - J_{n,n+1} \sigma_{klm,n+1} \\ &\quad - U_k (N_{\text{ges}} \sigma_{kkklmn} - \sigma_{klmn}) + U_l (N_{\text{ges}} \sigma_{kl ll mn} - \sigma_{klmn}) \\ &\quad - U_m (N_{\text{ges}} \sigma_{kl m m m n} - \sigma_{klmn}) + U_n (N_{\text{ges}} \sigma_{kl m n n n} - \sigma_{klmn}) \\ &\quad - (\epsilon_k - \epsilon_l + \epsilon_m - \epsilon_n) \sigma_{klmn} \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

in der zweiten Ordnung.

An dieser Stelle soll angemerkt werden, dass auch die jeweiligen Gleichungen für die Zeitabhängigkeiten der Kontrollparameter an den entsprechenden Stellen angepasst werden müssen.

E.2. Lexikographische Fock-Basis

Eine effiziente Methode [48], um eine Fock-Basis zu erzeugen, ist es, diese in einer lexikographischen Ordnung zu sortieren. Jedem Basisvektor der Fock-Basis wird dabei ein fester Index ν zugeordnet. Der Index $\nu = 1$ gehört zum höchsten Zustand $|\psi\rangle_1 = |n_1 = N_{\text{ges}}, n_2 = 0, \dots, n_M = 0\rangle$, der Index $\nu = D$ zum niedrigsten Zustand $|\psi\rangle_D = |n_1 = 0, \dots, n_{M-1} = 0, n_M = N_{\text{ges}}\rangle$, wobei D die Dimension der Basis bezeichnet und mit der Gesamtteilchenzahl N_{ges} und der Anzahl der Mulden M über Gleichung (4.4) zusammenhängt. Für zwei Basiszustände $|\psi\rangle = |n_1, \dots, n_M\rangle$ und $|\psi'\rangle = |n'_1, \dots, n'_M\rangle$ gilt $|\psi'\rangle < |\psi\rangle$, wenn ein Index $1 \leq m \leq M$ existiert, sodass $n'_{k < m} = n_{k < m}$ und $n'_k < n_k$.

Der Index $\nu(n_1, \dots, n_M)$ eines Basis-Zustands des Fock-Raumes ergibt sich zu [33, 49]

$$\nu(n_1, \dots, n_M) = 1 + \sum_{m=1}^{M-1} \sum_{\tilde{n}=0}^{N_{m-1}} D(\tilde{n}, M_m), \quad (\text{E.5})$$

wobei N_m die Anzahl der Teilchen im entsprechenden Unterraum bezeichnet und durch

$$N_m = N_{\text{ges}} - \sum_{k=1}^m n_k \quad (\text{E.6})$$

gegeben ist und M_m die Anzahl der Teilchen im entsprechenden Unterraum angibt und sich über

$$M_m = M - m \quad (\text{E.7})$$

bestimmen lässt. In Tabelle E.1 ist für $N_{\text{ges}} = 3$ und $M = 3$ ein Beispiel einer lexikographischen Basis dargestellt.

E.3. Lexikographische Sprungindizes

Um unreine Anfangswerte für die BBR-Methode zu bestimmen, müssen Erwartungswerte der Dichteoperatoren mit dem Zustand (6.44) bestimmt werden. Erwartungswerte solcher Operatoren, bestehend aus Paaren von Erzeugern und Vernichtern, können effizient mithilfe von Sprungindizes ausgewertet werden [49]. Für den Erwartungswert eines Operators \hat{O} gilt

$$\langle \psi_k | \hat{O} | \psi_l \rangle = \langle \psi_k | \psi_{l'} \rangle = \delta_{kl'}, \quad (\text{E.8})$$

d.h. er ist nur dann von null verschieden, wenn $k = l'$ wobei $|\psi_{l'}\rangle = \hat{O}|\psi_l\rangle$. Die Anzahl der Elemente, die gleich null sind, ist dabei sehr groß. Die Bedingung (E.8) müsste mit

Tabelle E.1.: Lexikographische Fock-Basis für $N_{\text{ges}} = 3$ und $M = 3$, nach [48].

ν	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

einer if-Abfrage D^2 -mal überprüft werden, was erstens sehr ineffizient ist und zweites müssen derartig viele solcher Erwartungswerte im Zuge des Minimierungsverfahrens in Unterabschnitt 6.3.3 berechnet werden, dass selbst für sehr geringe Teilchenzahlen keine akzeptable Rechenzeit erzielt werden würde.

Weitaus effizienter ist hingegen folgendes Verfahren [33, 49]: Das System befindet sich vor dem Sprung eines Teilchens vom Gitterplatz k zum Gitterplatz l im Zustand $|\psi\rangle = |n_1, \dots, n_M\rangle$ mit dem Index ν und nach dem Sprung im Zustand $|\psi'\rangle = |n'_1, \dots, n'_M\rangle$ mit dem Index ν' . Der neue Index ν' nach dem Sprung kann bestimmt werden mit

$$\nu' = \nu + s_{kl}, \quad (\text{E.9})$$

wobei s_{kl} die Verschiebung des Indexes ν bezeichnet und Sprungindex oder die Sprungverschiebung genannt wird. s_{kl} ist gegeben durch

$$s_{kl} = \begin{cases} -\sum_{m=\tilde{m}}^{\tilde{M}-1} D(N_m - 1, M_m), & n'_{\tilde{m}} > n_{\tilde{m}} \\ \sum_{m=\tilde{m}}^{\tilde{M}-1} D(N_m, M_m), & n'_{\tilde{m}} < n_{\tilde{m}}, \end{cases} \quad (\text{E.10})$$

mit

$$\tilde{m} = \min(k, l) \quad (\text{E.11})$$

und

$$\tilde{M} = \max(k, l). \quad (\text{E.12})$$

Auf diese Weise können direkt die Elemente in Gleichung (E.8) bestimmt werden, die ungleich null sind. Somit können Erwartungswerte von Erzeuger-Vernichter-Paaren, wie sie im Bose-Hubbard-Hamiltonian vorkommen, sehr einfach und effizient ausgewertet werden. Nicht-Nächster-Nachbar-Sprünge können ebenso, durch mehrmalige Anwendung des Verfahrens, ausgewertet werden. Daher empfiehlt sich die Verwendung des Zweiteilchenoperators (4.9) zur Auswertung der Dynamik anstelle des Operators (4.7b), da sich

E. Erläuterungen zur Implementierung

$\hat{\sigma}_{klmn}$ aus zwei Erzeuger-Vernichter-Paaren zusammensetzt, für welche nacheinander das obige Verfahren angewendet werden kann. Im Operator $\hat{\sigma}'_{klmn}$ hingegen tauchen erst die Erzeuger und dann die Vernichter auf, wobei sich das Verfahren nicht anwenden lässt. Eine Alternative stellt die Verwendung der Kovarianzen Δ_{klmn} in Gleichung (4.21) dar, da auch hier Erzeuger und Vernichter paarweise auftreten.

Literaturverzeichnis

- [1] N. Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge (2011).
- [2] C. M. Bender. Making sense of non-Hermitian Hamiltonians. *Rep. Prog. Phys.* 70, 947 (2007).
- [3] C. M. Bender und S. Boettcher. Real spectra in non-Hermitian Hamiltonians having \mathcal{PT} symmetry. *Phys. Rev. Lett.* 80, 5243 (1998).
- [4] C. M. Bender, S. Boettcher und P. N. Meisinger. \mathcal{PT} -symmetric quantum mechanics. *J. Math. Phys.* 40, 2201 (1999).
- [5] A. Mostafazadeh. \mathcal{QT} -symmetry and weak pseudo-hermiticity. *J. Phys. A* 41, 055304 (2008).
- [6] A. Mostafazadeh. Pseudo-hermitian representation of quantum mechanics. *Int. J. Geom. Meth. Mod. Phys.* 7, 1191 (2010).
- [7] C. M. Bender, D. C. Brody und H. F. Jones. Complex extension of quantum mechanics. *Phys. Rev. Lett.* 89, 270401 (2002).
- [8] A. Mostafazadeh. Pseudo-Hermiticity versus \mathcal{PT} symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian. *J. Math. Phys.* 43, 205 (2002).
- [9] 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).
- [10] C. E. Rüter, K. G. Makris, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, M. Segev und D. Kip. Observation of parity-time symmetry in optics. *Nat. Phys.* 6, 192 (2010).
- [11] S. Klaiman, U. Günther und N. Moiseyev. Visualization of branch points in \mathcal{PT} -symmetric waveguides. *Phys. Rev. Lett.* 101, 080402 (2008).
- [12] Z. H. Musslimani, K. G. Makris, R. El-Ganainy und D. N. Christodoulides. Optical solitons in \mathcal{PT} periodic potentials. *Phys. Rev. Lett.* 100, 030402 (2008).

- [13] K. G. Makris, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides und Z. H. Musslimani. \mathcal{PT} -symmetric optical lattices. *Phys. Rev. A* 81, 063807 (2010).
- [14] B. Peng, S. K. Özdemir, F. Lei, F. Monifi, M. Gianfreda, G. L. Long, S. Fan, F. Nori, C. M. Bender und L. Yang. Parity-time-symmetric whispering-gallery microcavities. *Nat. Phys.* 10, 394 (2014).
- [15] E.-M. Graefe. Stationary states of a \mathcal{PT} -symmetric two-mode Bose–Einstein condensate. *J. Phys. A* 45, 444015 (2012).
- [16] 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).
- [17] 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).
- [18] E.-M. Graefe, U. Günther, H. J. Korsch und A. E. Niederle. A non-Hermitian \mathcal{PT} symmetric Bose–Hubbard model: eigenvalue rings from unfolding higher-order exceptional points. *J. Phys. A* 41, 255206 (2008).
- [19] E.-M. Graefe, H. J. Korsch und A. E. Niederle. Quantum-classical correspondence for a non-Hermitian Bose-Hubbard dimer. *Phys. Rev. A* 82, 013629 (2010).
- [20] H. Cartarius, D. Haag, D. Dast und G. Wunner. Nonlinear Schrödinger equation for a \mathcal{PT} -symmetric delta-function double well. *J. Phys. A* 45, 444008 (2012).
- [21] H. Cartarius und G. Wunner. Model of a \mathcal{PT} -symmetric Bose-Einstein condensate in a δ -function double-well potential. *Phys. Rev. A* 86, 013612 (2012).
- [22] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, G. Wunner, R. Eichler und J. Main. A Bose-Einstein condensate in a \mathcal{PT} symmetric double well. *Fortsch. Phys.* 61, 124 (2013).
- [23] 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).
- [24] 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, Cham (2016).
- [25] R. Gutöhrlein, H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. Bifurcations and exceptional points in a \mathcal{PT} -symmetric dipolar Bose–Einstein condensate. *J. Phys. A* 49, 485301 (2016).

- [26] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius und G. Wunner. Quantum master equation with balanced gain and loss. *Phys. Rev. A* 90, 052120 (2014).
- [27] 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).
- [28] 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).
- [29] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, J. Main und G. Wunner. Stationary states in the many-particle description of Bose-Einstein condensates with balanced gain and loss. *Phys. Rev. A* 96, 023625 (2017).
- [30] 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(R) (2013).
- [31] 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).
- [32] 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).
- [33] D. Dizdarevic. *Realisierung von balanced gain and loss in einem Bose-Hubbard-Modell mit zeitabhängigen Potentialen*. Masterarbeit, Universität Stuttgart (2016).
- [34] M. Kreibich. *Realizations of \mathcal{PT} -symmetric Bose-Einstein condensates with time-dependent Hermitian potentials*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2015).
- [35] D. Dast. *Bose-Einstein condensates with balanced gain and loss beyond mean-field theory*. Doktorarbeit, Universität Stuttgart (2017).
- [36] 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).
- [37] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner und P. Zoller. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* 81, 3108 (1998).
- [38] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T.W. Hänsch und I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature* 415, 39 (2002).

- [39] W. S. Bakr, A. Peng, M. E. Tai, R. Ma, J. Simon, J. I. Gillen, S. Fölling, L. Pollet und M. Greiner. Probing the Superfluid-to-Mott Insulator Transition at the Single-Atom Level. *Science* 329, 547 (2010).
- [40] S. Will, T. Best, U. Schneider, L. Hackermueller, D.-S. Lühmann und I. Bloch. Time-resolved observation of coherent multi-body interactions in quantum phase revivals. *Nature* 465, 197 (2010).
- [41] J. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch und S. Kuhr. Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator. *Nature* 467, 68 (2010).
- [42] J. R. Anglin und A. Vardi. Dynamics of a two-mode Bose-Einstein condensate beyond mean-field theory. *Phys. Rev. A* 64, 013605 (2001).
- [43] A. Vardi und J. R. Anglin. Bose-Einstein condensates beyond mean field theory: Quantum backreaction as decoherence. *Phys. Rev. Lett.* 86, 568 (2001).
- [44] 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).
- [45] F. Trimborn, D. Witthaut, H. Hennig, G. Kordas, T. Geisel und S. Wimberger. Decay of a Bose-Einstein condensate in a dissipative lattice – the mean-field approximation and beyond. *Eur. Phys. J. D* 63, 63 (2011).
- [46] 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).
- [47] T. Mielich. *Bogoliubov-Backreaction-Methode für Bose-Hubbard-Ketten*. Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2016).
- [48] J. M. Zhang und R. X. Dong. Exact diagonalization: the Bose-Hubbard model as an example. *Eur. J. Phys.* 31, 591 (2010).
- [49] K. Alpin. *Massively parallel computations of the Bose-Hubbard model with time-dependent potentials*. Bachelorarbeit, Universität Stuttgart (2016).
- [50] W. D. Heiss, H. Cartarius, G. Wunner und J. Main. Spectral singularities in \mathcal{PT} -symmetric Bose-Einstein condensates. *J. Phys. A* 46, 275307 (2013).
- [51] M. A. Nielsen und I. L. Chuang. *Quantum Computation and Quantum Information: 10th Anniversary Edition*. Cambridge University Press, New York, 10. Auflage (2011).

- [52] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu und F. Laloë. *Quantenmechanik*, Band 1. de Gruyter, Berlin, vierte Auflage (2009).

Danksagung

Abschließend möchte ich mich bei allen bedanken, die zum Gelingen dieser Masterarbeit beigetragen haben.

Zuallererst möchte ich mich bei Herrn Apl. Prof. Dr. rer. nat. Jörg Main für die Vergabe des Themas und die sehr gute und nette Betreuung, sein stets offenes Ohr und für so manchen zielführenden und hilfreichen Vorschlag bedanken. Im Besonderen danke ich ihm für das Korrekturlesen der Arbeit und auch für die Übernahme des Hauptberichts.

Des Weiteren danke ich Herrn Prof. Dr. sc. nat. Hans Peter Büchler für die Übernahme des Mitberichts.

Herrn Prof. Dr. rer. nat. Günter Wunner danke ich für Aufnahme an das 1. Institut für theoretische Physik der Universität Stuttgart während der Bachelor- und Masterarbeit.

Außerdem bedanke ich mich bei Herrn Priv.-Doz. Dr. rer. nat. Holger Cartarius und Herrn Dr. Robin Gutöhrlein für die perfekte Systemadministration.

Allen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts danke ich für das gute Arbeitsklima.

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 02. November 2017

Tina Mathea