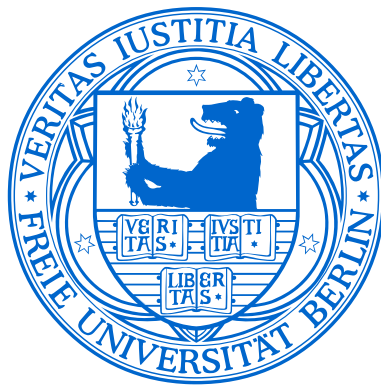

ÜBER DIE DISSIPATIVE DYNAMIK VON ULTRAKALTEN BOSONEN IM OPTISCHEN GITTER



*Diplomarbeit
am Fachbereich Physik
der Freien Universität Berlin*

vorgelegt am 30. Juli 2010

von

Mathias Hayn

Hauptgutachter: Priv.-Doz. Dr. Axel Pelster

„Ich habe früher einmal das Problem der Dissociation der Gase unter gewissen möglichst allgemeinen Vorraussetzungen behandelt, die ich freilich zum Schlusse specialisiren musste.“

LUDWIG BOLTZMANN

in: LUDWIG BOLTZMANN:
„Vorlesungen über Gastheorie – II Teil“
2., unveränderter Abdruck, 1912
Verlag von Johann Ambrosius Barth, Leipzig

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Physikalischer Hintergrund	5
2.1	BOSE–EINSTEIN-Kondensation (BEC)	5
2.2	Bosonen im optischen Gitter	7
2.3	Das BOSE–HUBBARD-Modell und der MOTT-Superfluid-Phasenübergang für Bosonen im optischen Gitter	9
2.4	Spontane Symmetriebrechung und der Ordnungsparameter	12
2.5	Motivation des Modells	15
3	Über die allgemeine Ableitung der MARKOV’schen Quanten-Mastergleichung	19
3.1	Mikroskopische Herleitung der Mastergleichung	19
3.2	Herleitung der LINDBLAD-Form der Mastergleichung	24
4	Bosonen im optischen Gitter als offenes Quantensystem	31
4.1	Das BOSE–HUBBARD-Modell für Bosonen im optischen Gitter	31
4.1.1	Das allgemeine BOSE–HUBBARD-Modell	32
4.1.2	Das Ein-Band BOSE–HUBBARD-Modell	36
4.1.3	Das Zwei-Band BOSE–HUBBARD-Modell	40
4.2	Der kohärente Antrieb	44
4.3	Ein BEC als Reservoir für Anregungen	47
4.3.1	Zur Theorie schwach wechselwirkender BOSE-Gase	47
4.3.2	Das BEC-Reservoir und die Kopplung an das optische Gitter	56
4.4	Herleitung der Mastergleichung	59
4.5	Adiabatische Elimination des oberen Bandes	67
4.6	Zusammenfassung	68
5	MOTT-Superfluid-Phasenübergang für Bosonen im optischen Gitter	73
5.1	Herleitung der Momentengleichung	73
5.2	Die Momentengleichung in der Molekularfeld-Näherung	75
5.3	Der MOTT-Superfluid-Phasenübergang	77
5.3.1	Eine approximative Lösung	79
5.3.2	Die exakte Lösung	82
5.4	Zusammenfassung	89
6	Quantenphasenübergang von Bosonen in einem offenen optischen Gitter	91
6.1	Zeitentwicklung von Operatoren	92
6.2	Zeitentwicklung von Leiteroperatoren	97
6.3	Herleitung der Momentengleichung mit Hilfe des GUTZWILLER-Ansatzes	100
6.4	Zeitentwicklung des Ordnungsparameters	109

6.5	Der Phasenübergang	110
6.6	Zusammenfassung	117
	Zusammenfassung und Ausblick	119
	A Das Wechselwirkungs-Bild der Quantenmechanik	121
	B Über BLOCH- und WANNIER-Funktionen	125
	C Numerische Berechnung der WANNIER-Funktionen	129
	C.1 Zur numerischen Lösung des BLOCH-Problems	129
	C.2 Quelltext: Berechnung der WANNIER-Funktionen und der Parameter des BOSE– HUBBARD-Modells	133
	D Die Molekularfeld-Näherung	139
	Literaturverzeichnis	143
	Danksagung	153

Kapitel 1

Einleitung

Ultrakalte Quantengase sind ein aktuelles und spannendes Forschungsgebiet, mit welchem sich unzählige Gruppen auf der ganzen Welt und speziell auch in Deutschland beschäftigen. Die Anzahl der Experimente und theoretischen Arbeiten ist kaum überblickbar. Von praktischer Bedeutung wurde dieses Gebiet im Jahr 1995, als Gruppen um ERIC ALLIN CORNELL und CARL EDWIN WIEMANN in Boulder, Colorado und WOLFGANG KETTERLE am *Massachusetts Institute of Technology* (MIT) in Cambridge, Massachusetts erstmals BOSE–EINSTEIN-Kondensate (BEC) in Rubidium- bzw. Natriumdämpfen beobachteten [ANDERSON ET AL., 1995; DAVIS ET AL., 1995]. Bis heute wurde bei einer Reihe weiterer Elemente BOSE–EINSTEIN-Kondensation (BEC)¹ erreicht. Darunter sind bosonische Isotope der Alkalimetalle Lithium, Natrium, Kalium, Rubidium, Caesium, die Erdalkalimetalle Calcium und Strontium, Wasserstoff, metastabiles Helium, das Seltenerdmetall Ytterbium und das Übergangsmetall Chrom [UCA, 2010; STELLMER ET AL., 2009].

Die erste Erwähnung der BEC in einer theoretischen Arbeit stammt aus der Feder von ALBERT EINSTEIN aus dem Jahr 1925 [EINSTEIN, 1925]. Ausgangspunkt für ihn war ein Artikel von SATYENDRANATH BOSE [BOSE, 1924] über die Quantenstatistik von *Photonen*. EINSTEIN übertrug diese Idee auf freie *Atome*, d. h. *massive* Teilchen. Er sagte einen Phasenübergang voraus, bei welchem die Atome in den Zustand niedrigster kinetischer Energie kondensieren.

Vor allem für die Experimentalphysiker war es von 1925 bis 1995 ein weiter Weg. Erst durch ausgefeilte experimentelle Aufbauten, wie der Laserkühlung und dem simultanen Kühlen und Speichern von neutralen Atomen in magneto-optischen Fallen, war es möglich ein atomares Gas bis herab zur BEC-Übergangstemperatur gasförmig zu halten und schließlich zu „BOSE–EINSTEIN-kondensieren“.

In den Jahren nach der erstmaligen Erzeugung eines BEC gab es viele Experimente zu den Eigenschaften der Kondensate. Besondere Bedeutung fand dabei, dass ein BEC eine kohärente, makroskopische Materie-Welle darstellt, sodass man beispielsweise die Interferenz von zwei sich überlappenden Kondensaten beobachtete. Andere Experimente untersuchten kollektive Anregungen, Vortizes und Solitonen in einem BEC. In Spinor-BEC wurde nicht nur die Kondensation in einen einzigen quantenmechanischen Zustand beobachtet, sondern hier tritt BEC in mehreren Hyperfeinzuständen zugleich auf [STENGER ET AL., 1998].

Der große Vorteil von BEC-Experimenten besteht darin, dass man eine sehr genaue quantenmechanische und damit mikroskopische Beschreibung für das Gleichgewicht wie auch für die

¹Es ist allgemein üblich sowohl das Phänomen der BOSE–EINSTEIN-Kondensation als auch die Phase des BOSE–EINSTEIN-Kondensates der Kürze halber mit BEC zu bezeichnen. Dabei kommt das „C“ in BEC von der englischen Bezeichnung *condensation* bzw. *condensate*.

Dynamik des Systems besitzt. Außerdem lässt sich mittels externer elektromagnetischer Felder das System in einem sehr hohen Maße kontrollieren. Schließlich sind BEC experimentell sehr gut von der Umgebung getrennt, woraus relativ lange Kohärenzzeiten resultieren.

Die experimentellen Ergebnisse und die theoretischen Vorhersagen sind auf dem Gebiet der BOSE–EINSTEIN-Kondensation in sehr guter Übereinstimmung. Da das BEC aus einem stark verdünntem Gas mit Dichten von um die 10^{-14} cm^{-3} entstanden ist [BLOCH ET AL., 2008], wechselwirken die Atome nur sehr selten miteinander. Dadurch ist im Gegensatz zum superfluiden Helium die Kondensatdichte relativ hoch und man kann die statischen und dynamischen Eigenschaften dieser Kondensate durch ein klassisches Feld beschreiben. Die Bewegungsgleichung für dieses Feld ist die GROSS–PITAEVSKII-Gleichung. Mikroskopisch, d. h. auf der Ebene der Quantenmechanik, kann man die Wechselwirkung der kondensierten Teilchen untereinander im Rahmen der BOGOLIUBOV-Theorie behandeln. In dieser Theorie betrachtet man nur schwache Korrelationen der wechselwirkenden Teilchen.

Im Hinblick auf aktuelle Fragestellungen von Vielteilchen-Systemen – insbesondere auf dem Gebiet der Festkörperphysik – sind jedoch gerade diese Korrelationen von Interesse und man stellte sich die Frage, wie man stark korrelierte Systeme erzeugen kann. Im Rahmen von ultrakalten Gasen lässt sich dieses Regime der stark korrelierten Systeme dadurch erreichen, dass man das BEC in ein sogenanntes *optisches Gitter* einbringt [JAKSCH ET AL., 1998]. Experimentell verwirklicht wurde dies erstmals von GREINER ET AL. [2002a]. Bei einem optischen Gitter werden die neutralen Atome durch die optische Dipolkraft entweder in den Intensitätsminima oder -maxima eines stehenden Laserfeldes gefangen. Im Gegensatz zu den meisten Systemen der Festkörperphysik sind neutrale Atome in optischen Gittern sehr gut von der Umgebung abgeschottet und man kann mit kohärenter Dynamik über einen relativ langen Zeitraum arbeiten. Des Weiteren sind optische Gitter im Vergleich zu den kristallinen Gittern perfekt, d. h. ohne Fehlstellen. Andererseits lässt sich gezielt Unordnung in das Gitter hineinbringen, indem man ein optisches Gitter einer anderen Wellenlänge oder ein Laser-Speckle überlagert [BILLY ET AL., 2008; ROATI ET AL., 2008].

Ultrakalte Bosonen in optischen Gittern sind theoretisch ebenso gut beschreibbar und experimentell im gleichen Maße kontrollierbar wie ein BEC. Durch Veränderung der Laseranordnung und der Parameter der Laser lassen sich verschiedene Geometrien von Gittern realisieren, die Gittertiefe ändern, Untergitter oder vom Spin abhängige Gitter erstellen. Je nachdem, in wie vielen Raumrichtungen man stehende Wellen auf die Atome richtet, kann man ein-, zwei- oder dreidimensionale optische Gitter erzeugen. Möglich ist auch über FESHBACH-Resonanzen die s-Wellen Streulänge und damit die Wechselwirkung zwischen den Atomen zu verändern. Durch all diese Möglichkeiten der Manipulation des Systems lassen sich verschiedenste fundamentale Fragen der modernen Festkörperphysik, Quanteninformation und auch der Quantenmechanik untersuchen.

Ein viel untersuchtes Modell aus der Festkörperphysik ist z. B. das sogenannte BOSE–HUBBARD-Modell. Dieses Modell beschreibt in seiner einfachsten Form lokal wechselwirkende Bosonen in einem Gitter. Charakterisiert wird das System durch zwei Energien: Die Tunnelenergie, welche nötig ist, damit sich Bosonen von einem zum nächsten Gitterplatz bewegen können und die Wechselwirkungsenergie zweier Bosonen auf einem Gitterplatz. Je nachdem, welche der beiden Energieskalen dominiert, befindet sich das System in zwei unterschiedlichen Phasen. Der dazwischen stattfindende Phasenübergang ist ein Quantenphasenübergang, da er auch bei verschwindender Temperatur auftritt und dann statt durch thermische Fluktuationen durch

Quantenfluktuationen vorangetrieben wird. Experimentell beobachtet wurde dieser sogenannte MOTT-Superfluid-Phasenübergang für Bosonen in optischen Gittern von GREINER ET AL. [2002a].

Neben diesen Fragestellungen von Atomen im optischen Gitter im Gleichgewicht beschäftigte man sich bereits sehr früh mit der Untersuchung von Nicht-Gleichgewichts-Phänomenen. GREINER ET AL. [2002b] betrachteten zum Beispiel die Dynamik eines Superfluids, welches einer raschen Änderung der Gittertiefe ausgesetzt war und beobachteten ein periodisches Zerfallen und Wiederaufleben der makroskopischen Wellenfunktion.

Ein Großteil der Veröffentlichungen beschäftigen sich mit einer Dynamik, deren Generatoren hermitesche Operatoren sind, bzw. deren Zeitentwicklung unitär ist. Vor allem auf dem Gebiet der Quantenoptik betrachtet man oft eine Zeitentwicklung, welche *nicht* unitär ist. Hier wird das System durch ein externes Feld angetrieben und gleichzeitig an eine Umgebung – ein Reservoir oder Bad – angekoppelt. Dies resultiert in einer Nicht-Gleichgewichtsdynamik, welche durch eine sogenannte *Mastergleichung* beschrieben wird. Diese Systeme bezeichnet man als *offene Systeme*.

In jüngerer Zeit sind einige Artikel erschienen, welche sich mit solchen – speziell auch mit ultrakalten bosonischen – offenen und getriebenen Vielteilchen-Systemen befassen [DIEHL ET AL., 2008; KRAUS ET AL., 2008; VERSTRAETE ET AL., 2009; SHCHESNOVICH und KONOTOP, 2010; TOMADIN ET AL., 2010; KRAUTER ET AL., 2010; DIEHL ET AL., 2010]. Diese Diplomarbeit befasst sich speziell mit dem Modell aus dem Artikel von DIEHL ET AL. [2008]. In diesem Artikel werden ultrakalte wechselwirkende Bosonen in einem optischen Gitter betrachtet, welche mit einem Bad bestehend aus einem BEC schwach wechselwirken. Außerdem werden die Bosonen im Gitter durch einen weiteren Laser in ein höheres Energieband angeregt. Durch Abgabe von Energie an das BEC-Bad können die Bosonen des Gitters wieder in das energetisch tiefer liegende Band fallen. Dabei ist die grundlegende physikalische Idee, die Kohärenz des Lasers auf die Bosonen zu übertragen. Die Anregung der Bosonen erfolgt zwar nur lokal, jedoch erhält man je nach Wahl der Parameter einen Zustand mit langreichweitiger Ordnung, welcher eine ähnliche Form aufweist wie der superfluide Zustand im BOSE–HUBBARD-Modell. Das Besondere ist, dass dieser Zustand ein Nicht-Gleichgewichtszustand ist.

Analog wie im BOSE–HUBBARD-Modell erwartet man auch in diesem nun offenen Quantensystem einen Quantenphasenübergang. Da dieser jedoch zwischen Zuständen des Nicht-Gleichgewichts auftritt, ist es nicht möglich, die üblichen thermodynamischen Berechnungsmethoden anzuwenden. Speziell ist beispielsweise die Entwicklung der freien Energie nach dem Ordnungsparameter – d. h. die GINZBURG–LANDAU-Theorie – in der Nähe des Phasenübergangs nicht möglich. Wir sind daher auf andere Lösungsmethoden angewiesen, für welche die Mastergleichung anstatt der SCHRÖDINGER-Gleichung den Ausgangspunkt bildet.

Überblick über die Diplomarbeit

Diese Diplomarbeit lässt sich thematisch in zwei Teile gliedern. Der erste Teil umfasst die Kapitel 2 bis 4 und bietet die Grundlagen für diese Arbeit. Der zweite Teil besteht aus den Kapiteln 5 und 6 und befasst sich mit dem Quantenphasenübergang von Bosonen im optischen Gitter im Gleichgewicht bzw. im Nicht-Gleichgewicht.

In Kapitel 2 werden kurz wichtige Begriffe aus dem Gebiet der ultrakalten Atome vorgestellt.

Es wird erläutert, was ein BOSE–EINSTEIN-Kondensat ist und was man unter optischen Gittern versteht. Außerdem stellen wir das BOSE–HUBBARD-Modell vor und besprechen den hier auftretenden MOTT-Superfluid-Phasenübergang. Da wir mit Hilfe des Ordnungsparameters Berechnungen durchführen wollen, sprechen wir über diesen im Zusammenhang mit spontan gebrochenen Symmetrien. Abschließend geben wir eine Motivation für das in dieser Diplomarbeit verwendete Modellsystem.

Kapitel 3 befasst sich mit der mathematischen Beschreibung von offenen Quantensystemen im Rahmen eines System-Bad-Modells. Es wird die allgemeine Form der Bewegungsgleichung für den statischen Operator des Systems hergeleitet. Wir stellen das Konzept von dynamischen Halb-Gruppen kurz vor und zeigen, dass deren Generatoren auf die sogenannte LINDBLAD-Form gebracht werden können.

Im darauf folgenden 4. Kapitel wird das Modellsystem ausführlich vorgestellt. Es werden sowohl die zwei Teilsysteme — dies sind die Bosonen im optische Gitter und das BEC-Bad — als auch deren Wechselwirkung detailliert beschrieben. Dazu werden wir ausgehend von den Ergebnissen aus Kapitel 3 eine Mastergleichung in LINDBLAD-Form für den statistischen Operator der Bosonen des Gitters herleiten.

In Kapitel 5 wird analytisch der Quantenphasenübergang des BOSE–HUBBARD-Modells berechnet, während Kapitel 6 diese Überlegungen um einen zusätzlichen dissipativen Anteil in der Bewegungsgleichung erweitert. Betrachtet werden in beiden Fällen stationäre Zustände im Rahmen der Molekularfeld-Näherung. Zur Charakterisierung dieser Zustände benutzen wir das Konzept des Ordnungsparameters. Das Ergebnis dieser Arbeit wird das näherungsweise Aufstellen dieses Ordnungsparameters und des daraus resultierenden Phasendiagramms sein.

Im Anhang dieser Diplomarbeit findet man eine Wiederholung der grundlegenden Formeln des Wechselwirkungs-Bildes der Quantenmechanik. Außerdem werden kurz die wichtigsten Eigenschaften von BLOCH- und WANNIER-Funktionen aufgelistet und es wird gezeigt, wie man sich diese Funktionen und daraus die Parameter des BOSE–HUBBARD-Modells numerisch berechnen kann. Abschließend wird auf die Molekularfeld-Näherung, wie wir sie im Rahmen dieser Arbeit verwenden, eingegangen.

Kapitel 2

Physikalischer Hintergrund

Dieses Kapitel soll eine Einführung in die physikalischen Grundlagen dieser Diplomarbeit geben. Wir besprechen, was man unter einem BOSE–EINSTEIN-Kondensat versteht, unter welchen Bedingungen es auftritt und wie man experimentell ein solches Kondensat gewinnt. Im Anschluss daran erklären wir, wieso neutrale Teilchen durch eine stehende Laser-Welle ein Gitterpotential spüren und wie man dieses Potential gezielt beeinflussen kann. Dann gehen wir näher auf das BOSE–HUBBARD-Modell ein, welches die Grundlage für die Beschreibung von Bosonen in einem optischen Gitter darstellt und beschreiben den für das BOSE–HUBBARD-Modell charakteristischen MOTT-Superfluid-Phasenübergang. Außerdem erklären wir den Zusammenhang zwischen der Definition eines Ordnungsparameters und einer spontan gebrochenen Symmetrie. Abschließend stellen wir kurz das in dieser Arbeit verwendeten Modellsystems vor.

2.1 BOSE–EINSTEIN-Kondensation (BEC)

Wir beginnen damit, zu klären, was ein BOSE–EINSTEIN-Kondensat ist. Dabei orientieren wir uns an dem Buch von LEGGETT [2007]. Ein freies, ideales Gas aus N Bosonen wird in drei Dimensionen zu einem BOSE–EINSTEIN-Kondensat, wenn eine *makroskopische Anzahl von Teilchen den Grundzustand besetzen*. Diese Aussage der makroskopischen Besetzung des Grundzustandes lässt sich auf allgemeinere Systeme mit Wechselwirkung zwischen den Teilchen sowie Systeme, welche nicht im Gleichgewicht sind, erweitern. Dazu betrachten wir die sogenannte *Einteilchen-Dichtematrix*, welche durch die Vorschrift

$$\rho_1(r_1, r_2) = \langle \hat{\psi}^\dagger(r_1) \hat{\psi}(r_2) \rangle \quad (2.1)$$

definiert ist. Der Erwartungswert $\langle \circ \rangle$ ist ein quantenstatistischer Erwartungswert und $\hat{\psi}^\dagger(r)$ und $\hat{\psi}(r)$ sind bosonische Feldoperatoren, die ein Teilchen am Ort r erzeugen bzw. vernichten. Die Einteilchen-Dichtematrix (2.1) kann man in der Tat als Matrix mit r_1 als Zeilen- und r_2 als Spaltenindex betrachten. Gemäß ihrer Definition (2.1) ist sie eine hermitesche Matrix, d. h. $\rho_1(r_1, r_2) = \rho_1^*(r_2, r_1)$. Da sich hermitesche Matrizen bekanntlich diagonalisieren lassen, können wir die Einteilchen-Dichtematrix in folgender Form schreiben:

$$\rho_1(r_1, r_2) = \sum_i n_i \varphi_i(r_1) \varphi_i^*(r_2). \quad (2.2)$$

Die hier auftretenden Funktionen $\varphi_i(r)$ bilden ein vollständiges und orthogonales Funktionensystem. Die n_i sind die Eigenwerte der Einteilchen-Dichtematrix zu den Eigenfunktionen $\varphi_i(r)$,

wobei diese folgende Eigenwertgleichung erfüllen:

$$\int_V \rho_1(r_1, r_2) \varphi_i(r_2) dr_2 = n_i \varphi_i(r_1). \quad (2.3)$$

Hier ist V das zu betrachtende Raumvolumen.

Basierend auf diesen Vorbemerkungen lautet die Definition eines BEC dann:

BOSE–EINSTEIN-Kondensation tritt genau dann auf, wenn exakt ein Eigenwert n_i der Einteilchen-Dichtematrix ρ_1 von der Ordnung N der Anzahl der Teilchen des Systems ist und alle anderen Eigenwerte von der Ordnung 1 sind.

Die Aussage, dass ein Eigenwert n_i von der Ordnung N ist, bedeutet, dass im *thermodynamischen Limes*, d. h. im Grenzfall $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ und gleichzeitig $N/V \rightarrow n = \text{konst.}$, das Verhältnis n_i/V gegen eine endliche Konstante geht. Entsprechend gehen die Eigenwerte der Ordnung 1 im thermodynamischen Limes gegen Null. Gibt es mehr als einen aber endlich viele solcher *makroskopischen* Eigenwerte, so spricht man von *fragmentierten* BEC.

Eine andere Möglichkeit der Definition eines BOSE–EINSTEIN-Kondensates besteht darin, den Grenzfall $|r_1 - r_2| \rightarrow \infty$ zu betrachten [GRIFFIN ET AL., 1995]. Ist das System in einem normalen Zustand, so geht die Einteilchen-Dichtematrix in diesem Grenzfall gegen Null. Befindet sich das System allerdings in der BEC-Phase, so geht $\rho_1(r_1, r_2)$ im thermodynamischen Limes für $|r_1 - r_2| \rightarrow \infty$ gegen eine endliche Konstante. Damit besitzt die Einteilchen-Dichtematrix $\rho_1(r_1, r_2)$ in der BEC-Phase Nicht-Diagonaleinträge, welche eine *langreichweitige Ordnung* aufweisen (engl.: *off-diagonal long range order*, kurz ODLRO). An dieser Stelle sei erwähnt, dass hierüber die Definition eines Ordnungsparameters möglich ist. Näheres zum Konzept des Ordnungsparameters findet man im Abschnitt 2.4.

Die nächste Frage, die man sich stellen kann, ist, bei welchen Temperaturen BEC auftritt. Dazu muss man bedenken, dass die BEC ihren Ursprung in der Quantenmechanik bzw. -statistik hat. Effekte der Quantenmechanik werden dann von Bedeutung, wenn die DE BROGLIE-Wellenlänge λ eines Teilchens groß wird. Übertragen auf ein BEC heißt dies, dass die DE BROGLIE-Wellenlänge des Vielteilchensystems größer sein muss, als eine typische Längenskala L des Systems. Diese Längenskala ist bei einem verdünnten atomaren Gas von der Größenordnung des Abstands zweier Teilchen. Bezeichnen wir mit n die Teilchendichte, so gilt:

$$L \sim n^{-1/3}. \quad (2.4)$$

Die DE BROGLIE-Wellenlänge ist durch die Impulsverteilung gegeben. Im thermodynamischen Gleichgewicht wird die Energieskala durch die thermische Energie $k_B T$, mit der BOLTZMANN-Konstanten k_B und der Temperatur T , bestimmt. Für ein ideales und freies Gas gilt dann für den Impuls:

$$p \sim (mk_B T)^{1/2}. \quad (2.5)$$

Gilt schließlich $L \lesssim \lambda$, dann erhalten wir zusammen mit der Abschätzung (2.4) und der DE BROGLIE-Beziehung $\lambda = \hbar/p$ eine Abschätzung für die *kritische Temperatur* eines BEC:

$$k_B T_c \lesssim \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3}. \quad (2.6)$$

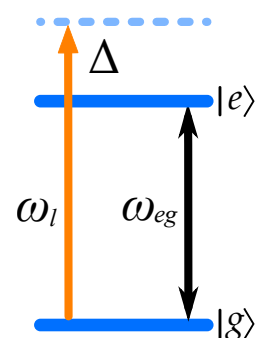
Setzt man hier typische Dichten von 10^{22} cm^{-3} ein, so erhält man je nach atomarer Spezies eine kritische Temperatur von wenigen Kelvin. Dies ist jedoch eine Temperatur, bei welcher jedes

normale Gas bereits in den flüssigen oder festen Aggregatzustand übergegangen wäre. Um jedoch trotzdem BOSE–EINSTEIN-Kondensation von Gasen zu erhalten, muss man die Dichte so weit verringern, dass der gasförmige Zustand wenigstens noch *meta-stabil* ist, d. h. auf experimentell relevanten Zeitskalen lange Zeit stabil ist. Eine Verringerung der Dichte führt gemäß Gleichung (2.6) jedoch gleichzeitig zu einer Absenkung der kritischen Temperatur. Für BEC-Experimente mit Alkali-Gasen liegt die Dichte beispielsweise bei 10^{12} bis 10^{15} cm^{-3} [BLOCH ET AL., 2008]. Dies führt zu kritischen Temperaturen von 5 bis 600 nK.

Um solche niedrigen Temperaturen im nK-Bereich experimentell zu realisieren, benötigt man fortgeschrittene Kühlmechanismen [METCALF und VAN DER STRATEN, 1999; PETHICK und SMITH, 2008]. Eine wichtige Kühlmethode ist das sogenannte DOPPLER-Kühlen. Hier werden mehrere entgegengerichtete Laserstrahlen auf das atomare Gas gerichtet. Die Frequenz der Laser ist gegenüber einer atomaren Übergangsfrequenz rotverschoben. Damit ist die Absorptionsrate von Photonen für Atome, welche entgegen dem Laserlicht fliegen, größer als für Atome, welche sich in Richtung des Laserlichtes bewegen. Bei der Absorption eines Photons muss der Impuls erhalten bleiben, wodurch das entgegenkommende Atom abgebremst wird und die atomare Gaswolke insgesamt eine niedrigere kinetische Energie und damit Temperatur erhält. Mit Hilfe des DOPPLER-Kühlens kommt man in den Bereich von einigen μK . Für noch kältere Temperaturen gibt es noch eine Reihe weiterer Kühlmechanismen. Um jedoch in den für die BEC notwendigen Bereich von einigen hundert nK zu kommen, bedient man sich einer Technik, die *Verdampfungskühlung* genannt wird [ANDERSON ET AL., 1995; KETTERLE ET AL., 1999]. Hier werden die Atome mit der höchsten Energie aus der Falle genommen, indem ein Radio-Frequenzfeld den Spin dieser Atome umdreht. Dadurch können diese *heißen* Atome nicht mehr in der Falle gehalten werden und verschwinden aus dem System. Dies führt nach einer Thermalisierung¹ der Gasatome zu einer geringeren mittleren kinetischen Energie der Atome und damit zu einer geringeren Temperatur bis hinunter zu einigen 100 nK und tiefer [KETTERLE ET AL., 1999; BLOCH ET AL., 2008].

2.2 Bosonen im optischen Gitter

Zur Beschreibung von Atomen in einem optischen Gitter betrachten wir zunächst die Dynamik eines Atoms, welches eine große Anzahl von Niveaus besitzt, von denen jedoch nur zwei durch einen monochromatischen Laser gekoppelt werden. Diese Niveaus wollen wir mit $|g\rangle$ und $|e\rangle$ bezeichnen. Hier ist $|g\rangle$ der Grundzustand und $|e\rangle$ der angeregte Zustand des Zwei-Niveau Atoms. Die Übergangsfrequenz zwischen diesen beiden Zuständen bezeichnen wir mit ω_{eg} , die Frequenz des Lasers mit ω_l . Der Laser soll nicht in Resonanz mit dem atomaren Übergang sein, sondern weist eine *Verstimmung* $\Delta = \omega_l - \omega_{eg}$ auf. Das elektromagnetische Feld des Lasers behandeln wir als klassische Größe.



In der sogenannten *rotating-wave Näherung* [METCALF und VAN DER STRATEN, 1999] nimmt der HAMILTON-Operator die Form

¹Das Gas ist zwar extrem verdünnt, jedoch sind Stöße zwischen den Atomen entscheidend, dass das Gas thermalisieren kann.

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{kin}} + \Delta |e\rangle \langle e| - \frac{1}{2} \hbar (\Omega^* |g\rangle \langle e| + \Omega |e\rangle \langle g|) \quad (2.7)$$

an. Dabei ist der erste Term \hat{H}_{kin} der kinetische Anteil des Hamiltonian und $\Omega = \Omega(x)$ ist die RABI-Frequenz, welche die Kopplungsstärke von Atom und Lichtfeld angibt. Die RABI-Frequenz ist gegeben durch:

$$\Omega = \Omega_0 \sin(k_0 x), \quad (2.8)$$

mit der Amplitude:

$$\Omega_0 := 2 \langle e | \hat{\mu} | g \rangle E_0. \quad (2.9)$$

Hier haben wir explizit eine stehende Welle für das Laserfeld angesetzt. In der Amplitude Ω_0 taucht der Dipoloperator $\hat{\mu}$ des Atoms und der Impuls des Photons $k_0 = \omega_l/c = 2\pi/\lambda$ mit der Lichtgeschwindigkeit c auf.

Wählen wir für $|\Psi\rangle$ den Ansatz $|\Psi\rangle = \Psi_g |g\rangle + \Psi_e |e\rangle$, so spaltet sich die SCHRÖDINGER-Gleichung des HAMILTON-Operators (2.7) in zwei gekoppelte Differentialgleichungen für die Koeffizienten Ψ_g und Ψ_e auf. Diese lauten:

$$i\hbar \frac{d\Psi_g}{dt} = \hat{H}_{\text{kin}} \Psi_g - \frac{1}{2} \hbar \Omega \Psi_e, \quad (2.10)$$

$$i\hbar \frac{d\Psi_e}{dt} = (\hat{H}_{\text{kin}} + \Delta) \Psi_e - \frac{1}{2} \hbar \Omega^* \Psi_g. \quad (2.11)$$

Machen wir nun die Annahme, dass die kinetische Energie des oberen Zustandes klein ist im Vergleich zur Verstimmung und dass sich die Population des oberen Zustandes kaum ändert, d. h. $\frac{d\Psi_e}{dt} \approx 0$, so erhalten wir für Ψ_e aus Gleichung (2.11):

$$\Psi_e \approx \frac{\hbar \Omega^*}{2\Delta} \Psi_g. \quad (2.12)$$

Dies setzen wir in Gleichung (2.10) ein und bekommen eine effektive SCHRÖDINGER-Gleichung für den unteren Zustand:

$$i\hbar \frac{d\Psi_g}{dt} \approx \left(\hat{H}_{\text{kin}} - \frac{\hbar^2 |\Omega|^2}{4\Delta} \right) \Psi_g. \quad (2.13)$$

Man sieht, dass in dem dazugehörigen HAMILTON-Operator effektiv ein konservatives Potential auftaucht. Dieses ist das Dipolpotential, welches für das *optische Gitter* verantwortlich ist:

$$V_{\text{lat}}(x) = -\frac{\hbar^2 |\Omega|^2}{4\Delta} =: V_0 \sin^2(k_l x), \quad (2.14)$$

mit der Amplitude

$$V_0 = -\frac{\hbar^2 |\Omega_0|^2}{4\Delta}. \quad (2.15)$$

Die Bewegung der Atome im Grundzustand erfolgt effektiv, als ob sie sich in einem periodischen Potential befinden würden. Die *Gitterkonstante* a des optischen Gitters ist über die Beziehung $\lambda = 2\pi/k_l$ mit der Wellenlänge λ des Lasers verknüpft, d. h. $a = \lambda/2$. Je nach Vorzeichen der

Verstimmung Δ ist V_0 positiv oder negativ. Im Experiment sind die Laser meist blau verstimmt, d. h. $\Delta > 0$, so dass die Minima des optischen Potentials mit den Nullstellen des Laserfeldes übereinstimmen. Hiermit werden Verluste durch spontane Emission möglichst klein gehalten.

Das optische Gitter ist allein durch den Laser und die Kopplung des Laserfeldes an das Atom gegeben. Durch Veränderung der Wellenlänge des Lasers lassen sich optische Gitter mit verschiedenen Gitterkonstanten erzeugen. Die Tiefe des Gitters kann über die Intensität bzw. die Verstimmung der Laser geregelt werden. Durch Hinzufügen von weiteren Lasern und verschiedenen geometrischen Aufbauten lassen sich eine Vielzahl von Arten von Gittern erzeugen. Eine einfache Möglichkeit ist die Erzeugung eines kubischen Gitters, bei welchem in allen drei Raumrichtungen stehende Wellen, die orthogonal zueinander sind, überlagert werden. Mit diesen kubischen Gittern wollen wir uns in dieser Diplomarbeit beschäftigen.

2.3 Das BOSE–HUBBARD-Modell und der MOTT-Superfluid-Phasenübergang für Bosonen im optischen Gitter

Das BOSE–HUBBARD-Modell ist eine Übertragung des HUBBARD-Modells [HUBBARD, 1963] auf Bosonen. Das HUBBARD-Modell ist eines der einfachsten Modelle, um Elektronen in Festkörpern zu beschreiben. Auf dieses wollen wir jedoch nicht weiter eingehen und betrachten nur das BOSE–HUBBARD-Modell. Dieses beschreibt wechselwirkende Bosonen auf einem Gitter. Dabei wird angenommen, dass nur Bosonen auf dem gleichen Gitterplatz miteinander wechselwirken. Außerdem können sich die Bosonen von einem Gitterplatz zum nächstgelegenen bewegen. Der HAMILTON-Operator des BOSE–HUBBARD-Modells besitzt die folgende Form:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (2.16)$$

Hier bezeichnet $\langle i,j \rangle$ unter der ersten Summe, dass über alle Gitterplätze i und j summiert wird, welche nächste Nachbarn sind. Die zweite Summe läuft über alle Gitterplätze i . Der Parameter J wird als Tunnel- oder Hoppingmatrixelement bezeichnet und gibt die Stärke des Tunnels eines Bosons von einem Gitterplatz zum Nachbargitterplatz an. U stellt die Wechselwirkung zweier Bosonen auf einem Gitterplatz dar. Beide Größen werden als unabhängig vom Gitterplatz und von der Teilchenzahl angenommen. Die hier auftretenden Operatoren \hat{a}_i^\dagger und \hat{a}_i sind bosonische Leiteroperatoren, d. h. sie erzeugen bzw. vernichten ein Teilchen am Gitterplatz i . Außerdem erfüllen sie die kanonischen BOSE-Vertauschungsrelationen für Erzeuger und Vernichter:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{i,j}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger]. \quad (2.17)$$

Der Operator $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ ist der Teilchenzahl-Operator des Gitterplatzes i .

Erstmals ausführlich diskutiert wurde das BOSE–HUBBARD-Modell von FISHER ET AL. [1989]. Das ultrakalte Quantengase in einem optischen Gitter solch ein BOSE–HUBBARD-Modell realisieren könnten, wurde von JAKSCH ET AL. [1998] vorgeschlagen und experimentell durch GREINER ET AL. [2002a] dadurch nachgewiesen, dass sie den das BOSE–HUBBARD-Modell charakterisierenden MOTT-Superfluid-Phasenübergang beobachtet haben.

Wir wollen im Folgenden ein wenig näher auf diesen Phasenübergang eingehen. Der Ursprung dieser zwei Phasen liegt in den zwei nicht kompatiblen Termen des BOSE–HUBBARD-Hamiltonians (2.16). Zum einen ist dies der Tunnel-Term, der proportional zum Tunnelmatrixelement J ist. Dieser ist der kinetische Anteil des Hamiltonian und beschreibt das Tunneln von Teilchen von einem Gitterplatz j zu seinem Nachbargitterplatz i . Dies sorgt für den Aufbau einer quantenmechanischen Phasenkorrelation zwischen den Bosonen an verschiedenen Gitterplätzen. Dominiert der Tunnel-Term $J \gg U$, so hat man eine über das gesamte Gitter auftretende Kopplung der Phasen. Dies ist wiederum ein BEC-Zustand im Sinne einer makroskopischen Wellenfunktion. Anders ausgedrückt minimiert der Zustand, in welchem jedes Boson mit gleicher Wahrscheinlichkeit auf jedem Gitterplatz sitzt, die Tunnelenergie. Dies ist gerade ein kondensierter Zustand. Dieser Zustand ist nicht nur kondensiert, sondern besitzt auch die Eigenschaften eines superfluiden Zustandes, d. h. ein lineares Anregungsspektrum ohne eine Lücke im Limes langer Wellenlängen [ERNST ET AL., 2009]. Das Tunnelmatrixelement J dominiert, wenn die Wechselwirkung zwischen den Atomen gering ist oder wenn das Gitter sehr flach ist.

Der dazu konkurrierende Term ist der Wechselwirkungs-Term proportional zu U . Dominiert dieser Term, d. h. $U \gg J$, so minimieren die Bosonen ihre Energie dadurch, dass jeweils zwei Bosonen möglichst weit voneinander entfernt sind. Haben wir genauso viele Bosonen wie Gitterplätze, so ist dieser Zustand niedrigster Energie dadurch gegeben, dass auf jedem Gitterplatz genau ein Boson sitzt. Dieser Zustand wird MOTT-Zustand genannt. Die Wechselwirkungsenergie ist in diesem Fall Null. Hätten wir jedoch ein leeres Gitterplatz und dafür ein Gitterplatz, der mit zwei Bosonen besetzt ist, so hätte dieser Zustand eine um U höhere Energie, welche im Grenzfall $U \gg J$ nicht durch die Tunnelenergie kompensiert werden kann. Die Bosonen sind daher auf ihren jeweiligen Gitterplätzen lokalisiert. Das charakteristische Merkmal eines MOTT-Zustandes, durch welchen man diesen auch experimentell nachweisen kann, ist das Vorhandensein einer Lücke proportional U im Anregungsspektrum. Aus diesem Grund wird der MOTT-Zustand auch MOTT-Isolator genannt.

Die Einteilchen-Dichtematrix eines Systems in einem Gitter lässt sich durch $\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle$ ausdrücken. An dem Verhalten der Einteilchen-Dichtematrix kann man deutlich den Unterschied zwischen superfluider und MOTT-Phase erkennen. Die Korrelation weit entfernter Bosonen, die durch den Tunnel-Term induziert wird, sorgt dafür, dass die Nicht-Diagonaleinträge in der Dichtematrix für die superfluide Phase eine langreichweitige Ordnung aufweisen. In der MOTT-Phase fallen die Nicht-Diagonaleinträge hingegen exponentiell mit dem Abstand $|i - j|$ ab. Dies ist das Konzept der ODLRO aus dem Abschnitt 2.1.

Je nach Wahl der Parameter des BOSE–HUBBARD-Modells lässt sich auf der einen Seite der superfluide Zustand ($J \gg U$) und auf der anderen Seite der MOTT-Zustand ($U \gg J$) realisieren. Eine interessante Frage ist nun, was im Parameterbereich $J \approx U$ auftritt. Die Antwort darauf lautet: Ein Phasenübergang zweiter Ordnung. Das dazugehörige Phasendiagramm bei verschwindender Temperatur ist in Abbildung 2.1 dargestellt. Das chemische Potential μ minimiert die freie Energie für eine gegebene Dichte der Bosonen. Dieser Phasenübergang tritt bei verschwindender Temperatur auf. Hier sind alle thermischen Fluktuationen eingefroren und Quantenfluktuationen bestimmen den Phasenübergang. Deswegen spricht man in diesem Fall von einem *Quantenphasenübergang*.

Der reine MOTT-Zustand kann nur eingenommen werden, wenn die Dichte der Bosonen ganzzahlig ist. Für nicht-ganzzahlige Teilchendichten gibt es immer einen superfluiden Anteil im

System. Betrachten wir dazu die beiden gestrichelten Linien in der Abbildung 2.1. Für $J \gg U$ und einer Teilchendichte von $\bar{n} = 2$ befindet sich das System in einem superfluiden Zustand. Verkleinert man nun das Tunnelmatrixelement bei gleich bleibender Teilchendichte, so gelangt das System bei $J/U \approx 0.1$ an die Phasengrenze bei genau der Spitze des sogenannten MOTT-Lappens und geht für noch kleinere J schließlich in den MOTT-Zustand über. Anders sieht es aus, wenn die Teilchendichte auch nur leicht unterhalb von $\bar{n} = 2$ ist. Dann wird selbst im Grenzfall $J \rightarrow 0$ der MOTT-Zustand nie der Grundzustand des Systems. Weitere Informationen zum MOTT-Superfluid-Übergang ist z. B. in den Überblicksartikeln von LEWENSTEIN ET AL. [2007] und BLOCH ET AL. [2008] zu finden.

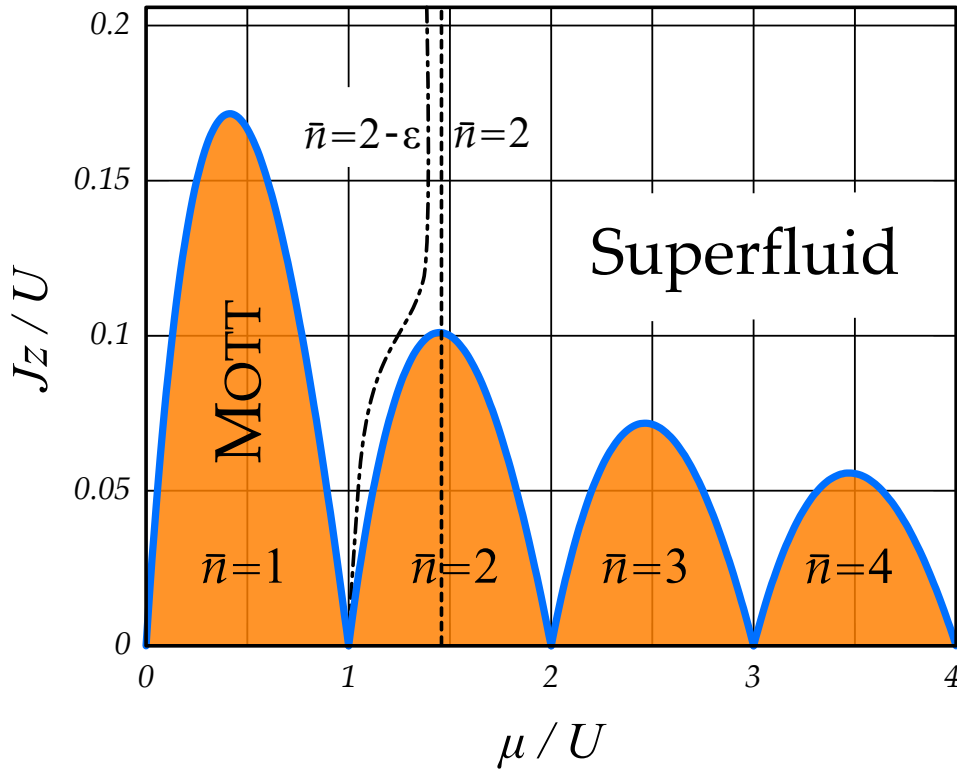


Abbildung 2.1: Phasendiagramm des BOSE–HUBBARD-Modells bei verschwindender Temperatur. Der MOTT-Isolator ist durch die eingefärbten Bereiche dargestellt. Jeder Zustand innerhalb eines MOTT-Lappens besitzt jeweils die gleiche ganzzahlige mittlere Teilchendichte \bar{n} . Die superfluide Phase befindet sich im Phasendiagramm oberhalb der blauen Phasengrenze. In der superfluiden Phase sind außerdem zwei Linien konstanter Teilchendichte eingetragen. Der Parameter z ist die Koordinationszahl des Gitters. Dieses Phasendiagramm wurde im Rahmen der in Abschnitt 5.3 verwendeten Molekularfeld-Näherung gewonnen.

Wie bereits gesagt, bieten ultrakalte bosonische Quantengase in optischen Gittern die Möglichkeit der experimentellen Realisierung des BOSE–HUBBARD-Modells und damit auch des MOTT-Superfluid-Phasenübergangs. Durch Variation der Gittertiefe V_0 und durch Verändern der s-Wellen Streulänge a_s über FESHBACH-Resonanzen lässt sich das Verhältnis J/U experimentell leicht über mehrere Größenordnungen einstellen. Das Verhalten von J/U in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Erzeugt wurde diese Kurve mit

numerisch berechneten Parametern J und U . Näheres dazu ist im Anhang C zu finden.

Für Bosonen im optischen Gitter kann man die beiden Phasen des BOSE–HUBBARD-Modells experimentell dadurch beobachten, dass man zunächst das optische Gitter und alle Fallenpotentiale abschaltet und anschließend das BOSE-Gas im freien Fall expandieren lässt. Diese sogenannte *time of flight* Bilder sind in der Abbildung 2.3 dargestellt. In der gemessenen Dichteverteilung erkennt man die Phasenkorrelation des kondensierten Zustandes an markanten Maxima. Ein BEC in einer *gewöhnlichen* harmonischen Falle produziert ein zentrales Maximum in der Dichteverteilung, wohingegen der kondensierte Zustand im optischen Gitter zusätzlich zwar weniger intensive aber mehrere um den reziproken Gittervektor verschobene Interferenz-Maxima zeigt [BLOCH ET AL., 2008]. Die Wortwahl *kondensiert* deutet darauf hin, dass man auf Grundlage dieser Interferenz-Bilder wirklich nur einen kondensierten Zustand beobachten kann, nicht jedoch, ob dieser auch superfluid ist. Näheres dazu findet man in BLOCH ET AL. [2008]. Den MOTT-Zustand erkennt man in diesen Bildern daran, dass weder ein zentrales Maximum noch weitere Interferenzmaxima auftreten und damit keine langreichweitige Phasenkorrelation zwischen den Bosonen im Gitter existiert.

2.4 Spontane Symmetriebrechung und der Ordnungsparameter

Zum Abschluss dieser Einführung in die physikalischen Grundlagen wollen wir noch ein paar Worte über die sogenannte spontane Symmetriebrechung und den Ordnungsparameter verlieren, da wir das Konzept des Ordnungsparameters in den Kapiteln 5 und 6 verwenden, um das Phasendiagramm für den MOTT-Superfluid-Phasenübergang herzuleiten.

Ist die Wirkung eines quantenmechanischen Systems invariant unter einer kontinuierlichen Symmetrie, so sagt das NOETHER-Theorem voraus, dass ein erhaltener *Strom* existiert, welcher einer Kontinuitätsgleichung genügt. Aus diesem Strom kann man einen *Generator* \hat{Q} der Symmetrietransformation konstruieren, welcher mit dem HAMILTON-Operator des Systems kommutiert. Eine simple Formulierung für eine *spontan gebrochene Symmetrie* ist, dass der Grundzustand des Systems kein Eigenzustand dieses Generators ist [SAKURAI, 1994; BRAUNER, 2010]. Aus diesem Grund und da der Generator und damit auch eine endliche Symmetrietransformation mit dem HAMILTON-Operator kommutiert, wird der Grundzustand durch eine Symmetrietransformation in einen anderen Zustand gleicher Energie transformiert. Bei einer kontinuierlichen Symmetrie liegen damit *unendlich* viele entartete Grundzustände vor.

Dieses Kontinuum von entarteten Grundzuständen wird durch verschiedene Werte des sogenannten *Ordnungsparameters* charakterisiert. Existiert ein Operator $\hat{\Phi}$, sodass im thermodynamischen Limes der Vakuumerwartungswert

$$\langle 0 | [\hat{\Phi}, \hat{Q}] | 0 \rangle \tag{2.18}$$

endlich ist, dann bezeichnet man diesen Erwartungswert als *Ordnungsparameter*. Entscheidend ist dabei der thermodynamische Limes.

In der Realität existieren immer externe Störungen, welche die Symmetrie leicht brechen und entartete Zustände ein wenig aufspalten. Im thermodynamischen Limes erzeugt dann eine noch so kleine Störung Energieunterschiede, durch welche nur *ein* Grundzustand aus zuvor unendlich vielen resultiert. Nach einem adiabatischen Abschalten dieser Störung liegt dann ein spezieller Grundzustand unter vielen vor. Für die spontane Symmetriebrechung ist es entschei-

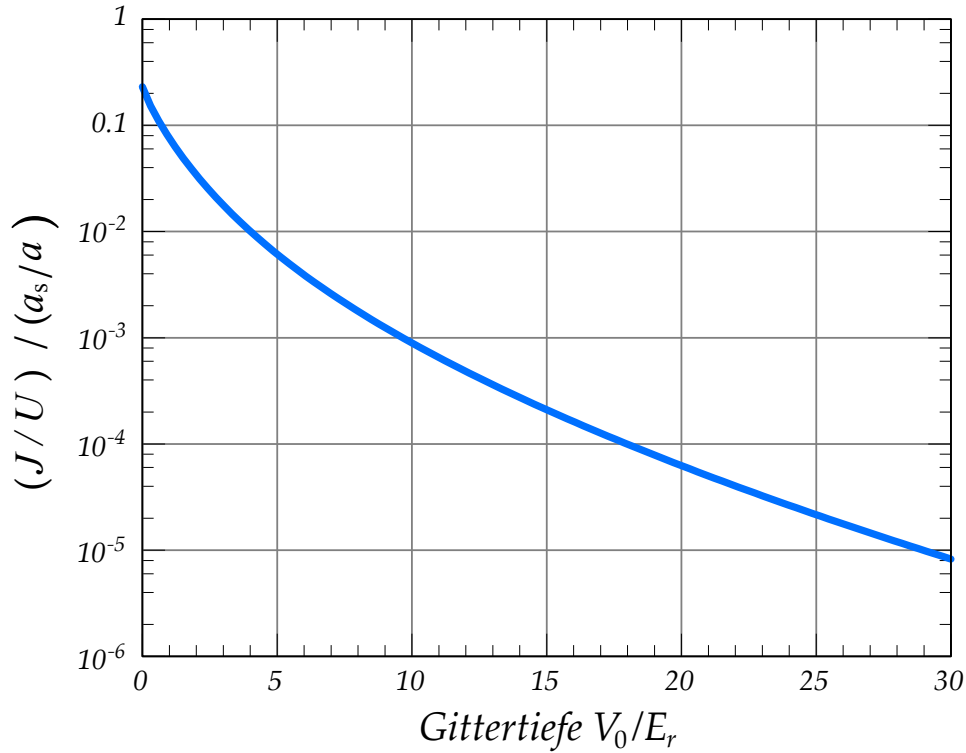


Abbildung 2.2: Verhältnis der zwei Parameter J und U des BOSE–HUBBARD-Modells für Bosonen in einem optischen Gitter der Tiefe V_0 . Die Größenordnung von J/U lässt sich zusätzlich durch das Verhältnis a_s/a der s -Wellen Streulänge a_s zur Gitterkonstanten a verändern.

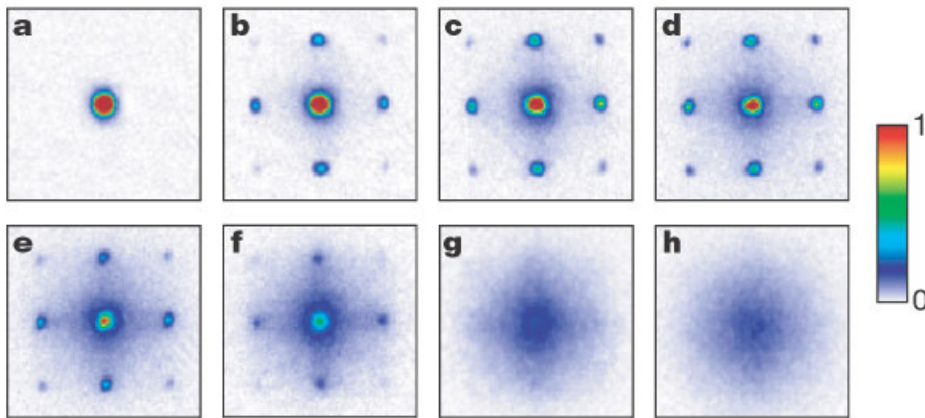


Abbildung 2.3: Gezeigt sind die Absorptionbilder eines frei expandierten Bose-Gases in einem Gitter nach dem Abschalten aller Fallenpotentiale und des optischen Gitters. Diese Absorptionbilder wurden für verschiedene Gittertiefen V_0 aufgenommen: **a**, 0; **b**, $3E_r$; **c**, $7E_r$; **d**, $10E_r$; **e**, $13E_r$; **f**, $14E_r$; **g**, $16E_r$ und **h**, $20E_r$. Alle Gittertiefen in Einheiten von $E_r = (\hbar k_0)^2/(2m)$. Entnommen aus GREINER ET AL. [2002a]. Siehe dazu auch GREINER [2003].

dend, dass der thermodynamische Limes ausgeführt wird, bevor die Störung zu Null gesetzt wird.

Werden wir etwas spezieller und betrachten ein freies BOSE-Gas. Das Vakuum des FOCK-Raums bezeichnen wir mit $|\text{vac}\rangle$. Zu Beginn betrachten wir ein endliches System mit einer endlichen Teilchenzahl N . Dann ist der Grundzustand $|\text{SF}\rangle_N$ des Systems dadurch gegeben, dass sich alle Teilchen in der Null-Impulsmode befinden:

$$|\text{SF}\rangle_N = \sqrt{\frac{1}{N!}} \left(\hat{a}_{q=0}^\dagger \right)^N |\text{vac}\rangle. \quad (2.19)$$

Der Teilchenzahl-Operator $\hat{N} = \sum_q \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q$ ist ein Generator der U(1)-Eichsymmetrie². Hier ist der Grundzustand $|\text{SF}\rangle_N$ ein Eigenzustand dieses Generators mit Eigenwert N . In der Tat existiert, wie wir gleich zeigen werden, auch kein Ordnungsparameter und die Symmetrie ist nicht spontan gebrochen. Die übliche Definition eines Ordnungsparameters in diesem System geschieht über den Erwartungswert des Vernichters $\hat{a}_i = \sqrt{1/V} \sum_q \exp[iqx_i] \hat{a}_q$. Wenden wir diesen Operator auf den Grundzustand ${}_N \langle \text{SF} |$ an:

$$\begin{aligned} {}_N \langle \text{SF} | \hat{a}_i &= \sqrt{\frac{1}{N!V}} \sum_q e^{iqx_i} \langle \text{vac} | \hat{a}_0^N \hat{a}_q = \sqrt{\frac{1}{N!V}} \langle \text{vac} | \hat{a}_0^{N+1} + \sqrt{\frac{1}{N!V}} \sum_{q \neq 0} e^{iqx_i} \langle \text{vac} | \hat{a}_0^N \hat{a}_q \\ &= \sqrt{\frac{N+1}{V}} {}_{N+1} \langle \text{SF} | + \sqrt{\frac{1}{V}} \sum_{q \neq 0} \langle N_0 = N, N_q = 1 |. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Dieser besteht aus einem Grundzustand mit $N+1$ Teilchen und aus Zuständen mit N Teilchen in der $q=0$ -Mode plus einem Teilchen in einer höher energetischen Mode. Damit gilt für alle Teilchenzahlen ${}_N \langle \text{SF} | \hat{a}_i | \text{SF} \rangle_N = 0$ und die Definition eines Ordnungsparameters über den Operator \hat{a}_i ist nicht möglich.

Betrachten wir jedoch das gleiche System im thermodynamischen Limes, dann sind die kohärenten Zustände³ $|\text{SF}\rangle = \exp[\alpha \hat{a}_{q=0}^\dagger] |0\rangle$ Grundzustände des Systems, welche aus dem FOCK-Vakuum $|\text{vac}\rangle$ durch die Symmetrietransformation $\exp[\alpha \hat{a}_0^\dagger - \alpha^* \hat{a}_0]$ erzeugt werden [BRAUNER, 2010]. Die kohärenten Zustände sind Eigenzustände von $\hat{a}_{q=0}$ mit dem Eigenwert α [GLAUBER, 1963]. Sie sind keine Eigenzustände des adjungierten Operators $\hat{a}_{q=0}^\dagger$ und damit auch keine Eigenzustände des Teilchenzahl-Operators $\hat{N} = \sum_q \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q$. Die Symmetrie ist hier demnach spontan gebrochen und in der Tat ist die Definition eines Ordnungsparameters möglich, denn nun gibt es mit \hat{a}_i einen Operator mit:

$$\langle \text{SF} | [\hat{a}_i, \hat{N}] | \text{SF} \rangle = \langle \text{SF} | \hat{a}_i | \text{SF} \rangle = \alpha \neq 0. \quad (2.21)$$

Man vergleiche dazu die Formel (2.18).

Wir halten fest, dass die Definition eines Ordnungsparameters über einen Erwartungswert verbunden ist, mit dem Eintreten einer spontan gebrochenen Symmetrie und dem thermodynamischen Limes.

²Die Wirkung einer U(1)-Eichsymmetrie-Transformation besteht darin, dass die Feldoperatoren eine Phase $e^{i\varphi}$ erhalten.

³bis auf Normierung

2.5 Motivation des Modells

In vielen Experimenten auf dem Gebiet der ultrakalten Quantengase ist man darauf aus, einen Grundzustand eines bestimmten HAMILTON-Operators zu präparieren. Dies erreicht man durch eine entsprechende Wahl der Konfiguration des experimentellen Aufbaus, sodass beispielsweise für Bosonen in einem optischen Gitter das System durch ein BOSE–HUBBARD-Hamiltonian beschrieben werden kann. Den Grundzustand erreicht man dann durch möglichst gutes Kühlen des Systems.

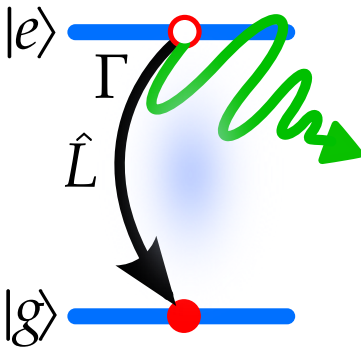
Eine andere Möglichkeit, die aus dem Gebiet der Quantenoptik kommt, ist das System anzutreiben und durch Kopplung an ein Bad in einen *stationären Nicht-Gleichgewichtszustand* zu bringen. Die Dynamik des Systems lässt sich dann nicht allein durch einen hermiteschen HAMILTON-Operator \hat{H} beschreiben, sondern geschieht durch eine sogenannte *Mastergleichung*:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + i\hbar \mathcal{L} \hat{\rho}(t). \quad (2.22)$$

Hier ist $\hat{\rho}(t)$ der statistische Operator des Systems. Der hermitesche Operator $\mathcal{L} \hat{\rho}(t)$ beschreibt die Kopplung von System und Bad, wobei die Freiheitsgrade des Bades ausintegriert sind und nicht mehr explizit auftauchen. Nach LINDBLAD [1976], GORINI, KOSSAKOWSKI und SUDARSHAN [1976] lässt sich dieser sogenannte dissipative Anteil der Dynamik ganz allgemein ausdrücken durch:

$$\mathcal{L} \hat{\rho}(t) = \sum_{\ell} \Gamma_{\ell} \left(2\hat{L}_{\ell} \hat{\rho}(t) \hat{L}_{\ell}^{\dagger} - \hat{L}_{\ell}^{\dagger} \hat{L}_{\ell} \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t) \hat{L}_{\ell}^{\dagger} \hat{L}_{\ell} \right). \quad (2.23)$$

Dies ist die sogenannte LINDBLAD-Form des dissipativen Anteils der Mastergleichung (2.22).



Die Operatoren \hat{L}_{ℓ} werden als *Quantensprung-Operatoren* bezeichnet. Der Parameter Γ_{ℓ} ist von der physikalischen Dimension her eine Rate und stellt die Zerfallsrate eines Zustandes dar, welcher durch die Wirkung der Quantensprung-Operatoren zerfällt. Auf der Ebene der Atomphysik wäre Γ_{ℓ} beispielsweise die Zerfallsrate angeregter Zustände, wie sie qualitativ durch einen EINSTEIN-Koeffizienten gegeben ist. Dem Operator $\hat{L}_{\ell} \propto |g\rangle \langle e|$ entspräche dann ein Operator, der ein angeregtes Atom vom Zustand $|e\rangle$ in den Grundzustand $|g\rangle$ zerfallen lässt.

Stationäre Zustände $\hat{\rho}_s$ der Mastergleichung (2.22) sind z. B. sogenannte *Dunkelzustände*, welche außerdem mit dem Hamiltonian kompatibel sind, d. h. $[\hat{H}, \hat{\rho}_s] = 0$ erfüllen. Ein Dunkelzustand ist definiert durch $\mathcal{L} \hat{\rho}_s = 0$ [KRAUS ET AL., 2008]. Ist $\hat{\rho}_s$ ein reiner Zustand⁴, d. h. $\hat{\rho}_s = |D\rangle \langle D|$, so sind die Dunkelzustände $|D\rangle$ dadurch charakterisiert, dass sie Eigenzustände der Quantensprung-Operatoren mit Eigenwert Null sind: $\hat{L}_{\ell} |D\rangle = 0$.

Wir betrachten ein Vielteilchen-System bestehend aus Bosonen in einem optischen Gitter und sind auf der Suche nach einer Kopplung mit einem Bad und einem Antrieb, die Quantensprung-Operatoren realisieren, welche einen BEC-Zustand als Dunkelzustand haben. DIEHL ET AL.

⁴Wir bemerken, dass bei manchen Autoren Dunkelzustände als reine Zustände definiert werden. Siehe z. B. SCHIRMER und WANG [2010].

[2008] haben gezeigt, dass eine Konfiguration bestehend aus einem optischen Gitter mit Zwischengitterplätzen, einem Bad von BOGOLIUBOV-Anregungen eines BEC, sowie ein zusätzlicher RAMAN-Laser solche Quantensprung-Operatoren möglich machen. Wir beschreiben kurz die einzelnen Komponenten des Modells. Wir werden im Kapitel 4 das Modellsystem ausführlich behandeln. Eine graphische Veranschaulichung der Prozesse des Modellsystems ist in der Abbildung 2.4 dargestellt.

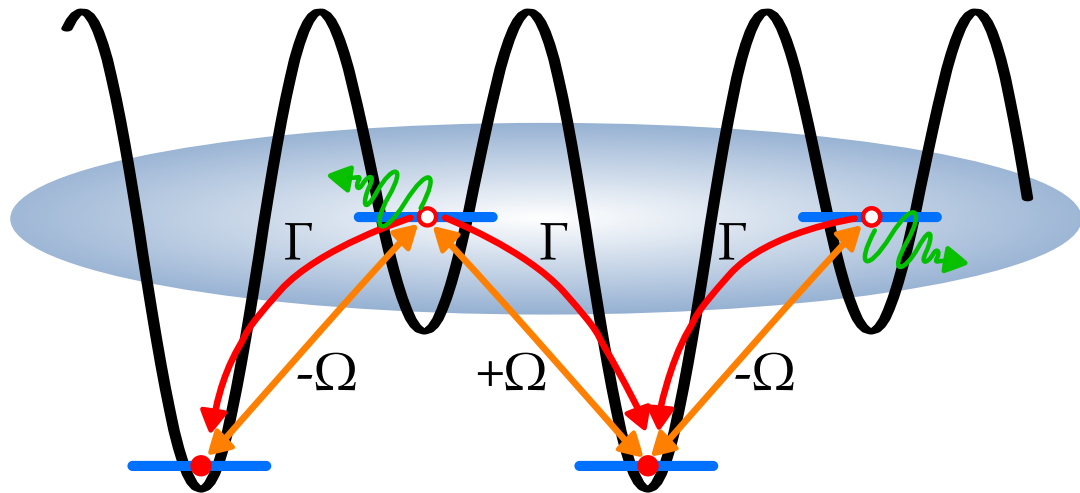


Abbildung 2.4: Veranschaulichung des Modells. Gezeigt sind hier das optische Gitterpotential (schwarze Linie), das BEC-Bad (blaues Oval) sowie die beiden Niveaus im unteren und im oberen Potentialminimum, welche den Gitter- bzw. den Untergitterplätzen entsprechen. Der RAMAN-Laser (oranger Pfeil) mit der RABI-Frequenz Ω koppelt beide Niveaus. Das obere Niveau kann durch Abgabe einer BOGOLIUBOV-Anregung (grüner Pfeil) an das BEC mit der Rate Γ in das untere Niveau zerfallen (roter Pfeil).

Das zu Grunde liegende Potential des optischen Gitters hat die in der Abbildung 2.4 gezeigte Form und man kann es sich als ein Gitter vorstellen, dem zusätzlich ein Untergitter der gleichen Periodizität überlagert wurde. Dabei entsprechen Gitterplätze des Untergitters angeregten Zuständen. Redet man in der Sprache der Festkörperphysik, so beziehen sich die lokalisierten Zustände im Untergitter auf die WANNIER-Funktionen des ersten angeregten BLOCH-Bandes, wohingegen die Zustände der Gitterplätze in den tiefer liegenden Minima des Potentials den WANNIER-Funktionen des untersten BLOCH-Bandes zuzuordnen sind.

Durch das Einstrahlen eines zusätzlichen RAMAN-Lasers können die Zustände des unteren BLOCH-Bandes in das obere BLOCH-Band angeregt werden und umgekehrt. Dabei wechselt auf Grund der doppelten Wellenlänge des RAMAN-Lasers im Vergleich zur Gitterkonstanten des optischen Gitters effektiv das Vorzeichen der RABI-Frequenz Ω von einem Gitterplatz zum nächsten.

Der zweite Schritt besteht darin, dass die Bosonen im oberen Band durch die Wechselwirkung mit einem zusätzlichen BEC in das untere BLOCH-Band mit der Rate Γ zerfallen können. Dies geschieht unter Emission einer BOGOLIUBOV-Anregung in das BEC. Dadurch geht dem System Energie verloren und dieser Prozess stellt damit den dissipativen Teil der Dynamik dar.

Durch die kohärente Anregung der Bosonen in das obere Band und des dissipativen Zerfallens zurück in das untere Band, lässt sich zeigen, dass die Quantensprung-Operatoren der Mastergleichung folgende Form annehmen ([DIEHL ET AL., 2008] oder Kapitel 4 dieser Diplomarbeit):

$$\hat{L}_{i,j} = (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_j^\dagger)(\hat{a}_i - \hat{a}_j). \quad (2.24)$$

Hier sind \hat{a}_i^\dagger und \hat{a}_i bosonische Erzeugungs- und Vernichtungs-Operatoren für den Zustand im unteren Potentialminimum des Gitters bei dem Gitterplatz i . Die Gitterplätze i und j sind hier benachbarte Gitterplätze. Das unterschiedliche Vorzeichen zwischen den Vernichtern ist eine Konsequenz des zwischen den Gitterplätzen alternierenden Vorzeichens der RABI-Frequenz Ω .

Die Quantensprung-Operatoren $\hat{L}_{i,j}$ beschreiben einen Prozess, bei welchem eine antisymmetrische Superposition von Teilchen auf benachbarten Gitterplätzen zerstört wird und dafür eine symmetrische Superposition hergestellt wird. Für den ersten Schritt sorgt der Operator $\hat{a}_i - \hat{a}_j$ und für den zweiten Schritt der Operator $\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_j^\dagger$ im Quantensprung-Operator (2.24). Die Quantensprung-Operatoren (2.24) sorgen demnach für eine lokale Kopplung der Phasen von Bosonen auf benachbarten Gitterplätzen, was letztendlich eine globale Kopplung der Phasen zur Folge hat. Dies ist aber gerade ein BEC-Zustand, wie er auch durch den Tunnel-Term des BOSE–HUBBARD-Modells erzeugt wird. Weiter kann man für den Fall verschwindender Wechselwirkung der Bosonen zeigen, dass ein BEC-Zustand tatsächlich ein Dunkelzustand der Quantensprung-Operatoren (2.24) ist.

Diese Art des Pumpens in einen BEC-Zustand entspricht dem *Velocity-Selective Coherent Population Trapping* (kurz VSCPT) aus dem Bereich des Laser-Kühlens [ASPECT ET AL., 1988; KASEVICH und CHU, 1992; METCALF und VAN DER STRATEN, 1999]. Auch dort wird ein antisymmetrisch superponierter Zustand in einen symmetrisch superponierten Zustand gepumpt, wobei dort ersterer als *Hellzustand* und letzterer als Dunkelzustand bezeichnet wird. Aus diesem Zusammenhang kommt auch die Bezeichnung *Dunkelzustand*, da dieser im Gegensatz zum Hellzustand nicht vom Licht des RABI-Lasers angeregt werden kann.

Kapitel 3

Über die allgemeine Ableitung der MARKOV'schen Quanten-Mastergleichung

Es soll eine mikroskopische Herleitung einer Quanten-Mastergleichung für ein Untersystem gezeigt werden. Ausgehend von der reinen hamilton'schen Dynamik des Gesamtsystems erhält man durch das Anwenden der zeitabhängigen Störungstheorie bis zur zweiten Ordnung in der System-Bad-Wechselwirkung und anschließendem Aussparen der Bad-Freiheitsgrade eine dissipative Dynamik des Untersystems. Dabei findet die BORN-MARKOV-Näherung Anwendung. Zuletzt bringen wir die Mastergleichung in LINDBLAD-Form. Die hier vorgestellte Herleitung basiert auf den empfehlenswerten und lesenswerten Monographien von BLUM [1981] sowie von BREUER und PETRUCCIONE [2007].

3.1 Mikroskopische Herleitung der Mastergleichung

Wir betrachten ein quantenmechanisches System bestehend aus zwei Untersystemen. Dabei ist ein Untersystem ein sogenanntes *Bad* oder *Reservoir*, welches dadurch definiert ist, dass es viele Freiheitsgrade aufweist. Das zweite Untersystem soll bzgl. der Teilchenzahl, des Volumens und anderer extensiver Größen klein sein im Vergleich zu diesem Bad. Im Folgenden bezeichnen wir das letztere Untersystem kurz als *System* und das Untersystem plus Bad als Gesamtsystem. Vergleiche dazu die nebenstehende Abbildung 3.1. Alle das System betreffenden Größen wollen wir mit dem Index *S* kennzeichnen. Entsprechend erhalten die Größen für das Bad den Index *B*. Beginnen wir mit dem HAMILTON-Operator des Gesamtsystems:

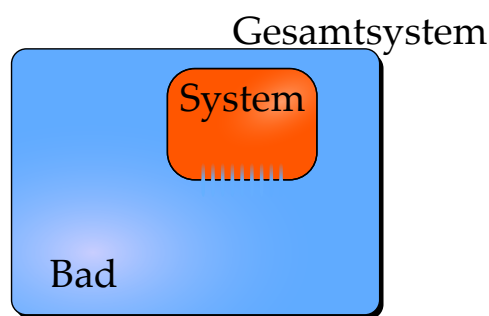


Abbildung 3.1:

Das von uns betrachtete Gesamtsystem besteht aus einem kleinen Untersystem, das wir System nennen und einem großen Untersystem. Letzteres stellt ein Bad dar und steht in Wechselwirkung mit dem System.

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_B + \hat{H}_{\text{int}}. \quad (3.1)$$

Wie man an den Indizes erkennt, ist \hat{H}_S der HAMILTON-Operator des uns interessierenden Systems und \hat{H}_B der HAMILTON-Operator des Bades. Bei dem durch den HAMILTON-Operator \hat{H}_S beschriebenen System handelt es sich um ein *offenes* System. Dabei ist offen *nicht* im thermodynamischen Sinne, d. h. mit einem Austausch von Teilchen und Energie gemeint, sondern, dass in noch unbestimmter Weise eine Wechselwirkung zwischen System und Bad existiert. Diese Wechselwirkung wird durch den HAMILTON-Operator \hat{H}_{int} realisiert.

Die Gleichung (3.1) ist formal gesehen nicht ganz korrekt, da System und Bad in zwei verschiedenen Tensorräumen leben. Der Grund hierfür liegt in der Tatsache, dass System und Bad unabhängige Freiheitsgrade besitzen. Dies ist analog zum physikalischen Ortsraum und dem Spinraum in der Einteilchen-Quantenmechanik. Entsprechend bestehen die jeweiligen HAMILTON-Operatoren aus System- oder Bad-Operatoren. Der HAMILTON-Operator \hat{H}_{int} der Wechselwirkung enthält allerdings Operatoren aus beiden Räumen. Formal korrekt lautet der HAMILTON-Operator (3.1) dann:

$$\hat{H} = \hat{H}_S \otimes \mathbb{1}_B + \mathbb{1}_S \otimes \hat{H}_B + \hat{H}_{\text{int}}. \quad (3.2)$$

Hierbei bezeichnet $\mathbb{1}_{S/B}$ die Identität im Tensorraum des Systems bzw. des Bades.

Wir wollen Systeme betrachten, welche nicht notwendigerweise durch einen reinen Zustand $|\psi\rangle$ beschrieben werden können. Die Größe, mit welcher man auch gemischte Zustände behandeln kann, ist der *statistische Operator* $\hat{\rho}$. Dieser wird auch als *Dichteoperator* oder *Dichtematrix* bezeichnet. Der statistische Operator ist ein linearer Operator, welcher *Spurklasse* und positiv semidefinit ist. Die Eigenschaft der Spurklasse bedeutet insbesondere, dass die Spur des Produktes des statistischen Operators mit einem zweiten Operator endlich ist. Speziell ist die Spur des statistischen Operators gleich eins. Aus der Eigenschaft der positiven Definitheit folgt, dass der statistische Operator hermitesch ist.

Da das Gesamtsystem ein abgeschlossenes quantenmechanisches System *ohne* Umgebung ist, unterliegt dieses einer reinen hamilton'schen, d. h. unitären Dynamik. Für den statistischen Operator $\hat{\rho}$ des Gesamtsystems gilt demnach die LIOUVILLE-VON NEUMANN-Gleichung. Im Wechselwirkungs-Bild lautet diese:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}^I(t)}{dt} = \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \hat{\rho}^I(t) \right]. \quad (3.3)$$

Siehe dazu die Gleichung (A.18) im Anhang A. Hierbei steht der Superskript I für das Wechselwirkungs-Bild¹. Analog werden wir im Folgenden den Superskript S für Operatoren benutzen, welche im SCHRÖDINGER-Bild auftauchen.

Unser Ziel ist es, eine Differentialgleichung erster Ordnung für den statistischen Operator des Systems aufzustellen. Dafür gehen wir zunächst vom Ansatz her wie in der zeitabhängigen Störungstheorie vor. Wir integrieren formal einmal die Gleichung (3.3):

$$\hat{\rho}^I(t) = \hat{\rho}^I(0) - i/\hbar \int_0^t \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(\tau), \hat{\rho}^I(\tau) \right] d\tau. \quad (3.4)$$

¹engl. *interaction picture*.

Dabei gilt: $\hat{\rho}^I(0) = \hat{\rho}^S(0) =: \hat{\rho}(0)$. Diesen Ausdruck setzen wir in die rechte Seite der Gleichung (3.3) ein:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}^I(t)}{dt} = \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \hat{\rho}(0) \right] - i/\hbar \int_0^t \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(\tau), \hat{\rho}^I(\tau) \right] \right] d\tau. \quad (3.5)$$

Integriert man diese Gleichung ein weiteres Mal und ersetzt den zeitabhängigen statistischen Operator in dem Doppelkommutator durch den statistischen Operator bei $t = 0$, so haben wir einen Ausdruck für $\hat{\rho}^I(t)$ in zeitabhängiger Störungstheorie zweiter Ordnung. Diese zweite Integration wollen wir jedoch nicht ausführen und bleiben bei der obigen Gleichung (3.5) für den statistischen Operator. Wir halten jedoch fest, dass die Gleichung (3.5) einer Störungstheorie in zweiter Ordnung für den statistischen Operator des Systems entspricht.

Die Gleichung (3.5) liefert uns den statistischen Operator für das Gesamtsystem. Uns interessiert allerdings nicht die Dynamik des gesamten Systems, sondern nur die des Untersystems *ohne* das Bad. Aus diesem Grund spüren wir die Bad-Freiheitsgrade aus und erhalten eine Differentialgleichung für den statistischen Operator des Systems im Wechselwirkungs-Bild $\hat{\rho}_S^I(t) = \text{Tr}_B \{ \hat{\rho}^I(t) \}$:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = \text{Tr}_B \left\{ \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \hat{\rho}(0) \right] \right\} - i/\hbar \int_0^t \text{Tr}_B \left\{ \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(\tau), \hat{\rho}^I(\tau) \right] \right] \right\} d\tau. \quad (3.6)$$

Bis hierhin ist alles noch exakt. Um den obigen Ausdruck weiter auszuwerten, müssen wir jedoch eine Annahme über die Stärke der Kopplung von System und Bad machen. Diese als BORN-Näherung bezeichnete Vereinfachung geht von einer schwachen Kopplung von System und Bad aus. Dadurch ist der Einfluss des Systems auf das Bad nur schwach und der statistische Operator $\hat{\rho}_B$ des Bades ändert sich kaum:

$$\hat{\rho}_B(t) \approx \hat{\rho}_B(0) =: \hat{\rho}_B. \quad (3.7)$$

Diese Voraussetzung ist dadurch in hohem Maße erfüllt, als dass wir das System als klein gegenüber dem Bad angenommen haben.

Gehen wir davon aus, dass der statistische Operator $\hat{\rho}$ des Gesamtsystems bei $t = 0$ ein Tensorprodukt aus den statistischen Operatoren von System und Bad ist, d. h.:

$$\hat{\rho}(0) = \hat{\rho}_S(0) \otimes \hat{\rho}_B, \quad (3.8)$$

dann bleibt er auf Grund der BORN-Näherung auch für alle späteren Zeiten ein Tensorprodukt der statistischen Operatoren:

$$\hat{\rho}^I(t) \approx \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B. \quad (3.9)$$

Des Weiteren können wir voraussetzen, dass der Wechselwirkungs-Hamiltonian \hat{H}_{int} keine diagonalen Terme in jener Darstellung aufweist, in welcher der Bad-Hamiltonian \hat{H}_B diagonal ist. Dies lässt sich durch eine geeignete Umdefinition des System-Hamiltonians \hat{H}_S und des Wechselwirkungs-Hamiltonians immer erreichen. Zusammen mit der Voraussetzung in Gleichung (3.8) gilt dann für den ersten Term in Gleichung (3.6):

$$\text{Tr}_B \left\{ \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \hat{\rho}(0) \right] \right\} = 0. \quad (3.10)$$

Man könnte mit Blick auf diese Formel auch anders argumentieren: Was diese Formel ausdrückt ist, dass die im Wechselwirkungs-Hamiltonian auftretenden Operatoren des Bades einen verschwindenden Mittelwert aufweisen. Wäre dieser Mittelwert allerdings ungleich Null, so kann man durch Umdefinieren der entsprechenden Operatoren einen Mittelwert von Null erreichen, ohne etwas an der eigentlichen Dynamik des Systems zu verändern.

Wenden wir die BORN'sche Näherung auf die Gleichung (3.6) an, so bekommen wir für die Dynamik des statistischen Operators des Systems

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = -i/\hbar \int_0^t \text{Tr}_B \left\{ \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(\tau), \hat{\rho}_S^I(\tau) \otimes \hat{\rho}_B \right] \right] \right\} d\tau. \quad (3.11)$$

Diese Gleichung ist eine Integro-Differentialgleichung für $\hat{\rho}_S^I(t)$. Die nun folgende MARKOV-Näherung macht hieraus eine Differentialgleichung, welche lokal in der Zeit ist.

Zunächst sei τ_B die Zeitskala auf welcher die Korrelationsfunktionen² des Bades abklingen. Dann ist der Integrand in Gleichung (3.11) nur für Zeiten $\tau \geq t - \tau_B$ ungleich Null. Des Weiteren existiert eine Relaxationszeit τ_R , in welcher sich das System merklich ändert. Ist nun die Korrelationszeit τ_B des Bades merklich schneller, als die Relaxationszeit des Systems:

$$\tau_B \gg \tau_R, \quad (3.12)$$

dann ist $\hat{\rho}_S^I(\tau) \approx \hat{\rho}_S^I(t)$ im Integranden von Gleichung (3.11). Wir können außerdem die Integrationsvariable τ durch $t - \tau$ substituieren und die obere Integrationsgrenze gegen unendlich gehen lassen. Damit erhalten wir schließlich die MARKOV'sche Quanten-Mastergleichung:

$$\boxed{i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = -i/\hbar \int_0^\infty \text{Tr}_B \left\{ \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t - \tau), \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \right] \right] \right\} d\tau.} \quad (3.13)$$

Hierbei handelt es sich um eine Differentialgleichung erster Ordnung für den statistischen Operator des Systems, welche lokal in der Zeit ist. Dies ist das gesuchte Ergebnis und wird der Ausgangspunkt für die Herleitungen im Abschnitt 4.4 sein.

Die MARKOV-Näherung bedeutet, dass das Bad keinerlei *Gedächtnis* aufweist. Anregungen im Bad, welche durch die Wechselwirkung mit dem System hervorgerufen werden, verschwinden in den unendlichen Freiheitsgraden des Bades und wirken niemals wieder auf das System zurück. An dieser Stelle ist die große – idealerweise unendliche – Anzahl der Freiheitsgrade des Bades entscheidend.

Zum Abschluss dieses Abschnittes wollen wir noch prüfen, ob der durch die MARKOV'sche Quanten-Mastergleichung (3.13) bestimmte statistische Operator die ihn definierenden Eigenschaften beibehält. Wir hatten oben festgehalten, dass die Spur des statistischen Operators konstant gleich eins ist. Demnach ist zu prüfen, ob die Zeitableitung der Spur des statistischen Operators verschwindet:

²Die Korrelationsfunktionen sind durch $\text{Tr}\{\hat{B}(t_0)\hat{B}(t_0 + \Delta t)\hat{\rho}_B\}$ definiert. \hat{B} sind Operatoren aus dem Tensorraum des Bades, welche in dem Wechselwirkungs-Hamiltonian \hat{H}_{int}^I auftauchen.

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr}_S \{ \hat{\rho}_S^I(t) \} &= \text{Tr}_S \left\{ i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^I(t) \right\} \\
 &= \text{Tr}_S \left\{ -i/\hbar \int_0^\infty \text{Tr}_B \left\{ \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau), \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \right] \right] \right\} d\tau \right\} \\
 &= -i/\hbar \int_0^\infty \text{Tr} \left\{ \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau), \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \right] \right] \right\} d\tau \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

Hier bedeutet Tr_S die Spur über die Freiheitsgrade des Systems S und Tr die Spur über die Freiheitsgrade von System und Bad. Der letzte Schritt folgt aus der Tatsache, dass man Operatoren innerhalb der Spur zyklisch vertauschen kann, d. h. $\text{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\hat{C}\} = \text{Tr}\{\hat{B}\hat{C}\hat{A}\} = \text{Tr}\{\hat{C}\hat{A}\hat{B}\}$ und demnach die Spur eines Kommutators Null ergibt³. Damit bleibt die Spur unter der Zeitentwicklung der Mastergleichung erhalten.

Die zweite Eigenschaft des statistischen Operators ist die positive Semidefinitheit. Uns nügt zu zeigen, dass der statistische Operator hermitesch bleibt. Dies ist der Fall, wenn die Mastergleichung hermitesch ist, so dass $\hat{\rho}_S^I(t)$ und $\hat{\rho}_S^{I\dagger}(t)$ der gleichen Bewegungsgleichung unterliegen und damit für alle Zeiten identisch sind. Die Mastergleichung (3.13) ist in der Tat hermitesch, da der Integrand hermitesch ist. Dies sieht man mit Hilfe der folgenden zwei Identitäten:

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger - \hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger = [\hat{B}^\dagger, \hat{A}^\dagger] \tag{3.15}$$

$$\implies [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]]^\dagger = [[\hat{B}, \hat{C}]^\dagger, \hat{A}^\dagger] = [[\hat{C}^\dagger, \hat{B}^\dagger], \hat{A}^\dagger] = [\hat{A}^\dagger, [\hat{B}^\dagger, \hat{C}^\dagger]]. \tag{3.16}$$

Womit für hermitesche \hat{A} , \hat{B} und \hat{C} gilt:

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]]^\dagger = [\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]]. \tag{3.17}$$

Zusammenfassend können wir sagen, dass die MARKOV'sche Quanten-Mastergleichung (3.13) die Eigenschaften von statistischen Operatoren erhält.

Eine ähnliche Fragestellung wie die Erhaltung der Spur ist, ob ein reiner Zustand unter der Zeitentwicklung (3.13) rein bleibt. Ein reiner Zustand ist durch die Bedingung $\text{Tr}\{\hat{\rho}^2\} = 1$ definiert. Zustände, die nicht rein sind, heißen *gemischte* Zustände und unterliegen der Ungleichung $\text{Tr}\{\hat{\rho}^2\} < 1$. Betrachten wir also die Zeitentwicklung der Spur von $\hat{\rho}^2$:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr}_S \{ \hat{\rho}_S^I(t)^2 \} &= \text{Tr}_S \left\{ i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^I(t)^2 \right\} = 2 \text{Tr}_S \left\{ \hat{\rho}_S^I(t) i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S^I(t) \right\} \\
 &= \text{Tr}_S \left\{ -\hat{\rho}_S^I(t) i/\hbar \int_0^\infty \text{Tr}_B \left\{ \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau), \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \right] \right] \right\} d\tau \right\} \\
 &= -i/\hbar \int_0^\infty \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_S^I(t) \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t), \left[\hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau), \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \right] \right] \right\} d\tau.
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

³Zu beachten ist, dass die letzte Aussage nur für Spurklasse-Operatoren gültig ist. Für die Leiteroperatoren \hat{a} des harmonischen Oszillators gilt z. B., dass der Ausdruck $\text{Tr}\{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\}$ divergiert. Siehe dazu z. B. MUKAMEL [1995]

Dies ist im Allgemeinen ungleich Null, da in der Spur nicht *nur* ein Kommutator steht. Wir können also festhalten, dass im Allgemeinen die Reinheit eines Zustandes unter der Zeitentwicklung einer MARKOV'sche Quanten-Mastergleichung (3.13) nicht erhalten bleibt.

3.2 Herleitung der LINDBLAD-Form der Mastergleichung

Die Zeitentwicklung des Untersystems S lässt sich ganz allgemein und abstrakt mit Hilfe von sogenannten *dynamischen Halb-Gruppen* beschreiben [BREUER und PETRUCCIONE, 2007]. Dies sind Abbildungen

$$V(t) : \mathcal{S}(\mathcal{H}_S) \longrightarrow \mathcal{S}(\mathcal{H}_S) \quad (3.19)$$

von dem Raum $\mathcal{S}(\mathcal{H}_S)$ der statistischen Operatoren des Untersystems in sich selbst mit der Halb-Gruppen-Eigenschaft:

$$V(t_1)V(t_2) = V(t_1 + t_2), \quad t_1, t_2 \geq 0. \quad (3.20)$$

Mit der Halb-Gruppen-Eigenschaft lässt sich die Änderung des statistischen Operators von dem Ausgangszustand bei $t = 0$ bis zu einem späteren Zeitpunkt bei $t > 0$ beschreiben durch:

$$\hat{\rho}_S(t) = V(t)\hat{\rho}(0).$$

Führen wir den *Generator* \mathcal{L} der Halb-Gruppe durch die Definition

$$V(t) = \exp(-i\mathcal{L}t/\hbar) \quad (3.21)$$

ein, so bekommen wir eine Differentialgleichung erster Ordnung für den statistischen Operator des Systems:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = \mathcal{L} \hat{\rho}_S(t). \quad (3.22)$$

Die Abbildungen $V(t)$ bilden nur eine Halb-Gruppe, da man mit diesen Abbildungen dissipative Dynamik beschreiben will. Da im Allgemeinen in diesem Fall *keine* reversible zeitliche Entwicklung des Systems vorliegt, existiert auch keine inverse Abbildung zu jedem Element der Gruppe.

Sowohl den Generator \mathcal{L} als auch $V(t)$ bezeichnet man als *Super-Operator*, da dieser Operatoren auf Operatoren abbildet. Im Falle reiner hamilton'scher Dynamik ist \mathcal{L} durch einen Kommutator wie in der LIOUVILLE–VON NEUMANN-Gleichung (3.3) gegeben.

Die obige Quanten-Mastergleichung (3.13) in der BORN–MARKOV-Näherung definiert allerdings *nicht* zwangsläufig einen Generator \mathcal{L} einer dynamischen Halb-Gruppe. Erst mit Hilfe der sogenannten *rotating-wave*-Näherung, welche über schnell oszillierende Terme mittelt, bekommt man das gewünschte Ergebnis [BREUER und PETRUCCIONE, 2007].

Bevor wir jedoch diese Näherung anwenden können, müssen wir den Hamiltonian der Wechselwirkung von Bad und System im Wechselwirkungs-Bild darstellen. Dazu spalten wir diesen im SCHRÖDINGER-Bild in Operatoren \hat{A} des Systems und in Operatoren \hat{B} des Bades auf:

$$\hat{H}_{\text{int}}^S = \sum_{\alpha} \hat{A}_{\alpha}^S \otimes \hat{B}_{\alpha}^S. \quad (3.23)$$

Hier ist α ein beliebiger Index. Zu beachten ist, dass zwar $\hat{H}_{\text{int}}^{\text{S}}$ hermitesch ist und damit auch die komplette Summe. Die einzelnen Summanden $\hat{A}_{\alpha}^{\text{S}}$ und $\hat{B}_{\alpha}^{\text{S}}$ müssen jedoch nicht hermitesch sein.

Diesen Ausdruck könnten wir nun *einfach* in das Wechselwirkungs-Bild transformieren, was uns allerdings im weiteren Verlauf nicht viel nützen würde. Die Ausdrücke werden etwas übersichtlicher, wenn wir die zugrunde liegenden Energieniveaus des Untersystems S benutzen. Die Idee ist, dass man \hat{H}_{int} in *Eigenoperatoren* des System-Hamiltonians \hat{H}_{S} zerlegt. Ein Operator \hat{O} heißt Eigenoperator zu \hat{H}_{S} , falls dieser die Eigenwertgleichung

$$[\hat{H}_{\text{S}}, \hat{O}] = \zeta \hat{O} \quad (3.24)$$

erfüllt. Dabei ist $\zeta \in \mathbb{C}$ der Eigenwert von \hat{O} .

Wir bezeichnen mit ε die Eigenwerte von \hat{H}_{S} und mit $\hat{\Pi}(\varepsilon)$ die Projektionsoperatoren des entsprechenden Eigenraumes. Als nächstes definieren wir Operatoren

$$\hat{A}_{\alpha}^{\text{S}}(\omega) := \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega} \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}} \hat{\Pi}(\varepsilon'), \quad (3.25)$$

deren Eigenschaften wir im Folgendem näher untersuchen wollen. Summiert wird in der Definition (3.25) über alle Eigenwerte ε und ε' von \hat{H}_{S} bei fester Energiedifferenz $\hbar\omega$.

Betrachten wir den Kommutator mit dem System-Hamiltonian:

$$\begin{aligned} [\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}}, \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}}(\omega)] &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega} [\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}}, \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}} \hat{\Pi}(\varepsilon')] \\ &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega} \sum_{\varepsilon''} \left(\underbrace{|\varepsilon''\rangle \langle \varepsilon''|}_{=\langle \varepsilon'' | \varepsilon'' \rangle} \hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}} \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}} \hat{\Pi}(\varepsilon') - \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}} \hat{\Pi}(\varepsilon') \underbrace{\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}}}_{=\varepsilon'' | \varepsilon'' \rangle} |\varepsilon''\rangle \langle \varepsilon''| \right) \\ &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega} \sum_{\varepsilon''} \left(\underbrace{|\varepsilon''\rangle \langle \varepsilon''|}_{=\varepsilon \langle \varepsilon'' | \hat{\Pi}(\varepsilon)} \varepsilon'' \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}} \hat{\Pi}(\varepsilon') - \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}} \underbrace{\hat{\Pi}(\varepsilon') \varepsilon'' | \varepsilon''\rangle}_{=\varepsilon' \hat{\Pi}(\varepsilon') | \varepsilon'' \rangle} \right) \\ &= \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \hbar\omega} \underbrace{(\varepsilon - \varepsilon')}_{=-\hbar\omega} \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}} \hat{\Pi}(\varepsilon') \\ [\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}}, \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}}(\omega)] &= -\hbar\omega \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}}(\omega). \end{aligned} \quad (3.26)$$

Dabei haben wir im ersten Schritt die Vollständigkeitsrelation der Energieeigenzustände eingesetzt.

Mittels hermitescher Konjugation erhält man einen analogen Ausdruck für den adjungierten System-Operator:

$$[\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}}, \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}\dagger}(\omega)] = \hbar\omega \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}\dagger}(\omega). \quad (3.27)$$

Damit sind $\hat{A}_{\alpha}^{\text{S}}(\omega)$ und $\hat{A}_{\alpha}^{\text{S}\dagger}(\omega)$ Eigenoperatoren zu dem System-Hamiltonian $\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}}$ mit Eigenwerten $\mp \hbar\omega$.

Nun wollen wir diese Eigenoperatoren in das Wechselwirkungs-Bild transformieren. Es gilt gemäß Gleichung (A.9):

$$\hat{A}_{\alpha}^{\text{I}}(\omega, t) = e^{i(\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}} + \hat{H}_{\text{B}}^{\text{S}})t/\hbar} \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}}(\omega) e^{-i(\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}} + \hat{H}_{\text{B}}^{\text{S}})t/\hbar} = e^{i\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}}t/\hbar} \hat{A}_{\alpha}^{\text{S}}(\omega) e^{-i\hat{H}_{\text{S}}^{\text{S}}t/\hbar}. \quad (3.28)$$

Hier haben wir ausgenutzt, dass \hat{A} ein Systemoperator ist und den Tensorraum des Bades unberührt lässt. Dann können wir $\hat{A}_\alpha^I(\omega, t)$ mit Hilfe der Bewegungsgleichung (A.11) und dem Kommutator (3.26) berechnen:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \hat{A}_\alpha^I(\omega, t) &= [\hat{A}_\alpha^I(\omega, t), \hat{H}_S^S] \\ &= e^{i\hat{H}_S^S t/\hbar} [\hat{A}_\alpha^S(\omega), \hat{H}_S^S] e^{-i\hat{H}_S^S t/\hbar} \\ &= e^{i\hat{H}_S^S t/\hbar} \hbar\omega \hat{A}_\alpha^S(\omega) e^{-i\hat{H}_S^S t/\hbar} \\ &= \hbar\omega \hat{A}_\alpha^I(\omega, t). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Dies lässt sich einfach integrieren und mit der Anfangsbedingung $\hat{A}_\alpha^I(\omega, 0) = \hat{A}_\alpha^S(\omega)$ erhalten wir:

$$\hat{A}_\alpha^I(\omega, t) = e^{-i\omega t} \hat{A}_\alpha^S(\omega). \quad (3.30)$$

Den Adjungierten berechnet man durch schlichtes hermitesch konjugieren:

$$\hat{A}_\alpha^{I\dagger}(\omega, t) = e^{i\omega t} \hat{A}_\alpha^{S\dagger}(\omega). \quad (3.31)$$

Wir sehen damit, dass die Eigenoperatoren im Wechselwirkungs-Bild sich lediglich durch einen Phasenfaktor von den Eigenoperatoren im SCHRÖDINGER-Bild unterscheidet.

Nun summieren wir $\hat{A}_\alpha^S(\omega)$ über alle möglichen Energiedifferenzen ω und erhalten:

$$\begin{aligned} \sum_\omega \hat{A}_\alpha^S(\omega) &= \sum_\omega \sum_{\varepsilon' - \varepsilon = \omega} \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_\alpha^S \hat{\Pi}(\varepsilon') \\ &= \sum_\varepsilon \sum_{\varepsilon'} \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_\alpha^S \hat{\Pi}(\varepsilon') \\ &= \sum_\varepsilon \hat{\Pi}(\varepsilon) \hat{A}_\alpha^S \sum_{\varepsilon'} \hat{\Pi}(\varepsilon') \\ \sum_\omega \hat{A}_\alpha^S(\omega) &= \hat{A}_\alpha^S. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Dies ist gerade der Anteil des Systems im Wechselwirkungs-Hamiltonian (3.23). Für diesen können wir demnach auch schreiben:

$$\hat{H}_{\text{int}}^S = \sum_\alpha \sum_\omega \hat{A}_\alpha^S(\omega) \otimes \hat{B}_\alpha^S, \quad (3.33)$$

welcher damit schließlich in Eigenoperatoren des System-Hamiltonians zerlegt ist.

In der Quanten-Mastergleichung (3.13) tritt der Wechselwirkungs-Hamiltonian im Wechselwirkungs-Bild auf, sodass wir in der obigen Zerlegung die Wechselwirkungs-Darstellung der Systemoperatoren einsetzen wollen:

$$\hat{H}_{\text{int}}^I(t) = \sum_\alpha \sum_\omega e^{-i\omega t} \hat{A}_\alpha^S(\omega) \otimes \hat{B}_\alpha^I(t), \quad \text{oder} \quad (3.34a)$$

$$= \sum_\alpha \sum_\omega e^{i\omega t} \hat{A}_\alpha^{S\dagger}(\omega) \otimes \hat{B}_\alpha^{I\dagger}(t), \quad (3.34b)$$

wobei natürlich auch die Bad-Operatoren in das Wechselwirkungs-Bild transformiert wurden:

$$\begin{aligned}\hat{B}_\alpha^I(t) &= e^{i(\hat{H}_S^S + \hat{H}_B^S)t/\hbar} \hat{B}_\alpha^S e^{-i(\hat{H}_S^S + \hat{H}_B^S)t/\hbar} \\ &= e^{i\hat{H}_B^S t/\hbar} \hat{B}_\alpha^S e^{-i\hat{H}_B^S t/\hbar}.\end{aligned}\quad (3.35)$$

Dabei haben wir ausgenutzt, dass \hat{B}_α nur auf den Tensorraum des Bades wirkt.

Bevor wir \hat{H}_{int} aus Gleichung (3.34) in die Mastergleichung (3.13) einsetzen, wollen wir in Letzterer den darin auftretenden Doppellkommutator auflösen. Dadurch erhalten wir:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} &= -i/\hbar \int_0^\infty \text{Tr}_B \left\{ \hat{H}_{\text{int}}^I(t) \hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B - \hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \hat{H}_{\text{int}}^I(t) + \right. \\ &\quad \left. + \underbrace{\hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau) \hat{H}_{\text{int}}^I(t) - \hat{H}_{\text{int}}^I(t) \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau)}_{= \text{hermitesch Konjugierte (h.c.) der ersten beiden Terme}} \right\} d\tau, \quad (3.36)\end{aligned}$$

bzw.

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = -i/\hbar \int_0^\infty \text{Tr}_B \left\{ \hat{H}_{\text{int}}^I(t) \hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B - \hat{H}_{\text{int}}^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B \hat{H}_{\text{int}}^I(t) + \text{h.c.} \right\} d\tau. \quad (3.37)$$

Nun ersetzen wir den Wechselwirkungs-Hamiltonian zum Zeitpunkt t bzw. $t-\tau$ durch die Aufspaltung (3.34b) bzw. (3.34a):

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} &= -i/\hbar \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\omega, \omega'} \int_0^\infty \text{Tr}_B \left\{ e^{i\omega t} \hat{A}_\alpha^{S\dagger}(\omega) \otimes \hat{B}_\alpha^{I\dagger}(t) e^{-i\omega'(t-\tau)} \hat{A}_\beta^S(\omega') \otimes \hat{B}_\beta^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B + \right. \\ &\quad \left. - e^{-i\omega'(t-\tau)} \hat{A}_\beta^S(\omega') \otimes \hat{B}_\beta^I(t-\tau) \hat{\rho}_S^I(t) \otimes \hat{\rho}_B e^{i\omega t} \hat{A}_\alpha^{S\dagger}(\omega) \otimes \hat{B}_\alpha^{I\dagger}(t) + \text{h.c.} \right\} d\tau. \quad (3.38)\end{aligned}$$

Jetzt nehmen wir die System-Operatoren aus der Spur über die Freiheitsgrade des Bades und verwenden innerhalb der Spur die Invarianz dieser unter zyklischer Permutation von Bad-Operatoren:

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} &= i/\hbar \left\{ \sum_{\omega, \omega'} e^{i(\omega-\omega')t} \sum_{\alpha, \beta} \int_0^\infty \text{Tr}_B \left\{ \hat{B}_\alpha^{I\dagger}(t) \hat{B}_\beta^I(t-\tau) \hat{\rho}_B \right\} e^{i\omega'\tau} d\tau \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[\hat{A}_\beta^S(\omega') \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_\alpha^{S\dagger}(\omega) - \hat{A}_\alpha^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_\beta^S(\omega') \hat{\rho}_S^I(t) \right] + \text{h.c.} \right\} \\ &= i/\hbar \left\{ \sum_{\omega, \omega'} \sum_{\alpha, \beta} e^{i(\omega-\omega')t} \Gamma_{\alpha, \beta}(\omega', t) \left[\hat{A}_\beta^S(\omega') \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_\alpha^{S\dagger}(\omega) - \hat{A}_\alpha^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_\beta^S(\omega') \hat{\rho}_S^I(t) \right] + \text{h.c.} \right\}. \quad (3.39)\end{aligned}$$

Die hier auftretenden Korrelationen

$$\Gamma_{\alpha, \beta}(\omega', t) := \int_0^\infty \text{Tr}_B \left\{ \hat{B}_\alpha^{I\dagger}(t) \hat{B}_\beta^I(t-\tau) \hat{\rho}_B \right\} e^{i\omega'\tau} d\tau \quad (3.40)$$

sind die Bad-Korrelationsfunktionen. Sie bestimmen die Zeitskala τ_B , welche im Abschnitt 3.1 eingeführt wurde. Im Falle eines stationären Zustandes $\hat{\rho}_B$ des Bades sind die Korrelationen $\Gamma_{\alpha,\beta}$ nicht vom Zeitpunkt t abhängig [BREUER und PETRUCCIONE, 2007].

Nun wenden wir die bereits oben erwähnte *rotating wave Näherung* an. Sei τ_S eine Zeitskala des Systems, welche durch einen *typischen* Wert von $|\omega - \omega'|^{-1}$ repräsentiert wird. Ist diese nun wesentlich größer als die Relaxationszeit τ_R des Systems, d. h. gilt $\tau_S \gg \tau_R$, dann können wir die Terme mit $\omega \neq \omega'$ in der Mastergleichung vernachlässigen. Denn diese Terme oszillieren schnell auf Zeitskalen, in welchen $\hat{\rho}_S^I(t)$ sich kaum ändert und ergänzen sich damit beim Integrieren zu Null. Für quantenoptische Systeme ist dies eine sehr gute Näherung [BREUER und PETRUCCIONE, 2007; GARDINER und ZOLLER, 2004].

Wir erhalten somit in der *rotating-wave*-Näherung für die Quanten-Mastergleichung (3.13):

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = i/\hbar \left\{ \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) \left[\hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \right] + \text{h.c.} \right\}. \quad (3.41)$$

In dieser Gleichung erkennt man immer noch nicht ohne weiteres den hamilton'schen und den dissipativen Anteil der Dynamik. Um beide Anteile klar zu trennen, zerlegen wir die Korrelationsfunktionen des Bades in zwei hermitesche Matrizen:

$$\Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) := \frac{1}{2} \gamma_{\alpha,\beta}(\omega) + i S_{\alpha,\beta}(\omega). \quad (3.42)$$

Dabei ist

$$S_{\alpha,\beta}(\omega) := \frac{1}{2i} \left(\Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) - \Gamma_{\beta,\alpha}^*(\omega) \right) \quad (3.43)$$

und

$$\gamma_{\alpha,\beta}(\omega) := \Gamma_{\alpha,\beta}(\omega) + \Gamma_{\beta,\alpha}^*(\omega). \quad (3.44)$$

Diese hermitesche Aufspaltung für $\Gamma_{\alpha,\beta}$ setzen wir in Gleichung (3.41) ein:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} &= i/\hbar \left\{ \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{1}{2} \gamma_{\alpha,\beta}(\omega) + i S_{\alpha,\beta}(\omega) \right) \left[\hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \right] + \text{h.c.} \right\} \\ &= i/\hbar \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ \left(\frac{1}{2} \gamma_{\alpha,\beta}(\omega) + i S_{\alpha,\beta}(\omega) \right) \left[\hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{2} \underbrace{\gamma_{\alpha,\beta}^*}_{=\gamma_{\beta,\alpha}(\omega)} - i \underbrace{S_{\alpha,\beta}^*}_{=S_{\beta,\alpha}(\omega)} \right) \left[\hat{A}_{\alpha}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\beta}^{S\dagger}(\omega) - \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\beta}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\alpha}^S(\omega) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Im zweiten Term vertauschen wir die Summationsindizes α und β :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} &= i/\hbar \sum_{\omega} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ i S_{\alpha,\beta}(\omega) \times \right. \\ &\quad \times \left[\hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) - \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) + \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \right] + \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \gamma_{\alpha,\beta}(\omega) \left[\hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) + \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \right] \right\} \end{aligned}$$

$$= i/\hbar \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \left\{ i S_{\alpha, \beta}(\omega) \left[\hat{\rho}_S^I(t), \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega) \right] + \gamma_{\alpha, \beta}(\omega) \left[\hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \frac{1}{2} \left\{ \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega), \hat{\rho}_S^I(t) \right\} \right] \right\}. \quad (3.46)$$

Auf Grund der Hermitezität von $S_{\alpha, \beta}$ ist auch der erste Term hermitesch. Dieser liefert damit den hamilton'schen Beitrag zur Zeitentwicklung, deren Generator als *LAMB-Shift*-Hamiltonian bezeichnet wird:

$$\hat{H}_{LS}^S = 1/\hbar \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} S_{\alpha, \beta}(\omega) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega). \quad (3.47)$$

Führen wir außerdem noch den sogenannten *Dissipator*

$$\mathcal{L}(\hat{\rho}_S^I(t)) = \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\omega} \sum_{\alpha, \beta} \gamma_{\alpha, \beta}(\omega) \left(2\hat{A}_{\beta}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \left\{ \hat{A}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{A}_{\beta}^S(\omega), \hat{\rho}_S^I(t) \right\} \right) \quad (3.48)$$

ein, so schreibt sich die Quanten-Mastergleichung schließlich:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^I(t)}{dt} = \left[\hat{H}_{LS}^S, \hat{\rho}_S^I(t) \right] + i\hbar \mathcal{L}(\hat{\rho}_S^I(t)). \quad (3.49)$$

Mit $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ bezeichnen wir den Antikommutator. Da die Matrizen $\gamma_{\alpha, \beta}$ positiv und hermitesch sind, lassen diese sich durch unitäre Matrizen u diagonalisieren:

$$u\gamma u^{-1} =: \kappa. \quad (3.50)$$

Außerdem schreiben wir für die System-Operatoren in der neuen Basis:

$$\hat{A}_{\alpha}^S(\omega) =: \sum_{\eta} u_{\eta, \alpha} \hat{C}_{\eta}^{S\dagger}(\omega). \quad (3.51)$$

Die Operatoren $\hat{C}_{\eta}^{S\dagger}(\omega)$ werden als LINDBLAD- oder *Quantensprung-Operatoren* bezeichnet. Der Dissipator besitzt dann die folgende Form:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\hat{\rho}_S^I) &= \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\alpha, \omega} \kappa_{\alpha} \left(2\hat{C}_{\alpha}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t) \hat{C}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) - \left\{ \hat{C}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \hat{C}_{\alpha}^S(\omega), \hat{\rho}_S^I(t) \right\} \right) \\ &= \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\alpha, \omega} \kappa_{\alpha} \left(\left[\hat{C}_{\alpha}^S(\omega), \hat{\rho}_S^I(t) \hat{C}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \right] + \left[\hat{C}_{\alpha}^S(\omega) \hat{\rho}_S^I(t), \hat{C}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \right] \right) \\ &= \frac{1}{2\hbar^2} \sum_{\alpha, \omega} \kappa_{\alpha} \left(\left[\hat{C}_{\alpha}^S(\omega), \hat{\rho}_S^I(t) \hat{C}_{\alpha}^{S\dagger}(\omega) \right] + \text{h.c.} \right). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Zu guter Letzt kann man die Mastergleichung wieder zurück in das SCHRÖDINGER-Bild transformieren. Der dissipative Anteil bleibt in seiner Form davon unverändert. Der hamilton'sche Anteil erhält jedoch zusätzlich den System-Hamiltonian:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^S(t)}{dt} = \left[\hat{H}_S^S + \hat{H}_{LS}^S, \hat{\rho}_S^S(t) \right] + i\hbar \mathcal{L}(\hat{\rho}_S^S(t)). \quad (3.53)$$

Auch hier kann man sich wieder fragen, ob der sich durch diese Mastergleichung in der Zeit entwickelnde statistische Operator die Eigenschaften eines statistischen Operators tatsächlich beibehält. Dass die Spur erhalten bleibt, sieht man sofort, da in der Zeitentwicklung nur Terme aus Kommutatoren auftauchen und deren Spur ist, wie wir am Ende des letzten Abschnitts 3.1 gesehen haben, gleich Null. Außerdem bemerken wir, dass mit den selben Argumenten wie im genannten Abschnitt die Reinheit $\text{Tr}\{\hat{\rho}_S^S(t)^2\}$ nicht erhalten bleibt.

Um zu zeigen, dass der statistische Operator positiv semidefinit bleibt, genügt es uns, zu zeigen, dass er hermitesch bleibt. Dies ist der Fall, wenn sich $\hat{\rho}_S^S(t)$ und sein hermitesch konjugiertes $\hat{\rho}_S^{S\dagger}(t)$ identisch in der Zeit entwickeln, d. h. die gleiche Mastergleichung erfüllen. Diese Bedingung ist in der Tat erfüllt, da gemäß der Gleichung (3.15) die hermitesch konjugierte Mastergleichung (3.53) folgende Form hat:

$$-i\hbar \frac{d\hat{\rho}_S^{S\dagger}(t)}{dt} = \left[\hat{H}_S^S + \hat{H}_{LS}^S, \hat{\rho}_S^S(t) \right]^\dagger - i\hbar \mathcal{L}(\hat{\rho}_S^S(t))^\dagger = - \left[\hat{H}_S^S + \hat{H}_{LS}^S, \hat{\rho}_S^S(t) \right] - i\hbar \mathcal{L}(\hat{\rho}_S^S(t)). \quad (3.54)$$

Dabei haben wir ausgenutzt, dass der Dissipator (3.52) hermitesch ist. Demnach besitzen $\hat{\rho}_S^S(t)$ und $\hat{\rho}_S^{S\dagger}(t)$ die gleiche Zeitentwicklung und bleiben unter der Mastergleichung (3.53) für alle Zeiten hermitesch.

Diese LINDBLAD-Form der Mastergleichung (3.53) werden wir im Abschnitt 4.4 für unser Modellsystem wiedersehen. Die hier gezeigte Herleitung können wir dort jedoch nicht verwenden, da wir die Eigenwerte des BOSE-HUBBARD-Hamiltonians nicht kennen. Dadurch ist es uns nicht möglich, den Wechselwirkungs-Hamiltonian wie in Gleichung (3.33) nach Eigenoperatoren des BOSE-HUBBARD-Hamiltonians zu entwickeln. Ausgehend von der MARKOV'schen Quanten-Mastergleichung (3.13) und einem explizit gegebenen Wechselwirkungs-Hamiltonian ist es allerdings letztendlich möglich eine Mastergleichung in LINDBLAD-Form herzuleiten.

Kapitel 4

Bosonen im optischen Gitter als offenes Quantensystem

In diesem Kapitel stellen wir das dieser Arbeit zu Grunde liegende Modell vor. Dieses geht auf die Arbeit von DIEHL ET AL. [2008] zurück. Es beschreibt zwei Untersysteme, welche miteinander gekoppelt sind. Das erste besteht aus bosonischen kalten Atomen in einem optischen Gitter. Mathematisch beschrieben wird dieses System durch das sogenannte BOSE–HUBBARD-Modell. Das zweite System besteht aus einem schwach wechselwirkenden BOSE-Gas, welches durch ein Bad von BOGOLIUBOV-Anregungen modelliert wird.

In dem Artikel von DIEHL ET AL. [2008] wird auch die Herleitung der Mastergleichung, welche die Dynamik des Systems beschreibt, *skizziert*. Wir werden in diesem Kapitel die Mastergleichung im *Detail* herleiten. Betrachten wir jedoch zunächst das einfache BOSE–HUBBARD-Modell.

4.1 Das BOSE–HUBBARD-Modell für Bosonen im optischen Gitter

Das HUBBARD-Modell [HUBBARD, 1963] ist ein relativ einfaches aber keinesfalls triviales Modell zur Beschreibung eines wechselwirkenden Vielteilchen-Systems. Es hat seinen Ursprung in der Festkörperphysik der 1960er Jahre und modelliert wechselwirkende Elektronen in einem periodischen Potential. Ursprünglich diente es als Modell zur Beschreibung eines Übergangs des Systems von einem isolierenden – einem MOTT-Isolator – zu einem elektrisch leitenden Zustand. Es dient aber auch als einfachstes Modell zur Beschreibung von Hochtemperatur-Supraleitung. Der HAMILTON-Operator des HUBBARD-Modells besteht aus zwei Termen. Einem kinetischen Term, welcher das Tunneln zwischen benachbarten Gitterplätzen beschreibt und einem Wechselwirkungsterm, der die COULOMB-Abstoßung zweier Elektronen auf einem Gitterplatz modelliert.

Das HUBBARD-Modell ist zunächst ein Modell für Elektronen, d. h. für Fermionen. Es lässt sich jedoch auch auf wechselwirkende Bosonen in einem periodischen Potential übertragen. Dieses Modell bezeichnet man dann als BOSE–HUBBARD-Modell¹. Ausgiebig untersucht wurde dieses Modell erstmals von FISHER ET AL. [1989].

In Zusammenhang mit ultrakalten Bosonen in einem optischen Gitter wurde das BOSE–HUBBARD-Modell erstmals von JAKSCH ET AL. [1998] gebracht. Sie zeigten, dass sich der HA-

¹Zur Unterscheidung wird das HUBBARD-Modell dann auch als FERMI–HUBBARD-Modell bezeichnet.

MILTON-Operator eines ultrakalten bosonischen Quantengases, welches in ein optisches Gitter gebracht wurde, auf die Form eines BOSE–HUBBARD-Hamiltonian bringen lässt. Dies wollen wir im folgenden Abschnitt zeigen.

4.1.1 Das allgemeine BOSE–HUBBARD-Modell

Unser Ausgangspunkt ist der HAMILTON-Operator von wechselwirkenden identischen Teilchen in zweiter Quantisierung [GROSS und RUNGE, 1986]:

$$\hat{H} = \int_V dx \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{h}(x) \hat{\psi}(x) + \frac{1}{2} \int_V dx \int_V dx' \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}^\dagger(x') \hat{V}_{\text{int}}(x-x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x). \quad (4.1)$$

Hier ist V das zu betrachtende Volumen und $\hat{h}(x)$ der Einteilchen-Hamiltonian in Ortsdarstellung

$$\hat{h}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{lat}}(x) + V_{\text{trap}}(x) \quad (4.2)$$

mit der Masse m der Bosonen, dem Potential $V_{\text{lat}}(x)$ des optischen Gitters und dem Potential $V_{\text{trap}}(x)$ der äußeren Falle. Das Gitter habe die Periode a . Wir werden in dieser Arbeit nur optische Gitter mit kubischer Symmetrie betrachten. Die bosonischen Feldoperatoren $\hat{\psi}^\dagger(x)$ und $\hat{\psi}(x)$ erzeugen bzw. vernichten ein Boson am Orte x und genügen den kanonischen BOSE-Kommutatorrelationen:

$$[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(x')] = \delta(x-x') \quad \text{und} \quad [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(x')] = 0 = [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(x')]. \quad (4.3)$$

Die Wechselwirkung zweier Bosonen untereinander wird durch das Zweiteilchen-Wechselwirkungspotential $\hat{V}_{\text{int}}(x-x')$ beschrieben. Eine Wechselwirkung von drei und mehr Teilchen können wir auf Grund der geringen Dichte des atomaren Gases vernachlässigen [PETHICK und SMITH, 2008]. Im Allgemeinen ist das Zweiteilchen-Wechselwirkungspotential eine komplizierte Funktion des Abstandes der beiden Teilchen. Da allerdings nur bei sehr niedrigen Temperaturen von einigen hundert nK gearbeitet wird, besitzen die wechselwirkenden Teilchen nur eine sehr niedrige kinetische Energie. Im Rahmen der Streutheorie können wir damit die BORN'sche Näherung verwenden [SAKURAI, 1994]. Vom Standpunkt der Partialwellenanalyse aus betrachtet, berücksichtigen wir damit nur s-Wellen Streuung. Das Wechselwirkungspotential ist dann ausschließlich durch die s-Wellen Streulänge a_s charakterisiert und kann durch ein effektives Potential der Form [PETHICK und SMITH, 2008]:

$$\hat{V}_{\text{int}}(x-x') = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \delta(x-x') \quad (4.4)$$

ausgedrückt werden. Anschaulich hat dies die Form einer Kontakt-Wechselwirkung und führt im Hamiltonian (4.1) effektiv auf eine Dichte-Dichte-Wechselwirkung. Wir wollen den Vorfaktor der Kontakt-Wechselwirkung \hat{V}_{int} mit g abkürzen, d. h.:

$$g := \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}. \quad (4.5)$$

Die Dimension von g ist Jm^{-3} , da wir die Streuung von Teilchen in drei Raumdimensionen betrachten. Arbeitet man mit niederdimensionalen optischen Gittern, so werden die entsprechenden Raumdimensionen ausintegriert und g bekommt die Dimension Jm^{-2} bzw. Jm^{-1} für zwei- bzw. eindimensionale optische Gitter.

Da das Einteilchen-Potential des Gitters V_{lat} bei Vernachlässigung der Falle periodisch ist, macht es Sinn, die Feldoperatoren nach Funktionen zu entwickeln, welche dieser Symmetrie unterliegen. Eine mögliche Wahl wären die BLOCH-Funktionen [KITTEL, 2006; CZYCHOLL, 2004]. Wir verwenden jedoch deren „FOURIER-Transformierte“, die sogenannten WANNIER-Funktionen [KOHN, 1959, 1973; CZYCHOLL, 2004]. Diese wollen wir mit $w^{(n)}(x - x_i^{(n)})$ bezeichnen. Hier ist n der Bandindex, wie man ihn von den BLOCH-Funktionen her kennt. Abkürzend werden wir auch die Notation

$$\boxed{w^{(n)}(x - x_i^{(n)}) =: w_i^{(n)}(x)} \quad (4.6)$$

verwenden. Der Ort $x_i^{(n)}$ hat eine besondere Bedeutung, denn gemäß KOHN [1959] gibt es pro Band genau einen Satz von WANNIER-Funktionen, in welchem die WANNIER-Funktionen

1. entweder symmetrisch oder antisymmetrisch um entweder $x = x_i^{(n)}$ oder $x = x_i^{(n)} + \frac{1}{2}a$,
2. rein reell sind und
3. exponentiell im Unendlichen abfallen.

Besonders der letzte Punkt ist für uns von Interesse, denn er sorgt für eine starke Lokalisierung der WANNIER-Funktion $w^{(n)}(x - x_i^{(n)})$ um $x = x_i^{(n)}$. Man kann sich eine WANNIER-Funktion als Wellenfunktion eines auf einem Gitterplatz lokalisierten Teilchens vorstellen. Näheres zu BLOCH- und WANNIER-Funktionen, deren Eigenschaften und Verbindung zueinander findet man im Anhang B.

Auf Grund der Vollständigkeit (B.8) der WANNIER-Funktionen können wir die Feldoperatoren $\hat{\psi}(x)$ nach diesen entwickeln. Siehe dazu Gleichung (B.13) auf Seite 127 im Anhang B. Die hier auftretenden Operatoren $\hat{a}_i^{(n)\dagger}$ und $\hat{a}_i^{(n)}$ sind wiederum Erzeuger und Vernichter von Bosonen und erfüllen kanonische BOSE-Kommutatorrelationen:

$$[\hat{a}_i^{(n)}, \hat{a}_{i'}^{(n')\dagger}] = \delta_{n,n'} \delta_{i,i'} \quad \text{und} \quad [\hat{a}_i^{(n)}, \hat{a}_{i'}^{(n')}] = 0 = [\hat{a}_i^{(n)\dagger}, \hat{a}_{i'}^{(n')\dagger}]. \quad (4.7)$$

Im Folgenden wollen wir $\hat{a}_i^{(n)\dagger}$ und $\hat{a}_i^{(n)}$ kurz als Leiteroperatoren bezeichnen. Auf Grund der Eigenschaft der WANNIER-Funktionen $w^{(n)}(x - x_i^{(n)})$ stark auf dem Gitterplatz bei $x = x_i^{(n)}$ lokalisiert zu sein, interpretiert man die Leiteroperatoren $\hat{a}_i^{(n)\dagger}$ und $\hat{a}_i^{(n)}$ als Erzeuger bzw. Vernichter eines Bosons am Gitterplatz i des n -ten Bandes.

Setzen wir nun die Entwicklung (B.13) der Feldoperatoren und das Wechselwirkungspotential (4.4) in den Hamiltonian (4.1) ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{n,m} \sum_{i,j} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)} \int_{\mathcal{V}} w^{(n)*}(x - x_i^{(n)}) \hat{h}(x) w^{(m)}(x - x_j^{(m)}) dx + \\ & + \frac{1}{2} g \sum_{\substack{n,m \\ u,v}} \sum_{\substack{i,j \\ k,l}} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)\dagger} \hat{a}_k^{(u)} \hat{a}_l^{(v)} \int_{\mathcal{V}} w^{(n)*}(x - x_i^{(n)}) w^{(m)*}(x - x_j^{(m)}) w^{(u)}(x - x_k^{(u)}) w^{(v)}(x - x_l^{(v)}) dx. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Nun führen wir drei Abkürzungen ein, um diesen HAMILTON-Operator übersichtlicher zu machen. Wir definieren das sogenannte *Tunnelmatrixelement*:

$$\mathcal{J}_{i,j}^{(n,m)} := - \int_V \mathbf{w}^{(n)*}(x - x_i^{(n)}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}_{\text{lat}}(x) \right] \mathbf{w}^{(m)}(x - x_j^{(m)}) dx. \quad (4.9)$$

Das Tunnelmatrixelement hängt in einem homogenen Gitter auf Grund der Translationsinvarianz des LAPLACE-Operators und des Gitterpotentials nicht von den Gitterpunkten i und j ab, sondern nur von deren relativer Lage. Da wir nur kubische Gitter betrachten, ist sogar nur der Abstand $|i - j|$ entscheidend für das Tunnelmatrixelement. Näheres wird weiter unten diskutiert. Außerdem sei auf das gewählte negative Vorzeichen hingewiesen. Als zweites definieren wir die *Wechselwirkungsstärke*:

$$U_{ijkl}^{(nmuv)} := g \int_V \mathbf{w}^{(n)*}(x - x_i^{(n)}) \mathbf{w}^{(m)*}(x - x_j^{(m)}) \mathbf{w}^{(u)}(x - x_k^{(u)}) \mathbf{w}^{(v)}(x - x_l^{(v)}) dx. \quad (4.10)$$

Als letztes führen wir einen Parameter ein, welcher die Eigenschaften des äußeren Fallenpotentials beschreibt:

$$\epsilon_{i,j}^{(n,m)} := \int_V \mathbf{w}^{(n)*}(x - x_i^{(n)}) \hat{V}_{\text{trap}}(x) \mathbf{w}^{(m)}(x - x_j^{(m)}) dx. \quad (4.11)$$

Ist das Fallenpotential über der Ausdehnung eines Gitterplatzes nahezu konstant, d. h. gilt $|\nabla \hat{V}_{\text{trap}}(x)| \ll |\hat{V}_{\text{trap}}(x)/a|$, mit der Gitterkonstante a , so liefert das Integral (4.11) nur einen Beitrag für $n = m$ und $i = j$. Sind nämlich die Gitterplätze i und j weit voneinander entfernt, so sorgt die starke Lokalisierung der WANNIER-Funktionen für ein Verschwinden des Integrals (4.11). Sind jedoch die Gitterplätze i und j nahe beisammen, so können wir das langsam variierende Fallenpotential als konstant ansehen und vor das Integral (4.11) ziehen. Die Orthonormalität (B.7) sorgt dann für das Verschwinden des Integrals für $n \neq m$ und $i \neq j$. Es gilt also:

$$\epsilon_{i,j}^{(n,m)} = \epsilon_i^{(n)} \delta_{n,m} \delta_{i,j}, \quad \text{mit} \quad \epsilon_i^{(n)} = \int_V \left| \mathbf{w}^{(n)*}(x - x_i^{(n)}) \right|^2 \hat{V}_{\text{trap}}(x) dx. \quad (4.12)$$

Mit den Definitionen (4.9), (4.10) und (4.12) nimmt der HAMILTON-Operator (4.8) folgende Form an:

$$\hat{H} = - \sum_{n,m} \sum_{i,j} \mathcal{J}_{i,j}^{(n,m)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} \sum_{\substack{i,j \\ u,v \\ k,l}} U_{ijkl}^{(nmuv)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)\dagger} \hat{a}_k^{(u)} \hat{a}_l^{(v)} + \sum_n \sum_i \epsilon_i^{(n)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_i^{(n)}. \quad (4.13)$$

Da in einem kubischen Gitter der Einteilchen HAMILTON-Operator separiert, d. h.: $\hat{h}(\mathbf{x}) = \hat{h}(x) + \hat{h}(y) + \hat{h}(z)$, separieren auch die WANNIER-Funktionen [HOFFMANN, 2007]:

$$\mathbf{w}^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \mathbf{w}^{(n)}(x - x_i) \mathbf{w}^{(n)}(y - y_i) \mathbf{w}^{(n)}(z - z_i). \quad (4.14)$$

Mit \mathbf{x} bezeichnen wir **nur** in der folgenden Diskussion bzgl. des Tunnelmatrixelementes Vektoren im \mathbb{R}^3 mit den Komponenten x , y und z . Die Aufspaltung (4.14) setzen wir in die Definition (4.9) des Tunnelmatrixelementes ein:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{i,j}^{(n,m)} &= - \int_V \mathbf{w}^{(n)*}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{h}(\mathbf{x}) \mathbf{w}^{(n)}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) d^3x & (4.15) \\ &= - \int \mathbf{w}^{(n)*}(x - x_i) \hat{h}(x) \mathbf{w}^{(m)}(x - x_j) dx \int \mathbf{w}^{(n)*}(y - y_i) \mathbf{w}^{(m)}(y - y_j) dy \int \mathbf{w}^{(n)*}(z - x_i) \mathbf{w}^{(m)}(z - z_j) dz \\ &\quad - \int \mathbf{w}^{(n)*}(x - x_i) \mathbf{w}^{(m)}(x - x_j) dx \int \mathbf{w}^{(n)*}(y - y_i) \hat{h}(y) \mathbf{w}^{(m)}(y - y_j) dy \int \mathbf{w}^{(n)*}(z - x_i) \mathbf{w}^{(m)}(z - z_j) dz \\ &\quad - \int \mathbf{w}^{(n)*}(x - x_i) \mathbf{w}^{(m)}(x - x_j) dx \int \mathbf{w}^{(n)*}(y - y_i) \mathbf{w}^{(m)}(y - y_j) dy \int \mathbf{w}^{(n)*}(z - x_i) \hat{h}(z) \mathbf{w}^{(m)}(z - z_j) dz. \end{aligned}$$

Wir sehen, dass dies auf Grund der Orthonormalität (B.7) nur dann ungleich Null ist, wenn sowohl die Bänder n und m identisch sind, als auch die Gitterpunkte \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j entlang nur einer Richtung des Gitters liegen. Wir wählen ohne Einschränkung die x -Richtung aus. Dann gilt: $x_i \neq x_j$, $y_i = y_j$ und $z_i = z_j$. Sei nun $|i - j|$ der Abstand der Gitterpunkte \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j , dann gilt für das Tunnelmatrixelement gemäß Gleichung (4.15):

$$\mathcal{J}_{i,j}^{(n,m)} = \mathcal{J}_{|i-j|}^{(n)} \delta_{n,m} = -\delta_{n,m} \int \mathbf{w}^{(n)*}(x - x_{i+|i-j|}) \hat{h}(x) \mathbf{w}^{(n)}(x - x_i^{(n)}) dx. \quad (4.16)$$

Da dieser Ausdruck außerdem translationsinvariant ist, hängt das Tunnelmatrixelement schließlich nur noch vom Abstand $a|i - j|$ der Punkte \mathbf{x}_i und \mathbf{x}_j ab:

$$\mathcal{J}_{i,j}^{(n,m)} = \mathcal{J}_{|i-j|}^{(n)} \delta_{n,m} = -\delta_{n,m} \int \mathbf{w}^{(n)*}(x - a|i - j|) \hat{h}(x) \mathbf{w}^{(n)}(x) dx. \quad (4.17)$$

Das Tunnelmatrixelement (4.17) lässt sich noch weiter vereinfachen, wenn man die WANNIER-Funktionen durch BLOCH-Funktionen $\varphi_q^{(n)}(x)$ darstellt. Die Umrechnung findet man in Formel (B.6) im Anhang B. Es gilt:

$$\mathcal{J}_{|i-j|}^{(n)} = - \int \mathbf{w}^{(n)*}(x - a|i - j|) \hat{h}(x) \mathbf{w}^{(n)}(x) dx \quad (4.18)$$

$$= - \frac{1}{N_x} \sum_{q,p} e^{iqa|i-j|} \int \varphi_q^{(n)*}(x) \underbrace{\hat{h}(x) \varphi_p^{(n)}(x)}_{=\varepsilon_p^{(n)} \varphi_p^{(n)}(x)} dx. \quad (4.19)$$

Hier ist N_x die Anzahl der Gitterplätze entlang der x -Richtung des Gitters und $\varepsilon_p^{(n)}$ sind die BLOCH-Energien. Nun bilden auch die BLOCH-Funktionen gemäß der Gleichung (B.4) ein orthonormales Funktionensystem, womit das Integral nur für $q = p$ endlich bleibt. Wir erhalten dann:

$$\mathcal{J}_{|i-j|}^{(n)} = - \frac{1}{N_x} \sum_q e^{iqa|i-j|} \varepsilon_q^{(n)}. \quad (4.20)$$

Wir sehen, dass $\mathcal{J}_{|i-j|}^{(n)}$ der $|i - j|$ -te FOURIER-Koeffizient von $-\varepsilon_q^{(n)}$ bzgl. $e^{-iqa|i-j|}$ ist. Diesen Zusammenhang werden wir für die numerische Berechnung des Tunnelmatrixelementes heranziehen. Fassen wir unsere Ergebnisse bzgl. des Tunnelmatrixelementes (4.9) zusammen: Das

Tunnelmatrixelement ist nur innerhalb eines Bandes und nur für Gitterpunkte entlang einer Richtung des Gitters ungleich Null. Es gilt:

$$J_{i,j}^{(n,m)} = \delta_{n,m} J_{|i-j|}^{(n)} = -\delta_{n,m} \int w^{(n)*}(x-a|i-j|) \hat{h}(x) w^{(n)}(x) dx = -\delta_{n,m} \frac{1}{N_x} \sum_q e^{iqa|i-j|} \epsilon_q^{(n)}. \quad (4.21)$$

Bevor wir den HAMILTON-Operator mit diesen Erkenntnissen über das Tunnelmatrixelement angeben, betrachten wir das Tunnelmatrixelement $J_0^{(n)}$. Dieses ist eine endliche für jedes Band unterschiedliche Konstante, die unabhängig vom Gitterplatz ist. Im Hamiltonian führt dies zu einen Term der Form $\sum_n \sum_i J_0^{(n)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_i^{(n)} = \sum_n J_0^{(n)} \hat{N}^{(n)}$, wobei $\hat{N}^{(n)}$ der Operator der Gesamtteilchenzahl des n -ten Bandes ist, d. h. $\hat{N}^{(n)} = \sum_i \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_i^{(n)}$.

Fügen wir unsere Erkenntnisse über das Tunnelmatrixelement gemäß Gleichung (4.21) in den HAMILTON-Operator (4.13) ein, so erhalten wir für den allgemeinen BOSE-HUBBARD-Hamiltonian:

$$\hat{H} = -\sum_n \sum_{|i-j|>0} J_{|i-j|}^{(n)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(n)} + \frac{1}{2} \sum_{n,m} \sum_{\substack{i,j \\ u,v}} U_{ijkl}^{(nmuv)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)\dagger} \hat{a}_k^{(u)} \hat{a}_l^{(v)} + \sum_n \sum_i \epsilon_i^{(n)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_i^{(n)} + \sum_n J_0^{(n)} \hat{N}^{(n)}. \quad (4.22)$$

4.1.2 Das Ein-Band BOSE-HUBBARD-Modell

Nun kommen wir zu dem für die ultrakalten Quantengase in optischen Gittern wichtigen Ein-Band BOSE-HUBBARD-Hamiltonian. Dieser ist eine Vereinfachung von (4.22). Wir spezialisieren uns auf ein einfaches Gitterpotential der Form:

$$V_{\text{lat}}(x) = V_0 \sum_{i=1}^3 \sin^2(k_0 x_i), \quad (4.23)$$

mit der Gittertiefe V_0 und dem Gittervektor $k_0 = \pi/a$.

Des Weiteren nehmen wir an, dass die Temperatur T und die Wechselwirkungsenergien viel kleiner sind als der Abstand der untersten beiden Bänder. Dann können wir uns im Hamiltonian (4.22) auf das untere Band $n = 0$ beschränken und erhalten einen Hamiltonian der Form:

$$\hat{H} = -\sum_{|i-j|} J_{|i-j|} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ k,l}} U_{ijkl} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_l + \sum_i \epsilon_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + J_0 \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i. \quad (4.24)$$

Hier sind $J_{|i-j|} = J_{|i-j|}^{(0)}$, $U_{ijkl} = U_{ijkl}^{(0000)}$, $\epsilon_i = \epsilon_i^{(0)}$ und $J_0 = J_0^{(0)}$ die Parameter des HAMILTON-Operators (4.22) für das unterste Band $n = 0$. Die Leiteroperatoren beziehen sich ausschließlich auf das unterste Band, d. h. $\hat{a}_i := \hat{a}_i^{(0)}$. Der letzte Term proportional zu J_0 spielt keine Rolle, da dieser gleich dem Teilchenzahloperator $\hat{N} = \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ ist und damit letztendlich nur eine Energieschiebung im Spektrum bewirkt. Im Folgenden werden wir diesen Term vernachlässigen.

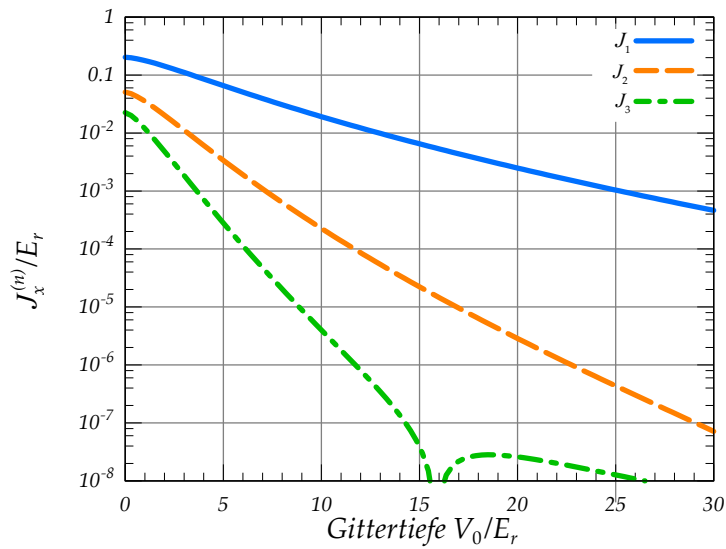


Abbildung 4.1: Numerische Berechnung der Tunnelmatrixelemente (4.21) $J_1 = J_1^{(0)}$, $J_2 = J_2^{(0)}$ und $J_3 = J_3^{(0)}$ in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 .

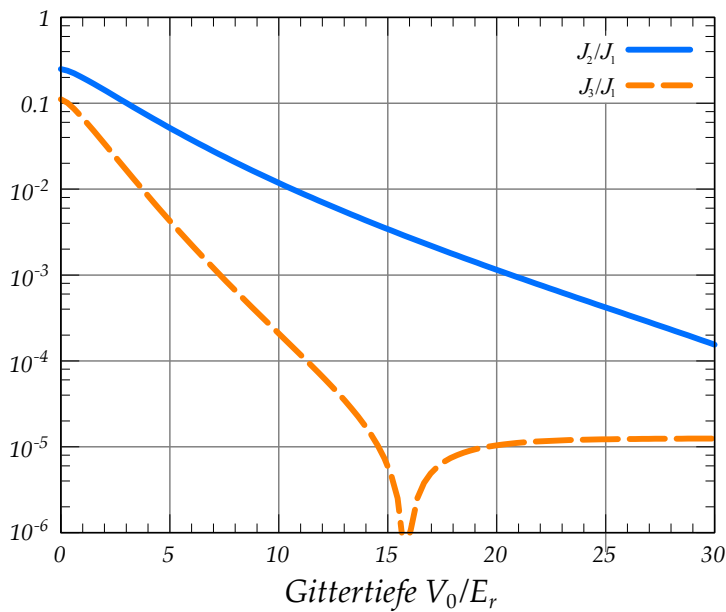


Abbildung 4.2: Vergleich der numerisch berechneten Tunnelmatrixelemente (4.21) $J_2^{(0)} = J_2$ und $J_3^{(0)} = J_3$ zu $J_1^{(0)} = J_1$ in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 .

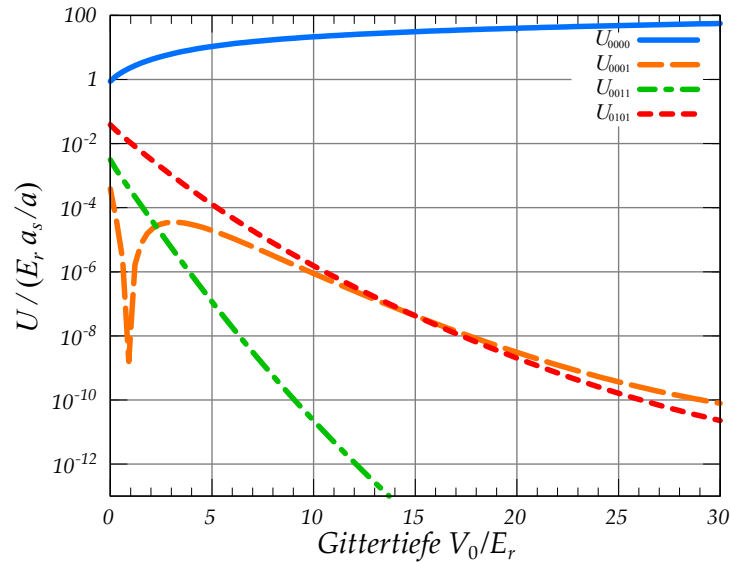


Abbildung 4.3: Numerische Berechnung der Wechselwirkungsstärken (4.10) $U_{0000} = U_{0000}^{(0000)}$, $U_{0001} = U_{0001}^{(0000)}$, $U_{0011} = U_{0011}^{(0000)}$ und $U_{0101} = U_{0101}^{(0000)}$ in drei Raumdimensionen. Alle Größen sind in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 aufgetragen. Die Wechselwirkungsstärke skaliert mit dem Quotienten a_s/a , bestehend aus der s -Wellen Streulänge a_s und der Gitterkonstanten a . Der Einbruch von U_{0001} bei $V_0 = 1E_r$ kommt durch einen Vorzeichenwechsel zustande. Gezeichnet wurde auf Grund der logarithmischen Skala für U_{0001} nur der Betrag. Alle anderen Parameter sind rein positiv.

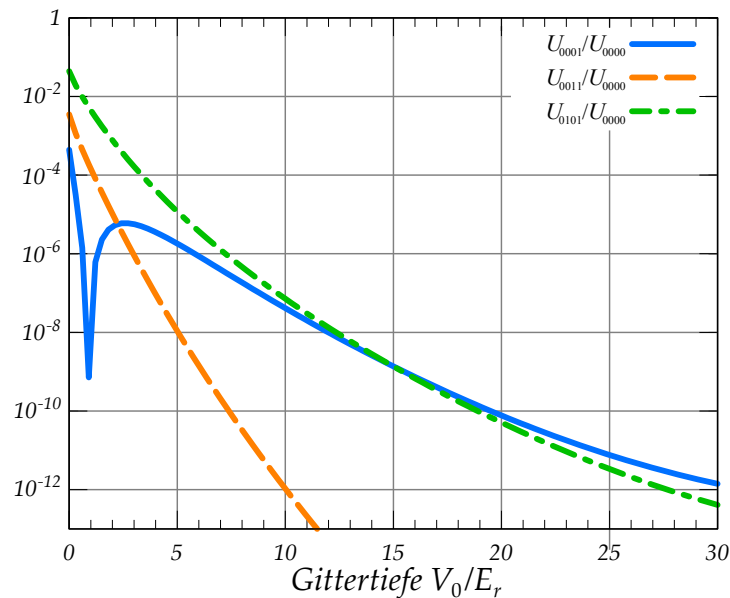


Abbildung 4.4: Numerische Berechnung der Verhältnisse der Wechselwirkungsstärken $U_{0001} = U_{0001}^{(0000)}$, $U_{0011} = U_{0011}^{(0000)}$ und $U_{0101} = U_{0101}^{(0000)}$ zu $U_{0000} = U_{0000}^{(0000)}$ in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 und für drei Raumdimensionen. Bezüglich des Einbruchs der Kurve U_{0001}/U_{0000} siehe die Bildunterschrift zur Abbildung 4.3.

Wir haben die einzelnen Parameter des Hamiltonian (4.24) numerisch berechnet. Die numerische Vorgehensweise wird im Anhang C erläutert. Diese numerischen Ergebnisse werden wir im Folgenden benutzen, um zu zeigen, dass einige Parameter des Hamiltonian (4.24) vernachlässigbar sind. Wir beginnen mit den Tunnelmatrixelementen.

Abbildung 4.1 zeigt die Abhängigkeit der Tunnelmatrixelemente $J_\ell = J_\ell^{(0)}$ von der Gittertiefe V_0 . Außerdem ist in der Abbildung 4.2 das Verhältnis der Tunnelmatrixelemente J_2, J_3 zweiter und dritter Ordnung zu dem Tunnelmatrixelement J_1 erster Ordnung dargestellt. Man sieht, dass für Gittertiefen von $V_0 > 3E_r$ das erste Tunnelmatrixelement J_1 mehr als eine Größenordnung größer ist, als die Tunnelmatrixelemente J_2 und J_3 . Diese beiden können wir daher im Weiteren vernachlässigen. Die Größe E_r heißt *recoil-Energie* oder kurz das *recoil* und ist die bestimmende Energieskala für Bosonen in optischen Gittern. Ein recoil ist definiert durch:

$$E_r := \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} = \frac{\hbar^2 (\pi/a)^2}{2m}. \quad (4.25)$$

Für das oft benutzte ^{87}Rb und einer Gitterkonstanten von $a = 425 \text{ nm}$ ist das recoil $E_r = 8.42 \cdot 10^{-30} \text{ J} = 525 \cdot 10^{-9} \text{ eV} = 12.7 \text{ kHz} = 42.4 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^{-1} = 609 \text{ nK}$.

Für die Wechselwirkungsstärke des unteren Bandes $U_{ijkl} = g \int_V w_i^*(x) w_j^*(x) w_k(x) w_l(x) dx$ betrachten wir zunächst nur die Fälle, bei welchen die Gitterplätze i, j, k, l gleich oder höchstens einen Gitterplatz voneinander entfernt sind. Da wir ein homogenes System annehmen, genügt es, den *nullten* Gitterplatz zu betrachten. Dann gibt es vier verschiedene Wechselwirkungsstärken: $U_{0000}, U_{0001}, U_{0011}$ und U_{0101} . Die restlichen sind entweder exakt gleich wie bei $U_{0010} = U_{0001}$, oder gehen durch komplexe Konjugation wie bei $U_{0100} = U_{0001}^*$ aus diesen vier hervor. Man betrachte dazu die Definition (4.10) der Wechselwirkungsstärke für das untere Band $n = m = u = v = 0$. Die numerisch berechneten vier Wechselwirkungsstärken sind in Abbildung 4.3 dargestellt. Bezüglich der Skalierung der Wechselwirkungsstärken mit dem Faktor a_s/a siehe die Formel (C.22) auf Seite 133 im Anhang C. In Abbildung 4.3 sieht man bereits deutlich, dass die Wechselwirkungsstärke U_{0000} für alle Gittertiefen V_0 mehr als eine Größenordnung größer ist, als die restlichen Wechselwirkungsstärken U_{0001}, U_{0011} und U_{0101} . Das Verhältnis der letzten drei zu der dominierenden Wechselwirkungsstärke U_{0000} wird in Abbildung 4.4 gezeigt. Die Ursache für diesen starken Abfall der drei Wechselwirkungsstärken liegt darin, dass diese WANNIER-Funktionen verschiedener Gitterplätze enthalten. Die immer stärker werdende Lokalisierung der WANNIER-Funktionen mit größer werdender Gittertiefe V_0 sorgt dann für ein Verschwinden der Integrale in U_{0001}, U_{0011} und U_{0101} . Damit ist klar, dass wir alle sich nicht nur auf einen Gitterplatz beziehenden Wechselwirkungsstärken vernachlässigen können.

Mit diesen Erkenntnissen über die Tunnelmatrixelemente und die Wechselwirkungsstärken wird aus dem Hamiltonian (4.24):

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + \sum_i \epsilon_i \hat{n}_i. \quad (4.26)$$

Dieser HAMILTON-Operator wird als BOSE–HUBBARD-Hamiltonian bezeichnet. Die Bezeichnung $\langle i, j \rangle = |i - j| = 1$ in der ersten Summe bedeutet, dass über alle direkt benachbarten Gitterplätze summiert wird. Die Parameter sind gegeben durch:

$$J = - \int_V \mathbf{w}^*(x-a) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{lat}}(x) \right] \mathbf{w}(x) dx, \quad (4.27)$$

$$U = g \int_V |\mathbf{w}(x)|^4 dx, \quad (4.28)$$

$$\epsilon_i = \int_V |\mathbf{w}(x-x_i)|^2 V_{\text{trap}}(x) dx. \quad (4.29)$$

Das Tunnelmatrixelement J ist ein Maß für die Tunnelrate der Bosonen zwischen benachbarten Gitterplätzen. Die Wechselwirkungsstärke U gibt die Wechselwirkung der Bosonen auf einem Gitterplatz an. Sowohl J als auch U hängen nicht vom Gitterplatz ab, da wir ein Gitter ohne jegliche Störstellen voraussetzen. Der Einfluss des äußeren Fallenpotentials geht über den Parameters ϵ_i ein. Dieser hängt sehr wohl vom Gitterplatz ab, da das Fallenpotential nicht gitterperiodisch ist.

Unser eigentliches Modell besteht allerdings aus einem Zwei-Band BOSE–HUBBARD-Hamiltonian. Daher werden wir im nächsten Abschnitt den Hamiltonian (4.22) auf den Spezialfall von zwei Bändern bringen.

4.1.3 Das Zwei-Band BOSE–HUBBARD-Modell

Wir betrachten den HAMILTON-Operator (4.22) für den Fall zweier Bänder, d. h. $n = 0$ oder $n = 1$. Nun verwenden wir im Gegensatz zum letzten Abschnitt ein optisches Gitter, dem zusätzlich ein Untergitter mit der halben Periodenlänge überlagert ist:

$$V_{\text{lat}}(x) = V_0 \sum_{i=1}^3 \sin^2(k_0 x_i) + \frac{1}{4} V_1 \sum_{i=1}^3 \sin^2(2k_0 x_i). \quad (4.30)$$

Für die Tiefe des Untergitters gilt: $V_1 > V_0$. Das Gitter entlang einer Raumdimension ist in Abbildung 4.5 dargestellt. Man sieht in der Abbildung, dass zu den ursprünglichen Gitterplätzen bei Vielfachen der Gitterkonstanten a noch Untergitterplätze genau zwischen zwei ur-

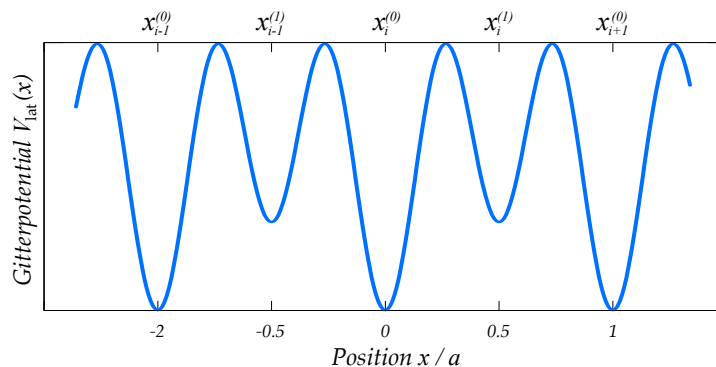


Abbildung 4.5: Potential des optischen Gitters gemäß Gleichung (4.30) mit $V_1 = 10V_0$ entlang einer Raumdimension.

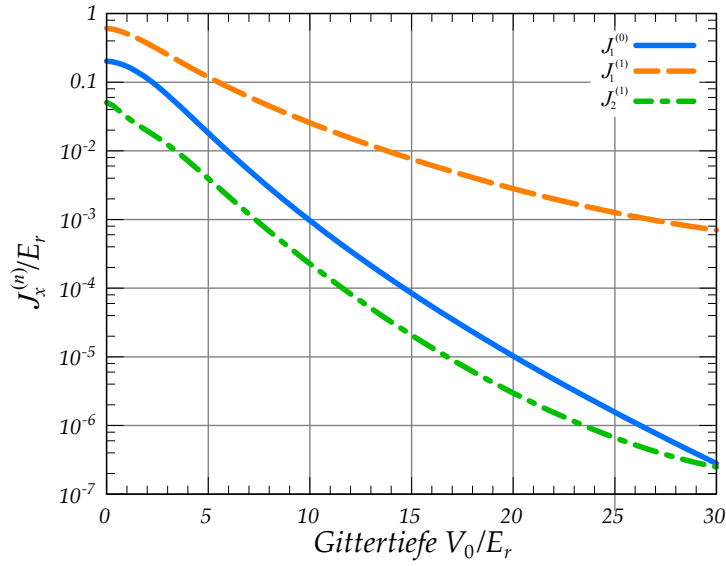


Abbildung 4.6: Numerische Berechnung des Tunnelmatrixelemente (4.21) $J_1^{(0)}$, $J_1^{(1)}$ und $J_2^{(1)}$ in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 für das System mit einem Untergitter gemäß Gleichung (4.30).

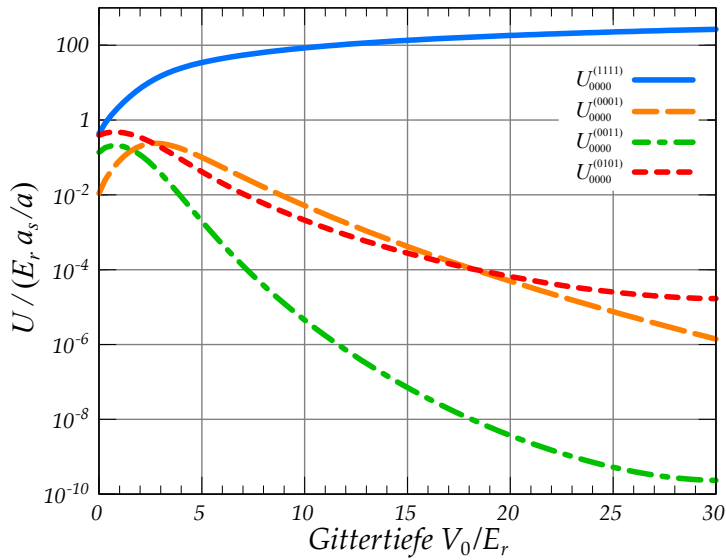


Abbildung 4.7: Numerische Berechnung der Wechselwirkungsstärken (4.10) $U_{0000}^{(1111)}$, $U_{0000}^{(0001)}$, $U_{0000}^{(0011)}$ und $U_{0000}^{(0101)}$ in drei Raumdimensionen. Alle Größen sind in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 in einem System mit einem Untergitter gemäß Gleichung (4.30) aufgetragen. Die Wechselwirkungsstärke skaliert mit dem Quotienten a_s/a , bestehend aus der s -Wellen Streulänge a_s und der Gitterkonstanten a .

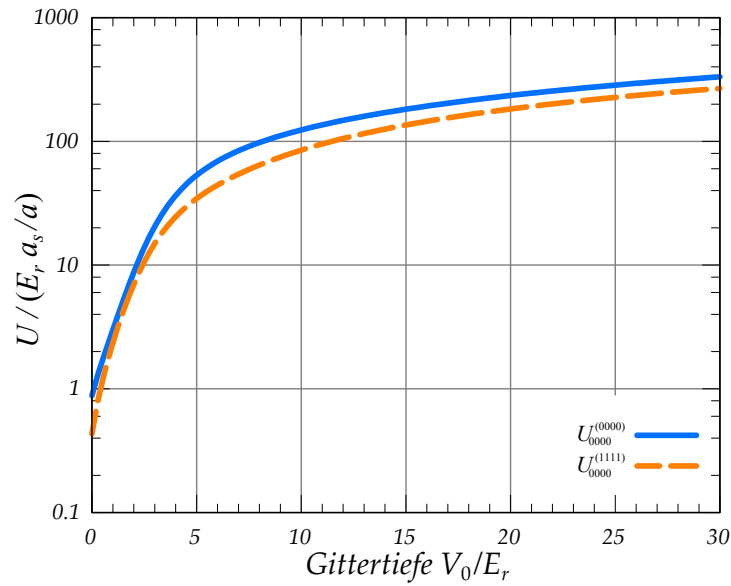


Abbildung 4.8: Numerische Berechnung der Wechselwirkungsstärken (4.10) $U_{0000}^{(1111)}$ und $U_{0000}^{(0000)}$ in drei Raumdimensionen. Alle Größen sind in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 in einem System mit einem Untergitter gemäß Gleichung (4.30) aufgetragen. Die Wechselwirkungsstärke skaliert mit dem Quotienten a_s/a , bestehend aus der s -Wellen Streulänge a_s und der Gitterkonstanten a .

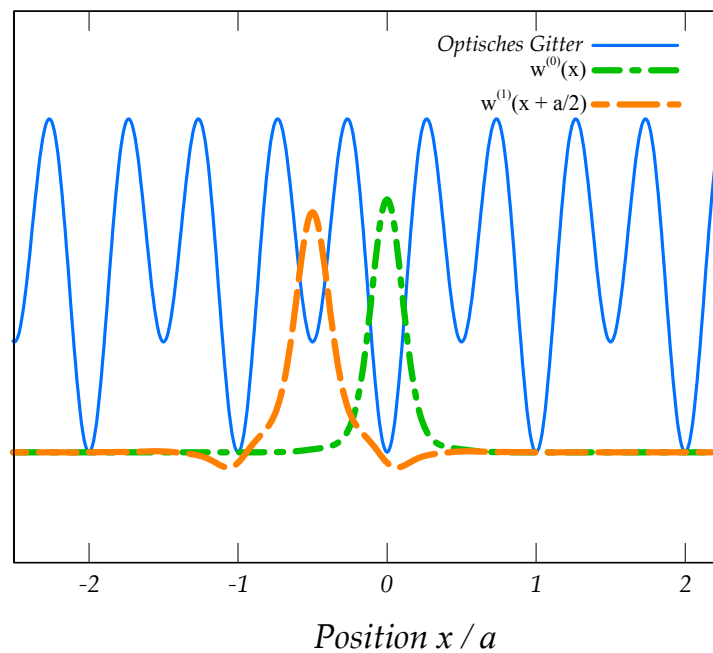


Abbildung 4.9: Gezeigt sind die WANNIER-Funktionen $w^{(0)}(x)$ und $w^{(1)}(x+a/2)$ des unteren und des oberen Bandes. Die WANNIER-Funktion $w^{(1)}(x+a/2)$ ist auf dem Zwischen-gitterplatz bei $x = -a/2$ lokalisiert.

sprünglichen Gitterplätzen hinzukommen. Einer Richtung des Gitters gilt: $x_{i+1}^{(n)} = x_i^{(n)} + a$ und $x_i^{(1)} = x_i^{(0)} + a/2$, wobei $x_i^{(0)}$ die Positionen der ursprünglichen Gitterplätze und $x_i^{(1)}$ die Positionen der Untergitterplätze bestimmen.

Natürlich kann man auch mit einem einfachen Gitter wie im vorherigen Abschnitt ein Zwei-Band BOSE–HUBBARD-Modell realisieren. Dies führt allerdings letzten Endes nicht auf die Form der Quantensprung-Operatoren, auf die wir aus sind [DIEHL ET AL., 2008].

Auch im Zwei-Band-Problem ist eine numerische Berechnung der Tunnelmatrixelemente und der Wechselwirkungsstärken nötig, um beurteilen zu können, welche Terme in dem HAMILTON-Operator (4.22) dominieren und welche vernachlässigt werden können. Für die folgenden Ergebnisse haben wir die Gittertiefe des Untergitters zu $V_1 = 10V_0$ gewählt.

Wir betrachten zuerst die Tunnelmatrixelemente $J_\ell^{(n)}$. Wie im Fall nur eines Bandes können wir auch hier die Tunnelmatrixelemente $J_2^{(0)}$, $J_3^{(0)}$ und höher des unteren Bandes vernachlässigen. In Abbildung 4.6 sind die Tunnelmatrixelemente $J_1^{(1)}$ und $J_2^{(1)}$ des oberen Bandes im Vergleich zu $J_1^{(0)}$ für das untere Band aufgetragen. Man sieht, dass $J_1^{(1)}$ für tiefer werdende Gitter über die zwei anderen Tunnelmatrixelemente dominiert. Das Tunnelmatrixelement des unteren Bandes $J_1^{(0)}$ ist jedoch für alle Gittertiefen V_0 ungefähr eine halbe Größenordnung größer als das Tunnelmatrixelement $J_2^{(1)}$ zweiter Ordnung des oberen Bandes. Wir werden daher Letzteres vernachlässigen und nur die Tunnelmatrixelemente $J_1^{(0)}$ und $J_1^{(1)}$ erster Ordnung betrachten.

Die Tunnelmatrixelemente des Ein- und des Zwei-Band-Modells zeigen qualitativ den gleichen Verlauf, lassen sich auf Grund der unterschiedlichen Gittertiefe jedoch nicht quantitativ vergleichen. Ein Vergleich der Abbildungen 4.1 und 4.6 zeigt, dass die vergleichbaren Größen J_1 aus dem Ein-Band-Modell und $J_1^{(0)}$ aus dem Zwei-Band-Modell sich um eine Größenordnung unterscheiden. Dies erklärt sich durch das tiefere Gitter im Zwei-Band-Modell, wodurch das quantenmechanische Tunneln zwischen benachbarten Gitterplätzen im Zwei-Band-Modell unterdrückt wird. Anders sieht es für das Tunnelmatrixelement $J_1^{(1)}$ aus. Die Tunnel-Barriere im Untergitter ist geringer, wodurch ein um mehrere Größenordnungen größeres Tunnelmatrixelement $J_1^{(1)}$ im Vergleich zu $J_1^{(0)}$ resultiert.

Wenden wir uns nun dem Verhalten der Wechselwirkungsstärke $U_{ijkl}^{(nmuv)}$ zu. Zunächst können wir, wie im Falle nur eines Bandes, diejenigen Wechselwirkungsstärken vernachlässigen, welche unterschiedliche Gitterplätze enthalten. Wir beschränken uns daher auf Wechselwirkungsstärken der Form $U_{0000}^{(nmuv)}$ mit $n, m, u, v = 0, 1$. Von diesen gibt es eine große Anzahl von Kombinationen, wobei auch hier wieder viele gleich oder komplex konjugiert zueinander sind. Unabhängig voneinander sind nur die Wechselwirkungsstärken $U_{0000}^{(0001)}$, $U_{0000}^{(0011)}$, $U_{0000}^{(0101)}$ und $U_{0000}^{(1111)}$. Die Abhängigkeit dieser vier Koeffizienten von der Gittertiefe zeigt die Abbildung 4.7. Man sieht, dass die Wechselwirkungsstärke $U_{0000}^{(1111)}$ für $V_0 > 1E_r$ alle anderen Wechselwirkungsstärken dominiert. Wir werden daher nur die Wechselwirkungsstärken $U_{0000}^{(1111)}$ und $U_{0000}^{(0000)}$ behalten. Das Verhalten beider ist in Abbildung 4.7 dargestellt und man erkennt, dass beide von der gleichen Größenordnung sind, wobei $U_{0000}^{(0000)}$ ein wenig größer ist als $U_{0000}^{(1111)}$.

Fassen wir unsere Ergebnisse aus den numerischen Berechnungen zusammen, so erhalten wir für ein System mit Untergitter gemäß Gleichung (4.30) explizit folgenden Zwei-Band BOSE–HUBBARD-Hamiltonian:

$$\hat{H} = -J^{(0)} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} - J^{(1)} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(1)} + \frac{1}{2} U^{(0)} \sum_i \hat{n}_i^{(0)} (\hat{n}_i^{(0)} - 1) + \frac{1}{2} U^{(1)} \sum_i \hat{n}_i^{(1)} (\hat{n}_i^{(1)} - 1). \quad (4.31)$$

Zu beachten ist, dass die Gitterplätze, die in der ersten und in der dritten Summe auftauchen, andere sind, als die in der zweiten und vierten Summe. Im letzten Fall handelt es sich um die Gitterplätze des Untergitters, welche im Vergleich zu den eigentlichen Gitterplätzen um $a/2$ versetzt sind. Dies erkennt man, wenn man die zu den Operatoren $\hat{a}_i^{(1)}$ gehörende WANNIER-Funktion $w^{(1)}(x - x_i^{(1)})$ untersucht. Man vergleiche dazu die Abbildung 4.9. Die WANNIER-Funktionen des unteren Bandes $w^{(0)}(x - x_i^{(0)})$ sind wie im einfachen Gitter an den Minima bei Vielfachen der Gitterkonstante a lokalisiert, wohingegen die WANNIER-Funktionen $w^{(1)}(x - x_j^{(1)})$ des oberen Bandes an den Minima des Untergitters bei $x_j^{(1)} = a(j + 1/2)$ mit ganzen Zahlen j lokalisiert sind.

4.2 Der kohärente Antrieb

Ein essentieller Bestandteil des Modells besteht darin, die Bosonen vom unteren in das obere Band des Gitters anzuregen. Hierfür wird zusätzlich zu den Lasern, welche das optische Gitter erzeugen, ein RAMAN-Laser hinzugenommen. Dessen Wellenlänge ist gerade doppelt so groß wie die Wellenlänge des optischen Gitters. Dadurch hat – wie wir am Ende sehen werden – die effektive RABI-Frequenz an benachbarten Gitterplätzen ein umgekehrtes Vorzeichen. Wir beschränken uns im Folgenden auf die Betrachtung entlang einer Gitterdimension.

Die Wechselwirkung des RAMAN-Lasers mit den Gitter-Bosonen wird in der Dipolnäherung dargestellt durch:

$$\hat{H}_{\text{AL}}(t) = \int_V \hat{\psi}^\dagger(x) \left[-\hat{d} \cdot \mathcal{E}(x, t) \right] \hat{\psi}(x) dx. \quad (4.32)$$

Hier ist \hat{d} der Dipoloperator, welcher hier als eine komplexe Zahl d angenommen werden kann, da die Ausdehnung des bosonischen Atoms klein gegenüber der Wellenlänge des RAMAN-Lasers ist. Das elektrische Feld \mathcal{E} ist durch eine stehende Welle gegeben:

$$\mathcal{E}(x, t) = \mathcal{E}_0 \epsilon \cos(k_0 x) \cos(\omega t). \quad (4.33)$$

Dabei ist \mathcal{E}_0 die elektrische Feldstärke, ϵ der Polarisationsvektor des Lasers, $k_0 = \pi/a$ der Gittervektor, wie er zuvor bereits in Gleichung (4.23) eingeführt wurde und ω ist die Frequenz des RAMAN-Lasers. Des Weiteren definieren wir die sogenannte RABI-Frequenz:

$$\hbar\Omega := \mathcal{E}_0 \epsilon \cdot d. \quad (4.34)$$

Zerlegen wir die Feldoperatoren in WANNIER-Funktionen gemäß der Formel (B.13), so gilt für die Atom-Laser-Wechselwirkung:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{AL}} &= -\hbar\Omega \cos(\omega t) \sum_{i,j} \sum_{n,m=0}^1 \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)} \int_V w^{(n)*}(x - x_i^{(n)}) w^{(m)}(x - x_j^{(m)}) \cos k_0 x dx \\ &=: -\hbar\Omega \cos(\omega t) \sum_{i,j} \sum_{n,m=0}^1 \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)} f_{i,j}^{(n,m)}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Hier haben wir abkürzend für das Überlappintegral der WANNIER-Funktionen mit dem Kosinus einen FRANCK–CONDON-Faktor $f_{i,j}^{(n,m)}$ eingeführt.

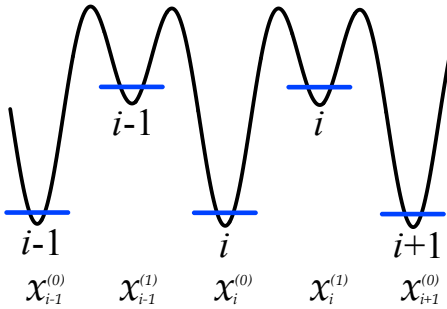


Abbildung 4.10:

Die vier nächsten Nachbarn des Gitterplatzes i .

Da die WANNIER-Funktionen $w^{(n)}(x - x_i^{(n)})$ stark auf dem i -ten Gitterplatz lokalisiert sind und der Kosinus nur von der Ordnung Eins ist, genügt es, wenn wir nur direkt benachbarte Gitterplätze betrachten. Dabei ist zu beachten, dass der Gitterplatz i in diesem Modell vier nächste Nachbarn besitzt: Zwei davon befinden sich im unteren Band an den Stellen $i + 1$ und $i - 1$ (d. h. bei $x_{i+1}^{(0)}$ und $x_{i-1}^{(0)}$) und die anderen beiden im oberen Band bei den Zwischengitterplätzen $i - 1$ und i (d. h. bei $x_{i-1}^{(1)}$ und $x_i^{(1)}$). Man betrachte dazu die Abbildung 4.10.

Mit diesen Überlegungen ergibt sich für den Hamilton-Operator (4.35):

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{AL}} &= -\hbar\Omega \cos(\omega t) \left\{ \sum_{(i,j)} \sum_{n=0}^1 f_{i,j}^{(n,n)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(n)} + \sum_i \left(f_{i,i+1}^{(1,0)} \hat{a}_i^{(1)\dagger} \hat{a}_{i+1}^{(0)} + f_{i,i}^{(1,0)} \hat{a}_i^{(1)\dagger} \hat{a}_i^{(0)} + \text{h.c.} \right) \right\} \\ &= -\hbar\Omega \cos(\omega t) \left\{ \sum_{(i,j)} \sum_{n=0}^1 f_{i,j}^{(n,n)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(n)} + \sum_i \left[\hat{a}_i^{(1)\dagger} \left(f_{i,i+1}^{(1,0)} \hat{a}_{i+1}^{(0)} + f_{i,i}^{(1,0)} \hat{a}_i^{(0)} \right) + \text{h.c.} \right] \right\} \quad (4.36) \end{aligned}$$

Wir haben hier die hermitesch konjugierten Term nicht ausgeschrieben, sondern mit +h.c. abgekürzt.

Zur weiteren Auswertung müssen wir die hier auftretenden FRANCK–CONDON-Faktoren berechnen. Die Gitterpunkte des Gitters und des Untergitters entlang einer Richtung des Gitters liegen bei:

$$x_i^{(0)} = ia, \quad \text{bzw.} \quad x_i^{(1)} = (i + 1/2)a, \quad (4.37)$$

mit ganzen Zahlen i . Außerdem seien in diesem Abschnitt die WANNIER-Funktionen reell (siehe dazu Abschnitt 4.1.2).

Beginnen wir mit der Berechnung der Anregung benachbarter Gitterplätze im unteren Band:

$$f_{i,i+1}^{(0,0)} = \int_{\mathbb{V}} w^{(0)}(x - x_i^{(0)}) w^{(0)}(x - x_{i+1}^{(0)}) \cos(k_0 x) dx. \quad (4.38)$$

Nun verschieben wir die Integrationsvariable um $x_i^{(0)} + a/2 = a(i + 1/2)$:

$$\begin{aligned} f_{i,i+1}^{(0,0)} &= \int_{\mathbb{V}} w^{(0)}(x + a/2) w^{(0)}(x - a/2) \underbrace{\cos[k_0(x + a(i + 1/2))]}_{\cos(k_0 x) \cos[\pi(i + 1/2)] - \sin(k_0 x) \sin[\pi(i + 1/2)]} dx \\ &= (-1)^{i+1} \int_{\mathbb{V}} w^{(0)}(x + a/2) w^{(0)}(x - a/2) \sin(k_0 x) dx. \quad (4.39) \end{aligned}$$

Da die WANNIER-Funktionen symmetrisch um Null sind, gilt:

$$w^{(0)}(x+a/2)w^{(0)}(x-a/2) = w^{(0)}(-x-a/2)w^{(0)}(-x+a/2). \quad (4.40)$$

Spiegeln wir um $x = 0$, so erhalten wir

$$w^{(0)}(x-a/2)w^{(0)}(x+a/2) = w^{(0)}(x+a/2)w^{(0)}(x-a/2) \quad (4.41)$$

und damit das ursprüngliche Produkt zurück. Das heißt, dass unter dem Integral auftretende Produkt der WANNIER-Funktionen ist symmetrisch um $x = 0$. Hingegen ist der Sinus antisymmetrisch um $x = 0$. Damit verschwindet das Integral und dieser FRANCK-CONDON-Faktor ist Null. Entsprechendes gilt für $f_{i,i-1}^{(0,0)}$. Zusammen haben wir damit:

$$f_{i,i+1}^{(0,0)} = 0 = f_{i,i-1}^{(0,0)}. \quad (4.42)$$

Wir wollen nun die entsprechenden FRANCK-CONDON-Faktoren für das obere Band berechnen:

$$f_{i,i+1}^{(1,1)} = \int_V w^{(1)}(x-x_i^{(1)})w^{(1)}(x-x_{i+1}^{(1)}) \cos(k_0x) dx. \quad (4.43)$$

Auch hier verschieben wir die Integrationsvariable. In diesem Fall um $x_i^{(1)} + a/2 = a(i+1)$:

$$f_{i,i+1}^{(1,1)} = (-1)^{i+1} \int_V w^{(1)}(x+a/2)w^{(1)}(x-a/2) \cos(k_0x) dx. \quad (4.44)$$

Hier erscheint ein Kosinus. Damit ist diesmal der gesamte Integrand symmetrisch um $x = 0$ und verschwindet zumindest nicht aus Paritätsgründen. Wir setzen abkürzend:

$$f_{i,i+1}^{(1,1)} = (-1)^{i+1} f^{(1)}, \text{ mit } \boxed{f^{(1)} := \int_V w^{(1)}(x+a/2)w^{(1)}(x-a/2) \cos(k_0x) dx.} \quad (4.45)$$

Nun benötigen wir noch die Anregungen zwischen unterschiedlichen Bändern. Hier berechnen wir zunächst:

$$f_{i,i}^{(1,0)} = \int_V w^{(1)}(x-x_i^{(1)})w^{(0)}(x-x_i^{(0)}) \cos(k_0x) dx. \quad (4.46)$$

Hier verschieben wir die Integrationsvariable um $x_i^{(0)} = ia$. Aus dem Integral wird dann:

$$f_{i,i}^{(1,0)} = (-1)^i f, \quad (4.47)$$

mit

$$\boxed{f = \int_V w^{(1)}(x-a/2)w^{(0)}(x) \cos(k_0x) dx.} \quad (4.48)$$

Als letztes berechnen wir den FRANCK-CONDON-Faktor $f_{i,i+1}^{(1,0)}$. Hier gehen wir analog wie oben vor und erhalten:

$$\begin{aligned}
 f_{i,i+1}^{(1,0)} &= \int_V w^{(1)}(x - x_i^{(1)}) w^{(0)}(x - x_{i+1}^{(0)}) \cos(k_0 x) dx \\
 &= (-1)^{i+1} \int_V w^{(1)}(x + a/2) w^{(0)}(x) \cos(k_0 x) dx
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

$$= -(-1)^i \int_V w^{(1)}(x - a/2) w^{(0)}(x) \cos(k_0 x) dx \tag{4.50}$$

$$= -(-1)^i f, \tag{4.51}$$

mit dem selben f wie in Gleichung (4.48).

Für die explizite Berechnung der FRANCK–CONDON-Faktoren müssen wir die numerisch bestimmten WANNIER-Funktionen heranziehen. Dies haben wir mit dem Gitterpotential (4.30) und einer Gittertiefe von $V_1 = 10 V_0$ getan. Die FRANCK–CONDON-Faktoren f und $f^{(1)}$ sind der Abbildung 4.11 zu entnehmen. In Abbildung 4.12 ist das Verhältnis beider Faktoren gezeichnet und man kann hieraus ablesen, dass der FRANCK–CONDON-Faktor f für alle Gittertiefen V_0 zwei- bis dreimal größer ist, als der FRANCK-CONDON-Faktor $f^{(1)}$. Aus diesem Grund werden wir $f^{(1)}$ im Hamiltonian (4.36) vernachlässigen.

Mit diesen numerischen Erkenntnissen und den Ergebnissen (4.42) und (4.48) können wir den HAMILTON-Operator (4.36) der Atom-Licht-Wechselwirkung schreiben als:

$$\hat{H}_{AL} = -\hbar \Omega f \cos(\omega t) \sum_i (-1)^i \left[\hat{a}_i^{(1)\dagger} (\hat{a}_i^{(0)} - \hat{a}_{i+1}^{(0)}) + \text{h.c.} \right]. \tag{4.52}$$

Wir sehen, dass die RABI-Frequenz Ω effektiv auf zwei benachbarten Gitterplätzen ein umgekehrtes Vorzeichen aufweist.

4.3 Ein BEC als Reservoir für Anregungen

Die bosonischen Atome im optischen Gitter koppeln an eine zusätzliche Spezies von bosonischen Atomen, welche durch ein schwach wechselwirkendes Bose-Einstein-Kondensat beschrieben werden sollen. Wir wollen zunächst die Theorie eines schwach wechselwirkenden BOSE-Gases vorstellen und anschließend auf dessen Kopplung an die Atome des optischen Gitters eingehen.

4.3.1 Zur Theorie schwach wechselwirkender BOSE-Gase

Wir betrachten ein in einem Volumen V homogenes Vielteilchensystem bestehend aus niederenergetischen Bosonen, welche schwach miteinander wechselwirken. Dann können wir uns auf s-Wellen-Streuung bzw. auf eine Kontaktwechselwirkung beschränken. Der HAMILTON-Operator in zweiter Quantisierung lautet in diesem Fall:

$$\hat{H} = \int_V \hat{\psi}_b^\dagger(x) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_b} \Delta \right\} \hat{\psi}_b(x) dx + \frac{1}{2} g_{bb} \int_V \hat{\psi}_b^\dagger(x) \hat{\psi}_b^\dagger(x) \hat{\psi}_b(x) \hat{\psi}_b(x) dx. \tag{4.53}$$

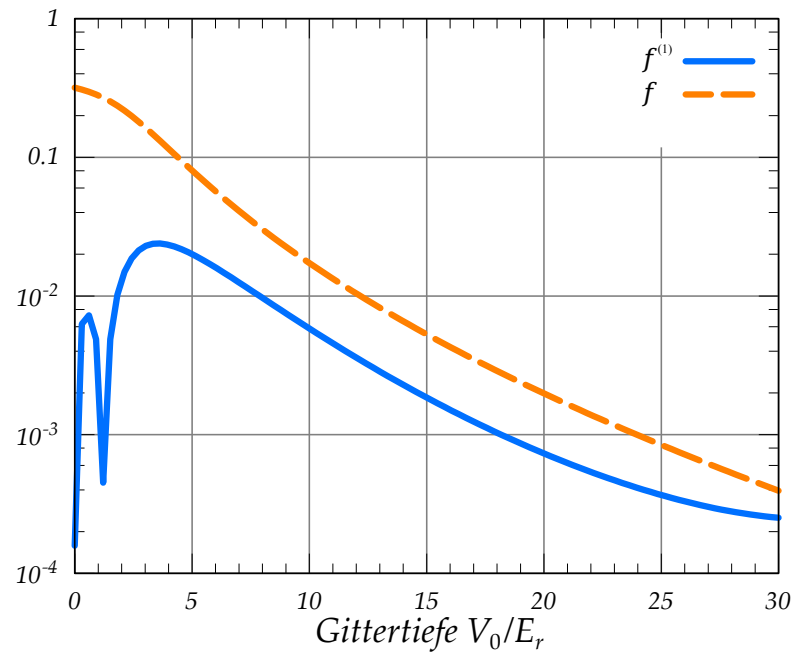


Abbildung 4.11: Numerisch berechnete FRANCK-CONDON-Faktoren (4.45) und (4.48) in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 in einer Raumdimension. Das Gitter hat die Form wie in Gleichung (4.30) mit $V_1 = 10V_0$. Der Einbruch bei $V_0 \approx 1E_r$ hat seinen Ursprung in einem Vorzeichenwechsel von $f^{(1)}$. Gezeichnet ist der Betrag von $f^{(1)}$. Der FRANCK-CONDON-Faktor f ist stets positiv.

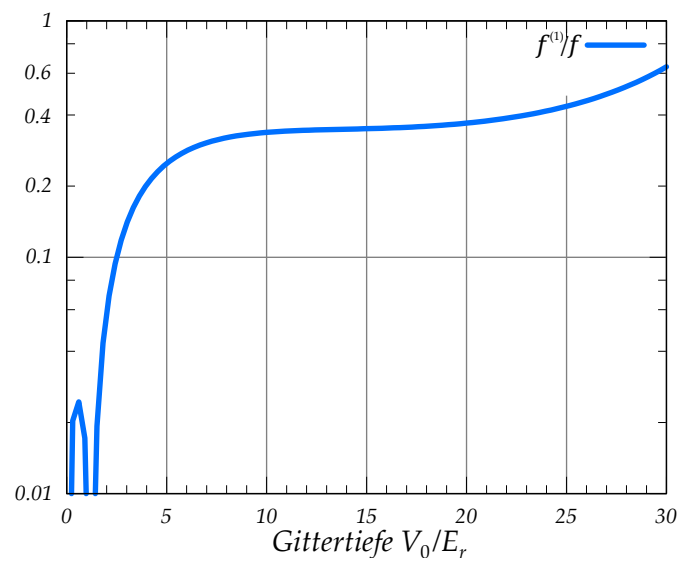


Abbildung 4.12: Verhältnis $f^{(1)}/f$ der numerisch berechneten FRANCK-CONDON-Faktoren (4.45) und (4.48) in Abhängigkeit von der Gittertiefe V_0 in einer Raumdimension. Das Gitter hat die Form wie in Gleichung (4.30) mit $V_1 = 10V_0$. Bezüglich des Einbruchs bei $V_0 \approx 1E_r$ siehe die Bildunterschrift von Abbildung 4.11.

Die hier auftretenden Feldoperatoren $\hat{\psi}_b(x)$ und $\hat{\psi}_b^\dagger(x)$ vernichten bzw. erzeugen ein Boson der Spezies b mit der Masse m_b am Orte x . Die Wechselwirkung g_{bb} ist repulsiv.

Nun entwickeln wir die Feldoperatoren $\hat{\psi}_b(x)$ nach Operatoren \hat{b}_k , welche Teilchen mit einem bestimmten Impuls k erzeugen und vernichten:

$$\hat{\psi}_b(x) = \sqrt{\frac{1}{V}} \sum_k e^{ikx} \hat{b}_k, \quad \hat{\psi}_b^\dagger(x) = \sqrt{\frac{1}{V}} \sum_k e^{-ikx} \hat{b}_k^\dagger. \quad (4.54)$$

Umgekehrt gilt:

$$\hat{b}_k = \sqrt{\frac{1}{V}} \int \hat{\psi}_b(x) e^{-ikx} dx, \quad \hat{b}_k^\dagger = \sqrt{\frac{1}{V}} \int \hat{\psi}_b^\dagger(x) e^{ikx} dx. \quad (4.55)$$

Genauso wie die Feldoperatoren $\hat{\psi}_b(x)$ erfüllen auch die Leiteroperatoren \hat{b}_k und \hat{b}_k^\dagger der Impulsmoden die kanonischen BOSE-Kommutatorrelationen:

$$[\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}, \quad \text{und} \quad [\hat{b}_k, \hat{b}_{k'}] = 0 = [\hat{b}_k^\dagger, \hat{b}_{k'}^\dagger]. \quad (4.56)$$

Nun ersetzen wir im Hamiltonian (4.53) die Feldoperatoren durch die Aufspaltung (4.54). Dies ergibt zunächst für den kinetischen Anteil:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{kinetisch}} &= \frac{1}{V} \int \sum_{k,k'} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} e^{ikx} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_b} \Delta \right\} e^{-ik'x} dx \\ &= \frac{1}{V} \int \sum_{k,k'} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'} e^{i(k-k')x} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b} dx. \end{aligned} \quad (4.57)$$

Das Integral über die Exponentialfunktion ergibt ein KRONECKER-Delta mit der Normierung V . Damit gilt für den kinetischen Anteil von (4.53):

$$\hat{H}_{\text{kin}} = \sum_k E_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k, \quad (4.58)$$

mit der Definition der Einteilchen-Energie:

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b}. \quad (4.59)$$

Als zweites ersetzen wir im Wechselwirkungsanteil des Hamiltonians (4.53) die Feldoperatoren $\hat{\psi}_b(x)$ durch die Entwicklung (4.54):

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{WW}} &= \frac{g_{bb}}{2V^2} \int \sum_{k,k',q,q'} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{k'}^\dagger \hat{b}_q \hat{b}_{q'} e^{i(k+k'-q-q')x} dx \\ &= \frac{g_{bb}}{2V} \sum_k \sum_{q,q'} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{q+q'-k}^\dagger \hat{b}_q \hat{b}_{q'} \\ &= \frac{g_{bb}}{2V} \sum_{q,q',k} \hat{b}_{q+k}^\dagger \hat{b}_{q'-k}^\dagger \hat{b}_q \hat{b}_{q'}. \end{aligned} \quad (4.60)$$

Hier ergab das Integral im ersten Schritt wieder ein KRONECKER-Delta. Im zweiten Schritt haben wir eine Indexverschiebung $k \rightarrow k + q$ ausgeführt.

Fassen wir den kinetischen (4.58) und den wechselwirkenden (4.60) Anteil zusammen, so erhalten wir für den Hamiltonian (4.53):

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{g_{bb}}{2V} \sum_{q,q',k} \hat{b}_{q+k}^\dagger \hat{b}_{q'-k}^\dagger \hat{b}_q \hat{b}_{q'}. \quad (4.61)$$

Unter der Summe werden zwei Bosonen mit den Impulsen q und q' vernichtet und dafür zwei Bosonen mit den Impulsen $q' - k$ und $q + k$ erzeugt. Dies entspricht der Streuung zweier Bosonen aneinander. Es wechselwirken demnach zwei Bosonen mit den Impulsen q und q' . Nach dem Streuprozess hat eines der Bosonen einen Impulsübertrag von k erhalten. Das andere Boson weist einen entsprechend um k verminderten Impuls auf. In der Summe ist der Impuls bei diesem Streuprozess erhalten, wie es sein sollte.

Nun wollen wir annehmen, dass der überwiegende Anteil der Bosonen b kondensiert ist, d. h., dass die Anzahl N_0 der Teilchen im Grundzustand mit dem Impuls $k = 0$ makroskopisch ist. In diesem Vielteilchenzustand gilt dann $\langle \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0 \rangle = N_0 \gg 1$. Dann fällt die Erzeugung bzw. Vernichtung nur eines Teilchens im Grundzustand nicht ins Gewicht und wir können die Leiteroperatoren \hat{b}_0^\dagger und \hat{b}_0 näherungsweise durch C-Zahlen ersetzen:

$$\hat{b}_0^\dagger \approx \hat{b}_0 \approx \sqrt{N_0}. \quad (4.62)$$

Damit gilt dann für den Kommutator dieser Leiteroperatoren:

$$[\hat{b}_0, \hat{b}_0^\dagger] \approx 0. \quad (4.63)$$

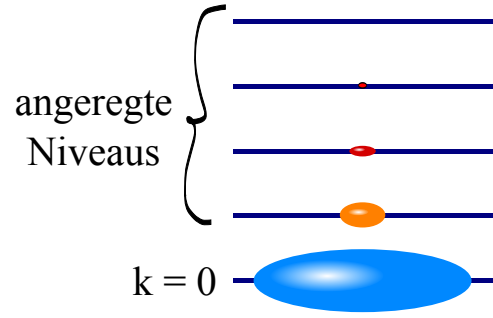


Abbildung 4.13:

Voraussetzung für die BOGOLIUBOV-Vorschrift ist ein makroskopisch besetzter Zustand für $k = 0$. Die angeregten Niveaus sollen nur schwach besetzt sein.

Diese Vorschrift geht auf NIKOLAI N. BOGOLIUBOV zurück [BOGOLIUBOV, 1947; PETHICK und SMITH, 2008].

Da der Grundzustand makroskopisch besetzt ist, können wir die Wechselwirkung der angeregten Niveaus untereinander vernachlässigen. Wir betrachten daher nur Leiteroperatoren von maximaler Ordnung $\hat{b}_{k \neq 0}^2$. Terme in welchen $\hat{b}_{k \neq 0}$ linear eingeht, können aus Gründen der Impulserhaltung nicht auftreten. Benutzen wir dies und die Annahme (4.62), so wird aus dem Hamiltonian (4.61):

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_k E_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{g_{bb}}{2V} \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0 \hat{b}_0 + \frac{g_{bb}}{2V} \sum_{k \neq 0} \left\{ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger \hat{b}_0 \hat{b}_0 + \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_{-k} + \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_0 + \right. \\ &\quad \left. + \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_0 \hat{b}_k + \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_0 \hat{b}_k + \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_0^\dagger \hat{b}_k \hat{b}_0 \right\} \\ &= \sum_k E_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{g_{bb}}{2V} N_0^2 + \frac{g_{bb}}{2V} N_0 \sum_{k \neq 0} \left\{ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{-k} + 4\hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \right\} \\ &= \frac{g_{bb}}{2V} N_0^2 + \sum_{k \neq 0} \left(E_k + \frac{2g_{bb}N_0}{V} \right) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{g_{bb}}{2V} N_0 \sum_{k \neq 0} \left\{ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{-k} \right\}. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Hier haben wir ausgenutzt, dass wir über positive und negative Impulse k summieren und das $E_{k=0} = 0$ gilt.

Die Anzahl N_0 der kondensierten Bosonen b stimmt nicht mit der Zahl N_b aller Bosonen b im System überein. Wir ersetzen in unserem Hamiltonian (4.64) N_0 gemäß:

$$N_b = N_0 + \sum_{k \neq 0} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k. \quad (4.65)$$

Dabei muss beachtet werden, dass – wie oben – nur Terme, welche bilinear in \hat{b}_k^\dagger und \hat{b}_k sind, berücksichtigt werden dürfen:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 - \frac{g_{bb} N_b}{V} \sum_{k \neq 0} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \sum_{k \neq 0} \left(E_k + \frac{2g_{bb} N_b}{V} \right) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{g_{bb}}{2V} N_b \sum_{k \neq 0} \{ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{-k} \} \\ &= \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 + \sum_{k \neq 0} \left(E_k + \frac{g_{bb} N_b}{V} \right) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{g_{bb}}{2V} N_b \sum_{k \neq 0} \{ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{-k} \} \\ &= \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 + \sum_{k \neq 0} \left(E_k + \frac{g_{bb} N_b}{V} \right) \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \frac{g_{bb}}{2V} N_b \sum_{k \neq 0} \{ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger + \hat{b}_k \hat{b}_{-k} \}. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Unser Ziel ist, den HAMILTON-Operator (4.66) auf Diagonalform zu bringen. Dazu führen wir eine lineare Transformation der Leiteroperatoren \hat{b} ein, welche ebenfalls auf BOGOLIUBOV zurückgeht [BOGOLIUBOV, 1947; PETHICK und SMITH, 2008] und daher als BOGOLIUBOV-Transformation bezeichnet wird:

$$\hat{B}_k = u_k \hat{b}_k + v_k \hat{b}_{-k}^\dagger, \quad \hat{B}_k^\dagger = u_k^* \hat{b}_k^\dagger + v_k^* \hat{b}_{-k}. \quad (4.67)$$

Die Koeffizienten u_k und v_k sind komplex und zunächst noch unbestimmt.

Von den neuen Operatoren \hat{B} fordern wir, dass sie ebenfalls die kanonischen BOSE-Kommutatorrelationen erfüllen:

$$[\hat{B}_k, \hat{B}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}, \quad [\hat{B}_k, \hat{B}_{k'}] = 0 = [\hat{B}_k^\dagger, \hat{B}_{k'}^\dagger]. \quad (4.68)$$

Werten wir zunächst die Kommutatorrelation zwischen zwei Vernichtern aus

$$\begin{aligned} 0 = [\hat{B}_k, \hat{B}_{k'}] &= [u_k \hat{b}_k + v_k \hat{b}_k^\dagger, u_{k'} \hat{b}_{k'} + v_{k'} \hat{b}_{k'}^\dagger] \\ &= u_k v_{k'} \delta_{k,-k'} - u_{k'} v_k \delta_{-k,k'} \\ &= (u_k v_{k'} - u_{k'} v_k) \delta_{k,-k'} \\ &= (u_k v_{-k} - u_{-k} v_k) \delta_{k,-k'} \end{aligned} \quad (4.69)$$

so sehen wir, dass die Koeffizienten u_k und v_k symmetrisch sind:

$$u_k = u_{-k}, \quad v_k = v_{-k}. \quad (4.70)$$

Mit der Kommutatorrelation für die Vernichter erhalten wir dieselbe Eigenschaft für die komplex konjugierten Koeffizienten. Betrachten wir außerdem noch die erste Kommutatorrelation (4.68), so erhalten wir eine Bedingung an die Koeffizienten u_k und v_k :

$$\begin{aligned}
 [\hat{B}_k, \hat{B}_{k'}^\dagger] &= [u_k \hat{b}_k + v_k \hat{b}_{-k}^\dagger, u_{k'}^* \hat{b}_{k'}^\dagger + v_{k'}^* \hat{b}_{-k'}] \\
 &= u_k u_{k'}^* \delta_{k,k'} - v_k v_{k'}^* \delta_{k,k'} \\
 &= (|u_k|^2 - |v_k|^2) \delta_{k,k'} \stackrel{!}{=} \delta_{k,k'}.
 \end{aligned} \tag{4.71}$$

Interpretiert man u_k mit dem \cosh und v_k mit dem \sinh , so gilt für die Koeffizienten demnach eine den Hyperbelfunktionen analoge Beziehung

$$|u_k|^2 - |v_k|^2 = 1. \tag{4.72}$$

Mit Hilfe dieser Bedingung können wir die inverse BOGOLIUBOV-Transformation ausführen:

$$\hat{b}_k = u_k^* \hat{B}_k - v_k \hat{B}_{-k}^\dagger, \quad \hat{b}_k^\dagger = u_k \hat{B}_k^\dagger - v_k^* \hat{B}_{-k}. \tag{4.73}$$

Nun setzen wir die BOGOLIUBOV-Transformation (4.73) in den HAMILTON-Operator (4.66) ein:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 + \sum_{k \neq 0} \left(E_k + g_{bb} n_b \right) \left[\underbrace{|u_k|^2 \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + |v_k|^2 (\hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + 1)}_{\text{nicht-diagonal}} - \underbrace{u_k v_k \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_{-k}^\dagger - u_k^* v_k^* \hat{B}_k \hat{B}_{-k}}_{\text{nicht-diagonal}} \right] + \\
 &+ \frac{1}{2} g_{bb} n_b \sum_{k \neq 0} \left\{ \underbrace{(u_k^2 + v_k^2) \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_{-k}^\dagger + (u_k^{*2} + v_k^{*2}) \hat{B}_k \hat{B}_{-k}}_{\text{nicht-diagonal}} - u_k^* v_k (2 \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + 1) - u_k v_k^* (2 \hat{B}_k \hat{B}_k + 1) \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.74}$$

Hier haben wir die Dichte $n_b = N_b/V$ der Bosonen b eingeführt.

Mit einer geeigneten Wahl der Koeffizienten, welche bisher nur der Bedingung (4.72) unterliegen, wollen wir die Nicht-Diagonalelemente zum Verschwinden bringen. Wir verlangen demnach:

$$-\left(E_k + g_{bb} n_b \right) u_k v_k + \frac{1}{2} g_{bb} n_b (u_k^2 + v_k^2) \stackrel{!}{=} 0. \tag{4.75}$$

Für die komplex konjugierten Koeffizienten gilt eine entsprechend komplex konjugierte Gleichung.

Motiviert von der Bedingung (4.72) machen wir den Ansatz:

$$u_k = e^{i\alpha_k} \cosh \phi_k, \quad v_k = e^{i\beta_k} \sinh \phi_k. \tag{4.76}$$

Dabei sind die Phasen α_k, β_k und der Winkel ϕ_k reell. Diesen Ansatz setzen wir in die Bedingung (4.75) ein:

$$\frac{1}{2} g_{bb} n_b \left(e^{i2\alpha_k} \cosh^2 \phi_k + e^{i2\beta_k} \sinh^2 \phi_k \right) = \left(E_k + g_{bb} n_b \right) e^{i(\alpha_k + \beta_k)} \cosh \phi_k \sinh \phi_k. \tag{4.77}$$

Dividieren wir die Exponentialfunktion auf der rechten Seite aus und benutzen die Identität $\cosh x \sinh x = \frac{1}{2} \sinh 2x$ für Hyperbelfunktionen, so bekommen wir:

$$g_{bb} n_b \left(e^{i(\alpha_k - \beta_k)} \cosh^2 \phi_k + e^{i(\beta_k - \alpha_k)} \sinh^2 \phi_k \right) = (E_k + g_{bb} n_b) \sinh 2\phi_k \quad (4.78)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist rein reell. Die linke Seite ist auf Grund der Exponentialfunktionen komplex. Dadurch kann Gleichheit nur gelten, wenn der Imaginärteil der linken Seite verschwindet, d. h. wenn bis auf Vielfache von 2π gilt:

$$\alpha_k = \beta_k. \quad (4.79)$$

Unterscheiden sich α_k und β_k um Vielfache von 2π , so bleiben die Koeffizienten u_k und v_k in dem Ansatz (4.76) invariant. Wir werden daher Vielfache von 2π im Folgenden nicht berücksichtigen.

Mit der Identität $\cosh^2 x + \sinh^2 x = \cosh 2x$ für Hyperbelfunktionen schreibt sich die Gleichung (4.78) dann:

$$\begin{aligned} g_{bb} n_b \cosh 2\phi_k &= (g_{bb} n_b + E_k) \sinh 2\phi_k, \text{ bzw.} \\ \tanh 2\phi_k &= \frac{g_{bb} n_b}{E_k + g_{bb} n_b} =: X. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Zur weiteren Auswertung benutzen wir eine leicht zu zeigende Identität für den *area tangens-hyperbolicus*:

$$\phi_k = \frac{1}{2} \operatorname{artanh} X = \frac{1}{2} \ln \left(\sqrt{\frac{1+X}{1-X}} \right), \quad (|X| < 1). \quad (4.81)$$

Mit der Definition (4.80) für X erhalten wir für den Winkel:

$$\phi_k = \ln \left(\sqrt{\frac{\varepsilon_k}{E_k}} \right). \quad (4.82)$$

Hier haben wir eine neue Energiedispersion eingeführt:

$$\boxed{\varepsilon_k = \sqrt{E_k^2 + 2g_{bb} n_b E_k}}. \quad (4.83)$$

Setzen wir diese Lösung für ϕ_k in den Ansatz (4.76) ein, dann erhalten wir für die Koeffizienten der BOGOLIUBOV-Transformation:

$$u_k = \frac{1}{2} e^{i\alpha_k} \frac{\varepsilon_k + E_k}{\sqrt{E_k \varepsilon_k}}, \quad (4.84a)$$

$$v_k = \frac{1}{2} e^{i\alpha_k} \frac{\varepsilon_k - E_k}{\sqrt{E_k \varepsilon_k}}. \quad (4.84b)$$

Mit dieser Wahl der Koeffizienten u_k und v_k verschwinden die Nicht-Diagonalelemente im Hamiltonian (4.74). Für die Diagonalelemente des Hamiltonians benötigen wir die folgenden Kom-

binationen der Koeffizienten u_k und v_k :

$$|u_k|^2 = \frac{1}{4} \frac{\varepsilon_k^2 + 2\varepsilon_k E_k + E_k^2}{E_k \varepsilon_k}, \quad (4.85a)$$

$$|v_k|^2 = \frac{1}{4} \frac{\varepsilon_k^2 - 2\varepsilon_k E_k + E_k^2}{E_k \varepsilon_k}, \quad (4.85b)$$

$$u_k v_k^* = \frac{1}{2} \frac{g_{bb} n_b}{\varepsilon_k}. \quad (4.85c)$$

Diese setzen wir in den Hamiltonian (4.74) ein und erhalten:

$$\hat{H} = \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 + \frac{1}{4} \sum_{k \neq 0} (E_k + g_{bb} n_b) \left[\frac{\varepsilon_k^2 + 2\varepsilon_k E_k + E_k^2}{E_k \varepsilon_k} \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + \frac{\varepsilon_k^2 - 2\varepsilon_k E_k + E_k^2}{E_k \varepsilon_k} (\hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + 1) \right] + \quad (4.86)$$

$$- \frac{1}{2} (g_{bb} n_b)^2 \sum_{k \neq 0} \frac{1}{\varepsilon_k} \{2\hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + 1\}$$

$$= \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 + \sum_{k \neq 0} \left\{ \left[\frac{1}{2} \frac{\varepsilon_k^2 + E_k^2}{E_k \varepsilon_k} (E_k + g_{bb} n_b) - \frac{(g_{bb} n_b)^2}{\varepsilon_k} \right] \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + \right. \quad (4.87)$$

$$\left. + \frac{1}{4} \frac{\varepsilon_k^2 - 2E_k \varepsilon_k + E_k^2}{E_k \varepsilon_k} (E_k + g_{bb} n_b) - \frac{(g_{bb} n_b)^2}{2\varepsilon_k} \right\}$$

$$= \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 + \sum_{k \neq 0} \left\{ \left[\frac{(E_k + g_{bb} n_b)^2}{\varepsilon_k} - \frac{(g_{bb} n_b)^2}{\varepsilon_k} \right] \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + \right. \quad (4.88)$$

$$\left. + \frac{1}{2} \frac{E_k + g_{bb} n_b - \varepsilon_k}{\varepsilon_k} (E_k + g_{bb} n_b) - \frac{(g_{bb} n_b)^2}{2\varepsilon_k} \right\}$$

$$= \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 + \sum_{k \neq 0} \left\{ \frac{E_k^2 + 2g_{bb} n_b E_k}{\varepsilon_k} \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + \frac{1}{2} \frac{1}{\varepsilon_k} (\varepsilon_k^2 - E_k \varepsilon_k - \varepsilon_k g_{bb} n_b) \right\}.$$

Schließlich nimmt der HAMILTON-Operator (4.53) die Form

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{k \neq 0} \varepsilon_k \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k \quad (4.89)$$

an. Dabei ist E_0 die Nullpunktenergie:

$$E_0 = \frac{g_{bb}}{2V} N_b^2 + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (\varepsilon_k - E_k - g_{bb} n_b). \quad (4.90)$$

Man kann sich davon überzeugen, dass die Nullpunktenergie *divergiert*. Dies ist allerdings nur eine Folge der Approximation der Wechselwirkung durch eine Kontaktwechselwirkung. Geht man eine Ordnung weiter, so wird die Kopplungskonstante g renormiert und die Nullpunktenergie erhält einen endlichen Wert [PITAEVSKII und STRINGARI, 2004].

Außerdem sei noch angemerkt, dass die Phase α_k des Ansatzes für die BOGOLIUBOV-Transformation (4.76) im HAMILTON-Operator (4.89) nicht mehr auftaucht und somit invariant unter

einer Änderung dieser Phase ist. Wir werden daher diese Phase im weiteren Verlauf nicht mehr berücksichtigen.

Der HAMILTON-Operator (4.89) beschreibt *nicht-wechselwirkende* Bosonen, welche durch die Leiteroperatoren \hat{B}_k^\dagger und \hat{B}_k erzeugt und vernichtet werden. Die dazugehörige Einteilchen-Dispersionrelation ist gegeben durch die Formel (4.83) und ist in Abbildung 4.14 dargestellt.

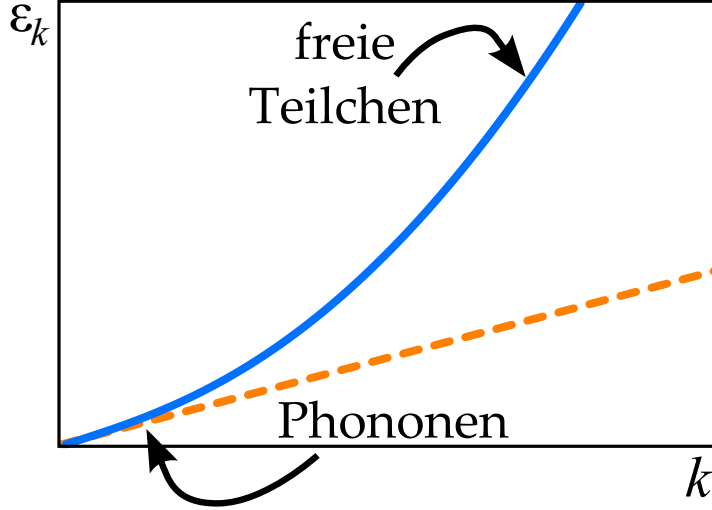


Abbildung 4.14: Dispersionsrelation der BOGOLIUBOV-Anregungen nach Gleichung (4.83) in blau. Für $k \rightarrow 0$ ist $\varepsilon \sim k$. Dies wird durch die orange gepunktete Kurve dargestellt.

Die durch die BOGOLIUBOV-Transformation (4.67) eingeführten Quasi-Teilchen stellen Anregungen des BOSE–EINSTEIN-Kondensates der Bosonen b dar. Die Bedeutung dieser Anregungen ist in den zwei Grenzfällen verschwindenden und sehr großen Impulses k ersichtlich. Im Grenzfall $k \rightarrow 0$ gilt für die Dispersionsrelation (4.83):

$$\varepsilon_k \cong c_b |\hbar k|, \quad k \rightarrow 0 \quad (4.91)$$

mit der Schallgeschwindigkeit:

$$c_b := \sqrt{\frac{g_{bb} n_b}{m_b}}. \quad (4.92)$$

Für $k \rightarrow 0$ liegt demnach ein Phononenast vor. Dies ist eine Bestätigung des GOLDSTONE-Theorems [BRAUNER, 2010], dessen Aussage kurz ausgedrückt ist, dass für jede gebrochene kontinuierliche Symmetrie eines Systems eine masselose Anregung existiert. Masselos bedeutet hier, dass die Dispersion für große Wellenlängen gegen Null geht. Die gebrochene Symmetrie ist die Eichsymmetrie des Hamiltonian (4.53). Dieser bleibt invariant unter einer globalen Änderung der Phase der Feldoperatoren $\hat{\psi}_b(x) \rightarrow \hat{\psi}_b(x)e^{i\varphi}$. Der Übergang des Systems in ein BEC, d. h. eine makroskopische Besetzung der $k = 0$ Mode, bricht diese Symmetrie. Die hier auftretenden Phononen werden in diesem Zusammenhang auch als GOLDSTONE-Bosonen bezeichnet.

Gilt jedoch $k \gg \zeta^{-1}$, so liegt ein Spektrum freier Teilchen vor, d. h. $\varepsilon_k \cong \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b}$. Hierbei bezeichnet ζ die sogenannte *healing length*. Die Bedeutung der *healing length* ist die Folgende:

Bringt man eine Störung in ein homogenes BEC oder stößt das BEC an eine Begrenzung, so verschwindet die makroskopische Wellenfunktion des BEC hier. Die healing length gibt nun die Größenordnung an, auf welcher die Wellenfunktion wieder den Wert annimmt, welchen sie im Bereich tief in der kondensierten Phase hat.

4.3.2 Das BEC-Reservoir und die Kopplung an das optische Gitter

Bevor wir die Kopplung des BEC mit dem optischen Gitter beschreiben, halten wir nochmals fest, dass der Hamiltonian des BEC gemäß Gleichung (4.89) folgende Form hat:

$$\hat{H}_b = \sum_k \varepsilon_k \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k. \quad (4.93)$$

Hier haben wir die konstante Grundzustandsenergie verworfen, da diese für die folgenden Betrachtungen keine Rolle spielt.

Koppeln wir nun unser Zwei-Band System der Bosonen a im optischen Gitter mit dem BEC bestehend aus den Bosonen der Spezies b , so kann durch Aussendung einer BOGOLIUBOV-Anregung in das BEC eine Abregung vom oberen Band in das untere Band des Gitters erfolgen. Siehe dazu die Abbildung 4.15. Dies ist ein analoger Prozess wie in der Quantenelektrodynamik, in welcher die Kopplung von Quantenfluktuationen an angeregte Atome deren spontanen Zerfall realisiert. So gesehen entspricht das BEC in unserem System dem Vakuum der Quantenelektrodynamik und die Photonen als elementare Anregungen in Letzterem werden durch die kollektiven Anregungen der BOGOLIUBOV-Anregungen dargestellt.

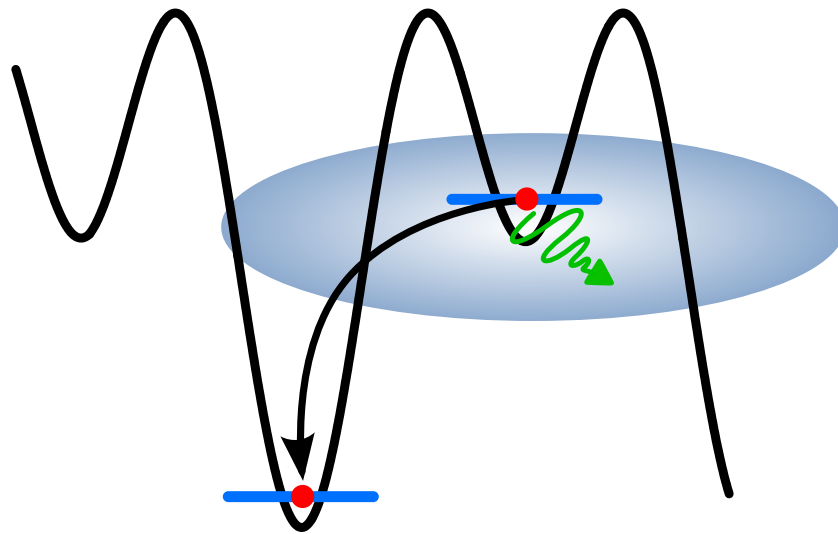


Abbildung 4.15: Zur Kopplung des Gitters an das BEC: Durch Aussendung einer BOGOLIUBOV-Anregung (grüner Pfeil) in das BEC werden Bosonen im optischen Gitter vom oberen in das untere Band abgeregt.

Für die Wechselwirkung zwischen den Bosonen b des BEC und den Bosonen a des optischen Gitters wollen wir von dem mikroskopischen Wechselwirkungs-Hamiltonian ausgehen:

$$\hat{H}_{ab} = \int_V dx_a \int_V dx_b \hat{\psi}_a^\dagger(x_a) \hat{\psi}_b^\dagger(x_b) \hat{h}_{ab}(x_a, x_b) \hat{\psi}_b(x_b) \hat{\psi}_a(x_a), \quad (4.94)$$

mit den Feldoperatoren $\hat{\psi}_a$ und $\hat{\psi}_b$ für die Bosonen der Spezies a und b und dem Zwei-Teilchen Wechselwirkungs-Hamiltonian \hat{h}_{ab} . Auch hier betrachten wir nur niedrige Dichten beider bosonischer Spezies und wollen nur niederenergetische Streuung behandeln. Dann können wir eine Kontakt-Wechselwirkung annehmen:

$$\hat{h}_{ab}(x_a, x_b) = g_{ab} \delta(x_a - x_b), \quad (4.95)$$

mit der Kopplungskonstanten $g_{ab} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{ab}}{2m_r}$. Dabei ist a_{ab} die s-Wellen Streulänge der Streuung von Bosonen der Spezies a und b aneinander und m_r ist die reduzierte Masse, d. h. $m_r = m_a m_b / (m_a + m_b)$. Wir erhalten damit für den Wechselwirkungs-Hamiltonian:

$$\hat{H}_{ab} = g_{ab} \int_V \hat{\psi}_a^\dagger(x) \hat{\psi}_b^\dagger(x) \hat{\psi}_b(x) \hat{\psi}_a(x) dx. \quad (4.96)$$

Nun entwickeln wir die Feldoperatoren der Bosonen a und b nach Einteilchen-Wellenfunktionen. Die zu den Bosonen des Gitters gehörenden Feldoperatoren $\hat{\psi}_a$ zerlegen wir gemäß Gleichung (B.13) in WANNIER-Funktionen und die Feldoperatoren $\hat{\psi}_b$ der Bosonen b nach ebenen Wellen gemäß Gleichung (4.54). Hier ersetzen wir außerdem die Leiteroperatoren \hat{b}_k durch die Operatoren \hat{B}_k der BOGOLIUBOV-Anregungen nach Gleichung (4.67). Zu beachten ist, dass $\hat{b}_0 = \sqrt{N_0}$ gilt. Dann nimmt der Feldoperator der Spezies b folgende Form an:

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_b(x) &= \sqrt{\frac{N_0}{V}} + \sqrt{\frac{1}{V}} \sum_k e^{ikx} (u_k \hat{B}_k - v_k \hat{B}_{-k}^\dagger) \\ &= \sqrt{\rho_b} + \sqrt{\frac{1}{V}} \sum_k (u_k \hat{B}_k e^{ikx} - v_k \hat{B}_k^\dagger e^{-ikx}). \end{aligned} \quad (4.97)$$

Dabei bezeichnet $\rho_b = N_0/V$ die Kondensatdichte. Bevor wir diese Entwicklung in den Wechselwirkungs-Hamiltonian (4.96) einsetzen, berechnen wir zunächst das Produkt der darin auftretenden BEC-Feldoperatoren:

$$\hat{\psi}_b^\dagger(x) \hat{\psi}_b(x) = \rho_b + \sqrt{\frac{\rho_b}{V}} \sum_k (u_k - v_k) \left[e^{ikx} \hat{B}_k + e^{-ikx} \hat{B}_k^\dagger \right] + \mathcal{O}(\hat{B}_k^2). \quad (4.98)$$

Terme, welche quadratisch in den BOGOLIUBOV-Operatoren \hat{B}_k sind, können wir im Folgenden vernachlässigen [DALEY ET AL., 2004]. Die Differenz der BOGOLIUBOV-Koeffizienten u_k und v_k können wir mit Hilfe der Gleichungen (4.84) ausrechnen. Es gilt:

$$u_k - v_k = \sqrt{\frac{E_k}{\epsilon_k}}. \quad (4.99)$$

Diese Größe wird auch als *statischer Strukturfaktor* bezeichnet.

Das Produkt der beiden Feldoperatoren (4.98) zusammen mit der Entwicklung (B.13) für die $\hat{\psi}_\alpha$ setzen wir in den Wechselwirkungs-Hamiltonian (4.96) ein. Wir erhalten dann:

$$\begin{aligned}\hat{H}_{ab} &= g_{ab} \sum_{n,m} \sum_{i,j} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)} \int_V w_i^{(n)*}(x) w_j^{(m)}(x) \left\{ \rho_b + \sqrt{\frac{\rho_b}{V}} \sum_k \sqrt{\frac{E_k}{\varepsilon_k}} \left[e^{ikx} \hat{B}_k + e^{-ikx} \hat{B}_k^\dagger \right] \right\} dx \\ &= g_{ab} \rho_b \sum_{i,n} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_i^{(n)} + g_{ab} \sqrt{\frac{\rho_b}{V}} \sum_{n,m} \sum_{i,j} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)} \sum_k \sqrt{\frac{E_k}{\varepsilon_k}} \times \\ &\quad \times \int_V w_i^{(n)*}(x) w_j^{(m)}(x) \left[e^{ikx} \hat{B}_k + e^{-ikx} \hat{B}_k^\dagger \right] dx.\end{aligned}\quad (4.100)$$

An dieser Stelle wollen wir aus Gründen der Übersicht zwei neue Operatoren einführen. Der erste ist definiert durch:

$$\hat{A}_k^\dagger := \sum_{i,j} \sum_{n,m} \mathcal{G}_{i,j;k}^{(n,m)} \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_j^{(m)}, \quad (4.101)$$

mit den Matrixelementen:

$$\mathcal{G}_{i,j;k}^{(n,m)} := g_{ab} \sqrt{\frac{\rho_b}{V} \frac{E_k}{\varepsilon_k}} \int_V w_i^{(n)*}(x - x_i^{(n)}) w_j^{(m)}(x - x_j^{(m)}) e^{ikx} dx. \quad (4.102)$$

Der zweite Operator

$$\hat{N}_a := \sum_n \sum_i \hat{a}_i^{(n)\dagger} \hat{a}_i^{(n)} \quad (4.103)$$

ist der Operator für die Gesamtteilchenzahl der Bosonen im Gitter.

Bevor wir den Wechselwirkungs-Hamiltonian durch diese zwei Operatoren ausdrücken, führen wir noch eine Betrachtung der Energieskalen des Systems durch. Der Abstand ε der Bänder soll im Teilchenast des BOGOLIUBOV-Spektrums liegen. Hier gilt $E_k/\varepsilon_k \sim 1$. Das Tunnelmatrixelement² liegt hingegen im Phononenast, wo $E_k/\varepsilon_k \approx 0$ gilt. Des Weiteren sind Übergänge zwischen verschiedenen Quasi-Impuls-Zuständen eines Bandes auf Grund von Energie- und Impulserhaltung verboten [GRIESSNER ET AL., 2007]. Wir behalten daher nur Leiteroperatoren der Form $\hat{a}_i^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}$ in der Summe des Operators \hat{A}_k . Das Produkt $\hat{A}_k \hat{B}_k^\dagger \sim \hat{a}_i^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)} \hat{B}_k^\dagger$ entspricht dann genau dem Bild des Zerfalls in das untere Band durch eine dissipative Wechselwirkung mit dem BEC-Bad: Im oberen Band wird ein Boson entfernt und unter Abgabe einer BOGOLIUBOV-Anregung in das untere Band eingefügt.

Außerdem können wir die Lokalisierung der WANNIER-Funktionen $w_i^{(n)}(x)$ auf dem i -ten Gitterplatz ausnutzen. Dann treten in der Summe in (4.101) nur Gitterplätze auf, die höchstens einen Gitterplatz voneinander entfernt sind. Unter Berücksichtigung dieser Bemerkungen wird aus den Operatoren \hat{A}_k^\dagger aus Gleichung (4.101):

$$\hat{A}_k^\dagger := \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{G}_{i,j;k}^{(1,0)} \hat{a}_i^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)}. \quad (4.104)$$

²Im Falle tiefer Gitter ist das Tunnelmatrixelement eines Bandes durch ein Viertel der Bandbreite des BLOCH-Bandes gegeben. Tiefe Gitter bedeuten in diesem Zusammenhang nur wenige *recoil*.

Mit Hilfe der beiden Operatoren (4.103) und (4.104) schreibt sich der Wechselwirkungs-Hamiltonian (4.100) dann:

$$\hat{H}_{ab} = g_{ab} \rho_b \hat{N}_a + \sum_k \left(\hat{A}_k^\dagger \hat{B}_k + \hat{A}_k \hat{B}_k^\dagger \right). \quad (4.105)$$

4.4 Herleitung der Mastergleichung

Nun kommen wir zum entscheidenden Punkt dieses Kapitels: Der Herleitung der Quanten-Mastergleichung, welche die Grundlage der Fragestellungen des Kapitels 6 dient.

Als Ausgangspunkt wählen wir die allgemeine Form der MARKOV'schen Quanten-Mastergleichung (3.13), wie wir sie im Kapitel 3.1 auf Seite 22 hergeleitet haben. Mit dem Wechselwirkungs-Hamiltonian (4.94) lautet diese:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^I}{dt} = -i/\hbar \int_0^\infty \text{Tr}_b \left\{ \left[\hat{H}_{ab}^I(t), \left[\hat{H}_{ab}^I(t-\tau), \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \right] \right] \right\} d\tau, \quad (4.106)$$

mit den statistischen Operatoren $\hat{\rho}_a$ und $\hat{\rho}_b$ der Bosonen a und b . Hier setzen wir den Wechselwirkungshamiltonian (4.105) ein, wobei wir den ersten Term proportional dem Teilchenzahloperator \hat{N} weglassen:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^I}{dt} = & -i/\hbar \sum_{k,q} \int_0^\infty \text{Tr}_b \left\{ \left[\hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) + \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t), \left[\hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) + \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau), \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \right] \right] \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (4.107)$$

Nun lösen wir den doppelten Kommutator auf. Hier gilt es, auf Grund der vielen Terme die Übersicht zu bewahren:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^I}{dt} = & -i/\hbar \sum_{k,q} \int_0^\infty \text{Tr}_b \left\{ \hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) \hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b + \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t) \hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b + \right. \\ & + \hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b + \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b + \\ & - \hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) - \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) + \\ & - \hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau) - \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau) + \\ & - \hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) - \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t) + \\ & - \hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) - \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t) + \\ & + \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) + \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t) + \\ & + \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{A}_k^{\dagger I}(t) \hat{B}_k^I(t) + \hat{\rho}_a^I(t) \hat{\rho}_b \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{B}_q^{\dagger I}(t-\tau) \hat{A}_k^I(t) \hat{B}_k^{\dagger I}(t) \left. \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (4.108)$$

Mit dieser expliziten Form können wir die Spur über die Freiheitsgrade des Bades direkt ausführen. Wir schreiben $\text{Tr}_b\{\hat{\mathcal{O}}\hat{\rho}_b\} = \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_b$ und bekommen dann:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^I}{dt} = & -i/\hbar \sum_{k,q} \int_0^\infty \left\{ \hat{A}_k^{I\dagger}(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \langle \hat{B}_k^I(t) \hat{B}_q^I(t-\tau) \rangle_b - \hat{A}_k^{I\dagger}(t) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \langle \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{B}_k^I(t) \rangle_b + \right. \\
 & - \hat{A}_q^{I\dagger}(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_k^I(t) \langle \hat{B}_k^I(t) \hat{B}_q^I(t-\tau) \rangle_b + \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_q^{I\dagger}(t-\tau) \hat{A}_k^I(t) \langle \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{B}_k^I(t) \rangle_b + \\
 & + \hat{A}_k^I(t) \hat{A}_q^{I\dagger}(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \langle \hat{B}_k^I(t) \hat{B}_q^I(t-\tau) \rangle_b - \hat{A}_k^I(t) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_q^{I\dagger}(t-\tau) \langle \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{B}_k^I(t) \rangle_b + \\
 & - \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_k^{I\dagger}(t) \langle \hat{B}_k^I(t) \hat{B}_q^I(t-\tau) \rangle_b + \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{A}_k^{I\dagger}(t) \langle \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{B}_k^I(t) \rangle_b + \\
 & + \hat{A}_k^{I\dagger}(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \langle \hat{B}_k^I(t) \hat{B}_q^I(t-\tau) \rangle_b - \hat{A}_k^{I\dagger}(t) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \langle \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{B}_k^I(t) \rangle_b + \\
 & - \hat{A}_q^{I\dagger}(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_k^I(t) \langle \hat{B}_k^I(t) \hat{B}_q^I(t-\tau) \rangle_b + \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_q^{I\dagger}(t-\tau) \hat{A}_k^I(t) \langle \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{B}_k^I(t) \rangle_b + \\
 & + \hat{A}_k^I(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \langle \hat{B}_k^I(t) \hat{B}_q^I(t-\tau) \rangle_b - \hat{A}_k^I(t) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \langle \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{B}_k^I(t) \rangle_b + \\
 & \left. - \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_k^{I\dagger}(t) \langle \hat{B}_k^I(t) \hat{B}_q^I(t-\tau) \rangle_b + \hat{\rho}_a^I(t) \hat{A}_q^I(t-\tau) \hat{A}_k^{I\dagger}(t) \langle \hat{B}_q^I(t-\tau) \hat{B}_k^I(t) \rangle_b \right\} d\tau. \tag{4.109}
 \end{aligned}$$

Die Korrelationsfunktionen des Bades können wir vereinfachen, da die Zeitentwicklung der Leiteroperatoren \hat{B}_k leicht zu berechnen ist. Zunächst gilt für die Zeitentwicklung dieser im Wechselwirkungs-Bild (A.11)

$$i\hbar \frac{d\hat{B}_k^I(t)}{dt} = [\hat{B}_k^I(t), \hat{H}_a^S + \hat{H}_b^S] = [\hat{B}_k^I(t), \hat{H}_b^S], \tag{4.110}$$

da \hat{H}_a^S keine Operatoren des Bades enthält und damit $[\hat{B}_k^I(t), \hat{H}_a^S] = 0$ gilt. Ferner ist \hat{H}_b^S der Hamiltonian (4.89) aus der BOGOLIUBOV-Theorie. Dieser kommutiert ebenso mit dem System-Hamiltonian \hat{H}_a^S . Somit gilt für den Kommutator in Gleichung (4.110):

$$\begin{aligned}
 [\hat{B}_k^I(t), \hat{H}_b^S] &= e^{i(\hat{H}_a^S + \hat{H}_b^S)t/\hbar} [\hat{B}_k^S(t), \hat{H}_b^S] e^{-i(\hat{H}_a^S + \hat{H}_b^S)t/\hbar} \\
 &= e^{i(\hat{H}_a^S + \hat{H}_b^S)t/\hbar} \varepsilon_k \hat{B}_k^S e^{-i(\hat{H}_a^S + \hat{H}_b^S)t/\hbar} \\
 &= \varepsilon_k \hat{B}_k^I(t).
 \end{aligned} \tag{4.111}$$

Mit diesem Ergebnis lässt sich die Bewegungsgleichung (4.110) leicht integrieren und wir erhalten schließlich:

$$\hat{B}_k^I(t) = \hat{B}_k^S e^{-i\varepsilon_k t/\hbar}. \tag{4.112}$$

Für die Adjungierte gilt entsprechendes.

Auf Grund dieser trivialen Zeitentwicklung der \hat{B}_k^I treten in Gleichung (4.109) nur Korrelationsfunktionen, d. h. Erwartungswerte von Leiteroperatoren im SCHRÖDINGER-Bild auf. Diese lassen sich mit einer gegebenen Gleichgewichtsverteilung $\hat{\rho}_b$ des Bades in der Regel analytisch berechnen. Wir nehmen für das Bad der BOGOLIUBOV-Anregungen einen thermischen Zustand

bei $T = 0$ an. Dies bedeutet, dass das Bad im Gleichgewicht aus einem BEC ohne BOGOLIUBOV-Anregungen besteht. Gibt es keine spontane Symmetriebrechung, dann verschwinden alle Korrelationsfunktionen bis auf eine:

$$\langle \hat{B}_k^{\text{S}\dagger} \hat{B}_{k'}^{\text{S}} \rangle_b = 0, \quad \langle \hat{B}_k^{\text{S}\dagger} \hat{B}_{k'}^{\text{S}\dagger} \rangle_b = 0, \quad \langle \hat{B}_k^{\text{S}} \hat{B}_{k'}^{\text{S}} \rangle_b = 0, \quad \langle \hat{B}_k^{\text{S}} \hat{B}_{k'}^{\text{S}\dagger} \rangle_b = \delta_{k,k'}. \quad (4.113)$$

Diese Ergebnisse setzen wir in die Mastergleichung (4.109) ein:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^{\text{I}}}{dt} = & -i/\hbar \sum_k \int_0^\infty \left\{ -\hat{A}_k^{\text{I}}(t) \hat{\rho}_a^{\text{I}}(t) \hat{A}_k^{\text{I}\dagger}(t-\tau) e^{i\varepsilon_k \tau/\hbar} - \hat{A}_k^{\text{I}}(t-\tau) \hat{\rho}_a^{\text{I}}(t) \hat{A}_k^{\text{I}\dagger}(t) e^{-i\varepsilon_k \tau/\hbar} + \right. \\ & \left. + \hat{A}_k^{\text{I}\dagger}(t) \hat{A}_k^{\text{I}}(t-\tau) \hat{\rho}_a^{\text{I}}(t) e^{-i\varepsilon_k \tau/\hbar} + \hat{\rho}_a^{\text{I}}(t) \hat{A}_k^{\text{I}\dagger}(t-\tau) \hat{A}_k^{\text{I}}(t) e^{i\varepsilon_k \tau/\hbar} \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (4.114)$$

Hier bemerken wir, dass der zweite und der vierte Term die hermitesch konjugierten Terme des ersten und des dritten Terms sind. Dies werden wir im Folgenden ausnutzen, um die Ausdrücke kompakter und übersichtlicher zu schreiben.

Nun extrahieren wir explizit die Zeitentwicklung der Operatoren im Wechselwirkungs-Bild gemäß Gleichung (A.9). Dazu definieren wir $\hat{H}_0 := \hat{H}_a^{\text{S}} + \hat{H}_b^{\text{S}}$ und erhalten:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^{\text{I}}}{dt} = & -i/\hbar \sum_k \int_0^\infty \left\{ -e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A}_k^{\text{S}} \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) e^{-i\hat{H}_0 \tau/\hbar} \hat{A}_k^{\text{S}\dagger} e^{i\hat{H}_0 \tau/\hbar} e^{i\varepsilon_k \tau/\hbar} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} + \right. \\ & \left. + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{A}_k^{\text{S}\dagger} e^{-i\hat{H}_0 \tau/\hbar} \hat{A}_k^{\text{S}} e^{i\hat{H}_0 \tau/\hbar} \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} e^{-i\varepsilon_k \tau/\hbar} + \text{h.c.} \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (4.115)$$

Unser Ziel ist, dies zurück in das SCHRÖDINGER-Bild zu transformieren. Für die linke Seite der Gleichung (4.115) gilt:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^{\text{I}}}{dt} &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \right) \\ &= e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \left[\hat{\rho}_a^{\text{S}}(t), \hat{H}_0 \right] e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} + e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^{\text{S}}}{dt} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.116)$$

Dieses Ergebnis setzen wir die Gleichung (4.115) ein und eliminieren außerdem die äußeren Exponentialfunktionen auf beiden Seiten der Gleichung. Wir erhalten dann eine Mastergleichung für den statistischen Operator des optischen Gitters im SCHRÖDINGER-Bild:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^{\text{S}}}{dt} &= \left[\hat{H}_0, \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) \right] - i/\hbar \sum_k \left(-\hat{A}_k^{\text{S}} \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) \hat{A}_k^{\dagger} + \hat{A}_k^{\text{S}\dagger} \hat{A}_k \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) - \hat{A}_k \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) \hat{A}_k^{\text{S}\dagger} + \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) \hat{A}_k^{\dagger} \hat{A}_k^{\text{S}} \right) \\ &= \left[\hat{H}_0, \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) \right] + i/\hbar \sum_k \left(\left[\hat{A}_k^{\text{S}}, \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) \hat{A}_k^{\dagger} \right] + \left[\hat{A}_k \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t), \hat{A}_k^{\text{S}\dagger} \right] \right) \\ &= \left[\hat{H}_0, \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) \right] + i/\hbar \sum_k \left(\left[\hat{A}_k^{\text{S}}, \hat{\rho}_a^{\text{S}}(t) \hat{A}_k^{\dagger} \right] + \text{h.c.} \right), \end{aligned} \quad (4.117)$$

mit

$$\hat{A}_k := \int_0^\infty e^{-i\hat{H}_a\tau/\hbar} \hat{A}_k^S e^{i\hat{H}_a\tau/\hbar} e^{-i\varepsilon_k\tau/\hbar} d\tau. \quad (4.118)$$

Die neu eingeführten Operatoren \hat{A}_k wollen wir etwas genauer betrachten. Dazu fügen wir zwei nach den Eigenzuständen $|\tilde{n}\rangle$ und $|\tilde{m}\rangle$ von \hat{H}_a entwickelten Identitäten ein. Die explizite Form dieser Eigenzustände ist zwar nicht bekannt, jedoch bekommen wir formal:

$$\hat{A}_k = \sum_{\tilde{n}, \tilde{m}} \int_0^\infty e^{-i(E_{\tilde{n}} - E_{\tilde{m}} + \varepsilon_k)\tau/\hbar} |\tilde{n}\rangle \langle \tilde{n}| \hat{A}_k^S |\tilde{m}\rangle \langle \tilde{m}| d\tau. \quad (4.119)$$

Nun ist etwas physikalische Überlegung nötig. Der Operator \hat{A}_k^S enthält einen Erzeuger und einen Vernichter von Bosonen im oberen und unteren Band, d. h. symbolisch $\hat{A}_k^S \sim \hat{a}_i^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}$. Demnach koppelt \hat{A}_k^S Zustände des oberen und des unteren Bandes miteinander und die Energien $E_{\tilde{n}}$ und $E_{\tilde{m}}$ sind Energie-Eigenwerte bezüglich des unteren bzw. des oberen Bandes. Ist nun der Abstand der Bänder ε viel größer als J und U im BOSE–HUBBARD-Hamiltonian (4.31), so ist $E_m - E_n \approx \varepsilon$ und das Integral in Gleichung (4.119) gibt nur einen Beitrag für $\varepsilon_k - \varepsilon = 0$. Mit diesen Überlegungen ergibt sich:

$$\hat{A}_k \approx \pi\hbar \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \hat{A}_k^S. \quad (4.120)$$

Dies setzen wir in die Mastergleichung (4.117) ein:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^S}{dt} = [\hat{H}_0, \hat{\rho}_a^S(t)] + i\pi \sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \left([\hat{A}_k^S, \hat{\rho}_a^S(t) \hat{A}_k^{S\dagger}] + \text{h.c.} \right). \quad (4.121)$$

Um die Deltafunktion unter der Summe auszuwerten, betrachten wir den Limes kontinuierlicher Impulse k . Hierfür müssen wir die Summe wie folgt ersetzen:

$$\sum_k \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \hat{f}(k) \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \hat{f}(k) d^3k =: \hat{\mathcal{F}}. \quad (4.122)$$

Hier haben wir die Operatoren des dissipativen Anteils der Mastergleichung (4.121) in der operatorwertigen Funktion $\hat{f}(k)$ zusammengefasst. Es gilt $\hat{f}(k) = [\hat{A}_k^S, \hat{\rho}_a^S(t) \hat{A}_k^{S\dagger}] + \text{h.c.}$

An dieser Stelle ist entscheidend, dass der Impuls k der BOGOLIUBOV-Anregungen ein Vektor ist. Wir schreiben im Folgenden $k = |k|n$, mit dem Betrag $|k|$ und der Richtung n mit Betrag eins. Die Integration $\int d^3k$ können wir analog aufspalten in eine Integration über den Betrag und über den Raumwinkel des Impulses k : $\int d^3k = \int_0^\infty |k|^2 d|k| \int_{|n|=1} d^2n$. Da wir für den Rest dieses Kapitels den Vektor k immer als Produkt von Betrag und Richtung schreiben werden, ist die Variable k wieder frei und wird schreiben daher abkürzend $k = |k|$. Insgesamt wird dann aus der Summe im dissipativen Anteil der Mastergleichung:

$$\hat{\mathcal{F}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|n|=1} d^2n \int_0^\infty dk \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) k^2 \hat{f}(kn). \quad (4.123)$$

Im nächsten Schritt wollen wir die Integration über k in eine Integration über ε_k transformieren, da in der Deltafunktion ε_k auftaucht und nicht k . Dazu betrachten wir die Energie der BOGOLIUBOV-Anregungen aus Gleichung (4.83):

$$\varepsilon_k = \sqrt{E_k^2 + 2g_{bb} n_b E_k}, \quad (4.124)$$

mit $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b}$ der Energie freier Teilchen. Lösen wir dies nach dem Impuls k auf, so bekommen wir:

$$k = \left(\frac{\hbar^2}{2m_b} \right)^{-1/2} \sqrt{\sqrt{\varepsilon_k^2 + (g_{bb} n_b)^2} - g_{bb} n_b}. \quad (4.125)$$

Daraus ergibt sich für das Differential dk :

$$k dk = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2m_b} \right)^{-1} \sqrt{\frac{1}{\varepsilon_k^2 + (g_{bb} n_b)^2}} \varepsilon_k d\varepsilon_k =: \gamma_k \varepsilon_k d\varepsilon_k. \quad (4.126)$$

Jetzt kombinieren wir diese beiden Gleichungen in dem Integral (4.123) und erhalten:

$$\hat{\mathcal{F}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{|n|=1} d^2 n \int_0^\infty d\varepsilon_k \gamma_k \varepsilon_k k(\varepsilon_k) \delta(\varepsilon - \varepsilon_k) \hat{f}(k n). \quad (4.127)$$

Hier ist mit $k = k(\varepsilon_k)$ der Impuls k als Funktion von ε_k gemäß der Beziehung (4.125) zu verstehen. Nun sei k_1 derjenige Impuls, für welchen $\varepsilon - \varepsilon_{k_1} = 0$ gilt, dann können wir das Integral über ε_k mit Hilfe der Deltafunktion auflösen und erhalten:

$$\hat{\mathcal{F}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \gamma_{k_1} \varepsilon_{k_1} k_1 \int_{|n|=1} d^2 n \hat{f}(k_1 n). \quad (4.128)$$

Wir schreiben die operatorwertige Funktion $\hat{f}(k_1 n)$ aus und ersetzen \hat{A}_k^S gemäß der Gleichung (4.104). Wir erhalten dann für das Integral $\hat{\mathcal{F}}$:

$$\hat{\mathcal{F}} = \frac{V}{(2\pi)^3} \gamma_{k_1} \varepsilon_{k_1} k_1 \int_{|n|=1} d^2 n \left(\left[\hat{A}_{k_1 n}^S, \hat{\rho}_a^S(t) \hat{A}_{k_1 n}^{S\dagger} \right] + \text{h.c.} \right) \quad (4.129)$$

$$= \frac{V}{(2\pi)^3} \gamma_{k_1} \varepsilon_{k_1} k_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle i',j' \rangle} \int_{|n|=1} d^2 n \left(\mathcal{G}_{i,j;k_1 n}^{(1,0)*} \mathcal{G}_{i',j';k_1 n}^{(1,0)} \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_i^{(1)}, \hat{\rho}_a^S(t) \hat{a}_{i'}^{(1)\dagger} \hat{a}_{j'}^{(0)} \right] + \text{h.c.} \right) \quad (4.130)$$

$$= \frac{g_{ab}^2 \rho_b}{(2\pi)^3} \gamma_{k_1} E_{k_1} k_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle i',j' \rangle} \int_{\mathbb{V}} dx_1 dx_2 \left(w_i^{(1)}(x_1) w_j^{(0)*}(x_1) w_{i'}^{(1)*}(x_2) w_{j'}^{(0)}(x_2) \times \right. \\ \left. \times \int_{|n|=1} d^2 n e^{-ik_1 n(x_1 - x_2)} \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_i^{(1)}, \hat{\rho}_a^S(t) \hat{a}_{i'}^{(1)\dagger} \hat{a}_{j'}^{(0)} \right] + \text{h.c.} \right). \quad (4.131)$$

Das Integral über den Raumwinkel können wir auswerten. Wir bezeichnen dies mit \mathcal{I}_n :

$$\mathcal{I}_n := \int_{|n|=1} d^2 n e^{-ik_1 n(x_1 - x_2)}. \quad (4.132)$$

Um dieses Integral für gegebenes $x_1 - x_2$ zu lösen, wählen wir das Koordinatensystem des Vektors n so, dass $x_1 - x_2$ in Richtung der z -Achse des n -Koordinatensystems zeigt. Wenn wir mit ϑ und φ den Polar- bzw. Azimutwinkel des n -Koordinatensystems bezeichnen, dann gilt für das Integral \mathcal{I}_n :

$$\mathcal{I}_n = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta e^{-ik_1 \cos \vartheta |x_1 - x_2|} = 2\pi \int_{-1}^1 d(\cos \vartheta) e^{-ik_1 \cos \vartheta |x_1 - x_2|} = 4\pi \frac{\sin(k_1 |x_1 - x_2|)}{k_1 |x_1 - x_2|}. \quad (4.133)$$

Dieses Ergebnis setzen wir in die Gleichung (4.131) ein:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{F}} = \frac{g_{ab}^2 \rho_b}{2\pi^2} \gamma_{k_1} E_{k_1} \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle i',j' \rangle} \int_V dx_1 dx_2 & \left(w_i^{(1)}(x_1) w_j^{(0)*}(x_1) w_{i'}^{(1)*}(x_2) w_{j'}^{(0)}(x_2) \times \right. \\ & \left. \times \frac{\sin(k_1 |x_1 - x_2|)}{|x_1 - x_2|} \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_i^{(1)}, \hat{\rho}_a^S(t) \hat{a}_{i'}^{(1)\dagger} \hat{a}_{j'}^{(0)} \right] + \text{h.c.} \right). \end{aligned} \quad (4.134)$$

Bis auf einen Faktor $i\pi$ ist dies der dissipative Anteil der Mastergleichung (4.121). Wir stecken nun alle Größen in $\hat{\mathcal{F}}$ bis auf die Operatoren in einen Parameter:

$$\Gamma_{j,j'}^{i,i'} := \frac{g_{ab}^2 \rho_b m_b}{2\pi \hbar^3} \frac{E_{k_1}}{E_{k_1} + g_{bb} n_b} \int_V dx_1 dx_2 w_i^{(1)}(x_1) w_j^{(0)*}(x_1) w_{i'}^{(1)*}(x_2) w_{j'}^{(0)}(x_2) \frac{\sin(k_1 |x_1 - x_2|)}{|x_1 - x_2|}. \quad (4.135)$$

Dann lautet die Mastergleichung (4.121) in kompakter Form:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}_a^S}{dt} = \left[\hat{H}_0, \hat{\rho}_a^S(t) \right] + i\hbar \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle i',j' \rangle} \left(\Gamma_{j,j'}^{i,i'} \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_i^{(1)}, \hat{\rho}_a^S(t) \hat{a}_{i'}^{(1)\dagger} \hat{a}_{j'}^{(0)} \right] + \text{h.c.} \right). \quad (4.136)$$

Dabei haben wir in (4.135) die Definition (4.126) des Parameters γ_k eingesetzt und zusätzlich die Identität $\varepsilon_k^2 + (g_{bb} n_b)^2 = E_k^2 + 2g_{bb} n_b E_k + (g_{bb} n_b)^2 = (E_k + g_{bb} n_b)^2$ benutzt. Die Koeffizienten $\Gamma_{j,j'}^{i,i'}$ haben die Einheit s^{-1} und stellen die *Zerfallsraten* des Systems dar.

Die Zerfallsraten $\Gamma_{j,j'}^{i,i'}$ sind im Limes $k_1 a \rightarrow \infty$ nur für ein eindimensionales Gitter ungleich Null. Um dies zu sehen, betrachten wir das Integral³ in der Definition (4.135):

$$\Gamma_{j,j'}^{i,i'} \propto \int_V dx_1 dx_2 f(x_1, x_2) \frac{\sin(k_1 |x_1 - x_2|)}{|x_1 - x_2|} \xrightarrow{k_1 a \rightarrow \infty} \pi \int_V dx_1 dx_2 f(x_1, x_2) \delta(|x_1 - x_2|). \quad (4.137)$$

³Der Vorfaktor von $\Gamma_{j,j'}^{i,i'}$ in (4.135) geht im Grenzfalle $k_1 a \rightarrow \infty$ gegen den endlichen Wert $\frac{g_{ab}^2 \rho_b m_b}{2\pi \hbar^3}$.

Dabei haben wir die WANNIER-Funktionen aus Gleichung (4.135) in der Funktion $f(x_1, x_2)$ zusammengefasst und eine Darstellung der Deltafunktion benutzt: $\frac{\sin(kx)}{x} \rightarrow \pi\delta(x)$, für $k \rightarrow \infty$. Für die Auflösung des Integrals (4.137) substituieren wir die Integrationsvariable x_2 durch $x = x_1 - x_2$. Die Integration über x teilen wir dann auf in eine Integration über den Radius r und über den Raumwinkel n . In D Dimensionen gilt: $dx = dn dr r^{D-1}$. Aus dem Integral (4.137) wird dann:

$$\Gamma_{j,j'}^{i,i'} \propto \int_V dx_1 \int_{|n|=1} dn \int_0^\infty dr r^{D-1} f(x_1, x_1 - rn) \delta(r) = \begin{cases} 0 & : D > 1, \\ 2 \int dx_1 f(x_1, x_1) & : D = 1. \end{cases} \quad (4.138)$$

Die Zerfallsrate (4.135) nimmt somit im Grenzfall $k_1 a \rightarrow \infty$ folgende Form an:

$$\Gamma_{j,j'}^{i,i'} = \frac{g_{ab}^2 \rho_b m_b}{\hbar^3} \int w^{(1)}(x - x_i^{(1)}) w^{(0)*}(x - x_j^{(0)}) w^{(1)*}(x - x_{i'}^{(1)}) w^{(0)}(x - x_{j'}^{(0)}) dx. \quad (4.139)$$

Die Integration erfolgt hier über die Abmessungen des eindimensionalen Gitters.

Da die Bandlücke ε groß ist im Vergleich zur recoil-Energie $(\hbar\pi)^2/(2m_a a^2)$ und k_1 durch die Bandlücke bestimmt ist, erwarten wir, dass der Grenzfall $k_1 a \gg 1$ gut erfüllt ist und damit die dissipative Kopplung des optischen Gitters mit dem BEC-Bad nur in einer Raumdimension endlich ist. Wir beschränken uns daher im Folgenden auf ein eindimensionales optisches Gitter.

Auf Grund der Lokalisierung der WANNIER-Funktionen $w^{(n)}(x - x_i^{(n)})$ auf den Gitterplätzen bei $x = x_i$ betrachten wir nur Zerfallsraten $\Gamma_{j,j'}^{i,i'}$, für welche die WANNIER-Funktionen gleich sind oder auf benachbarten Gitterplätzen liegen. Wir sehen auch, dass in dem von uns betrachteten Limes die Zerfallsraten proportional zu den Wechselwirkungsstärken $U_{j'i'ji}^{(0101)}$ gemäß der Definition (4.10) sind. Da die WANNIER-Funktionen vom Gitterplatz unabhängig sind, berücksichtigen wir nur die folgenden drei unabhängigen Zerfallsraten:

$$\Gamma := \Gamma_{j,j}^{j,j} = \Gamma_{j,j}^{j-1,j-1}, \quad \Gamma_0 := \Gamma_{j,j}^{j,j-1} = \Gamma_{j,j}^{j-1,j} \quad \text{und} \quad \Gamma_1 := \Gamma_{j,j+1}^{j,j} = \Gamma_{j+1,j}^{j,j}. \quad (4.140)$$

Im Folgenden wollen wir nur den dissipativen Anteil der Dynamik der Gleichung (4.136) betrachten und bezeichnen diesen mit $\mathcal{L}\hat{\rho}$. Behalten wir nur die eben eingeführten Zerfallsraten (4.140) in der Doppelsumme in der Mastergleichung (4.136), so lautet der dissipative Anteil explizit:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\hat{\rho} = \sum_j \bigg\{ & \Gamma \left(\left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] + \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_{j-1}^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_{j-1}^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] \right) + \\ & + \Gamma_0 \left(\left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_{j-1}^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] + \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_{j-1}^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] \right) + \\ & + \Gamma_1 \left(\left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_{j+1}^{(0)} \right] + \left[\hat{a}_{j+1}^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] \right) + \text{h.c.} \bigg\}. \end{aligned} \quad (4.141)$$

Diese Mastergleichung ist gemäß Gleichung (3.52) bereits in LINDBLAD-Form, kann jedoch noch kompakter geschrieben werden. Dazu betrachten wir von Gleichung (4.141) zunächst nur den Term proportional zu Γ :

$$\sum_j \Gamma \left(\left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] + \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_{j-1}^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_{j-1}^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] \right). \quad (4.142)$$

Da wir Randterme vernachlässigen können, macht es unter der Summe keinen Unterschied, ob der Index $j-1$ oder j auftaucht. Aus diesem Grund können wir für den zweiten Kommutator in der Summe (4.142) auch

$$\left[\hat{a}_{j+1}^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_{j+1}^{(0)} \right] \quad (4.143)$$

schreiben. Berücksichtigen wir jedoch beide Ausdrücke und nehmen zusätzlich noch den ersten Kommutator in Gleichung (4.142) doppelt, so bekommen wir für Gleichung (4.142):

$$\frac{1}{2} \sum_j \Gamma \left(\left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] + \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_{j-1}^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_{j-1}^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] + \left[\hat{a}_{j+1}^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_{j+1}^{(0)} \right] + \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)} \right] \right). \quad (4.144)$$

Dies kombinieren wir mit den beiden Termen proportional zu Γ_0 und Γ_1 in Gleichung (4.141). Man kann sich leicht davon überzeugen, dass man so folgendes Resultat erhält:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\hat{\rho} = \sum_j \left\{ & \left(\Gamma/2 + \Gamma_1 \right) \frac{1}{2} \left[\left(\hat{a}_j^{(0)\dagger} + \hat{a}_{j+1}^{(0)\dagger} \right) \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \left(\hat{a}_j^{(0)} + \hat{a}_{j+1}^{(0)} \right) \right] + \right. \\ & + \left(\Gamma/2 - \Gamma_1 \right) \frac{1}{2} \left[\left(\hat{a}_j^{(0)\dagger} - \hat{a}_{j+1}^{(0)\dagger} \right) \hat{a}_j^{(1)}, \hat{\rho} \hat{a}_j^{(1)\dagger} \left(\hat{a}_j^{(0)} - \hat{a}_{j+1}^{(0)} \right) \right] + \\ & + \left(\Gamma/2 + \Gamma_0 \right) \frac{1}{2} \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \left(\hat{a}_{j-1}^{(1)} + \hat{a}_j^{(1)} \right), \hat{\rho} \left(\hat{a}_{j-1}^{(1)\dagger} + \hat{a}_j^{(1)\dagger} \right) \hat{a}_j^{(0)} \right] + \\ & \left. + \left(\Gamma/2 - \Gamma_0 \right) \frac{1}{2} \left[\hat{a}_j^{(0)\dagger} \left(\hat{a}_{j-1}^{(1)} - \hat{a}_j^{(1)} \right), \hat{\rho} \left(\hat{a}_{j-1}^{(1)\dagger} - \hat{a}_j^{(1)\dagger} \right) \hat{a}_j^{(0)} \right] + \text{h.c.} \right\}. \end{aligned} \quad (4.145)$$

Hier treten symmetrische (+) und antisymmetrische (-) Kombinationen von Leiteroperatoren benachbarter Gitterplätze auf. Für diese führen wir neue Operatoren und dazugehörige Zerfallsraten ein. Wir setzen:

$$\hat{c}_{j,\pm}^{(0)} := \left(\hat{a}_j^{(0)\dagger} \pm \hat{a}_{j+1}^{(0)\dagger} \right) \hat{a}_j^{(1)}, \quad \hat{c}_{j,\pm}^{(1)} := \hat{a}_j^{(0)\dagger} \left(\hat{a}_{j-1}^{(1)} \pm \hat{a}_j^{(1)} \right) \quad (4.146)$$

und

$$\kappa_{0,\pm} := \frac{1}{2} \left(\Gamma/2 \pm \Gamma_0 \right), \quad \kappa_{1,\pm} := \frac{1}{2} \left(\Gamma/2 \pm \Gamma_1 \right). \quad (4.147)$$

Mit diesen Definitionen lässt sich der dissipative Anteil (4.145) der Mastergleichung (4.136) wesentlich kompakter schreiben:

$$\mathcal{L}\hat{\rho} = \sum_j \left\{ \kappa_{1,+} \left[\hat{c}_{j,+}^{(0)}, \hat{\rho} \hat{c}_{j,+}^{(0)\dagger} \right] + \kappa_{1,-} \left[\hat{c}_{j,-}^{(0)}, \hat{\rho} \hat{c}_{j,-}^{(0)\dagger} \right] + \kappa_{0,+} \left[\hat{c}_{j,+}^{(1)}, \hat{\rho} \hat{c}_{j,+}^{(1)\dagger} \right] + \kappa_{0,-} \left[\hat{c}_{j,-}^{(1)}, \hat{\rho} \hat{c}_{j,-}^{(1)\dagger} \right] + \text{h.c.} \right\}. \quad (4.148)$$

Wir wählen die Zerfallskonstanten (4.140) so, dass von den Koeffizienten (4.147) nur $\kappa_{0,+}$ und $\kappa_{1,+}$ ungleich Null sind. Diese Wahl verlangt, dass $\Gamma_0 = \Gamma_1 = \Gamma/2$ realisiert werden muss, so dass außerdem $2\kappa_{1,+} = 2\kappa_{0,+} = \Gamma =: \kappa$ gilt. Schreiben wir schließlich noch die hermitesch konjugierten Terme im dissipativen Anteil der Mastergleichung (4.148) explizit aus, so erhalten wir mit dieser Forderung an die Zerfallsraten für die komplette Mastergleichung:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{H}_0, \hat{\rho}(t) \right] + \frac{1}{2} i\hbar \kappa \sum_j \left\{ \left[2\hat{c}_{j,+}^{(0)} \hat{\rho} \hat{c}_{j,+}^{(0)\dagger} - \left\{ \hat{c}_{j,+}^{(0)\dagger} \hat{c}_{j,+}^{(0)}, \hat{\rho} \right\} \right] + \left[2\hat{c}_{j,+}^{(1)} \hat{\rho} \hat{c}_{j,+}^{(1)\dagger} - \left\{ \hat{c}_{j,+}^{(1)\dagger} \hat{c}_{j,+}^{(1)}, \hat{\rho} \right\} \right] \right\}. \quad (4.149)$$

Dabei haben wir den Superskript S für das SCHRÖDINGER-Bild und den Index a am statistischen Operator weggelassen, da wir von hier an mit dieser Mastergleichung nur im SCHRÖDINGER-Bild arbeiten wollen und das BEC-Bad keine Rolle mehr spielt. Zum Ende dieses Abschnittes sei noch angemerkt, dass die Mastergleichung (4.149) gemäß dem Abschnitt 3.2 in LINDBLAD-Form ist und damit die Erhaltung der Spur und der Hermitezität gewährleistet.

4.5 Adiabatische Elimination des oberen Bandes

Da der RAMAN-Laser beide Bänder des optischen Gitters aneinander koppelt und so sowohl Übergänge vom unteren in das obere als auch vom oberen in das untere Band ermöglicht, sind zunächst beide Bänder gleich wahrscheinlich besetzt. Ist die Frequenz des Lasers jedoch nicht exakt auf die Bandlücke abgestimmt, so erfolgt die Besetzung des oberen Bandes weniger effektiv. Zudem kommt durch die Kopplung an das BEC ein zusätzlicher Prozess ins Spiel, welcher analog dem spontanen Zerfall der Quantenelektrodynamik ist. Dies bewirkt, dass alle angeregten Zustände in das untere Band zerfallen und so Letzteres viel wahrscheinlicher besetzt ist als das obere Band. Dies ermöglicht es, das obere Band *adiabatisch* zu *eliminieren*, sodass wir am Ende effektiv ein Ein-Band Modell vorliegen haben. Wir orientieren uns im Folgenden an dem Artikel von MOORE ET AL. [1999].

Ausgangspunkt ist die Definition eines neuen Leiteroperators des oberen Bandes, welcher in einem *rotierenden Bezugssystem* definiert ist:

$$\hat{\alpha}_j(t) := \hat{\alpha}_j^{(1)\text{H}}(t) e^{i\omega t}. \quad (4.150)$$

Zu beachten ist, dass der Leiteroperator \hat{a} hier im HEISENBERG-Bild auftaucht. Für den neuen Operator $\hat{\alpha}$ bekommen wir dann unter Ausnutzung der HEISENBERG'schen Bewegungsgleichung [SAKURAI, 1994]:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\alpha}_j(t) = [\hat{\alpha}_j^{(1)\text{H}}(t), \hat{H}] e^{i\omega t} - \hbar\omega \hat{\alpha}_j(t). \quad (4.151)$$

Für \hat{H} setzen wir den Zwei-Band BOSE–HUBBARD-Hamiltonian (4.31), den Hamiltonian (4.52) der Atom-Licht-Wechselwirkung \hat{H}_{AL} , sowie den Wechselwirkungs-Hamiltonian (4.105) \hat{H}_{ab} ein. Der HAMILTON-Operator \hat{H}_b des BEC-Bades kommutiert mit $\hat{\alpha}_i^{(1)}$ und damit auch mit $\hat{\alpha}$ und braucht deswegen nicht berücksichtigt zu werden.

Die Lebensdauer der Gitterbosonen im oberen Band ist so klein ($\sim 1/\Delta$), dass eine Bewegung während dieser Periode nicht stattfindet. Aus diesem Grund können wir die kinetische Energie vernachlässigen. Mit Δ bezeichnen wir das *Detuning*, d. h. die Differenz zwischen der Frequenz ω des RAMAN-Lasers und der Bandlücke ε .

Des Weiteren vernachlässigen wir alle Terme, welche mit ω rotieren, da diese im Vergleich zu allen anderen Termen rasch oszillieren und sich bei der folgenden Integration über die Zeit zu Null integrieren.

Am Ende bleibt folgende Bewegungsgleichung für den neu eingeführten Leiteroperator:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\alpha}_j(t) \approx -\Delta \hat{\alpha}_j(t) - \hbar\Omega(-1)^j [\hat{\alpha}_j^{(0)\text{H}}(t) - \hat{\alpha}_{j+1}^{(0)\text{H}}(t)]. \quad (4.152)$$

Dies können wir formal integrieren:

$$\hat{\alpha}_j(t) = i \int_0^t ds \Omega e^{i\Delta(t-s)/\hbar} (-1)^j [\hat{\alpha}_j^{(0)\text{H}}(s) - \hat{\alpha}_{j+1}^{(0)\text{H}}(s)] + \hat{\alpha}_j(0). \quad (4.153)$$

Ohne Einschränkung können wir annehmen, dass zu Beginn keine Bosonen im oberen Band sitzen und können damit den Operator $\hat{\alpha}_j(0)$ zu Null setzen. Des Weiteren nehmen wir an, dass die Operatoren $\hat{\alpha}_j^{(0)\text{H}}(s)$ auf einer Zeitskala variieren, die viel länger ist als \hbar/Δ . Da die Exponentialfunktion mit der schnellen Frequenz $1/(\hbar/\Delta)$ oszilliert, sind die Operatoren $\hat{\alpha}_j^{(0)\text{H}}(s)$ im Integral nahezu konstant und wir können sie vor das Integral ziehen und zum Zeitpunkt t auswerten. Integrieren wir die übrig bleibende Exponentialfunktion, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_j(t) &\approx i\Omega(-1)^j [\hat{\alpha}_j^{(0)\text{H}}(t) - \hat{\alpha}_{j+1}^{(0)\text{H}}(t)] \frac{\hbar}{i\Delta} e^{i\Delta t/\hbar} (e^{-i\Delta t/\hbar} - 1) \\ &= \frac{\hbar\Omega}{\Delta} (-1)^j [\hat{\alpha}_j^{(0)\text{H}}(t) - \hat{\alpha}_{j+1}^{(0)\text{H}}(t)] (1 - e^{i\Delta t/\hbar}). \end{aligned} \quad (4.154)$$

Den Term, der mit der schnellen Frequenz Δ/\hbar rotiert, können wir gegenüber dem Term, der gar nicht rotiert, vernachlässigen. Am Ende aller Näherungen und Vereinfachungen bleibt:

$$\hat{\alpha}_j^{(1)} \approx (-1)^j \frac{\hbar\Omega}{\Delta} (\hat{\alpha}_j^{(0)} - \hat{\alpha}_{j+1}^{(0)}), \quad (4.155)$$

wobei wir nun wieder im SCHRÖDINGER-Bild sind. Die Konsequenzen dieser adiabatischen Elimination des oberen Bandes fassen wir im folgenden abschließenden Abschnitt zusammen.

4.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir detailliert das dieser Diplomarbeit zu Grunde liegende Modell studiert und möchten an dieser Stelle die wichtigsten Formeln rekapitulieren. Das System besteht aus zwei Teilen: Einem optischen Gitter, welches mit Bosonen gefüllt ist, und einem Bad bestehend aus einem BEC.

Die Bosonen der Spezies a mit der Masse m_a in einem eindimensionalen optischen Gitter werden durch einen Zwei-Band BOSE–HUBBARD-Hamiltonian (4.31) beschrieben. Nachdem wir das obere Energie-Band unter Anwendung der Gleichung (4.155) adiabatisch eliminiert haben, erhalten das Tunnelmatrixelement $\mathcal{J}^{(1)}$ und die Wechselwirkungsstärke $U^{(1)}$ des oberen Bandes einen zusätzlichen Faktor $\left(\frac{\hbar\Omega}{\Delta}\right)^2$. Da der RAMAN-Laser stark verstimmt und schwach ist, gilt $\frac{\hbar\Omega}{\Delta} \ll 1$. Damit können wir die Terme bzgl. des oberen Bandes im BOSE–HUBBARD-Hamiltonian (4.31) vernachlässigen und erhalten dann einen Ein-Band-Hamiltonian:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (4.156)$$

mit $\hat{a}_i = \hat{a}_i^{(0)}$ dem Leiteroperator des i -ten Gitterplatzes und $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ dem dazugehörigen Teilchenzahloperator. Die Parameter

$$J = - \int w^{(0)*}(x-a) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_a} \Delta + V_{\text{lat}}(x) \right] w^{(0)}(x) dx, \quad (4.157)$$

und

$$U = \frac{4\pi\hbar^2 a_a}{m_a} \int |w^{(0)}(x)|^4 dx \quad (4.158)$$

sind durch die WANNIER-Funktionen $w^{(0)}(x - x_i^{(0)})$ des unteren Bandes auf dem Gitterplatz bei $x_i^{(0)}$ und das Gitterpotential

$$V_{\text{lat}}(x) = V_0 \sin^2(k_0 x) + \frac{1}{4} V_1 \sin^2(2k_0 x) \quad (4.159)$$

bestimmt. Hier ist a_a die s-Wellen Streulänge der Bosonen im Gitter, $k_0 = \pi/a$ der Gittervektor und a die Gitterkonstante.

Zusätzlich wirkt ein RAMAN-Laser auf die Bosonen des Gitters, welcher die Bosonen im unteren und oberen Band miteinander koppelt. Der monochromatische Laser bei der Frequenz ω bildet eine stehende Welle mit einer Wellenlänge, welche genau doppelt so groß wie die Gitterkonstante a ist. Die Wechselwirkung zwischen dem Laser und den Bosonen des Gitters beschreiben wir semiklassisch. Der HAMILTON-Operator ist:

$$\hat{H}_{\text{AL}} = -\hbar\Omega f \cos(\omega t) \sum_i (-1)^i \left[\hat{a}_i^{(1)\dagger} \left(\hat{a}_i^{(0)} - \hat{a}_{i+1}^{(0)} \right) + \text{h.c.} \right]. \quad (4.160)$$

Summiert wird über alle Gitterplätze i des Gitters. Hier ist Ω die RABI-Frequenz und $f = \int w^{(1)}(x - a/2) w^{(0)}(x) \cos(k_0 x) dx$ der FRANCK-CONDON-Faktor. Diesen Teil des System-Hamiltonians werden wir im Kapitel 6, wo wir die Dynamik des Systems betrachten, nicht berücksichtigen, da wir uns dort nur auf das untere Band konzentrieren.

Das zweite System bestehend aus einem BOSE-EINSTEIN-Kondensat dient als Bad von BOGOLIUBOV-Anregungen. Es kann auf Grund der großen Energielücke ε zwischen den beiden Bändern des optischen Gitters effektiv als Reservoir bei einer verschwindenden Temperatur angenommen werden. Der HAMILTON-Operator dieses Teilsystems ohne die Grundzustandsenergie lautet:

$$\hat{H}_b = \sum_k \varepsilon_k \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k. \quad (4.161)$$

Summiert wird über alle Impulse k . Dabei ist

$$\varepsilon_k = \sqrt{E_k^2 + 2g_{bb} n_b E_k} \quad (4.162)$$

die Dispersionsrelation der BOGOLIUBOV-Anregungen und $E_k = \hbar^2 k^2 / (2m_b)$ die freie Dispersionsrelation. Des Weiteren ist $g_{bb} = 4\pi\hbar^2 a_b / m_b$ die Kopplungskonstante, a_b die s-Wellen Streulänge zweier Bosonen der Spezies b , n_b die Dichte des BEC und m_b die Masse der Bosonen im BEC. Die Leiteroperatoren \hat{B}_k^\dagger und \hat{B}_k erzeugen bzw. vernichten eine BOGOLIUBOV-Anregung mit dem Impuls k .

Die Wechselwirkung zwischen den beiden Bosonen-Arten aus dem Gitter und aus dem BEC wird durch eine Dichte-Dichte-Wechselwirkung modelliert. Der Hamiltonian der Wechselwirkung lautet:

$$\hat{H}_{ab} = \sum_k \left(\hat{A}_k^\dagger \hat{B}_k + \hat{A}_k \hat{B}_k^\dagger \right). \quad (4.163)$$

Summiert wird wieder über alle Impulse der BOGOLIUBOV-Anregungen. Die Operatoren \hat{A}_k^\dagger sind gegeben durch:

$$\hat{A}_k^\dagger := \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{G}_{i,j;k}^{(1,0)} \hat{a}_i^{(1)\dagger} \hat{a}_j^{(0)}, \quad (4.164)$$

mit

$$\mathcal{G}_{i,j;k}^{(1,0)} := \frac{2\pi\hbar^2 a_{ab}}{m_{ab}} \sqrt{\frac{\rho_b}{V}} \sqrt{E_k/\varepsilon_k} \int w^{(1)*}(x-x_i^{(1)}) w^{(0)}(x-x_j^{(0)}) e^{-ikx} dx. \quad (4.165)$$

Hier ist a_{ab} die s-Wellen Streulänge für die Streuung der beiden Bosonen-Arten aneinander, $m_{ab} = m_a m_b / (m_a + m_b)$ die relative Masse und ρ_b die Kondensatdichte des BEC.

Aus diesem Wechselwirkungs-Hamiltonian können wir ausgehend von der MARKOV'schen Quanten-Mastergleichung eine Mastergleichung in LINDBLAD-Form für den statistischen Operator der Bosonen im optischen Gitter herleiten. Unter Anwendung der adiabatischen Elimination (4.155) lautet die Mastergleichung im SCHRÖDINGER-Bild:

$$\boxed{i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}(t) \right] + \frac{1}{2} i\hbar\kappa \sum_{\langle i,j \rangle} \left([\hat{c}_{i,j}, \hat{\rho}(t) \hat{c}_{i,j}^\dagger] + [\hat{c}_{i,j} \hat{\rho}(t), \hat{c}_{i,j}^\dagger] \right)}. \quad (4.166)$$

Der hier auftretende HAMILTON-Operator ist der Ein-Band BOSE–HUBBARD-Hamiltonian aus Gleichung (4.160). Die Quantensprung-Operatoren $\hat{c}_{i,j}$ sind durch

$$\boxed{\hat{c}_{i,j} = (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_j^\dagger) (\hat{a}_i - \hat{a}_j)} \quad (4.167)$$

gegeben und die Zerfallsrate ist:

$$\kappa = \left(\frac{\hbar\Omega}{\Delta} \right)^2 \Gamma, \quad (4.168)$$

mit $\Gamma = \frac{4\pi^2 \hbar a_{ab}^2 \rho_b m_b}{m_{ab}^2} \int w_i^{(1)}(x) w_i^{(0)*}(x) w_i^{(1)*}(x) w_i^{(0)}(x) dx$.

In der Mastergleichung (4.166) tauchen drei Parameter auf: J und U aus dem HAMILTON-Operator sowie κ aus dem LINDBLAD-Anteil. Alle drei Parameter sind abhängig von der Form der WANNIER-Funktionen und somit Funktionen der Gittertiefe V_0 . In die Parameter U und κ gehen außerdem noch die s-Wellen Streulängen a_a bzw. a_{ab} ein, welche unabhängig mit Hilfe von FESHBACH-Resonanzen verändert werden können. Damit sollten sich die drei Parameter des betrachteten Modells unabhängig variieren lassen.

Gegenüber der Mastergleichung (4.149) hat die oben notierte Mastergleichung (4.166) keine Quantensprung-Operatoren $\hat{c}_{j,+}^{(1)}$ mehr. Diese nehmen nach der adiabatischen Elimination des oberen Bandes die Form

$$\hat{c}_{j,+}^{(1)} \propto \hat{a}_j^\dagger (-\hat{a}_{j-1} + 2\hat{a}_j - \hat{a}_{j+1}) \quad (4.169)$$

an und zerstören damit eine antisymmetrische Superposition von Phasen von Teilchen auf drei benachbarten Gitterplätzen. Der Operator $\hat{c}_{j,+}^{(1)}$ sorgt damit ebenso wie die $\hat{c}_{i,j}$ für eine feste Phasenbeziehung von Bosonen auf benachbarten Gitterplätzen und damit letztendlich für einen kondensierten Zustand. Dies sieht man klarer, wenn man die Leiteroperatoren in den Impulsraum gemäß Gleichung (B.14) entwickelt. Dies ergibt

$$\hat{c}_{j,+}^{(1)} \propto \sum_{q,p} \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_p e^{-i(q-p)x_j} (1 - \cos(pa)). \quad (4.170)$$

Man sieht, dass in der Summe kein Operator auftaucht, welcher Teilchen in der Kondensat-Mode mit $q = 0$ zerstört. Das Kondensat ist damit ein Dunkelzustand von $\hat{c}_{j,+}^{(1)}$. Wir erwarten, keine *qualitativen* Änderungen in dem Verhalten unseres Systems, wenn wir diesen Quantensprung-Operator nicht berücksichtigen. Daher werden wir im Folgenden nur die Mastergleichung in der Form (4.166) mit den Quantensprung-Operatoren (4.167) verwenden.

Kapitel 5

Der MOTT-Superfluid-Phasenübergang für Bosonen im optischen Gitter

Bevor wir uns den Fall eines dissipativen Quanten-Systems anschauen, wollen wir zunächst den BOSE–HUBBARD-Hamiltonian als abgeschlossenes System ohne ein zusätzliches Bad betrachten. Wir untersuchen den BOSE–HUBBARD-Hamiltonian in seiner einfachsten Form, wie er in Abschnitt 4.1.2 hergeleitet wurde. Wir berücksichtigen daher nur das unterste Band. Die Parameter J und U des HAMILTON-Operators sind sowohl zeitlich konstant als auch unabhängig vom Gitterplatz. Außerdem vernachlässigen wir das Fallenpotential, welches über den Parameter ϵ_i in den BOSE–HUBBARD-Hamiltonian (4.26) eingeht. Der Hamiltonian lautet dann:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (5.1)$$

Wir interessieren uns zunächst für die Dynamik, welche durch diesen Hamiltonian induziert wird. Ausgangspunkt soll hier die SCHRÖDINGER-Gleichung für den statistischen Operator $\hat{\rho}$ sein:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]. \quad (5.2)$$

Diese bezeichnet man als LIOUVILLE–VON NEUMANN-Gleichung. Zusammen mit einer Anfangsbedingung ist die Zeitabhängigkeit des statistischen Operators durch die LIOUVILLE-VON NEUMANN-Gleichung vollständig bestimmt.

5.1 Herleitung der Momentengleichung

Wir wollen damit beginnen, die Dynamik des Produktes von α Erzeugern und β Vernichtern des Gitterplatzes k anzuschauen: $\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta$. Genauer gesagt interessieren wir uns nur für die Dynamik des Erwartungswertes von diesem Operator. Der Erwartungswert eines Operators \hat{O} ist über den statistischen Operator gemäß

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr} \{ \hat{O} \hat{\rho} \} = \text{Tr} \{ \hat{\rho} \hat{O} \} \quad (5.3)$$

definiert. Wir wollen den Erwartungswert $\langle \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta \rangle$ in dieser Arbeit als *Moment* bezeichnen und schreiben hierfür abkürzend:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)} := \langle \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta \rangle. \quad (5.4)$$

Die Notation mit dem Gitterplatz k als Superskript und α und β als Subskript an den Momenten mag an dieser Stelle widersprüchlich sein, wird sich aber im weiteren Verlauf der Arbeit als praktisch herausstellen, da wir den Superskript k später fallen lassen werden.

Beginnen wir nun damit die Dynamik des Momentes $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)}$ zu berechnen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)} = i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr} \{ \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta \hat{\rho}(t) \} = \text{Tr} \{ \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) \} = \text{Tr} \{ \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \}. \quad (5.5)$$

Hier haben wir die LIOUVILLE-VON NEUMANN-Gleichung (5.2) und die Definition (5.4) benutzt. Den Kommutator des HAMILTON-Operators mit dem statistischen Operator können wir noch umformen. Dafür benutzen wir, dass die Spur invariant unter zyklischer Permutation der in ihr enthaltenen Operatoren ist:

$$\text{Tr} \{ \hat{A} \hat{B} \hat{C} \} = \text{Tr} \{ \hat{B} \hat{C} \hat{A} \} = \text{Tr} \{ \hat{C} \hat{A} \hat{B} \}. \quad (5.6)$$

Dies benutzen wir, um den Kommutator in der Spur umzuschreiben. Mit Hilfe von Gleichung (5.6) gilt nämlich ganz allgemein:

$$\text{Tr} \{ \hat{A} [\hat{B}, \hat{C}] \} = \text{Tr} \{ [\hat{A}, \hat{B}] \hat{C} \}. \quad (5.7)$$

Damit erhalten wir aus der Gleichung (5.5):

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)} = \text{Tr} \{ \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \} = \text{Tr} \{ [\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta, \hat{H}] \hat{\rho}(t) \} = \langle [\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta, \hat{H}] \rangle. \quad (5.8)$$

An Hand dieser Gleichung wird die Äquivalenz von der LIOUVILLE-VON NEUMANN- bzw. der SCHRÖDINGER- und der HEISENBERG-Gleichung erkennbar.

Für die Zeitentwicklung der Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)}$ benötigen wir den Kommutator des Operators $\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta$ mit dem HAMILTON-Operator. Dafür brauchen wir wiederum die Kommutatoren:

$$[\hat{a}_k^{\dagger\alpha}, \hat{a}_i] = -\alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \delta_{k,i}, \quad (5.9a)$$

$$[\hat{a}_k^\beta, \hat{a}_i^\dagger] = \beta \hat{a}_k^{\beta-1} \delta_{k,i}, \quad (5.9b)$$

$$[\hat{a}_k^{\dagger\alpha}, \hat{n}_i] = -\alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \delta_{k,i}, \quad (5.9c)$$

$$[\hat{a}_k^\beta, \hat{n}_i] = \beta \hat{a}_k^\beta \delta_{k,i}. \quad (5.9d)$$

Beginnen wir damit, den Kommutator des Operators $\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta$ mit dem Tunnel-Anteil des BOSE-HUBBARD-Hamiltonians (5.1) auszurechnen:

$$\begin{aligned} -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta, \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j] &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{ \hat{a}_k^{\dagger\alpha} [\hat{a}_k^\beta, \hat{a}_i^\dagger] \hat{a}_j + \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_k^{\dagger\alpha}, \hat{a}_j] \hat{a}_k^\beta \} \\ &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \{ \beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} \hat{a}_j \delta_{k,i} - \alpha \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta \delta_{k,j} \} \\ &= -J \sum_{\langle i|k \rangle} \{ \beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} \hat{a}_i - \alpha \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta \}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Summiert wird hier über alle Nachbarn i des Gitterplatzes k .

Nun berechnen wir den Anteil des Kommutators aus Gleichung (5.8), welcher die Wechselwirkung des BOSE–HUBBARD-Hamiltonians enthält:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2}U \sum_i [\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta, \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1)] &= \frac{1}{2}U \sum_i \left\{ \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{n}_i [\hat{a}_k^\beta, \hat{n}_i] + \hat{a}_k^{\dagger\alpha} [\hat{a}_k^\beta, \hat{n}_i] (\hat{n}_i - 1) + \hat{n}_i [\hat{a}_k^{\dagger\alpha}, \hat{n}_i] \hat{a}_k^\beta + \right. \\
 &\quad \left. + [\hat{a}_k^{\dagger\alpha}, \hat{n}_i] (\hat{n}_i - 1) \hat{a}_k^\beta \right\} \\
 &= \frac{1}{2}U \sum_i \left\{ \beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{n}_i \hat{a}_k^\beta \delta_{k,i} + \beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta (\hat{n}_i - 1) \delta_{k,i} - \alpha \hat{n}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta \delta_{k,i} - \alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha} (\hat{n}_i - 1) \hat{a}_k^\beta \delta_{k,i} \right\} \\
 &= \frac{1}{2}U \left\{ 2\beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{n}_k \hat{a}_k^\beta + \beta^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta - \beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta - 2\alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{n}_k \hat{a}_k^\beta - \alpha^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta + \alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta \right\} \\
 &= \frac{1}{2}U \left\{ 2(\beta - \alpha) \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{n}_k \hat{a}_k^\beta + [\beta(\beta - 1) - \alpha(\alpha - 1)] \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta \right\}.
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

Jetzt haben wir mit (5.10) und (5.11) beide zu berechnenden Kommutatoren zusammen und setzen diese in die Bewegungsgleichung (5.8) ein:

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)} &= -J \sum_{\langle i|k \rangle} \left\{ \beta \langle \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} \hat{a}_i \rangle - \alpha \langle \hat{a}_i^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta \rangle \right\} + \\
 &\quad + U(\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1}^{(k)} + \left\{ \frac{1}{2}U [\beta(\beta - 1) - \alpha(\alpha - 1)] \right\} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)}.
 \end{aligned}
 } \tag{5.12}$$

Diese Bewegungsgleichung für die Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)}$ bezeichnen wir als *Momentengleichung*. Dieser Ausdruck gilt exakt. Schwierigkeiten bereiten hier zwei Terme:

Zum Einen ist dies der Tunnel-Term, da in diesem Erwartungswerte von nicht-lokalen Operatoren auftreten. Dies ist natürlich gerade die Besonderheit des Tunnel-Terms, durch welchen eine langreichweitige Phasenkorrelation der Bosonen aufgebaut wird. Wir werden diesen Term im Rahmen der Molekularfeld-Näherung und unter Ausnutzung der Annahme eines homogenen Systems vereinfachen. Diese Näherungen machen unsere Rechnungen *einfacher* und zerstören *nicht* das Quanten-Phänomen der *Superfluidität*, welches seinen Ursprung in der oben erwähnten Phasenkorrelation hat.

Der andere nicht-triviale Term in Gleichung (5.12) ist der Term mit $\mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1}^{(k)}$. Hier wird die Dynamik des Erwartungswertes $\langle \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta \rangle$, welcher $\alpha + \beta$ Leiteroperatoren enthält, an den Erwartungswert $\langle \hat{a}_k^{\dagger\alpha+1} \hat{a}_k^{\beta+1} \rangle$ mit $\alpha + \beta + 2$ Leiteroperatoren gekoppelt. Demnach muss man, wenn man an der Dynamik eines bestimmten Momentes interessiert ist, auch Momente höherer Ordnung als dieses mit einbeziehen und berechnen. Dies ist ein Problem, welches wir an dieser Stelle nicht vereinfachen können, was wir jedoch später durch eine Beschränkung des FOCK-Raums auf kleine Teilchenzahlen näherungsweise lösen können.

5.2 Die Momentengleichung in der Molekularfeld-Näherung

Auf die im vorherigen Abschnitt hergeleitete Bewegungsgleichung (5.12) für die Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)}$ des BOSE–HUBBARD-Modells wenden wir in diesem Abschnitt die Molekularfeld-Näherung an. Näheres zur Molekularfeld-Näherung ist im Anhang D auf Seite 139 zu finden. Der Ansatz

dieser Näherung besteht im Wesentlichen darin, dass man die Leiteroperatoren \hat{a}_ℓ aufteilt in ein mittleres Feld $\langle \hat{a}_\ell \rangle = \Psi_\ell$ und in operatorwertige Fluktuationen $\delta \hat{a}_\ell$ hierum:

$$\hat{a}_\ell = \Psi_\ell + \delta \hat{a}_\ell. \quad (5.13)$$

Das Moment $\mathcal{M}_{0,1}^{(\ell)} = \Psi_\ell$ wird als Ordnungsparameter bezeichnet und charakterisiert den MOTT-Superfluid-Phasenübergang. Näheres dazu folgt im nächsten Abschnitt 5.3.

Die eigentliche Näherung besteht darin, dass Produkte von Fluktuationen von Leiteroperatoren verschiedener Gitterplätze vernachlässigt werden, d. h. :

$$\delta \hat{a}_i \delta \hat{a}_j \approx 0, \quad \text{für } i \neq j. \quad (5.14)$$

Dies führt zu folgender Aufspaltung bei Produkten von Leiteroperatoren, wobei \hat{f}_1 und \hat{f}_2 Funktionen von Leiteroperatoren jeweils verschiedener Gitterplätze (d. h. $i \neq k$) sind:

$$\hat{f}_1(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \hat{f}_2(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) = \langle \hat{f}_1(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \rangle \hat{f}_2(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) + \hat{f}_1(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \langle \hat{f}_2(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) \rangle - \langle \hat{f}_1(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \rangle \langle \hat{f}_2(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) \rangle. \quad (5.15)$$

Die Molekularfeld-Näherung kann nur auf den Tunnel-Term angewendet werden, da dieser als einziger in der Momentengleichung strikt nicht-lokal ist.

Als nächstes nehmen wir an, dass das zu betrachtende System homogen ist. Wir vernachlässigen damit jegliche Randeffekte. Diese Vereinfachung werden durch die Ersetzungen

$$\hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) \longrightarrow \hat{f}(\hat{a}^\dagger, \hat{a}), \quad \text{sowie} \quad (5.16a)$$

$$\hat{f}_1(\Psi_k^*, \Psi_k) \sum_{i \in \mathcal{I}} \hat{f}_2(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \longrightarrow \hat{f}_1(\Psi^*, \Psi) \hat{f}_2(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) |\mathcal{I}| \quad (5.16b)$$

realisiert. Mit $|\mathcal{I}|$ bezeichnen wir die Anzahl der Elemente der Menge \mathcal{I} . In Gleichung (5.12) tritt die Summe über alle nächsten Nachbarn des Gitterplatzes k auf. Die Anzahl z aller nächsten Nachbarn jedes Gitterplatzes hängt von der Symmetrie des Gitters und der räumlichen Dimension des Systems ab und wird als Koordinationszahl bezeichnet. Im Falle eines Gitters mit kubischer Symmetrie gilt $z = 2D$, mit der räumlichen Dimension D des Systems.

Da die Momente nun vom Gitterplatz unabhängig sind, definieren wir:

$$\boxed{\mathcal{M}_{\alpha,\beta} := \langle \hat{a}^{\dagger\alpha} \hat{a}^\beta \rangle}. \quad (5.17)$$

Die Momente sind, wenn man sie als Matrizen betrachtet, hermitesch, d. h.:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^* = \mathcal{M}_{\beta,\alpha}. \quad (5.18)$$

Außerdem sind die Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}$ im Allgemeinen komplexe Größen. Im Speziellen sind die Momente mit $\alpha = \beta$ jedoch rein reell. Dies ist klar, da es sich in diesem Fall um Erwartungswerte von Potenzen des Teilchenzahloperators \hat{n} handelt. Dieser ist ein hermitescher Operator.

Dass es sich bei dem Operator $\hat{a}^{\dagger\alpha} \hat{a}^\alpha$ tatsächlich nur um ein Polynom in dem Teilchenzahloperator \hat{n} handelt, lässt sich einfach zeigen. Dazu betrachtet man entweder direkt die Matrixelemente von $\hat{a}^{\dagger\alpha} \hat{a}^\alpha$, oder die Kommutator-Algebra der Leiteroperatoren. Wir gehen den zweiten Weg und spalten dazu im Operator $\hat{a}^{\dagger\alpha} \hat{a}^\alpha$ ein Teilchenzahloperator \hat{n} ab und kommutieren diesen anschließend unter Beachtung der Kommutatorrelation (5.9c) nach links durch:

$$\hat{a}^{\dagger\alpha} \hat{a}^\alpha = \hat{a}^{\dagger\alpha-1} \hat{n} \hat{a}^{\alpha-1} = (\hat{n} - \alpha + 1) \hat{a}^{\dagger\alpha-1} \hat{a}^{\alpha-1}. \quad (5.19)$$

Für den Operator $\hat{a}^{\dagger\alpha-1} \hat{a}^{\alpha-1}$ verfährt man genauso. Wir können demnach iterativ vorgehen und erhalten nach $(\alpha - 1)$ Schritten:

$$\begin{aligned} \hat{a}^{\dagger\alpha} \hat{a}^\alpha &= (\hat{n} - \alpha + 1)(\hat{n} - \alpha + 2) \cdots (\hat{n} - \alpha + \alpha - 1)(\hat{n} - \alpha + \alpha) \hat{a}^{\dagger 0} \hat{a}^0 \\ \hat{a}^{\dagger\alpha} \hat{a}^\alpha &= \hat{n}(\hat{n} - 1) \cdots (\hat{n} - \alpha + 1) \end{aligned} \quad (5.20)$$

Damit ist $\hat{a}^{\dagger\alpha} \hat{a}^\alpha$ wie behauptet lediglich ein Polynom in dem Teilchenzahloperator \hat{n} .

Mit der Definition (5.17) der Momente, der Molekularfeld-Näherung (5.15) sowie der Homogenitätsannahme gemäß Gleichung (5.16) erhalten wir für die Momentengleichung (5.12):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(t) &= -Jz [\beta \Psi(t) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}(t) - \alpha \Psi^*(t) \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}(t)] + \\ &+ U(\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1}(t) + \frac{1}{2} U (\beta(\beta - 1) - \alpha(\alpha - 1)) \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(t). \end{aligned} \quad (5.21)$$

Schließlich wollen wir dimensionslose Größen einführen. Dabei folgen wir der gängigen Konvention im BOSE-HUBBARD-Modell und drücken sowohl die Energieskala als auch die Zeitskala durch die Wechselwirkungsstärke U aus:

$$\boxed{\tilde{J} = \frac{Jz}{U}, \quad \tau = \frac{Ut}{\hbar}.} \quad (5.22)$$

Damit schreibt sich die Momentengleichung:

$$\boxed{i \frac{d}{d\tau} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(\tau) = -\tilde{J} [\beta \Psi(\tau) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}(\tau) - \alpha \Psi^*(\tau) \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}(\tau)] + (\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1}(\tau) + \frac{1}{2} (\beta(\beta - 1) - \alpha(\alpha - 1)) \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(\tau).} \quad (5.23)$$

Diese Momentengleichung in der Molekularfeld-Näherung steht im Mittelpunkt dieses Kapitels und soll im Weiteren als Ausgangspunkt für die Betrachtungen des MOTT-Superfluid-Phasenüberganges herangezogen werden.

5.3 Der MOTT-Superfluid-Phasenübergang

Im Folgenden wollen wir den MOTT-Superfluid-Phasenübergang mit Hilfe der Momentengleichung (5.23) in der Molekularfeld-Näherung ausrechnen. Die superfluide Phase ist durch einen endlichen Ordnungsparameter $\Psi \neq 0$ definiert, wohingegen in der MOTT-Phase der Ordnungsparameter verschwindet. Wir sind hauptsächlich an der Phasengrenze interessiert. Diese ist durch den Grenzfall $\Psi \rightarrow 0$ definiert

Da sowohl die MOTT- als auch die superfluide Phase im BOSE-HUBBARD-Modell Phasen im thermodynamischen Gleichgewicht sind, interessieren uns nur stationäre Gleichgewichtszustände. Wir betrachten dazu folgende Phasentransformation der Leiteroperatoren:

$$\hat{a}(\tau) \longrightarrow \hat{a}(\tau) e^{-i\phi(\tau)}. \quad (5.24)$$

Dabei ist $\phi(\tau)$ eine von der Zeit abhängige Phase. Die Momente (5.17) transformieren sich entsprechend gemäß:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta}(\tau) \longrightarrow \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(\tau) e^{-i\phi(\tau)(\beta-\alpha)}. \quad (5.25)$$

Aus der zeitlichen Ableitung der Momente wird dann:

$$i \frac{d}{d\tau} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(\tau) \longrightarrow \left[i \frac{d}{d\tau} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(\tau) + (\beta - \alpha) \frac{d\phi}{d\tau} \right] e^{-i\phi(\tau)(\beta-\alpha)}. \quad (5.26)$$

Der stationäre Zustand des Systems entspricht nun dem Fall, dass die zeitlichen Ableitungen der Momente verschwinden und dass die Phase $\phi(\tau)$ aus Gleichung (5.24) linear in der Zeit ist:

$$\phi(\tau) = \tilde{\mu}\tau + \phi. \quad (5.27)$$

Mit Hilfe von quantenstatistischen Rechnungen lässt sich zeigen, dass $\tilde{\mu}$ das chemische Potential der Thermodynamik ist. Die zeitunabhängige Phase ϕ können wir nutzen, um den Ordnungsparameter Ψ im stationären Fall reell zu wählen. Dies werden wir an dieser Stelle noch nicht tun, wir behalten jedoch im Hinterkopf, dass wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\Psi^* = \Psi$ setzen können. Unsere Momentengleichung (5.23) nimmt dann für stationäre Zustände folgende Form an:

$$0 = -\tilde{J}(\beta\Psi\mathcal{M}_{\alpha,\beta-1} - \alpha\Psi^*\mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}) + (\beta - \alpha)\mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1} + \frac{1}{2}(\beta(\beta-1) - \alpha(\alpha-1))\mathcal{M}_{\alpha,\beta} - \tilde{\mu}(\beta - \alpha)\mathcal{M}_{\alpha,\beta}. \quad (5.28)$$

Dies ist die Form der Momentengleichung, aus welcher wir im Folgenden alle von uns verwendeten Gleichungen ableiten werden.

Mit Hilfe der Momentengleichung (5.28) stellen wir zunächst eine Gleichung für den Ordnungsparameter Ψ auf. Diese erhalten wir aus der Momentengleichung für $\alpha = 0$ und $\beta = 1$. Es gilt:

$$0 = -\tilde{J}\Psi\mathcal{M}_{0,0} + \mathcal{M}_{1,2} - \tilde{\mu}\Psi. \quad (5.29)$$

Wir erinnern an die Identität: $\mathcal{M}_{0,1} = \Psi$. Da per definitionem $\mathcal{M}_{0,0} = \langle 1 \rangle = 1$ gilt, erhalten wir als Ordnungsparameter-Gleichung:

$$0 = -(\tilde{J} + \tilde{\mu})\Psi + \mathcal{M}_{1,2}. \quad (5.30)$$

Sind wir in der superfluiden Phase, so befindet sich das System in einem annähernd kohärenten Zustand und für die Momente gilt in diesem Fall: $\mathcal{M}_{\alpha,\beta} \approx \Psi^{*\alpha} \Psi^\beta$. Dann entspricht die Ordnungsparameter-Gleichung (5.30) der stationären GROSS-PITAEVSKII-Gleichung: $0 = -(\tilde{J} + \tilde{\mu})\Psi + U|\Psi|^2\Psi$. Siehe dazu z. B. PITAEVSKII und STRINGARI [2004].

Wir sehen, dass die Gleichung (5.30) für den Ordnungsparameter an ein Moment höherer Ordnung koppelt. Der Ursprung dieser Kopplung der Momente liegt in der Wechselwirkung der Bosonen. Ist $U = 0$, so koppelt das Moment $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}$ über das Tunnelmatrixelement nur an Momente niedrigerer Ordnung.

Um die Gleichung (5.30) für den Ordnungsparameter zu lösen, betrachten wir die Gleichung für das Moment $\mathcal{M}_{1,2}$ näher. Dafür setzen wir $\alpha = 1$ und $\beta = 2$ in die stationäre Momentengleichung (5.28) ein und erhalten:

$$0 = -2\tilde{J}\Psi\mathcal{M}_{1,1} + \tilde{J}\Psi^*\mathcal{M}_{0,2} + \mathcal{M}_{2,3} + \mathcal{M}_{1,2} - \tilde{\mu}\mathcal{M}_{1,2}. \quad (5.31)$$

Das Moment $\mathcal{M}_{1,1} = \langle \hat{a}^\dagger \hat{a} \rangle$ ist nichts Anderes als die Teilchenzahl auf einem Gitterplatz oder die Teilchendichte n im Gitter. Damit wird aus der Gleichung (5.31) für das Moment $\mathcal{M}_{1,2}$:

$$0 = \mathcal{M}_{2,3} + (1 - \bar{\mu})\mathcal{M}_{1,2} + \tilde{\mathcal{J}}\mathcal{M}_{0,2}\Psi^* - 2\tilde{\mathcal{J}}n\Psi. \quad (5.32)$$

Auch hier sehen wir, dass das Moment $\mathcal{M}_{1,2}$ an höhere Momente koppelt. Es taucht allerdings mit $\mathcal{M}_{0,2}$ auch ein Moment niedrigerer Ordnung auf.

Durch Setzen von $\alpha = 0$ und $\beta = 2$ in der stationären Momentengleichung (5.28) erhalten wir eine weitere Gleichung für das Moment $\mathcal{M}_{0,2}$:

$$0 = -2\tilde{\mathcal{J}}\Psi^2 + 2\mathcal{M}_{1,3} + \mathcal{M}_{0,2} - 2\bar{\mu}\mathcal{M}_{0,2} = 2\mathcal{M}_{1,3} + (1 - 2\bar{\mu})\mathcal{M}_{0,2} - 2\tilde{\mathcal{J}}\Psi^2. \quad (5.33)$$

Man sieht, dass man die Gleichungen (5.30), (5.32) und (5.33) nicht so einfach lösen kann, da man kein geschlossenes System von Gleichungen für die Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}$ findet. Es treten immer mehr Unbekannte als Gleichungen auf. Daher liegt es nahe, die Gleichungen ab einer bestimmten Ordnung der Momente abubrechen und so ein geschlossenes System von Gleichungen zu erhalten, welches lösbar ist. Die Frage ist nur, wie man abbricht. Dazu werden wir im Folgenden die Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}$ nach dem Ordnungsparameter Ψ entwickeln. Dadurch sehen wir, welche Terme in der Momentengleichung in der Nähe des Phasenübergangs wirklich eine Rolle spielen. Zusätzlich werden wir den FOCK-Raum begrenzen, um letztendlich ein geschlossenes System von Gleichungen zu erhalten.

5.3.1 Eine approximative Lösung

Es ist sinnvoll, die Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}$ in der Nähe des Phasenüberganges nach dem Ordnungsparameter zu entwickeln, da dieser dann klein ist. Dieses Vorgehen entspricht einer LANDAU-Entwicklung der freien Energie in der Theorie der Phasenübergänge zweiter Ordnung. In der Tat handelt es sich bei dem MOTT-Superfluid-Phasenübergang um einen Phasenübergang zweiter Ordnung.

Wir entwickeln zunächst ganz allgemein die Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}$ nach dem Ordnungsparameter Ψ und seinem komplex konjugierten Ψ^* . Die Koeffizienten dieser Entwicklung bezeichnen wir mit $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(n,m)}$. Es gilt dann:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \Psi^{*n} \Psi^m \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(n,m)}. \quad (5.34)$$

In linearer Ordnung in Ψ und Ψ^* lautet diese Entwicklung: $\mathcal{M}_{\alpha,\beta} \approx \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(0,0)} + \Psi \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(0,1)} + \Psi^* \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(1,0)}$.

Wir haben in Gleichung (5.27) gesehen, dass die Leiteroperatoren im stationären Zustand bis auf eine Phase ϕ bestimmt sind. Diese wollen wir nun ausnutzen, um die Entwicklung der Momente in Gleichung (5.34) zu vereinfachen. Wir betrachten dazu die Phasentransformation $\hat{a} \rightarrow \hat{a}e^{-i\phi}$. Die Momente transformieren sich dann gemäß $\mathcal{M}_{\alpha,\beta} \rightarrow \mathcal{M}_{\alpha,\beta}e^{i(\alpha-\beta)\phi}$. Aus der Entwicklung (5.34) wird dann:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta}e^{i(\alpha-\beta)\phi} = \sum_{n,m=0}^{\infty} \Psi^{*n} \Psi^m \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(n,m)} e^{i(n-m)\phi}. \quad (5.35)$$

Die Entwicklung der Momente kann damit nur dann invariant unter einer Phasentransformation sein, wenn in der Entwicklung (5.34) nur Koeffizienten $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(n,m)}$ auftauchen, für welche

$n - m = \alpha - \beta$ gilt. Wir unterscheiden zwei Fälle. Im ersten Fall sei $\alpha - \beta > 0$. Dann können wir die Entwicklung der Momente schreiben als:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta} = \sum_{m=0}^{\infty} \Psi^{*m+\alpha-\beta} \Psi^m \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(m+\alpha-\beta,m)} = \Psi^{*\alpha-\beta} \sum_n |\Psi|^{2n} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(n+\alpha-\beta,n)}. \quad (5.36)$$

Im Fall von $\alpha - \beta < 0$ können wir umgekehrt für die Momente schreiben:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta} = \sum_{n=0}^{\infty} \Psi^{*n} \Psi^{n-\alpha+\beta} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(n,n-\alpha+\beta)} = \Psi^{-\alpha+\beta} \sum_n |\Psi|^{2n} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(n,m-\alpha+\beta)}. \quad (5.37)$$

An Hand dieser Formel sehen wir, dass die Momente mit $\alpha < \beta$ in führender Ordnung mit $\Psi^{\beta-\alpha}$ gehen. Speziell gilt beispielsweise für die bereits oben betrachteten Momente $\mathcal{M}_{0,2}$ und $\mathcal{M}_{1,2}$:

$$\mathcal{M}_{0,2} = \Psi^2 \left(\mathcal{M}_{0,2}^{(0,2)} + |\Psi|^2 \mathcal{M}_{0,2}^{(1,3)} + \dots \right), \quad (5.38)$$

$$\mathcal{M}_{1,2} = \Psi \left(\mathcal{M}_{1,2}^{(0,1)} + |\Psi|^2 \mathcal{M}_{1,2}^{(1,2)} + \dots \right). \quad (5.39)$$

Um die Notation zu vereinfachen, wählen wir die Phase ϕ der stationären Zustände derart, dass der Ordnungsparameter reell ist. Die Entwicklung der Momente lautet dann:

$$\boxed{\mathcal{M}_{\alpha,\beta} = \Psi^{|\beta-\alpha|} \sum_{\ell=0}^{\infty} \Psi^{2\ell} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(2\ell+|\alpha-\beta|)}}. \quad (5.40)$$

Mit Hilfe dieser Entwicklung können wir die Momentengleichung (5.28) systematisch nach Ordnungen in Ψ lösen. Betrachten wir also die Ordnungsparameter-Gleichung (5.30) und setzen für $\mathcal{M}_{1,2}$ die Entwicklung (5.40) ein:

$$0 = -(\tilde{\mathcal{J}} + \tilde{\mu}) \Psi + \Psi \left(\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} + \Psi^2 \mathcal{M}_{1,2}^{(3)} + \dots \right) = \left[-(\tilde{\mathcal{J}} + \tilde{\mu}) + \mathcal{M}_{1,2}^{(1)} \right] \Psi + \mathcal{M}_{1,2}^{(3)} \Psi^3 + \mathcal{O}(\Psi^5). \quad (5.41)$$

Neben der trivialen Lösung $\Psi = 0$ besitzt diese Gleichung auch die Lösung:

$$\Psi^2 \approx \frac{\tilde{\mathcal{J}} + \tilde{\mu} - \mathcal{M}_{1,2}^{(1)}}{\mathcal{M}_{1,2}^{(3)}}. \quad (5.42)$$

Jetzt gilt es, die Koeffizienten $\mathcal{M}_{1,2}^{(1)}$ und $\mathcal{M}_{1,2}^{(3)}$ zu bestimmen. Beide erhalten wir aus der Gleichung (5.32) für das Moment $\mathcal{M}_{1,2}$, indem wir die Entwicklung (5.40) für $\mathcal{M}_{1,2}$ einsetzen. Behalten wir nur Terme bis zur Ordnung Ψ^3 , so bekommen wir:

$$\begin{aligned} 0 &= \Psi \left(\mathcal{M}_{2,3}^{(1)} + \Psi^2 \mathcal{M}_{2,3}^{(3)} + \dots \right) + (1 - \tilde{\mu}) \Psi \left(\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} + \Psi^2 \mathcal{M}_{1,2}^{(3)} + \dots \right) + \tilde{\mathcal{J}} \Psi^2 \left(\mathcal{M}_{0,2}^{(2)} + \dots \right) \Psi - 2\tilde{\mathcal{J}} n \Psi \\ &= \left[\mathcal{M}_{2,3}^{(1)} + (1 - \tilde{\mu}) \mathcal{M}_{1,2}^{(1)} - 2\tilde{\mathcal{J}} n \right] \Psi + \left[\mathcal{M}_{2,3}^{(3)} + (1 - \tilde{\mu}) \mathcal{M}_{1,2}^{(3)} + \tilde{\mathcal{J}} \mathcal{M}_{0,2}^{(2)} \right] \Psi^3 + \mathcal{O}(\Psi^5). \end{aligned} \quad (5.43)$$

Ist der Ordnungsparameter Ψ ungleich Null, so muss diese Gleichung für jede Ordnung in Ψ einzeln erfüllt sein. Die niedrigste Ordnung liefert eine Gleichung für $\mathcal{M}_{1,2}^{(1)}$:

$$\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} = \frac{2\tilde{\mathcal{J}}n - \mathcal{M}_{2,3}^{(1)}}{1 - \tilde{\mu}}. \quad (5.44)$$

Aus der nächsten Ordnung bekommen wir entsprechend den Koeffizienten $\mathcal{M}_{1,2}^{(3)}$:

$$\mathcal{M}_{1,2}^{(3)} = -\frac{\tilde{\mathcal{J}}\mathcal{M}_{0,2}^{(2)} + \mathcal{M}_{2,3}^{(3)}}{1 - \tilde{\mu}}. \quad (5.45)$$

Der Vorteil der Entwicklung der Momente nach dem Ordnungsparameter ist, dass wir direkt sehen können, welche Terme in der Nähe des Phasenübergangs relevant sind. Das Problem der Kopplung der einzelnen Momente zu immer höheren Momenten ist damit allerdings nicht gelöst. Um diese Kopplung abzubrechen, begrenzen wir schließlich den zu Grunde liegenden FOCK-Raum auf maximal zwei Teilchen. Dann verschwinden die Momente $\mathcal{M}_{2+x,2+y}$ mit $x, y > 0$ und wir erhalten anstatt den Gleichungen (5.44) und (5.45):

$$\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} \approx \frac{2\tilde{\mathcal{J}}n}{1 - \tilde{\mu}} \quad \text{und} \quad \mathcal{M}_{1,2}^{(3)} \approx -\frac{\tilde{\mathcal{J}}\mathcal{M}_{0,2}^{(2)}}{1 - \tilde{\mu}}. \quad (5.46)$$

Die einzige Größe, die uns jetzt noch zur Bestimmung des Ordnungsparameters fehlt, ist der Koeffizient $\mathcal{M}_{0,2}^{(2)}$. Diesen können wir uns allerdings auf eine analoge Weise aus der Gleichung (5.33) für das Moment $\mathcal{M}_{0,2}$ herleiten. Für die Gleichung (5.33) gilt bis zur Ordnung Ψ^2 :

$$0 = \left[2\mathcal{M}_{1,3}^{(2)} + (1 - 2\tilde{\mu})\mathcal{M}_{0,2}^{(2)} - 2\tilde{\mathcal{J}} \right] \Psi^2 + \mathcal{O}(\Psi^4). \quad (5.47)$$

Mit der Einschränkung des FOCK-Raumes auf zwei Teilchen gilt dann für den Koeffizienten $\mathcal{M}_{0,2}^{(2)}$:

$$\mathcal{M}_{0,2}^{(2)} \approx \frac{2\tilde{\mathcal{J}}}{1 - 2\tilde{\mu}}. \quad (5.48)$$

Dieses Ergebnis setzen wir in die Gleichung (5.46) für $\mathcal{M}_{1,2}^{(3)}$ ein und erhalten dann mit der Gleichung (5.42) für den Ordnungsparameter:

$$\Psi^2 \approx \frac{\tilde{\mathcal{J}}(2n + \tilde{\mu} - 1) + \tilde{\mu}(\tilde{\mu} - 1)}{2\tilde{\mathcal{J}}^2} (\tilde{\mu} - 1)(2\tilde{\mu} - 1). \quad (5.49)$$

Auf Grund der Begrenzung des FOCK-Raumes auf nur zwei Teilchen können wir nicht erwarten, dass der Ordnungsparameter der superfluiden Phase korrekt wiedergegeben wird, da im Superfluid die Teilchenzahl fluktuiert. Im Gegensatz dazu ist die Teilchenzahl in der MOTT-Phase bei $T = 0$ konstant. Hier sollte unsere Beschreibung besser funktionieren. Darum lassen wir den Ordnungsparameter (5.49) gegen Null gehen und erhalten so für die Phasengrenze zwischen dem MOTT- und dem superfluiden Zustand:

$$\tilde{\mathcal{J}} = -\frac{\tilde{\mu}(\tilde{\mu} - 1)}{\tilde{\mu} + 2n - 1}. \quad (5.50)$$

Für die relevante Teilchenzahl $n = 1$ in unserem begrenzten FOCK-Raum erhalten wir damit die korrekte Phasengrenze der Molekularfeld-Näherung [HOFFMANN, 2007]:

$$\tilde{\mathcal{J}} = -\frac{\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-1)}{\tilde{\mu}+1}. \quad (5.51)$$

Um die Parametrisierung der Phasengrenze auch für größere Teilchenzahlen zu erhalten, ist es notwendig, den FOCK-Raum zu vergrößern und die Momente $\mathcal{M}_{2,3}^{(3)}$ und $\mathcal{M}_{1,3}^{(2)}$ in die Berechnung mit einzubeziehen. Tut man dies und begrenzt den FOCK-Raum auf maximal drei Teilchen, d. h. $\mathcal{M}_{3+x,3+y} = 0$ für $x, y > 0$, so erhalten wir für die Parametrisierung der Phasengrenze:

$$\tilde{\mathcal{J}} = -\frac{\tilde{\mu}(\tilde{\mu}-1)(\tilde{\mu}-2)}{(\tilde{\mu}-1)(\tilde{\mu}-2) + 2n(\tilde{\mu}-2) + 3n(n-1)}. \quad (5.52)$$

Dies reproduziert für die Teilchenzahlen $n = 1$ oder $n = 2$ die Phasengrenze der Molekularfeld-Näherung [HOFFMANN, 2007]. Daraus kann man schließen, dass man die Phasengrenze für Teilchenzahlen von $n = 1, 2, \dots, N$ der MOTT-Phase dadurch erhält, dass man den Fock-Raum auf $N + 1$ Teilchen beschränkt und dann die Gleichung (5.30) für den Ordnungsparameter bis zur ersten Ordnung in Ψ löst. Dies wird für größer werdende FOCK-Räume immer komplizierter. Geht man diese Rechnung jedoch von Hand durch, so erkennt man ein bestimmtes sich wiederholendes Schema, aus welchem man den Schluss ziehen kann, dass sich die Parametrisierung der Phasengrenze für beliebig viele Teilchenzahlen der MOTT-Phase rekursiv finden lässt. Dies werden wir im folgenden Abschnitt untersuchen.

5.3.2 Die exakte Lösung

In diesem Unterabschnitt sind wir an der Phasengrenze des MOTT-Superfluid-Phasenüberganges interessiert. Die Bestimmung des Ordnungsparameters verfolgen wir nicht weiter. Betrachten wir jedoch noch einmal die Gleichung (5.30) für den Ordnungsparameter mit den nach dem Ordnungsparameter entwickelten Moment $\mathcal{M}_{1,2}$:

$$0 = \left[-(\tilde{\mathcal{J}} + \tilde{\mu})\Psi + \mathcal{M}_{1,2}^{(1)} \right] \Psi + \mathcal{O}(\Psi^3). \quad (5.53)$$

In unmittelbarer Nähe der Phasengrenze sind nur die Terme von der Ordnung Ψ von Bedeutung, d. h. unsere Aufgabe besteht darin, das Moment $\mathcal{M}_{1,2}^{(1)}$ zu bestimmen. Anstatt nun jedoch die Momentengleichung für $\mathcal{M}_{1,2}$ aufzustellen, betrachten wir ganz allgemein die Momentengleichung (5.28) für Momente der Form $\mathcal{M}_{\ell, \ell+1}$:

$$0 = -\tilde{\mathcal{J}} \left[(\ell+1)\Psi \mathcal{M}_{\ell, \ell} - n\Psi \mathcal{M}_{\ell-1, \ell+1} \right] + \mathcal{M}_{\ell+1, \ell+2} + (2\ell - \tilde{\mu})\mathcal{M}_{\ell, \ell+1}. \quad (5.54)$$

Hier setzen wir die Entwicklung (5.40) der Momente nach dem Ordnungsparameter ein:

$$0 = \left[\mathcal{M}_{\ell+1, \ell+2}^{(1)} + (\ell - \tilde{\mu})\mathcal{M}_{\ell, \ell+1}^{(1)} - \tilde{\mathcal{J}}(\ell+1)\mathcal{M}_{\ell, \ell}^{(0)} \right] \Psi + \mathcal{O}(\Psi^3). \quad (5.55)$$

An dieser Stelle tritt ein Problem unserer Methode auf: Wir haben keine Gleichung für die diagonalen Momente $\mathcal{M}_{\ell, \ell}$, da diese Momente gemäß der Momentengleichung (5.28) und der Einschränkung $\Psi^* = \Psi$ zeitlich konstant sind. In der obigen Gleichung tritt allerdings nur der Koeffizient des Momentes $\mathcal{M}_{\ell, \ell}$ auf, welcher in der Entwicklung nach dem Ordnungsparameter zu Ψ^0 gehört. Damit gilt in der MOTT-Phase bei $T = 0$: $\mathcal{M}_{\ell, \ell} = \mathcal{M}_{\ell, \ell}^{(0)}$. In der MOTT-Phase können wir das Moment $\mathcal{M}_{\ell, \ell}$ jedoch ausrechnen, da hier die Teilchenzahl fest ist. Sei also n die Teilchenzahl der zu betrachtenden MOTT-Phase, dann gilt gemäß Formel (5.20):

$$\mathcal{M}_{\ell,\ell} = n(n-1)(n-2)\dots(n-\ell+1) = \frac{n!}{(n-\ell)!}. \quad (5.56)$$

Für $\ell > n$ ist $\mathcal{M}_{\ell,\ell} = 0$. Dieses Ergebnis setzen wir in die Gleichung (5.55) ein:

$$0 = \left[\mathcal{M}_{\ell+1,\ell+2}^{(1)} + (\ell - \tilde{\mu}) \mathcal{M}_{\ell,\ell+1}^{(1)} - \tilde{\mathcal{J}}(\ell+1) \frac{n!}{(n-\ell)!} \right] \Psi + \mathcal{O}(\Psi^3). \quad (5.57)$$

Mit der Abkürzung:

$$m(\ell) := \mathcal{M}_{\ell,\ell+1}^{(1)} \quad (5.58)$$

haben wir dann bis zur ersten Ordnung in Ψ folgende Gleichung zu lösen:

$$m(\ell+1) = (\tilde{\mu} - \ell)m(\ell) + \tilde{\mathcal{J}}(1+\ell) \frac{n!}{(n-\ell)!}. \quad (5.59)$$

Zur Lösung dieser *Rekursions-* oder *Differenzgleichung* gibt es verschiedene Methoden. Zum Einen können wir die Rekursion direkt iterativ auflösen. Näheres dazu liest man z. B. in dem einführenden Buch von ELAYDI [2005] nach. Wir wollen jedoch eine andere Methode verwenden. Diese hat zwar den Nachteil, dass sie ein wenig aufwendiger ist, der Vorteil ist jedoch, dass die *Differenzgleichung* in eine gewöhnliche *Differentialgleichung* umgeschrieben werden kann, für welche es weit etabliertere Lösungsmethoden gibt. Die Idee dazu stammt aus dem fortgeschrittenen Buch von CHENG [2003] und besteht darin, dass man eine sogenannte *erzeugende Funktion* $G(x)$ einführt, die wie folgt definiert ist:

$$G(x) = m(0) + x m(1) + \frac{1}{2!} x^2 m(2) + \frac{1}{3!} x^3 m(3) + \dots = \sum_{p=0}^{\infty} m(p) \frac{x^p}{p!}. \quad (5.60)$$

Unabhängig von der erzeugenden Funktion definieren wir eine lineare Abbildung \mathcal{T} von komplexen Folgen $c(p)$ auf reellwertige Funktionen $\mathcal{T}[c(p)](x)$ durch:

$$\mathcal{T}[c(p)](x) := \sum_{p=0}^{\infty} c(p) \frac{x^p}{p!}. \quad (5.61)$$

Die erzeugende Funktion $G(x)$ ist dann gerade der Spezialfall $\mathcal{T}[m(p)](x)$.

Wie man außerdem leicht sieht, sind die Momente $m(p)$ nichts Anderes als die TAYLOR-Koeffizienten der erzeugenden Funktion $G(x)$. Man erhält die Momente demnach durch Ableiten der erzeugenden Funktion am Nullpunkt:

$$m(\ell) = \left. \frac{d^\ell}{dx^\ell} G(x) \right|_{x=0}. \quad (5.62)$$

Nun wenden wir die Abbildung \mathcal{T} auf die Differenzgleichung (5.59) an. Da \mathcal{T} eine lineare Abbildung ist, können wir die drei Terme einzeln betrachten. Schauen wir uns zuerst die linke Seite der Differenzgleichung (5.59) an:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}[m(\ell+1)](x) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} m(\ell+1) \frac{x^\ell}{\ell!} = \sum_{\ell=1}^{\infty} m(\ell) \frac{x^{\ell-1}}{(\ell-1)!} \\
 &= \frac{d}{dx} \sum_{\ell=1}^{\infty} m(\ell) \frac{x^\ell}{\ell!} = \frac{d}{dx} \sum_{\ell=0}^{\infty} m(\ell) \frac{x^\ell}{\ell!} \\
 \Rightarrow \mathcal{T}[m(\ell+1)](x) &= \frac{d}{dx} \mathcal{T}[m(\ell)](x) = \frac{d}{dx} G(x).
 \end{aligned} \tag{5.63}$$

Hier haben wir im ersten Schritt den Summationsindex verschoben und im dritten Schritt die Summe wieder von Null an beginnen lassen, da der von x unabhängige nullte Summand durch die davor stehende Ableitung vernichtet wird.

Bei der Transformation des ersten Terms auf der rechten Seite der Differenzgleichung (5.59) ist nur der Teil proportional zu ℓ nicht-trivial:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}[\ell m(\ell)](x) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \ell m(\ell) \frac{x^\ell}{\ell!} = x \frac{d}{dx} \sum_{\ell=0}^{\infty} m(\ell) \frac{x^\ell}{\ell!} \\
 \Rightarrow \mathcal{T}[\ell m(\ell)](x) &= x \frac{d}{dx} \mathcal{T}[m(\ell)](x) = x \frac{d}{dx} G(x).
 \end{aligned} \tag{5.64}$$

Als letztes transformieren wir den zweiten Term auf der rechten Seite von Gleichung (5.59), welcher als Inhomogenität bezeichnet wird:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1+\ell}{(n-\ell)!} n! \frac{x^\ell}{\ell!} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (1+\ell) \binom{n}{\ell} x^\ell = \sum_{\ell=0}^n (1+\ell) \binom{n}{\ell} x^\ell. \tag{5.65}$$

Hier findet der *binomische Satz* [ABRAMOWITZ und STEGUN, 1972, Gl. 3.6.8] Anwendung:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \binom{n}{\ell} x^\ell = (1+x)^n. \tag{5.66}$$

Damit gilt auch:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \ell \binom{n}{\ell} x^\ell = x \frac{d}{dx} \sum_{\ell=0}^{\infty} \binom{n}{\ell} x^\ell = x \frac{d}{dx} (1+x)^n = nx(1+x)^{n-1}, \tag{5.67}$$

Dabei sind $\binom{n}{\ell} = \frac{n!}{\ell!(n-\ell)!}$ die *Binomialkoeffizienten*. Dies setzen wir in Gleichung (5.65) ein und erhalten einen kompakten summenlosen Ausdruck:

$$\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1+\ell}{(n-\ell)!} n! \frac{x^\ell}{\ell!} = \left(1+n \frac{x}{1+x}\right) (1+x)^n. \tag{5.68}$$

Fügen wir nun alle transformierten Terme der Gleichungen (5.63), (5.64) und (5.68) zusammen, so bekommen wir eine Differentialgleichung für die erzeugende Funktion $G(x)$:

$$(1+x)G'(x) - \tilde{\mu}G(x) = \tilde{J} \left(1+n \frac{x}{1+x}\right) (1+x)^n. \tag{5.69}$$

Damit wurde das Problem des Lösens der Differenzgleichung (5.59) in das Problem des Lösens der Differentialgleichung (5.69) umgewandelt. Da es sich bei der Differentialgleichung (5.69) um eine gewöhnliche nur von erster Ordnung mit nicht-konstanten Koeffizienten und einer Inhomogenität handelt, ist die Lösung dieses Problems relativ einfach. Der kanonische Weg besteht darin, zunächst die zugehörige homogene Gleichung zu lösen:

$$(1+x)G'_{\text{hom}}(x) - \tilde{\mu}G_{\text{hom}}(x) = 0. \quad (5.70)$$

Die Methode der *Trennung der Variablen* und eine einmalige Integration liefert das Ergebnis:

$$G_{\text{hom}}(x) = C_1(1+x)^{\tilde{\mu}}. \quad (5.71)$$

Hier ist C_1 eine aus den Anfangsbedingungen zu bestimmende Integrationskonstante. Um die eigentliche inhomogene Differentialgleichung (5.69) zu lösen, wird diese Konstante C_1 nun eine Funktion von x , d. h., wir wählen als Ansatz:

$$G(x) = C_1(x)(1+x)^{\tilde{\mu}}. \quad (5.72)$$

Die erste Ableitung hiervon lautet:

$$G'(x) = C_1'(x)(1+x)^{\tilde{\mu}} + \frac{\tilde{\mu}}{1+x}G(x). \quad (5.73)$$

Der zweite Term löst gerade den homogenen Anteil der Gleichung (5.69) und wir erhalten eine Differentialgleichung für die Koeffizienten-Funktion $C_1(x)$:

$$(1+x)^{\tilde{\mu}+1}C_1'(x) = \tilde{J} \left(1 + n \frac{x}{1+x} \right) (1+x)^n. \quad (5.74)$$

Wie im homogenen Fall verwenden wir auch hier die Methode der Trennung der Variablen und können die Gleichung (5.74) einmal integrieren. So ergibt sich:

$$C_1(x) = \tilde{J} \int \left\{ (1+x)^{n-\tilde{\mu}-1} + nx(1+x)^{n-\tilde{\mu}-2} \right\} dx + C_2, \quad (5.75)$$

mit einer noch zu berechnenden Integrationskonstante C_2 . Der erste Teil des Integranden ist trivial zu integrieren. Den zweiten Term integrieren wir einmal partiell:

$$\int x(1+x)^a dx = \frac{x(1+x)^{a+1}}{a+1} - \frac{1}{a+1} \int (1+x)^{a+1} dx = \frac{x(1+x)^{a+1}}{a+1} - \frac{1}{a+1} \frac{(1+x)^{a+2}}{a+2}, \quad (5.76)$$

bis auf Integrationskonstanten und mit $a = n - \tilde{\mu} - 2$. Dies setzen wir in die Gleichung (5.75) ein und erhalten für die Koeffizienten-Funktion $C_1(x)$:

$$C_1(x) = \tilde{J} \left\{ \frac{1}{n-\tilde{\mu}} (1+x)^{n-\tilde{\mu}} + \frac{n}{n-\tilde{\mu}-1} x(1+x)^{n-\tilde{\mu}-1} - \frac{1}{n-\tilde{\mu}-1} \frac{n}{n-\tilde{\mu}} (1+x)^{n-\tilde{\mu}} \right\} + C_2. \quad (5.77)$$

Aus der geschweiften Klammer ziehen wir den Faktor $(1+x)^{n-\tilde{\mu}-1}$ heraus und bilden mit den übrigen drei Termen einen Hauptnenner:

$$\begin{aligned}
 C_1(x) &= \tilde{\mathcal{J}} \frac{(n - \tilde{\mu} - 1)(1 + x) + nx(n - \tilde{\mu}) - n(1 + x)}{(n - \tilde{\mu})(n - \tilde{\mu} - 1)} (1 + x)^{n - \tilde{\mu} - 1} + C_2 \\
 &= \tilde{\mathcal{J}} \frac{xn(n - \tilde{\mu}) - (\tilde{\mu} + 1)(1 + x)}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} (1 + x)^{n - \tilde{\mu} - 1} + C_2.
 \end{aligned} \tag{5.78}$$

Den Bruch können wir aufspalten in einen Term, welcher proportional zu x ist und einen konstanten Term:

$$C_1(x) = \tilde{\mathcal{J}} \left\{ x \frac{n(n - \tilde{\mu}) - (\tilde{\mu} + 1)}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} - \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} \right\} (1 + x)^{n - \tilde{\mu} - 1} + C_2. \tag{5.79}$$

Den Zähler des ersten Summanden in der geschweiften Klammer können wir in zwei Schritten teilweise auf die Form des Nenners bringen:

$$\begin{aligned}
 C_1(x) &= \tilde{\mathcal{J}} \left\{ x \frac{-\tilde{\mu}(n + 1) + (n - 1)(n + 1)}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} - \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} \right\} (1 + x)^{n - \tilde{\mu} - 1} + C_2 \\
 &= -\tilde{\mathcal{J}} \left\{ x \frac{(\tilde{\mu} - n + 1)(n + 1)}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} + \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} \right\} (1 + x)^{n - \tilde{\mu} - 1} + C_2 \\
 C_1(x) &= -\tilde{\mathcal{J}} \left\{ x \frac{n + 1}{\tilde{\mu} - n} + \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} \right\} (1 + x)^{n - \tilde{\mu} - 1} + C_2.
 \end{aligned} \tag{5.80}$$

Die Integrationskonstante C_2 wollen wir nun spezifizieren, indem wir die Anfangsbedingung für die erzeugende Funktion $G(x)$ einsetzen. Die Anfangsbedingung für $G(x)$ bekommen wir aus der Gleichung (5.62) mit $\ell = 0$, d. h.:

$$G(x = 0) = m(0) = \mathcal{M}_{0,1}^{(1)} = 1, \tag{5.81}$$

da $\Psi \stackrel{!}{=} \mathcal{M}_{0,1} = \Psi \left(\mathcal{M}_{0,1}^{(1)} + \Psi^2 \mathcal{M}_{0,1}^{(3)} + \dots \right)$ gelten muss. Gemäß dem Ansatz für die erzeugende Funktion $G(x)$ aus Gleichung (5.72) gilt dann:

$$\begin{aligned}
 1 = G(0) = C_1(0) &= -\tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} + C_2 \\
 \Rightarrow C_2 &= \left(1 + \tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} \right).
 \end{aligned} \tag{5.82}$$

Damit ist die Koeffizienten-Funktion $C_1(x)$ bestimmt, die Differentialgleichung (5.69) ist gelöst und wir können die erzeugende Funktion $G(x)$ aufstellen. Diese lautet:

$$G(x) = \left\{ -\tilde{\mathcal{J}} \left[x \frac{n + 1}{\tilde{\mu} - n} + \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} \right] (1 + x)^{n - \tilde{\mu} - 1} + \left[1 + \tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} \right] \right\} (1 + x)^{\tilde{\mu}}. \tag{5.83}$$

Löst man die geschweifte Klammer auf, so vereinfacht sich der Ausdruck für $G(x)$ wie folgt:

$$G(x) = -\tilde{\mathcal{J}} \left\{ x \frac{n + 1}{\tilde{\mu} - n} + \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} \right\} (1 + x)^{n - 1} + \left\{ \tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} + 1 \right\} (1 + x)^{\tilde{\mu}}. \tag{5.84}$$

Um die Lösung für die uns eigentlich interessierende Differenzgleichung (5.59) zu erhalten, müssen wir die erzeugende Funktion $G(x)$ gemäß Gleichung (5.62) an der Stelle $x = 0$ ableiten. Dazu führen wir die folgenden Ersetzungen ein:

$$A := -\tilde{J} \frac{n+1}{\tilde{\mu}-n}, \quad B := -\tilde{J} \frac{\tilde{\mu}+1}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} \quad \text{und} \quad C := \tilde{J} \frac{\tilde{\mu}+1}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} + 1, \quad (5.85)$$

womit sich die erzeugende Funktion (5.84) kurz als

$$G(x) = [Ax + B](1+x)^{n-1} + C(1+x)^{\tilde{\mu}} \quad (5.86)$$

schreibt. Diese gilt es nun ℓ -mal abzuleiten. Dazu erweist es sich als praktisch, den Ausdruck $(1+x)^z$ wieder zurück in eine binomische Reihe zu entwickeln:

$$(1+x)^z = \sum_{k=0}^{\infty} \binom{z}{k} x^k. \quad (5.87)$$

Da jedoch $\tilde{\mu}$ und damit auch z nicht notwendigerweise ganzzahlig ist, schreiben wir die *Binomialkoeffizienten* als $\binom{n}{z} = \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(z+1)\Gamma(n-z+1)}$. Hier haben wir die *Gammafunktion* $\Gamma(z)$ eingeführt. Die Gammafunktion ist die analytische Fortsetzung der Fakultätsfunktion und ist z. B. mittels der Funktionalgleichung

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \quad \text{mit} \quad \Gamma(1) = 1 \quad (5.88)$$

definiert [BRONSTEIN ET AL., 2001]. Für natürliche Zahlen z reduziert sich $\Gamma(z+1)$ auf die Fakultätsfunktion $z!$.

Benutzen wir nun die Entwicklung (5.87) in der Lösung für die erzeugende Funktion in der Form von Gleichung (5.86), so ergibt sich:

$$G(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \binom{n-1}{k} [Ax^{k+1} + Bx^k] + \binom{\tilde{\mu}}{k} Cx^k \right\}. \quad (5.89)$$

Da $G(x)$ lediglich aus Polynomen in x besteht, lässt sich die ℓ -te Ableitung einfach ausführen:

$$\begin{aligned} \frac{d^\ell}{dx^\ell} G(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \binom{n-1}{k} \left[A(k+1)k \cdots (k+1-(\ell-1))x^{k+1-\ell} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + Bk(k-1) \cdots (k-(\ell-1))x^{k-\ell} \right] + \binom{\tilde{\mu}}{k} Ck(k-1) \cdots (k-(\ell-1))x^{k-\ell} \right\} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \binom{n-1}{k} \left[A \frac{(k+1)!}{(k-\ell+1)!} x^{k+1-\ell} + B \frac{k!}{(k-\ell)!} x^{k-\ell} \right] + \binom{\tilde{\mu}}{k} C \frac{k!}{(k-\ell)!} x^{k-\ell} \right\} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ A(k+1) \frac{(n-1)!}{(k-\ell+1)!(n-k-1)!} x^{k-\ell+1} + \right. \\ &\quad \left. + B \frac{(n-1)!}{(k-\ell)!(n-k-1)!} x^{k-\ell} + C \frac{\Gamma(\tilde{\mu}+1)}{\Gamma(\tilde{\mu}-k+1)} \frac{1}{(k-\ell)!} x^{k-\ell} \right\}. \quad (5.90) \end{aligned}$$

Um hieraus die Momente zu erhalten, lassen wir gemäß der Gleichung (5.62) x gegen Null gehen. Von den Summanden bleiben dann nur diejenigen der Ordnung x^0 übrig. Wir erhalten:

$$\left. \frac{d^\ell}{dx^\ell} G(x) \right|_{x=0} = A \ell \frac{(n-1)!}{(n-\ell)!} + B \frac{(n-1)!}{(n-\ell-1)!} + C \frac{\Gamma(\tilde{\mu}+1)}{\Gamma(\tilde{\mu}-\ell+1)}. \quad (5.91)$$

Man sieht aus Gleichung (5.91) bereits, dass für $\ell = n$ der zweite und für $\ell > n$ zusätzlich noch der erste Term verschwindet, da in diesem Fall im Nenner Fakultäten von negativen ganzen Zahlen auftauchen. Dies rührt daher, dass der erste Term der Lösung für $G(x)$ in Gleichung (5.84) nur eine endliche ganzzahlige Potenz von x aufweist, welche entsprechend bei $n-1$, bzw. n liegt. Da Fakultäten von negativen ganzen Zahlen nicht definiert sind, wollen wir auch die Fakultäten der ersten beiden Terme in Gleichung (5.91) als Gammafunktionen schreiben. Damit ist das Verschwinden dieser Terme für $\ell \geq n$ auf Grund der Divergenz der Gammafunktion bei negativen ganzen Zahlen automatisch garantiert. Ersetzen wir zusätzlich noch die Konstanten A , B und C gemäß der Gleichung (5.85), dann erhalten wir schließlich als Lösung für die gesuchten Koeffizienten der Momente:

$$m(\ell) = \mathcal{M}_{\ell, \ell+1}^{(1)} = - \left\{ \tilde{\mathcal{J}} \ell \frac{n+1}{\tilde{\mu}-n} \frac{\Gamma(n)}{\Gamma(n-\ell+1)} + \tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu}+1}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} \frac{\Gamma(n)}{\Gamma(n-\ell)} + \right. \\ \left. - \left[\tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu}+1}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} + 1 \right] \frac{\Gamma(\tilde{\mu}+1)}{\Gamma(\tilde{\mu}-\ell+1)} \right\}. \quad (5.92)$$

In der Tat gilt für $\ell = 0$:

$$m(0) = \mathcal{M}_{0,1}^{(1)} = - \left\{ \tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu}+1}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} - \left[\tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu}+1}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} + 1 \right] \right\} = 1, \quad (5.93)$$

wie es sein soll.

Für den Fall $\ell = 1$ erwarten wir die Bestimmungsgleichung (5.53) für den Ordnungsparameter in erster Ordnung in Ψ zu reproduzieren. Das Setzen von $\ell = 1$ in Gleichung (5.92) führt auf:

$$m(1) = \mathcal{M}_{1,2}^{(1)} = - \left\{ \tilde{\mathcal{J}} \frac{n+1}{\tilde{\mu}-n} + \tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu}+1}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} (n-1) - \left[\tilde{\mathcal{J}} \frac{\tilde{\mu}+1}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} + 1 \right] \tilde{\mu} \right\} \\ = - \left\{ \tilde{\mathcal{J}} \frac{(n+1)(\tilde{\mu}-n+1) + (\tilde{\mu}+1)(n-1) - \tilde{\mu}(\tilde{\mu}+1)}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} - \tilde{\mu} \right\} \\ = - \left\{ \tilde{\mathcal{J}} \frac{(\tilde{\mu}+1-n-1)(n-1) - \tilde{\mu}(\tilde{\mu}+1-n-1)}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} - \tilde{\mu} \right\} \\ = + \left\{ \tilde{\mathcal{J}} \frac{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)}{(\tilde{\mu}-n)(\tilde{\mu}-n+1)} + \tilde{\mu} \right\} \\ = (\tilde{\mathcal{J}} + \tilde{\mu}) \quad (5.94)$$

und liefert in der Tat die Gleichung (5.53).

Mit Hilfe der Lösung (5.92) sind wir nun in der Lage, alle Momente der Form $\mathcal{M}_{\ell, \ell+1}$ in erster Ordnung in Ψ zu berechnen. Den Ordnungsparameter Ψ können wir zwar nicht bestimmen, jedoch können wir durch eine physikalisch motivierte Bedingung im Grenzfall $\Psi \rightarrow 0$ eine

Gleichung aufstellen, welche die Parameter $\tilde{\mu}$ und \tilde{J} miteinander in Beziehung bringt und die Phasengrenze parametrisiert.

Bedenken wir dazu, dass in der MOTT-Phase eine feste und *endliche* Teilchenzahl n pro Gitterplatz vorliegt. Befindet sich unser System in einem Zustand nur knapp außerhalb der MOTT-Phase, also bereits in der superfluiden Phase, so sollten die Amplituden für Gitterplatz-FOCK-Zustände mit Teilchenzahlen pro Gitterplatz $n' \gg n$ verschwindend klein sein und im Grenzfall $n' \rightarrow \infty$ exakt gegen Null gehen. Dies motiviert folgende Bedingung:

$$\lim_{\ell \rightarrow \infty} \mathcal{M}_{\ell, \ell+1} = 0, \quad (5.95)$$

da der Operator $\hat{a}^{\dagger \ell} \hat{a}^{\ell+1} = \hat{a}^{\dagger \ell} \hat{a}^{\ell} \hat{a} \stackrel{(5.20)}{=} \hat{n}(\hat{n}-1) \dots (\hat{n}-\ell+1) \hat{a}$ im Grenzfall $\ell \rightarrow \infty$ nach dem oben Gesagten identisch dem Nulloperator ist.

Der Grenzwert (5.95) liefert die gesuchte Bedingung. Nun vollziehen wir den Grenzwert für die berechneten Momente aus Gleichung (5.92). Da die mittlere Teilchenzahl pro Gitterplatz n endlich ist, divergieren die Gammafunktionen $\Gamma(n-\ell+1)$ und $\Gamma(n-\ell)$ für $\ell > n$, wie wir oben nach Gleichung (5.88) bereits diskutiert haben. Ist das chemische Potential $\tilde{\mu}$ *nicht* ganzzahlig, so bleibt die Gammafunktion $\Gamma(\tilde{\mu}-\ell+1)$ für alle ℓ endlich. Die Bedingung aus Gleichung (5.95) ist demnach äquivalent zu der Bedingung:

$$0 = \tilde{J} \frac{\tilde{\mu} + 1}{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)} + 1, \quad (5.96)$$

oder nach \tilde{J} umgestellt:

$$\boxed{\tilde{J} = -\frac{(\tilde{\mu} - n)(\tilde{\mu} - n + 1)}{\tilde{\mu} + 1}}. \quad (5.97)$$

Dies ist die gesuchte Parametrisierung der Phasengrenze des MOTT-Superfluid-Phasenübergangs in der Molekularfeld-Näherung für den MOTT-Lappen mit n Teilchen [HOFFMANN, 2007]. Das Phasendiagramm der Molekularfeld-Näherung ist in Abbildung 5.1 dargestellt.

Angemerkt sei noch, dass man die Phasengrenze (5.97) auch aus der stärkeren Bedingung $m(\ell > n) = 0$ erhält. Dies hat seinen Ursprung daher, dass wir uns am absoluten Temperatur-Nullpunkt befinden und damit wirklich exakt n Teilchen auf jedem Gitterplatz in der MOTT-Phase sitzen. Dadurch sind alle Momente $\mathcal{M}_{\alpha, \beta}$ mit $\alpha, \beta > n$ in unserer Näherung exakt Null. Dies ist auch der Grund, warum die approximative Lösung so gute Ergebnisse geliefert hat. Dieses Verhalten ändert sich bei endlichen Temperaturen, da es hier keine echte MOTT-Phase mit einer festen Anzahl von Teilchen mehr gibt.

5.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir ausgehend von der LIOUVILLE-VON NEUMANN-Gleichung für den statistischen Operator eine Bewegungsgleichung für Erwartungswerte von Operatoren der Form $\hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta}$ hergeleitet. Durch das Anwenden der Molekularfeld-Näherung und unter der Annahme, dass ein homogenes System vorliegt, konnten wir daraus eine Bewegungsgleichung für die lokalen Momente $\mathcal{M}_{\alpha, \beta} = \langle \hat{a}^{\dagger \alpha} \hat{a}^{\beta} \rangle$ aufstellen. Mit Hilfe dieser Momentengleichung ließ sich

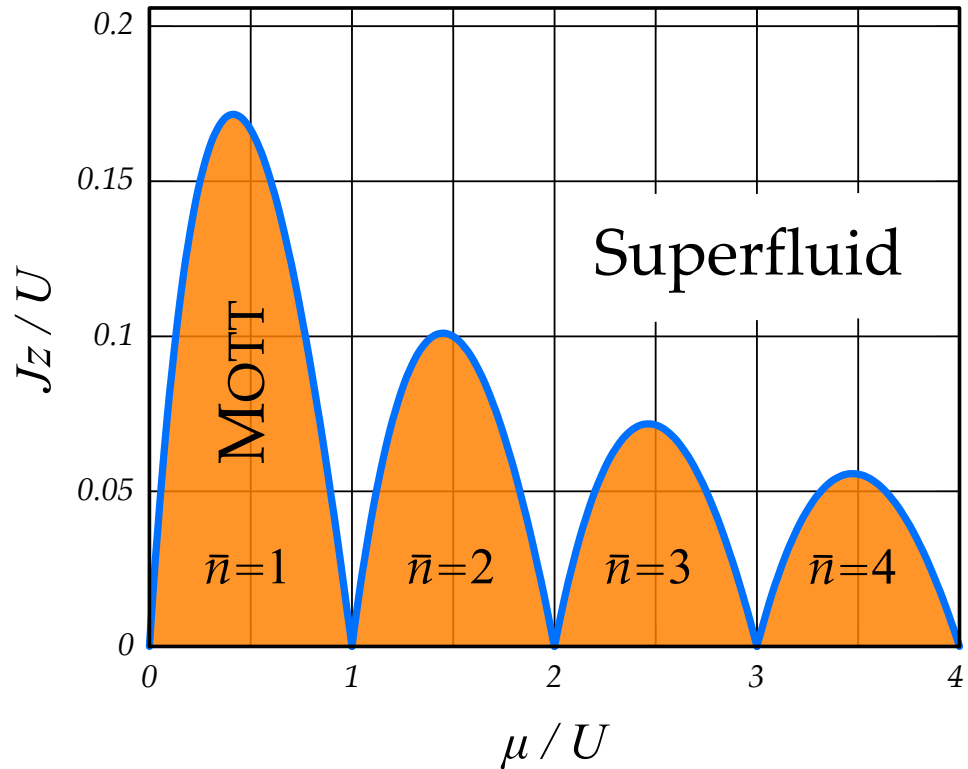


Abbildung 5.1: Phasengrenze des BOSE–HUBBARD-Modells in der Molekularfeld-Näherung. Der MOTT-Isolator ist durch die eingefärbten Bereiche dargestellt. Jeder Zustand innerhalb eines MOTT-Lappens besitzt die gleiche ganzzahlige mittlere Teilchenzahl \bar{n} . Die superfluide Phase befindet sich im Phasendiagramm oberhalb der Phasengrenze.

eine Bestimmungsgleichung für den Ordnungsparameter des MOTT-Superfluid-Phasenübergangs herleiten, welche wir für den Spezialfall stationärer Lösungen näherungsweise durch eine Entwicklung der Momente nach dem Ordnungsparameter und einer Begrenzung des FOCK-Raums lösen konnten.

Außerdem haben wir gezeigt, dass sich eine Rekursionsgleichung für den ersten Entwicklungskoeffizienten der Momente $\mathcal{M}_{\ell, \ell+1}$ aufstellen lässt, welche wir dann in eine Differentialgleichung transformiert haben und im Anschluss exakt lösen konnten. Beide Lösungen – die genäherte und die exakte – stellen die Parametrisierung der Phasengrenze des MOTT-Superfluid-Phasenübergangs in Abhängigkeit von dem chemischen Potential, dem Tunnelmatrixelement und der Wechselwirkungsstärke dar, welche mit den Ergebnis aus der Literatur übereinstimmt.

Kapitel 6

Der Quantenphasenübergang von Bosonen in einem offenen optischen Gitter

In diesem Kapitel untersuchen wir schließlich das in Kapitel 4 vorgestellte Modellsystem. Wie wir dort bereits ausführlich dargelegt haben, besteht dieses System aus einem optischen Gitter gefüllt mit ultrakalten Bosonen und zusätzlich aus einem BOSE–EINSTEIN-Kondensat. Das BEC dient als Reservoir von BOGOLIUBOV-Anregungen. Die Bosonen des optischen Gitters werden mit Hilfe eines RAMAN-Lasers in ein höheres Energie-Band angeregt und fallen durch Kopplung mit dem BEC-Reservoir wieder in das unterste Energie-Band des Gitters zurück. Der Übergang vom oberen in das untere Energie-Band wird durch die Emission einer BOGOLIUBOV-Anregung in das BEC-Reservoir ermöglicht.

Auf Grund der Kopplung an ein Reservoir haben wir es hier mit *dissipativer Dynamik* zu tun. Die Zeitentwicklung des Systems lässt sich nicht allein durch einen hermiteschen Generator beschreiben, sondern geschieht über die im Abschnitt 4.4 hergeleitete Mastergleichung (4.166). Diese lautet im SCHRÖDINGER-Bild:

$$i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \frac{1}{2} i\hbar\kappa \sum_{\langle i,j \rangle} (2\hat{c}_{i,j} \hat{\rho}(t) \hat{c}_{i,j}^\dagger - \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j} \hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t) \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j}). \quad (6.1)$$

Hier ist $\hat{\rho}$ der statistische Operator, der die Bosonen im optischen Gitters beschreibt. Die Summe läuft über alle nächsten Nachbarn i und j im Gitter und $\hat{c}_{i,j}$ sind Quantensprung-Operatoren, welche eine effektive Kopplung der Stärke κ zwischen System und Bad beschreiben. Sie besitzen folgende Form (4.167):

$$\hat{c}_{i,j} = (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_j^\dagger)(\hat{a}_i - \hat{a}_j). \quad (6.2)$$

Man beachte, dass die Vorzeichen bei den adjungierten Operatoren vertauscht sind:

$$\hat{c}_{i,j}^\dagger = (\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_j^\dagger)(\hat{a}_i + \hat{a}_j). \quad (6.3)$$

Den dissipativen Anteil werden wir durch $\mathcal{L}[\hat{\rho}]$ abkürzen. Eine kompakte Schreibweise des dissipativen Anteils lautet:

$$i\hbar \mathcal{L}[\hat{\rho}] = \frac{1}{2} \kappa \sum_{\langle i,j \rangle} ([\hat{c}_{i,j}, \hat{\rho} \hat{c}_{i,j}^\dagger] + [\hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{\rho}, \hat{c}_{i,j}]) = \frac{1}{2} i\hbar\kappa \sum_{\langle i,j \rangle} ([\hat{c}_{i,j}, \hat{\rho} \hat{c}_{i,j}^\dagger] + \text{h.c.}). \quad (6.4)$$

Der unitäre Anteil der Zeitentwicklung ist durch einen hermiteschen Generator bestimmt, welcher in dem von uns betrachteten Modell der BOSE–HUBBARD-Hamiltonian aus der Gleichung (4.156) ist. Dieser weist folgende Form auf:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1). \quad (6.5)$$

Summiert wird hier in der zweiten Summe über alle Gitterplätze i und in der ersten Summe zusätzlich noch über deren nächste Nachbarn j . Die Operatoren \hat{a}_i sind Leiteroperatoren und \hat{n}_i die dazugehörigen Teilchenzahl-Operatoren.

Die Wechselwirkungsstärke U zweier Bosonen eines Gitterplatzes, welche in dem BOSE–HUBBARD-Hamiltonian auftaucht, sorgt für eine Lokalisierung der Bosonen. Hingegen wirkt der Tunnel-Term im Hamiltonian und auch der dissipative Anteil, welche beide benachbarte Gitterplätze koppeln, für eine Delokalisierung der Bosonen über das gesamte Systems. Der dissipative Anteil der Mastergleichung bewirkt demnach einen ähnlichen Effekt wie der Tunnel-Term des BOSE–HUBBARD-Hamiltonians. Dadurch kann man je nach Stärke der Kopplung κ eine Art MOTT-Superfluid-Phasenübergang des Systems erwarten.

6.1 Zeitentwicklung von Operatoren

Eine direkte Berechnung des statistischen Operators $\hat{\rho}$ mit Hilfe der Mastergleichung (6.1) ist ohne weiteres nicht möglich. Allerdings lässt sich mit ihrer Hilfe die Zeitentwicklung von Erwartungswerten beliebiger Operatoren bestimmen.

Betrachten wir dazu einen Operator $\hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k)$ in zweiter Quantisierung, welcher von den Leiteroperatoren \hat{a}_k und \hat{a}_k^\dagger eines Gitterplatzes k abhängen soll. Wir schreiben für diesen abkürzend $\hat{f}(\hat{a}_k^\circ)$. Die genaue Form des Operators \hat{f} bleibt zunächst beliebig. Beginnen wir mit der Zeitentwicklung des dazugehörigen Erwartungswertes:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr}\{\hat{f}(\hat{a}_k^\circ) \hat{\rho}(t)\} &= \text{Tr}\{\hat{f}(\hat{a}_k^\circ) i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}(t)\} \\ &= \text{Tr}\{\hat{f}(\hat{a}_k^\circ) [\hat{H}, \hat{\rho}(t)]\} + \frac{1}{2} i\hbar \kappa \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}\{\hat{f}(\hat{a}_k^\circ) [\hat{c}_{i,j}, \hat{\rho}(t) \hat{c}_{i,j}^\dagger] + \hat{f}(\hat{a}_k^\circ) [\hat{c}_{i,j} \hat{\rho}(t), \hat{c}_{i,j}^\dagger]\}. \end{aligned} \quad (6.6)$$

Wir verwenden die Formel (5.7), um den statistischen Operator aus den Kommutatoren herauszunehmen und dafür den Operator \hat{f} hinein zuschreiben. Zusammen mit der Invarianz der Spur unter zyklischer Permutation der in ihr enthaltenen Operatoren erhalten wir dann:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr}\{\hat{f}(\hat{a}_k^\circ) \hat{\rho}(t)\} &= \text{Tr}\{[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{H}] \hat{\rho}(t)\} + \frac{1}{2} i\hbar \kappa \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}\{[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,j}] \hat{\rho}(t) \hat{c}_{i,j}^\dagger + [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,j} \hat{\rho}(t)] \hat{c}_{i,j}^\dagger\} \\ &= \text{Tr}\{[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{H}] \hat{\rho}(t)\} + \frac{1}{2} i\hbar \kappa \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}\{\hat{c}_{i,j}^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,j}] \hat{\rho}(t) + \hat{c}_{i,j}^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,j} \hat{\rho}(t)]\} \\ &= \text{Tr}\{[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{H}] \hat{\rho}(t)\} + \frac{1}{2} i\hbar \kappa \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}\{\hat{c}_{i,j}^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,j}] \hat{\rho}(t) + [\hat{c}_{i,j}^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] \hat{c}_{i,j} \hat{\rho}(t)\}. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Den hamilton'schen Anteil lassen wir zunächst so stehen. Den dissipativen Anteil können wir jedoch auf Grund der speziellen Form der Quantensprung-Operatoren $\hat{c}_{i,j}$ in eine praktischere Form bringen. Dazu schreiben wir für den Operator in der Spur abkürzend:

$$\hat{L}_{k;i,j} := \hat{c}_{i,j}^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,j}] + [\hat{c}_{i,j}^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] \hat{c}_{i,j} \quad (6.8)$$

und für dessen Spur:

$$L_k := \sum_{\langle i,j \rangle} L_{k;i,j} := \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr} \{ \hat{L}_{k;i,j} \hat{\rho} \} = \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr} \{ \hat{c}_{i,j}^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,j}] \hat{\rho} + [\hat{c}_{i,j}^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] \hat{c}_{i,j} \hat{\rho} \}. \quad (6.9)$$

In der Summe sind i und j nächste Nachbarn. $L_{k;i,j}$ ist nur dann ungleich Null, wenn i oder j auch nächste Nachbarn von k sind. Die Summe spaltet damit in zwei Summen auf. Eine in welcher über i als nächsten Nachbarn von k summiert wird und eine zweite entsprechend für j . Aus den Quantensprung-Operatoren wird dann

$$\hat{c}_{i,j} = \begin{cases} \hat{c}_{i,k} & : \text{ wenn } i \text{ nächster Nachbar von } k \\ \hat{c}_{k,j} & : \text{ wenn } j \text{ nächster Nachbar von } k. \end{cases} \quad (6.10)$$

Vertauscht man im zweiten Fall die Indizes k und j von $\hat{c}_{k,j}$, so erhält man auf Grund der Definition (6.2) der Quantensprung-Operatoren ein negatives Vorzeichen:

$$\hat{c}_{i,j} = \begin{cases} \hat{c}_{i,k} & : \text{ wenn } i \text{ nächster Nachbar von } k \\ -\hat{c}_{j,k} & : \text{ wenn } j \text{ nächster Nachbar von } k. \end{cases} \quad (6.11)$$

Ebenso gilt für den adjungierten Operator:

$$\hat{c}_{i,j}^\dagger = \begin{cases} \hat{c}_{i,k}^\dagger & : \text{ wenn } i \text{ nächster Nachbar von } k \\ -\hat{c}_{j,k}^\dagger & : \text{ wenn } j \text{ nächster Nachbar von } k. \end{cases} \quad (6.12)$$

Da in Gleichung (6.9) nur Produkte von zwei Quantensprung-Operatoren auftauchen, ergänzt sich ein eventuell auftretendes Minuszeichen zu einem Pluszeichen. Damit haben die Terme in Gleichung (6.9) mit i und j als nächsten Nachbarn von k die gleiche Form. Aus diesem Grund haben wir es mit zwei identischen Summen mit verschiedenen Summationsindizes zu tun. Eine Umbenennung der Summationsindizes führt schließlich zu dem Ergebnis:

$$L_k = 2 \sum_{\langle i|k \rangle} \text{Tr} \{ \hat{c}_{i,k}^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,k}] \hat{\rho} + [\hat{c}_{i,k}^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] \hat{c}_{i,k} \hat{\rho} \} = 2 \sum_{\langle i|k \rangle} \text{Tr} \{ \hat{L}_{k;i,k} \hat{\rho} \}, \quad (6.13)$$

wobei angemerkt sei, dass in der Summe über alle nächsten Nachbarn i des fest vorgegebenen Gitterplatzes k zu summieren ist.

Im Vergleich zu der Ausgangsgleichung (6.9) ist die obige Gleichung nicht wesentlich einfacher geworden. Im nächsten Schritt wird sich dies ändern.

Bis auf die Tatsache der Indexvertauschung $\hat{c}_{ij} = -\hat{c}_{ji}$ haben wir die explizite Form der Quantensprung-Operatoren noch nicht ausgenutzt. Daher setzen wir die Definitionen (6.2) und (6.3) in die oben auftretenden Kommutatoren ein. Für den ersten erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,k}] &= [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_k^\dagger)(\hat{a}_i - \hat{a}_k)] \\
 &= [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k] \\
 &= -\hat{a}_i^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + \hat{a}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] - [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k].
 \end{aligned} \tag{6.14}$$

Hier haben wir ausgenutzt, dass $\hat{f}(\hat{a}_k^\circ)$ nur Leiteroperatoren des k -ten Gitterplatzes enthält und dass die Leiteroperatoren verschiedener Gitterplätze kommutieren.

Betrachten wir weiter den zweiten Kommutator in Gleichung (6.13):

$$\begin{aligned}
 [\hat{c}_{i,k}^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] &= [(\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_k^\dagger)(\hat{a}_i + \hat{a}_k), \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] \\
 &= [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k - \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] \\
 &= \hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_k, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] - \hat{a}_i [\hat{a}_k^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] - [\hat{n}_k, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)].
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

Nun multiplizieren wir beide Kommutatoren von links bzw. von rechts mit dem jeweils adjungierten Quantensprung-Operator. Für ersteren gilt:

$$\begin{aligned}
 \hat{c}_{i,k}^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,k}] &= (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k - \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) (-\hat{a}_i^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + \hat{a}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] - [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k]) \\
 &= -\hat{n}_i \hat{a}_i^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + \hat{n}_i \hat{a}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] - \hat{n}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] + \\
 &\quad -\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + \hat{n}_i \hat{a}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] + \\
 &\quad + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] - \hat{a}_i \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] + \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] + \\
 &\quad + \hat{a}_i^\dagger \hat{n}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] - \hat{a}_i \hat{n}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] + \hat{n}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k].
 \end{aligned} \tag{6.16}$$

Analog verfahren wir für den zweiten Kommutator in Gleichung (6.13):

$$\begin{aligned}
 [\hat{c}_{i,k}^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] \hat{c}_{i,k} &= (\hat{a}_i^\dagger [\hat{a}_k, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] - \hat{a}_i [\hat{a}_k^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] - [\hat{n}_k, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)]) (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k) \\
 &= -\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + \hat{a}_i \hat{n}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] + \hat{n}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] + \\
 &\quad + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] \hat{a}_k - \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] \hat{a}_k - \hat{a}_i^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] \hat{a}_k + \\
 &\quad - \hat{n}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_i \hat{a}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] \hat{a}_k^\dagger + \\
 &\quad + \hat{a}_i^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] \hat{n}_k - \hat{a}_i [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] \hat{n}_k - [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] \hat{n}_k.
 \end{aligned} \tag{6.17}$$

Um den Operator $\hat{L}_{k;i,j}$ aus Gleichung (6.8) zu erhalten, müssen wir von den beiden Ausdrücken (6.16) und (6.17) die Summe bilden. Dabei treten Doppelkommutatoren und Antikommutatoren auf. Es ergibt sich:

$$\hat{L}_{k;i,k} = \hat{c}_{i,k}^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{c}_{i,k}] + [\hat{c}_{i,k}^\dagger, \hat{f}(\hat{a}_k^\circ)] \hat{c}_{i,k} \tag{6.18}$$

$$\begin{aligned}
 = & - \left\{ \hat{a}_i^\dagger, \hat{n}_i \right\} \left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k \right] + \left\{ \hat{a}_i, \hat{n}_i \right\} \left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger \right] + \overbrace{\hat{a}_i^\dagger \left\{ \left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k \right], \hat{a}_k \right\}}^{=: \text{AK}_{a1}} + \\
 & + \hat{a}_k^{\dagger 2} \left[\left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k \right], \hat{a}_k \right] - \hat{n}_i \left[\left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger \right], \hat{a}_k \right] - \hat{a}_i^\dagger \left\{ \left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k \right], \hat{a}_k \right\} + \\
 & - \hat{n}_i \left[\left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k \right], \hat{a}_k^\dagger \right] + \hat{a}_k^2 \left[\left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger \right], \hat{a}_k^\dagger \right] + \hat{a}_i \left\{ \left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k \right], \hat{a}_k^\dagger \right\} + \\
 & + \hat{a}_i^\dagger \overbrace{\left\{ \left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k \right], \hat{n}_k \right\}}^{=: \text{AK}_{a2}} - \hat{a}_i \overbrace{\left\{ \left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger \right], \hat{n}_k \right\}}^{=: \text{AK}_{b2}} - \left[\left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k \right], \hat{n}_k \right] + \\
 & - \underbrace{\left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger \right] \hat{a}_k}_{=: \text{K}_1} + \hat{a}_k^\dagger \left[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k \right].
 \end{aligned}$$

Dies sieht auf den ersten Blick recht kompliziert aus. Im Folgenden werden wir jedoch geschickt die Kommutator-Algebra anwenden, um für die Gleichung (6.18) einen übersichtlicheren Ausdruck zu erhalten.

Störend für bosonische Leiteroperatoren sind zunächst die Antikommutatoren. Um Antikommutatoren in Termen von Kommutatoren zu schreiben, gilt ganz allgemein:

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = [\hat{A}, \hat{B}] + 2\hat{B}\hat{A} = [\hat{B}, \hat{A}] + 2\hat{A}\hat{B}. \quad (6.19)$$

Die ersten beiden in Gleichung (6.18) explizit gegebenen Antikommutatoren sind trivial zu berechnen:

$$\{\hat{a}_i^\dagger, \hat{n}_i\} = \{\hat{n}_i, \hat{a}_i^\dagger\} = [\hat{n}_i, \hat{a}_i^\dagger] + 2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger + 2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i \quad (6.20a)$$

$$\{\hat{a}_i, \hat{n}_i\} = [\hat{a}_i, \hat{n}_i] + 2\hat{n}_i \hat{a}_i = \hat{a}_i + 2\hat{n}_i \hat{a}_i. \quad (6.20b)$$

Für die restlichen vier Antikommutatoren in Gleichung (6.18) haben wir etwas mehr zu arbeiten. Es fällt zunächst auf, dass jeweils zwei der Antikommutatoren die gleichen Operatoren enthalten, wobei diese jedoch vertauscht angeordnet sind. Gemeint sind hier die mit AK_{a1} und AK_{a2} bzw. AK_{b1} und AK_{b2} bezeichneten Antikommutatoren. Diese können wir mit Hilfe der JACOBI-Identität für Kommutatoren

$$\left[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C} \right] + \left[[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A} \right] + \left[[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B} \right] = 0 \quad (6.21)$$

umschreiben. Mit der JACOBI-Identität (6.21) gilt nämlich:

$$\left[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C} \right] - \left[[\hat{A}, \hat{C}], \hat{B} \right] = \left[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}] \right]. \quad (6.22)$$

Für die Differenz zweier Antikommutatoren, welche die Form von AK_{a1} aufweisen, können wir dann unter Ausnutzung der Gleichungen (6.19) und (6.22) schreiben:

$$\begin{aligned}
 \left\{ [\hat{A}, \hat{B}], \hat{C} \right\} - \left\{ [\hat{A}, \hat{C}], \hat{B} \right\} &= \left[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C} \right] - \left[[\hat{A}, \hat{C}], \hat{B} \right] + 2\hat{C}[\hat{A}, \hat{B}] - 2\hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \\
 &= \left[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}] \right] + 2(\hat{C}[\hat{A}, \hat{B}] - \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]).
 \end{aligned} \quad (6.23)$$

Speziell ergibt sich für den Term $\text{AK}_{a1} - \text{AK}_{a2}$ aus Gleichung (6.18):

$$\text{AK}_{a1} - \text{AK}_{a2} = \left[\hat{f}(\hat{a}_k), [\hat{a}_k, \hat{n}_k] \right] + 2(\hat{n}_k [\hat{f}(\hat{a}_k), \hat{a}_k] - \hat{a}_k [\hat{f}(\hat{a}_k), \hat{n}_k]). \quad (6.24)$$

Ein analoges Ergebnis erhält man für die Differenz $AK_{b1} - AK_{b2}$.

Als letztes wollen wir den Leiteroperator \hat{a}_k im Term K_1 der Gleichung (6.18) links vom Kommutator schreiben. Hierfür gilt:

$$[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] \hat{a}_k = \hat{a}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] + [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger], \hat{a}_k]. \quad (6.25)$$

Nun vereinfachen wir Gleichung (6.18) mit Hilfe der hergeleiteten Gleichungen (6.20), (6.23) und (6.25). Außerdem ordnen wir den Ausdruck nach Termen mit gleichen Kommutatoren:

$$\begin{aligned} \hat{L}_{k;i,k} &= \overbrace{(-2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i + \hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_k^\dagger)}^{\text{aus Gl. (6.20a)}} [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + \overbrace{(2\hat{n}_i \hat{a}_i + \hat{a}_i - \hat{a}_k)}^{\text{aus Gl. (6.20b)}} [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] + \\ &+ \hat{a}_i^{\dagger 2} [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k] + \hat{a}_i^2 [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger], \hat{a}_k^\dagger] - (\hat{n}_i + 1) [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger], \hat{a}_k] + \\ &- \hat{n}_i [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k^\dagger] - [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k], \hat{n}_k] + \\ &= [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger], \hat{a}_k] \quad \text{aus Gl. (6.24)} \\ &+ \hat{a}_i^\dagger \left\{ \underbrace{[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), [\hat{a}_k, \hat{n}_k]]}_{=\hat{a}_k} + 2(\hat{n}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] - \hat{a}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k]) \right\} + \\ &+ \hat{a}_i \left\{ \underbrace{[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), [\hat{n}_k, \hat{a}_k^\dagger]]}_{=\hat{a}_k^\dagger} + 2(\hat{a}_k^\dagger [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] - \hat{n}_k [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger]) \right\} \\ &= (-2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i - \hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_k^\dagger + \hat{a}_i^\dagger + 2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_k) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + \\ &+ (2\hat{n}_i \hat{a}_i + \hat{a}_i - \hat{a}_k + \hat{a}_i - 2\hat{a}_i \hat{n}_k) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] + \\ &+ \hat{a}_i^{\dagger 2} [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k] + \hat{a}_i^2 [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger], \hat{a}_k^\dagger] + \\ &- (\hat{n}_i + 1 - \hat{n}_i) [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k^\dagger] + \\ &+ 2(-\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] - [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k], \hat{n}_k]. \quad (6.26) \end{aligned}$$

Schließlich erhalten wir den endgültigen Ausdruck:

$$\begin{aligned} \hat{L}_{k;i,k} &= (-2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i + \hat{a}_k^\dagger + 2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_k) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + (2\hat{n}_i \hat{a}_i + 2\hat{a}_i - \hat{a}_k - 2\hat{a}_i \hat{n}_k) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] + \\ &+ 2(\hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] + \hat{a}_i^{\dagger 2} [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k] + \hat{a}_i^2 [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger], \hat{a}_k^\dagger] + \\ &- (2\hat{n}_i + 1) [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k^\dagger] - [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k], \hat{n}_k]. \quad (6.27) \end{aligned}$$

Setzen wir dies zusammen unter Berücksichtigung der Gleichungen (6.8) und (6.13) in die Gleichung (6.7) ein, so ergibt sich für die Bewegungsgleichung des Erwartungswertes des Operators $\hat{f}(\hat{a}_k^\circ)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr} \{ \hat{f}(\hat{a}_k^\circ) \hat{\rho}(t) \} &= \text{Tr} \{ [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{H}] \hat{\rho}(t) \} + i\hbar \kappa \sum_{\langle i|k \rangle} \text{Tr} \left\{ [(-2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i + \hat{a}_k^\dagger + 2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_k) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] + \right. \\ &\left. + (2\hat{n}_i \hat{a}_i + 2\hat{a}_i - \hat{a}_k - 2\hat{a}_i \hat{n}_k) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] + 2(\hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k) [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] + \right. \\ &\left. - (2\hat{n}_i + 1) [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k^\dagger] - [[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k], \hat{n}_k] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \hat{a}_i^{\dagger 2} \left[[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k \right] + \hat{a}_i^2 \left[[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger], \hat{a}_k^\dagger \right] + \\
 & - (2\hat{n}_i + 1) \left[[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k^\dagger \right] - \left[[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k], \hat{n}_k \right] \hat{\rho}(t) \} \quad (6.28)
 \end{aligned}$$

$$= \text{Tr} \left\{ [\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{H}] \hat{\rho}(t) \right\} + i\hbar \frac{1}{2} \kappa \sum_{\langle i|k \rangle} \text{Tr} \left\{ 2\hat{L}_{k;i,k} \right\}. \quad (6.29)$$

Vergleicht man dieses Ergebnis mit der Gleichung (6.7) auf Seite 92, so scheint es, als hätten wir die Bewegungsgleichung nur komplizierter geschrieben. Dies ist aber nur auf den ersten Blick der Fall. Denn erstens beinhaltet die Bewegungsgleichung in der Form (6.7) noch die Quantensprung-Operatoren, wohingegen der Ausdruck (6.28) die bosonischen Leiteroperatoren allein enthält. Zweitens besteht die Bewegungsgleichung in der Form (6.28) nur aus Kommutatoren und Doppelkommutatoren des Operators $\hat{f}(\hat{a}_k^\circ)$ mit den grundlegenden Operatoren \hat{a}_k , \hat{a}_k^\dagger und \hat{n}_k . Diese sind in der Regel viel einfacher zu lösen, als die Kommutatoren, welche in Gleichung (6.7) in Zusammenhang mit den Quantensprung-Operatoren auftreten. Und drittens sind bei *einfachen* Operatoren $\hat{f}(\hat{a}_k^\circ)$ bereits viele der Kommutatoren in Gleichung (6.28) Null.

6.2 Zeitentwicklung von Leiteroperatoren

Im letzten Abschnitt haben wir die Bewegungsgleichung für den Erwartungswert eines beliebigen Operators \hat{f} aufgestellt. Unser Ziel ist es, die Zeitentwicklung des Ordnungsparameters $\Psi(t) = \text{Tr} \{ \hat{a} \hat{\rho}(t) \}$ zu berechnen. Dies bedeutet, die Gleichung (6.28) für $\hat{f} = \hat{a}_k$ aufzustellen. Bevor wir jedoch so speziell werden, wollen wir für \hat{f} ein Produkt aus beliebigen Potenzen von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren ansetzen. Wir betrachten daher den Operator

$$\hat{f}(\hat{a}_k^\circ) = \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^\beta \quad (6.30)$$

mit beliebigen ganzen Zahlen α und β .

Das „Kochrezept“ besteht nun darin, die Kommutatoren dieses Operators mit den Leiteroperatoren und dem Teilchenzahloperator auszurechnen und diese dann in die Bewegungsgleichung (6.28) einzusetzen. Dafür benutzen wir die Kommutatoren aus den Gleichungen (5.9) und wir erhalten:

$$[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k] = -\alpha \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^\beta, \quad (6.31a)$$

$$[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger] = \beta \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 1}, \quad (6.31b)$$

$$[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k] = (\beta - \alpha) \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^\beta, \quad (6.31c)$$

$$\left[[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k \right] = -\alpha [\hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1}, \hat{a}_k] \hat{a}_k^\beta = \alpha(\alpha - 1) \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 2} \hat{a}_k^\beta, \quad (6.31d)$$

$$\left[[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k^\dagger], \hat{a}_k^\dagger \right] = \beta \hat{a}_k^{\dagger \alpha} [\hat{a}_k, \hat{a}_k^{\beta - 1}] = \beta(\beta - 1) \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 2}, \quad (6.31e)$$

$$\left[[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{a}_k], \hat{a}_k^\dagger \right] = -\alpha \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} [\hat{a}_k, \hat{a}_k^\beta] = -\alpha \beta \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^{\beta - 1}, \quad (6.31f)$$

$$\left[[\hat{f}(\hat{a}_k^\circ), \hat{n}_k], \hat{n}_k \right] = (\alpha - \beta)^2 \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^\beta. \quad (6.31g)$$

Diese setzen wir in Gleichung (6.28) ein. Der Übersichtlichkeit wegen wollen wir zunächst nur

den dissipativen Anteil (6.8) betrachten:

$$\begin{aligned}
 2\hat{L}_{k;i,k} = & (-2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i + \hat{a}_k^\dagger + 2\hat{a}_i^\dagger \hat{n}_k)(-\alpha)\hat{a}_k^{\dagger\alpha-1}\hat{a}_k^\beta + (2\hat{n}_i \hat{a}_i + 2\hat{a}_i - \hat{a}_k - 2\hat{a}_i \hat{n}_k) \times \\
 & \times \beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} + 2(\hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k)(\beta - \alpha)\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta + \hat{a}_i^{\dagger 2} \alpha(\alpha - 1)\hat{a}_k^{\dagger\alpha-2} \hat{a}_k^\beta + \\
 & + \hat{a}_i^2 \beta(\beta - 1)\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-2} - (2\hat{n}_i + 1)(-\alpha\beta)\hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^{\beta-1} - (\alpha - \beta)^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta.
 \end{aligned} \tag{6.32}$$

Hier multiplizieren wir alle Terme aus und bringen die Leiteroperatoren in Normalordnung¹:

$$\begin{aligned}
 2\hat{L}_{k;i,k} = & 2\alpha \hat{a}_i^\dagger \hat{n}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta - \alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta - 2\alpha \hat{a}_i^\dagger \underbrace{\hat{n}_k \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1}}_{=\hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{n}_k + (\alpha-1)\hat{a}_k^{\dagger\alpha-1}} \hat{a}_k^\beta + \\
 & + 2\beta \hat{n}_i \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} + 2\beta \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} - \beta \hat{a}_k \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} - 2\beta \hat{a}_i \underbrace{\hat{n}_k \hat{a}_k^{\dagger\alpha}}_{=\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{n}_k + \alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha}} \hat{a}_k^{\beta-1} + \\
 & + 2(\beta - \alpha) \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta - 2(\beta - \alpha) \hat{a}_i^\dagger \underbrace{\hat{a}_k \hat{a}_k^{\dagger\alpha}}_{=\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k + \alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1}} \hat{a}_k^\beta + \alpha(\alpha - 1) \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_k^{\dagger\alpha-2} \hat{a}_k^\beta + \beta(\beta - 1) \hat{a}_i^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-2} + \\
 & + 2\alpha\beta \hat{n}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^{\beta-1} + \alpha\beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^{\beta-1} - (\alpha - \beta)^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta
 \end{aligned} \tag{6.33}$$

$$\begin{aligned}
 2\hat{L}_{k;i,k} = & 2\alpha \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta - \alpha \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta+1} - 2\alpha(\alpha - 1) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta + \\
 & + 2\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} + 2\beta \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} - \alpha \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta - \beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta - \alpha\beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^{\beta-1} + \\
 & - 2\beta \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha+1} \hat{a}_k^\beta - 2\alpha\beta \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} + \\
 & + (\beta - \alpha) \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha+1} \hat{a}_k^\beta - 2(\beta - \alpha) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta+1} - 2\alpha(\beta - \alpha) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta + \\
 & + \alpha(\alpha - 1) \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_k^{\dagger\alpha-2} \hat{a}_k^\beta + \beta(\beta - 1) \hat{a}_i^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-2} + \\
 & + 2\alpha\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^{\beta-1} + \alpha\beta \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^{\beta-1} - (\alpha - \beta)^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta.
 \end{aligned} \tag{6.34}$$

Schließlich fassen wir Terme mit gleichen Leiteroperatoren zusammen und erhalten für den dissipativen Anteil der Mastergleichung:

$$\begin{aligned}
 2\hat{L}_{k;i,k} = & 2\alpha \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta + 2\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} - 2\alpha \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha+1} \hat{a}_k^\beta - 2\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta+1} + \\
 & - 2\alpha(\beta - 1) \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^\beta - 2\beta(\alpha - 1) \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-1} - [\alpha + \beta + (\alpha - \beta)^2] \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta + \\
 & + \alpha(\alpha - 1) \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_k^{\dagger\alpha-2} \hat{a}_k^\beta + \beta(\beta - 1) \hat{a}_i^2 \hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^{\beta-2} + 2\alpha\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_k^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_k^{\beta-1}.
 \end{aligned} \tag{6.35}$$

Dieser Ausdruck ist analytisch so ohne weiteres nicht angebar, sodass wir auf Näherungsmethoden angewiesen sind. Das komplizierteste an der obigen Gleichung sind die nicht-lokalen Terme, d. h. Terme, bei welchen Produkte von Leiteroperatoren verschiedener Gitterplätze auftreten. Diese Korrelationsfunktionen lassen sich aber im Rahmen der Molekularfeld-Näherung auflösen. Näheres zu dieser Näherungsmethode findet man im Abschnitt D. Wir ersetzen nun jeden nicht-lokalen Term in Gleichung (6.35) gemäß der Gleichung (D.7) auf Seite 140:

¹Ein Produkt von Leiteroperatoren heißt *normalgeordnet* oder ist in *Normalordnung*, wenn in dem Produkt alle Erzeuger \hat{a}_i^\dagger links von allen Vernichtern \hat{a}_i stehen.

$$\begin{aligned}
 2\hat{L}_{k;i,k} = & 2\alpha \langle \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^\beta + 2\alpha \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^\beta \rangle - 2\alpha \langle \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^\beta \rangle + \\
 & + 2\beta \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^2 \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 1} + 2\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^2 \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 1} \rangle - 2\beta \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^2 \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 1} \rangle + \\
 & - 2\alpha \langle \hat{a}_i \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha + 1} \hat{a}_k^\beta - 2\alpha \hat{a}_i \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha + 1} \hat{a}_k^\beta \rangle + 2\alpha \langle \hat{a}_i \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha + 1} \hat{a}_k^\beta \rangle + \\
 & - 2\beta \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta + 1} - 2\beta \hat{a}_i^\dagger \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta + 1} \rangle + 2\beta \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta + 1} \rangle + \\
 & - 2\alpha(\beta - 1) \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^\beta - 2\alpha(\beta - 1) \hat{a}_i^\dagger \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^\beta \rangle + 2\alpha(\beta - 1) \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^\beta \rangle + \\
 & - 2\beta(\alpha - 1) \langle \hat{a}_i \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 1} - 2\beta(\alpha - 1) \hat{a}_i \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 1} \rangle + 2\beta(\alpha - 1) \langle \hat{a}_i \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 1} \rangle + \\
 & - [\alpha + \beta + (\alpha - \beta)^2] \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^\beta + \\
 & + \alpha(\alpha - 1) \langle \hat{a}_i^{\dagger 2} \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 2} \hat{a}_k^\beta + \alpha(\alpha - 1) \hat{a}_i^{\dagger 2} \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 2} \hat{a}_k^\beta \rangle - \alpha(\alpha - 1) \langle \hat{a}_i^{\dagger 2} \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 2} \hat{a}_k^\beta \rangle + \\
 & + \beta(\beta - 1) \langle \hat{a}_i^2 \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 2} + \beta(\beta - 1) \hat{a}_i^2 \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 2} \rangle - \beta(\beta - 1) \langle \hat{a}_i^2 \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha} \hat{a}_k^{\beta - 2} \rangle + \\
 & + 2\alpha\beta \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^{\beta - 1} + 2\alpha\beta \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^{\beta - 1} \rangle - 2\alpha\beta \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle \langle \hat{a}_k^{\dagger \alpha - 1} \hat{a}_k^{\beta - 1} \rangle.
 \end{aligned} \tag{6.36}$$

Des Weiteren nehmen wir an, dass das zu betrachtende System groß genug ist, so dass wir Randeffekte vernachlässigen können. Dies bedeutet, dass wir ein räumlich homogenes System vorliegen haben und dass alle Gitterplätze als identisch zu betrachten sind. Dann können wir den Index für den Gitterplatz an den entkoppelten Erwartungswerten weglassen.

Nun multiplizieren wir den dissipativen Anteil (6.36) mit dem statistischen Operator, bilden davon die Spur und summieren über alle nächsten Nachbarn. Da der Summand auf Grund der Annahme eines homogenen Systems nicht vom Gitterplatz abhängt, liefert die Summation über die nächsten Nachbarn lediglich die Anzahl z der nächsten Nachbarn. Für die Erwartungswerte der Leiteroperatoren führen wir wie bereits im Abschnitt 5.2 die *Momente* ein:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta}(t) = \text{Tr}\{\hat{a}^{\dagger \alpha} \hat{a}^\beta \hat{\rho}(t)\}. \tag{6.37}$$

Für den dissipativen Anteil der Bewegungsgleichung (6.28) erhalten wir dann schließlich:

$$\begin{aligned}
 2 \sum_{\langle i|k \rangle} \text{Tr}\{\hat{L}_{k;i,k} \hat{\rho}\} = & z \left\{ 2\alpha \mathcal{M}_{2,1} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta} + 2\beta \mathcal{M}_{1,2} \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1} - 2\alpha \Psi \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta} - 2\beta \Psi^* \mathcal{M}_{\alpha,\beta+1} + \right. \\
 & - 2\alpha(\beta - 1) \Psi^* \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta} - 2\beta(\alpha - 1) \Psi \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1} - [\alpha + \beta + (\alpha - \beta)^2] \mathcal{M}_{\alpha,\beta} + \\
 & \left. + \alpha(\alpha - 1) \mathcal{M}_{2,0} \mathcal{M}_{\alpha-2,\beta} + \beta(\beta - 1) \mathcal{M}_{0,2} \mathcal{M}_{\alpha,\beta-2} + 2\alpha\beta \mathcal{M}_{1,1} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta-1} \right\}.
 \end{aligned} \tag{6.38}$$

Mit der Gleichung (6.38) sind wir mit dem dissipativen Anteil der Bewegungsgleichung (6.28) am Ende angelangt und kommen nun zur Berechnung des hamilton'schen Anteils. Die Rechnungen für diesen sind die gleichen, die bereits im Kapitel 5 in den Abschnitten 5.1 und 5.2 durchgeführt wurden. Wir wollen daher das Ergebnis aus der Momentengleichung (5.21) auf Seite 77 übernehmen und erhalten so für hamilton'schen Anteil der Dynamik:

$$\begin{aligned}
 \left[i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr}\{\hat{a}^{\dagger \alpha} \hat{a}^\beta \hat{\rho}(t)\} \right]_{\text{Hamilton}} = & -Jz [\beta \Psi(t) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}(t) - \alpha \Psi^*(t) \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}(t)] + \\
 & + U(\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1}(t) + \frac{1}{2} U (\beta(\beta - 1) - \alpha(\alpha - 1)) \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(t).
 \end{aligned} \tag{6.39}$$

Mit (6.39) und (6.38) haben wir sowohl den hamilton'schen als auch den dissipativen Anteil der Bewegungsgleichung (6.28) berechnet. Fügen wir beides zusammen, so erhalten wir schließlich für die Zeitentwicklung des Erwartungswertes (6.37) des Operators $\hat{a}^{\dagger\alpha}\hat{a}^\beta$ in der Molekularfeld-Näherung und unter der Annahme eines homogenen Systems:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(t) = & -Jz [\beta \Psi(t) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}(t) - \alpha \Psi^*(t) \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}(t)] + \\
 & + U(\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1}(t) + \frac{1}{2} U (\beta(\beta - 1) - \alpha(\alpha - 1)) \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(t) + \\
 & + i\hbar\kappa z \left\{ 2\alpha \mathcal{M}_{2,1}(t) \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}(t) + 2\beta \mathcal{M}_{1,2}(t) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}(t) - 2\alpha \Psi(t) \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta}(t) + \right. \\
 & - 2\beta \Psi^*(t) \mathcal{M}_{\alpha,\beta+1}(t) - 2\alpha(\beta - 1) \Psi^* \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta} - 2\beta(\alpha - 1) \Psi(t) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}(t) + \\
 & - [\alpha + \beta + (\alpha - \beta)^2] \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(t) + \alpha(\alpha - 1) \mathcal{M}_{2,0}(t) \mathcal{M}_{\alpha-2,\beta}(t) + \\
 & \left. + \beta(\beta - 1) \mathcal{M}_{0,2}(t) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-2}(t) + 2\alpha\beta \mathcal{M}_{1,1} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta-1}(t) \right\}. \tag{6.40}
 \end{aligned}$$

Als Letztes wollen wir diese Bewegungsgleichung dimensionslos schreiben. Dazu führen wir neue Zeit- und Energieskalen ein:

$$\boxed{\tau = t\kappa z, \quad \tilde{U} = U/(\hbar\kappa z), \quad \tilde{J} = J/(\hbar\kappa)}. \tag{6.41}$$

In diesen neuen Skalen lautet die Bewegungsgleichung (6.40):

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 \frac{d}{d\tau} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}(\tau) = & -i\tilde{U}(\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1} - 2\alpha \Psi \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta} - 2\beta \Psi^* \mathcal{M}_{\alpha,\beta+1} + \\
 & - \left[\frac{1}{2} i\tilde{U} (\beta(\beta - 1) - \alpha(\alpha - 1)) + \alpha + \beta + (\alpha - \beta)^2 \right] \mathcal{M}_{\alpha,\beta} + \\
 & + 2\alpha \left[\mathcal{M}_{2,1} - \left(\beta - 1 + i\frac{1}{2} \tilde{J} \right) \Psi^* \right] \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta} + 2\beta \left[\mathcal{M}_{1,2} - \left(\alpha - 1 - i\frac{1}{2} \tilde{J} \right) \Psi \right] \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1} + \\
 & + 2\alpha\beta \mathcal{M}_{1,1} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta-1} + \alpha(\alpha - 1) \mathcal{M}_{2,0} \mathcal{M}_{\alpha-2,\beta} + \beta(\beta - 1) \mathcal{M}_{0,2} \mathcal{M}_{\alpha,\beta-2}.
 \end{aligned}
 } \tag{6.42}$$

Diese Bewegungsgleichung bezeichnen wir als *Momentengleichung* und bildet den Startpunkt für alle folgenden Betrachtungen der zeitlichen Entwicklung unseres Quantensystems.

Man beachte, dass diese Momentengleichung symmetrisch ist unter der Vertauschung von α und β und gleichzeitiger komplexer Konjugation. Dies lässt sich zurückführen auf die U(1)-Eichinvarianz des zu Grunde liegenden HAMILTON-Operators. Außerdem ist der dissipative Anteil der Dynamik in der Mastergleichung (6.1) und sogar die Quantensprung-Operatoren $\hat{c}_{i,j} = (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_j^\dagger)(\hat{a}_i - \hat{a}_j)$ für sich allein genommen bereits U(1)-eichinvariant. Dies ist entscheidend, da in der superfluiden Phase diese Symmetrie gebrochen ist.

6.3 Herleitung der Momentengleichung mit Hilfe des GUTZWILLER-Ansatzes

In diesem Abschnitt wollen wir die Momentengleichung (6.42) aus der Mastergleichung (6.1) auf eine andere äquivalente Art herleiten. Dazu benutzen wir eine Verallgemeinerung des sogenannten GUTZWILLER-Ansatzes. DIEHL ET AL. [2010] haben diesen Ansatz als Grundlage für ihre numerische Berechnungen bei der Untersuchung dieses Modells benutzt. Wir wollen mit Hilfe dieses Ansatzes die Momentengleichung (6.42) reproduzieren, um diese zu validieren.

Der ursprüngliche GUTZWILLER-Ansatz geht davon aus, dass die Vielteilchen-Wellenfunktion sich in ein Produkt aus Wellenfunktionen auf jeweils einem Gitterplatz zerlegen lässt. Da wir nicht auf der Ebene von Wellenfunktionen arbeiten, sondern mit einem statistischen Gemisch, wird dieser Ansatz auf den statistischen Operator $\hat{\rho}$ erweitert. Dies geschieht in dem Sinne, dass $\hat{\rho}$ sich in statistische Operatoren $\hat{\rho}_i$ auf jeweils einem Gitterplatz i aufspalten lässt:

$$\hat{\rho} = \bigotimes_i \hat{\rho}_i. \quad (6.43)$$

Diese sind wie der statistische Operator $\hat{\rho}$ des gesamten Gitters jeweils auf Eins normiert, d. h.:

$$\text{Tr}_i \{ \hat{\rho}_i \} = 1, \quad (6.44)$$

wobei sich die Spur $\text{Tr}_i \{ \bullet \}$ über die Freiheitsgrade des Gitterplatz i erstreckt. Da die einzelnen Gitterplätze unabhängige Freiheitsgrade besitzen, spaltet die sich über das gesamte Gitter erstreckende Spur in Spuren auf jeweils einem Gitterplatz auf:

$$\text{Tr} \{ \hat{\rho} \} = \text{Tr} \left\{ \bigotimes_i \hat{\rho}_i \right\} = \prod_i \text{Tr}_i \{ \hat{\rho}_i \}. \quad (6.45)$$

Anstatt sich die Zeitentwicklung des statistischen Operators $\hat{\rho}$ des gesamten Gitters anzuschauen, können wir uns nun auf die zeitliche Dynamik des statistischen Operators $\hat{\rho}_k$ auf einem Gitterplatz k beschränken. Dazu spüren wir alle Gitterplätze i ungleich k aus:

$$\hat{\rho}_k = \text{Tr}_{\neq k} \{ \hat{\rho} \} = \prod_{i \neq k} \text{Tr}_i \{ \hat{\rho}_i \}. \quad (6.46)$$

Dies wenden wir auf die Mastergleichung (6.1) an und betrachten der Übersichtlichkeit halber den hamilton'schen und den dissipativen Anteil separat. Beginnen wir mit Letzterem:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_{\neq \ell} \{ \mathcal{L}[\hat{\rho}(t)] \} &=: \mathcal{L}_\ell[\hat{\rho}_\ell] \\ &= \frac{1}{2} \kappa \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ 2\hat{c}_{i,j} \hat{\rho} \hat{c}_{i,j}^\dagger - \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{c}_{i,j}^\dagger \hat{c}_{i,j} \right\}. \end{aligned} \quad (6.47)$$

Enthalten die Quantensprung-Operatoren $\hat{c}_{i,j}$ keine Leiteroperatoren des ℓ -ten Gitterplatzes, so können wir die Operatoren in der Spur zyklisch permutieren. Dadurch summieren sich alle drei unter der Spur auftretenden Terme zu Null. Demnach ist entweder $i = \ell$ oder $j = \ell$. So erhalten wir:

$$\mathcal{L}_\ell[\hat{\rho}_\ell] = \frac{1}{2} \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ 2\hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho} \hat{c}_{i,\ell}^\dagger + 2\hat{c}_{\ell,i} \hat{\rho} \hat{c}_{\ell,i}^\dagger - \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} - \hat{c}_{\ell,i}^\dagger \hat{c}_{\ell,i} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{c}_{\ell,i}^\dagger \hat{c}_{\ell,i} \right\}. \quad (6.48)$$

Die Summation erstreckt sich über alle nächsten Nachbarn i des Gitterplatzes ℓ .

Analog dem Schritt von Gleichung (6.9) zu Gleichung (6.13) benutzen wir die Eigenschaft der Quantensprung-Operatoren, dass sie ihr Vorzeichen ändern, wenn man ihre beiden Indizes vertauscht. Da immer zwei Quantensprung-Operatoren zusammen auftauchen, ändert sich das Vorzeichen insgesamt nicht, jedoch treten nach Vertauschung der Indizes in Gleichung (6.48) die einzelnen Terme doppelt auf. Dies führt zu dem Ausdruck:

$$\mathcal{L}_\ell[\hat{\rho}_\ell] = \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ 2\hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho} \hat{c}_{i,\ell}^\dagger - \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} \right\}. \quad (6.49)$$

Nun spalten wir den statistischen Operator $\hat{\rho}$ des gesamten Gitters gemäß dem GUTZWILLER-Ansatz aus Gleichung (6.43) auf:

$$\hat{\rho} = \dots \otimes \hat{\rho}_i \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_k \otimes \dots \otimes \hat{\rho}_\ell \otimes \dots \quad (6.50)$$

Für die statistischen Operatoren $\hat{\rho}_k$ auf Gitterplätzen mit $k \neq i, \ell$ können die Spuren explizit ausgeführt werden. Für den ersten Term in der Spur in Gleichung (6.49) gilt beispielsweise:

$$\text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ 2\hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho} \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \right\} = \text{Tr}_i \left\{ 2\hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \right\} \prod_{j \neq i, \ell} \text{Tr}_j \left\{ \hat{\rho}_j \right\} = \text{Tr}_i \left\{ 2\hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \right\}. \quad (6.51)$$

Wobei wir im zweiten Schritt die Normierung (6.44) der statistischen Operatoren eines Gitterplatzes ausgenutzt haben. Dies wenden wir auf alle drei Terme in der Spur an und bekommen somit:

$$\mathcal{L}_\ell[\hat{\rho}_\ell] = \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \text{Tr}_i \left\{ 2\hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell \hat{c}_{i,\ell}^\dagger - \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell - \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} \right\}. \quad (6.52)$$

An dieser Stelle sei angemerkt, dass in diesem Ausdruck die Quantensprung-Operatoren nicht zyklisch vertauscht werden können, da sich die Spur nur über die Freiheitsgrade des Gitterplatzes i , nicht jedoch über die des Gitterplatzes ℓ erstreckt.

Die hier auftretende Spur wollen wir ausrechnen. Dazu benutzen wir die explizite Form der Quantensprung-Operatoren $\hat{c}_{i,\ell}$. Es gilt:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\ell}^\dagger &= (\hat{a}_i^\dagger - \hat{a}_\ell^\dagger)(\hat{a}_i + \hat{a}_\ell) \\ &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \end{aligned} \quad (6.53)$$

und

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\ell} &= (\hat{a}_i^\dagger + \hat{a}_\ell^\dagger)(\hat{a}_i - \hat{a}_\ell) \\ &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell. \end{aligned} \quad (6.54)$$

Für die Berechnung von Gleichung (6.52) benötigen wir das Produkt aus dem Quantensprung-Operator und seiner Adjungierten. Dies wollen wir explizit ausschreiben:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} &= (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell)(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell) \\ &= \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\ &+ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\ &- \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\ &- \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell. \end{aligned} \quad (6.55)$$

Die Leiteroperatoren in diesem Ausdruck bringen wir in Normalordnung:

$$\begin{aligned}
 \hat{c}_{i\ell}^\dagger \hat{c}_{i\ell} &= \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i^2 + 2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i \hat{a}_\ell - 2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^2 \hat{a}_\ell^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\
 &+ \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i \hat{a}_\ell - \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_\ell + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell^2 - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell + \\
 &- \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^2 \hat{a}_\ell^\dagger - 2\hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + 2\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell - \hat{a}_i^2 \hat{a}_\ell^{\dagger 2} + \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\
 &- \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell^2 - \hat{a}_i \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{a}_\ell - \hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{a}_\ell^2 + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \\
 &= \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i^2 + 2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - 2\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell - \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_\ell^2 - \hat{a}_i^2 \hat{a}_\ell^{\dagger 2} - 2\hat{a}_i \hat{a}_\ell^\dagger + 2\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{a}_\ell^2. \quad (6.56)
 \end{aligned}$$

Hiermit können wir die letzten beiden Terme in der Spur in Gleichung (6.52), in welchen die zwei Quantensprung-Operatoren direkt zusammen stehen, ausschreiben. Für den ersten dieser beiden Terme erhält man:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_i \left\{ \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell \right\} &= \mathcal{M}_{2,2}^{(i)} \hat{\rho}_\ell + 2\mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \hat{\rho}_\ell - 2\mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell - \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \hat{a}_\ell^2 \hat{\rho}_\ell + \\
 &- \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{\rho}_\ell - 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell + 2\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell + \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{a}_\ell^2 \hat{\rho}_\ell. \quad (6.57)
 \end{aligned}$$

Für den zweiten Term in der Spur in Gleichung (6.52) ergibt sich analog:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_i \left\{ \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \hat{c}_{i,\ell} \right\} &= \mathcal{M}_{2,2}^{(i)} \hat{\rho}_\ell + 2\mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \hat{\rho}_\ell - 2\mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell - \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^2 + \\
 &- \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger 2} - 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + 2\hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{a}_\ell^2. \quad (6.58)
 \end{aligned}$$

Hier haben wir analog wie im Abschnitt 5.1 das Moment $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(i)}$ auf dem Gitterplatz i eingeführt. Es ist definiert durch:

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(i)}(t) := \text{Tr}_i \left\{ \hat{a}_i^{\dagger \alpha} \hat{a}_i^\beta \hat{\rho}_i(t) \right\}. \quad (6.59)$$

Den ersten Term in der Spur in Gleichung (6.52) müssen wir gesondert betrachten, da bei diesem zwischen den beiden Quantensprung-Operatoren der statistische Operator steht:

$$\text{Tr}_i \left\{ \hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \right\} = \text{Tr}_i \left\{ (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell) \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i - \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell) \right\}. \quad (6.60)$$

Im Folgenden werden wir das Tensorprodukt \otimes zwischen den statistischen Operatoren verschiedener Gitterplätze der Kürze halber weglassen. Die Operatoren auf dem Gitterplatz i können wir in der Spur zyklisch permutieren und außerdem mit den Operatoren des Gitterplatzes ℓ vertauschen. Dies nutzen wir intensiv aus und erhalten:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_i \left\{ \hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell \hat{c}_{i,\ell}^\dagger \right\} &= \text{Tr}_i \left\{ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{\rho}_i \hat{\rho}_\ell + \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{a}_i \hat{\rho}_i \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell - \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{\rho}_i \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{\rho}_i \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \right. \\
 &- \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell - \hat{a}_i^{\dagger 2} \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell + \hat{a}_i \hat{a}_i^\dagger \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{a}_i^\dagger \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\
 &+ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^2 \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell - \hat{a}_i^2 \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger - \hat{a}_i \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\
 &\left. - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell - \hat{a}_i^\dagger \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell + \hat{a}_i \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{\rho}_i \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \right\}, \quad (6.61)
 \end{aligned}$$

oder durch die Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(i)}$ ausgedrückt:

$$\begin{aligned}
 &= \mathcal{M}_{2,2}^{(i)} \hat{\rho}_\ell + \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \hat{\rho}_\ell + \mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell - \mathcal{M}_{1,2}^{(i)} \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger - \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger - \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\
 &- \mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell - \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell - \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell + \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\
 &+ \mathcal{M}_{1,2}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell + \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell - \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger - \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell + \\
 &- \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell - \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell + \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell.
 \end{aligned} \tag{6.62}$$

In diesem Ausdruck fassen wir Terme mit dem gleichen Moment zusammen. Die Kombinationen von Operatoren lassen sich dann als Kommutatoren schreiben:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_i \{ \hat{c}_{i,\ell} \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_{i,\ell} \} &= \mathcal{M}_{2,2}^{(i)} \hat{\rho}_\ell + \frac{1}{2} \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \{ [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] - [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] + [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell] - [\hat{a}_\ell, \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell] + 4\hat{\rho}_\ell \} + \\
 &- \mathcal{M}_{2,1}^{(i)} [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell] + \mathcal{M}_{1,2}^{(i)} [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell] + \\
 &- \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \{ \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger - \hat{a}_\ell^\dagger [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] \} - \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \{ \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell + [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell \} + \\
 &- \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell - \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell.
 \end{aligned} \tag{6.63}$$

Nun fügen wir die Spuren (6.57), (6.58) und (6.63) in den dissipativen Anteil der Dynamik, wie er in Gleichung (6.52) gegeben ist, ein:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_\ell [\hat{\rho}_\ell] &= \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left([\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] - [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] + [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell] - [\hat{a}_\ell, \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell] + 4\hat{\rho}_\ell - 2\hat{\rho}_\ell - 2\hat{\rho}_\ell \right) + \right. \\
 &- 2\mathcal{M}_{2,1}^{(i)} [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell] + 2\mathcal{M}_{1,2}^{(i)} [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell] + \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(-2\hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + 2\hat{a}_\ell^\dagger [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] + 2\hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + 2\hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \right) + \\
 &+ \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \left(-2\hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell - 2[\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell + 2\hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell + 2\hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \right) + \\
 &+ \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \left(-2\hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell + \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^2 + \hat{a}_\ell^2 \hat{\rho}_\ell \right) + \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \left(-2\hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger 2} + \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{\rho}_\ell \right) + \\
 &\left. + \left(2\hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger + 2\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell - 2\hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell - \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{a}_\ell^2 - 2\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell - \hat{a}_\ell^{\dagger 2} \hat{a}_\ell^2 \hat{\rho}_\ell \right) \right\}.
 \end{aligned} \tag{6.64}$$

Sowohl die Operatoren bei den Momenten $\mathcal{M}_{0,2}^{(i)}$ und $\mathcal{M}_{2,0}^{(i)}$ als auch die Operatoren in der letzten Klammer lassen zusammenfassen und durch Kommutatoren ausdrücken. Wir erhalten dann:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_\ell [\hat{\rho}_\ell] &= \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left([\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] - [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] + [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell] - [\hat{a}_\ell, \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell] \right) - 2\mathcal{M}_{2,1}^{(i)} [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell] + \right. \\
 &+ 2\mathcal{M}_{1,2}^{(i)} [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell] + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(\hat{a}_\ell^\dagger [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \right) + 2\mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \left(-[\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell + \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell \right) + \\
 &- \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \left([\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell] - [\hat{a}_\ell, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] \right) - \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \left([\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] - [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell] \right) + \\
 &\left. + \left([\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell] - [\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell, \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] + [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] - [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] \right) \right\}.
 \end{aligned} \tag{6.65}$$

Man sieht leicht, dass dieser Operator hermitesch ist. In der Tat kann man $\mathcal{L}_\ell [\hat{\rho}_\ell]$ auch schreiben als:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_\ell[\hat{\rho}_\ell] = & \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left([\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] + [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell] \right) - 2\mathcal{M}_{2,1}^{(i)} [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell] + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(\hat{a}_\ell^\dagger [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] + \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \right) + \right. \\ & \left. - \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \left([\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell] - [\hat{a}_\ell, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] \right) + \left([\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell] + [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] \right) \right\} + \text{h.c.} \quad (6.66) \end{aligned}$$

Wir können damit den Dissipator \mathcal{L} aufspalten in zwei nicht hermitesche Teile $\mathcal{L}^{(1)}$ und $\mathcal{L}^{(2)} = \mathcal{L}^{(1)\dagger}$. Hierbei ist $\mathcal{L}^{(1)}$ der explizit ausgeschriebene Anteil in Gleichung (6.66).

Diesen Dissipator wenden wir auf den Operator $\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta$ an und spuren die Freiheitsgrade des Gitterplatzes ℓ aus.

$$\begin{aligned} L_\ell^{(\alpha,\beta)} := & \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(k)} \Big|_{\text{dissipativ}} = \text{Tr}_\ell \left\{ \mathcal{L}_\ell[\hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} = \text{Tr}_\ell \left\{ (\mathcal{L}_\ell^{(1)}[\hat{\rho}_\ell] + \mathcal{L}_\ell^{(1)}[\hat{\rho}_\ell]^\dagger) \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} \\ = & \text{Tr}_\ell \left\{ \mathcal{L}_\ell^{(1)}[\hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta + (\hat{a}_\ell^{\dagger\beta} \hat{a}_\ell^\alpha \mathcal{L}_\ell^{(1)}[\hat{\rho}_\ell]^\dagger)^\dagger \right\} = \text{Tr}_\ell \left\{ \mathcal{L}_\ell^{(1)}[\hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta + (\mathcal{L}_\ell^{(1)}[\hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\beta} \hat{a}_\ell^\alpha)^\dagger \right\} \\ = & \text{Tr}_\ell \left\{ \mathcal{L}_\ell^{(1)}[\hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta + \text{h.c.} (\alpha \leftrightarrow \beta) \right\} = \text{Tr}_\ell \left\{ \mathcal{L}_\ell^{(1)}[\hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} + \text{c.c.} (\alpha \leftrightarrow \beta). \quad (6.67) \end{aligned}$$

Hierbei bedeutet h.c. ($\alpha \leftrightarrow \beta$) hermitesche und c.c. ($\alpha \leftrightarrow \beta$) komplexe Konjugation bei einer gleichzeitigen Vertauschung der Indizes α und β . Hier setzen wir $\mathcal{L}^{(1)}[\hat{\rho}_\ell]$ aus Gleichung (6.66) ein:

$$\begin{aligned} L_\ell^{(\alpha,\beta)} = & \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left(\text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} + \text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} \right) + \right. \\ & - 2\mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(\text{Tr}_\ell \left\{ \hat{a}_\ell^\dagger [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} + \text{Tr}_\ell \left\{ \hat{a}_\ell^\dagger \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} \right) + \\ & - \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \left(\text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} - \text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell, \hat{a}_\ell \hat{\rho}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} \right) + \\ & \left. + \left(\text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} + \text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell \hat{a}_\ell^\dagger] \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\} \right) \right\} + \text{c.c.} (\alpha \leftrightarrow \beta). \quad (6.68) \end{aligned}$$

Nun wenden wir Gleichung (5.7) auf Seite 74 an, sodass wir die Spuren über den Gitterplatz ℓ als Erwartungswerte $\langle \hat{O} \rangle_\ell = \text{Tr}_\ell \{ \hat{O} \hat{\rho}_\ell \}$ über diesen Gitterplatz schreiben können. Wir bekommen dann:

$$\begin{aligned} L_\ell^{(\alpha,\beta)} = & \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left(\left\langle \hat{a}_\ell^\dagger [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell] \right\rangle_\ell + \left\langle \hat{a}_\ell [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell^\dagger] \right\rangle_\ell \right) - 2\mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \left\langle [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell] \right\rangle_\ell + \right. \\ & + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(\left\langle \hat{a}_\ell^\dagger [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \hat{a}_\ell^\dagger, \hat{a}_\ell] \right\rangle_\ell + \left\langle \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \hat{a}_\ell^\dagger \right\rangle_\ell \right) - \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \left(\left\langle \hat{a}_\ell [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell] \right\rangle_\ell - \left\langle [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell] \hat{a}_\ell \right\rangle_\ell \right) + \\ & \left. + \left(\left\langle \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell] \right\rangle_\ell + \left\langle \hat{a}_\ell^\dagger [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell] \right\rangle_\ell \right) \right\} + \text{c.c.} (\alpha \leftrightarrow \beta). \quad (6.69) \end{aligned}$$

Die hier auftretenden Kommutatoren können wir mit Hilfe der Gleichungen (6.31) auflösen. Wir erhalten dann Produkte von Momenten auf den Gitterplätzen i und ℓ :

$$\begin{aligned} L_\ell^{(\alpha,\beta)} = & \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left(-\alpha \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(\ell)} + \beta \left\langle \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^{\beta-1} \right\rangle_\ell \right) + 2\alpha \mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}^{(\ell)} + \right. \\ & \left. + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(\left\langle \hat{a}_\ell^\dagger (-\alpha + 1) \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta - \alpha \beta \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_\ell^{\beta-1} \right\rangle_\ell + \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta}^{(\ell)} + \beta \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}^{(\ell)} \right) + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -\mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \left(\left\langle -\alpha \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger \alpha-1} \hat{a}_\ell^\beta \right\rangle_\ell + \alpha \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta+1}^{(\ell)} \right) + \\
 & + \left((\beta - \alpha) \left\langle \hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger \alpha} \hat{a}_\ell^\beta \right\rangle_\ell - \alpha \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} \right) \} + \text{c.c.} (\alpha \leftrightarrow \beta) \quad (6.70)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & = \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left(-\alpha \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} + \beta \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} + \alpha \beta \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta-1}^{(\ell)} \right) + 2\alpha \mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta}^{(\ell)} + \right. \\
 & + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(-(\alpha+1) \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta}^{(\ell)} - \alpha \beta \mathcal{M}_{\alpha, \beta-1}^{(\ell)} + \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta}^{(\ell)} + \beta \mathcal{M}_{\alpha, \beta-1}^{(\ell)} \right) + \\
 & - \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \left(-\alpha \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta+1}^{(\ell)} - \alpha(\alpha-1) \mathcal{M}_{\alpha-2, \beta}^{(\ell)} + \alpha \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta+1}^{(\ell)} \right) + \\
 & \left. + \left((\beta - \alpha) \left[\mathcal{M}_{\alpha+1, \beta+1}^{(\ell)} + \alpha \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} \right] - \alpha \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} \right) \right\} + \text{c.c.} (\alpha \leftrightarrow \beta) \quad (6.71)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & = \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left((\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} + \alpha \beta \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta-1}^{(\ell)} \right) + 2\alpha \mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta}^{(\ell)} + \right. \\
 & + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(-\alpha \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta}^{(\ell)} - \beta(\alpha-1) \mathcal{M}_{\alpha, \beta-1}^{(\ell)} \right) + \\
 & \left. + \alpha(\alpha-1) \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-2, \beta}^{(\ell)} + (\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta+1}^{(\ell)} + \alpha(\beta - \alpha - 1) \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} \right\} + \text{c.c.} (\alpha \leftrightarrow \beta). \quad (6.72)
 \end{aligned}$$

Nun wollen wir die komplex konjugierten Terme c.c. ($\alpha \leftrightarrow \beta$) explizit ausschreiben. Dabei beachten wir, dass die Momente gemäß der Gleichung (5.18) hermitesch sind. Wir erhalten somit:

$$\begin{aligned}
 L_\ell^{(\alpha, \beta)} & = \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \left((\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} - (\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} + \alpha \beta \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta-1}^{(\ell)} + \alpha \beta \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta-1}^{(\ell)} \right) + \right. \\
 & + 2\alpha \mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta}^{(\ell)} + 2\beta \mathcal{M}_{1,2}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha, \beta-1}^{(\ell)} + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(-\alpha \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta}^{(\ell)} - \beta(\alpha-1) \mathcal{M}_{\alpha, \beta-1}^{(\ell)} \right) + \\
 & + 2\mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \left(-\beta \mathcal{M}_{\alpha, \beta+1}^{(\ell)} - \alpha(\beta-1) \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta}^{(\ell)} \right) + \\
 & + \alpha(\alpha-1) \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-2, \beta}^{(\ell)} + \beta(\beta-1) \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha, \beta-2}^{(\ell)} + \\
 & \left. + (\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta+1}^{(\ell)} + \alpha(\beta - \alpha - 1) \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} - (\beta - \alpha) \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta+1}^{(\ell)} + \beta(\alpha - \beta - 1) \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} \right\} \quad (6.73)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & = \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ 2\alpha \beta \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta-1}^{(\ell)} + 2\alpha \mathcal{M}_{2,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta}^{(\ell)} + 2\beta \mathcal{M}_{1,2}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha, \beta-1}^{(\ell)} + \right. \\
 & + 2\mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \left(-\alpha \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta}^{(\ell)} - \beta(\alpha-1) \mathcal{M}_{\alpha, \beta-1}^{(\ell)} \right) + 2\mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \left(-\beta \mathcal{M}_{\alpha, \beta+1}^{(\ell)} - \alpha(\beta-1) \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta}^{(\ell)} \right) + \\
 & \left. + \alpha(\alpha-1) \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-2, \beta}^{(\ell)} + \beta(\beta-1) \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha, \beta-2}^{(\ell)} - (\alpha + \beta + (\beta - \alpha)^2) \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} \right\}. \quad (6.74)
 \end{aligned}$$

Ordnen wir die Terme noch ein wenig um, so erhalten wir schließlich für den dissipativen Anteil der Dynamik von $\langle \hat{a}_k^{(\alpha)\dagger} \hat{a}_k^{(\beta)} \rangle = \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(k)}$:

$$\begin{aligned}
 L_\ell^{(\alpha, \beta)} & = \kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ -2\alpha \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha+1, \beta}^{(\ell)} - 2\beta \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha, \beta+1}^{(\ell)} - (\alpha + \beta + (\beta - \alpha)^2) \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(\ell)} + \right. \\
 & + 2\alpha \left[\mathcal{M}_{2,1}^{(i)} - (\beta - 1) \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \right] \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta}^{(\ell)} + 2\beta \left[\mathcal{M}_{1,2}^{(i)} - (\alpha - 1) \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \right] \mathcal{M}_{\alpha, \beta-1}^{(\ell)} + \\
 & \left. + 2\alpha \beta \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1, \beta-1}^{(\ell)} + \beta(\beta-1) \mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha, \beta-2}^{(\ell)} + \alpha(\alpha-1) \mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-2, \beta}^{(\ell)} \right\} = \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha, \beta}^{(k)} \Big|_{\text{dissipativ}}. \quad (6.75)
 \end{aligned}$$

Nun widmen wir uns dem unitären Anteil der zeitlichen Entwicklung (6.1). Auch hier spüren wir zunächst alle Freiheitsgrade aller Gitterplätze ungleich dem ℓ -ten aus:

$$\begin{aligned}
 \left. \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right\} \right|_{\text{HAMILTON}} &= \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] \right\} = \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ \left[-J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \right] \right\} \\
 &= \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ -J \sum_{\langle i,j \rangle} [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{\rho}(t)] + \frac{1}{2} U \sum_i [\hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \hat{\rho}(t)] \right\} \\
 &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{\rho}(t)] \right\} + \frac{1}{2} U \sum_i \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ [\hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \hat{\rho}(t)] \right\}.
 \end{aligned} \tag{6.76}$$

Die Spur eines Kommutators² ist Null, falls über alle Freiheitsgrade der in ihm enthaltenen Operatoren gespurt wird. Also ist beispielsweise $\text{Tr}_i \{ [\hat{a}_i, \hat{\rho}_i] \} = 0$, jedoch ist im Allgemeinen $\text{Tr}_i \{ [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_j] \} \neq 0$. Damit bleiben von der Summe der Wechselwirkungsstärke U nur die Summanden mit $i = \ell$ übrig. Den Tunnelterm wollen wir separat betrachten. Alle Summanden mit $i, j \neq \ell$ verschwinden und damit muss einer der beiden Leiteroperatoren auf den Gitterplatz ℓ wirken:

$$\begin{aligned}
 -J \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{\rho}(t)] \right\} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ \delta_{j,\ell} [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell, \hat{\rho}(t)] + \delta_{i,\ell} [\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_j, \hat{\rho}(t)] \right\} \\
 &= -J \sum_{\langle i|\ell \rangle} \text{Tr}_i \left\{ [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_\ell, \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell] + [\hat{a}_\ell^\dagger \hat{a}_i, \hat{\rho}_i \otimes \hat{\rho}_\ell] \right\}.
 \end{aligned} \tag{6.77}$$

Die Operatoren im Kommutator unter der Spur, über deren Freiheitsgrade nicht gespurt wird, können wir zusammen mit dem Kommutator aus der Spur nehmen. In der Spur bleiben nur die Operatoren der Freiheitsgrade, über welche gespurt wird, d. h.:

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}_i \left\{ [\hat{A}_i \hat{A}_j, \hat{B}_i \hat{B}_j] \right\} &= \text{Tr}_i \left\{ \hat{A}_i \hat{A}_j \hat{B}_i \hat{B}_j - \hat{B}_i \hat{B}_j \hat{A}_i \hat{A}_j \right\} \\
 &= \text{Tr}_i \left\{ \hat{A}_i \hat{B}_i \hat{A}_j \hat{B}_j - \hat{A}_i \hat{B}_i \hat{B}_j \hat{A}_j \right\} = \text{Tr}_i \left\{ \hat{A}_i \hat{B}_i \right\} [\hat{A}_j, \hat{B}_j].
 \end{aligned} \tag{6.78}$$

Mit dieser Einsicht nimmt der Tunnelterm folgende Form an:

$$-J \sum_{\langle i,j \rangle} \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ [\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j, \hat{\rho}(t)] \right\} = -J \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left(\text{Tr}_i \left\{ \hat{a}_i^\dagger \hat{\rho}_i \right\} [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell] + \text{Tr}_i \left\{ \hat{a}_i \hat{\rho}_i \right\} [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell] \right). \tag{6.79}$$

Hier treten mit $\mathcal{M}_{0,1}^{(i)}$ bzw. $\mathcal{M}_{1,0}^{(i)}$ bereits die einfachsten Momente auf dem Gitterplatz i auf. Betrachten wir wieder den hamilton'schen Anteil als Ganzes, so haben wir insgesamt:

$$\left. \text{Tr}_{\neq \ell} \left\{ i\hbar \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right\} \right|_{\text{HAMILTON}} = -J \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left(\mathcal{M}_{1,0}^{(i)} [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell] + \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell] \right) + \frac{1}{2} U [\hat{n}_\ell (\hat{n}_\ell - 1), \hat{\rho}_\ell]. \tag{6.80}$$

²Dabei muss der Kommutator bzw. ein in ihm enthaltener Operator *spurtreu* sein. Ein Operator heißt *spurtreu*, wenn seine Spur endlich ist.

Mit Hilfe dieses Ausdrucks erhalten wir für den hamilton'schen Anteil der Dynamik des Operators $\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta$:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \text{Tr} \left\{ \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \hat{\rho} \right\} \Big|_{\text{HAMILTON}} = -J \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left(\mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \text{Tr}_\ell \left\{ \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta [\hat{a}_\ell, \hat{\rho}_\ell] \right\} + \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \text{Tr}_\ell \left\{ \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta [\hat{a}_\ell^\dagger, \hat{\rho}_\ell] \right\} \right) + \frac{1}{2} U \text{Tr}_\ell \left\{ \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta [\hat{n}_\ell(\hat{n}_\ell - 1), \hat{\rho}_\ell] \right\} \quad (6.81)$$

$$= -J \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left(\mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell] \hat{\rho}_\ell \right\} + \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{a}_\ell^\dagger] \hat{\rho}_\ell \right\} \right) + \frac{1}{2} U \text{Tr}_\ell \left\{ [\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta, \hat{n}_\ell(\hat{n}_\ell - 1)] \hat{\rho}_\ell \right\} \quad (6.82)$$

$$= -J \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left(-\alpha \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \text{Tr}_\ell \left\{ \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha-1} \hat{a}_\ell^\beta \hat{\rho}_\ell \right\} + \beta \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \text{Tr}_\ell \left\{ \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^{\beta-1} \hat{\rho}_\ell \right\} \right) + \frac{1}{2} (\beta - \alpha) U \text{Tr}_\ell \left\{ \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta (\hat{n}_\ell - 1) \hat{\rho}_\ell + \hat{n}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta \hat{\rho}_\ell \right\} \quad (6.83)$$

$$= i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(\ell)}(t) \Big|_{\text{HAMILTON}}. \quad (6.84)$$

Die Leiteroperatoren im Wechselwirkungsanteil ordnen wir normal. Für den ersten der beiden Terme gilt:

$$\hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta (\hat{n}_\ell - 1) = \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha+1} \hat{a}_\ell^{\beta+1} + \beta \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta - \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta. \quad (6.85)$$

Für den zweiten Term erhalten wir analog:

$$\hat{n}_\ell \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta = \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha+1} \hat{a}_\ell^{\beta+1} + \alpha \hat{a}_\ell^{\dagger\alpha} \hat{a}_\ell^\beta. \quad (6.86)$$

Dies setzen wir in die obige Gleichung (6.83) ein, womit sich für den hamilton'schen Anteil ergibt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(\ell)}(t) \Big|_{\text{HAMILTON}} = -J \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left(-\alpha \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}^{(\ell)} + \beta \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}^{(\ell)} \right) + \frac{1}{2} (\beta - \alpha) U \left(2 \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1}^{(\ell)} + (\alpha + \beta - 1) \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(\ell)} \right). \quad (6.87)$$

Schließlich wollen wir beide Anteile der Dynamik – den hamilton'schen und den dissipativen – zusammenfügen:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(\ell)}(t) = i\hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(\ell)}(t) \Big|_{\text{HAMILTON}} + i\hbar \mathbf{L}_\ell^{(\alpha,\beta)}. \quad (6.88)$$

Setzen wir hier die beiden Ergebnisse aus den Gleichungen (6.75) und (6.87) ein, so erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 \hbar \frac{d}{dt} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(\ell)}(t) = & -i(\beta - \alpha)U \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1}^{(\ell)} - 2\hbar\kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left(\alpha \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta}^{(\ell)} + \beta \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha,\beta+1}^{(\ell)} \right) + \\
 & + \left(-i \frac{1}{2} U(\beta - \alpha)(\alpha + \beta - 1) - \hbar\kappa z(\alpha + \beta + (\beta - \alpha)^2) \right) \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(\ell)} + \\
 & + iJ \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left(-\alpha \mathcal{M}_{1,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}^{(\ell)} + \beta \mathcal{M}_{0,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}^{(\ell)} \right) + \\
 & + \hbar\kappa \sum_{\langle i|\ell \rangle} \left\{ 2\alpha(\mathcal{M}_{2,1}^{(i)} - (\beta - 1)\mathcal{M}_{1,0}^{(i)}) \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta}^{(\ell)} + 2\beta(\mathcal{M}_{1,2}^{(i)} - (\alpha - 1)\mathcal{M}_{0,1}^{(i)}) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1}^{(\ell)} + \right. \\
 & \left. + 2\alpha\beta \mathcal{M}_{1,1}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta-1}^{(\ell)} + \beta(\beta - 1)\mathcal{M}_{0,2}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha,\beta-2}^{(\ell)} + \alpha(\alpha - 1)\mathcal{M}_{2,0}^{(i)} \mathcal{M}_{\alpha-2,\beta}^{(\ell)} \right\}.
 \end{aligned} \tag{6.89}$$

Als abschließende Näherung wollen wir nur homogene Systeme betrachten. Dann fallen alle Gitterplatz-Indizes weg und jede Summe liefert den Faktor z . Außerdem wollen wir mit dimensionslosen Größen gemäß Gleichung (6.41) rechnen. Wir erhalten dann dieselbe Momentengleichung wie in (6.42):

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{d\tau} \mathcal{M}_{\alpha,\beta} = & -i(\beta - \alpha)\tilde{U} \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1} - 2\alpha \mathcal{M}_{0,1} \mathcal{M}_{\alpha+1,\beta} - 2\beta \mathcal{M}_{1,0} \mathcal{M}_{\alpha,\beta+1} + \\
 & + \left(-i \frac{1}{2} \tilde{U}(\beta - \alpha)(\alpha + \beta - 1) - (\alpha + \beta + (\beta - \alpha)^2) \right) \mathcal{M}_{\alpha,\beta} + \\
 & + i\tilde{J} \left(-\alpha \mathcal{M}_{1,0} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta} + \beta \mathcal{M}_{0,1} \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1} \right) + \\
 & + 2\alpha(\mathcal{M}_{2,1} - (\beta - 1)\mathcal{M}_{1,0}) \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta} + 2\beta(\mathcal{M}_{1,2} - (\alpha - 1)\mathcal{M}_{0,1}) \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1} + \\
 & + 2\alpha\beta \mathcal{M}_{1,1} \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta-1} + \beta(\beta - 1)\mathcal{M}_{0,2} \mathcal{M}_{\alpha,\beta-2} + \alpha(\alpha - 1)\mathcal{M}_{2,0} \mathcal{M}_{\alpha-2,\beta}.
 \end{aligned} \tag{6.90}$$

Der GUTZWILLER-Ansatz (6.43) und die Molekularfeld-Näherung (D.7) sind äquivalente Näherungsmethoden, da bei beiden die Erwartungswerte von Produkten von Operatoren verschiedener Gitterplätze in die entsprechenden Produkte von Erwartungswerten faktorisieren. Damit bestätigt das hier hergeleitete Ergebnis (6.90) die bereits im vorherigen Abschnitt 6.2 hergeleitete Momentengleichung (6.42).

6.4 Zeitentwicklung des Ordnungsparameters

In diesem Abschnitt wenden wir die Momentengleichung (6.42) auf die zeitliche Entwicklung des Ordnungsparameters an. Der Ordnungsparameter Ψ ist definiert als Erwartungswert des Vernichters:

$$\Psi(t) := \text{Tr} \left\{ \hat{a} \hat{\rho}(t) \right\}. \tag{6.91}$$

Dies ist nichts Anderes als das Moment $\mathcal{M}_{0,1}(t)$. Wir können daher unsere Momentengleichung in der Form (6.42) für den Spezialfall $\alpha = 0$, $\beta = 1$ benutzen. Wir erhalten:

$$\frac{d}{d\tau} \Psi(\tau) = -i\tilde{U} \mathcal{M}_{1,2}(\tau) - 2\Psi^*(\tau) \mathcal{M}_{0,2}(\tau) - 2\Psi(\tau) + 2(\mathcal{M}_{1,2}(\tau) + \Psi(\tau)) \mathcal{M}_{0,0}(\tau). \tag{6.92}$$

Das hier auftretende Moment $\mathcal{M}_{0,0}(\tau) \equiv \langle \hat{a}^{\dagger 0} \hat{a}^0 \rangle$ ist identisch Eins. Benutzen wir diese Identität und fassen die Terme zusammen, so erhalten wir:

$$\frac{d}{d\tau}\Psi(\tau) = (-i\tilde{U} + 2)\mathcal{M}_{1,2}(\tau) - 2\Psi^*(\tau)\mathcal{M}_{0,2}(\tau). \quad (6.93)$$

Wie aus der Gleichung (6.42) schon ersichtlich war, verknüpft die zeitliche Entwicklung die einzelnen Momente $\mathcal{M}_{\alpha,\beta}(\tau)$ miteinander. Um den Ordnungsparameter zu bestimmen, benötigen wir daher auch die Gleichungen für die Momente $\mathcal{M}_{1,2}(\tau)$ und $\mathcal{M}_{0,2}(\tau)$.

Wir stellen zunächst die Bewegungsgleichung für das Moment $\mathcal{M}_{0,2}(\tau)$ auf. Dazu nehmen wir wieder die Momentengleichung (6.42) mit $\alpha = 0$ und $\beta = 2$:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\mathcal{M}_{0,2}(\tau) = & -i2\tilde{U}\mathcal{M}_{1,3}(\tau) - 4\Psi^*(\tau)\mathcal{M}_{0,3} + (-i\tilde{U} - 6)\mathcal{M}_{0,2}(\tau) + \\ & + 4(\mathcal{M}_{1,2}(\tau) + \Psi(\tau))\Psi(\tau) + 2\mathcal{M}_{0,2}(\tau). \end{aligned} \quad (6.94)$$

Hier lässt sich der letzte Term mit in die erste Klammer hinein nehmen. Wir erhalten:

$$\frac{d}{d\tau}\mathcal{M}_{0,2}(\tau) = -i2\tilde{U}\mathcal{M}_{1,3}(\tau) - 4\Psi^*(\tau)\mathcal{M}_{0,3} + 4\Psi(\tau)\mathcal{M}_{1,2}(\tau) - (i\tilde{U} + 4)\mathcal{M}_{0,2}(\tau) + 4\Psi(\tau)^2. \quad (6.95)$$

Zur Lösung dieser Gleichung benötigen wir die zusätzlichen Momente $\mathcal{M}_{0,3}(\tau)$ und $\mathcal{M}_{1,3}(\tau)$, welche in der Gleichung (6.93) für den Ordnungsparameter nicht aufgetreten sind. Die gleiche Aussage trifft auch auf die Bewegungsgleichung für das Moment $\mathcal{M}_{1,2}(\tau)$ zu. Auch hier erscheinen höhere Momente. Setzen wir in der Momentengleichung (6.42) $\alpha = 1$ und $\beta = 2$, so ergibt sich:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\mathcal{M}_{1,2}(\tau) = & -i\tilde{U}\mathcal{M}_{2,3}(\tau) - 2\Psi(\tau)\mathcal{M}_{2,2}(\tau) - 4\Psi^*(\tau)\mathcal{M}_{1,3}(\tau) - (i\tilde{U} + 4)\mathcal{M}_{1,2}(\tau) + \\ & + 2(\mathcal{M}_{2,1}(\tau) - \Psi^*(\tau))\mathcal{M}_{0,2}(\tau) + 4\mathcal{M}_{1,2}(\tau)\mathcal{M}_{1,1}(\tau) + 4\mathcal{M}_{1,1}(\tau)\Psi(\tau) + 2\mathcal{M}_{0,2}(\tau)\Psi^*(\tau). \end{aligned} \quad (6.96)$$

Hier ergänzen sich die zwei Terme proportional $\Psi^*\mathcal{M}_{0,2}$ zu Null. Fassen wir die restlichen Momente zusammen, so erhalten wir:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}\mathcal{M}_{1,2}(\tau) = & -i\tilde{U}\mathcal{M}_{2,3}(\tau) - 2\Psi(\tau)\mathcal{M}_{2,2}(\tau) - 4\Psi^*(\tau)\mathcal{M}_{1,3}(\tau) + \\ & - \left[i\tilde{U} + 4(\mathcal{M}_{1,1}(\tau) - 1) \right] \mathcal{M}_{1,2}(\tau) + 2\mathcal{M}_{0,2}(\tau)\mathcal{M}_{2,1}(\tau) + 4\Psi(\tau)\mathcal{M}_{1,1}. \end{aligned} \quad (6.97)$$

Das Moment $\mathcal{M}_{1,1}(\tau)$ ist nichts anderes als die Teilchenzahl auf einem Gitterplatz. Diese ist in der Molekularfeld-Näherung konstant, wie man durch Einsetzen von $\alpha = 1$ und $\beta = 1$ in die Momentengleichung (6.42) leicht nachprüfen kann.

Das Problem ist nun, dass in der Bewegungsgleichung eines Momentes immer auch Momente höherer Ordnung auftreten. Dies führt zu einer unendlichen Iteration von Gleichungen. Es liegt nahe, diese Iteration bei einer bestimmten Ordnung der Momente abubrechen. Auf ein analoges Problem sind wir bereits im Abschnitt 5.3 gestoßen. Dort haben wir im stationären Fall die Momente nach dem Ordnungsparameter entwickelt und den FOCK-Raum begrenzt. Diese Vorgehensweise wollen wir auch hier wählen.

6.5 Der Phasenübergang

Von hier an wollen wir auf analoge Weise vorgehen wie im Abschnitt 5.3, wo wir die Phasengrenze für den MOTT-Superfluid-Phasenübergang hergeleitet haben. Dazu spezialisieren wir

die Momentengleichung (6.42) auf stationäre Zustände. Dies führt zu einem zusätzlichen Term $i\tilde{\mu}(\beta - \alpha)\mathcal{M}_{\alpha,\beta}$ in der Momentengleichung. Im Fall eines offenen und getriebenen Quantensystems, wie in unserem Fall, hat $\tilde{\mu}$ *nicht* die Bedeutung eines chemischen Potentials, da das System sich *nicht* in einem thermodynamischen Gleichgewichts-Zustand befindet. Deswegen ist $\tilde{\mu}$ auch durch *keine* thermodynamische Relation bestimmt. Wir werden später jedoch sehen, dass wir an $\tilde{\mu}$ eine Bedingung stellen *müssen*, um physikalisch sinnvolle Ergebnisse zu erhalten.

Wir wählen außerdem die Phase ϕ der stationären Zustände aus Gleichung (5.27) so, dass der Ordnungsparameter reell ist. Dann lautet die *stationäre Momentengleichung*:

$$\begin{aligned}
 0 = & -i\tilde{U}(\beta - \alpha)\mathcal{M}_{\alpha+1,\beta+1} - 2\alpha\Psi\mathcal{M}_{\alpha+1,\beta} - 2\beta\Psi\mathcal{M}_{\alpha,\beta+1} + \\
 & - \left[\frac{1}{2}i\tilde{U}(\beta(\beta - 1) - \alpha(\alpha - 1)) - i\tilde{\mu}(\beta - \alpha) + \alpha + \beta + (\alpha - \beta)^2 \right] \mathcal{M}_{\alpha,\beta} + \\
 & + 2\alpha \left[\mathcal{M}_{2,1} - \left(\beta - 1 + i\frac{1}{2}\tilde{J} \right) \Psi \right] \mathcal{M}_{\alpha-1,\beta} + 2\beta \left[\mathcal{M}_{1,2} - \left(\alpha - 1 - i\frac{1}{2}\tilde{J} \right) \Psi \right] \mathcal{M}_{\alpha,\beta-1} + \\
 & + 2\alpha\beta\mathcal{M}_{1,1}\mathcal{M}_{\alpha-1,\beta-1} + \alpha(\alpha - 1)\mathcal{M}_{2,0}\mathcal{M}_{\alpha-2,\beta} + \beta(\beta - 1)\mathcal{M}_{0,2}\mathcal{M}_{\alpha,\beta-2}.
 \end{aligned} \tag{6.98}$$

Um diese Gleichung zu lösen, entwickeln wir, wie im Abschnitt 5.3, die Momente nach dem Ordnungsparameter. An der Argumentation ändert sich im Falle einer dissipativen Zeitentwicklung nichts. Wir schreiben daher unsere Momente gemäß Gleichung (5.40):

$$\mathcal{M}_{\alpha,\beta} = \Psi^{|\beta-\alpha|} \sum_{\ell=0}^{\infty} \Psi^{2\ell} \mathcal{M}_{\alpha,\beta}^{(2\ell+|\alpha-\beta|)}. \tag{6.99}$$

Ausgehend von der Momentengleichung (6.98) und der Entwicklung (6.99) wollen wir nun die Phasengrenze berechnen.

Die Phasengrenze

Wir beginnen damit, eine Gleichung für den Ordnungsparameter aufzustellen. Da wir hauptsächlich daran interessiert sind, wie der dissipative Anteil der Dynamik einen superfluiden Zustand erzeugt, betrachten wir im Folgenden der Einfachheit halber ein verschwindendes Tunnelmatrixelement J .

Wir setzen in der stationären Momentengleichung (6.98) $\alpha = 0$ und $\beta = 1$ und ersetzen die auftretenden Momente durch die Entwicklung (6.99). Wir erhalten dann bis zur Ordnung Ψ^3 :

$$0 = \Psi \left[-(i\tilde{U} - 2)\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} + i\tilde{\mu} \right] \Psi + \left[-(i\tilde{U} - 2)\mathcal{M}_{1,2}^{(3)} - 2\mathcal{M}_{0,2}^{(2)} \right] \Psi^3 + \mathcal{O}(\Psi^5). \tag{6.100}$$

Diese Gleichung hat zwei Lösungen. Die erste ist die triviale Lösung $\Psi = 0$. Die zweite Lösung lautet:

$$\Psi^2 = \frac{-(i\tilde{U} - 2)\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} + i\tilde{\mu}}{(i\tilde{U} - 2)\mathcal{M}_{1,2}^{(3)} + 2\mathcal{M}_{0,2}^{(2)}}. \tag{6.101}$$

Die Phasengrenze ist dadurch bestimmt, dass der Ordnungsparameter gegen Null geht, d. h., die Nullstellen des Zählers liefern die Phasengrenze. Dazu benötigen wir das Moment $\mathcal{M}_{1,2}^{(1)}$.

Dies erhalten wir aus der stationären Momentengleichung (6.98) durch einsetzen von $\alpha = 1$ und $\beta = 2$. Bis zur quadratischen Ordnung in Ψ gilt dann:

$$0 = \left[-i\tilde{U}\mathcal{M}_{2,3}^{(1)} + (-i\tilde{U} + i\tilde{\mu} - 4)\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} + 4n(1 + \mathcal{M}_{1,2}^{(1)}) - 2\mathcal{M}_{2,2}^{(0)} \right] \Psi^2 + \mathcal{O}(\Psi^4). \quad (6.102)$$

Wir erinnern an dieser Stelle noch einmal daran, dass $\mathcal{M}_{1,1} = n$ die Teilchendichte ist. Die Gleichung (6.102) stellen wir nach $\mathcal{M}_{1,2}^{(1)}$ um:

$$\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} \approx \frac{-4n + 2\mathcal{M}_{2,2}^{(0)} + i\tilde{U}\mathcal{M}_{2,3}^{(1)}}{-i\tilde{U} + i\tilde{\mu} + 4(n-1)}. \quad (6.103)$$

Nun gilt es, das Moment $\mathcal{M}_{2,2}^{(0)}$ zu bestimmen. Dies kann man auf die gewohnte Art durch Einsetzen von $\alpha = 2$ und $\beta = 2$ in die stationäre Momentengleichung (6.98) machen. Wir können jedoch zeigen, dass wir alle diagonalen Momente der Form $\mathcal{M}_{\ell,\ell}^{(0)}$ mit einer einfachen Gleichung ausdrücken können. Dazu setzen wir in der Momentengleichung (6.98) $\alpha = \ell = \beta$. In niedrigster Ordnung in dem Ordnungsparameter erhalten wir:

$$0 = \ell n \mathcal{M}_{\ell-1,\ell-1}^{(0)} - \mathcal{M}_{\ell,\ell}^{(0)}. \quad (6.104)$$

Diese Rekursionsgleichung lässt sich sehr gut durch Iteration lösen:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{\ell,\ell}^{(0)} &= n\ell \mathcal{M}_{\ell-1,\ell-1}^{(0)} = n^2 \ell(\ell-1) \mathcal{M}_{\ell-2,\ell-2}^{(0)} = n^3 \ell(\ell-1)(\ell-2) \mathcal{M}_{\ell-3,\ell-3}^{(0)} = \dots \\ &= n^j \ell(\ell-1) \dots (\ell-j+1) \mathcal{M}_{\ell-j,\ell-j}^{(0)}. \end{aligned} \quad (6.105)$$

Dies iterieren wir, bis wir auf der rechten Seite zum Moment $\mathcal{M}_{\ell-(\ell-1),\ell-(\ell-1)}^{(0)} = \mathcal{M}_{1,1}^{(0)}$ kommen:

$$\mathcal{M}_{\ell,\ell}^{(0)} = n^{\ell-1} \ell(\ell-1) \dots (\ell-(\ell-1-1)) \mathcal{M}_{1,1}^{(0)} = n^\ell \ell!. \quad (6.106)$$

Damit haben die diagonalen Momente bei verschwindendem Ordnungsparameter die Form:

$$\boxed{\lim_{\Psi \rightarrow 0} \mathcal{M}_{\ell,\ell} = \mathcal{M}_{\ell,\ell}^{(0)} = n^\ell \ell!}. \quad (6.107)$$

Dieses Ergebnis setzen wir in den Ausdruck (6.103) ein:

$$\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} \approx \frac{-4n + 4n^2 + i\tilde{U}\mathcal{M}_{2,3}^{(1)}}{-i\tilde{U} + i\tilde{\mu} + 4(n-1)}. \quad (6.108)$$

Nun stehen wir wieder vor dem alten Problem, dass höhere Momente an das Moment koppeln, an dem wir interessiert sind. Dies lösen wir dadurch, dass wir den FOCK-Raum begrenzen und nur Teilchenzahlen bis maximal zwei zulassen. Dann ist das Moment $\mathcal{M}_{2,3}$ Null und damit auch seine Entwicklungskoeffizienten $\mathcal{M}_{2,3}^{(i)}$. Auf diesem eingeschränkten FOCK-Raum erhalten wir dann für das Moment $\mathcal{M}_{1,2}^{(1)}$ aus Gleichung (6.108):

$$\mathcal{M}_{1,2}^{(1)} \approx \frac{4n(n-1)}{-i\tilde{U} + i\tilde{\mu} + 4(n-1)}. \quad (6.109)$$

Dieses Ergebnis setzen wir in den Zähler des Ordnungsparameters aus Gleichung (6.101) ein und setzen diesen anschließend Null, um eine Gleichung für die Phasengrenze zu erhalten:

$$0 = -(i\tilde{U} - 2) \frac{-4n(n-1)}{-i\tilde{U} + i\tilde{\mu} + 4(n-1)} + i\tilde{\mu} \quad (6.110)$$

$$= \frac{-4n(n-1)(i\tilde{U} - 2) + i\tilde{\mu}[-i\tilde{U} + i\tilde{\mu} + 4(n-1)]}{-i\tilde{U} + i\tilde{\mu} + 4(n-1)} \quad (6.111)$$

$$\Rightarrow 0 = \tilde{U}[-i4n(n-1) + \tilde{\mu}] + 8n(n-1) - \tilde{\mu}^2 + i4\tilde{\mu}(n-1). \quad (6.112)$$

Daraus erhalten wir eine kritische Wechselwirkungsstärke \tilde{U}_c von:

$$\tilde{U}_c = \frac{8n(n-1) - \tilde{\mu}_c^2 + i4\tilde{\mu}_c(n-1)}{i4n(n-1) - \tilde{\mu}_c}. \quad (6.113)$$

An dieser Stelle nutzen wir den bis jetzt unbestimmt gebliebenen Parameter $\tilde{\mu}$ aus, um eine physikalisch sinnvolle Größe \tilde{U}_c zu erhalten. Wir wählen $\tilde{\mu}_c$ so, dass \tilde{U}_c in Gleichung (6.113) rein reell ist. Man beachte, dass $\tilde{\mu}$ selber rein reell ist. Der Imaginärteil von \tilde{U}_c lautet:

$$\Im\{\tilde{U}_c\} = \frac{64n^3 - 32n^2 - 8n\tilde{\mu}_c^2 - 32n^4 + 4n^2\tilde{\mu}_c^2 + 4\tilde{\mu}_c^2}{(4n^2 - 4n)^2 + \tilde{\mu}_c^2} = \frac{\tilde{\mu}_c^2(4n^2 - 8n + 4) - (32n^4 - 64n^3 + 32n^2)}{(4n^2 - 4n)^2 + \tilde{\mu}_c^2}. \quad (6.114)$$

Eine Nullstelle liegt bei $n = 1$ und ist eine Folge des eingeschränkten FOCK-Raums. Die zweite Nullstelle liegt bei:

$$\tilde{\mu}_c^2 = \frac{32n^4 - 64n^3 + 32n^2}{4n^2 - 8n + 4} = \frac{8n^4 - 16n^3 + 8n^2}{n^2 - 2n + 1} = 8n^2. \quad (6.115)$$

Und damit:

$$\boxed{\tilde{\mu}_c = +2\sqrt{2}n.} \quad (6.116)$$

Dabei haben wir die positive Wurzeln gewählt, da die zusätzlich auftretende negative Wurzel ein negatives und damit unphysikalisches \tilde{U}_c zur Folge hat. Dieses Ergebnis setzen wir in den Realteil von \tilde{U}_c ein:

$$\Re\{\tilde{U}_c\} = \frac{-16n^2\tilde{\mu} + 16n\tilde{\mu} + 16n^3\tilde{\mu} - 16n^2\tilde{\mu} - 8n^2\tilde{\mu} + 8n\tilde{\mu} + \tilde{\mu}^3}{(-4n + 4n^2)^2 + \tilde{\mu}^2} \quad (6.117)$$

$$= \frac{-40n^2\tilde{\mu} + 24n\tilde{\mu} + 16n^3\tilde{\mu} + \tilde{\mu}^3}{(-4n + 4n^2)^2 + \tilde{\mu}^2} \quad (6.118)$$

$$= \sqrt{2} \frac{-80n^3 + 48n^2 + 32n^4 + 16n^3}{16n^2(1 - 2n + n^2) + 8n^2} = 2\sqrt{2} \frac{-5n + 3 + 2n^2 + n}{2 - 4n + 2n^2 + 1} \quad (6.119)$$

$$= 2\sqrt{2} \frac{2n^2 - 4n + 3}{2n^2 - 4n + 3}. \quad (6.120)$$

Damit erhalten wir schließlich für die kritische Wechselwirkungsstärke auf der Phasengrenze:

$$\boxed{\tilde{U}_c = 2\sqrt{2}.} \quad (6.121)$$

Die kritische Wechselwirkungsstärke \tilde{U}_c hängt nicht von der Teilchendichte ab. Dies ist eine Konsequenz der Einschränkung des FOCK-Raumes. Geht man zur nächsten Ordnung, d. h. vergrößert man den FOCK-Raum und nimmt in der Gleichung (6.108) das Moment $\mathcal{M}_{2,3}^{(1)}$ mit, so erhält man ein kritisches \tilde{U}_c , welches sehr wohl von der Teilchendichte n abhängt. Diese Rechnung ist jedoch bei weitem nicht so übersichtlich, wie die hier vorgebrachte und lohnt keiner analytischen Betrachtung. Ein Problem bei höheren Ordnungen besteht darin, den Parameter $\tilde{\mu}_c$ so zu wählen, dass \tilde{U}_c auch wirklich reell wird. Dies führt auf nicht geschlossen lösbare Gleichungen, welche selbst in einer Entwicklung für kleine Teilchendichten n und unterstützt durch ein *Computeralgebra-System* sehr schwer zu lösen sind.

Für die kritische Wechselwirkungsstärke U_c erhalten DIEHL ET AL. [2010] das gleiche Ergebnis wie wir in Gleichung (6.121). Dabei betrachten sie sowohl den Limes verschwindender Dichten n , als auch eine numerisch exakte Integration der Mastergleichung (6.1). Aus der Arbeit geht allerdings nicht eindeutig hervor, wie der Parameter $\tilde{\mu}$ im stationären Fall festzulegen ist.

Einen interessanten Punkt merken wir noch an. Vergleichen wir die beiden Ergebnisse für die kritische Wechselwirkungsstärke (6.121) mit der Gleichung (6.116), so notieren wir das höchst bemerkenswerte Resultat:

$$\tilde{\mu}_c = \tilde{U}_c n. \quad (6.122)$$

Dies ähnelt dem Zusammenhang $\tilde{\mu} = \tilde{U}n$ zwischen dem chemischen Potential $\tilde{\mu}$, der Teilchendichte n und der Wechselwirkung \tilde{U} in der GROSS-PITAEVSKII-Theorie schwach wechselwirkender Bosonen [PITAEVSKII und STRINGARI, 2004]. Der Unterschied ist, dass in dieser Theorie $\tilde{\mu}$ das chemische Potential der Thermodynamik ist und die stationären Zustände thermodynamische Gleichgewichtszustände sind.

Für das BOSE–HUBBARD-Modell konnten wir im Abschnitt 5.3.2 eine Parametrisierung der Phasengrenze für beliebige ganzzahlige Dichten der MOTT-Phase aufstellen. Dort haben wir aus den Momenten $\mathcal{M}_{1,2}$ eine Differenzgleichung konstruiert, die wir exakt lösen konnten. Hier können wir mit Hilfe der Momentengleichung (6.98) und der Entwicklung (6.99) ebenfalls eine Differenzgleichung für Momente der Form $\mathcal{M}_{\ell,\ell+1}^{(1)}$ aufstellen. In dieser tauchen die Momente $\mathcal{M}_{\ell+2,\ell+3}^{(1)}$, $\mathcal{M}_{\ell+1,\ell+2}^{(1)}$ und $\mathcal{M}_{\ell,\ell+1}^{(1)}$ auf. Transformieren wir diese Differenzgleichung mit der Methode der erzeugenden Funktionen wie im Abschnitt 5.3.2 in eine Differentialgleichung, so erhalten wir eine gewöhnliche Differentialgleichung zweiter Ordnung, die wir auf Grund von fehlenden Randbedingungen nicht integrieren können.

Der Ordnungsparameter

Mit ein wenig mehr Aufwand können wir mit Hilfe der Bestimmungsgleichung (6.101) auch den Ordnungsparameter in der Nähe der Phasengrenze bestimmen. Dazu müssen wir die in dieser Gleichung auftretenden Momente $\mathcal{M}_{0,2}^{(2)}$ und $\mathcal{M}_{1,2}^{(3)}$ berechnen. Dies geschieht analog wie bei den anderen bisher berechneten Momenten: Um ein Moment $\mathcal{M}_{x,y}^{(z)}$ zu bestimmen, stellt man die stationäre Momentengleichung (6.98) für $\alpha = x$ und $\beta = y$ auf, ersetzt die Momente durch die Entwicklung (6.99), fasst alle Terme zu entsprechenden Ordnungen von Ψ zusammen und setzt schließlich den Ausdruck der Ordnung Ψ^z gleich Null. Auf diese Weise bekommen wir für das Moment $\mathcal{M}_{0,2}^{(2)}$ folgendes Ergebnis:

$$\mathcal{M}_{0,2}^{(2)} = \frac{4(1 + \mathcal{M}_{2,1}^{(1)}) - i2\tilde{U}\mathcal{M}_{3,2}^{(1)}}{4 + i\tilde{U} - i2\tilde{\mu}} \approx \frac{4(1 + \mathcal{M}_{1,2}^{(1)*})}{4 + i\tilde{U} - i2\tilde{\mu}}. \quad (6.123)$$

Dabei haben wir zum einen den FOCK-Raum auf zwei Teilchen eingeschränkt, wodurch das Moment $\mathcal{M}_{3,2}^{(1)}$ verschwindet. Zum anderen haben wir die Hermitezitäts-Eigenschaft (5.18) der Momente benutzt, woraus $\mathcal{M}_{2,1}^{(1)} = \mathcal{M}_{1,2}^{(1)*}$ folgt. Setzt man hier das Ergebnis für $\mathcal{M}_{1,2}^{(1)}$ aus Gleichung (6.109) ein, so erhält man schließlich:

$$\mathcal{M}_{0,2}^{(2)} \approx \frac{4[4i(1 - n^2) - \tilde{U} + \tilde{\mu}]}{[4(n - 1) - i(\tilde{U} - \tilde{\mu})][\tilde{U} - 2(2i + \tilde{\mu})]}. \quad (6.124)$$

Auf die Herleitung des Momentes $\mathcal{M}_{1,2}^{(3)}$ wollen wir nicht genauer eingehen, da dies umfangreicher ist und man für dieses außerdem noch das Moment $\mathcal{M}_{2,2}^{(2)}$ benötigt. Nach einiger Rechenarbeit erhält man für $\mathcal{M}_{1,2}^{(3)}$ als Ergebnis:

$$\mathcal{M}_{1,2}^{(3)} \approx \frac{32in(n - 1)(3\tilde{U} - 12i - 5\tilde{\mu} + 2n^2[\tilde{U} - 2(i + \tilde{\mu})] - 4n[\tilde{U} - 2(2i + \tilde{\mu})])}{[-4i(n - 1) + \tilde{U} - \tilde{\mu}][-4i(n - 1) - \tilde{U} + \tilde{\mu}]^2[\tilde{U} - 2(2i + \tilde{\mu})]}. \quad (6.125)$$

Die Ergebnisse für die Momente $\mathcal{M}_{1,2}^{(1)}$, $\mathcal{M}_{0,2}^{(2)}$ und $\mathcal{M}_{1,2}^{(3)}$ aus den Gleichungen (6.109), (6.124) und (6.125) setzen wir nun in die Gleichung (6.101) für den Ordnungsparameter ein. Dann müssen wir den Parameter $\tilde{\mu}$ so anpassen, das Ψ^2 auch wirklich wie nach Voraussetzung reell ist. Dies ist allerdings – wie oben bei der Berechnung der Phasengrenze bereits angesprochen – selbst mit einem Computeralgebra-System nicht geschlossen möglich. Da wir jedoch eine Entwicklung in kleinen Ψ gemacht haben, sind unsere Gleichungen und Ergebnisse sowieso nur in der Nähe des Phasenübergangs sinnvoll. Wir ersetzen daher für den Parameter $\tilde{\mu}$ das Ergebnis (6.122) auf der Phasengrenze, d. h. wir ersetzen $\tilde{\mu} = \tilde{U}n$. Dann erhalten wir für den Ordnungsparameter:

$$\Psi^2 = \frac{1}{8} \frac{n(n - 1)(16 + \tilde{U}^2)[4 + (1 - 2n)i\tilde{U}](8 - \tilde{U}^2)}{16n^3\tilde{U}(2i + \tilde{U}) - (4 - i\tilde{U})(4 + i\tilde{U})^2 - 4n^2[8(i\tilde{U} - 1) + 5\tilde{U}^2] + n(96 - 8i\tilde{U} + 12\tilde{U}^2 + i\tilde{U}^3)}. \quad (6.126)$$

Da wir für die Berechnung der Momente den FOCK-Raum stark eingeschränkt haben, sollte der Ordnungsparameter für kleine Teilchendichten eine gute Näherung ergeben. Der Ordnungsparameter (6.126) in niedrigster Ordnung in der Teilchendichte n besitzt die einfache Form:

$$\Psi^2 \approx \frac{1}{8} (8 - \tilde{U}^2)n = 1 - \left(\frac{\tilde{U}}{\tilde{U}_c}\right)^2 n. \quad (6.127)$$

Die sogenannte *Kondensatdichte* Ψ^2/n ist in Abbildung 6.1 dargestellt und zeigt genau das Verhalten, was man erwarten würde: Eine Kondensatdichte von Eins für eine verschwindende Wechselwirkungsstärke \tilde{U} , eine *Entleerung des Kondensates* für zunehmende Wechselwirkung und schließlich ein stetiges aber nicht analytisches Verschwinden der Kondensatdichte für $\tilde{U} \rightarrow \tilde{U}_c$. Es ist bemerkenswert, dass die Beschränkung unserer Betrachtungen auf den Phasenübergang durch eine Entwicklung nach kleinen Ψ und durch das Setzen des Parameters $\tilde{\mu}$

auf den Wert in der Nähe der Phasengrenze, das Verhalten der Kondensatdichte qualitativ und offenbar auch quantitativ so gut wiedergibt. Außerdem bemerken wir, dass dieses Ergebnis mit dem Resultat aus der Arbeit von DIEHL ET AL. [2010] übereinstimmt.

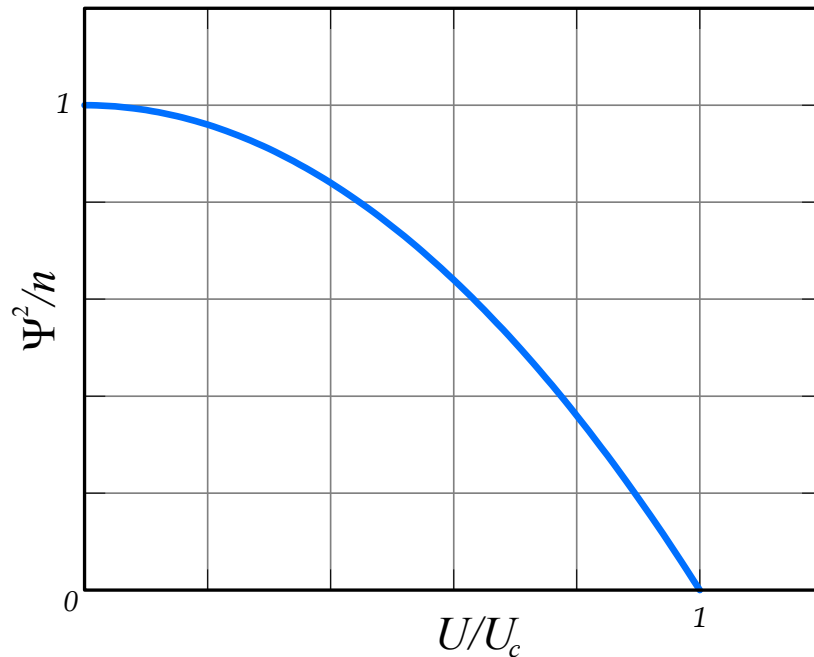


Abbildung 6.1: Die Kondensatdichte Ψ^2/n in Abhängigkeit von der Wechselwirkungsstärke \tilde{U} im Limes kleiner Dichten. Die kritische Wechselwirkungsstärke \tilde{U}_c ist gegeben durch $2\sqrt{2}$.

Die zwei Phasen

Mit Hilfe des Ordnungsparameters können wir zwei Phasen unterscheiden. Die Phase mit verschwindendem Ordnungsparameter $\Psi = 0$ ist der symmetrische Zustand bzw. ungeordnete Zustand, da dieser Zustand U(1) eichinvariant ist und keinerlei langreichweitige Ordnung aufweist. Im Gegensatz dazu ist in der superfluiden und geordneten Phase mit $\Psi \neq 0$ diese Symmetrie gebrochen und die Einteilchen-Dichtematrix weist langreichweitige Ordnung auf.

Wir haben in der Gleichung (6.107) gesehen, dass die Momente des diagonalen Zustandes die einfache Form $\mathcal{M}_{\ell,\ell} = n^\ell \ell!$ aufweisen. Daraus lässt sich der statistische Operator in dieser ungeordneten Phase herleiten:

$$\hat{\rho}^{(d)} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{n^N}{(1+n)^{1+N}} |N\rangle \langle N|. \quad (6.128)$$

Hier ist $|N\rangle$ ein FOCK-Zustand mit N Teilchen eines Gitterplatzes. Der statistische Operator $\hat{\rho}^{(d)}$ hat die Form eines thermischen Zustandes [GARDINER und ZOLLER, 2004], wobei das thermische Bad durch das System selber dargestellt wird [DIEHL ET AL., 2010]. Dieser Zustand ist

ein gemischter Zustand, mit der Teilchendichte $n \in \mathbb{R}$. Im Gegensatz dazu ist der MOTT-Zustand des BOSE–HUBBARD-Modells bei verschwindender Temperatur ein reiner Zustand mit einer festen ganzzahligen Teilchendichte.

Der diagonale Zustand $\hat{\rho}^{(d)}$ existiert für alle Parameter J , U und κ , da in der Mastergleichung (6.1) der hamilton'sche Anteil für einen diagonalen statistischen Operator verschwindet und κ für stationäre Zustände dann heraus dividiert werden kann. Hier muss eine Stabilitätsanalyse klären, für welche Parameter $\hat{\rho}^{(d)}$ stabil ist.

Der stationäre Zustand ist im Falle einer gebrochenen Symmetrie für $U = 0$ durch einen kohärenten Zustand gegeben. Ein endliches U sorgt für eine Dephasierung des kohärenten Zustands und ein Unterdrücken der langreichweitigen Ordnung in der Einteilchen-Dichtematrix [DIEHL ET AL., 2010]. Dies führt zu einer Entleerung des Kondensates. Dies ist das Verhalten, was wir in Abbildung 6.1 sehen.

6.6 Zusammenfassung

Zum Abschluss dieser Diplomarbeit haben wir uns mit der Dynamik des im Kapitel 4 vorgestellten offenen und getriebenen Quantensystems beschäftigt. Die Zeitentwicklung dieses Systems unterliegt einer Mastergleichung, welche eine Bewegungsgleichung für den statistischen Operator ist. Wir haben uns im Rahmen dieses Kapitels die Zeitentwicklung von Erwartungswerten von Leiteroperatoren der Form $\hat{a}_k^{\dagger\alpha} \hat{a}_k^\beta$ angeschaut. Diese Momente genügen einer Momentengleichung, die wir im stationären Fall näher untersucht haben. Speziell waren wir daran interessiert, ob die gegensätzlich wirkende Dynamik von Dissipation und Wechselwirkung der Bosonen zu einem Quantenphasenübergang wie im BOSE–HUBBARD-Modell führt. Dass ein Phasenübergang auftritt, konnten wir näherungsweise dadurch nachweisen, dass wir nicht-triviale Lösungen für den Ordnungsparameter erhalten haben. Dies lieferte uns außerdem im Limes kleiner Dichten den kritischen Punkt $U_c = 2\sqrt{2}$, bei welchem die Kondensation einsetzt. Dieses Resultat stimmt mit dem Ergebnis aus der Arbeit von DIEHL ET AL. [2010] überein.

Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Diplomarbeit haben wir uns mit ultrakalten Bosonen in einem optischen Gitter beschäftigt. Das BOSE–HUBBARD-Modell bildet die Grundlage für die Beschreibung dieses Systems. Wir haben sowohl das Ein-Band BOSE–HUBBARD-Modell als auch eine Erweiterung auf zwei Bänder näher untersucht. Bei dieser Erweiterung werden außerdem die Bosonen zwischen den untersten beiden Bändern des optischen Gitters durch einen Laser kohärent angeregt und zerfallen dissipativ über eine Kopplung mit einem BEC-Bad. Dieses erweiterte Modell wurde vorgeschlagen und untersucht von DIEHL ET AL. [2008, 2010].

In Kapitel 5 betrachteten wir das Ein-Band BOSE–HUBBARD-Modell ohne Dissipation und den dort auftretenden Quantenphasenübergang zwischen einem MOTT-Isolator und einem Superfluid. Die LIOUVILLE–VON NEUMANN-Gleichung für den statistischen Operator war dafür unser Ausgangspunkt. Aus dieser haben wir eine Bewegungsgleichung für die Momente – das sind die Erwartungswerte der Leiteroperatoren $\hat{a}_k^{(\alpha)\dagger} \hat{a}_k^{(\beta)}$ – hergeleitet. Aus dieser als Momentengleichung bezeichneten Bewegungsgleichung konnten wir im stationären Fall und unter Anwendung der Molekularfeld-Näherung die Phasengrenze zwischen MOTT- und superfluiden Zustand berechnen. Diese stimmt mit den bekannten Ergebnissen aus der Literatur überein [FISHER ET AL., 1989].

Im Rahmen dieser Arbeit haben wir außerdem in Kapitel 4 das Modellsystem von DIEHL ET AL. [2008] bestehend aus einem optischen Gitter und einem BEC-Bad detailliert untersucht. Dabei konnten wir im Abschnitt 4.4 zeigen, dass entgegen der Behauptung von DIEHL ET AL. [2008] der Mechanismus der dissipativen Kopplung zwischen den Bosonen des optischen Gitters und dem BEC-Bad nur für eindimensionale optische Gitter ungleich Null ist.

Auf Grund der Anregung durch den Laser und der Kopplung an ein BEC-Bad ist dieses System ein offenes und getriebenes System. Dadurch war es uns nicht möglich, die etablierten Berechnungsmethoden anzuwenden, welche für ein System im thermodynamischen Gleichgewicht gelten. Insbesondere ist die Anwendung einer GINZBURG–LANDAU-Theorie zur Beschreibung von Phasenübergängen zweiter Ordnung nicht möglich. Das einzige Prinzip, das wir für unsere Berechnungen zur Verfügung hatten, war die Mastergleichung, welche die Zeitentwicklung des statistischen Operators der Bosonen im optischen Gitter beschreibt. In Analogie zu unseren Untersuchungen für das BOSE–HUBBARD-Modell konnten wir in Kapitel 6, nun ausgehend von der Mastergleichung, eine Momentengleichung aufstellen. Diese Momentengleichung erhielten wir sowohl unter Verwendung der Molekularfeld-Näherung, als auch mit Hilfe des in DIEHL ET AL. [2010] vorgestellten GUTZWILLER-Ansatzes.

Bei der Beschränkung auf stationäre Zustände konnten wir mit Hilfe der Momentengleichung zeigen, dass ein superfluider Zustand mit gebrochener U(1)-Eichsymmetrie existiert. Dieser ist durch den Erwartungswert des Leiteroperators \hat{a} als Ordnungsparameter charakterisiert. Ist der Ordnungsparameter Null, so ist ein Zustand mit einem diagonalen statistischen Operator stabil. Dieser Zustand ist ein gemischter Zustand und weist die Form eines thermischen

Zustands auf. Durch eine Entwicklung der Momente nach dem Ordnungsparameter und eine Beschränkung des FOCK-Raums war es uns möglich, in Abschnitt 6.5 die kritische Wechselwirkungsstärke U_c der Bosonen zu berechnen, bei welcher die superfluide Phase verschwindet und der Ordnungsparameter gegen Null geht. Außerdem konnten wir im Limes kleiner Teilchendichten den Ordnungsparameter in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke bestimmen. Dieser zeigt qualitativ den erwarteten Verlauf und nimmt in den Punkten verschwindender und kritischer Wechselwirkungsstärken den richtigen Wert an. Die Ergebnisse für die kritische Wechselwirkungsstärke und für den Ordnungsparameter stimmen mit den Resultaten aus dem Artikel von DIEHL ET AL. [2010] überein.

Zukünftige interessante Fragestellungen zu diesem Modellsystem sind die Berechnung der kritischen Wechselwirkungsstärke in Abhängigkeit von der Teilchendichte und das Aufstellen des Ordnungsparameters für größere Teilchendichten. Ergebnisse könnte man dadurch gewinnen, dass man unsere Systematik fortsetzt und den FOCK-Raum sukzessive vergrößert. Die Schwierigkeit besteht hier jedoch darin, einen passenden Parameter $\tilde{\mu}$ zu wählen, der einen stationären Zustand sicherstellt und die physikalischen Größen reell lässt.

Eine andere lohnende Erweiterung besteht darin, von der Bewegungsgleichung für vom Gitterplatz abhängige Momente auszugehen und eine systematische Entwicklung in der Zerfallsrate κ durchzuführen. Mit diesem komplementären methodischen Ansatz ließen sich die in DIEHL ET AL. [2010] gefundenen dynamischen Instabilitäten untersuchen.

Anhang A

Das Wechselwirkungs-Bild der Quantenmechanik

Der Zustand eines quantenmechanischen Systems kann durch einen Vektor $|\psi\rangle$ in einem HILBERT-Raum beschrieben werden. Die Dynamik des Systems ist durch den HAMILTON-Operator \hat{H} und die SCHRÖDINGER-Gleichung

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (\text{A.1})$$

bestimmt. Von physikalischer Bedeutung sind jedoch nicht die abstrakten Vektoren $|\psi\rangle$, sondern die Matrixelemente von Observablen¹ \hat{O} :

$$\langle \phi | \hat{O} | \psi \rangle. \quad (\text{A.2})$$

Nimmt man nun einen beliebigen unitären Operator \hat{A} , d. h. $\hat{A}^{-1} = \hat{A}^\dagger$, dann gilt:

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{O} | \psi \rangle &= \langle \phi | \hat{A}^{-1} \hat{A} \hat{O} \hat{A}^{-1} \hat{A} | \psi \rangle \\ &= \langle \phi | \hat{A}^\dagger \hat{A} \hat{O} \hat{A}^\dagger \hat{A} | \psi \rangle \\ &= \langle \hat{A} \phi | \hat{A} \hat{O} \hat{A}^\dagger | \hat{A} \psi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Ändert man also alle Zustände und Operatoren gemäß:

$$|\psi\rangle^A := \hat{A} |\psi\rangle, \quad (\text{A.4a})$$

$$\hat{O}^A := \hat{A} \hat{O} \hat{A}^\dagger, \quad (\text{A.4b})$$

so bleiben alle Messgrößen unverändert. Diese simultane Änderung wird als *Bildtransformation* bezeichnet. Je nach Wahl des unitären Operators \hat{A} unterscheidet man verschiedene *Bilder*:

- $\hat{A} = 1 \rightarrow$ SCHRÖDINGER-Bild,
- $\hat{A} = \hat{U}^S(t, t_0) \rightarrow$ HEISENBERG-Bild.

Hier ist \hat{U}^S der Zeitentwicklungs-Operator im SCHRÖDINGER-Bild.

Wir wollen nun jedoch das sogenannte *Wechselwirkungs-* oder *DIRAC-Bild* betrachten. Dieses wird meist angewendet, wenn der HAMILTON-Operator sich in einen diagonalisierbaren Term \hat{H}_0 und in einen nicht diagonalisierbaren Störterm \hat{V} aufspalten lässt:

¹Observablen sind beobachtbare Größen, die über eine Messvorschrift physikalisch definiert werden.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (\text{A.5})$$

Die beiden hier auftauchenden Operatoren sind Operatoren im SCHRÖDINGER-Bild.

Operatoren und Vektoren im Wechselwirkungs-Bild wollen wir mit einem Superskript I kennzeichnen und im SCHRÖDINGER-Bild entsprechend mit dem Superskript S. Des Weiteren nehmen wir im Folgenden an, dass \hat{H} zeitunabhängig ist.

Derjenige unitäre Operator, welcher das Wechselwirkungs-Bild definiert, ist gegeben durch:

$$\hat{A} = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar}. \quad (\text{A.6})$$

Dies ist gerade der adjungierte Zeitentwicklungs-Operator zu dem diagonalisierbaren Hamiltonian \hat{H}_0 . Für die Vektoren des HILBERT-Raumes im Wechselwirkungs-Bild erhält man ausgehend von der SCHRÖDINGER-Gleichung (A.1)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle^S &= i\hbar \frac{d}{dt} \left(e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} |\psi(t)\rangle^I \right) \\ \hat{H}^S |\psi(t)\rangle^S &= \hat{H}_0^S e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} |\psi(t)\rangle^I + e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle^I \\ (\hat{H}_0^S + \hat{V}^S) |\psi(t)\rangle^S &= \hat{H}_0^S |\psi(t)\rangle^S + e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle^I \\ \Rightarrow \underbrace{e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} \hat{V}^S e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar}}_{=: \hat{V}^I(t)} |\psi(t)\rangle^I &= i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle^I, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

die sogenannte TOMONAGA-SCHWINGER-Gleichung:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle^I = \hat{V}^I(t) |\psi(t)\rangle^I. \quad (\text{A.8})$$

Im Gegensatz zum SCHRÖDINGER-Bild sind die Operatoren im Wechselwirkungs-Bild im Allgemeinen zeitabhängig und unterliegen damit einer Bewegungsgleichung. Diese erhalten wir aus der Definition (A.4b) eines Operators \hat{O} im Wechselwirkungs-Bild

$$\hat{O}^I(t) = e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} \hat{O}^S(t) e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar}. \quad (\text{A.9})$$

Hier haben wir auch für den Operator im SCHRÖDINGER-Bild eine explizite Zeitabhängigkeit angenommen, wie es z. B. für den Operator des elektrischen Feldes der Fall ist. Dann gilt:

$$i\hbar \frac{d\hat{O}^I}{dt} = -\hat{H}_0^S e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} \hat{O}^S(t) e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} + e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} \hat{O}^S(t) e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} \hat{H}_0^S + e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} i\hbar \frac{d\hat{O}^S}{dt} e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} \quad (\text{A.10})$$

oder

$$\boxed{i\hbar \frac{d\hat{O}^I}{dt} = \left[\hat{O}^I(t), \hat{H}_0^S \right] + e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} i\hbar \frac{d\hat{O}^S}{dt} e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar}.} \quad (\text{A.11})$$

Abschließend interessieren wir uns für den statistischen Operator im Wechselwirkungs-Bild. Zunächst entwickeln wir den statistischen Operator im SCHRÖDINGER-Bild nach seinen Eigenzuständen $|\psi_n(t)\rangle$:

$$\hat{\rho}^S(t) = \sum_n p_n |\psi_n(t)\rangle^S \langle \psi_n(t)|. \quad (\text{A.12})$$

Nun transformieren wir den statistischen Operator in das Wechselwirkungs-Bild, indem wir die Vektoren $|\psi_n(t)\rangle^S$ in das Wechselwirkungs-Bild transformieren. Dies ergibt:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^I(t) &= \sum_n p_n |\psi_n(t)\rangle^I \langle \psi_n(t)| \\ &= \sum_n p_n e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} |\psi_n(t)\rangle^S \langle \psi_n(t)| e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} \\ &= e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} \sum_n p_n |\psi_n(t)\rangle^S \langle \psi_n(t)| e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar}. \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Damit transformiert sich der statistische Operator wie ein normaler Operator gemäß Gleichung (A.9):

$$\boxed{\hat{\rho}^I(t) = e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} \hat{\rho}^S(t) e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar}.} \quad (\text{A.14})$$

Da auch $\hat{\rho}^I(t)$ zeitabhängig ist, erfüllt dieser eine LIOUVILLE–VON NEUMANN-Gleichung. Diese wollen wir nun herleiten. Dazu betrachten wir die Ableitung der Gleichung (A.14), die auf eine zu Gleichung (A.11) analoge Bewegungsgleichung führt:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}^I(t) = [\hat{\rho}^I(t), \hat{H}_0^I] + e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} i\hbar \frac{d\hat{\rho}^S}{dt} e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar}. \quad (\text{A.15})$$

Verwenden wir hier im zweiten Term die LIOUVILLE–VON NEUMANN-Gleichung für den statistischen Operator im SCHRÖDINGER-Bild

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}^S(t) = [\hat{H}^S, \hat{\rho}^S(t)], \quad (\text{A.16})$$

so erhalten wir:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}^I(t) = -[\hat{H}_0^I, \hat{\rho}^I(t)] + e^{i\hat{H}_0^S t/\hbar} [\hat{H}^S, \hat{\rho}^S(t)] e^{-i\hat{H}_0^S t/\hbar} = -[\hat{H}_0^I, \hat{\rho}^I(t)] + [\hat{H}^I, \hat{\rho}^I(t)]. \quad (\text{A.17})$$

Mit der Aufspaltung (A.5) bekommen wir dann schließlich die LIOUVILLE–VON NEUMANN-Gleichung für den statistischen Operator im Wechselwirkungs-Bild:

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\rho}^I(t) = [\hat{V}^I(t), \hat{\rho}^I(t)].} \quad (\text{A.18})$$

Anhang B

Über BLOCH- und WANNIER-Funktionen

In diesem Abschnitt wollen wir die Eigenschaften der BLOCH- und WANNIER-Funktionen zusammenfassen. Wir betrachten ein endliches quantenmechanisches System mit periodischen Randbedingungen, welches im Ortsraum durch den HAMILTON-Operator

$$\hat{H}(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{lat}}(x) \quad (\text{B.1})$$

beschrieben wird. Hier ist $\Delta = \sum_{i=1}^3 \partial_i^2$ der LAPLACE-Operator. Das Potential habe die Periodizität a , d. h. es gilt: $V_{\text{lat}}(x + ae_i) = V_{\text{lat}}(x)$ für eine beliebige Richtung e_i im Gitter. Dann ist die Aussage des BLOCH-Theorems [ASHCROFT und MERMIN, 1976; CZYCHOLL, 2004; KITTEL, 2006], dass die Eigenfunktionen $\varphi_q^{(n)}(x)$ des HAMILTON-Operators (B.1) von der Form

$$\varphi_q^{(n)}(x) = e^{iqx} u_q^{(n)}(x) \quad (\text{B.2})$$

sind, wobei $q \in \mathbb{R}^3$ und $n \in \mathbb{N}$ Quantenzahlen sind und $u_q^{(n)}(x)$ eine gitterperiodische Funktion ist, d. h. $u_q^{(n)}(x + ae_i) = u_q^{(n)}(x)$ erfüllt. Die Eigenfunktionen $\varphi_q^{(n)}(x)$ werden als BLOCH-Funktionen oder BLOCH-Wellen bezeichnet. Die Eigenwerte $\varepsilon_q^{(n)}$ des Eigenwertproblems

$$\hat{H}(x) \varphi_q^{(n)}(x) = \varepsilon_q^{(n)} \varphi_q^{(n)}(x) \quad (\text{B.3})$$

nennt man BLOCH-Energien. Die Quantenzahl q hat die Bedeutung eines Impulses und wird als Gitter- oder Quasi-Impuls bezeichnet. Der Quasi-Impuls geht im Grenzfall eines verschwindenden Gitters, d. h. $V_{\text{lat}}(x) \rightarrow \text{konst.}$ in den physikalischen Impuls über. Die zweite Quantenzahl n nummeriert die sogenannten Energie-Bänder durch. In Abbildung B.1 sind die Energie-Bänder für zwei verschiedene Gittertiefen eines eindimensionalen kubischen Gitters aufgetragen.

Die BLOCH-Funktionen bilden als Eigenfunktionen des HAMILTON-Operators ein orthonormales und vollständiges Funktionensystem:

$$\int_V \varphi_q^{(n)*}(x) \varphi_{q'}^{(n')}(x) dx = \delta_{n,n'} \delta_{q,q'}, \quad (\text{B.4})$$

$$\sum_n \sum_q \varphi_q^{(n)*}(x) \varphi_q^{(n)*}(x') = \delta(x - x'). \quad (\text{B.5})$$

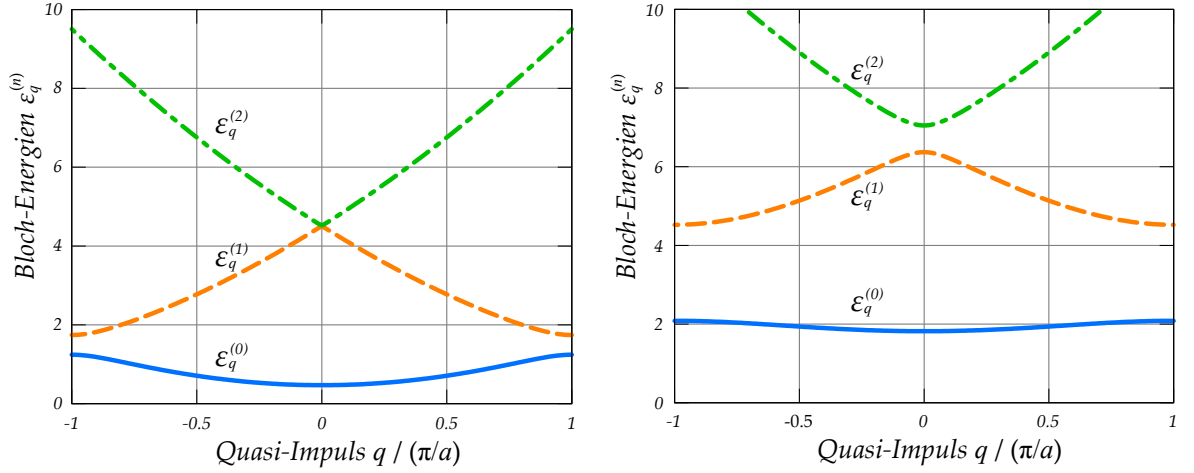


Abbildung B.1: Die untersten drei BLOCH-Bänder für das Gitterpotential $V_{\text{lat}}(x) = V_0 \sin^2(k_0 x)$ mit einer Gittertiefe von $V_0 = 1 E_r$ (links) und $V_0 = 5 E_r$ (rechts).

Hier und im Folgenden erstrecken sich die Integrale immer über das endliche Volumen V und die Summen \sum_n bzw. \sum_q gehen über alle Bänder n sowie alle Quasi-Impulse q aus der ersten BRIOULLIN-Zone. Für ein kubisches Gitter besteht die erste BRIOULLIN-Zone aus allen Quasi-Impulsen in $[-\pi/a, \pi/a]^3$. Genauer gesagt nimmt q (in einer Dimension) die Werte $2\pi k/(N_S a)$ mit $k = -\frac{N_S}{2} + 1, -\frac{N_S}{2} + 2, \dots, 0, \dots, \frac{N_S}{2} - 1, \frac{N_S}{2}$ an. Mit N_S bezeichnen wir die Anzahl der Gitterplätze. Des Weiteren sei angemerkt, dass die BLOCH-Funktionen die Dimension $m^{-1/2}$ haben.

Die WANNIER-Funktionen $w^{(n)}(x - x_i^{(n)})$ sind über eine unitäre Transformation der BLOCH-Funktionen definiert:

$$w^{(n)}(x - x_i^{(n)}) := w_i^{(n)}(x) := \sqrt{\frac{1}{N_S}} \sum_q e^{-iqx_i^{(n)}} \varphi_q^{(n)}(x) = \sqrt{\frac{1}{N_S}} \sum_q \varphi_q^{(n)}(x - x_i^{(n)}). \quad (\text{B.6})$$

Hierbei folgt der letzte Schritt aus dem BLOCH-Theorem (B.2). Die WANNIER-Funktionen sind an die Eigenschaften eines Gitters angepasst: Sie sind je nach Tiefe des Gitters relativ gut an einem Gitterplatz lokalisiert. Dies umso mehr, je tiefer das Gitter ist. Die WANNIER-Funktionen sind somit eine Art kanonisch konjugiertes Funktionensystem zu den vollkommen delokalisierten BLOCH-Funktionen, welche im Gegensatz dazu einen festen Quasi-Impuls besitzen.

Da die BLOCH- und die WANNIER-Funktionen durch eine unitäre Abbildung verknüpft sind, gelten auch für die WANNIER-Funktionen Orthonormalitäts- und Vollständigkeitsbeziehungen:

$$\int_V w_i^{(n)*}(x) w_{i'}^{(n')}(x) dx = \delta_{n,n'} \delta_{i,i'}, \quad (\text{B.7})$$

$$\sum_n \sum_i w_i^{(n)*}(x) w_i^{(n)}(x') = \delta(x - x'). \quad (\text{B.8})$$

In der Vollständigkeitsrelation und in allen folgenden Formeln erstrecken sich die Summen \sum_i über alle Gitterplätze i . Diese beiden Formeln lassen sich aus den Orthonormalitäts- (B.4) und Vollständigkeitsbeziehungen (B.5) der BLOCH-Funktionen herleiten. Auch die WANNIER-

Funktionen haben die Dimension $m^{-1/2}$. Die Rücktransformation von den WANNIER- auf die BLOCH-Funktionen lautet:

$$\varphi_q^{(n)}(x) = \sqrt{\frac{1}{N_S}} \sum_i e^{iqx_i^{(n)}} w_i^{(n)}(x). \quad (\text{B.9})$$

Transformation von Feldoperatoren

Die BLOCH-Funktionen sind Einteilchen-Lösungen eines wechselwirkungsfreien Vielteilchen-Systems. Mit diesen können wir daher aus den Feldoperatoren $\hat{\psi}(x)$ mit Hilfe einer unitären Transformation Leiteroperatoren konstruieren [GROSS und RUNGE, 1986]:

$$\hat{a}_q^{(n)} = \int_V \varphi_q^{(n)*}(x) \hat{\psi}(x) dx, \quad (\text{B.10})$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_n \sum_q \varphi_q^{(n)}(x) \hat{a}_q^{(n)}. \quad (\text{B.11})$$

Es gelten entsprechende Formeln für die adjungierten Operatoren. Der Operator $\hat{a}_q^{(n)}$ vernichtet ein Teilchen mit dem Quasi-Impuls q im n -ten Band. Entsprechend erzeugt $\hat{a}_q^{(n)\dagger}$ ein Teilchen im Quasi-Impulszustand q im n -ten Band.

Analog bekommen wir Leiteroperatoren, welche Teilchen auf einem Gitterplatz i im n -ten Band erzeugen bzw. vernichten, indem wir die Feldoperatoren mit WANNIER-Funktionen falten:

$$\hat{a}_i^{(n)} = \int_V w_i^{(n)*}(x) \hat{\psi}(x) dx, \quad (\text{B.12})$$

$$\hat{\psi}(x) = \sum_n \sum_i w_i^{(n)}(x) \hat{a}_i^{(n)}. \quad (\text{B.13})$$

Kombinieren wir die Gleichungen (B.11) bzw. (B.13) mit den Gleichungen (B.12) bzw. (B.10), so erhalten wir einen Zusammenhang zwischen den Leiteroperatoren der BLOCH- und denen der WANNIER-Funktionen:

$$\hat{a}_i^{(n)} = \sqrt{\frac{1}{N_S}} \sum_q e^{iqx_i^{(n)}} \hat{a}_q^{(n)}, \quad (\text{B.14})$$

$$\hat{a}_q^{(n)} = \sqrt{\frac{1}{N_S}} \sum_i e^{-iqx_i^{(n)}} \hat{a}_i^{(n)}. \quad (\text{B.15})$$

Da die Feldoperatoren $\hat{\psi}(x)$ den kanonischen BOSE-Kommutatorrelationen (4.3) genügen, unterliegen auch die Leiteroperatoren $\hat{a}_i^{(n)}$ und $\hat{a}_q^{(n)}$ kanonischen BOSE-Kommutatorrelationen:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_i^{(n)}, \hat{a}_j^{(m)\dagger}] &= \delta_{i,j} \delta_{n,m}, & [\hat{a}_i^{(n)\dagger}, \hat{a}_j^{(m)\dagger}] &= 0 = [\hat{a}_i^{(n)} \hat{a}_j^{(m)}], \\ [\hat{a}_q^{(n)}, \hat{a}_p^{(m)\dagger}] &= \delta_{q,p} \delta_{n,m}, & [\hat{a}_q^{(n)\dagger}, \hat{a}_p^{(m)\dagger}] &= 0 = [\hat{a}_q^{(n)} \hat{a}_p^{(m)}]. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Anhang C

Numerische Berechnung der WANNIER-Funktionen

In diesem Kapitel zeigen wir, wie man numerisch die Parameter des BOSE–HUBBARD-Hamiltonians (4.26) und (4.31) für ultrakalte Bosonen in einem optischen Gitter berechnen kann. Dazu genügt es, das Einteilchen-Problem (4.2) ohne das Fallenpotential V_{trap} zu lösen. Dadurch erhält man die BLOCH-Funktionen, mit denen man die alles bestimmenden WANNIER-Funktionen berechnen kann. Der erste Abschnitt erläutert dieses Vorgehen. Im Anschluss ist der Quelltext zur Berechnung angegeben.

C.1 Zur numerischen Lösung des BLOCH-Problems

Wir betrachten den Hamiltonian (B.1) mit einem Gitterpotential $V_{\text{lat}}(x)$ der Periodenlänge a wie in Gleichung (4.23). In einer Raumdimension ist der Hamiltonian dann gegeben durch:

$$\hat{H}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \sin^2(k_0 x). \quad (\text{C.1})$$

Hier ist V_0 die Stärke des Gitter-Potentials und $k_0 = \frac{\pi}{a}$ ist der Gittervektor. Das Untergitter aus Gleichung (4.30) lassen wir der Übersichtlichkeit halber zunächst weg. Wir werden jedoch am Ende sehen, dass wir dies leicht mit einbeziehen können.

Wir haben im Anhang B bereits erwähnt, dass die Eigenfunktionen dieses Hamiltonians die BLOCH-Funktionen $\varphi_q^{(n)}(x)$ mit den Energie-Eigenwerten $\varepsilon_q^{(n)}$ sind und dass diese sich gemäß dem BLOCH-Theorem (B.2) zerlegen lassen in ein Produkt aus einer ebenen Welle mit dem Quasi-Impuls q und einer gitterperiodischen Funktion $u_q^{(n)}(x)$. Diese Zerlegung (B.2) setzen wir in die stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung (B.3) ein:

$$\begin{aligned} \hat{H}(x) e^{iqx} u_q^{(n)}(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \left[iq e^{iqx} u_q^{(n)}(x) + e^{iqx} \frac{d}{dx} u_q^{(n)}(x) \right] + e^{iqx} u_q^{(n)}(x) V_0 \sin^2(k_0 x) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-q^2 e^{iqx} u_q^{(n)}(x) + 2iq e^{iqx} \frac{d}{dx} u_q^{(n)}(x) + e^{iqx} \frac{d^2}{dx^2} u_q^{(n)}(x) \right] + \\ &\quad + e^{iqx} u_q^{(n)}(x) V_0 \sin^2(k_0 x). \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

Benutzen wir hier in der eckigen Klammer die Operator-Identität

$$\left(-i \frac{d}{dx} + q\right) \left(-i \frac{d}{dx} + q\right) = -\frac{d^2}{dx^2} - 2iq \frac{d}{dx} + q^2, \quad (C.3)$$

so erhalten wir:

$$\hat{H}(x) e^{iqx} u_q^{(n)}(x) = \frac{1}{2m} e^{iqx} \left(-i \hbar \frac{d}{dx} + \hbar q\right)^2 u_q^{(n)}(x) + e^{iqx} u_q^{(n)}(x) V_0 \sin^2(k_0 x). \quad (C.4)$$

Nun führen wir einen bezüglich des Impulses renormierten HAMILTON-Operator gemäß

$$\hat{H}_q(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-i \frac{d}{dx} + q\right)^2 + V_0 \sin^2(k_0 x) \quad (C.5)$$

ein und erhalten für diesen folgende stationäre SCHRÖDINGER-Gleichung

$$\hat{H}(x) \varphi_q^{(n)}(x) = e^{iqx} \hat{H}_q(x) u_q^{(n)}(x) = \varepsilon_q^{(n)} e^{iqx} u_q^{(n)}(x), \quad (C.6)$$

oder nach Elimination der ebenen Wellen:

$$\hat{H}_q(x) u_q^{(n)}(x) = \varepsilon_q^{(n)} u_q^{(n)}(x). \quad (C.7)$$

An dieser Stelle nutzen wir die Periodizität der Funktionen $u_q^{(n)}(x)$ aus und zerlegen sie in eine FOURIER-Reihe:

$$u_q^{(n)}(x) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_q^{(n)}(j) e^{i2k_0 x j}. \quad (C.8)$$

Da die $u_q^{(n)}(x)$ glatt und periodisch mit der Gitterkonstanten a sind, sollten sich diese numerisch sehr gut durch wenige Summanden der Reihe ausdrücken lassen. Außerdem zerlegen wir auch das Gitterpotential in eine FOURIER-Reihe:

$$V_0 \sin^2(k_0 x) = -\frac{1}{4} V_0 \left(e^{i2k_0 x} + e^{-i2k_0 x} - 1\right). \quad (C.9)$$

Beide FOURIER-Entwicklungen setzen wir in die SCHRÖDINGER-Gleichung (C.7) ein:

$$\begin{aligned} \hat{H}_q(x) u_q^{(n)}(x) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_q^{(n)}(j) \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (2k_0 j + q)^2 - \frac{1}{4} V_0 \left(e^{i2k_0 x} + e^{-i2k_0 x} - 1\right) \right\} e^{i2k_0 x j} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left\{ c_q^{(n)}(j) \left[\frac{\hbar^2}{2m} (2k_0 j + q)^2 + \frac{1}{4} V_0 \right] - \frac{1}{4} V_0 \left(c_q^{(n)}(j-1) + c_q^{(n)}(j+1)\right) \right\} e^{i2k_0 x j} \\ &= \varepsilon_q^{(n)} \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_q^{(n)}(j) e^{i2k_0 x j}. \end{aligned} \quad (C.10)$$

In der zweiten Zeile haben wir im Anteil des Gitterpotentials eine Indexverschiebung ausgeführt, womit wir den gemeinsamen exponentiellen Faktor $\exp(i2k_0 j)$ ausklammern konnten.

Die Exponentialfunktionen bilden ein vollständiges Funktionensystem, sodass für jeden Summanden der Reihe separat gelten muss:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (2k_0j + q)^2 + \frac{1}{4} V_0 \right] c_q^{(n)}(j) - \frac{1}{4} V_0 (c_q^{(n)}(j-1) + c_q^{(n)}(j+1)) = \varepsilon_q^{(n)} c_q^{(n)}(j). \quad (\text{C.11})$$

Dies lässt sich als Matrix-Vektor-Gleichung aufschreiben

$$\sum_{j'=-\infty}^{\infty} H_{j,j'}(q) c_q^{(n)}(j') = \varepsilon_q^{(n)} c_q^{(n)}(j) \quad (\text{C.12})$$

und ist eine Eigenwertgleichung für die Vektoren $c_q^{(n)}(j)$ mit den Eigenwerten $\varepsilon_q^{(n)}$, d. h. den Eigenenergien der BLOCH-Funktionen. Die Matrix $H_{j,j'}(q)$ ist sehr dünn besetzt und weist nur Einträge auf der Diagonalen und auf der ersten Nebendiagonalen auf:

$$H_{j,j'}(q) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m} (2k_0j + q)^2 + \frac{1}{4} V_0 & : j = j' \\ -\frac{1}{4} V_0 & : |j - j'| = 1 \\ 0 & : \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{C.13})$$

In dem von uns betrachteten Modell tritt kein *einfaches* Gitterpotential auf, sondern eines mit einem Untergitter (4.30). Dieses Gitterpotential hat jedoch die gleiche Periodenlänge a und die oben gezeigte Ableitung des Eigenwertproblems (C.12) bleibt gültig. Wir müssen nur die Stellen anpassen, an denen die explizite Form des Gitterpotentials eingegangen ist. Anstatt der Formel (C.9) haben wir dann:

$$V_0 \sin^2(k_0x) + \frac{1}{4} V_1 \sin^2(2k_0x) = -\frac{1}{4} V_0 (e^{i2k_0x} + e^{-i2k_0x} - 1) - \frac{1}{16} V_1 (e^{i4k_0x} + e^{-i4k_0x} - 1). \quad (\text{C.14})$$

Setzt man dieses Potential in die SCHRÖDINGER-Gleichung (C.7) ein, so erhält man nun:

$$\begin{aligned} \hat{H}_q(x) u_q^{(n)}(x) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left\{ c_q^{(n)}(j) \left[\frac{\hbar^2}{2m} (2k_0j + q)^2 + \frac{1}{4} V_0 \right] - \frac{1}{4} V_0 (c_q^{(n)}(j-1) + c_q^{(n)}(j+1)) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{16} V_1 (c_q^{(n)}(j-2) + c_q^{(n)}(j+2)) \right\} e^{i2k_0j} \\ &= \varepsilon_q^{(n)} \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_q^{(n)}(j) e^{i2k_0j}. \end{aligned} \quad (\text{C.15})$$

Wir erhalten daraus wieder die gleiche Matrix-Vektor-Gleichung wie in (C.12), jedoch mit einer modifizierten HAMILTON-Matrix $H_{j,j'}$. Diese ist gegenüber der vorherigen um die zweite Nebendiagonale erweitert:

$$H_{j,j'}(q) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m}(2k_0j+q)^2 + \frac{1}{4}(V_0 + \frac{1}{4}V_1) & : j = j' \\ -\frac{1}{4}V_0 & : |j-j'| = 1 \\ -\frac{1}{16}V_1 & : |j-j'| = 2 \\ 0 & : \text{sonst.} \end{cases} \quad (\text{C.16})$$

Um die Eigenwerte dieser Matrix numerisch zu berechnen, ist es nötig, das Eigenwertproblem dimensionslos zu formulieren. Dies erreichen wir dadurch, dass wir alle Energien in Einheiten der *recoil* Energie $E_r = (\hbar k_0)^2/(2m)$ und alle Impulse in Einheiten von $k_0 = \pi/a$ ausdrücken. Wir setzen daher: $\tilde{\varepsilon}_{\tilde{q}}^{(n)} := \varepsilon_{\tilde{q}}^{(n)}/E_r$, $\tilde{q} := q/k_0$, $\tilde{V}_0 := V_0/E_r$ und $\tilde{V}_1 := V_1/E_r$. Damit nimmt das Eigenwertproblem (C.12) schließlich folgende Form an:

$$\boxed{\sum_{j'=-\infty}^{\infty} \tilde{H}_{j,j'}(\tilde{q}) c_{\tilde{q}}^{(n)}(j') = \tilde{\varepsilon}_{\tilde{q}}^{(n)} c_{\tilde{q}}^{(n)}(j).} \quad (\text{C.17})$$

Die HAMILTON-Matrix schreibt sich in den neuen Einheiten:

$$\boxed{\tilde{H}_{j,j'}(\tilde{q}) = \begin{cases} (2j+\tilde{q})^2 + \frac{1}{4}(\tilde{V}_0 + \frac{1}{4}\tilde{V}_1) & : j = j' \\ -\frac{1}{4}\tilde{V}_0 & : |j-j'| = 1 \\ -\frac{1}{16}\tilde{V}_1 & : |j-j'| = 2 \\ 0 & : \text{sonst.} \end{cases}} \quad (\text{C.18})$$

Numerisch lässt sich das Eigenwertproblem (C.17) sehr effektiv lösen. Dazu schränken wir den Vektorraum des unendlich dimensionalen Eigenwertproblems auf einen N -dimensionalen Vektorraum ein. Ein Maß für die Wahl von N stellt der Betrag der Koeffizienten $c_{\tilde{q}}^{(n)}(j)$ dar. Berechnet man sich aus dem Eigenwertproblem diese Koeffizienten, so sieht man, dass diese für $j \approx \pm 12$ nur noch von der Größenordnung 10^{-12} sind. Dies liegt zwar oberhalb der Maschinengenauigkeit von 10^{-16} , jedoch unterscheiden sich die BLOCH- und WANNIER-Funktionen, die man aus den bei $N = 12$ abgebrochenen Koeffizienten $c_{\tilde{q}}^{(n)}(j)$ berechnet, nicht von denen, die man für Koeffizienten mit $N > 12$ erhält. Wir begrenzen daher unseren Vektorraum auf die Dimension von $N = 12$.

Die Eigenwertgleichung (C.17) lösen wir numerisch für alle Quasi-Impulse $\tilde{q} \in [-1, 1]$ in der ersten BRIOULLIN-Zone und erhalten so aus der FOURIER-Reihe (C.8) die BLOCH-Funktionen $\varphi_{\tilde{q}}^{(n)}(x)$. Bei der Lösung des Eigenwertproblems ist darauf zu achten, dass die Koeffizienten $c_{\tilde{q}}^{(n)}(j)$ in Gleichung (C.8) nur bis auf ein Vorzeichen bestimmt sind. Dadurch, dass wir für jeden Quasi-Impuls q ein separates Eigenwertproblem lösen, springt dieses Vorzeichen unbestimmt von Plus nach Minus. Somit müssen wir in der Numerik dieses Vorzeichen fixieren. Dies realisieren wir dadurch, dass wir für ein festes j_0 das Vorzeichen der Koeffizienten $c_{\tilde{q}}^{(n)}(j_0)$ prüfen¹.

¹Es ergibt sich, dass die Koeffizienten $c_{\tilde{q}}^{(n)}(j)$ reell sind.

Wir wählen die Vorschrift, dass $c_q^{(n)}(j_0)$ positiv sein soll. Ist $c_q^{(n)}(j_0)$ negativ, so müssen wir damit das Vorzeichen des gesamten Vektors $c_q^{(n)}(j)$ für ein bestimmtes q umdrehen.

Mit Hilfe der BLOCH-Funktionen können wir unter Verwendung der Definition (B.6) die WANNIER-Funktionen berechnen, aus welchen wir schließlich das Tunnelmatrixelement $J_\ell^{(n)}$ und die Wechselwirkungsstärke $U_{ijkl}^{(nmuv)}$ des Ein- oder Zwei-Band BOSE–HUBBARD-Hamiltonians bekommen.

Die Tunnelmatrixelemente $J_\ell^{(n)}$ erhält man jedoch numerisch viel einfacher, indem man die diskrete FOURIER-Transformation der BLOCH-Energien berechnet. Dies haben wir bereits bei der Formel (4.20) auf Seite 35 gesehen. Die Tunnelmatrixelemente $J_\ell^{(n)}$ sind die ℓ -ten FOURIER-Koeffizienten der FOURIER-Reihe der BLOCH-Energien $\varepsilon_q^{(n)}$.

Für die Berechnung der Wechselwirkungsstärken $U_{ijkl}^{(nmuv)}$ betrachten wir der Einfachheit halber die lokale Wechselwirkungsstärke U des Ein-Band-Modells aus Gleichung (4.28):

$$U = g \int_V |w(x)|^4 dx. \quad (C.19)$$

Für ein kubisches Gitter in drei Raumdimensionen spalten sich die WANNIER-Funktionen in Produkte aus drei WANNIER-Funktionen: $w(x) = w(x_1)w(x_2)w(x_3)$ auf. Dann wird aus dem Integral in Gleichung (C.19) ein Produkt aus drei identischen Integralen:

$$U = g \left[\int_L |w(x)|^4 dx \right]^3. \quad (C.20)$$

Hier spannt die Länge L das Volumen V des Gitters auf. Wir wollen die Wechselwirkungsstärke U dimensionslos schreiben. Dazu betrachten wir die Definition (4.5) auf Seite 32 der Kopplungskonstanten g :

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} = \frac{\hbar^2(\pi/a)^2}{2m} \frac{8a_s a^2}{\pi} = E_r \frac{8a_s a^2}{\pi}. \quad (C.21)$$

Da die WANNIER-Funktionen die Dimension $m^{-1/2}$ haben, schreiben wir $w(x) = \sqrt{1/a} \tilde{w}(x)$ und erhalten schließlich eine dimensionslose Wechselwirkungsstärke \tilde{U} :

$$\tilde{U} = \frac{U}{E_r} = \frac{8a_s/a}{\pi} \left[\int_L |\tilde{w}(x/a)|^4 d(x/a) \right]^3. \quad (C.22)$$

Numerisch berechnen wir demnach die Wechselwirkungsstärke U in Einheiten von $E_r a_s/a$.

C.2 Quelltext: Berechnung der WANNIER-Funktionen und der Parameter des BOSE–HUBBARD-Modells

Wir zeigen hier den Quelltext, mit welchem wir die WANNIER-Funktionen, die Parameter $J_\ell^{(n)}$, $U_{ijkl}^{(nmuv)}$ der BOSE–HUBBARD-Hamiltonians (4.26) und (4.31) sowie die FRANCK–CONDON-Faktoren $f^{(1)}$ (4.45) und f (4.48) berechnet haben. Der Quelltext ist in der Sprache *Octave* [EATON ET AL., 2008] geschrieben.

```

1  %-----
2  %
3  % Programm zur Berechnung der
4  % Parameter des Bose-Hubbard-Modells
5  %
6  % Mit Untergitter
7  %
8  % Autor: Mathias Hayn
9  %
10 % Datum: 07. Juli 2010
11 %
12 % Sprache: Octave
13 %
14 %-----
15
16 NH    = 12; %Größe der Matrix des HAMILTON-Operators
17 xlen  = 8; %Länge des Ortsgitters in Einheiten von a
18 NB    = 2; %Anzahl der zu betrachtenden Bänder
19
20 %Initialisierung des Quasi-Impuls-Gitters
21 dq = 0.0003;          %Abstand zweier Gitterpunkte
22 qgrid = -1:dq:1;      %Feld für Quasi-Impuls
23 Nq = length( qgrid ); %Größe des Quasi-Impuls-Gitters
24
25 %Initialisierung des Ortsgitters
26 dx = 0.01;           %Abstand zweier Gitterpunkte
27 xgrid = -.5*xlen:dx:.5*xlen; %Feld für Ortsgitter
28 Nx = length( xgrid ); %Größe des Ortsgitters
29
30 %Feld für Energieeigenwerte
31 E = zeros( Nq, 2*NH+1 );
32 ftE1 = zeros( Nq, 1 ); %Feld für diskrete FOURIER-Transformierte von  $E_q^{(0)}$ 
33 ftE2 = zeros( Nq, 2 ); %Feld für diskrete FOURIER-Transformierte von  $E_q^{(1)}$ 
34
35 %Feld für BLOCH-Funktionen
36 phi = zeros( Nq, Nx, NB );
37
38 %Feld für gitterperiodische Funktionen  $u_q^{(n)}(q)$ 
39 u = zeros( Nq, Nx, NB );
40
41 %FOURIER-Koeffizienten  $c_q^{(n)}(j)$  der gitterperiodischen Funktionen
42 cj = zeros( Nq, 2*NH+1, NB );
43
44 %Felder für WANNIER-Funktionen bei ...
45 wannier1 = zeros( Nx, 1 ); % x=0, 1. Band
46 wannier2 = zeros( Nx, 1 ); % x=a/2, 2. Band
47 wannier1nn = zeros( Nx, 1 ); % x=a, 1. Band
48 wannier2nn = zeros( Nx, 1 ); % x=-a/2, 2. Band
49
50
51 %Initialisiere  $V_0$ -Feld
52 NV0 = 100; %Anzahl der Gitterpunkte im  $V_0$ -Feld

```

```

53 V0begin = 0;           %Kleinstes V0
54 V0end   = 30;         %Größtes V0
55 V0grid  = linspace( V0begin, V0end, NV0); %Feld für V0
56
57 %Kontrollfeld für Überlapp benachbarter WANNIER-Funktionen
58 overlap = zeros(NV0, 1);
59
60 %Feld für Bandabstand
61 Gap     = zeros( NV0, 1 );
62
63 %Felder für Zwei-Band-Wechselwirkungsstärke
64 BH1U0000 = zeros( NV0, 1 ); % $\mathcal{W}_{0000}^{(0000)}$ 
65 BH2U0001 = zeros( NV0, 1 ); % $\mathcal{W}_{0000}^{(0001)}$ 
66 BH2U0011 = zeros( NV0, 1 ); % $\mathcal{W}_{0000}^{(0011)}$ 
67 BH2U0101 = zeros( NV0, 1 ); % $\mathcal{W}_{0000}^{(0101)}$ 
68 BH2U1111 = zeros( NV0, 1 ); % $\mathcal{W}_{0000}^{(1111)}$ 
69
70 %Feld für Tunnelmatrixelemente
71 BH1J1 = zeros( NV0, 1 ); %Erstes Band nächste Nachbarn:  $J_1^{(0)}$ 
72 BH2J1 = zeros( NV0, 1 ); %Zweites Band nächste Nachbarn:  $J_1^{(1)}$ 
73 BH2J2 = zeros( NV0, 1 ); %Zweites Band zweit-nächste Nachbarn:  $J_2^{(2)}$ 
74
75 %Felder für FRANCK-CONDON-Faktoren
76 fcf1 = zeros( NV0, 1 );
77 fcf  = zeros( NV0, 1 );
78
79 %temporäre Daten
80 tempEvec = zeros( 2*NH+1 );
81 tempEval = zeros( 2*NH+1 );
82 tempsort = zeros( 2*NH+1, 1 );
83
84
85 V0nn = 1;
86 for V0 = V0grid
87
88     V1 = 10*V0; %Tiefe des Untergitters
89
90     %Hamiltonian initialisieren
91     H = zeros( 2*NH+1 );
92     %Nebendiagonalen initialisieren
93     temp1 = -.25*V0*ones( 1, 2*NH );
94     temp2 = -V1*ones( 1, 2*NH-1 )/16;
95     H += diag( temp1, 1 ) + diag( temp1, -1 ) + diag( temp2, 2 ) + diag(
96         temp2, -2 );
97
98     %Schleife für den Quasi-Impuls
99     nqq = 1;
100    for qqq = qgrid
101
102        %Initialisiere die Diagonalelemente des Hamiltonian
103        for iii = -NH:NH

```

```

103         H( iii+NH+1,iii+NH+1) = (2* iii+qqq)**2 + .5*(V0 + .25*V1);
104     endfor
105
106     %Löse das Eigenwertproblem
107     [tempEvec, tempEval] = eig( H );
108     [E(nqq, :), tempSORT] = sort( diag(tempEval) );
109     for nnn = 1:NB
110         cj(nqq, :, nnn) = tempEvec(:, tempSORT(nnn));
111     endfor
112
113     nqq++;
114 endfor
115
116 %Vorschrift für maximal lokalisierte WANNIER-Funktionen
117 for nnn = 1:NB
118     for nqq = 1:Nq
119         if ( cj(nqq, NH, nnn) < 0 )
120             cj(nqq, :, nnn) = -cj(nqq, :, nnn);
121         endif
122     endfor
123 endfor
124
125 %Berechne BLOCH-Funktionen
126 for nnn = 1:NB
127
128     u(:, :, nnn) = cj(:, :, nnn)*exp(i*2*pi*transpose(-NH:NH)*xgrid);
129
130     phi(:, :, nnn) = exp(i*transpose(qgrid)*xgrid*pi).*u(:, :, nnn);
131     phi(:, :, nnn) = phi(:, :, nnn)/(norm( phi(:, :, nnn), 'fro '
132         )*sqrt(dx));
133
134 endfor
135
136 %Berechne WANNIER-Funktionen im unteren Band bei x=0
137 wannier1 = sum( phi(:, :, 1), 1 ).';
138
139 %Berechne WANNIER-Funktionen im oberen Band bei x=a/2
140 wannier2 = (exp(i*pi*.5*qgrid)*phi(:, :, 2)).';
141
142 %Berechne WANNIER-Funktionen im unteren Band bei x=a
143 wannier1nn = (exp(-i*pi*qgrid)*phi(:, :, 1)).';
144
145 %Berechne WANNIER-Funktionen im oberen Band bei x=-a/2
146 wannier2nn = (exp(-i*pi*.5*qgrid)*phi(:, :, 2)).';
147
148 %Normiere WANNIER-Funktionen
149 wannier1 = wannier1/(norm( wannier1, 'fro ')*sqrt(dx));
150 wannier2 = wannier2/(norm( wannier2, 'fro ')*sqrt(dx));
151 wannier1nn = wannier1nn/(norm( wannier1nn, 'fro ')*sqrt(dx));
152 wannier2nn = wannier2nn/(norm( wannier2nn, 'fro ')*sqrt(dx));
153
154 %Berechne Überlapp
155 overlap(V0nn) = abs( wannier1'*wannier1nn*dx );

```

```

155
156 %Berechne  $U_{0000}^{(nmuv)}$  für Zwei-Band-Modell
157 BH1U0000(V0nn) = (sum( abs( wannier1 ) .**4)*dx)**3;
158 BH1U0000(V0nn) *= 8/pi;
159
160 BH2U0001(V0nn) = (wannier2.*(wannier1.*abs( wannier1 ) .**2)*dx)**3;
161 BH2U0001(V0nn) *= 8/pi;
162
163 BH2U0011(V0nn) = ((wannier2.**2).*(wannier1.**2)*dx)**3;
164 BH2U0011(V0nn) *= 8/pi;
165
166 BH2U0101(V0nn) = (sum( (abs(wannier1).**2).*abs(wannier2))*dx)**3;
167 BH2U0101(V0nn) *= 8/pi;
168
169 BH2U1111(V0nn) = (sum( abs( wannier2 ) .**4)*dx)**3;
170 BH2U1111(V0nn) *= 8/pi;
171
172 %Berechne  $J_{\ell}^{(n)}$  durch diskrete FOURIER-Transformation
173 ftE1 = abs(fft(E(:, 1), Nq))/Nq;
174 ftE2 = abs(fft(E(:, 2), Nq))/Nq;
175 BH1J1(V0nn) = ftE1(2);
176 BH2J1(V0nn) = ftE2(2);
177 BH2J2(V0nn) = ftE2(3);
178
179 %Berechne FRANCK-CONDON-Faktoren
180 fcf1(V0nn) = wannier2nn.*(wannier2.*cos(pi*xgrid'))*dx;
181 fcf(V0nn) = wannier2.*(wannier1.*cos(pi*xgrid'))*dx;
182
183 %Berechne Bandabstand
184 Gap(V0nn) = min( E(:, 2) ) - max( E(:, 1) );
185
186 V0nn++;
187 endfor

```


Anhang D

Die Molekularfeld-Näherung

In diesem Abschnitt wollen wir Näherungsformeln für das Produkt aus n Erzeugern und Vernichtern aufstellen. Dieses Produkt nennen wir n -Produkt. Wir wollen im Weiteren die Erzeuger und Vernichter kurz als Leiteroperatoren bezeichnen. Außerdem sollen in dem n -Produkt nur Leiteroperatoren *verschiedener* Gitterplätze auftauchen.

Ausgangspunkt ist die Molekularfeld-Näherung, bei welcher das Produkt zweier Leiteroperatoren als Linearkombination eben dieser Leiteroperatoren dargestellt wird. Zunächst werden die Leiteroperatoren in ein mittleres Feld $\langle \hat{a}_k \rangle = \Psi_k$ und in Fluktuationen $\delta \hat{a}_k$ hierum aufgespalten:

$$\hat{a}_k = \Psi_k + \delta \hat{a}_k. \quad (\text{D.1})$$

Das mittlere Feld ist dabei eine komplexe Zahl und die gesamte Operatorwertigkeit des Leiteroperators steckt in den Fluktuationen. Um in Produkten aus mehreren Leiteroperatoren die Übersicht zu bewahren, verwenden wir folgende Notation für die Leiteroperatoren:

$$\hat{a}_\alpha =: \hat{\alpha} = \alpha + \delta \hat{\alpha}. \quad (\text{D.2})$$

Hier ist α ein kollektiver Index, der sowohl den Gitterplatz angibt, als auch die Information darüber enthält, ob \hat{a}_α ein Erzeuger oder ein Vernichter ist.

Beginnen wir mit dem Produkt aus *zwei* Leiteroperatoren:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha} \hat{\beta} &= (\alpha + \delta \hat{\alpha})(\beta + \delta \hat{\beta}) = \alpha\beta + \alpha\delta \hat{\beta} + \beta\delta \hat{\alpha} + \delta \hat{\alpha} \delta \hat{\beta} \\ &= \alpha\beta + \alpha(\hat{\beta} - \beta) + \beta(\hat{\alpha} - \alpha) + \delta \hat{\alpha} \delta \hat{\beta} = \alpha\beta + \alpha\hat{\beta} - \alpha\beta + \beta\hat{\alpha} - \beta\alpha + \delta \hat{\alpha} \delta \hat{\beta} \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

Daraus bekommen wir das Ergebnis:

$$\hat{\alpha} \hat{\beta} = \hat{\alpha} \beta + \alpha \hat{\beta} - \alpha \beta + \mathcal{O}(\delta \hat{\alpha}^2). \quad (\text{D.4})$$

Hierbei ist $\mathcal{O}(\delta \hat{\alpha}^2)$ im Sinne von „in zweiter Ordnung in den Fluktuationen der Leiteroperatoren¹“ zu verstehen und es ist nicht speziell der Leiteroperator $\hat{\alpha}$ gemeint.

Der nächste Schritt der Verallgemeinerung besteht darin, dass man Produkte von Funktionen von Leiteroperatoren zweier verschiedener Gitterplätze betrachtet.

¹Genauer gesagt deren Matrixelemente.

Gegeben seien also zwei Funktionen $\hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k)$ und $\hat{g}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i)$, wobei die erste eine Funktion von Leiteroperatoren des Gitterplatzes k und die zweite entsprechend des Gitterplatzes i ist. Die beiden Funktionen spalten wir analog der Gleichung (D.1) jeweils in einen Mittelwert plus Fluktuationen um diesen auf:

$$\hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) = \langle \hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) \rangle + \delta \hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k), \quad (\text{D.5})$$

$$\hat{g}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) = \langle \hat{g}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \rangle + \delta \hat{g}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i). \quad (\text{D.6})$$

Aus dem Produkt der beiden Fluktuationen können wir dann analog der Gleichung (D.3) eine Molekularfeld-Näherung für die Funktionen \hat{f} und \hat{g} herleiten:

$$\hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) \hat{g}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \approx \langle \hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) \rangle \hat{g}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) + \hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) \langle \hat{g}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \rangle - \langle \hat{f}(\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_k) \rangle \langle \hat{g}(\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i) \rangle. \quad (\text{D.7})$$

Hier haben wir Terme, welche quadratisch in den Fluktuationen sind vernachlässigt.

Wir wollen nun das Ergebnis für das Produkt von zwei Leiteroperatoren auf das Produkt von drei, vier, ..., n Leiteroperatoren erweitern. Dazu gehen wir schrittweise vor und berechnen sukzessive Produkte immer höherer Ordnung in den Leiteroperatoren.

Betrachten wir zunächst das Produkt aus *drei* Leiteroperatoren:

$$\begin{aligned} \delta \hat{\alpha} \delta \hat{\beta} \delta \hat{\gamma} &= (\hat{\alpha} - \alpha)(\hat{\beta} - \beta)(\hat{\gamma} - \gamma) = (\hat{\alpha} - \alpha)(\hat{\beta} \hat{\gamma} - \hat{\beta} \gamma - \beta \hat{\gamma} + \beta \gamma) \\ &= \hat{\alpha} \hat{\beta} \hat{\gamma} - (\hat{\alpha} \hat{\beta} \gamma + \hat{\alpha} \beta \hat{\gamma} + \alpha \hat{\beta} \hat{\gamma}) + (\hat{\alpha} \beta \gamma + \alpha \hat{\beta} \gamma + \alpha \beta \hat{\gamma}) - \alpha \beta \gamma. \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Hier sei nochmals betont, dass α , β und γ auf jeweils verschiedenen Gitterplätzen wirken. Nun spalten wir in der ersten Klammer die Produkte aus zwei Leiteroperatoren gemäß Gleichung (D.4) auf:

$$\begin{aligned} \delta \hat{\alpha} \delta \hat{\beta} \delta \hat{\gamma} &= \hat{\alpha} \hat{\beta} \hat{\gamma} - (\hat{\alpha} \beta \gamma + \alpha \hat{\beta} \gamma - \alpha \beta \gamma + \hat{\alpha} \beta \gamma + \alpha \beta \hat{\gamma} - \alpha \beta \gamma + \alpha \hat{\beta} \gamma + \alpha \beta \hat{\gamma} - \alpha \beta \gamma) + \\ &\quad + (\hat{\alpha} \beta \gamma + \alpha \hat{\beta} \gamma + \alpha \beta \hat{\gamma}) - \alpha \beta \gamma + \mathcal{O}(\delta \alpha^2) \\ &= \hat{\alpha} \hat{\beta} \hat{\gamma} - (\hat{\alpha} \beta \gamma + \alpha \hat{\beta} \gamma + \alpha \beta \hat{\gamma} - 2\alpha \beta \gamma) + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Damit erhalten wir für das Produkt aus drei Leiteroperatoren:

$$\hat{\alpha} \hat{\beta} \hat{\gamma} = \hat{\alpha} \beta \gamma + \alpha \hat{\beta} \gamma + \alpha \beta \hat{\gamma} - 2\alpha \beta \gamma + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \quad (\text{D.10})$$

Auf analoge Weise lassen sich nun immer höhere Ordnungen von Produkten berechnen. Wir geben, ohne die explizite Rechnung zu zeigen, die Molekularfeld-Näherung für 4- und 5-Produkte an:

$$\hat{\alpha} \hat{\beta} \hat{\gamma} \hat{\epsilon} = \hat{\alpha} \beta \gamma \epsilon + \alpha \hat{\beta} \gamma \epsilon + \alpha \beta \hat{\gamma} \epsilon + \alpha \beta \gamma \hat{\epsilon} - 3\alpha \beta \gamma \epsilon + \mathcal{O}(\delta \alpha^2), \quad (\text{D.11})$$

$$\hat{\alpha} \hat{\beta} \hat{\gamma} \hat{\epsilon} \hat{\zeta} = \hat{\alpha} \beta \gamma \epsilon \zeta + \alpha \hat{\beta} \gamma \epsilon \zeta + \alpha \beta \hat{\gamma} \epsilon \zeta + \alpha \beta \gamma \hat{\epsilon} \zeta + \alpha \beta \gamma \epsilon \hat{\zeta} - 4\alpha \beta \gamma \epsilon \zeta + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \quad (\text{D.12})$$

Es liegt die Vermutung nahe, dass die Molekularfeld-Naherung fur ein Produkt aus n Leiteroperatoren auf *verschiedenen* Gitterplatzen wie folgt lautet:

$$\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2 \cdots \hat{\alpha}_n = \hat{\alpha}_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n + \alpha_1 \hat{\alpha}_2 \cdots \alpha_n + \dots + \alpha_1 \alpha_2 \cdots \hat{\alpha}_n - (n-1) \alpha_1 \alpha_2 \cdots \alpha_n + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \quad (\text{D.13})$$

Dies lasst sich durch Induktion beweisen. Den *Induktionsbeginn* stellt die Gleichung (D.4) dar. Die *Induktionsvoraussetzung* (D.13) schreiben wir in kompakter Form:

$$\hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2 \cdots \hat{\alpha}_n = \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \alpha_j - (n-1) \prod_{i=1}^n \alpha_i + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \quad (\text{D.14})$$

Der Induktionsschritt lautet:

$$\begin{aligned} \hat{\alpha}_1 \hat{\alpha}_2 \cdots \hat{\alpha}_n \hat{\alpha}_{n+1} &= \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i \hat{\alpha}_{n+1} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \alpha_j - (n-1) \hat{\alpha}_{n+1} \prod_{i=1}^n \alpha_i + \mathcal{O}(\delta \alpha^2) \\ &\stackrel{(\text{D.14})}{=} \sum_{i=1}^n \left(\hat{\alpha}_i \alpha_{n+1} + \hat{\alpha}_{n+1} \alpha_i - \alpha_i \alpha_{n+1} + \mathcal{O}(\delta \alpha^2) \right) \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \alpha_j - (n-1) \hat{\alpha}_{n+1} \prod_{i=1}^n \alpha_i + \mathcal{O}(\delta \alpha^2) \\ &= \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i \alpha_{n+1} \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \alpha_j + n \hat{\alpha}_{n+1} \prod_{i=1}^n \alpha_i - n \prod_{i=1}^{n+1} \alpha_i - (n-1) \hat{\alpha}_{n+1} \prod_{i=1}^n \alpha_i + \mathcal{O}(\delta \alpha^2) \\ &= \sum_{i=1}^{n+1} \hat{\alpha}_i \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n+1} \alpha_j - n \prod_{i=1}^{n+1} \alpha_i + \mathcal{O}(\delta \alpha^2). \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

Dies ist, was wir zeigen wollten.

Literaturverzeichnis

UltraCold Atom News Webseite (2010),

URL: <http://ucan.physics.utoronto.ca/News>.

ABRAMOWITZ, MILTON und IRENE A. STEGUN, Hg.: *Handbook of mathematical functions*, neunter dover druck, zehnte GPO Aufl., Dover, New York, NY (1972), ISBN 0-486-61272-4.

ANDERSON, M. H., J. R. ENSHER, M. R. MATTHEWS, C. E. WIEMAN und E. A. CORNELL: *Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor.*, *Science* **269** (5221) S. 198 (1995), DOI: 10.1126/science.269.5221.198.

ASHCROFT, NEIL W. und N. DAVID MERMIN: *Solid State Physics*, Saunders College Publishing, Fort Worth [u.a.] (1976), ISBN 0-03-049346-3.

ASPECT, A., E. ARIMONDO, R. KAISER, N. VANSTEENKISTE und C. COHEN-TANNOUDJI: *Laser Cooling below the One-Photon Recoil Energy by Velocity-Selective Coherent Population Trapping*, *Physical Review Letters* **61** (7) S. 826 (1988), DOI: 10.1103/PhysRevLett.61.826.

BILLY, JULIETTE, VINCENT JOSSE, ZHANCHUN ZUO, ALAIN BERNARD, BEN HAMBRECHT, PIERRE LUGAN, DAVID CLÉMENT, LAURENT SANCHEZ-PALENCIA, PHILIPPE BOUYER und ALAIN ASPECT: *Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder.*, *Nature* **453** (7197) S. 891 DOI: 10.1038/nature07000, ARXIV: 0804.1621.

BLOCH, IMMANUEL, JEAN DALIBARD und WILHELM ZWERGER: *Many-body physics with ultracold gases*, *Reviews of Modern Physics* **80** (3) S. 885 DOI: 10.1103/RevModPhys.80.885, ARXIV: 0704.3011.

BLUM, KARL: *Density Matrix Theory and Applications*, Plenum, New York [u.a.] (1981), ISBN 0-306-40684-5.

BOGOLIUBOV, NIKOLAY NIKOLAJEWITSCH: *J. Phys. (USSR)* **11** S. 23 (1947), nachgedruckt in D. Pines, *The Many-Body Problem*, (New York, W. A. Benjamin, 1961), p. 292.

- BOSE, S.: *Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese*, *Zeitschrift für Physik* **26** (1) S. 178 (1924),
DOI: 10.1007/BF01327326.
- BRADLEY, C. C., C. A. SACKETT, J. J. TOLLETT und R. G. HULET: *Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions*, *Physical Review Letters* **75** (9) S. 1687 (1995),
DOI: 10.1103/PhysRevLett.75.1687.
- BRAUNER, TOMÁŠ: *Spontaneous Symmetry Breaking and Nambu–Goldstone Bosons in Quantum Many-Body Systems*, *Symmetry* **2** (2) S. 609 (2010),
DOI: 10.3390/sym2020609.
- BREUER, HEINZ-PETER und FRANCESCO PETRUCCIONE: *The Theory of Open Quantum Systems*, Clarendon Press, Oxford [u.a.] (2007),
ISBN 978-0-19-921390-0.
- BRONSTEIN, ILJA NIKOLAJEWITSCH, KONSTANTIN ADOLFOWITSCH SEMENDJAJEW, GERHARD MUSIOL und HEINER MÜHLIG: *Taschenbuch der Mathematik*, 5. überarb. und erw. Aufl., Harri Deutsch, Thun [u.a.] (2001),
ISBN 3-8171-2005-2.
- CHENG, SUI SUN: *Partial difference equations*, *Advances in discrete mathematics and applications*, Francis & Taylor, London [u.a.] (2003),
ISBN 0-415-29884-9.
- CZYCHOLL, GERD: *Theoretische Festkörperphysik : Von den klassischen Modellen zu modernen Forschungsthemen*, 2. aktualisierte Aufl., Springer, Berlin [u.a.] (2004),
ISBN 3-540-20824-0.
- DALEY, A. J., P. O. FEDICHEV und P. ZOLLER: *Single-atom cooling by superfluid immersion: A nondestructive method for qubits*, *Physical Review A* **69** (2) S. 022306
DOI: 10.1103/PhysRevA.69.022306,
ARXIV: quant-ph/0308129.
- DALEY, ANDREW JOHN: *Manipulation and Simulation of Cold Atoms in Optical Lattices*, Dissertation, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck (2005),
URL: <http://homepage.uibk.ac.at/~c705190/>.
- DALVIT, D. A. R., G. P. BERMAN und M. VISHIK: *Dynamics of open bosonic quantum systems in coherent state representation*, *Physical Review A* **73** (1) S. 013803
DOI: 10.1103/PhysRevA.73.013803,
ARXIV: quant-ph/0601063.

- DAVIS, K. B., M.-O. MEWES, M. R. ANDREWS, N. J. VAN DRUTEN, D. S. DURFEE, D. M. KURN und W. KETTERLE: *Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms*, *Physical Review Letters* **75** (22) S. 3969 (1995),
DOI: 10.1103/PhysRevLett.75.3969.
- DIEHL, S., A. MICHELI, A. KANTIAN, B. KRAUS, H. P. BÜCHLER und P. ZOLLER: *Quantum states and phases in driven open quantum systems with cold atoms*, *Nature Physics* **4** (11) S. 878
DOI: 10.1038/nphys1073,
ARXIV: 0803.1482.
- DIEHL, SEBASTIAN, ANDREA TOMADIN, ANDREA MICHELI, ROSARIO FAZIO und PETER ZOLLER: *Dynamical Phase Transitions and Instabilities in Open Atomic Many-Body Systems*, *Physical Review Letters* **105** (1) S. 015702
DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.015702,
ARXIV: 1003.2071.
- EATON, JOHN W., DAVID BATEMAN und SREN HAUBERG: *GNU Octave Manual Version 3*, Network Theory Limited (2008),
ISBN 0-9546120-6-X,
URL: <http://www.octave.org>.
- EINSTEIN, ALBERT: *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases*, *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften* (1925).
- ELAYDI, SABER N.: *An introduction to difference equations*, 3. Aufl., Springer, New York, NY [u.a.] (2005),
ISBN 0-387-23059-9.
- ERNST, PHILIPP T., SÖREN GÖTZE, JASPER S. KRAUSER, KARSTEN PYKA, DIRK-SÖREN LÜHMANN, DANIELA PFANNKUCHE und KLAUS SENGSTOCK: *Probing superfluids in optical lattices by momentum-resolved Bragg spectroscopy*, *Nature Physics* **6** (1) S. 56
DOI: 10.1038/nphys1476,
ARXIV: 0908.4242.
- FISHER, MATTHEW P. A., PETER B. WEICHMAN, G. GRINSTEIN und DANIEL S. FISHER: *Boson localization and the superfluid-insulator transition*, *Physical Review B* **40** (1) S. 546 (1989),
DOI: 10.1103/PhysRevB.40.546.
- GARDINER, CRISPIN W. und PETER ZOLLER: *Quantum Noise: A Handbook of Markovian and Non-Markovian Quantum Stochastic Methods with Applications to Quantum Optics*, Springer Series in Synergetics – Springer complexity, 3. Aufl., Springer, Berlin [u.a.] (2004),
ISBN 3-540-22301-0.

- GLAUBER, ROY J.: *Coherent and Incoherent States of the Radiation Field*, *Physical Review* **131** (6) S. 2766 (1963),
DOI: 10.1103/PhysRev.131.2766.
- GORINI, VITTORIO, ALBERTO FRIGERIO, MAURIZIO VERRI, ANDRZEJ KOSSAKOWSKI und E. C. G. SUDARSHAN: *Properties of quantum Markovian master equations*, *Reports on Mathematical Physics* **13** (2) S. 149 (1978),
DOI: 10.1016/0034-4877(78)90050-2.
- GORINI, VITTORIO, ANDRZEJ KOSSAKOWSKI und E. C. G. SUDARSHAN: *Completely positive dynamical semigroups of N-level systems*, *Journal of Mathematical Physics* **17** (5) S. 821 (1976),
DOI: 10.1063/1.522979.
- GREINER, MARKUS: *Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials*, Dissertation, Ludwig-Maximilians-Universität München (2003),
URL: <http://greiner.physics.harvard.edu/Publications.html>.
- GREINER, MARKUS, OLAF MANDEL, TILMAN ESSLINGER, THEODOR W. HÄNSCH und IMMANUEL BLOCH: *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, *Nature* **415** (6867) S. 39 (2002a),
DOI: 10.1038/415039a.
- GREINER, MARKUS, OLAF MANDEL, THEODOR W. HÄNSCH und IMMANUEL BLOCH: *Collapse and revival of the matter wave field of a Bose-Einstein condensate*, *Nature* **419** (6902) S. 51
DOI: 10.1038/nature00968,
ARXIV: cond-mat/0207196.
- GRIESSNER, A., A. J. DALEY, S. R. CLARK, D. JAKSCH und P. ZOLLER: *Dark-State Cooling of Atoms by Superfluid Immersion*, *Physical Review Letters* **97** (22) S. 220403
DOI: 10.1103/PhysRevLett.97.220403,
ARXIV: cond-mat/0607254.
- GRIESSNER, A., A. J. DALEY, S. R. CLARK, D. JAKSCH und P. ZOLLER: *Dissipative dynamics of atomic Hubbard models coupled to a phonon bath: dark state cooling of atoms within a Bloch band of an optical lattice*, *New Journal of Physics* **9** (2) S. 44
DOI: 10.1088/1367-2630/9/2/044,
ARXIV: cond-mat/0612263.
- GRIFFIN, ALLAN, DAVID SNOKE und SANDRO STRINGARI, Hg.: *Bose-Einstein Condensation*, Cambridge Univ. Press, Cambridge [u.a.] (1995),
ISBN 0-521-46473-0.
- GROSS, EBERHARD K. U. und ERICH RUNGE: *Vielteilchentheorie*, Teubner, Stuttgart (1986),
ISBN 3-519-03086-1.

- HOFFMANN, ALEXANDER: *Bosonen im optischen Gitter*, Diplomarbeit, Freie Universität Berlin (2007),
URL: <http://users.physik.fu-berlin.de/~pelster/diplomatheses.html>.
- HUBBARD, J.: *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*, *Proc. R. Soc. Lond. A* **276** (1365) S. 238 (1963),
DOI: 10.1098/rspa.1963.0204.
- JAKSCH, D., H.-J. BRIEGEL, J. I. CIRAC, C. W. GARDINER und P. ZOLLER: *Entanglement of Atoms via Cold Controlled Collisions*, *Physical Review Letters* **82** (9) S. 1975
DOI: 10.1103/PhysRevLett.82.1975,
ARXIV: quant-ph/9810087.
- JAKSCH, D., C. BRUDER, J. I. CIRAC, C. W. GARDINER und P. ZOLLER: *Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices*, *Physical Review Letters* **81** (15) S. 3108 (1998),
DOI: 10.1103/PhysRevLett.81.3108.
- JAKSCH, D. und P. ZOLLER: *The cold atom Hubbard toolbox*, *Annals of Physics* **315** (1) S. 52 (2005),
DOI: 10.1016/j.aop.2004.09.010.
- JAKSCH, DIETER: *Bose-Einstein Condensation and Applications*, Dissertation, Leopold-Franzens-Universität Innsbruck (2003),
URL: <http://www.physics.ox.ac.uk/qubit/dieter/index.html>.
- KASEVICH, MARK und STEVEN CHU: *Laser cooling below a photon recoil with three-level atoms*, *Physical Review Letters* **69** (12) S. 1741 (1992),
DOI: 10.1103/PhysRevLett.69.1741.
- KETTERLE, W, D. S. DURFEE und D. M. STAMPER-KURN: *Making, probing and understanding Bose-Einstein condensates* (1999),
ARXIV: cond-mat/9904034.
- KITTEL, CHARLES: *Einführung in die Festkörperphysik*, 14., überarbeitete und erweiterte Aufl., Oldenbourg, München [u.a.] (2006),
ISBN 978-3-486-57723-5.
- KOHN, WALTER: *Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions*, *Physical Review* **115** (4) S. 809 (1959),
DOI: 10.1103/PhysRev.115.809.
- KOHN, WALTER: *Construction of Wannier Functions and Applications to Energy Bands*, *Physical Review B* **7** (10) S. 4388 (1973),
DOI: 10.1103/PhysRevB.7.4388.

- KRAUS, B., H. P. BÜCHLER, S. DIEHL, A. KANTIAN, A. MICHELI und P. ZOLLER: *Preparation of entangled states by quantum Markov processes*, *Physical Review A* **78** (4) S. 042307
DOI: 10.1103/PhysRevA.78.042307,
ARXIV: 0803.1463.
- KRAUTER, HANNA, CHRISTINE A. MUSCHIK, KASPER JENSEN, WOJCIECH WASILEWSKI, JONAS M. PETERSEN, J. IGNACIO CIRAC und EUGENE S. POLZIK: *Entanglement generated by dissipation* (2010),
ARXIV: 1006.4344.
- KRYSZEWSKI, STANISLAW und JUSTYNA CZECHOWSKA-KRYSZK: *Master equation - tutorial approach* (2008),
ARXIV: 0801.1757.
- LEGGETT, ANTHONY J.: *Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts*, *Reviews of Modern Physics* **73** (2) S. 307 (2001),
DOI: 10.1103/RevModPhys.73.307.
- LEGGETT, ANTHONY J.: *Quantum liquids : Bose condensation and Cooper pairing in condensed-matter systems*, Oxford Univ. Press, Oxford [u.a.] (2007),
ISBN 978-0-19-852643-8.
- LEWENSTEIN, MACIEJ, ANNA SANPERA, VERONICA AHUFINGER, BOGDAN DAMSKI, ADITI SEN und UJJWAL SEN: *Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond*, *Advances in Physics* **56** (2) S. 243
DOI: 10.1080/00018730701223200,
ARXIV: cond-mat/0606771.
- LEWENSTEIN, MACIEJ, LI YOU, J. COOPER und K. BURNETT: *Quantum field theory of atoms interacting with photons: Foundations*, *Physical Review A* **50** (3) S. 2207 (1994),
DOI: 10.1103/PhysRevA.50.2207.
- LINDBLAD, G.: *On the generators of quantum dynamical semigroups*, *Communications in Mathematical Physics* **48** (2) S. 119 (1976),
DOI: 10.1007/BF01608499.
- MARQUARDT, FLORIAN und ANNETT PÜTTMANN: *Introduction to dissipation and decoherence in quantum systems* (2008),
ARXIV: 0809.4403.
- MARZARI, NICOLA und DAVID VANDERBILT: *Maximally localized generalized Wannier functions for composite energy bands*, *Physical Review B* **56** (20) S. 12847
DOI: 10.1103/PhysRevB.56.12847,
ARXIV: cond-mat/9707145v1.

- METCALF, HAROLD J. und PETER VAN DER STRATEN: *Laser cooling and trapping*, Springer, New York, NY [u.a.] (1999), ISBN 0-387-98747-9.
- MOORE, M. G., O. ZOBAY und P. MEYSTRE: *Quantum optics of a Bose-Einstein condensate coupled to a quantized light field*, *Physical Review A* **60** (2) S. 1491
DOI: 10.1103/PhysRevA.60.1491,
ARXIV: cond-mat/9902293.
- MUKAMEL, SHAUL: *Principles of nonlinear optical spectroscopy*, Oxford series in optical and imaging sciences, 6, Oxford Univ. Press, New York [u.a.] (1995), ISBN 0-19-509278-3.
- PENROSE, OLIVER und LARS ONSAGER: *Bose-Einstein Condensation and Liquid Helium*, *Physical Review* **104** (3) S. 576 (1956),
DOI: 10.1103/PhysRev.104.576.
- PETHICK, CHRISTOPHER J. und HENRIK SMITH: *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*, 2. Aufl., Cambridge Univ. Press, Cambridge [u.a.] (2008), ISBN 978-0-521-84651-6.
- PITAEVSKII, LEV P. und SANDRO STRINGARI: *Bose-Einstein Condensation*, Nr. 116 in International series of monographs on physics, Clarendon Press, Oxford [u.a.] (2004), ISBN 0-19-850719-4.
- ROATI, GIACOMO, CHIARA D'ERRICO, LEONARDO FALLANI, MARCO FATTORI, CHIARA FORT, MATTEO ZACCANTI, GIOVANNI MODUGNO, MICHELE MODUGNO und MASSIMO INGUSCIO: *Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate.*, *Nature* **453** (7197) S. 895
DOI: 10.1038/nature07071,
ARXIV: 0804.2609.
- SAKURAI, JUN JOHN: *Modern Quantum Mechanics*, überarbeitete Aufl., Addison-Wesley (1994), ISBN 0-201-53929-2.
- SCHIRMER, SOPHIE G. und XIAOTING WANG: *Stabilizing open quantum systems by Markovian reservoir engineering*, *Physical Review A* **81** (6) S. 1
DOI: 10.1103/PhysRevA.81.062306,
ARXIV: 0909.1596.
- SHCHESNOVICH, V. S. und V. V. KONOTOP: *Control of a Bose-Einstein condensate by dissipation: Nonlinear Zeno effect*, *Physical Review A* **81** (5) S. 053611
DOI: 10.1103/PhysRevA.81.053611,
ARXIV: 1004.3893.

- STELLMER, SIMON, MENG KHOON TEY, BO HUANG, RUDOLF GRIMM und FLORIAN SCHRECK:
Bose-Einstein Condensation of Strontium, *Physical Review Letters* **103** (20) S. 200401
DOI: 10.1103/PhysRevLett.103.200401,
ARXIV: 0910.0634.
- STENGER, J., S. INOUE, D. M. STAMPER-KURN, H.-J. MIESNER, A. P. CHIKKATUR und
W. KETTERLE: *Spin domains in ground-state Bose-Einstein condensates*, *Nature* **396** S. 345
DOI: 10.1038/24567,
ARXIV: cond-mat/9901072.
- TOMADIN, A., V. GIOVANNETTI, R. FAZIO, D. GERACE, I. CARUSOTTO, H. E. TÜRECI und
A. IMAMOGLU: *Signatures of the superfluid-insulator phase transition in laser-driven dissipative nonlinear cavity arrays*, *Phys. Rev. A* **81** (6) S. 061801
DOI: 10.1103/PhysRevA.81.061801,
ARXIV: 0904.4437.
- VERSTRAETE, FRANK, MICHAEL M. WOLF und J. IGNACIO CIRAC: *Quantum computation and quantum-state engineering driven by dissipation*, *Nature Physics* **5** (9) S. 633 (2009),
DOI: 10.1038/nphys1342.

Danksagung

Eine Diplomarbeit kann man nicht ohne die Hilfe von anderen Menschen schreiben. Innerhalb des letzten Jahres haben mich viele Leute bei der Ausarbeitung und der Niederschrift dieser Arbeit unterstützt. Diesen Menschen bin ich zu Dank verpflichtet.

Mein erster Dank geht an Axel Pelster. Er hat mir dieses sehr interessante Thema als Diplomarbeit vorgeschlagen und meine Arbeit das Jahr über betreut. Ich bin Ihm sehr dankbar für einige sehr hilfreiche Anregungen und neue Ideen. Vor allem sein intensives Korrekturlesen dieser Arbeit und der Vorstufen davon, haben sie vor vielen Rechtschreibfehlern und einige inhaltlichen Fehlern bewahrt.

Ein großer Dank geht an Professor Kleinert, in dessen Arbeitsgruppe ich die letzten zwölf Monate an dieser Diplomarbeit arbeiten konnte.

Nach Innsbruck geht auch ein großes Dankeschön! Sebastian Diehl, dessen Modellsystem Grundlage meiner Diplomarbeit war, danke ich für die hilfreichen Diskussionen, Anregungen und die Klärung offener Fragen bezüglich des Modells.

Andrew Daley aus Innsbruck bin ich sehr zu Dank verpflichtet, da ich durch Ihn das Forschungsgebiet der ultra-kalten Quantengase überhaupt erst kennen gelernt habe und er dadurch mein Interesse für diese so kalte Materie geweckt hat. Außerdem hat er mir bei den numerischen Berechnungen der Wannier-Funktionen sehr geholfen.

Ein dickes Dankeschön geht an die ganze Arbeitsgruppe. Speziell an Christian Nietner (für viele Gespräche über meine und seine Diplomarbeit), Victor Bezerra (für die Diskussionen zum Bose–Hubbard-Modell und das Korrekturlesen meiner Arbeit), Florian Linder (der einzige Diplomand, der noch Lust hatte mit mir Vorlesungen zu hören und der immer interessiert an meinen Problem- und Fragestellungen war), Nathalie Pfitzinger (die mich vor allem zu Beginn vor vielen Computerproblemen bewahrt hat) und Hendrik Ludwig (der für eine gute Stimmung in unserem vollen Büro gesorgt hat).

Meinen Eltern bin ich sehr dankbar für die Unterstützung während der vielen Semester des Studiums und der Diplomarbeit. Sie haben mir oft den Rücken frei gehalten und waren für mich da, sodass ich relativ sorgenfrei studieren konnte. Ohne Sie wäre ich nicht da, wo ich jetzt bin.

An meine Freundin Sophie geht ein großes Dankeschön. Sie hat es vor allem in der stressigen Zeit der letzten Monate und vor allem Wochen mit mir ausgehalten, fleißig Korrektur gelesen und viele Rechtschreibfehler gefunden. Danke für Deine moralische Unterstützung, wenn es mit meiner Arbeit nicht so lief, wie ich es mir vorgestellt habe.

