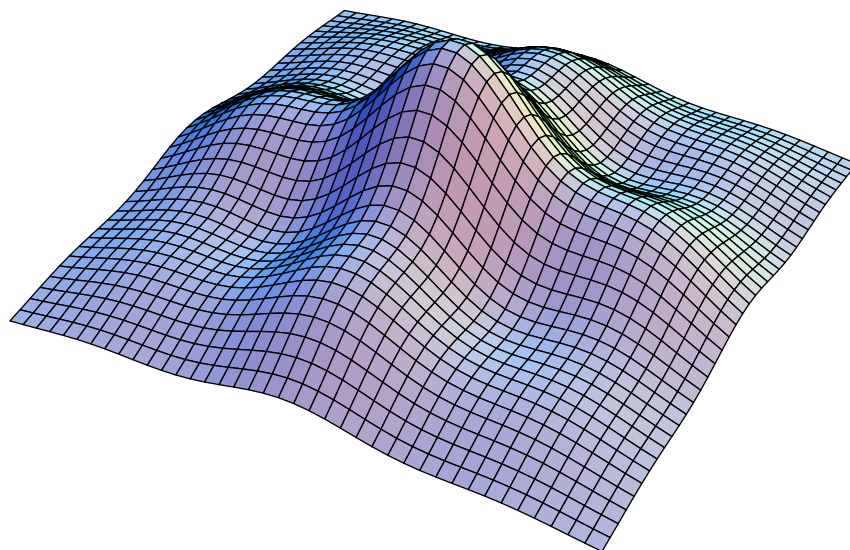


Bosonen im optischen Gitter

Diplomarbeit von
Alexander Hoffmann



Hauptgutachter: Prof. Dr. Hagen Kleinert



vorgelegt dem
Fachbereich Physik der
Freien Universität Berlin
April 2007

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Historisches und Motivation	5
1.2	Experimentelle Realisierung	6
1.3	Überblick	9
2	Bosonen im optischen Gitter	11
2.1	Bose-Hubbard-Modell	11
2.2	Herleitung des Bose-Hubbard-Modells	11
2.3	Wannier-Funktionen und Wechselwirkungskoeffizienten	13
2.3.1	Kettenbruchdarstellung	14
2.3.2	Harmonische Näherung	16
2.3.3	Numerische Berechnung	20
3	Molekularfeldtheorie	29
3.1	Landau-Theorie	29
3.2	Molekularfeldansatz	30
3.3	Bose-Hubbard-Modell für $T = 0$	32
3.3.1	Störungstheorie	32
3.3.2	Chemisches Potential	34
3.3.3	Phasenübergang	36
3.3.4	Monte-Carlo-Simulation	38
3.4	Bose-Hubbard-Modell für $T > 0$	38
3.4.1	Wechselwirkungsbild	39
3.4.2	Zustandssumme	41
3.4.3	Teilchenzahl und Phasengrenze	47
4	Harmonische Falle	51
4.1	Lokale-Dichte-Näherung	51
4.2	Bestimmung der Teilchenzahl	54

4.3	Anwendung	54
5	Quantenkorrekturen zur Molekularfeldtheorie	57
5.1	Selbstkonsistenz	57
5.2	Korrekturen der ersten Ordnung	61
6	Visibilität	65
6.1	Dichteverteilung	65
6.2	Molekularfeldtheorie	67
6.3	Visibilität der Mott-Phase	70
6.3.1	Visibilität für $T = 0$	70
6.3.2	Visibilität für $T > 0$	71
6.3.3	Vergleich mit dem Experiment	73
6.4	Visibilität in der superfluiden Phase	75
7	Bose-Fermi-Mischungen	79
7.1	Bose-Fermi-Hubbard-Modell	79
7.2	Phasengrenze für $T = 0$	81
7.3	Phasengrenze $T > 0$	85
8	Zusammenfassung und Ausblick	87
	Abbildungsverzeichnis	89
	Literaturverzeichnis	93
	Danksagung	95

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Historisches und Motivation

Bereits im Jahre 1924 sagten Albert Einstein und Satyendra Nath Bose theoretisch die Existenz der Bose-Einstein-Kondensation, die makroskopische Besetzung des quantenmechanischen Grundzustandes durch Bosonen, voraus. Aber erst moderne Kühltechniken wie Laserkühlung und evaporative Kühlung ermöglichten deren Realisierung. So gelang es Eric Cornell und Carl Wieman 1995 in Boulder, Colorado, die Herstellung des ersten Bose-Einstein-Kondensats (BEC) mit Rubidium-87-Atomen [1]. Kurz darauf schaffte es Wolfgang Ketterle am MIT, ein Bose-Einstein-Kondensat mit Natrium-23 herzustellen [2]. Dafür erhielten sie 2001 gemeinsam den Nobelpreis für Physik. Nach diesen ersten Erfolgen entwickelte sich schnell ein breites Gebiet der Physik, das sich sowohl experimentell als auch theoretisch mit der Bose-Einstein-Kondensation befasst. So wurden anschließend BECs mit den Isotopen He-4, Li-7, K-41, Cr-52, Rb-85, Cs-133 und Yb-174 erzeugt.

Neben der Erzeugung einfacher Kondensate wurde auch eine Vielzahl von Experimenten durchgeführt, bei der die Kondensate zusätzliche Eigenschaften aufweisen. So wurden zum Beispiel Spinorkondensate erzeugt, in denen die Bosonen nicht alle den selben Hyperfeinzustand besetzen [3], oder Bose-Fermi-Mischungen, bei denen fermionische Atome zugegeben werden [4]. Ein weiteres dieser Gebiete ist das der optischen Gitter. Hierbei wird das Verhalten des Kondensates in einem von stehenden Laserwellen erzeugten periodischen Potential beobachtet. Nachdem die Eigenschaften dieses Systems theoretisch vorhergesagt wurden [5,6], wurde es im Jahr 2002 erstmalig experimentell in der Arbeitsgruppe von Theodor W. Hänsch und Immanuel Bloch am MPI für Quantenoptik in Garching beobachtet [7].

Das besondere an Bosonen im optischen Gitter ist der Quantenphasenübergang, den man beobachten kann. Im Gegensatz zu einem normalen Phasenübergang, der aufgrund thermischer Fluktuationen stattfindet, sind bei einem Quantenphasenübergang quantenmechanische Fluktuationen die Ursache. Kontrolliert wird dieser Übergang durch die Stärke des optischen Gitters. Bei geringen Gittertiefen können sich die Bosonen beinahe ungehindert von einem Gitterplatz zum nächsten bewegen, so dass sich eine Phasenkohärenz zwischen den Gitterplätzen ausbildet. In dieser superfluiden Phase ist das Bose-Gas kompressibel und das Anregungsspektrum ist kontinuierlich. Erhöht man nun die Gittertiefe über einen kritischen Wert, so kommt man in die sogenannte Mott-Phase. Hier befindet sich jedes Teilchen an einem definierten Gitterplatz. Die Kompressibilität verschwindet und es entsteht eine Energielücke zur ersten Anregung.

Auch im optischen Gitter kann man Bose-Fermi-Mischungen herstellen. Dies wurde erst kürzlich von der Arbeitsgruppe Sengstock in Hamburg [8] und der Arbeitsgruppe Esslinger in Zürich [9] geschafft. Aktuell arbeitet man in Hamburg auch an der Realisierung von einem Spinor-BEC im Dreiecksgitter, wo man das Auftreten von Frustrationseffekten erwartet. Zum Spinor-BEC im Gitter gibt es bereits erste theoretische Betrachtungen im kubischen Gitter [10], aber wir wollen dieses System in dieser Diplomarbeit nicht weiter betrachten.

1.2 Experimentelle Realisierung

Die Voraussetzung zur Beobachtung einer Bose-Einstein-Kondensation ist ein stark verdünntes Gas von Bosonen der Masse m , das auf Temperaturen im Nanokelvinbereich heruntergekühlt wird. Diese Temperaturen erreicht man durch eine Kombination von Laserkühlung und erzwungener Verdampfungskühlung. Dazu werden die Bosonen in der optischen Molasse vorgekühlt und anschließend in die Falle transferiert, wo sie bis zur Kondensation weitergekühlt werden. Anschließend wird dann das optische Gitter eingeschaltet.

Das kubische optische Gitter besteht aus drei Paaren gegenläufiger rechtwinklig zueinander stehender Laser, wobei jedes Laserpaar eine stehende Welle erzeugt. Aufgrund des Stark-Effektes wirken diese stehenden Lichtwellen auf die Bosonen als ein Potential, das die Form eines dreidimensionalen kubischen Gitters, dargestellt in Abbildung 1.1, hat:

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^3 V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x_j\right) \quad . \quad (1.1)$$

Ein zweidimensionales Bild dieses Potential findet sich in Abbildung 1.2. Dabei stellt V_0 die Stärke des Laserpotentials dar, die über die Laserintensität beliebig verändert werden kann, und $a = \lambda/2$ ist der Gitterabstand, der durch die Wellenlänge des Laserlichtes λ festgelegt ist. Mit diesen Größen lässt sich die Rückstoßenergie

$$E_R = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2a^2 m} \quad (1.2)$$

definieren, die die Energieskala des Systems vorgibt. Neben dem dreidimensionalen kubischen Gitter werden auch Aufbauten mit ein- [11,12] und zweidimensionales Gittern, die man durch Einsatz von einem bzw. zwei Laserpaaren erhält, verwendet. Diese niederdimensionalen Experimente werden aber in dieser Diplomarbeit nur eine untergeordnete Rolle spielen.

Zusätzlich wird eine Magnetfalle der Frequenz ω_m eingesetzt. Diese führt zu einem zusätzlichen harmonischen Potential, das effektiv ein Verschieben der Potentialtöpfe bewirkt. Die Potentialtöpfe in der Mitte werden dadurch energetisch günstiger als diejenigen, die sich weiter außen befinden, was die Bosonen im Fallenmittelpunkt zusammenhält. Aufgrund der Tatsache, dass die Laserstrahlen nicht homogen sind, sondern eine gaussförmige Intensitätsverteilung mit der Halbwertbreite w besitzen, ist die Potentialstärke V_0 nicht für alle Gitterplätze gleich, sondern ist am Mittelpunkt stärker. Da dies denselben Effekt hat wie die Magnetfalle, können wir beide Einflüsse zusammenfassen und sie durch eine effektive Fallenfrequenz beschreiben [13]:

$$\omega \approx \sqrt{\omega_m^2 + \frac{8V_0 - 4E_R \sqrt{V_0/E_R}}{mw^2}} \quad . \quad (1.3)$$

Zur Beurteilung der experimentellen Situation ist es unerlässlich die effektive Fallenfrequenz zu kennen, die in der Eichkurve in Abbildung 1.3 graphisch dargestellt ist. Wir werden aber der Einfachheit halber fast im gesamten Verlauf dieser Diplomarbeit hauptsächlich das homogene Gitter betrachten und nur kurz auf durch die harmonische Falle bedingten Effekte eingehen.

Das Kondensat selber ist im optischen Gitter so klein, dass es nicht direkt beobachtet werden kann. Daher schaltet man Falle und optisches Gitter ab und fotografiert die expandierende Wolke von Teilchen nach einer bestimmten Zeit. Dabei erhält man Bilder, wie sie in Abbildung 1.4 zu sehen sind, die die Dichteverteilung der Bosonen darstellt. Diese Dichteverteilungen hängen direkt mit der Impulsverteilung der Bosonen vor dem Ausschalten zusammen. Auf ihnen kann man erkennen, dass wir uns bei geringen Gittertiefen in der superfluiden Phase befinden, wo die makroskopische Besetzung des Grundzustandes zu scharfen Peaks führt. Hier ist nämlich aufgrund der geringen Gittertiefe die Ortverteilung der Bosonen über die gesamte harmonische Falle verschmiert. Die Impulsunschärfe ist nach

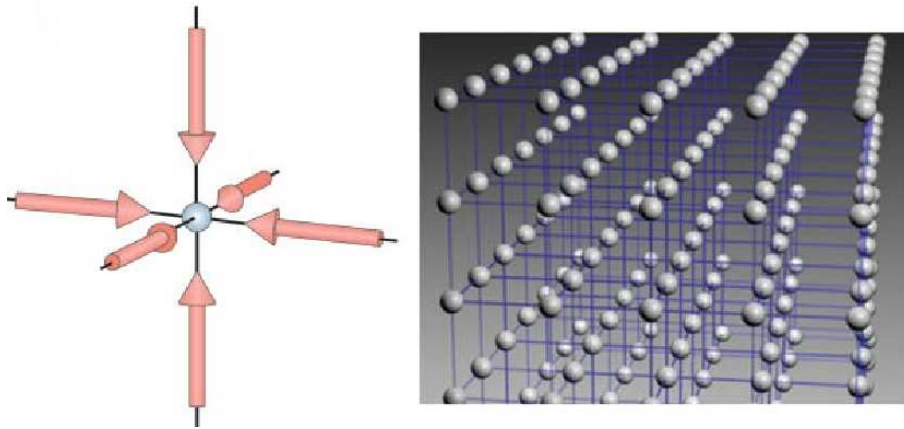


Abbildung 1.1: Formaler Aufbau des dreidimensionalen kubischen Gitters.

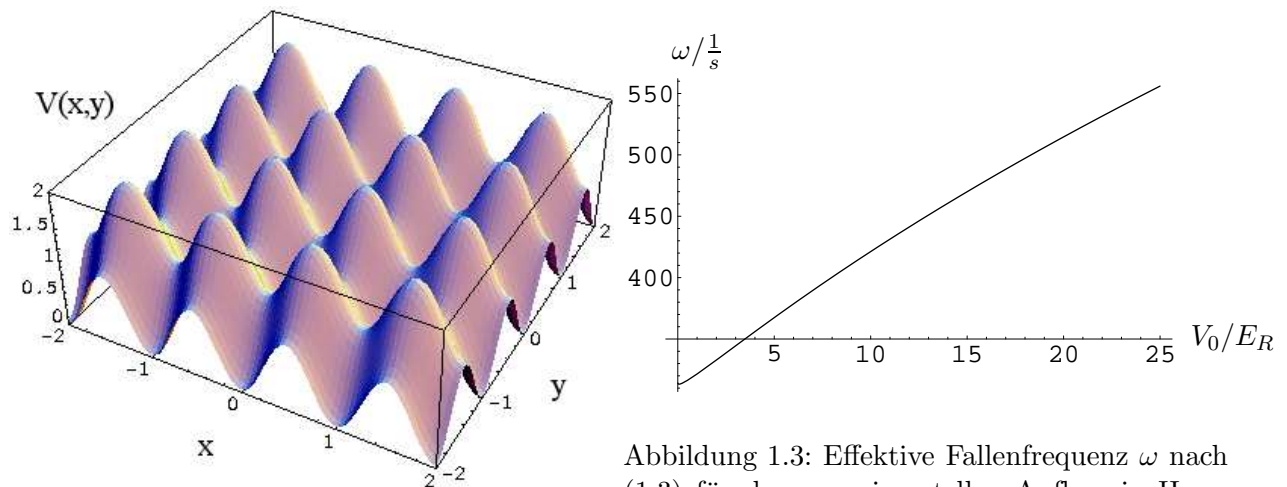


Abbildung 1.3: Effektive Fallenfrequenz ω nach (1.3) für den experimentellen Aufbau in Hamburg (siehe Ende von Abschnitt 1.2).

Abbildung 1.2: Potential des Optischen Gitters.

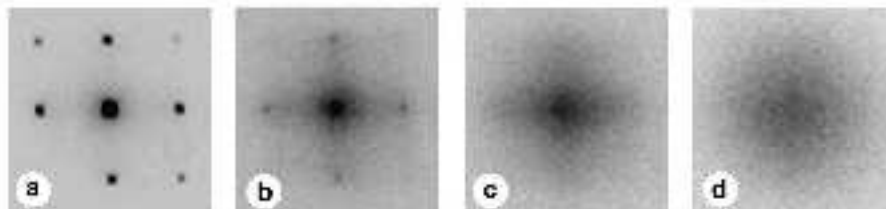


Abbildung 1.4: Time-of-Flight Bilder von einem Experiment der Bloch-Gruppe [14] für verschiedene Gittertiefen V_0 : (a) $8 E_R$, (b) $14 E_R$, (c) $16 E_R$ und (d) $30 E_R$.

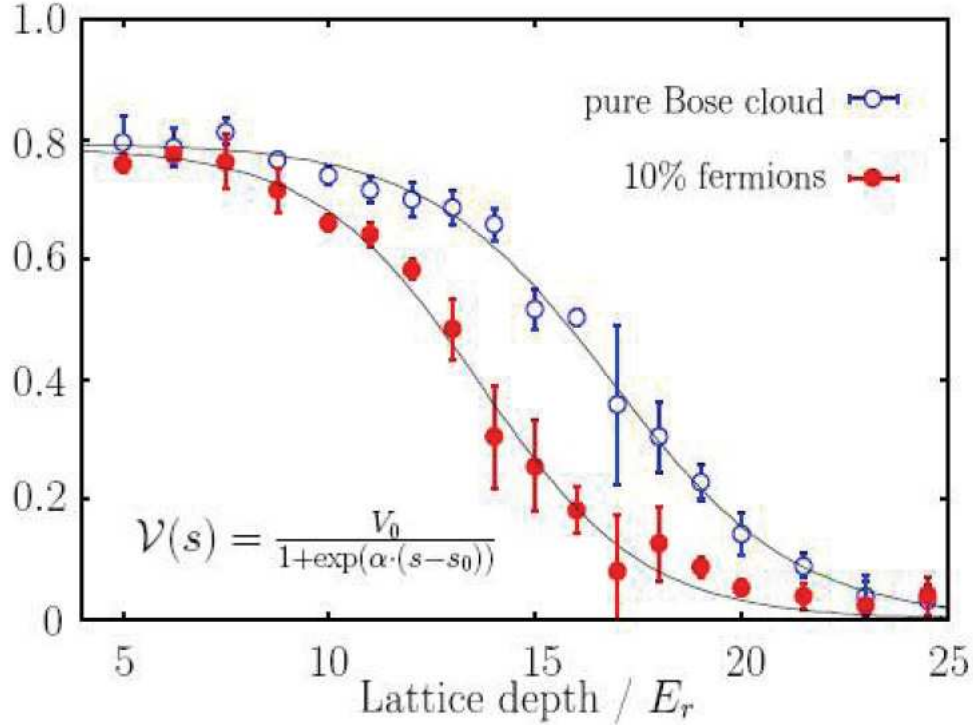


Abbildung 1.5: Visibilität in Abhängigkeit von der Laserintensität. Messung der Sengstock-Gruppe in Hamburg.

der Heisenbergrelation folglich klein, genauso wie die Ortsverteilung im Time-of-Flight Bild. Diese Peaks verschwinden beim Hochfahren der Laserintensität V_0 , bis wir uns in der Mott-Phase befinden. Hier sind die Bosonen in den tiefen Potentialtöpfen des Gitters lokalisiert. Diese Lokalisierung im Ortsraum führt zu einer großen Impulsunschärfe, wodurch wir in der Aufnahme nur eine statistische Verteilung sehen. Wir können also an der Ausprägtheit der Peaks erkennen, in welcher Phase wir uns befinden. Daher definieren wir mit der Visibilität eine Größe

$$\mathcal{V} = \frac{n_{\max} - n_{\min}}{n_{\max} + n_{\min}}, \quad (1.4)$$

die diese Eigenschaft misst [14,15]. Dabei messen wir die Teilchendichte am ersten Nebenmaximum n_{\max} und suchen dann das Minimum n_{\min} auf einem Kreis um das Hauptmaximum mit dem Abstand des Nebenmaximums als Radius.

Sollten wir im Verlauf dieser Diplomarbeit explizite Zahlenwerte benötigen, so werden wir die der Sengstock-Gruppe aus Hamburg verwenden [8]. Dort werden Laser der Wellenlänge $\lambda = 1030 \text{ nm}$ mit einer Halbwertsbreite von $w = 92 \text{ }\mu\text{m}$ verwendet. Diese erzeugen ein kubisches Gitter mit Gitterabstand $a = 515 \cdot 10^{-9} \text{ m}$. Als Bosonen wurden Rubidiumatome mit einer Masse von $m_B = 87 u$ verwendet. Ihre s-Wellenstreuungslänge, die die Wahrscheinlichkeit für einen Stoß zweier Bosonen miteinander beschreibt, beträgt $a_{\text{BB}} = 99 a_0$ (mit dem Bohrradius $a_0 = 5.392 \cdot 10^{-11} \text{ m}$). Die Magnetfalle besitzt eine Frequenz von $\omega_m = 2\pi \times 50 \text{ Hz}$. Die Rückstossenergie für diesen Aufbau beträgt $E_R = 1.43 \cdot 10^{-30} \text{ J}$. Für Bose-Fermi-Mischungen werden Kaliumatome ($m_F = 40 u$) als Fermionen verwendet. Die Streulänge zwischen diesen beiden Atomsorten beträgt $a_{\text{BF}} = -205 a_0$.

Desweiteren werden wir Messdaten der Sengstock-Gruppe verwenden, die uns freundlicherweise von Kai Bongs zur Verfügung gestellt wurden. Dabei handelt es sich um Visibilitätsmessungen sowohl für reine Bosonen als auch für Bose-Fermi-Mischungen zu verschiedenen Laserstärken, die in Abbildung 1.5 zu sehen sind.

1.3 Überblick

Alle Experimente werden trotz des großen Kühlaufwandes aus thermodynamischen Gründen bei einer endlichen Temperatur durchgeführt. Die theoretischen Betrachtungen hingegen beschränken sich im Allgemeinen auf den Fall $T = 0$. Lediglich wenige jüngere Veröffentlichungen beziehen Rechnungen bei endlichen Temperaturen ein [16–18]. In der vorliegenden Arbeit werden wir uns daher ausgiebig mit der Betrachtung des Temperatureinflusses beschäftigen. Insbesondere im Hinblick darauf, dass im Gegensatz zum normalen BEC für Kondensate im Gitter bisher keine Möglichkeit bekannt ist, die Temperatur zu messen. Die thermische Wolke, die wir beim normalen BEC zum Bestimmen der Temperatur benutzen, ist im optischen Gitter durch die breite Wolke der Mott-Phase überlagert und daher nicht messbar. Dabei werden wir uns bei dem Versuch, ein geeignetes Thermometer für Bosonen im optischen Gitter zu finden, auf die Visibilität als einfach zugängliche Messgröße konzentrieren.

In Kapitel 2 beschäftigen wir uns mit der Herleitung des Bose-Hubbard-Modells, das für die Beschreibung von Bosonen im optischen Gitter von grundlegender Bedeutung ist. Dabei verwenden wir verschiedene Konzepte der Festkörperphysik, da wir genauso wie die Festkörperphysiker ein periodisches Problem vorliegen haben. Besonderes Augenmerk werden wir bei der Herleitung auf die Parameter des Bose-Hubbard-Modells legen, da sie bei der Charakterisierung des Systems eine wichtige Rolle spielen. In Kapitel 3 werden wir die Lage des Quantenphasenübergangs im Rahmen der Landau-Theorie berechnen. Dazu benutzen wir den Molekularfeldansatz, der ursprünglich von Weiss zur Beschreibung des Ferromagnetismus eingeführt wurde [19]. Wir werden zuerst das bereits in der Literatur bekannte Resultat für $T = 0$ herleiten und dieses dann für endliche Temperaturen verallgemeinern.

Anschließend werden wir uns in Kapitel 4 mit dem Einfluss einer zusätzlichen harmonischen Falle beschäftigen, da wir damit einen besseren Zugang zu der experimentellen Situation erhalten.

In Kapitel 5 werden wir versuchen den Molekularfeldansatz aus Kapitel 3 zu verbessern und Quantenkorrekturen zur Molekularfeldtheorie auszurechnen. Dabei wählen wir einen Zugang, der mit der Variationsstörungstheorie [20,21] verwandt ist.

Danach wenden wir uns in Kapitel 6 der Visibilität zu, da sie die in den meisten Experimenten beobachtete Messgröße ist. Zuerst werden wir ein Ergebnis der Molekularfeldtheorie betrachten. Dabei werden wir feststellen, dass diese konzeptionell nicht dafür geeignet ist, die benötigte Korrelationsfunktion zu berechnen. Daher erfüllt unser Ergebnis nicht ausreichend unsere Erwartungen und wir werden einen neuen Ansatz wählen, um die Visibilität in der Mott-Phase mit der Starkkopplungstheorie [22,23] zu berechnen. Für die superfluide Phase stellen wir eine separate Betrachtung an.

Schlussendlich werfen wir in Kapitel 7 noch einen Blick auf die Bose-Fermi-Mischungen. Hier sind wir an der Phasengrenze sowohl für $T = 0$ als auch für endliche Temperaturen interessiert.

Kapitel 2

Bosonen im optischen Gitter

2.1 Bose-Hubbard-Modell

Ein verdünntes bosonisches Gas in einem optischen Gitter wird durch das Bose-Hubbard-Modell [5–7] beschrieben:

$$\hat{H}_{\text{BHM}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i - \mu \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad , \quad (2.1)$$

wobei die Indizes i, j die Gitterplätze durchnummerieren und die Summe $\langle i, j \rangle$ nur über die Paare nächster Nachbarn läuft.

Der Parameter J im ersten Term wird Hopping-Energie genannt. Sie beschreibt den Energiegewinn durch Tunneln von einem Gitterplatz zum nächsten. Im zweiten Term tritt die Onsite-Energie U auf. Sie charakterisiert die Wechselwirkung zwischen zwei Teilchen eines Gitterplatzes miteinander. Ferner sind \hat{a}_i^\dagger und \hat{a}_i die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Bosonen am Gitterplatz i , die die bekannten Kommutatorrelationen für Bosonen erfüllen [24,25]:

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j] = \delta_{ij} \quad , \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0 \quad , \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = 0 \quad . \quad (2.2)$$

Desweiteren definiert $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ den Teilchenzahloperator am Gitterplatz i , dessen Eigenzustände $|n_i\rangle$ die Eigenschaften

$$\hat{n}_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle \quad , \quad (2.3a)$$

$$\hat{a}_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle \quad , \quad (2.3b)$$

$$\hat{a}_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle \quad (2.3c)$$

besitzen.

2.2 Herleitung des Bose-Hubbard-Modells

Bevor wir uns aber an die Arbeit machen, das durch (2.1) beschriebene Bose-Hubbard-Modell zu behandeln, sollten wir einen Schritt zurück gehen und es herleiten. Hierzu gehen wir vom allgemeinen Hamiltonoperator für Bosonen in der zweiten Quantisierung aus:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{H}_{\text{frei}} \hat{\psi}(\mathbf{x}) \\ &+ \frac{1}{2} \iint d^3x_1 d^3x_2 \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}_2) V_{\text{int}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{\psi}(\mathbf{x}_1) \hat{\psi}(\mathbf{x}_2) \quad , \end{aligned} \quad (2.4)$$

wobei

$$\hat{H}_{\text{frei}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) - \mu' \quad (2.5)$$

den Einteilchen-Hamiltonoperator und μ' das chemischen Potential bezeichnet. Für die bosonischen Feldoperatoren $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})$ und $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ gelten die Vertauchungsrelationen

$$[\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x}')] = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}')] = 0, \quad [\hat{\psi}(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x}')] = 0 \quad . \quad (2.6)$$

Wir vernachlässigen in (2.4) wegen der geringen Dichte Wechselwirkungen zwischen drei und mehr Teilchen und nehmen für das Wechselwirkungspotential eine Kontaktwechselwirkung an:

$$V_{\text{int}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{4\pi a_{\text{BB}}\hbar^2}{m}\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) \quad . \quad (2.7)$$

Somit vereinfacht sich der Wechselwirkungsbeitrag in (2.4) und wir erhalten

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) - \mu' \right] \hat{\psi}(\mathbf{x}) + \frac{2\pi a_{\text{BB}}\hbar^2}{m} \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x})\hat{\psi}(\mathbf{x}) \quad . \quad (2.8)$$

Vorerst wollen wir uns der Einfachheits halber auf ein homogenes System beschränken und berücksichtigen als externes Potential lediglich das optische Gitter (1.1). Aus der Festkörperphysik wissen wir, dass wir als Lösung bei periodischen Potentialen eine Reihe von Energiebändern zu erwarten haben [26,27]. Wegen der geringen Temperatur können wir annehmen, dass alle Bosonen im untersten Band sitzen. Daher entwickeln wir nun die Feldoperatoren nach den Wannier-Zuständen des untersten Bandes:

$$\hat{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{a}_i w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad , \quad \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{a}_i^\dagger w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad . \quad (2.9)$$

Die Wannier-Funktionen $w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ sind orthonormal

$$\int d^3x w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = \delta_{ij} \quad (2.10)$$

und vollständig

$$\sum_i w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)w(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.11)$$

und bilden daher eine Basis. Sie sind am Ort \mathbf{x}_i lokalisiert und ihre Form hängt vom zugrunde liegenden periodischen Gitter ab. Sie sind aber keine Eigenzustände des Hamiltonians (2.5). Eine genauere Betrachtung der Wannier-Funktionen und ihre konkrete Berechnung erfolgt in Abschnitt 2.3.

Mit der Entwicklung (2.9) geht (2.8) über in:

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_{i,j} \int d^3x \hat{a}_i^\dagger w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) - \mu' \right] \hat{a}_j w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \frac{4\pi a_{\text{BB}}\hbar^2}{m} \int d^3x \hat{a}_i^\dagger w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \hat{a}_j^\dagger w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \hat{a}_k w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) \hat{a}_l w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_l) \quad . \end{aligned} \quad (2.12)$$

Da die Wannier-Funktionen stark an einem Gitterplatz lokalisiert sind, können wir alle Hopping-Terme von Teilchen, die nicht auf benachbarten Gitterplätzen sind, und alle Kontaktwechselwirkungen von Teilchen verschiedener Plätze vernachlässigen. Damit erhalten wir den großkanonischen Bose-Hubbard-Hamiltonoperator:

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i + (\epsilon - \mu') \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad , \quad (2.13)$$

wobei die darin auftretenden Parameter sich aus den Wannier-Funktionen gemäß

$$J = J(i, j) = - \int d^3x w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right] w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \quad (2.14)$$

$$U = U(i) = \frac{4\pi a_{\text{BB}} \hbar^2}{m} \int d^3x |w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)|^4 \quad (2.15)$$

$$\epsilon = \epsilon(i) = \int d^3x w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right] w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad (2.16)$$

ergeben. Dabei sind alle Koeffizienten wegen der Translationsinvarianz im Gitter ortsunabhängig. Um die Eigenenergie ϵ zu eliminieren, führen wir jetzt das effektive chemische Potential $\mu = \mu' - \epsilon$ ein und erhalten damit (2.1).

2.3 Wannier-Funktionen und Wechselwirkungskoeffizienten

Zur expliziten Berechnung der Wechselwirkungskoeffizienten brauchen wir zunächst einmal die Wannier-Funktionen, die aus der Festkörperphysik stammen [26–28]. Wannier-Funktionen werden analog zu Wellenpaketen gebildet. Nur verwenden wir anstatt ebener Wellen die Eigenfunktionen $\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ der Einteilchen-Schrödinger-Gleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_0 \sum_{j=1}^3 \sin^2 \left(\frac{\pi}{a} x_j \right) \right] \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = E_n(\mathbf{k}) \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (2.17)$$

Da uns nur das unterste Band interessiert, setzen wir $n = 0$ und berechnen die Wannier-Funktionen dieses Bandes gemäß

$$w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = N_S^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}_i} \phi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \quad (2.18)$$

wobei die Summe nur über die erste Brillouin-Zone läuft und N_S die Zahl der Gitterplätze bezeichnet. Mit dieser Definition können wir leicht die geforderten Bedingungen der Orthonormierung (2.10) und der Vollständigkeit (2.11) beweisen. Aus

$$\int d^3x w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = \frac{1}{N_S} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_i - i\mathbf{k}'\mathbf{x}_j} \int d^3x \phi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \phi_{0,\mathbf{k}'}(\mathbf{x}) \quad (2.19)$$

folgt unter Benutzung der Orthonormalität der Eigenfunktionen $\phi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x})$:

$$= \frac{1}{N_S} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_i - i\mathbf{k}'\mathbf{x}_j} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \frac{1}{N_S} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_i - i\mathbf{k}\mathbf{x}_j} \quad (2.20)$$

was beim Ausführen der Summation das Kroneckersymbol δ_{ij} ergibt. Für die Vollständigkeit erhalten wir zunächst analog:

$$\sum_i w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_i) = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{N_S} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}_i - i\mathbf{k}'\mathbf{x}_i} \phi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \phi_{0,\mathbf{k}'}(\mathbf{x}') \quad (2.21)$$

Nun können wir die Summe über die Gitterplätze i ausführen und erhalten eine Diracsche δ -Funktion:

$$= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \phi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \phi_{0,\mathbf{k}'}(\mathbf{x}') = \sum_{\mathbf{k}} \phi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \phi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x}') = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (2.22)$$

da die Eigenfunktionen $\phi_{0,\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ eine Vollständigkeitsbeziehung erfüllen. Weiterhin können wir die geforderten Kommutatorrelationen (2.2) aus den Kommutatorbeziehungen der Bosonen (2.6) herleiten. Dazu benötigen wir die Umkehrung von (2.9), die sich trivialerweise mit (2.10) ergibt zu:

$$\hat{a}_i = \int d^3x \hat{\psi}(\mathbf{x}) w^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad \text{und} \quad \hat{a}_i^\dagger = \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad . \quad (2.23)$$

Damit folgt

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j] = \iint d^3x d^3x' w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) w^*(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j) [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x}')] \quad . \quad (2.24)$$

Verwenden wir nun den Kommutator (2.6) und anschließend die Orthonormalität der Wannier-Funktionen (2.10), so erhalten wir:

$$[\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j] = \delta_{ij} \quad . \quad (2.25)$$

Für die anderen beiden Kommutatoren gelten analoge Überlegungen.

2.3.1 Kettenbruchdarstellung

Versuchen wir erst einmal das Problem (2.17) direkt zu lösen. Die Gleichung (2.17) lässt sich durch den Separationsansatz $\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \prod_{i=1}^3 \phi_{n,k_i}(x_i)$ lösen. Damit ergibt sich die eindimensionale Schrödinger-Gleichung:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2 \left(\frac{\pi}{a} x \right) \right] \phi_{n,k}(x) = E_n(k) \phi_{n,k}(x) \quad . \quad (2.26)$$

Damit separieren auch die Wannier-Funktionen nach

$$w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \prod_{r=x,y,z} w(r - r_i) \quad (2.27)$$

und (2.18) geht über in:

$$w(x - x_i) = N_S^{-1/2} \sum_k e^{-ikx_i} \phi_{0,k}(x) \quad , \quad (2.28)$$

wobei wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit lediglich die x -Richtung betrachten. Wir führen die Variablentransformation

$$\frac{\pi}{a} x = x', \quad \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\pi}{a} \frac{\partial}{\partial x'} \quad (2.29)$$

durch und verwenden die trigonometrische Beziehung

$$\sin^2 \alpha = \frac{1}{2} (1 - \cos 2\alpha) \quad . \quad (2.30)$$

Desweiteren definieren wir den Wellenvektor des optischen Gitters, der die Größe der Brillouin-Zone charakterisiert, durch $k_L = \pi/a$. Damit geht (2.26) über in:

$$\left[-\frac{\hbar^2 k_L^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{V_0}{2} (1 - \cos 2x') \right] \phi_{n,k}(x') = E_n(k) \phi_{n,k}(x') \quad . \quad (2.31)$$

Wir benutzen die bereits in Abschnitt 1.2 definierte Rückstoßenergie E_R und verwenden die abkürzenden Schreibweisen

$$E_R = \frac{\hbar^2 k_L^2}{2m}, \quad \tilde{V}_0 = \frac{V_0}{E_R}, \quad \tilde{E}(k) = \frac{E(k)}{E_R} \quad , \quad (2.32)$$

womit wir die dimensionslose Schrödinger-Gleichung erhalten:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\tilde{V}_0}{2} (1 - \cos 2x') \right] \phi_{n,k}(x') = \tilde{E}_n(k) \phi_{n,k}(x') \quad . \quad (2.33)$$

Sie entspricht einer Mathieu'schen Differentialgleichung, die auch bei der erzwungenen Schwingung auftritt [29]. In der klassischen Theorie versucht man, das Stabilitätsdiagramm bei bekannten Koeffizienten zu berechnen. Wir hingegen wollen die unbestimmten Energie ausrechnen und benutzen, dass das Potential in (2.33) periodisch ist. Daher können wir das Bloch-Theorem verwenden [26,27]:

$$\phi_{0,k}(x') = e^{ikx'} u_k(x') \quad , \quad (2.34)$$

wobei die Bloch-Funktionen $u_k(x')$ die Periodizität des Gitters besitzen: $u_k(x') = u_k(x' + 1)$. Damit geht (2.33) über in:

$$\left[k^2 - 2ik \frac{\partial}{\partial x'} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\tilde{V}_0}{2} (1 - \cos 2x') \right] u_k(x') = \tilde{E}_n(k) u_k(x') \quad . \quad (2.35)$$

Für die Bloch-Funktion $u_k(x)$ können wir aufgrund ihrer Periodizität einen Fourierreihenansatz machen:

$$u_k(x') = \sum_{l=-\infty}^{\infty} A_l e^{2ilx'} \quad , \quad (2.36)$$

der eingesetzt in (2.35) die Bestimmungsgleichung für die Fourierkoeffizienten liefert:

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} \left[\tilde{E}_n(k) - k^2 - 4kl - 4l^2 - \frac{\tilde{V}_0}{2} + \frac{\tilde{V}_0}{4} (e^{2ix'} + e^{-2ix'}) \right] A_l e^{2ilx'} = 0 \quad . \quad (2.37)$$

Umsummieren führt zu

$$\sum_{l=-\infty}^{\infty} \left\{ \left[\tilde{E}_n(k) - \frac{\tilde{V}_0}{2} - (k + 2l)^2 \right] A_l + \frac{\tilde{V}_0}{4} (A_{l+1} + A_{l-1}) \right\} e^{2ilx'} = 0 \quad , \quad (2.38)$$

das sich mit der Abkürzung

$$F(l) = \frac{\tilde{V}_0}{4[\tilde{E}_n(k) - \tilde{V}_0/2 - (k + 2l)^2]} \quad (2.39)$$

und der Verwendung der linearen Unabhängigkeit der Exponentialfunktionen zu einem homogenen linearen Gleichungssystem umformen lässt:

$$F(l)A_{l+1} + A_l + F(l)A_{l-1} = 0; \quad l = \dots, -1, 0, 1, \dots \quad . \quad (2.40a)$$

In Matrixform erhält man eine tridiagonale Bandmatrix:

$$\left(\begin{array}{cccccccc} \ddots & & & & & & & \\ F(-2) & 1 & F(-2) & & & & & \\ & F(-1) & 1 & F(-1) & & & & \\ & & F(0) & 1 & F(0) & & & \\ & & & F(1) & 1 & F(1) & & \\ & & 0 & & F(2) & 1 & F(2) & \\ & & & & & & \ddots & \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \vdots \\ A_{-2} \\ A_{-1} \\ A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ \vdots \end{array} \right) = 0 \quad . \quad (2.40b)$$

Nun lösen wir (2.40a), indem wir die Aufsteigeoperatoren

$$S_l := \frac{A_{l+1}}{A_l} \quad (2.41)$$

einführen. Damit reduziert sich (2.40a) zu:

$$F(l)S_l + 1 + \frac{F(l)}{S_{l-1}} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad S_{l-1} = -\frac{F(l)}{1 + F(l)S_l} \quad . \quad (2.42)$$

Durch Verschieben des Indexes l können wir eine Iteration durchführen, und wir erhalten folgenden Kettenbruch:

$$S_l = -\frac{F(l+1)}{1 + F(l+1)S_{l+1}} = -\frac{F(l+1)}{1 - F(l+1)\frac{F(l+2)}{1 + F(l+2)S_{l+2}}} = \dots \quad . \quad (2.43)$$

Mit einer analogen Iteration erhalten wir einen weiteren Kettenbruch für A_{l-1}/A_l . Wählen wir für beide Kettenbrüche als Startpunkt $l = 0$, so ergibt sich (2.40a) zu:

$$-\frac{F(1)}{1 - F(1)\frac{F(2)}{1 - F(2)\frac{F(3)}{1 - \dots}}} + 1 - \frac{F(-1)}{1 - F(-1)\frac{F(-2)}{1 - F(-2)\frac{F(-3)}{1 - \dots}}} = 0 \quad . \quad (2.44)$$

Es ist unmöglich, aus dieser Gleichung einen analytischen Ausdruck für die Energieeigenwerte zu bestimmen. Daher müssen wir einen anderen Weg zur Bestimmung der Wannier-Funktionen wählen. Eine Möglichkeit wäre es, durch die Wahl einer geeigneten Näherung ein analytisch lösbares Problem zu erzeugen und eine andere wäre eine numerische Lösung von (2.40a) zu finden. Wir werden beide Ansätze verfolgen und die Ergebnisse miteinander vergleichen.

2.3.2 Harmonische Näherung

Beginnen wir mit der Näherung, wie sie auch in der Referenz [30] verwendet wurde. Unser Potential (1.1) besteht aus einer Reihe von Potentialtöpfen. Folglich können wir annehmen, dass sich für tiefe Potentialtöpfe, d.h. große V_0 , unser Hamiltonoperator durch eine Reihe identischer Hamiltonoperatoren, die das Verhalten in einem Potentialtopf beschreiben, annähern lässt. Dieser Einzelplatz-Hamiltonoperator liefern uns an jedem Gitterplatz lokalisierte Wellenfunktionen, deren Überlagerung die totale Wellenfunktion liefert. Dies sind aber auch genau die Eigenschaften der Wannier-Funktionen und wir nehmen daher an, dass die Einzelplatz-Wellenfunktionen die gesuchten Wannier-Funktionen annähern. Um die Einzelplatz-Wellenfunktionen zu bestimmen, nähern wir nun das Gitter an einem Minimum harmonisch. Damit erhalten wir aus der eindimensionalen Schrödinger-Gleichung (2.26):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 k_L^2 x^2 \right] w(x) = E w(x) \quad . \quad (2.45)$$

Wir lösen sich diese Differentialgleichung mit dem Ansatz:

$$w(x) = C \exp\left(-\frac{b}{2}x^2\right) \quad . \quad (2.46)$$

Einsetzen in (2.45) liefert

$$b = \frac{\sqrt{2mV_0}k_L}{\hbar}$$

und aus der Forderung nach Normierung folgt die Konstante C zu:

$$C = \sqrt[4]{2V_0m} \sqrt{\frac{k_L}{\hbar\pi}} \quad (2.47)$$

unter Benutzung des Gaußschen Integrals

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-Ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{A}} \quad . \quad (2.48)$$

Damit ergibt sich die eindimensionale Wannier-Funktion in harmonischer Näherung zu:

$$w(x) = \sqrt[8]{2V_0 m} \sqrt[4]{\frac{k_L}{\hbar\pi}} \exp\left[-\frac{\sqrt{2V_0 m} k_L}{2\hbar} x^2\right] = \sqrt[8]{\tilde{V}_0} \sqrt[4]{\frac{\pi}{a^2}} \exp\left[-\frac{\pi^2}{2} \sqrt{\tilde{V}_0} \left(\frac{x}{a}\right)^2\right] \quad . \quad (2.49)$$

Mit dieser harmonischen Näherung der Wannier-Funktionen können wir die Wechselwirkungskoeffizienten berechnen. Beginnen wir mit der Onsite-Energie [31]. Aus (2.15) folgt nach der Separation der Raumdimensionen:

$$U = \frac{4\pi a_{\text{BB}} \hbar^2}{m} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx |w(x - x_i)|^4 \right]^3 \quad . \quad (2.50)$$

Nach Einsetzen von (2.49) folgt:

$$U = \frac{4\pi a_{\text{BB}} \hbar^2}{m} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\tilde{V}_0} \frac{\pi}{a^2} \exp\left[-2\pi^2 \sqrt{\tilde{V}_0} \left(\frac{x}{a}\right)^2\right] \right\}^3 \quad , \quad (2.51)$$

das sich nach erneuter Verwendung des Gaußsches Integral (2.48) ergibt zu:

$$U = \frac{4\pi a_{\text{BB}} \hbar^2}{m} \left[\sqrt[4]{\tilde{V}_0} \frac{\sqrt{\pi}}{a\sqrt{2}} \right]^3 = \sqrt{8\pi} E_R \frac{a_{\text{BB}}}{a} \tilde{V}_0^{3/4} \quad . \quad (2.52)$$

In der gesamten Diplomarbeit werden wir uns zwar lediglich mit einem dreidimensionalen Gitter beschäftigen. Aber da wir später in diesem Kapitel den Fehler der harmonischen Näherung genauer analysieren wollen, brauchen wir auch die Lösungen des ein- und zweidimensionalen Gitters, da wir aus der Dimensionsabhängigkeit auf die Struktur des Fehlers schließen können. Daher werden wir auch die Onsite-Energien für ein- und zweidimensionale Gitter berechnen.

Diese ergeben sich völlig analog zu der Onsite-Energien in drei Dimensionen. In einem zweidimensionalen Gitter haben wir anstatt der Gitterpunkte ein Gitter aus langen Stangen in z -Richtung, deren Länge L beispielsweise durch eine äußere harmonische Falle begrenzt wird. Wir rechnen aber im homogenen System und nehmen daher an, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit nicht von der z -Komponente abhängt. Aufgrund der Normierung erhalten wir dann als Ersatz für die Wannier-Funktion $w(z) = 1/\sqrt{L}$. Aus Dimensionsgründen setzen wir in den Endformeln $L = a$. So erhalten wir:

$$U_{2\text{D}} = \frac{4\pi a_{\text{BB}} \hbar^2}{m} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx |w(x - x_i)|^4 \right]^2 \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \frac{1}{L^2} \quad , \quad (2.53)$$

was nach Einsetzen der Wannier-Funktion aus (2.49) auf folgendes Ergebnis führt:

$$U_{2\text{D}} = 4E_R \frac{a_{\text{BB}}}{a} \sqrt{\tilde{V}_0} \quad . \quad (2.54)$$

In einem eindimensionalen Gitter hingegen haben wir eine Anordnung von Ebenen, die in einer harmonischen Falle wegen der runden Form Pfannkuchen genannt werden. Deren Onsite-Energie geben

sich zu:

$$U_{1D} = \frac{4\pi a_{\text{BB}} \hbar^2}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dx |w(x - x_i)|^4 \left[\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} dz \frac{1}{L^2} \right]^2, \quad (2.55)$$

was zu folgendem Ergebnis führt

$$U_{1D} = \frac{\sqrt{32}}{\pi} E_R \frac{a_{\text{BB}}}{a} \sqrt[4]{\tilde{V}_0}. \quad (2.56)$$

Wenden wir uns nun wieder dem dreidimensionalen optischen Gitter zu und berechnen die Hopping-Energie und die Eigenenergie. Da die nächsten Nachbarn immer in einer Raumrichtung liegen, ergeben sich (2.14) und (2.16) nach der Separation zu:

$$J = J_{1D} \epsilon_0^2 - 2\epsilon_{1D} \epsilon_0 j_0, \quad \epsilon = 3\epsilon_{1D} \epsilon_0^2, \quad (2.57)$$

mit den Definitionen

$$J_{1D} = - \int_{-\infty}^{\infty} dx w^*(x - x_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{ext}}(x) \right] w(x - x_j), \quad (2.58a)$$

$$\epsilon_{1D} = \int_{-\infty}^{\infty} dx w^*(x - x_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\text{ext}}(x) \right] w(x - x_i), \quad (2.58b)$$

$$\epsilon_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |w(x - x_i)|^2, \quad (2.58c)$$

$$j_0 = \int_{-\infty}^{\infty} dx w^*(x - x_i) w(x - x_j), \quad (2.58d)$$

da für nächste Nachbarn $x_i - x_j = \pm a$, $y_i - y_j = 0$ und $z_i - z_j = 0$ oder eine entsprechende Vertauschung von x , y und z gilt.

Bevor wir nun die Näherungsformel (2.49) einsetzen, können wir noch die Normierung $\epsilon_0 = 1$ und die Orthogonalität $j_0 = 0$ der exakten Wannier-Funktionen benutzen um das Problem zu vereinfachen. Damit wird (2.57) zu:

$$J = J_{1D}, \quad \epsilon = 3\epsilon_{1D}. \quad (2.59)$$

Damit sind Hopping- und Eigenwechselwirkungsenergie unabhängig von der Dimension im Gegensatz zur Onsite-Energie, deren funktionaler Verlauf stark von der Dimension abhängt.

Zur Berechnung von J_{1D} setzen wir (2.49) in (2.58a) ein und benutzen die Abkürzung $c = \sqrt{2V_0 m} k_L / \hbar$:

$$J_{1D} = - \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{c}{\pi}} e^{-c(x-x_i)^2/2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2(k_L x) \right] e^{-c(x-x_j)^2/2}. \quad (2.60)$$

Die Variablensubstitution $x' = x - x_j$ führt auf:

$$J_{1D} = - \sqrt{\frac{c}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx' e^{-c(x'-x_i+x_j)^2/2} \left[\frac{\hbar^2}{2m} c - \frac{\hbar^2}{2m} c^2 x'^2 + V_0 \sin^2(k_L x') \right] e^{-cx'^2/2}. \quad (2.61)$$

Wir verwenden $x_j - x_i = \pm a$ und führen eine quadratische Ergänzung des Exponenten durch:

$$J_{1D} = -\sqrt{\frac{c}{\pi}} e^{-c\frac{a^2}{4}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{\hbar^2 c}{2m} e^{-c(x'\pm a/2)^2} - \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{\hbar^2 c^2 x'^2}{2m} e^{-c(x'\pm a/2)^2} + \int_{-\infty}^{\infty} dx' V_0 \sin^2(k_L x') e^{-c(x'\pm a/2)^2} \right] . \quad (2.62)$$

Wenn wir diese drei Integrale einzeln lösen, dann ergibt sich nach (2.48) für das erste Integral:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{\hbar^2}{2m} c e^{-c(x'\pm a/2)^2} = \frac{\hbar^2 c}{2m} \sqrt{\frac{\pi}{c}} , \quad (2.63)$$

für das zweite Integral folgt

$$I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \frac{\hbar^2}{2m} c^2 x'^2 e^{-c(x'\pm a/2)^2} = \frac{\hbar^2}{2m} c^2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{c^3}} + \frac{a^2}{4} \sqrt{\frac{\pi}{c}} \right) , \quad (2.64)$$

und für das dritte Integral erhalten wir unter erneuter Verwendung von (2.30):

$$I_3 = \int_{-\infty}^{\infty} dx' V_0 \sin^2(k_L x') e^{-c(x'\pm a/2)^2} = \frac{V_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx' [1 - \cos(2k_L x')] e^{-c(x'\pm a/2)^2} . \quad (2.65)$$

Mit Hilfe von $\cos(2k_L x') = \Re\{e^{i2k_L x'}\}$ erhalten wir ein Integral, das nach quadratischer Ergänzung wieder Gaußsche Form annimmt:

$$I_3 = \frac{V_0}{2} \sqrt{\frac{\pi}{c}} \left(e^{-\frac{\pi^2}{a^2 c}} + 1 \right) . \quad (2.66)$$

Fassen wir dies zusammen, so erhalten wir insgesamt:

$$J = J_{1D} = -e^{-\frac{\pi^2}{4} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}}} \left[\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m a^2} \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{V_0}{E_R}} - \frac{\pi^2 V_0}{4 E_R} \right) + \frac{V_0}{2} \left(e^{-\sqrt{\frac{E_R}{V_0}}} + 1 \right) \right] . \quad (2.67)$$

Für große V_0 ist es gerechtfertigt, die Exponentialfunktion $e^{-\sqrt{\frac{E_R}{V_0}}} \approx 1 - \sqrt{\frac{E_R}{V_0}}$ bis zur ersten Ordnung nach Taylor zu entwickeln:

$$J \approx E_R \left(\frac{\pi^2}{4} - 1 \right) \tilde{V}_0 e^{-\pi^2 \sqrt{\tilde{V}_0}/4} \quad (2.68)$$

Wir führen die zu (2.32) analoge Abkürzung $\tilde{J} = J/E_R$ ein. Damit wird (2.68) in Übereinstimmung mit Referenz [30] zu:

$$\tilde{J} = \left(\frac{\pi^2}{4} - 1 \right) \tilde{V}_0 e^{-\pi^2 \sqrt{\tilde{V}_0}/4} . \quad (2.69)$$

Analog zu der Berechnung von J erhalten wir die Eigenenergie ϵ_{1D} nach (2.58b) als:

$$\epsilon_{1D} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{c}{\pi}} e^{-\frac{c}{2}(x-x_i)^2} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0 \sin^2(k_L x) \right] e^{-\frac{c}{2}(x-x_i)^2} \quad (2.70)$$

\tilde{V}_0	N	O
5	1.00000	$1.14852 \cdot 10^{-6}$
10	1.00000	$1.14848 \cdot 10^{-6}$
15	1.00000	$1.14848 \cdot 10^{-6}$
20	1.00000	$1.14848 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 2.1: Norm und Überlappintegral der numerisch bestimmten Wannier-Funktion für verschiedene Laserstärken \tilde{V}_0 .

Eine explizite Auswertung der Integrale führt auf:

$$\epsilon_{1D} = \frac{c\hbar^2}{4m} + V_0 \frac{\pi^2}{2a^2c} = E_R \sqrt{\tilde{V}_0} \quad . \quad (2.71)$$

Mit (2.59) und $\tilde{\epsilon} = \epsilon/E_R$ ergibt sich dann die Eigenenergie in drei Dimensionen zu:

$$\tilde{\epsilon} = 3\sqrt{\tilde{V}_0} \quad . \quad (2.72)$$

2.3.3 Numerische Berechnung

Aus (2.38) können wir mit $G(l) = (k + 2l)^2 + \tilde{V}_0/2$ die zu (2.40b) analoge Matrixdarstellung

$$\begin{pmatrix} \ddots & & & & & & & & & & & \\ & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & G(-2) & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & & & & & & & & \\ & & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & G(-1) & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & & & & & & & \\ & & & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & G(0) & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & & & & & & \\ & & & & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & G(1) & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & & & & & \\ & & & & & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & G(2) & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & & & & \\ & & 0 & & & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & (G(2)) & -\frac{\tilde{V}_0}{4} & & & & \\ & & & & & & & & \ddots & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ A_{-2} \\ A_{-1} \\ A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} \vdots \\ A_{-2} \\ A_{-1} \\ A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.73)$$

der zu lösenden Eigenwertgleichung ableiten. Es ist natürlich keinem Computer möglich, eine Matrix mit unendlich vielen Dimensionen zu lösen. Daher schneiden wir einen Teil der Matrix ab und lassen l nur zwischen $-l_{\max}$ und l_{\max} laufen. Die so erhaltene $(2l_{\max} + 1)$ -dimensionale Eigenwertgleichung lässt sich numerisch lösen [32]. Als Parameter verwenden wir die Werte aus dem Experiment der Sengstock-Gruppe [8] (siehe Ende von Abschnitt 1.2). Als erstes müssen wir überprüfen, wie groß wir unser l_{\max} wählen müssen, sodass wir ein ausreichend präzises Ergebnis erhalten. Dazu betrachten wir Abbildung 2.1. Wir erkennen, dass die Graphen für $l_{\max} = 2$ und $l_{\max} = 4$ übereinander liegen und die rote Linie fast vollständig überdeckt ist. Daher ist schon bei sehr kleinem l_{\max} kaum ein Unterschied in den Wannier-Funktionen zu erkennen. Wenn wir im weiteren Verlauf mit der Wahl $l_{\max} = 10$ rechnen, können wir davon ausgehen, dass unsere Ergebnisse nicht merklich vom exakten Ergebnis abweichen. Desweiteren können wir die Qualität unseres Programmes testen, indem wir die Normierungsbedingung $N = \int dx |w(x)|^2$ und die Orthogonalität durch das Überlappintegral $O = \int dx w(x)w(x-a)$ überprüfen. In Tabelle 2.1 sehen wir, dass für alle Gittertiefen \tilde{V}_0 die Normierung im Bereich der Maschinengenauigkeit gegeben ist und auch das Überlappintegral verschwindend klein ist, wie es die Orthogonalität fordert.

Da wir nun sicher sein können, dass unser Programm gute Ergebnisse liefert, betrachten wir das Verhalten der Wannier-Funktionen in Abhängigkeit des experimentell einstellbaren Parameters \tilde{V}_0 . Je höher wir die Laserstärke \tilde{V}_0 einstellen, desto tiefer wird das Potentialloch und folglich werden sich

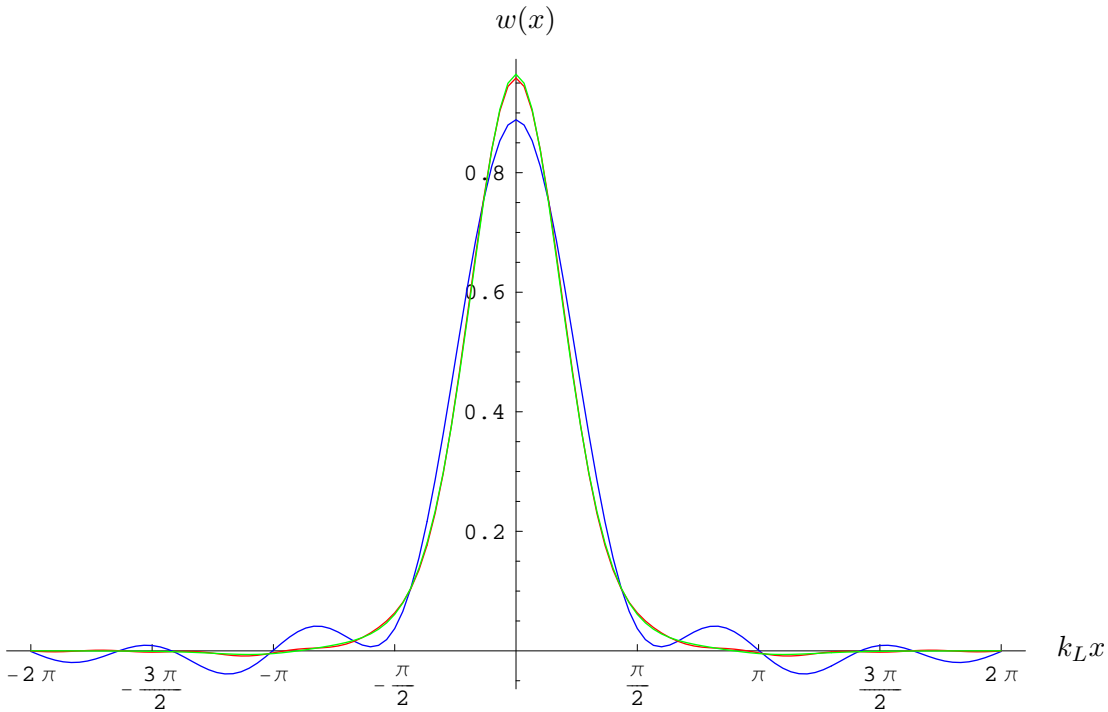


Abbildung 2.1: Darstellung der numerisch berechneten Wannier-Funktion für verschiedene l_{\max} und $\tilde{V}_0 = 10$ (blaue Linie $l_{\max} = 1$, rote für $l_{\max} = 2$ und grüne Linie für $l_{\max} = 4$).

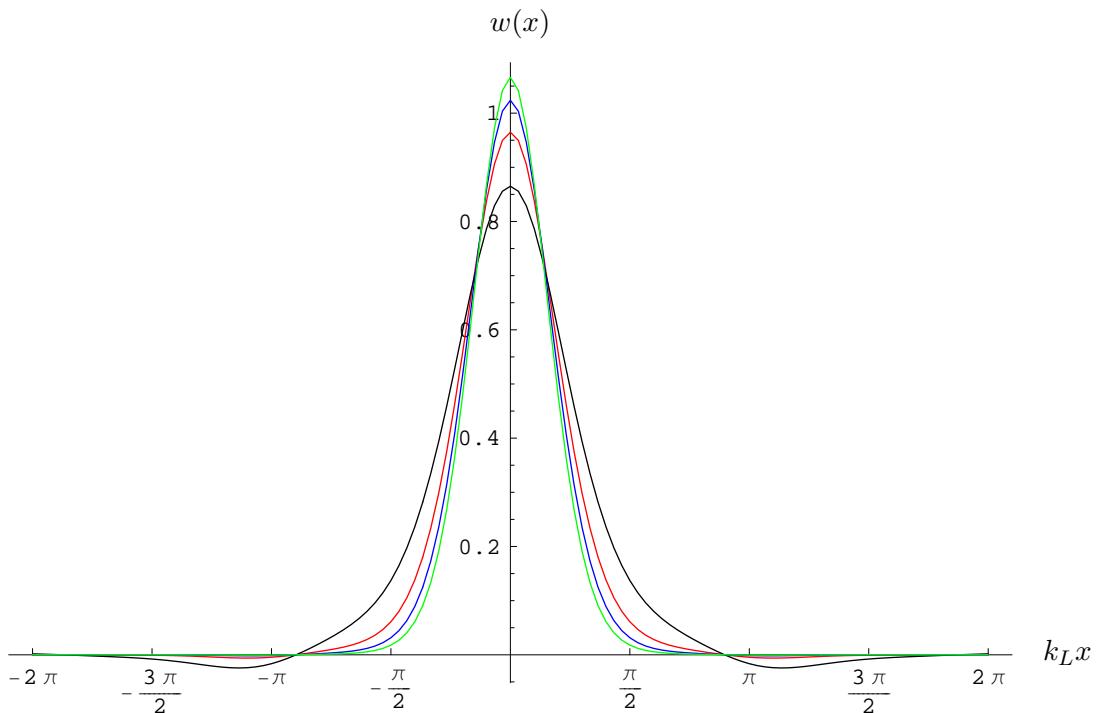


Abbildung 2.2: Vergleich der numerisch berechneten Wannier-Funktion für verschiedene Laserstärken: $\tilde{V}_0 = 5$ (schwarz); $\tilde{V}_0 = 10$ (rot); $\tilde{V}_0 = 15$ (blau); $\tilde{V}_0 = 20$ (grün).

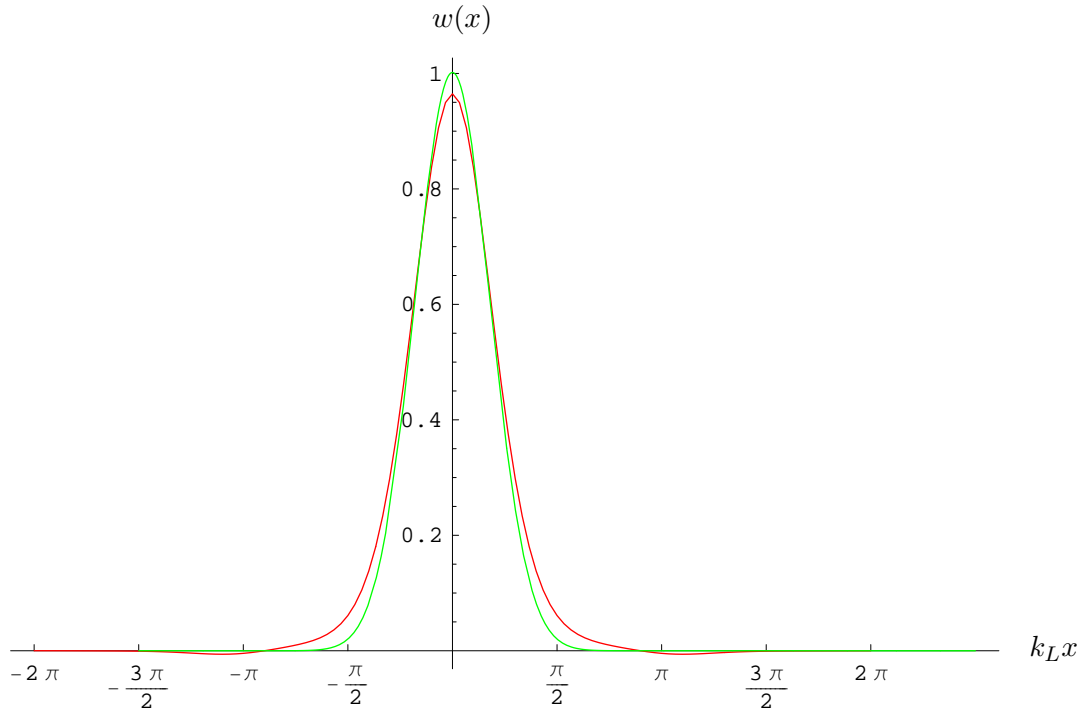


Abbildung 2.3: Vergleich der numerisch berechneten Wannier-Funktion (rot) mit der harmonischen Näherung (grün) für $\tilde{V}_0 = 10$.

die Bosonen näher am Minimum aufhalten. Dieses Verhalten spiegelt sich in den immer mehr im Ursprung zentrierten Wannier-Funktionen, die in Abbildung 2.2 dargestellt sind, wider. Dabei fällt auf, dass die Wannier-Funktionen sowohl positive wie auch negative Werte annehmen, obwohl wir aus der Quantenmechanik wissen, dass die Grundzustandswellenfunktion keine Knoten besitzt. Dies ist kein Widerspruch, da die Wannier-Funktion gemäß (2.18) nicht nur aus dem Grundzustand sondern aus einem ganzen Band an Zuständen berechnet wird, von denen nur der unterste keine Knoten besitzen darf.

Weiterhin vergleichen wir die numerisch bestimmte Wannier-Funktion mit der harmonisch genäherten aus Abschnitt 2.3.2, was in Abbildung 2.3 dargestellt ist. Wir erkennen, dass die Wannier-Funktion der harmonischen Näherung stärker im Minimum konzentriert ist als die des numerischen Ergebnisses. Als nächstes berechnen wir die Onsite-Energien für alle Dimensionen, die wir aus (2.15) durch numerische Integration gewinnen. Für die ein- und zweidimensionalen Onsite-Energien nehmen wir wie in Abschnitt 2.3.2 in zwei bzw. einer Richtung eine Gleichverteilung der Wellenfunktion an und berechnen dann U_{1D} nach (2.55) und U_{2D} nach (2.53) mit der Wahl $L = a$. Aus dem vorhergegangenen Vergleich der Wannier-Funktionen erwarten wir in der harmonischen Näherung für die Onsite-Energie \tilde{U} größere Werte als bei der numerischen Lösung. Desweiteren erwarten wir, dass für große Potentialstärken V_0 die Näherung gut ist, da sich dann tiefe Potentialtöpfe ausbilden, die einem harmonischen Potential gleichen.

Ein Blick auf die Abbildungen 2.4 zeigt, dass unsere erste Annahme richtig war. Bezüglich der Annäherung für große V_0 können wir aber keine exakte Aussage treffen. Scheinbar wird die Näherung für große V_0 sogar schlechter. Daher führen wir eine genauere Analyse des Fehlers durch. Wir plotten den relativen Fehler in Abhängigkeit von V_0 sowohl direkt (siehe Abbildung 2.5(a-c)) als auch in doppelt logarithmischer Darstellung (siehe Abbildung 2.5(d-f)). Dann fitten wir eine Gerade an den doppelt-logarithmischen Plot: $\ln(\delta U) = \ln C - \alpha \ln(V_0)$, was der funktionalen Abhängigkeit $U = C/V_0^\alpha$ entspricht. Die daraus resultierenden Koeffizienten C und α sind in Tabelle 2.2 dargestellt. Aus ihr entnehmen wir, dass der Fehler mit wachsender Dimension zunimmt. Dies ist explizit in Abbildung 2.6

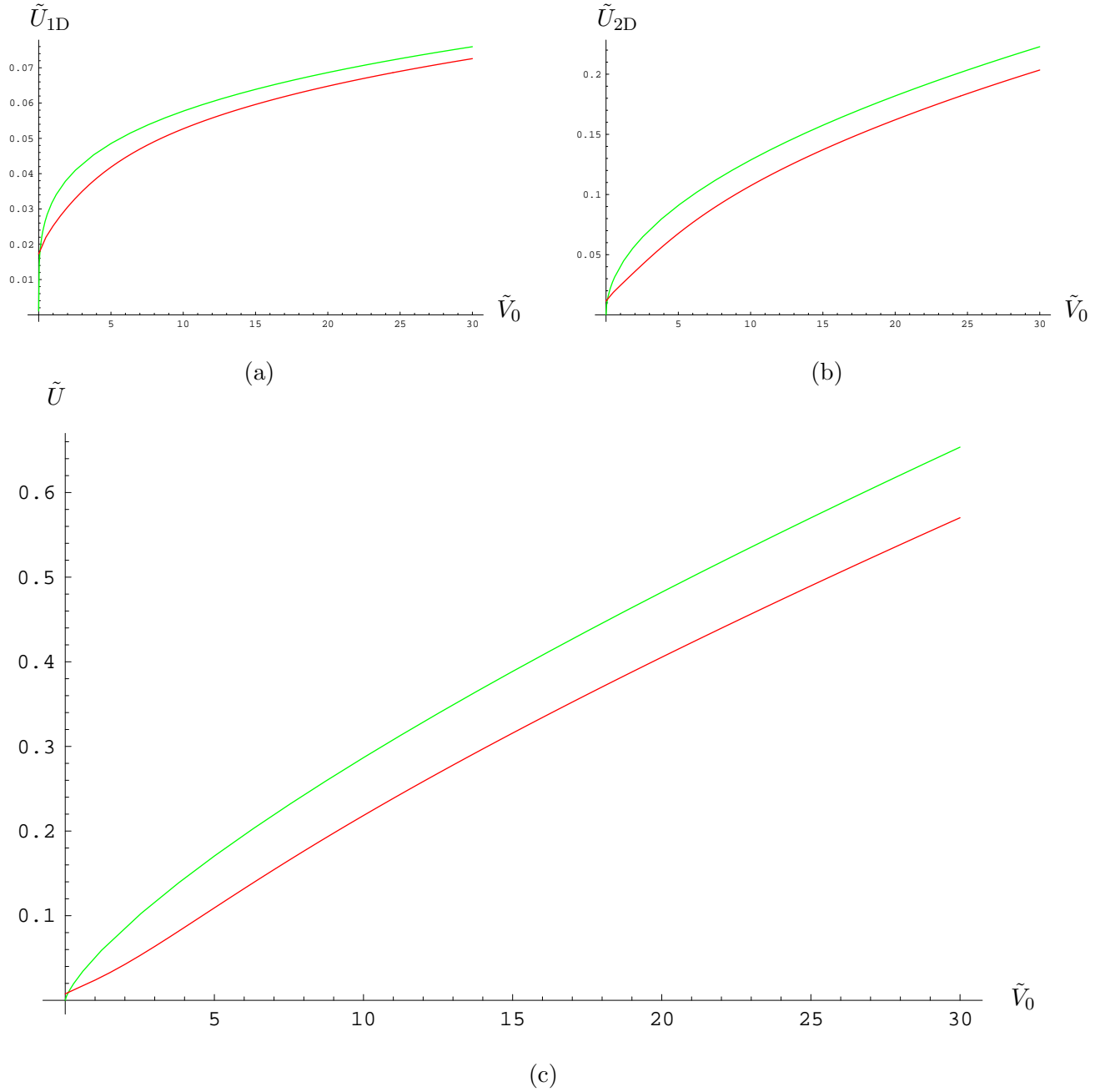
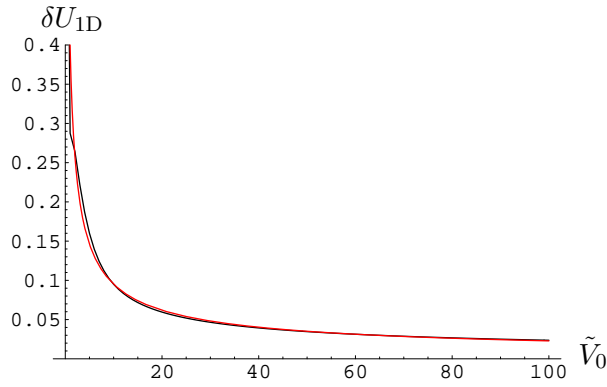


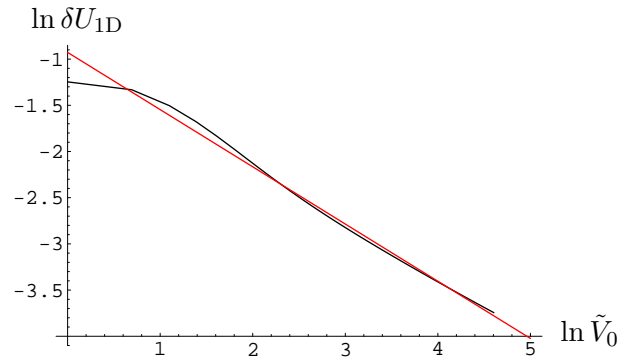
Abbildung 2.4: Vergleich der numerisch berechneten Onsite-Energie (rot) mit der harmonischen Näherung (grün) in Abhängigkeit von \tilde{V}_0 für (a) $D = 1$, (b) $D = 2$ und (c) $D = 3$.

D	$\ln C$	C	α
1	-0,927456	0.395559	0.61926
2	-0,141308	0.868222	0.638183
3	0,359177	1.43215	0.65758

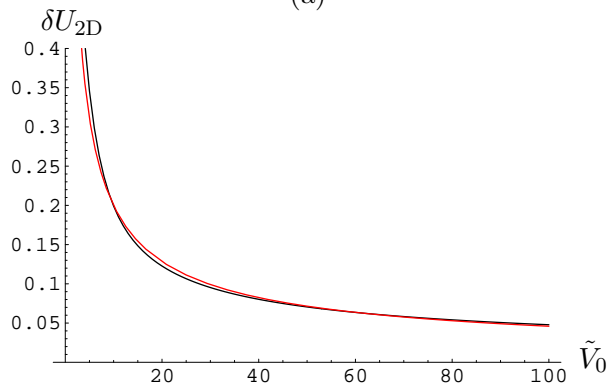
Tabelle 2.2: Koeffizienten des Fits $\ln(\delta U) = \ln C - \alpha \ln(V_0)$ von Abbildung 2.5.



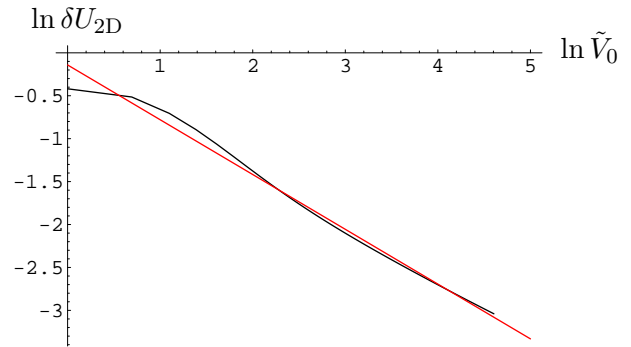
(a)



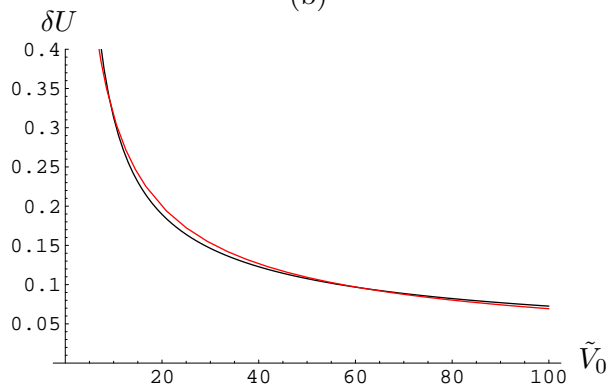
(d)



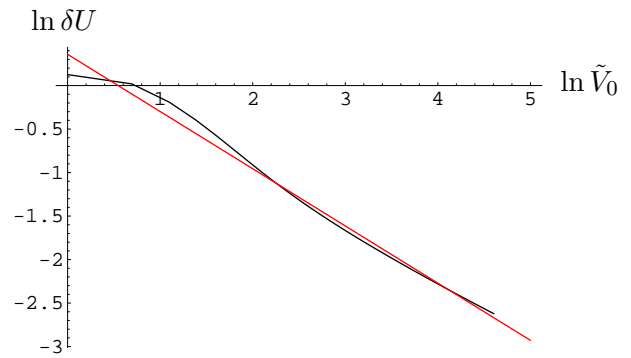
(b)



(e)



(c)



(f)

Abbildung 2.5: Relativer Fehler der Onsite-Energie in einfacher (a)–(c) und doppelt logarithmischer Darstellung (d)–(f) für die Dimensionen: $D = 1$ (a)+(d), $D = 2$ (b)+(e) und $D = 3$ (c)+(f). In allen Bildern gilt: Schwarz sind die numerische Werte und rot der Fit.

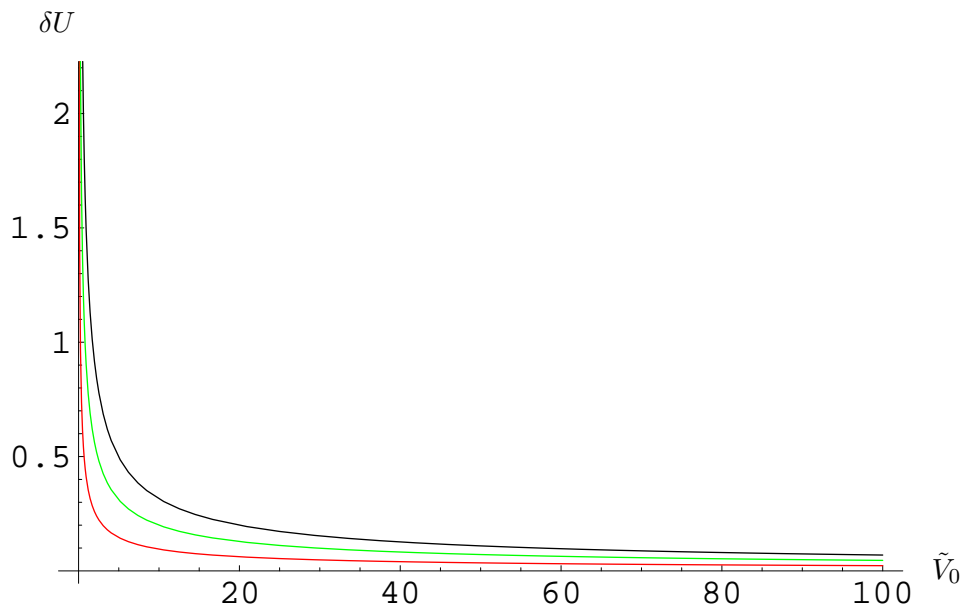


Abbildung 2.6: Vergleich des relativen Fehlers in Abhängigkeit von \tilde{V}_0 für $D = 1$ (rot), für $D = 2$ (grün) und für $D = 3$ (schwarz).

zu sehen. Diese Zunahme ist dadurch zu erklären, dass bei höheren Dimensionen die Wannier-Integrale mit einem höheren Exponenten eingehen, wodurch die Unterschiede stärker zur Geltung kommen.

Als letztes wenden wir uns der Hopping-Energie zu. Die Formel (2.14) enthält mit dem Laplace-Operator eine zweifache Ableitung. Da uns aber die Wannier-Funktion nur an einer geringen Zahl von Stützpunkten bekannt ist, wäre der Fehler bei einer numerischen Berechnung der Ableitung sehr groß. Daher berechnen wir die Hopping-Energie, indem wir in (2.14) die Definition der Wannier-Funktion (2.28) einsetzen. Dabei können wir uns auf den Fall $D = 1$ beschränken, da J nicht dimensionsabhängig ist:

$$J = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{N_S} \sum_{k,k'} e^{ikx_i} \phi_{0,k}(x) \hat{H} e^{-ik'x_j} \phi_{0,k'}(x) \quad . \quad (2.74)$$

Die Verwendung der Schrödinger-Gleichung (2.26) und die Benutzung der Orthonormalität der Eigenfunktionen $\phi_{0,k}(x)$ führen zu:

$$J = \frac{1}{N_S} \sum_{k,k'} e^{ikx_i - ik'x_j} E(k') \delta_{k,k'} \quad (2.75)$$

$$= \frac{2}{N_S} \sum_{k>0} E(k) \cos(\pi k/k_l) \quad , \quad (2.76)$$

wobei die Summe nur über die erlaubten k -Werte der ersten Brillouin-Zone läuft. Da sich die Hopping-Energie aus den Energieeigenwerten berechnet, betrachten wir diese genauer. Wir sehen in Abbildung 2.7 die numerisch berechnete Bandstruktur. Diese entspricht dem Bild, was uns aus der Festkörperphysik bekannt ist. Mit wachsender Laserstärke \tilde{V}_0 werden die Bänder flacher und liegen bei höheren Energien, wie wir in Abbildung 2.8 sehen.

Im Gegensatz zur Onsite-Energie erwarten wir für die Hopping-Energie \tilde{J} aus dem Wannier-Funktionsvergleich in Abbildung 2.3 kleinere Werte als bei der numerischen Lösung. Ein Blick auf die Abbildungen 2.9 zeigt, dass dies tatsächlich der Fall ist. Die Werte für die harmonische Näherung (2.68) liegen

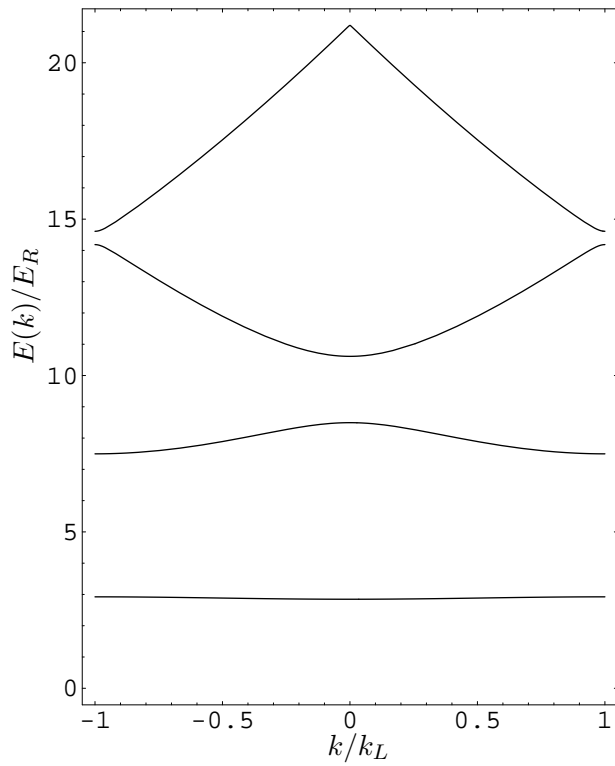


Abbildung 2.7: Die ersten vier Bänder für $\tilde{V}_0 = 10$.

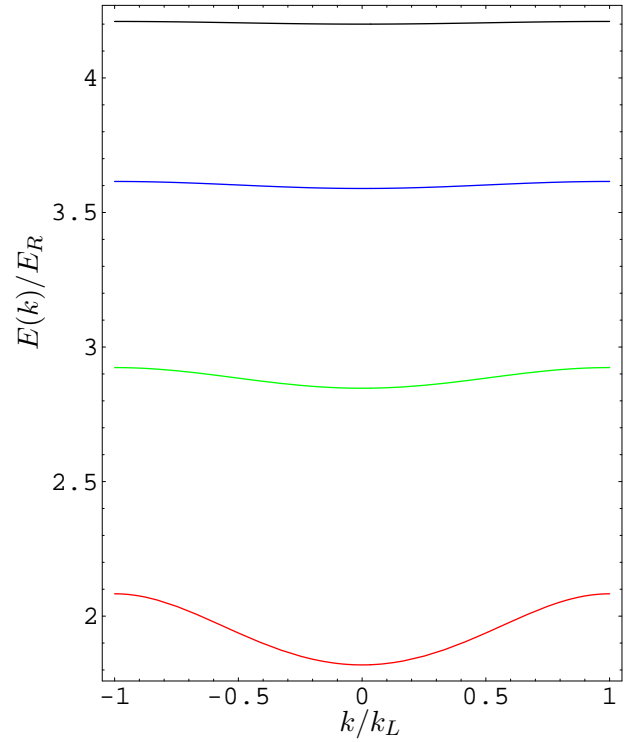


Abbildung 2.8: Unterstes Band für $\tilde{V}_0 = 5$ (rot), $\tilde{V}_0 = 10$ (grün), $\tilde{V}_0 = 15$ (blau) und $\tilde{V}_0 = 20$ (schwarz).

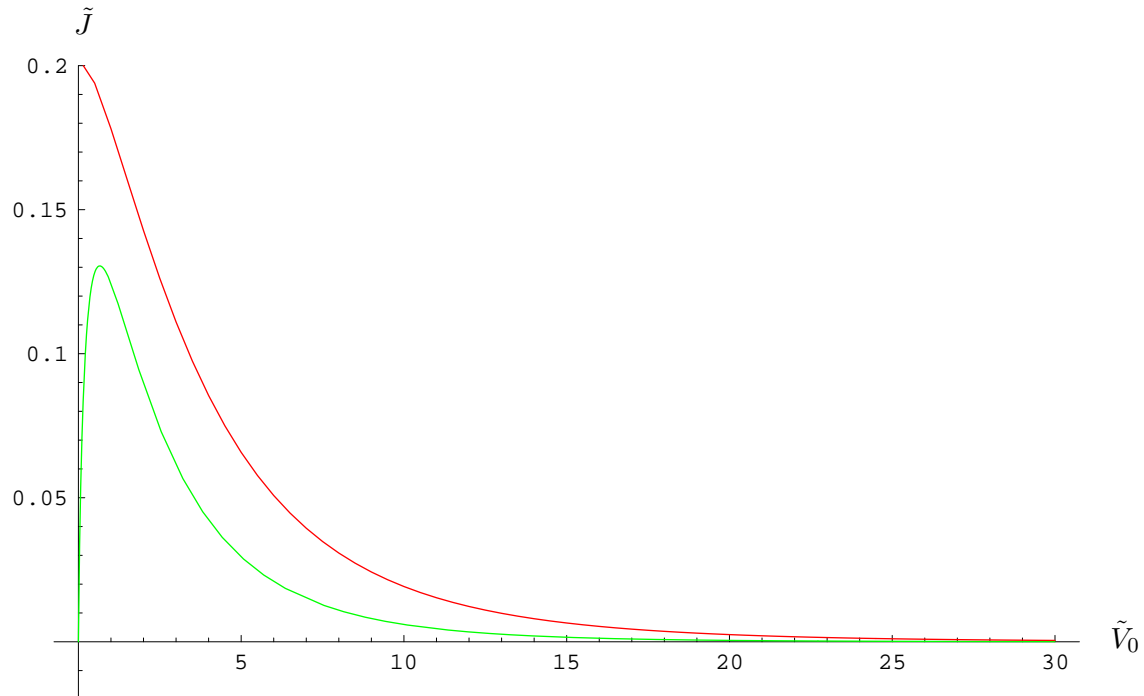


Abbildung 2.9: Vergleich der numerisch berechneten Hopping-Energie (rot) mit der harmonischen Näherung (grün) in Abhängigkeit von \tilde{V}_0 .

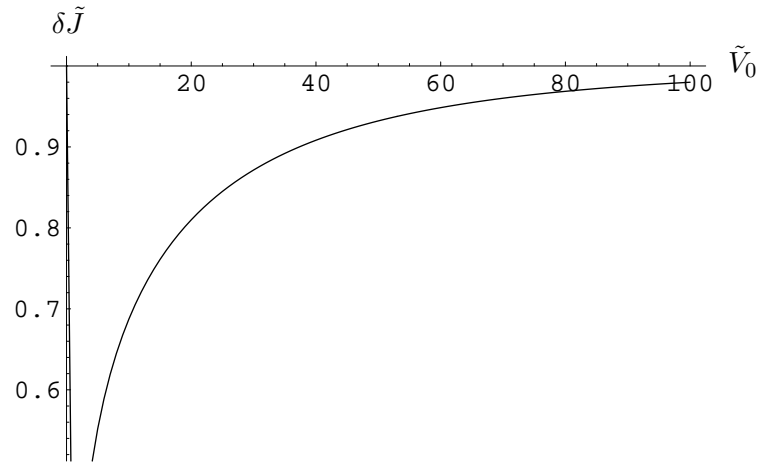


Abbildung 2.10: Relativer Fehler der harmonischen Näherung zur numerisch berechneten Hopping-Energie in Abhängigkeit von \tilde{V}_0

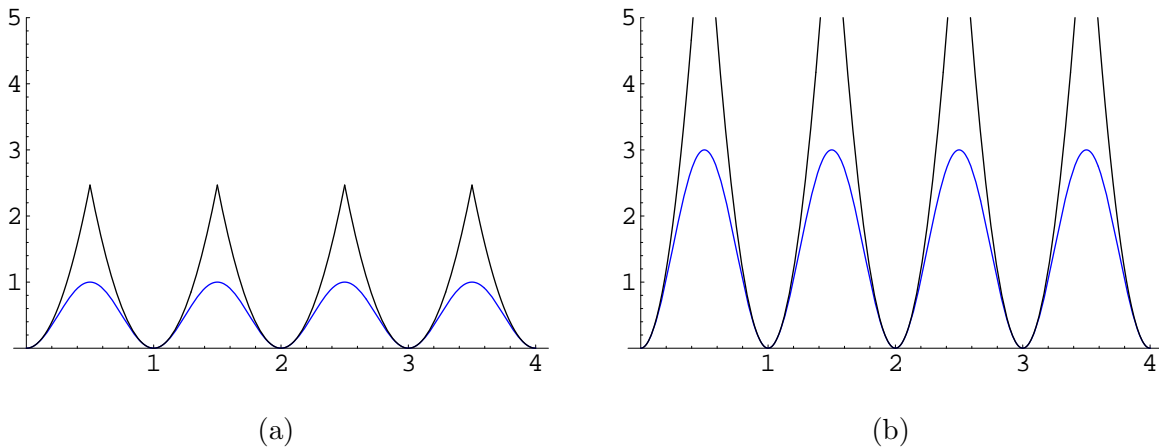


Abbildung 2.11: Schematische Darstellung der harmonischen Näherung für eine kleine Laserstärke (a) und eine große Laserstärke (b). Dabei ist das echte Potential (1.1) in blau dargestellt und die harmonischen Potentialtöpfe schwarz.

deutlich unter dem numerisch berechneten. Daher ist auch hier eine genauere Betrachtung des Fehlers notwendig. In Abbildung 2.10 sehen wir, dass der relative Fehler für große \tilde{V}_0 zunimmt und sogar für $\tilde{V}_0 \rightarrow \infty$ gegen 1 läuft. Dieses Verhalten ist im ersten Moment verwunderlich, da unsere Näherung gerade für starke Laserintensität gut sein sollte. Betrachten wir die Situation jedoch genauer in Abbildung 2.11, so wird schnell klar, was passiert ist. Für die Hopping-Energie ist das Tunneln wichtig, das direkt mit der Höhe der Potentialbarriere in Zusammenhang steht. Bei kleinen Laserstärken wie in Abbildung 2.11(a) ist die Näherung schlecht, da ihre Potentialbarriere höher ist, sodass die berechnete Hopping-Energie zu klein ist. Wenn wir nun zu höheren Potentialbarrieren wie in Abbildung 2.11(b) übergehen, so wird die Näherung zwar besser, aber die Potentialbarrieren werden noch größer, woraus das beobachtete Anwachsen des Fehlers der Hopping-Energie resultiert.

Insgesamt können wir feststellen, dass die harmonische Näherung nur qualitativ das Verhalten der Wechselwirkungskoeffizienten wiedergibt. Für quantitative Aussagen ist sie aber nicht geeignet und besonders die Hopping-Energie ist nur schlecht gegeben. Daher werden wir im weiteren Verlauf immer dann, wenn wir konkrete Zahlen brauchen, um einen Vergleich mit einem Experiment zu machen, auf die numerisch berechneten zurückgreifen. Insbesondere tun wir dies bei der Eichkurve in Abbildung

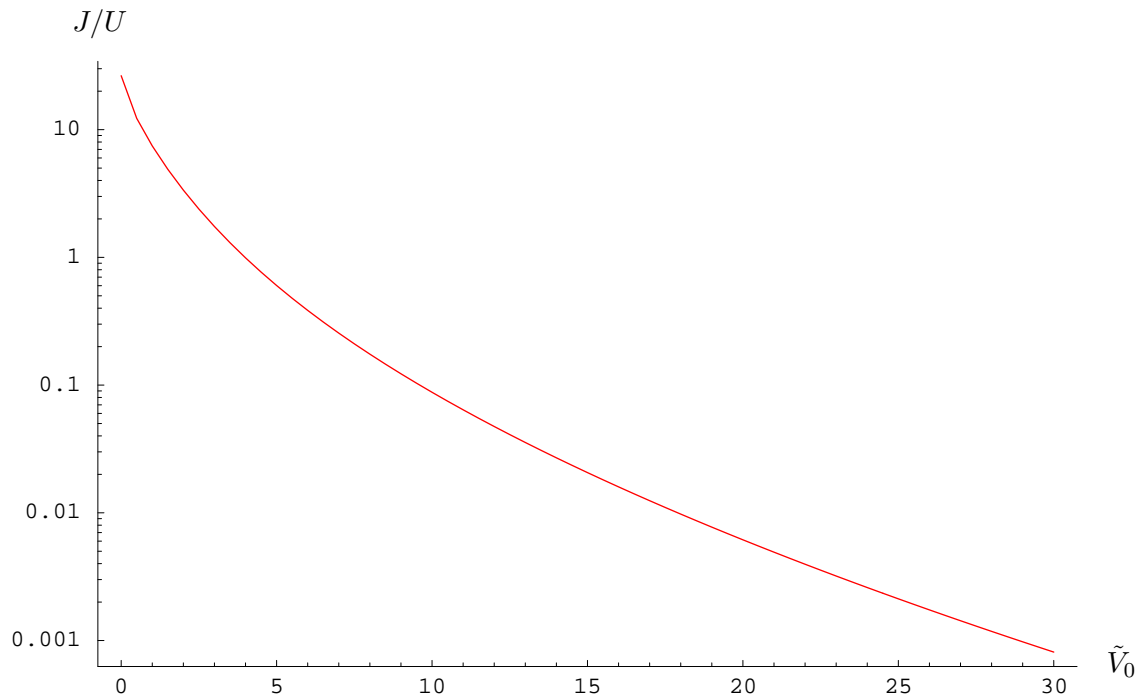


Abbildung 2.12: Eichkurve von J/U für den experimentellen Aufbau der Sengstock-Gruppe.

2.12, die den Zusammenhang zwischen der experimentell einstellbaren Laserstärke \tilde{V}_0 und dem für die Theorie wichtigen Verhältnis J/U darstellt.

Kapitel 3

Molekularfeldtheorie

In diesem Kapitel untersuchen wir den Quantenphasenübergang zwischen der superfluiden Phase und der Mott-Phase im Rahmen der Molekularfeldtheorie. Hierzu verwenden wir die Landau-Theorie und betrachten das großkanonische Potential als Funktion des Ordnungsparameters. Dabei zeigen wir, dass es sich um einen Phasenübergang zweiter Ordnung handelt.

Desweiteren werden wir es in diesem und den folgenden Kapiteln häufig mit Erwartungswerten $\langle \cdot \rangle$ zu tun haben. Diese sind im Fall $T = 0$ als quantenmechanische Erwartungswerte

$$\langle \hat{X} \rangle = \langle \phi | \hat{X} | \phi \rangle \quad (3.1)$$

aufzufassen, wobei wir für die Zustände $|\phi\rangle$ die Eigenzustände des Bose-Hubbard-Hamiltonians nehmen. Im Fall $T > 0$ sind sie als quantenstatistische Erwartungswerte

$$\langle \hat{X} \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{X} e^{-\beta \hat{H}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}} \right\}} \quad (3.2)$$

aufzufassen.

3.1 Landau-Theorie

In der Landau-Theorie [33,34] führen wir einen reellen Ordnungsparameter ψ ein, der unsere Phasen kennzeichnet. In der symmetrischen Phase (in unserem Fall die Mott-Phase) ist der Ordnungsparameter $\psi = 0$. In der ungeordneten Phase (bei uns die superfluide Phase) gilt immer $\psi \neq 0$. Beide Phasen sind durch ihr eigenes großkanonisches Potential \mathcal{F}_{SF} bzw. $\mathcal{F}_{\text{Mott}}$ charakterisiert, die nur an der Phasengrenze übereinstimmen. Nun führen wir ein ordnungsparameterabhängiges großkanonisches Potential $\mathcal{F}(\psi)$ ein, das diese beiden enthält. Dies entwickeln wir in der Nähe der Phasengrenze in eine Potenzreihe des Ordnungsparameters ψ , die wir nach der vierten Ordnung abbrechen:

$$\mathcal{F}(\psi) = a_0 + a_1\psi^1 + a_2\psi^2 + a_3\psi^3 + a_4\psi^4 \quad . \quad (3.3)$$

Dabei ist der Ordnungsparameter keine freie Variable sondern immer so zu wählen, dass das großkanonische Potential minimiert wird. Bei einem Phasenübergang zweiter Ordnung folgt aus Symmetriegründen $a_1 = 0$ und $a_3 = 0$, da wir sonst keinen stetigen Übergang an der Phasengrenze erhalten [33]. Somit reduziert sich (3.3) auf:

$$\mathcal{F}(\psi) = a_0 + a_2\psi^2 + a_4\psi^4 \quad . \quad (3.4)$$

Nun legen wir den Wert des Ordnungsparameters durch Minimieren von (3.4) fest. Aus der Extremalisierung folgt zunächst

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \psi} = \psi(2a_2 + 4a_4\psi^2) = 0 \quad , \quad (3.5)$$

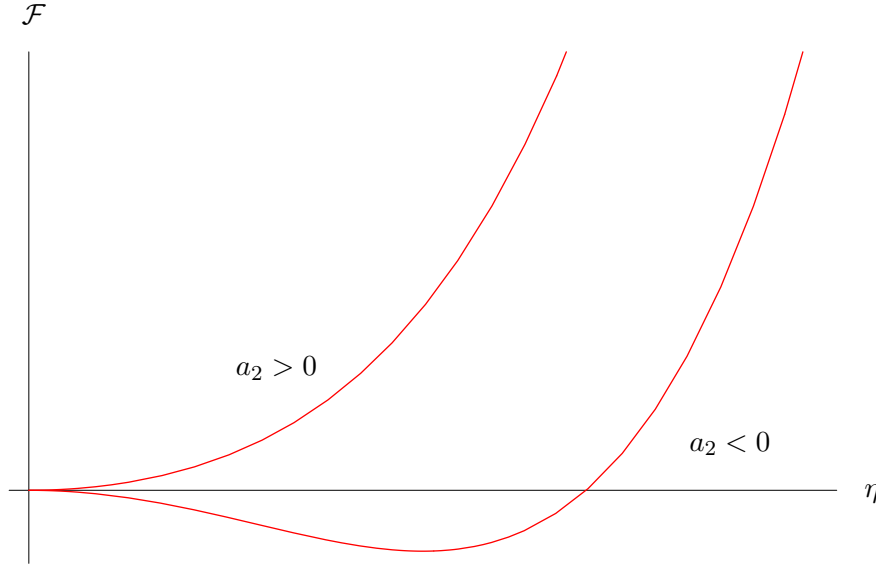


Abbildung 3.1: Großkanonisches Potential \mathcal{F} gemäß (3.4) in Abhängigkeit des Ordnungsparameters

während für die zweiten Ableitung gilt:

$$\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \psi^2} = 2a_2 + 12a_4 \psi^2 > 0 \quad . \quad (3.6)$$

Demnach liegen folgende Minima vor:

$$\psi = 0 \text{ falls } a_2 > 0 \quad \text{und} \quad \psi = \sqrt{-\frac{a_2}{2a_4}} \text{ falls } a_2 < 0 \quad . \quad (3.7)$$

Diese Minima entsprechen den beiden Phasen. Die Phasengrenze ist durch die Bedingung $a_2 = 0$ gegeben. Weiterhin muss für die Existenz des Minimums in der ungeordneten Phase $a_4 > 0$ gelten. Das Auftreten dieser beiden Minima ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

3.2 Molekularfeldansatz

Da der Hopping-Beitrag nicht lokal ist, ist das Berechnen thermodynamischer Eigenschaften auf der Grundlage des Bose-Hubbard-Hamiltonians (2.1) sehr aufwendig. Daher wollen wir das Problem mit einem Molekularfeldansatz näherungsweise lösen. Wir nehmen an, dass sich die bosonischen Feldoperatoren durch ihre Mittelwerte und eine kleine Schwankung beschreiben lassen:

$$\hat{a}_i = \langle \hat{a}_i \rangle + \delta \hat{a}_i, \quad \hat{a}_i^\dagger = \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle + \delta \hat{a}_i^\dagger \quad . \quad (3.8)$$

Vernachlässigen wir nun Beiträge, bei denen die Schwankungen quadratisch eingehen, so gilt:

$$0 \approx \delta \hat{a}_i^\dagger \delta \hat{a}_j = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_j - \langle \hat{a}_j \rangle \hat{a}_i^\dagger + \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_j \rangle \quad ,$$

woraus unmittelbar folgt:

$$\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \approx \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_j + \langle \hat{a}_j \rangle \hat{a}_i^\dagger - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_j \rangle \quad . \quad (3.9)$$

Jetzt setzen wir diese Näherung in den Hopping-Beitrag von (2.1) ein und erhalten:

$$\hat{H}_{\text{MF}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \hat{a}_j + \langle \hat{a}_j \rangle \hat{a}_i^\dagger - \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle \langle \hat{a}_j \rangle \right) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i - \mu \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad . \quad (3.10)$$

Wir nehmen an, dass die Erwartungswerte $\langle \hat{a}_i^\dagger \rangle$, $\langle \hat{a}_j \rangle$ vom Gitterplatz unabhängig sind und definieren:

$$\langle \hat{a}_i^\dagger \rangle = \psi^* \quad , \quad \langle \hat{a}_i \rangle = \psi \quad . \quad (3.11)$$

Damit sind die Summen in (3.10) nur noch vom Gitterplatz i abhängig. Die Aufsummierung $\langle i, j \rangle$ reduziert sich also zu $z \sum_i$ bei z nächsten Nachbarn. Die Zahl der nächsten Nachbarn ist im Gitter durch die Koordinationszahl gegeben, die im dreidimensionalen kubischen Gitter $z = 6$ beträgt. Es ergibt sich so der Molekularfeld-Hamiltonian:

$$\hat{H}_{\text{MF}} = \sum_i \left[-Jz(\psi^* \hat{a}_i + \psi \hat{a}_i^\dagger - \psi^* \psi) + \frac{U}{2} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i - \mu \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \right] \quad . \quad (3.12)$$

Dabei wird das in (3.11) definierte, jetzt noch komplexe ψ die Rolle des Landau-Ordnungsparameters übernehmen, der am Minimum des großkanonische Potential ausgewertet wird. Dass diese Definition (3.11) seine Berechtigung hat, zeigen wir jetzt im Selbstkonsistenzbeweis.

Dazu benutzen wir die allgemeine Definition des großkanonischen Potentials:

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \quad . \quad (3.13)$$

Nun verwenden wir die Minimumsbedingung der Landau-Theorie und führen die Ableitung aus:

$$0 = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \psi} = \frac{\text{Tr}(\hat{a}_i^\dagger - \psi^*) e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}}}{\text{Tr} e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}}} = \langle \hat{a}_i^\dagger \rangle - \psi^* \quad . \quad (3.14)$$

Diese Aussage ist nun äquivalent zur Definition (3.11), wobei der Beweis für $\langle \hat{a}_j \rangle = \psi$ analog verläuft. Der Bose-Hubbard-Hamiltonoperator (2.1) ist invariant unter einer globalen $U(1)$ -Phasentransformation [35]:

$$\hat{a}_i \rightarrow \hat{a}_i e^{i\phi} \quad , \quad \hat{a}_i^\dagger \rightarrow \hat{a}_i^\dagger e^{-i\phi} \quad . \quad (3.15)$$

In (3.12) können solche Transformationen durch ein Verschieben der Phase des Ordnungsparameters ausgeglichen werden. Da das Ergebnis nicht von der Phase abhängen darf, können wir ψ ohne Beschränkung der Allgemeinheit als reell wählen. Verwenden wir nun den Kommutator (2.2) und den Teilchenzahloperator $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$, so ergibt sich:

$$\hat{H}_{\text{MF}} = \sum_i \left\{ -Jz[\psi(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) - \psi^2] + \frac{U}{2} \hat{n}_i(\hat{n}_i - 1) - \mu \hat{n}_i \right\} \quad . \quad (3.16)$$

Wir nehmen an, dass die Erwartungswerte $\langle \hat{a}_i^\dagger \rangle$, $\langle \hat{a}_j \rangle$ vom Gitterplatz unabhängig sind und definieren:

$$\langle \hat{a}_i^\dagger \rangle = \psi^* \quad , \quad \langle \hat{a}_i \rangle = \psi \quad . \quad (3.17)$$

Der so erhaltene Hamiltonoperator ist lokal, sodass wir uns im weiteren Verlauf nur auf die Betrachtung eines Gitterplatzes beschränken und alle Indizes i im Folgenden weglassen können. Wir erhalten für jeden einzelnen Gitterplatz den Hamiltonian:

$$\hat{H}_{\text{EZ}} = -Jz[\psi(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) - \psi^2] + \frac{U}{2} \hat{n}(\hat{n} - 1) - \mu \hat{n} \quad . \quad (3.18)$$

3.3 Bose-Hubbard-Modell für $T = 0$

Wir beginnen mit dem Fall verschwindender Temperatur. Nun wollen wir den Hamiltonoperator (3.18) benutzen, um dessen Energieeigenwerte zu bestimmen.

3.3.1 Störungstheorie

Der Hamiltonoperator (3.18) lässt sich in der Form $\hat{H}_{\text{EZ}} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ mit $\hat{H}_0 = -Jz\psi^2 + \frac{U}{2}\hat{n}(\hat{n}-1) - \mu\hat{n}$ und $\hat{V} = -Jz\psi(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$ darstellen. Wenn wir annehmen, dass der Parameter J klein ist, was gemäß Abbildung 2.9 zumindest für große V_0 gegeben ist, können wir zur Lösung dieses Problems die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie benutzen.

Dazu machen wir einen Potenzreihenansatz in J für die Eigenzustände und -werte:

$$|\Psi_n\rangle = \sum_{i=0}^{\infty} J^i |\Psi_n^{(i)}\rangle \quad , \quad (3.19)$$

$$E_{\text{EZ}}(n) = \sum_{i=0}^{\infty} J^i E_n^{(i)} \quad . \quad (3.20)$$

Zusammen mit der Schrödinger-Gleichung ergeben sich die Rekursionsformeln [25]:

$$E_n^{(p)} = \langle \Psi_n^{(0)} | \hat{V} | \Psi_n^{(p-1)} \rangle \quad , \quad (3.21a)$$

$$|\Psi_n^{(p)}\rangle = \sum_{m \neq n} |\Psi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \Psi_m^{(0)} | \hat{V} | \Psi_n^{(p-1)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} - \sum_{j=1}^p E_n^{(j)} \sum_{m \neq n} |\Psi_m^{(0)}\rangle \frac{\langle \Psi_m^{(0)} | \Psi_n^{(p-j)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad , \quad (3.21b)$$

die ausgehend vom ungestörten System nacheinander die verschiedenen Ordnungen in J bestimmen. Dabei braucht man für die Energiekorrekturen lediglich die Zustandskorrekturen der vorangegangenen Ordnung, während man für die Zustandskorrekturen alle vorherigen Energie- und Zustandskorrekturen benötigt.

Zuerst lösen wir das ungestörte Problem $\hat{H}_0 |\Psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\Psi_n^{(0)}\rangle$. Die Eigenvektoren des Teilchenzahloperators sind gleichzeitig die Eigenvektoren von \hat{H}_0 , da $\hat{H}_0 = \hat{H}_0(\hat{n})$ ist:

$$|\Psi_n^{(0)}\rangle = |n\rangle \quad . \quad (3.22)$$

Nach (2.3a) sind dann die Energieeigenwerte gegeben durch:

$$E_n^{(0)} := E_n = Jz\psi^2 + \frac{U}{2}n(n-1) - \mu n \quad . \quad (3.23)$$

Nun rechnen wir die Korrekturen nach (3.21a) angefangen mit der 1. Ordnung aus:

$$E_n^{(1)} = -Jz\psi \langle n | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n \rangle \quad . \quad (3.24)$$

Jetzt nutzen wir die Eigenschaften der Auf- und Absteigeoperatoren (2.3b) und (2.3c) und erhalten:

$$E_n^{(1)} = -Jz\psi (\sqrt{n} \langle n | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle n | n+1 \rangle) = 0 \quad . \quad (3.25)$$

Die dazugehörige Eigenzustandskorrektur ist nach (3.21b) gegeben durch:

$$|\Psi_n^{(1)}\rangle = -Jz\psi \sum_{m \neq n} |m\rangle \frac{\langle m | \hat{a} + \hat{a}^\dagger | n \rangle}{E_n - E_m} \quad . \quad (3.26)$$

Wir benutzen wieder (2.3b) und (2.3c) und verwenden, dass $\langle n|n'\rangle = \delta_{n,n'}$, da die Eigenvektoren des Teilchenzahloperators orthonormiert sind:

$$|\Psi_n^{(1)}\rangle = -Jz\psi \sum_{m \neq n} |m\rangle \frac{\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}}{E_n - E_m} \quad (3.27)$$

$$= -Jz\psi \left(\frac{\sqrt{n}}{E_n - E_{n-1}} |n-1\rangle + \frac{\sqrt{n+1}}{E_n - E_{n+1}} |n+1\rangle \right) \quad (3.28)$$

Die Korrekturen der 2. Ordnung erhalten wir damit als:

$$E_n^{(2)} = J^2 z^2 \psi^2 \left(\frac{\sqrt{n}\langle n|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|n-1\rangle}{E_n - E_{n-1}} + \frac{\sqrt{n+1}\langle n|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|n+1\rangle}{E_n - E_{n+1}} \right) \quad (3.29)$$

Wir verwenden erneut die Eigenschaften der Auf- und Absteigeoperatoren und erhalten:

$$E_n^{(2)} = J^2 z^2 \psi^2 \left[\frac{n}{E_n - E_{n-1}} + \frac{n+1}{E_n - E_{n+1}} \right] \quad (3.30)$$

Bei der Zustandskorrektur in der zweiten Ordnung benutzen wir (3.25) und erhalten:

$$|\Psi_n^{(2)}\rangle = J^2 z^2 \psi^2 \sum_{m \neq n} |m\rangle \left[\frac{\sqrt{n}\langle m|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|n-1\rangle}{(E_n - E_{n-1})(E_n - E_m)} + \frac{\sqrt{n+1}\langle m|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|n+1\rangle}{(E_n - E_{n+1})(E_n - E_m)} \right] \quad (3.31)$$

was sich auf folgenden Ausdruck reduziert:

$$|\Psi_n^{(2)}\rangle = J^2 z^2 \psi^2 \left[\frac{\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle}{(E_n - E_{n-1})(E_n - E_{n-2})} + \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle}{(E_n - E_{n+1})(E_n - E_{n+2})} \right] \quad (3.32)$$

Eine weitere Durchführung der Rekursion liefert uns die 3. Ordnung:

$$E_n^{(3)} = \langle n|\hat{V}|\Psi_n^{(2)}\rangle = 0, \quad (3.33)$$

da die Operatoren \hat{a} , \hat{a}^\dagger in $\hat{V}|\Psi_n^{(2)}\rangle$ nur eine Linearkombination der Vektoren $|n \pm 1\rangle$, $|n \pm 3\rangle$ liefern, die orthogonal zu $\langle n|$ sind. Und die dritte Zustandskorrektur ergibt sich aus:

$$|\Psi_n^{(3)}\rangle = \sum_{m \neq n} |m\rangle \left(\frac{\langle m|\hat{V}|\Psi_n^{(2)}\rangle}{E_n - E_m} - E_n^{(2)} \frac{\langle m|\Psi_n^{(1)}\rangle}{E_n - E_m} \right) \quad (3.34)$$

Nach einer längeren Rechnung erhalten wir

$$|\Psi_n^{(3)}\rangle = -J^3 z^3 \psi^3 \left\{ \frac{\sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle}{(E_n - E_{n-1})(E_n - E_{n-2})(E_n - E_{n-3})} + \frac{(n-1)\sqrt{n}|n-1\rangle}{(E_n - E_{n-1})^2(E_n - E_{n-2})} \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle}{(E_n - E_{n+1})(E_n - E_{n+2})(E_n - E_{n+3})} + \frac{(n+2)\sqrt{(n+1)}|n+1\rangle}{(E_n - E_{n+1})^2(E_n - E_{n+2})} \right. \\ \left. - E_n^{(2)} \left[\frac{\sqrt{n}|n-1\rangle}{(E_n - E_{n-1})^2} + \frac{\sqrt{n+1}|n+1\rangle}{(E_n - E_{n+1})^2} \right] \right\} \quad (3.35)$$

Die Zustandskorrekturen haben wir nur berechnet, da sie für die Rekursion der Energieeigenwerte benötigt wurden. Daher berechnen wir im für die Landau-Entwicklung letzten Schritt nur noch die Energiekorrektur vierter Ordnung:

$$E_n^{(4)} = -Jz\psi\langle n|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|\Psi_n^{(3)}\rangle \quad . \quad (3.36)$$

Mit (3.35) erhalten wir schließlich:

$$E_n^{(4)} = J^4 z^4 \psi^4 \left[\frac{(n-1)n}{(E_n - E_{n-2})(E_n - E_{n-1})^2} + \frac{(n+1)(n+2)}{(E_n - E_{n+2})(E_n - E_{n+1})^2} - \frac{n^2}{(E_n - E_{n-1})^3} \right. \\ \left. - \frac{n(n+1)}{(E_n - E_{n+1})(E_n - E_{n-1})^2} - \frac{(n+1)^2}{(E_n - E_{n+1})^3} - \frac{n(n+1)}{(E_n - E_{n-1})(E_n - E_{n+1})^2} \right] \quad . \quad (3.37)$$

Dabei sind die auftretenden Energiedifferenzen nach (3.23) gegeben durch:

$$E_n - E_{n-1} = U(n-1) - \mu \quad , \quad (3.38a)$$

$$E_n - E_{n+1} = \mu - Un \quad , \quad (3.38b)$$

$$E_n - E_{n-2} = (2n-3)U - 2\mu \quad , \quad (3.38c)$$

$$E_n - E_{n+2} = 2\mu - (2n+1)U \quad . \quad (3.38d)$$

Wir haben nun die Energie als eine Potenzreihe in J gegeben. Diese Potenzreihe können wir auch als eine Potenzreihe von ψ darstellen:

$$E_{EZ}(n) = a_0 + a_2\psi^2 + a_4\psi^4 + \dots \quad , \quad (3.39)$$

wobei die einzelnen Koeffizienten gegeben sind als:

$$a_0 = \frac{U}{2}(n^2 - n) - \mu n \quad , \quad (3.40)$$

$$a_2 = Jz + J^2 z^2 \left[\frac{n+1}{E_n - E_{n+1}} + \frac{n}{E_n - E_{n-1}} \right] \\ = Jz - J^2 z^2 \frac{U + \mu}{(\mu - Un)(U(n-1) - \mu)} \quad (3.41)$$

und

$$a_4 = J^4 z^4 \left[\frac{n+1}{(E_{n+1} - E_n)^2} \left(\frac{n}{E_{n-1} - E_n} + \frac{n+1}{E_{n+1} - E_n} - \frac{n+2}{E_{n+2} - E_n} \right) \right. \\ \left. + \frac{n}{(E_{n-1} - E_n)^2} \left(\frac{n}{E_{n+1} - E_n} + \frac{n}{E_{n-1} - E_n} - \frac{n-1}{E_{n-2} - E_n} \right) \right] \quad . \quad (3.42)$$

Unsere Rechnung liefert uns also eine Potenzreihe, wie wir sie nach (3.4) erwarten. Die Koeffizienten a_1 und a_3 sind tatsächlich Null, wie es aufgrund der $U(1)$ -Eichinvarianz und für den Phasenübergang zweiter Ordnung notwendig ist.

3.3.2 Chemisches Potential

Im Experiment liegt eine feste Gesamtteilchenzahl N vor, die sich auf eine feste Zahl von Gitterplätzen N_S verteilt. In der Theorie hingegen rechnen wir im großkanonischen Ensemble, das von einer Veränderung der Teilchenzahl ausgeht. Wir müssen das chemische Potential folglich so wählen, dass sich die gewünschte Gesamtteilchenzahl N als mittlere Teilchenzahl einstellt. Darüber hinaus verwenden wir die Bedingung, dass sich das System am absoluten Nullpunkt in seinem Energieminimum befinden

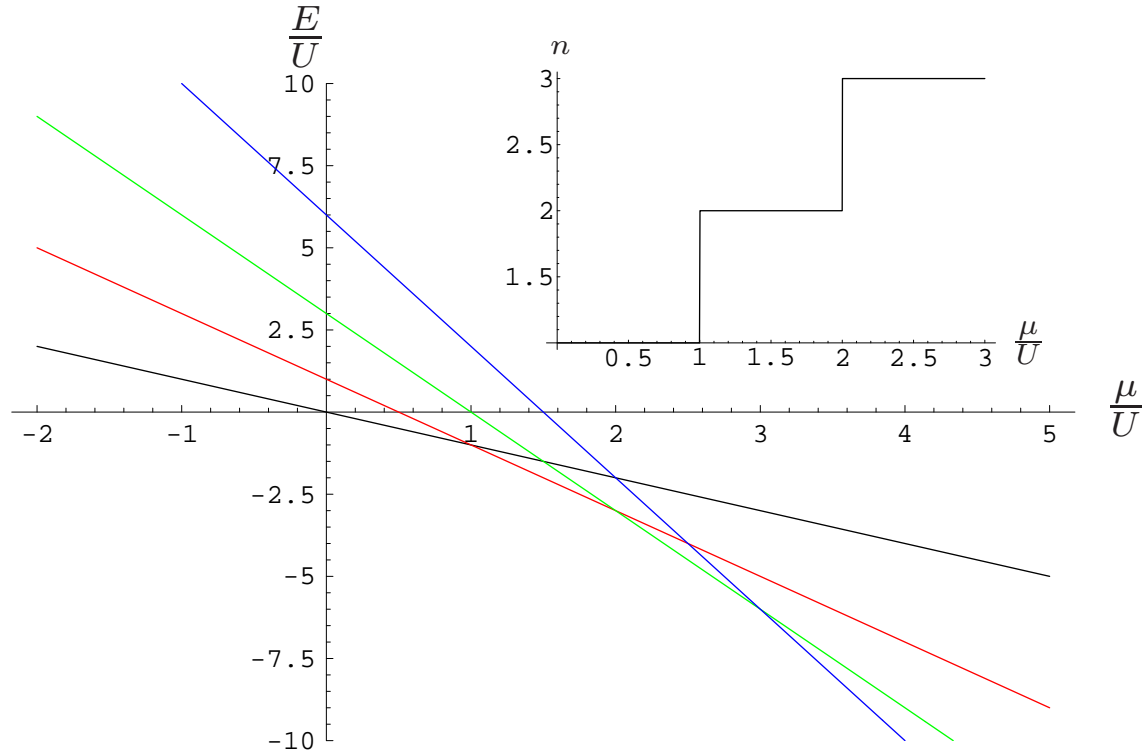


Abbildung 3.2: Ungestörte Energie ($J = 0$) für die Teilchenzahlen $n = 1$ (schwarze Linie), $n = 2$ (rot), $n = 3$ (grün) und $n = 4$ (blau) und im Inlet die Teilchenzahl n in Abhängigkeit vom chemischen Potential μ .

muss.

Betrachten wir dazu das ungestörte System ohne Hopping ($J = 0$), dessen Energiezustände durch (3.23) gegeben sind. Diese werden in Abbildung 3.2 dargestellt. Wir erkennen, dass für jede Teilchenzahl n die Energie des System immer in einem gewissen Bereich des chemischen Potentials μ minimal wird. Es gilt:

$$U(n-1) < \mu < Un \quad (3.43)$$

für positives μ und es gilt $n = 0$ für alle negativen μ . Wenn wir also das chemische Potential von Null an durchfahren, erhöht sich bei jeder ganzen Zahl für μ/U die Teilchenzahl um eins (siehe Inlet in Abbildung 3.2), da genau an diesen Stellen in Abbildung 3.2 sich die Geraden von verschiedenen Teilchenzahlen n schneiden, und somit eine andere Teilchenzahl energetisch günstig ist.

Wir haben bisher immer nur einen Gitterplatz betrachtet und angenommen, dass sich auf allen Gitterplätzen gleich viele Teilchen sitzen. Wir schließen nun auch Fälle ein, in denen die durchschnittliche Teilchendichte $\bar{n} = N/N_S$ nicht ganzzahlig ist. Wir suchen Bedingungen, die eine möglichst gleichmäßige Verteilung der Bosonen auf das Gitter erreichen. Dazu füllen wir gleichmäßig jeden Gitterplatz mit n_L Bosonen, sodass weniger Bosonen als Gitterplätze übrig bleiben. Von den restlichen Bosonen geben wir je eins in einen Gitterplatz. So erhalten wir zwei Mengen von Gitterplätzen: L und M . Hierbei seien N_L die Anzahl der Gitterplätze der Menge L , die von n_L Bosonen besetzt sind, und N_M die Anzahl der Gitterplätze der Menge M , die von n_M Bosonen besetzt sind. Alle oben auftretenden Zahlen sind eindeutig durch die Wahl von \bar{n} definiert durch die Nebenbedingungen:

$$\text{konstante Zahl der Gitterplätze: } N_L + N_M = N_S \quad , \quad (3.44a)$$

$$\text{konstante Teilchenzahl: } N_L n_L + N_M n_M = N \quad , \quad (3.44b)$$

$$\text{Gleichverteilung der Bosonen: } n_M = n_L + 1 \quad , \quad (3.44c)$$

$$\text{Bosonen sind abzählbar: } n_L, n_M \in \mathbb{N} \quad . \quad (3.44d)$$

Damit gilt für die Teilchendichte nach der Definitionsgleichung $\bar{n} = N/N_S$:

$$\bar{n} = \frac{1}{N_S} \left(\sum_{i \in L} n_L + \sum_{i \in M} n_m \right) \quad (3.45)$$

und unter Verwendung von (3.44c) erhalten wir:

$$\bar{n} = n_L + \frac{N_M}{N_S} \quad . \quad (3.46)$$

Wir berechnen jetzt die durchschnittliche Energie pro Gitterplatz:

$$\bar{E} = \frac{1}{N_S} \left[\sum_{i \in L} \frac{U}{2} (n_L^2 - n_L) - \mu n_L + \sum_i \frac{U}{2} (n_M^2 - n_M) - \mu n_M \right] \quad (3.47)$$

und erhalten durch Anwenden von (3.44c) und (3.45)

$$\bar{E} = \frac{1}{N_S} \left[\sum_i \frac{U}{2} n_L^2 + \sum_{i \in M} \frac{U}{2} (n_L + 1)^2 + \sum_i \left(\frac{U}{2} \bar{n} - \mu \bar{n} \right) \right] \quad . \quad (3.48)$$

Da die Summen nun unabhängig von i sind, verwenden wir (3.46) und erhalten:

$$\bar{E} = \frac{U}{2} (\bar{n}^2 - \bar{n}) - \mu \bar{n} + \frac{N_M}{N_S} - \left(\frac{N_M}{N_S} \right)^2 \quad . \quad (3.49)$$

Im Grenzfall $N_M = 0$ sind alle Gitterplätze mit $n = \bar{n} = n_L$ Teilchen besetzt, sodass diese Formel in (3.23) mit $\psi = 0$ übergeht. Im Grenzfall $N_M = N_S$ erhalten wir dasselbe, nur ist hier die Teilchenzahl $n = \bar{n} = n_M$.

Das Ergebnis (3.49) ist in Abbildung 3.3 dargestellt. Wir erkennen, dass bei nicht-ganzzahligen Teilchendichten das chemische Potential stets die nächst kleinere ganze Zahl multipliziert mit der Onsite-Energie ist. Hier entsteht jetzt das Problem, dass wir bei ganzzahligem μ/U gar nicht wissen, welche mittlere Teilchenzahl dem zugeordnet ist. Dies wird im Inlet von Abbildung 3.2 durch die senkrechte Linie bei den ganzen Zahlen verdeutlicht.

3.3.3 Phasenübergang

In Abschnitt 3.1 haben wir hergeleitet, dass sich die Lage der Phasengrenze aus der Bedingung $a_2 = 0$ ergibt. Mit (3.41) erhalten wir [31]:

$$\frac{Jz}{U} = \frac{(n - \frac{\mu}{U})(1 - n + \frac{\mu}{U})}{1 + \frac{\mu}{U}} \quad , \quad (3.50)$$

was in Abbildung 3.4 dargestellt ist. Außerdem müssen wir noch zeigen, dass die Bedingung $a_4 > 0$ mit (3.42) erfüllt ist. Nach (3.43) gilt zunächst:

$$\begin{aligned} E_n - E_{n-1} &= U(n-1) - \mu < 0 \\ E_n - E_{n+1} &= \mu - Un < 0 \quad , \end{aligned}$$

sodass

$$E_{n-1} - E_n > 0 \quad \text{und} \quad E_{n+1} - E_n > 0$$

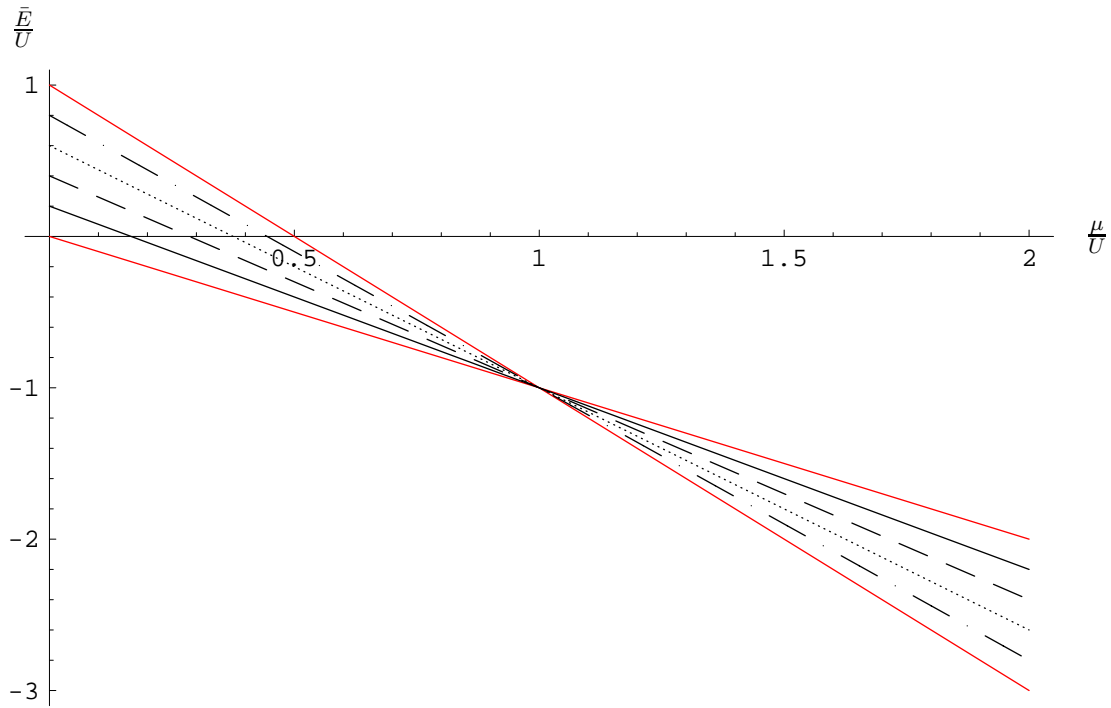


Abbildung 3.3: Energiedichte für verschieden rationale Teilchendichten $\bar{n} = 1.2$ (durchgezogene Linie), $\bar{n} = 1.4$ (gestrichelt), $\bar{n} = 1.6$ (gepunktet) und $\bar{n} = 1.8$ (Strich-Punkt Linie). Begrenzt werden diese von den Graphen für $\bar{n} = 1$ und $\bar{n} = 2$ dargestellt durch die roten Linien.

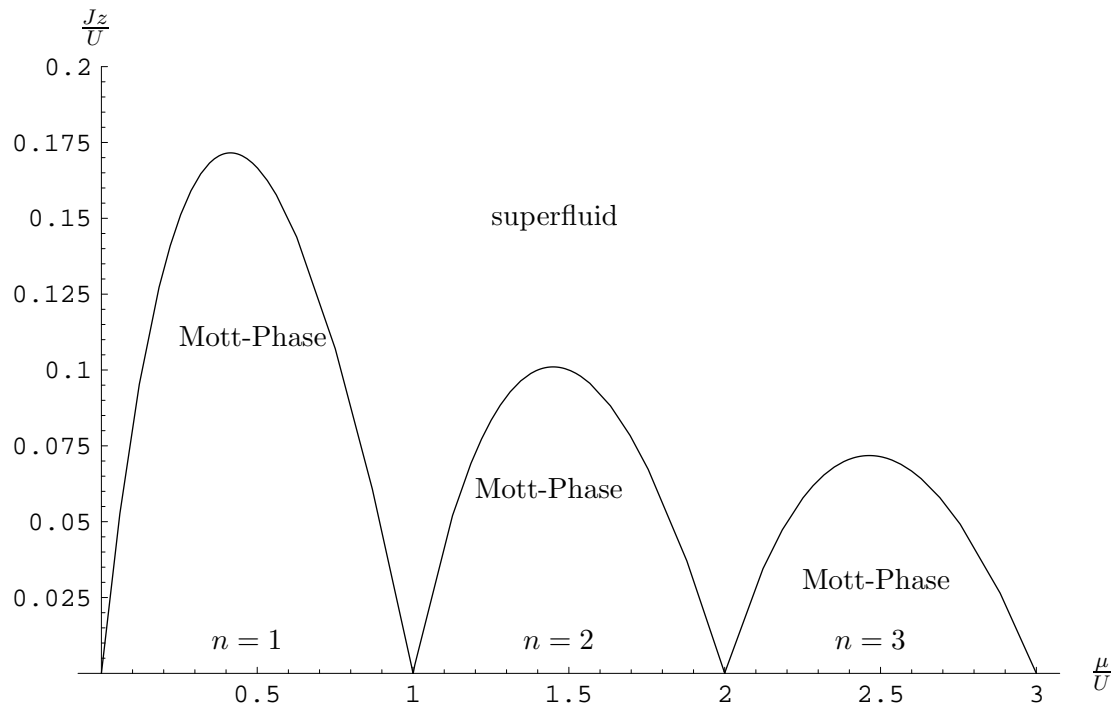


Abbildung 3.4: Phasengrenze für $T = 0$.

gilt. Außerdem folgen aus

$$\begin{aligned} E_{n-2} - E_n &= 2(E_{n-1} - E_n) + U > 0 \quad , \\ E_{n+2} - E_n &= 2(E_{n+1} - E_n) + U > 0 \end{aligned}$$

die Ungleichungen

$$\begin{aligned} \frac{n+1}{E_{n+1} - E_n} - \frac{n+2}{E_{n+2} - E_n} &= \frac{n(E_{n+1} - E_n) + (n+1)U}{(E_{n+1} - E_n)(E_{n+2} - E_n)} > 0 \quad , \\ \frac{n}{E_{n-1} - E_n} - \frac{n-1}{E_{n-2} - E_n} &= \frac{(n+1)(E_{n-1} - E_n) + nU}{(E_{n-1} - E_n)(E_{n-2} - E_n)} > 0 \quad . \end{aligned}$$

Damit ist a_4 aus (3.42) die Summe bzw. das Produkt positiver Zahlen und somit selbst positiv. Nun sind alle für den Phasenübergang zweiter Ordnung notwendigen Bedingungen aus Abschnitt 3.1 erfüllt und wir haben endlich gezeigt, dass tatsächlich solch ein Phasenübergang vorliegt.

Schauen wir uns das Phasendiagramm in Abbildung 3.4 etwas genauer an. Zuerst einmal müssen wir klären, wie es zu den einzelnen Mott-Lobes mit $n = 1$, $n = 2$, etc. kommt. Da jedes ψ mit einem J assoziiert ist, entspricht unsere $J = 0$ Betrachtung des vorangegangenen Abschnittes 3.3.2 automatisch auch einer $\psi = 0$ Betrachtung. Dies gilt aber gerade in der Mott-Isolator Phase und daher können wir dort die Teilchenzahlen mit Hilfe von Abbildung 3.2 bestimmen und beim Plotten der Phasengrenze in der Formel (3.50) genau den Wert für n einsetzen, der zu dem jeweiligen Wert von μ gehört.

Desweiteren sind die Nullstellen der Phasengrenzen interessant. Diese liegen genau an den Stellen, bei denen μ/U ganzzahlig ist. Folglich tritt für ganzzahliges μ/U keine Mott-Phase auf. Damit löst sich das Problem von Abschnitt 3.3.2 bei nichtganzzahligen mittleren Besetzungszahlen auf. Da an diesen Stellen keine Mott-Phase vorliegt, ist unsere $n(\mu)$ Beziehung nicht anwendbar, stattdessen tritt diejenige der superfluiden Phase auf. Es stellt sich also die Frage, warum wir bei nichtganzzahligen mittleren Besetzungen keine Mott-Phase erhalten. Dies lässt sich anschaulich verstehen: Stellen wir uns ein Gitter vor, in dem jeder Platz mit einem Boson besetzt ist und genau ein Platz ein weiteres Boson enthält. Dann kann dieses Boson ohne Energieaufwand von einem Platz zum nächsten hüpfen und so eine langreichweitige Phasenkorrelation zwischen den Gitterplätzen aufbauen. Dies ist aber gerade eine charakteristische Eigenschaft der superfluiden Phase.

3.3.4 Monte-Carlo-Simulation

Neben der hier diskutierten Molekularfeldtheorie des Bose-Hubbard-Modells kann man das Problem auch numerisch lösen. Dies geschieht durch Quanten-Monte-Carlo-Simulationen, bei denen der ursprüngliche Bose-Hubbard-Hamiltonian (2.1) verwendet wird. Daher können wir den durch die Molekularfeldnäherung bedingten Fehler dadurch abschätzen, dass wir unser Ergebnis mit einem durch Quanten-Monte-Carlo-Simulation erhaltenen vergleichen. Hierzu verwenden wir die Daten aus der Referenz [36] und stellen diese in Abbildung 3.5 dar.

Wir sehen, dass unsere Näherung im gesamten μ -Bereich zu klein ist. Besonders stark ist der Unterschied an der Spitze, wo das analytische Ergebnis um etwa 10% zu klein ist.

3.4 Bose-Hubbard-Modell für $T > 0$

Wir wollen jetzt das Verhalten des Systems bei Temperaturen oberhalb des absoluten Nullpunktes im Rahmen der Molekularfeldtheorie bestimmen. Dabei wollen wir thermische Anregungen in höhere Bänder, die eine stärkere Bewegung der Bosonen bewirken würden, nicht berücksichtigen. Daher sind

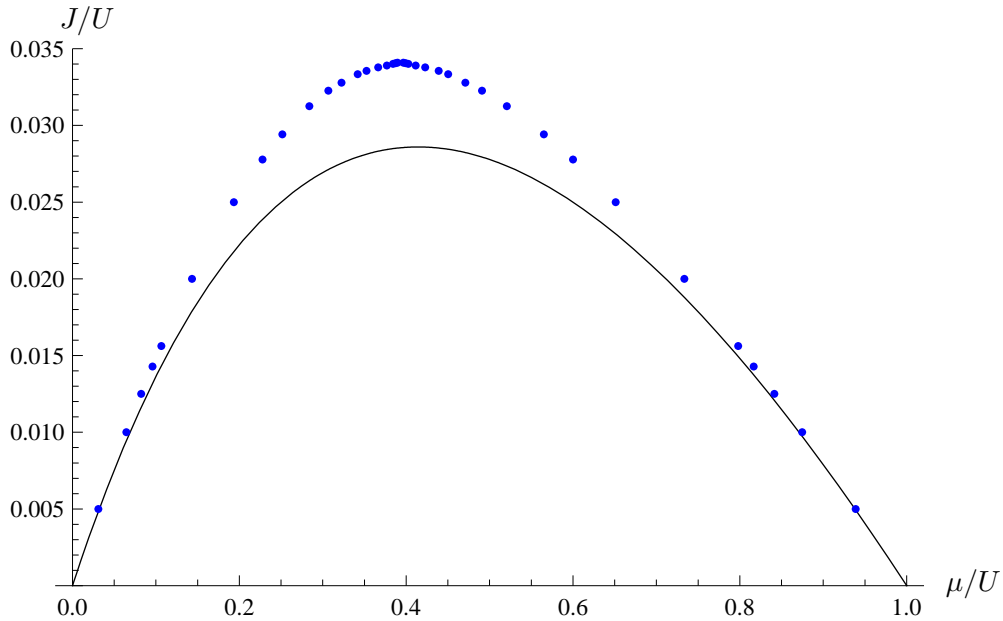


Abbildung 3.5: Vergleich der Phasengrenze für $n = 1$ aus Molekularfeldtheorie (schwarze Linie) und Monte-Carlo Simulation (blaue Punkte) [36].

alle nachfolgenden Betrachtungen nur im Bereich sehr kleiner Temperaturen gültig. Die Ensemble-Theorie gibt uns die grundlegenden Formeln für das großkanonische Potential

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z} \quad (3.51)$$

mit der großkanonischen Zustandssumme in Molekularfeldnäherung

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \quad (3.52)$$

3.4.1 Wechselwirkungsbild

Die Zeitentwicklung der Quantenmechanik [37,38] kann in drei verschiedenen Bildern dargestellt werden: dem Schrödinger-Bild, dem Heisenberg-Bild und dem Wechselwirkungsbild, das auch Dirac-Bild genannt wird. Im Schrödinger-Bild steckt die gesamte Zeitabhängigkeit in den Zustandsvektoren, während die Observablen konstant sind. Im Heisenberg-Bild hingegen sind die Zustandsvektoren konstant, während die Observablen zeitabhängig sind. Im Folgenden werden wir das Wechselwirkungsbild verwenden. Dieses ist eine Mischung von Schrödinger- und Heisenberg-Bild. Dazu benötigen wir einen Hamiltonoperator, der sich in der Form $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ darstellen lässt. Dann wird die Zeitentwicklung des freien Systems \hat{H}_0 durch die Observablen beschrieben und der Beitrag der Störung \hat{V} durch die Zustände aufgefangen. Beim Übergang zwischen den Bildern ist darauf zu achten, dass Norm und Erwartungswerte erhalten bleiben. Desweiteren führen wir eine Wick-Rotation $t = -i\tau$ durch, um von der Real- zur Imaginärzeitentwicklung überzugehen. Damit kommen wir von der Dynamik von Quantensystemen zur Quantenstatistik.

Wir wollen die Vektoren und Operatoren im Schrödinger-Bild ohne Index schreiben: $|\Psi\rangle$, \hat{A} . Die Zeitentwicklung im Schrödinger-Bild ergibt sich aus der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung. Die Wick-Rotation angewandt auf die Schrödinger-Gleichung führt zu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle \quad \rightarrow \quad -\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} |\Psi(\tau)\rangle = \hat{H} |\Psi(\tau)\rangle \quad (3.53)$$

Mit dem Ansatz für die Zeitenwicklung $|\Psi(\tau)\rangle = U(\tau, \tau_0)|\Psi(\tau_0)\rangle$ und der Zeitunabhängigkeit der Hamiltonoperators ($\partial\hat{H}/\partial\tau = 0$) gilt für den Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(\tau, \tau_0) = e^{\hat{H}(\tau_0 - \tau)/\hbar} \quad . \quad (3.54)$$

Der Zeitentwicklungoperator (3.54) besitzt die Eigenschaft

$$\hat{U}^{-1}(\tau, \tau_0) = \hat{U}(\tau_0, \tau) \quad . \quad (3.55)$$

Im Wechselwirkungsbild versehen wir die Größen mit einem Index D: $|\Psi_D\rangle$, \hat{A}_D . Den Übergang vom Schrödinger- zum Wechselwirkungsbild erhalten wir durch folgenden Überlegungen:

- Synchronisation zum Anfangszeitpunkt τ_0

$$|\Psi_D(\tau_0)\rangle = |\Psi(\tau_0)\rangle \quad , \quad (3.56)$$

- Übergang von Schrödinger- zum Wechselwirkungsbild

$$|\Psi_D(\tau)\rangle = \hat{U}_0(\tau_0, \tau)|\Psi(\tau)\rangle \quad (3.57)$$

- und der Zeitenwicklung im Wechselwirkungsbild

$$|\Psi_D(\tau)\rangle = \hat{U}_D(\tau, \tau')|\Psi_D(\tau')\rangle \quad . \quad (3.58)$$

Dabei ist der freie Zeitentwicklungoperator $\hat{U}_0(\tau, \tau')$ in Analogie zu (3.54) gegeben durch:

$$\hat{U}_0(\tau, \tau') = e^{\hat{H}_0(\tau' - \tau)/\hbar} \quad . \quad (3.59)$$

Aus dem Erhalt der Normierung in beiden Bildern

$$1 = \langle\Psi(\tau)|\Psi(\tau)\rangle = \langle\Psi_D(\tau)|\Psi_D(\tau)\rangle \quad (3.60)$$

erhalten wir die Zeitenwicklung der Kets zu:

$$\langle\Psi_D(\tau)| = \langle\Psi(\tau)|\hat{U}_0^{-1}(\tau_0, \tau) \quad . \quad (3.61)$$

Verwenden wir dies und den Erhalt der Erwartungswerte, so gilt:

$$\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \langle\Psi_D(\tau)|\hat{U}_0(\tau_0, \tau)\hat{A}\hat{U}_0^{-1}(\tau_0, \tau)|\Psi_D(\tau)\rangle = \langle\Psi_D(\tau)|\hat{A}_D(\tau)|\Psi_D(\tau)\rangle \quad ,$$

woraus für die Operatoren folgt:

$$\hat{A}_D(\tau) = \hat{U}_0(\tau_0, \tau)\hat{A}\hat{U}_0^{-1}(\tau_0, \tau) \quad . \quad (3.62)$$

Außerdem folgt aus (3.57) und der Zeitenwicklung im Schrödinger-Bild:

$$|\Psi_D(\tau)\rangle = \hat{U}_0(\tau_0, \tau)|\Psi(\tau)\rangle = \hat{U}_0^{-1}(\tau, \tau_0)\hat{U}(\tau, \tau')|\Psi(\tau')\rangle = \hat{U}_0^{-1}(\tau, \tau_0)\hat{U}(\tau, \tau')\hat{U}_0(\tau', \tau_0)|\Psi_D(\tau')\rangle \quad . \quad (3.63)$$

Mit (3.58) können wir hieraus eine Darstellung des Diracschen Zeitentwicklungsoperators durch Schrödingersche Zeitentwicklungsoperatoren herleiten:

$$\hat{U}_D(\tau, \tau') = \hat{U}_0^{-1}(\tau, \tau_0)\hat{U}(\tau, \tau')\hat{U}_0(\tau', \tau_0) \quad . \quad (3.64)$$

Jetzt betrachten wir noch die Zeitableitung eines Zustandes (3.57):

$$\frac{\partial |\Psi_D(\tau)\rangle}{\partial \tau} = \frac{\partial \hat{U}_0(\tau_0, \tau)}{\partial \tau} |\Psi(\tau)\rangle + \hat{U}_0(\tau_0, \tau) \frac{\partial |\Psi(\tau)\rangle}{\partial \tau} .$$

Wir führen die Ableitung des Zeitentwicklungoperators (3.59) explizit aus, ersetzen die Zeitableitung des Zustandes durch (3.57) und erhalten:

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\Psi_D(\tau)\rangle}{\partial \tau} &= \left[\hat{U}_0^{-1}(\tau, \tau_0) \frac{1}{\hbar} \hat{H}_0 + \hat{U}_0^{-1}(\tau, \tau_0) \frac{-1}{\hbar} \hat{H} \right] |\Psi(\tau)\rangle \\ &= \frac{-1}{\hbar} \hat{U}_0^{-1}(\tau, \tau_0) \hat{V} \hat{U}_0(\tau, \tau_0) \hat{U}_0(\tau_0, \tau) |\Psi(\tau)\rangle . \end{aligned} \quad (3.65)$$

Dann gehen wir mit (3.58) und (3.62) ins Wechselwirkungsbild über und erhalten:

$$\frac{\partial |\Psi_D(\tau)\rangle}{\partial \tau} = \frac{-1}{\hbar} \hat{V}_D(\tau) |\Psi_D(\tau)\rangle . \quad (3.66)$$

Unter Verwendung von (3.57) folgt außerdem:

$$\hbar \frac{d}{d\tau} \hat{U}_D(\tau, \tau_0) = -\hat{V}_D(\tau) \hat{U}_D(\tau, \tau_0) . \quad (3.67)$$

Dies integrieren wir

$$\hat{U}_D(\tau, \tau_0) = 1 + \frac{-1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \hat{V}_D(\tau_1) \hat{U}_D(\tau_1, \tau_0) , \quad (3.68)$$

und durch Iteration erhalten wir die Dyson-Reihe:

$$\begin{aligned} U_D(\tau, \tau_0) &= 1 + \frac{-1}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \hat{V}_D(\tau_1) + \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^2 \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau_0}^{\tau_1} d\tau_2 \hat{V}_D(\tau_1) \hat{V}_D(\tau_2) + \dots \\ &\dots + \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^n \int_{\tau_0}^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau_0}^{\tau_1} dt_2 \dots \int_{\tau_0}^{\tau_{n-1}} d\tau_n \hat{V}_D(\tau_1) \hat{V}_D(\tau_2) \dots \hat{V}_D(\tau_n) + \dots \end{aligned} \quad (3.69)$$

3.4.2 Zustandssumme

Nun benutzen wir das Wechselwirkungsbild, um die großkanonische Zustandssumme zu berechnen. Für den Hamiltonoperator (3.18) benutzen wir die Zerlegung $\hat{H}_{MF} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ mit $\hat{V} = -Jz\psi(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger)$ wie schon in Abschnitt 3.3. Wir nutzen nun die folgende triviale Umformung der Zustandssumme (3.52):

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{MF}} \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} e^{\hbar \beta \hat{H}_0 / \hbar} e^{-(\hbar \beta - 0) \hat{H}_{MF} / \hbar} e^{-\hat{H}_0 \cdot 0 / \hbar} \right\} , \end{aligned} \quad (3.70)$$

um dann nach (3.64) zum Zeitentwicklungoperator des Dirac-Bildes überzugehen:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{U}_D(\hbar \beta, 0) \right\} . \quad (3.71)$$

Nun setzen wir für $\hat{U}_D(\hbar\beta, 0)$ die Dyson-Reihe (3.69) ein:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_0} \left[1 + \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \hat{V}_D(\tau) + \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \hat{V}_D(\tau) \hat{V}_D(\tau_1) + \dots \right] \right\} . \quad (3.72)$$

Da die Spur unabhängig von der Basis ist, können wir zum Berechnen von (3.72) die Besetzungsbasis $|n\rangle$ wählen. Dabei brechen wir wie schon im Fall $T = 0$ nach der 4. Ordnung ab. Da Zustände mit verschiedenen Besetzungszahlen orthogonal zueinander sind, können nur Beiträge mit gleichvielen Auf- wie Absteigeoperatoren bestehen bleiben, während alle anderen verschwinden. Dieses Verhalten haben wir schon im Fall verschwindender Temperatur gesehen, wo zum Beispiel die erste und dritte Ordnung der Störungsreihe verschwanden. Es folgt also:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} = & \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \langle n | \left\{ 1 + \frac{J^2 z^2 \psi^2}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \left[\hat{a}_D(\tau) \hat{a}_D^\dagger(\tau_1) + \hat{a}_D^\dagger(\tau) \hat{a}_D(\tau_1) \right] \right. \\ & + \frac{J^4 z^4 \psi^4}{\hbar^4} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \left[\hat{a}_D(\tau) \hat{a}_D(\tau_1) \hat{a}_D^\dagger(\tau_2) \hat{a}_D^\dagger(\tau_3) + \hat{a}_D(\tau) \hat{a}_D^\dagger(\tau_1) \hat{a}_D(\tau_2) \hat{a}_D^\dagger(\tau_3) \right. \\ & + \hat{a}_D(\tau) \hat{a}_D^\dagger(\tau_1) \hat{a}_D^\dagger(\tau_2) \hat{a}_D(\tau_3) + \hat{a}_D^\dagger(\tau) \hat{a}_D(\tau_1) \hat{a}_D(\tau_2) \hat{a}_D^\dagger(\tau_3) \\ & \left. \left. + \hat{a}_D^\dagger(\tau) \hat{a}_D(\tau_1) \hat{a}_D^\dagger(\tau_2) \hat{a}_D(\tau_3) + \hat{a}_D^\dagger(\tau) \hat{a}_D^\dagger(\tau_1) \hat{a}_D(\tau_2) \hat{a}_D(\tau_3) \right] + \dots \right\} |n\rangle . \end{aligned} \quad (3.73)$$

Mit den Definitionen

$$\mathcal{I}_{uv} = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \langle n | \hat{u} \hat{v} | n \rangle , \quad (3.74)$$

$$\mathcal{I}_{uvwx} = \int_0^\tau d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \langle n | \hat{u} \hat{v} \hat{w} \hat{x} | n \rangle \quad (3.75)$$

sind die einzelnen Summanden in (3.73) nach Ausführen der Spur von der Form:

$$\mathcal{I}_{..} = \gamma \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{a\tau} \int_0^\tau d\tau_1 e^{b\tau_1} \quad (3.76)$$

beziehungsweise für die vierten Ordnung

$$\mathcal{I}_{....} = \gamma \int_0^\tau d\tau e^{a\tau} \int_0^\tau d\tau_1 e^{b\tau_1} \int_0^{\tau_1} d\tau_2 e^{c\tau_2} \int_0^{\tau_2} d\tau_3 e^{d\tau_3} . \quad (3.77)$$

Diese Integrale lassen sich elementar iterativ ausrechnen:

$$\mathcal{I}_{\dots} = \gamma \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{a\tau} \int_0^{\tau} d\tau_1 e^{b\tau_1} \int_0^{\tau_1} d\tau_2 e^{c\tau_2} \left[\frac{e^{d\tau_2} - 1}{d} \right] \quad (3.78)$$

$$= \gamma \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{a\tau} \int_0^{\tau} d\tau_1 e^{b\tau_1} \left[\frac{e^{(c+d)\tau_1} - 1}{(c+d)d} - \frac{e^{c\tau_1} - 1}{cd} \right] \quad (3.79)$$

$$= \gamma \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{a\tau} \left[\frac{e^{(b+c+d)\tau} - 1}{(b+c+d)(c+d)d} - \frac{e^{b\tau} - 1}{b(c+d)d} - \frac{e^{(b+c)\tau} - 1}{(b+c)cd} + \frac{e^{b\tau} - 1}{bcd} \right] \quad (3.80)$$

$$= \gamma \left[\frac{e^{(a+b+c+d)\hbar\beta} - 1}{(a+b+c+d)(b+c+d)(c+d)d} - \frac{e^{a\hbar\beta} - 1}{a(b+c+d)(c+d)d} - \frac{e^{(a+b)\hbar\beta} - 1}{(a+b)b(c+d)d} \right. \\ \left. + \frac{e^{a\hbar\beta} - 1}{ab(c+d)d} - \frac{e^{(a+b+c)\hbar\beta} - 1}{(a+b+c)(b+c)cd} + \frac{e^{a\hbar\beta} - 1}{a(b+c)cd} + \frac{e^{(a+b)\hbar\beta} - 1}{(a+b)bcd} - \frac{e^{a\hbar\beta} - 1}{abcd} \right] . \quad (3.81)$$

Aus dieser Rechnung lässt sich problemlos das Resultat der zweiten Ordnung aus (3.79) extrahieren:

$$\mathcal{I}_{..} = \gamma \left[\frac{e^{(a+b)\hbar\beta} - 1}{(a+b)b} - \frac{e^{a\hbar\beta} - 1}{ab} \right] . \quad (3.82)$$

Dabei ist zwar gegeben, dass für die Koeffizienten selber $a, b, c, d \neq 0$ gilt, bei Summen wie zum Beispiel $a + b$ hingegen gilt dies nicht immer. Es können dann Terme auftreten, deren Zähler und Nenner verschwinden. In diesen Fällen können wir durch einen Grenzübergang $\lim_{a+b \rightarrow 0}$ zu einem analytisch verwendbaren Ausdruck kommen.

Durch Ausführen der Spur bestimmen wir die Koeffizienten γ , a und b und bei der vierten Ordnung zusätzlich c und d . Für die zweite Ordnung für $\mathcal{I}_{a^\dagger a}$ ergibt sich:

$$\gamma = n, \quad a = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar}, \quad b = \frac{E_{n-1} - E_n}{\hbar}, \quad (3.83)$$

sodass offensichtlich $a + b = 0$ gilt. Daher brauchen wir folgenden Grenzübergang, den wir nach der Regel von L'Hospital bestimmen:

$$\lim_{a+b \rightarrow 0} \frac{e^{(a+b)\hbar\beta} - 1}{(a+b)b} = \frac{\hbar\beta}{b} . \quad (3.84)$$

Setzen wir dies in (3.81) ein, so erhalten wir:

$$\mathcal{I}_{a^\dagger a} = \frac{\hbar^2 n}{E_{n-1} - E_n} \left[\beta + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{E_{n-1} - E_n} \right] . \quad (3.85)$$

Ein analoges Vorgehen liefert uns:

$$\mathcal{I}_{aa^\dagger} = \frac{\hbar^2 (n+1)}{E_{n+1} - E_n} \left[\beta + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{E_{n+1} - E_n} \right] . \quad (3.86)$$

Auf die gleiche Art und Weise gehen wir in der vierten Ordnung vor. Hier erhalten wir für $\mathcal{I}_{a^\dagger a^\dagger a a}$:

$$\gamma = n(n-1), \quad a = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar}, \quad b = \frac{E_{n-1} - E_{n-2}}{\hbar}, \quad c = \frac{E_{n-2} - E_{n-1}}{\hbar}, \quad d = \frac{E_{n-1} - E_n}{\hbar} . \quad (3.87)$$

Auch hier haben wir wieder verschwindende Koeffizientensummen. So ist $a + b + c + d = 0$, wofür wir

$$\lim_{a+b+c+d \rightarrow 0} \frac{e^{(a+b+c+d)\hbar\beta} - 1}{(a+b+c+d)(b+c+d)(c+d)d} = \frac{\hbar\beta}{(b+c+d)(c+d)d} \quad (3.88)$$

brauchen und ebenso gilt $b + c = 0$. Hierfür berechnen wir:

$$\lim_{b+c \rightarrow 0} -\frac{e^{(a+b+c)\hbar\beta} - 1}{(a+b+c)(b+c)cd} + \frac{e^{a\hbar\beta} - 1}{a(b+c)cd} = -\frac{\hbar\beta e^{a\hbar\beta}}{acd} + \frac{e^{a\hbar\beta} - 1}{a^2cd} \quad (3.89)$$

Dies eingesetzt in Formel (3.81) liefert:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{a^\dagger a^\dagger a a} = & \hbar^4 n(n-1) \left\{ \beta \left[\frac{1}{(E_{n-2} - E_n)(E_{n-1} - E_n)^2} + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})}}{(E_{n-2} - E_{n-1})(E_{n-1} - E_n)^2} \right] \right. \\ & + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{(E_{n-2} - E_n)(E_{n-1} - E_n)^3} + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{(E_{n-2} - E_{n-1})(E_{n-1} - E_n)^3} \\ & \left. + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{(E_{n-2} - E_{n-1})^2(E_{n-2} - E_n)^2} - \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-2})} - 1}{(E_{n-2} - E_{n-1})^2(E_{n-2} - E_n)(E_{n-1} - E_n)} \right\} \quad (3.90) \end{aligned}$$

Für $\mathcal{I}_{a^\dagger a a^\dagger a}$ erhalten wir mit $\gamma = n^2$, $a = E_n - E_{n-1}$, $b = E_{n-1} - E_n$, $c = E_n - E_{n-1}$ und $d = E_{n-1} - E_n$:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{a^\dagger a a^\dagger a} = & \frac{\hbar^4 n(n+1)}{E_{n-1} - E_n} \left[\frac{\beta^2}{2(E_{n+1} - E_n)} - \frac{\beta}{(E_{n+1} - E_n)^2} - \frac{\beta}{(E_{n+1} - E_n)(E_{n-1} - E_n)} \right. \\ & \left. - \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+1} - E_n)^3} - \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{(E_{n-1} - E_n)^2(E_{n+1} - E_{n-1})} + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+1} - E_n)^2(E_{n+1} - E_{n-1})} \right] \quad (3.91) \end{aligned}$$

Völlig analog ergeben sich:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{a a^\dagger a^\dagger a} = & \frac{\hbar^4 n(n+1)}{E_{n-1} - E_n} \left[\frac{\beta^2}{2(E_{n+1} - E_n)} - \frac{\beta}{(E_{n+1} - E_n)^2} - \frac{\beta}{(E_{n+1} - E_n)(E_{n-1} - E_n)} \right. \\ & \left. - \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+1} - E_n)^3} - \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{(E_{n-1} - E_n)^2(E_{n+1} - E_{n-1})} + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+1} - E_n)^2(E_{n+1} - E_{n-1})} \right] \quad (3.92) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{a^\dagger a a a^\dagger} = & \frac{\hbar^4 n(n+1)}{E_{n+1} - E_n} \left[\frac{\beta^2}{2(E_{n-1} - E_n)} - \frac{\beta}{(E_{n-1} - E_n)^2} - \frac{\beta}{(E_{n+1} - E_n)(E_{n-1} - E_n)} \right. \\ & \left. - \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{(E_{n-1} - E_n)^3} - \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+1} - E_n)^2(E_{n-1} - E_{n+1})} + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{(E_{n-1} - E_n)^2(E_{n-1} - E_{n+1})} \right] \quad (3.93) \end{aligned}$$

$$\mathcal{I}_{a a^\dagger a a^\dagger} = \frac{\hbar^4 (n+1)^2}{(E_{n+1} - E_n)^2} \left[\frac{\beta^2}{2} - \beta \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} + 2}{E_{n+1} - E_n} - 3 \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+1} - E_n)^2} \right] \quad (3.94)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{a a a^\dagger a^\dagger} = & \hbar^4 (n+1)(n+2) \left\{ \beta \left[\frac{1}{(E_{n+2} - E_n)(E_{n+1} - E_n)^2} + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})}}{(E_{n+2} - E_{n+1})(E_{n+1} - E_n)^2} \right] \right. \\ & + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+2} - E_n)(E_{n+1} - E_n)^3} + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+2} - E_{n+1})(E_{n+1} - E_n)^3} \\ & \left. + \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+2} - E_{n+1})^2(E_{n+2} - E_n)^2} - \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+2})} - 1}{(E_{n+2} - E_{n+1})^2(E_{n+2} - E_n)(E_{n+1} - E_n)} \right\} \quad (3.95) \end{aligned}$$

Mit den so berechneten Koeffizienten können wir die Zustandssumme darstellen als:

$$\mathcal{Z} = Z_0 + J^2 Z_2 + J^4 Z_4 + \dots \quad (3.96)$$

Dabei ergeben sich die einzelnen Taylorkoeffizienten zu:

$$Z_0 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \quad , \quad (3.97)$$

$$Z_2 = \frac{\psi^2 z^2}{\hbar^2} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} (\mathcal{I}_{a^\dagger a} + \mathcal{I}_{aa^\dagger}) \quad , \quad (3.98)$$

$$Z_4 = \frac{\psi^4 z^4}{\hbar^4} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} (\mathcal{I}_{a^\dagger a^\dagger aa} + \mathcal{I}_{a^\dagger aa^\dagger a} + \mathcal{I}_{aa^\dagger a^\dagger a} + \mathcal{I}_{a^\dagger aaa^\dagger} + \mathcal{I}_{aa^\dagger aa^\dagger a} + \mathcal{I}_{aaa^\dagger a^\dagger}) \quad . \quad (3.99)$$

Mit (3.85) und (3.86) erhalten wir:

$$Z_2 = \psi^2 z^2 \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \left[\frac{\beta n}{E_{n-1} - E_n} + \frac{\beta(n+1)}{E_{n+1} - E_n} + \frac{n [e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1]}{(E_{n-1} - E_n)^2} + \frac{(n+1) [e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1]}{(E_{n+1} - E_n)^2} \right] \quad . \quad (3.100)$$

Die Terme ohne β -Faktor lassen sich zusammenfassen:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \left[n \frac{e^{\beta(E_n - E_{n-1})} - 1}{(E_{n-1} - E_n)^2} + (n+1) \frac{e^{\beta(E_n - E_{n+1})} - 1}{(E_{n+1} - E_n)^2} \right] \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} n \frac{e^{-\beta E_{n-1}} - e^{-\beta E_n}}{(E_{n-1} - E_n)^2} + \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{e^{-\beta E_{n+1}} - e^{-\beta E_n}}{(E_{n+1} - E_n)^2} \quad . \end{aligned}$$

Durch Verschieben des Summationindex erhalten wir:

$$= \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_{n+1}}}{(E_n - E_{n+1})^2} + \sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{e^{-\beta E_{n+1}} - e^{-\beta E_n}}{(E_{n+1} - E_n)^2} = 0 \quad .$$

Damit vereinfacht sich (3.100) zu:

$$Z_2 = \psi^2 z^2 \beta \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \left(\frac{n}{E_{n-1} - E_n} + \frac{n+1}{E_{n+1} - E_n} \right) \quad . \quad (3.101)$$

Durch analoges Vorgehen können wir auch bei Z_4 einen Großteil der Terme zusammenfassen, sodass sich insgesamt ergibt:

$$\begin{aligned} Z_4 = & \psi^4 z^4 \left\{ \frac{\beta^2}{2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{n}{E_{n-1} - E_n} + \frac{n+1}{E_{n+1} - E_n} \right)^2 e^{-\beta E_n} \right. \\ & - \beta \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{n+1}{(E_{n+1} - E_n)^2} \left(\frac{n}{E_{n-1} - E_n} + \frac{n+1}{E_{n+1} - E_n} - \frac{n+2}{E_{n+2} - E_n} \right) \right. \\ & \left. \left. + \frac{n}{(E_{n-1} - E_n)^2} \left(\frac{n}{E_{n+1} - E_n} + \frac{n}{E_{n-1} - E_n} - \frac{n-1}{E_{n-2} - E_n} \right) \right] e^{-\beta E_n} \right\} \quad . \quad (3.102) \end{aligned}$$

Nun gehen wir nach (3.51) zum großkanonische Potential über:

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - \frac{1}{\beta} \ln \left[1 + \frac{J^2 Z_2}{Z_0} + \frac{J^4 Z_4}{Z_0} + O(J^6) \right] \quad . \quad (3.103)$$

Wir benutzen die Taylorentwicklung der Logarithmusfunktion:

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 - \frac{Z_2 J^2}{\beta Z_0} - \frac{Z_4 J^4}{\beta Z_0} + \frac{Z_2^2 J^4}{2\beta Z_0^2} + O(J^6) \quad . \quad (3.104)$$

Ein Koeffizientenvergleich mit einer Taylorreihe des großkanonischen Potentials entwickelt in Potenzen von J

$$\mathcal{F} = F_0 + J^2 F_2 + J^4 F_4 + \dots \quad (3.105)$$

liefert uns die Koeffizienten F_0 , F_2 und F_4 :

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \quad , \quad (3.106)$$

$$F_2 = -\frac{Z_2}{\beta Z_0} \quad , \quad (3.107)$$

$$F_4 = -\frac{Z_4}{\beta Z_0} + \frac{Z_2^2}{2\beta Z_0^2} \quad . \quad (3.108)$$

Nun wollen wir aber mit dem großkanonischen Potential den Phasenübergang ausrechnen und dazu brauchen wir eine Landau-Entwicklung nach dem Ordnungsparmeter ψ und nicht nach J . Also müssen wir die Reihe ein letztes mal umschreiben. Dies ist kein großes Problem, da zu jedem J ein ψ gehört. Lediglich die ψ -Abhängigkeit der Energien (3.23) muss noch berücksichtigt werden. Dazu führen wir ein:

$$E'_n = E_n - Jz\psi^2 = \frac{U}{2}n(n-1) - \mu n \quad . \quad (3.109)$$

Mit dieser Abkürzung erhalten wir:

$$\mathcal{F}(\psi) = a_0(T) + a_2(T)\psi^2 + a_4(T)\psi^4 + \dots \quad (3.110)$$

mit den Landau-Koeffizienten

$$a_0(T) = -k_B T \ln \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E'_n/k_B T} \quad , \quad (3.111)$$

$$a_2(T) = Jz - J^2 z^2 Z_0^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{U + \mu}{(\mu - Un)(U(n-1) - \mu)} \right] e^{-E'_n/k_B T} \quad , \quad (3.112)$$

$$\begin{aligned} a_4(T) = & J^4 z^4 \left(\frac{\beta}{2} \left\{ \left[Z_0^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{n}{E'_{n-1} - E'_n} + \frac{n+1}{E'_{n+1} - E'_n} \right) e^{-E'_n/k_B T} \right]^2 \right. \right. \\ & \left. \left. - Z_0^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{n}{E'_{n-1} - E'_n} + \frac{n+1}{E'_{n+1} - E'_n} \right)^2 e^{-E'_n/k_B T} \right\} \right. \\ & \left. + Z_0^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{n+1}{(E'_{n+1} - E'_n)^2} \left(\frac{n}{E'_{n-1} - E'_n} + \frac{n+1}{E'_{n+1} - E'_n} - \frac{n+2}{E'_{n+2} - E'_n} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{n}{(E'_{n-1} - E'_n)^2} \left(\frac{n}{E'_{n+1} - E'_n} + \frac{n}{E'_{n-1} - E'_n} - \frac{n-1}{E'_{n-2} - E'_n} \right) \right] e^{-\beta E'_n} \right) . \end{aligned} \quad (3.113)$$

Dabei verwenden wir die Zustandssumme des ungestörten Hamiltonians \hat{H}_0 bei $\psi = 0$, die definiert ist als:

$$Z_0 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-E'_n/k_B T} \quad . \quad (3.114)$$

Mit (3.41) und (3.42) können wir die Koeffizienten in Form von Erwartungswerten darstellen. Hierbei bedeuten die Erwartungswerte der nicht operatorwertigen Terme, dass wir die Spur bereits ausgeführt haben und somit gilt:

$$\langle \cdot \rangle_T = Z_0^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \cdot e^{-E'_n/k_B T} \quad . \quad (3.115)$$

Damit erhalten wir:

$$a_2(T) = \langle a_2 \rangle_T \quad , \quad (3.116)$$

$$a_4(T) = \langle a_4 \rangle_T + \frac{\beta}{2} (\langle a_2 \rangle_T^2 - \langle a_2^2 \rangle_T) \quad . \quad (3.117)$$

In dieser Form erkennt man leicht, dass die Koeffizienten für $T \rightarrow 0$ gegen die in Abschnitt 3.3 berechneten Werte laufen.

3.4.3 Teilchenzahl und Phasengrenze

Wir können jetzt analog zum Vorgehen im $T = 0$ Fall die großkanonische freie Energie des ungestörten Systems betrachten ($J = 0$), die wie schon im $T = 0$ Fall einer $\psi = 0$ Betrachtung entspricht. Wir können aber zusätzlich auch den thermischen Erwartungswert des Teilchenzahloperators n bestimmen, da gilt:

$$\langle n \rangle_T = Z_0^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-E'_n/k_B T} \quad . \quad (3.118)$$

In Abbildung 3.6 können wir sehen, wie bei abnehmender Temperatur unser ungestörtes großkanonisches Potential sich der Kurve annähert, die durch das Energieminimum in Abbildung 3.2 gegeben ist. Den selben Zusammenhang können wir auch zwischen Abbildung 3.8 und dem Inlet von Abbildung 3.2 feststellen. Die langsame Ausbildung der Stufen wird in Abbildung 3.7 noch verdeutlicht.

Die Bestimmung der Phasengrenze folgt dem gleichen Prinzip wie im Fall $T = 0$. Wir haben erneut die Landau-Bedingung $a_2(T) = 0$, sodass sich als Phasengrenze aus (3.116) ergibt:

$$Jz = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E'_n/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{U + \mu}{(\mu - Un)(U(n-1) - \mu)} e^{-E'_n/k_B T}} \quad . \quad (3.119)$$

Wie schon bei der Teilchenzahl und der ungestörten Energie wird auch hier der Übergang zum $T = 0$ Limes in Abbildung 3.9 erkennbar. Insbesondere ist zu sehen, dass bei endlichen Temperaturen die scharfe Grenze zwischen den einzelnen Mott-Lobes verschwimmt, sodass sich auch für nichtganzzahlige μ/U eine Mott-Phase ausbildet. Dies ist insofern kein Problem, da gemäß Abbildung 3.8 unser $n(\mu)$ eine invertierbare Funktion ist. Wie uns aus Referenz [17] bekannt ist, ist bei endlichen Temperaturen die Kompressibilität nicht mehr Null sondern nur noch exponentiell klein. Die Energielücke hingegen bleibt erhalten.

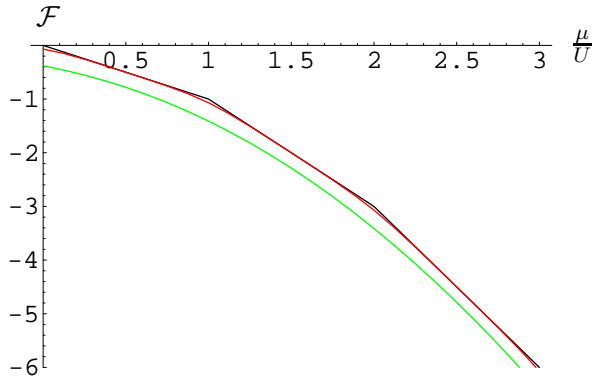


Abbildung 3.6: Großkanonisches Potential in der Mott-Phase für verschiedenen Temperaturen $k_B T/U = 0.001$ (schwarz), $k_B T/U = 0.1$ (rot), $k_B T/U = 0.5$ (grün).

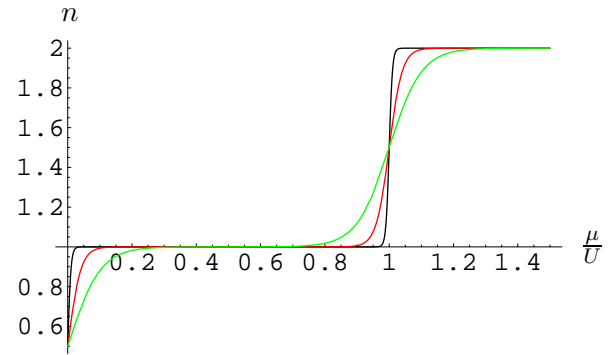


Abbildung 3.7: Ausschnitt der Abbildung 3.8 mit anderen Temperaturen $k_B T/U = 0.005$ (schwarz), $k_B T/U = 0.02$ (rot), $k_B T/U = 0.05$ (grün).

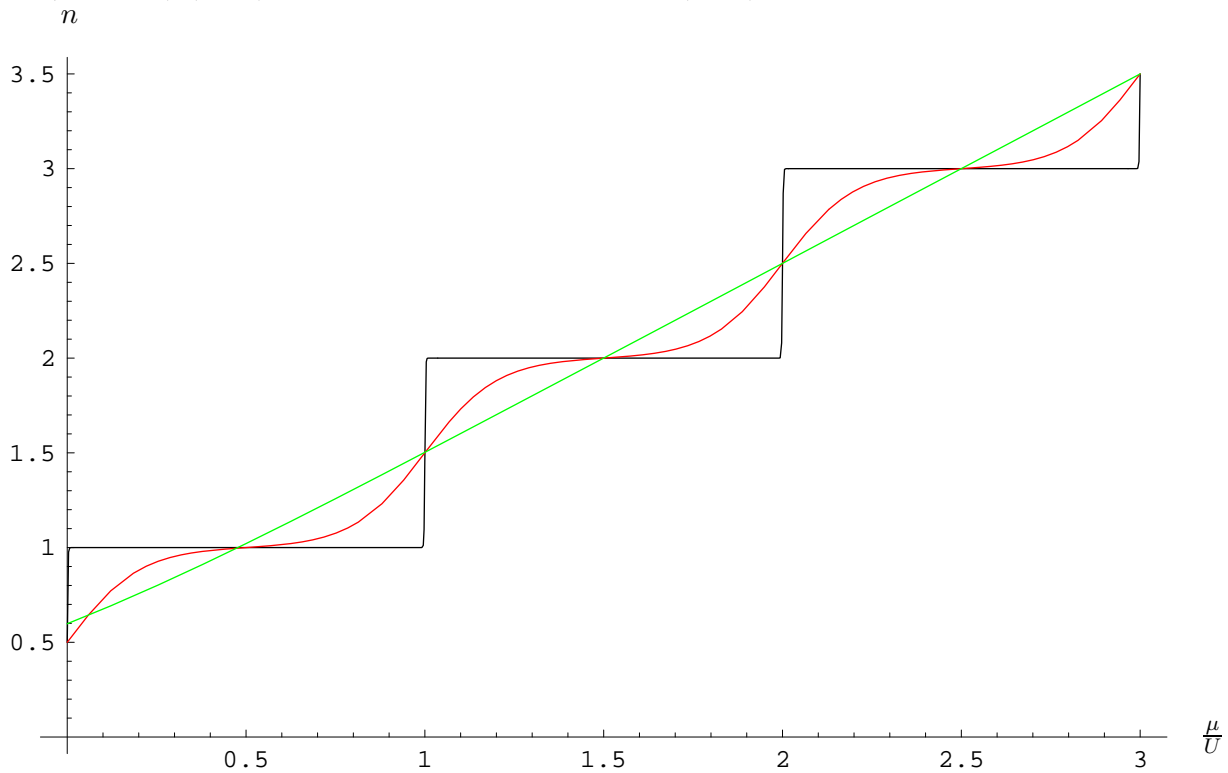


Abbildung 3.8: Teilchenzahl in der Mott-Phase für verschiedene Temperaturen $k_B T/U = 0.001$ (schwarz), $k_B T/U = 0.1$ (rot), $k_B T/U = 0.5$ (grün)

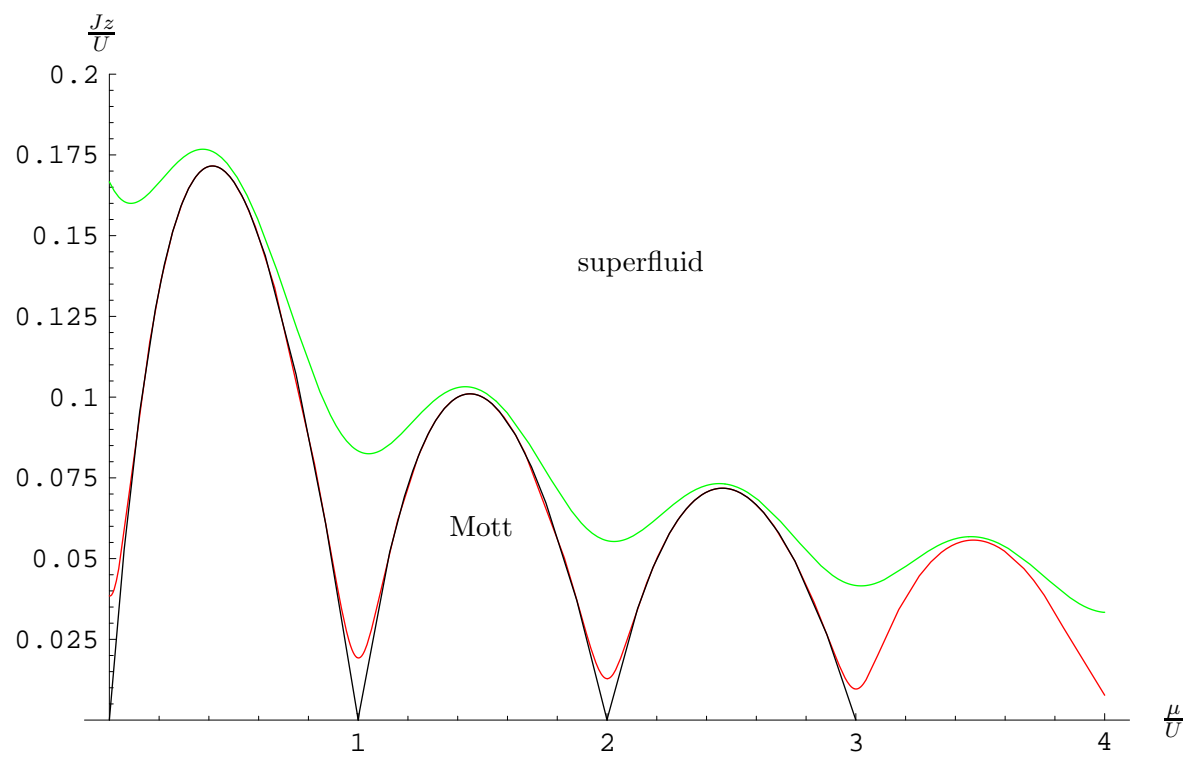


Abbildung 3.9: Phasengrenze für verschiedene Temperaturen: $k_B T/U = 0$ (schwarz); $k_B T/U = 0.02$ (rot); $k_B T/U = 0.1$ (grün).

Kapitel 4

Harmonische Falle

In allen Experimenten wird, um das Kondensat im Gitter festzuhalten, zusätzlich zum optischen Gitter eine magnetische Falle benutzt. Diese magnetische Falle führt zu einem zusätzlichen harmonischen Potential, sodass das externe Potential anstatt von (1.1) durch

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{x}^2 + \sum_{j=1}^3 V_0 \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x_j\right) \quad (4.1)$$

beschrieben wird. Dabei wird die hier auftretende Frequenz ω nach (1.3) berechnet.

4.1 Lokale-Dichte-Näherung

Strenggenommen wird durch das zusätzliche Potential die Translationsinvarianz zerstört, sodass unsere bisherigen Lösungsmethoden wie z.B. die Wannier-Zerlegung und die Bloch-Funktionen nicht mehr angewendet werden dürfen. Wenn wir aber annehmen, dass sich das Zusatzpotential nur sehr schwach mit dem Ort ändert, können wir in guter Näherung wie bei einem periodischen Potential rechnen. Leiten wir nun mit dem neuen externen Potential (4.1) den Bose-Hubbard-Hamiltonian auf dem selben Weg wie in Abschnitt 2.2 her, so erhalten wir

$$\hat{H}_{\text{BHM}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i - \mu \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \sum_i V_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad , \quad (4.2)$$

mit dem Onsite-Potential

$$V_i = \int d^3x \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{x}^2 |w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)|^2 \quad . \quad (4.3)$$

Aufgrund der Lokalisierung der Wannier-Funktion am Gitterplatz i können wir in (4.3) das Integral durch den Wert am Mittelpunkt nähern:

$$V_i \approx \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{x}_i^2 \quad . \quad (4.4)$$

Von der Qualität dieser Näherung können wir uns in Abbildung 4.1 überzeugen. Wir erhalten durch diese Mittelpunktsnäherung lediglich eine konstante Verschiebung, die aber aufgrund der Unbestimmtheit des chemischen Potentials keine Auswirkung hat.

Wir können (4.2) nämlich umschreiben, indem wir ein gitterplatzabhängiges chemisches Potential einführen:

$$\mu_i = \mu - V_i \quad . \quad (4.5)$$

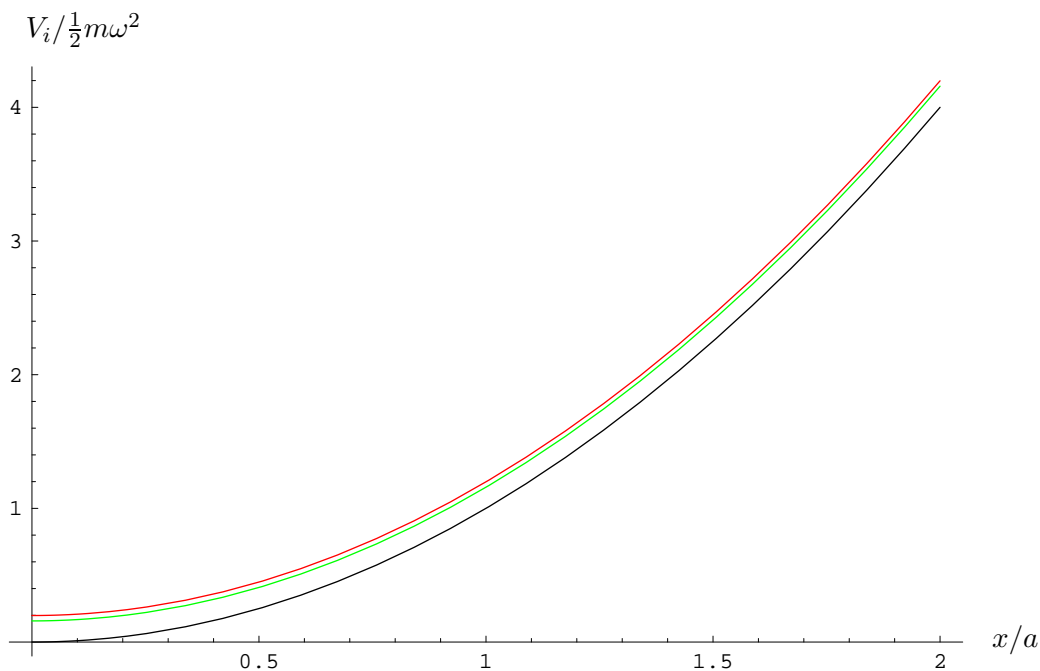


Abbildung 4.1: Querschnitt durch die y, z -Ebene von V_i mit numerisch bestimmter Wannier-Funktion (rot), harmonisch genäherter Wannier-Funktion (grün) und in der Mittelpunktapproximation (4.4) (schwarz).

Damit erhalten wir den Hamiltonian:

$$\hat{H}_{\text{BHM}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i - \sum_i \mu_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad . \quad (4.6)$$

Benutzen wir jetzt wieder den Molekularfeldansatz wie in Kapitel 3, erhalten wir lokal dasselbe Problem. Der einzige Unterschied ist, dass im homogenen Fall alle Gitterplätze gleich besetzt sind, während sich im System mit Falle die Besetzungszahl aufgrund des lokalen chemischen Potentials ändert. Da unser effektives chemisches Potential mit größerem Abstand abnimmt, können wir annehmen, dass in den mittleren Gitterplätzen am meisten Teilchen sitzen und die Besetzungszahl nach außen hin abnimmt. Dies ist nicht weiter verwunderlich, da sich Bosonen in einer harmonischen Falle ohne ein optisches Gitter genauso verhalten. So erhalten wir für $T = 0$ und $J = 0$ eine Hochzeitstortenstruktur, die mit zunehmendem chemischen Potential immer mehr Schichten bekommt (siehe Abbildung 4.2). Für endliche Hopping-Energien J tritt ein neuer Effekt auf. Betrachten wir im Phasendiagramm von Abbildung 3.4 einen Strahl mit konstantem J und wandern in Richtung abnehmendes chemisches Potential. Dies entspricht in der Falle dem abnehmenden effektivem chemischen Potential bei zunehmender Entfernung vom Fallenzentrum. Dann durchlaufen wir abwechselnd superfluide und Mott-Bereiche. In der Falle bilden sich also verschiedene superfluide Schalen, die zwischen den Mott-Plateaus liegen. In Quanten-Monte-Carlo-Simulationen wurde dieses Verhalten bestätigt [39].

Ganz analog können wir uns das System für endliche Temperaturen anschauen. Für $J = 0$ ergibt sich nach (3.118) das Bild aus Abbildung 4.3. Je höher unsere Temperatur steigt, desto stärker sind unsere Stufen abgerundet. Mit speziellen Messtechniken [40] kann man die Schalenstruktur ausmessen und aus der Schärfe der Schalengrenzen Rückschlüsse auf die Temperatur machen.

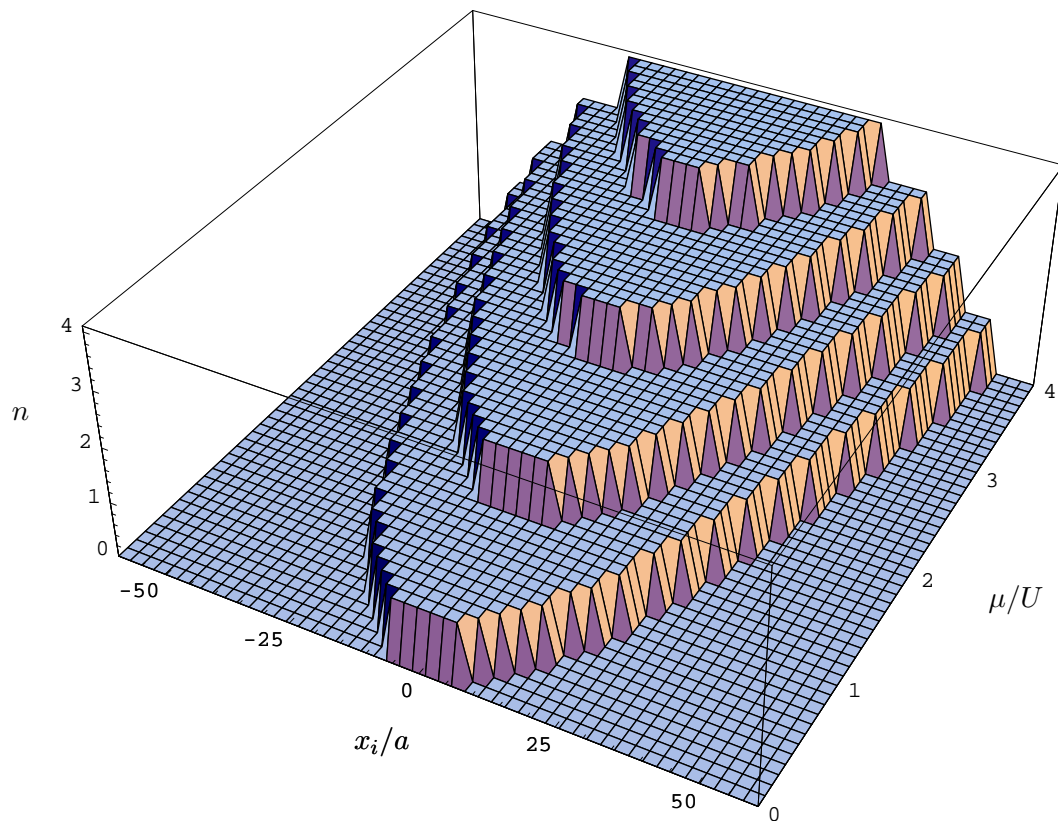


Abbildung 4.2: Teilchendichte in Abhängigkeit von μ , Querschnitt durch die y, z -Ebene.

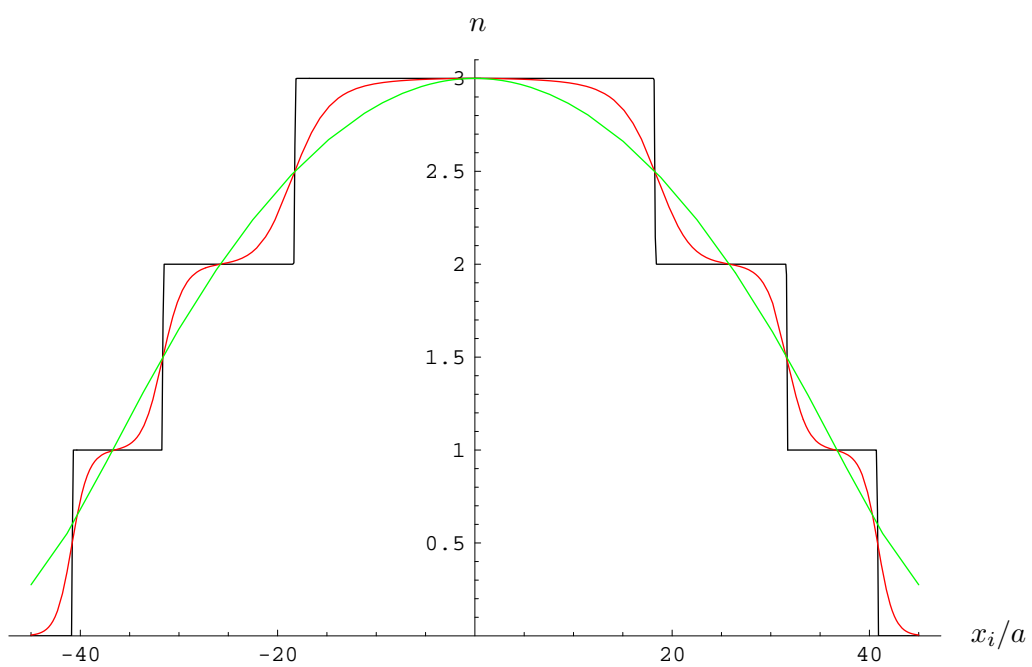


Abbildung 4.3: Teilchendichte, Querschnitt durch die y, z -Ebene für die Temperaturen $k_B T/U = 0.001$ (schwarz), $k_B T/U = 0.1$ (rot) und $k_B T/U = 0.5$ (grün).

4.2 Bestimmung der Teilchenzahl

Die Falle erlaubt uns sogar noch mehr. Bisher hatten wir keine Möglichkeit die Gesamtzahl der Teilchen zu bestimmen, da sie nur künstlich über die frei wählbare Zahl der Gitterplätze N_G festgelegt war. In der harmonischen Falle hat das Kondensat aber eine natürliche Grenze. Diese Eigenschaft können wir uns zu Nutze machen, um aus der experimentell bestimmbaren Gesamtteilchenzahl das chemische Potential festzulegen. Dazu berechnen wir einfach:

$$N(\mu) = \sum_i n_i(\mu) \quad , \quad (4.7)$$

wobei $n_i(\mu)$ im Fall $T = 0$ durch die nächste ganze Zahl zu μ_i/U (siehe Abschnitt 3.3.2) und im Fall $T > 0$ durch (3.118) gegeben ist. Nun besitzt das Gitter eine so große Zahl an Gitterplätzen, dass es sehr aufwendig ist diese Summe explizit auszuführen. Wenn wir vernachlässigen, dass die Gitterplätze diskret sind, können wir einfach die Radien der einzelnen Mott-Plateaus berechnen und erhalten so für die Teilchenzahl die analytischen Näherungsformeln:

$$\text{1D: } N = \sum_{0 \leq c < \mu/U} 2 \sqrt{\frac{\mu - cU}{\frac{1}{2}m\omega^2 a^2}} + 1 \quad , \quad (4.8)$$

$$\text{3D: } N = \sum_{0 \leq c < \mu/U} \frac{4\pi}{3} \sqrt{\frac{\mu - cU}{\frac{1}{2}m\omega^2 a^2}}^3 \quad (4.9)$$

und die durchschnittliche Teilchendichte:

$$\text{1D: } \bar{n} = \frac{\sum_{0 \leq c < \mu/U} 2 \sqrt{\frac{\mu - cU}{\frac{1}{2}m\omega^2 a^2}} + 1}{2 \sqrt{\frac{\mu}{\frac{1}{2}m\omega^2 a^2}} + 1} \quad , \quad (4.10)$$

$$\text{3D: } \bar{n} = \frac{\sum_{0 \leq c < \mu/U} \frac{4\pi}{3} \sqrt{\frac{\mu - cU}{\frac{1}{2}m\omega^2 a^2}}^3}{\frac{4\pi}{3} \sqrt{\frac{\mu - cU}{\frac{1}{2}m\omega^2 a^2}}^3} \quad . \quad (4.11)$$

Der Vergleich in Abbildung 4.4 zeigt, dass gerade in drei Dimensionen die Näherung sehr gut ist. In einer Dimension sind aufgrund der geringen Teilchenzahl noch geringfügige Abweichungen zu erkennen.

4.3 Anwendung

Mit diesen Erkenntnissen ist es uns jetzt möglich, einen genaueren Blick auf das Experiment zu werfen. Mit den Daten der Sengstock-Gruppe vom Ende der Abschnittes 1.2 ist es uns nun möglich, das chemische Potential und die Besetzungszahl im Fallenmittelpunkt zu berechnen. Dazu nutzen wir insbesondere Gleichung (1.3), die den Zusammenhang zwischen Laserstärke und Fallenfrequenz beschreibt. Da im Experiment verschiedene Gesamtteilchenzahlen verwendet werden, fehlt uns bisher dazu ein Wert. Wir entscheiden uns hier mit $N = 200000$ zu rechnen, was der Größenordnung der Teilchen im Experiment entspricht.

Wir erhalten so Abbildung 4.5. Es ist auf den ersten Blick verwunderlich, dass gerade bei kleinen Laserstärken, wo die effektive Fallenfrequenz klein ist, sich die Bosonen so stark am Mittelpunkt sammeln. Die Ursache hierfür ist, dass bei kleinen Laserstärken gleichzeitig die Onsite-Wechselwirkung klein ist und es dadurch sehr leicht ist die Bosonen zusammenzupressen. Somit erhalten wir im Experiment der Sengstock-Gruppe sechs bis sieben Bosonen pro Gitterplatz im Zentrum der Falle.

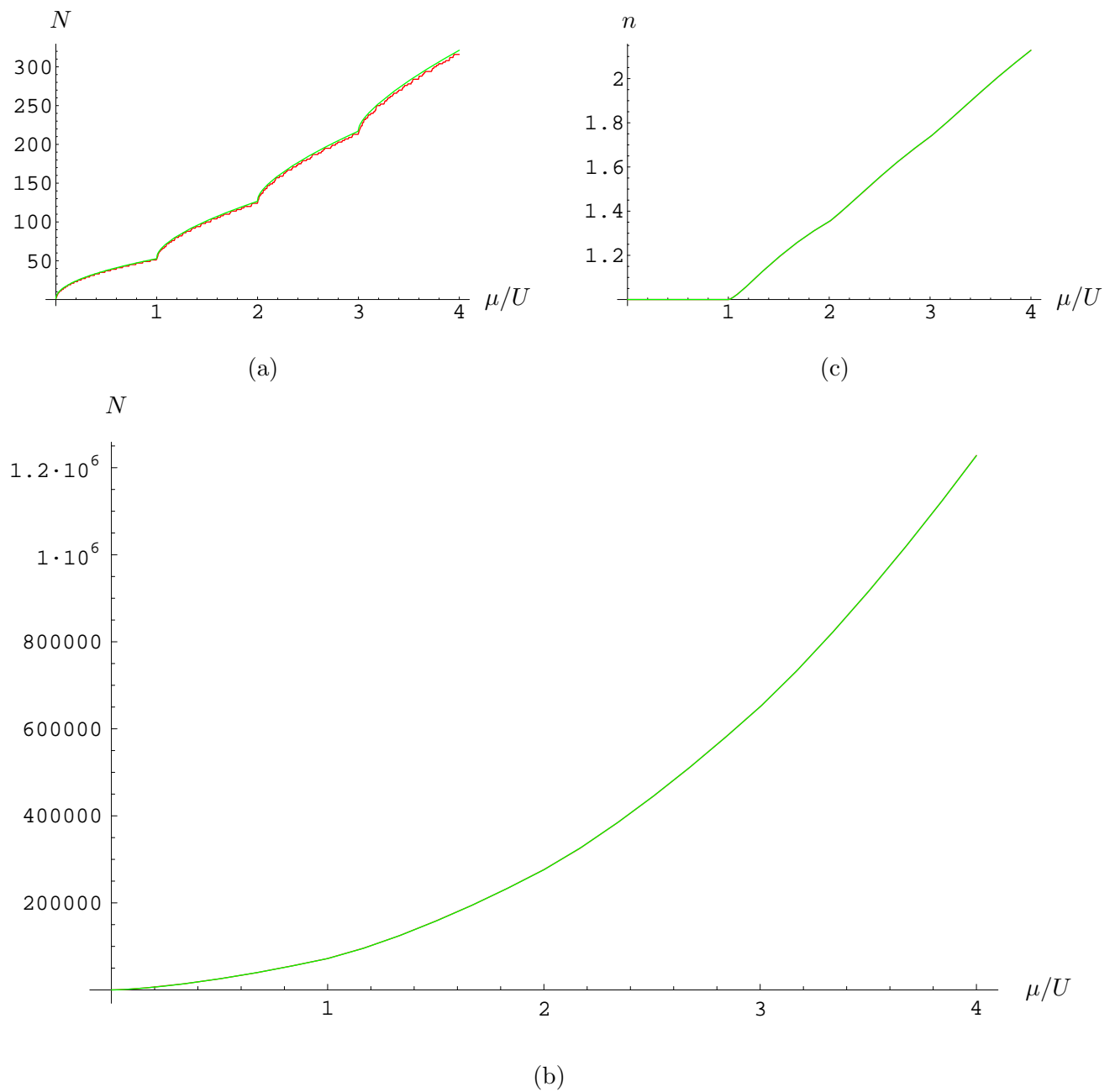


Abbildung 4.4: (a) Gesamtteilchenzahl in 1D, (b) Gesamtteilchenzahl in 3D, (c) Teilchendichte in 3D. In allen drei Bildern: die direkte Summe 4.7 ist rot und die Näherung 4.8–4.11 ist grün dargestellt.

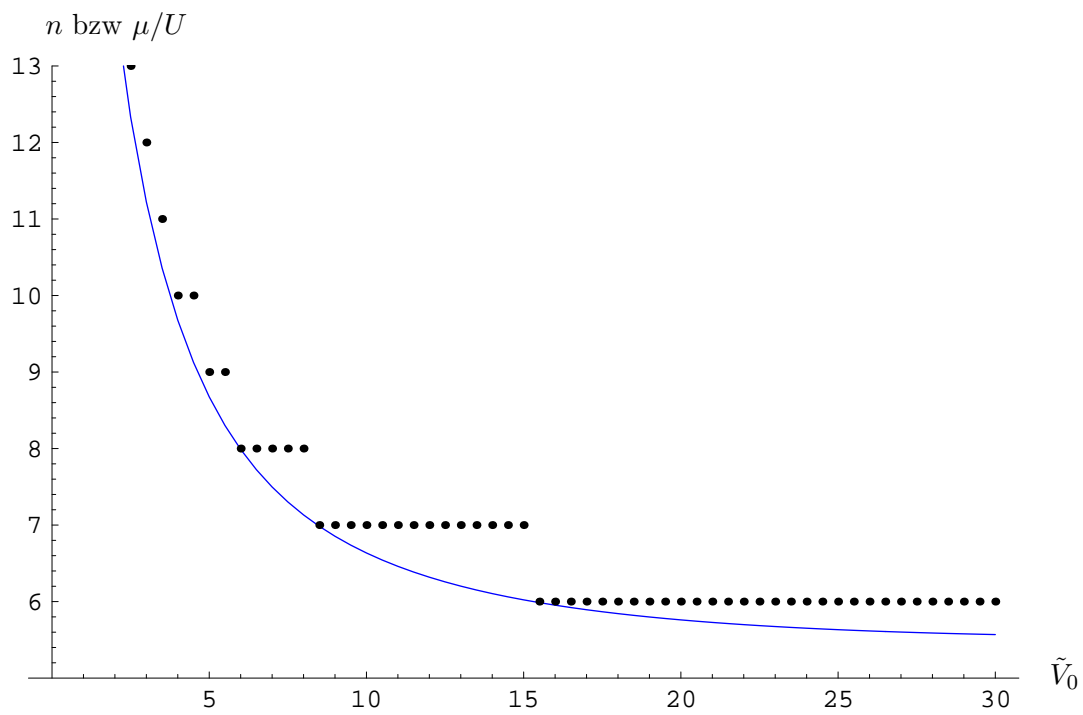


Abbildung 4.5: Chemisches Potential (blaue Linie) und maximale Teilchenzahl (schwarze Punkte) in Abhängigkeit von der Gittertiefe in Anwesenheit einer Falle für $N = 200000$.

Kapitel 5

Quantenkorrekturen zur Molekularfeldtheorie

Bisher haben wir immer in der Molekularfeldtheorie gerechnet, von der wir in Abschnitt 3.3.4 gezeigt haben, dass sie signifikant von den Ergebnissen der Quanten-Monte-Carlo-Simulation abweicht. Daher wollen wir in diesem Kapitel über die Molekularfeldtheorie hinaus gehen und Quantenkorrekturen zu ihr ausrechnen. Dazu betrachten wir den Hamiltonoperator

$$\hat{H}_\eta = \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i - \mu \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \eta J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - (1 - \eta) J_{\text{BZ}} \sum_i [\psi(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) - \psi^2] \quad , \quad (5.1)$$

der für $\eta = 0$ in den Molekularfeld-Hamiltonian (3.16) und für $\eta = 1$ in den Bose-Hubbard-Hamiltonian (2.1) übergeht. Jetzt nehmen wir wie bisher als ungestörten Hamiltonian

$$\hat{H}_0 = \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i - \mu \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (5.2)$$

und als Störoperator

$$\hat{V} = -\eta J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - (1 - \eta) J_{\text{BZ}} \sum_i [\psi(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) - \psi^2] \quad . \quad (5.3)$$

Dieser Störoperator besteht aus zwei Teilen, dem Hubbard-Anteil $\eta J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ und dem Molekularfeldanteil $(1 - \eta) J_{\text{BZ}} \sum_i [\psi(\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) - \psi^2]$. Nun berechnen wir das großkanonische Potential mit demselben Verfahren wie in Abschnitt 3.4. Dabei berücksichtigen wir nur solche Terme, die eine bestimmte Ordnung in η enthalten. Anschließend setzen wir $\eta = 1$, da dies dem Bose-Hubbard Hamiltonian entspricht. Entwickeln wir nur bis zur Ordnung η^0 , so erhalten wir die bisher behandelte Molekularfeldtheorie. Lassen wir hingegen alle Ordnungen in η stehen fällt, der Ordnungsparameter ganz weg und wir erhalten die Starkkopplungsentwicklung [22]. Dieses Vorgehen entspricht prinzipiell der Variationsstörungstheorie [20,21]. Nur verwenden wir anstelle des normalerweise verwendeten harmonischen Oszillators den Molekularfeldhamiltonian. Damit ist unser Variationsparameter der Ordnungsparameter ψ anstatt einer Testfrequenz. Im Folgenden wollen wir uns anschauen, welche Verbesserungen der Molekularfeldtheorie wir durch Hinzunahme der ersten Ordnung in η erhalten können.

5.1 Selbstkonsistenz

Bevor wir uns aber ans konkrete Ausrechnen machen, müssen wir uns überzeugen, dass unser Vorgehen selbstkonsistent ist. Um dieses zu beweisen, müssen wir zeigen, dass mit unserem Hamiltonian \hat{H}_η des

Variationansatzes gilt:

$$\langle \hat{a}_i \rangle = \psi \quad . \quad (5.4)$$

Dazu schreiben wir den Hamiltonian (5.1) in der Form:

$$\hat{H}_\eta = \hat{H}_{\text{MF}} + \eta(\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) \quad . \quad (5.5)$$

Analog zu unserem Vorgehen beim Molekularfeld-Hamiltonian in Kapitel 3 gehen wir von

$$\frac{\partial \mathcal{F}_\eta}{\partial \psi} = 0 \quad (5.6)$$

aus. Da wir nur in der ersten Ordnung von η rechnen, müssen wir das großkanonische Potential auch nur bis zur ersten Ordnung von η entwickeln:

$$\mathcal{F}_\eta = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}_\eta \quad (5.7)$$

mit

$$\mathcal{Z}_\eta = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_\eta} \right\} \quad . \quad (5.8)$$

Hierzu verwenden wir das Wechselwirkungsbild mit $\hat{V} = \eta(\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}})$ und schreiben analog zu (3.71):

$$\mathcal{Z}_\eta = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \hat{U}_{\text{D}}(\hbar\beta, 0) \right\} \quad . \quad (5.9)$$

Jetzt benutzen wir die Dyson-Reihe (3.69) bis zur ersten Ordnung, da dies gleichzeitig die ersten Ordnung in η liefert:

$$\mathcal{Z}_\eta = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \left(1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \hat{V}_{\text{D}}(\tau) \right) \right\} \quad (5.10)$$

$$= \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \left[1 - \frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{\frac{\tau}{\hbar} \hat{H}_{\text{MF}}} \eta (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\frac{\tau}{\hbar} \hat{H}_{\text{MF}}} \right] \right\} \quad . \quad (5.11)$$

Mit Hilfe der zyklischen Vertauschbarkeit von Operatoren unter der Spur folgt:

$$\mathcal{Z}_\eta = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\} - \beta \eta \text{Tr} \left\{ (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \quad . \quad (5.12)$$

Benutzen wir die Taylorreihe $\ln(1+z) \approx z$ und (5.7), so erhalten wir das großkanonische Potential zu:

$$\mathcal{F}_\eta = -\frac{1}{\beta} \ln \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\} + \eta \frac{\text{Tr} \left\{ (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} \quad . \quad (5.13)$$

Wenn wir die Ableitung von \mathcal{F}_η nach ψ berechnen wollen, so müssen wir uns zuerst ein Problem vor Augen führen, das bei der Ableitung von Funktionen von Operatoren entstehen kann. Bilden wir

die Ableitung $\frac{\partial}{\partial\psi}e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}}$ und ist der Kommutator $[\hat{H}_{\text{MF}}, \frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi}] \neq 0$, so ergibt sich aufgrund der Taylorreihe der Exponentialfunktion folgendes Bild:

$$\frac{\partial}{\partial\psi}e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} = \frac{\partial}{\partial\psi} \left(1 - \beta\hat{H}_{\text{MF}} + \frac{\beta^2}{2}\hat{H}_{\text{MF}}\hat{H}_{\text{MF}} - \frac{\beta^3}{6}\hat{H}_{\text{MF}}\hat{H}_{\text{MF}}\hat{H}_{\text{MF}} + \dots \right) \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} &= -\beta\frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi} + \frac{\beta^2}{2} \left(\frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi}\hat{H}_{\text{MF}} + \hat{H}_{\text{MF}}\frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi} \right) \\ &\quad - \frac{\beta^3}{6} \left(\hat{H}_{\text{MF}}\hat{H}_{\text{MF}}\frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi} + \hat{H}_{\text{MF}}\frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi}\hat{H}_{\text{MF}} + \frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi}\hat{H}_{\text{MF}}\hat{H}_{\text{MF}} \right) + \dots \end{aligned} \quad (5.15)$$

Allgemein gilt daher:

$$\frac{\partial}{\partial\psi}e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^{n+1}}{(n+1)!} \sum_{k=0}^n \hat{H}_{\text{MF}}^{n-k} \frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi} \hat{H}_{\text{MF}}^k \quad . \quad (5.16)$$

Stehen derartige Ausdrücke unter einer Spur, so können wir durch zyklisches Vertauschen der Operatoren zu dem uns vertrauten Ergebnissen kommen:

$$\frac{\partial}{\partial\psi} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\} = \text{Tr} \left\{ -\beta \frac{\partial\hat{H}_{\text{MF}}}{\partial\psi} e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \quad . \quad (5.17)$$

Dieses Ergebnis kann aber nicht verwendet werden, wenn unter der Spur weitere Operatoren stehen, die nicht mit dem Hamiltonian \hat{H}_{MF} kommutieren. Daher folgt also:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathcal{F}_\eta}{\partial\psi} &= \frac{\text{Tr} \left\{ \sum_i (\hat{a}_i^\dagger - \psi^*) e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} - \eta\beta \left[\frac{\text{Tr} \left\{ (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{(n+1)!} \sum_{k=0}^n \hat{H}_{\text{MF}}^{n-k} \sum_i (\hat{a}_i^\dagger - \psi^*) \hat{H}_{\text{MF}}^k \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\text{Tr} \left\{ \sum_i (\hat{a}_i^\dagger - \psi^*) e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} - \frac{\text{Tr} \left\{ \sum_i (\hat{a}_i^\dagger - \psi^*) e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \text{Tr} \left\{ (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}^2} \right] \quad . \end{aligned} \quad (5.18)$$

Der Ordnungsparameter ψ ist eine reelle Zahl und vertauscht folglich mit \hat{H}_{MF} . Wenn wir zusätzlich noch (??) benutzen, um die Summen über die i zu entkoppeln, lässt sich (5.18) vereinfachen zu:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\mathcal{F}_\eta}{\partial\psi} &= N_S \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} - N_S \eta\beta \left[\frac{\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{(n+1)!} \sum_{k=0}^n \hat{H}_{\text{MF}}^k (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) \hat{H}_{\text{MF}}^{n-k} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} \right. \\ &\quad \left. + N_S \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} - N_S \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \text{Tr} \left\{ (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\hat{H}_{\text{MF}}} \right\}^2} \right] - N_S (1 - \eta\beta) \psi \quad . \end{aligned} \quad (5.19)$$

Um Selbstkonsistenz zu erhalten muss folglich gelten:

$$\frac{\partial\mathcal{F}_\eta}{\partial\psi} \stackrel{!}{=} N_S (1 - \eta\beta) \langle \hat{a}^\dagger \rangle - N_S (1 - \eta\beta) \psi \quad . \quad (5.20)$$

Um diese Gleichheit zu beweisen entwickeln wir auch

$$\langle \hat{a}^\dagger \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{-\beta \hat{H}_\eta} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_\eta} \right\}} \quad (5.21)$$

bis zur ersten Ordnung von η . Der Nenner ist durch (5.12) gegeben und für den Zähler ergibt sich bis zur ersten Ordnung in η durch eine analoge Überlegung:

$$\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{-\beta \hat{H}_\eta} \right\} = \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} - \frac{\eta}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{(-\beta + \frac{\tau}{\hbar}) \hat{H}_{\text{MF}}} (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\frac{\tau}{\hbar} \hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \quad (5.22)$$

Entwickeln des Bruches (5.21) führt zu:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}^\dagger \rangle &= \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} - \frac{\eta \int_0^{\hbar\beta} \text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{(-\beta + \frac{\tau}{\hbar}) \hat{H}_{\text{MF}}} (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\frac{\tau}{\hbar} \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\hbar \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}} \\ &\quad - \eta\beta \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{a}^\dagger e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \text{Tr} \left\{ (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\}^2} \quad (5.23) \end{aligned}$$

Der Vergleich mit (5.19) zeigt, dass Selbstkonsistenz zu folgender Operatoridentität äquivalent ist:

$$-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} \hat{a}^\dagger e^{(-\beta + \frac{\tau}{\hbar}) \hat{H}_{\text{MF}}} (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) e^{-\frac{\tau}{\hbar} \hat{H}_{\text{MF}}} = \hat{a}^\dagger \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^{n+1}}{(n+1)!} \sum_{k=0}^n \hat{H}_{\text{MF}}^k (\hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}) \hat{H}_{\text{MF}}^{n-k} \quad (5.24)$$

Diese Beziehung müssen wir jetzt allgemein beweisen. Dazu nutzen wir die Taylorentwicklung der Exponentialfunktion:

$$-\int_0^{\beta} d\tau \hat{A} e^{(-\beta + \tau) \hat{H}_{\text{MF}}} \hat{X} e^{-\tau \hat{H}_{\text{MF}}} \quad (5.25)$$

$$= -\int_0^{\beta} d\tau \hat{A} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (\beta - \tau)^n}{n!} \hat{H}_{\text{MF}}^n \right] \hat{X} \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \tau^k}{k!} \hat{H}_{\text{MF}}^k \right] \quad (5.26)$$

Mit der Variablensubstitution $\tau' = \tau/\beta$ erhalten wir:

$$= -\int_0^1 d\tau' \beta \hat{A} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^{n+k}}{n!k!} (1 - \tau')^n \tau'^k \hat{H}_{\text{MF}}^n \hat{X} \hat{H}_{\text{MF}}^k \quad (5.27)$$

Die Doppelsumme können wir mit der Cauchy-Produktformel vereinfachen.

$$= -\int_0^1 d\tau' \beta \hat{A} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^n \frac{(-\beta)^{k+n-k}}{k!(n-k)!} (1 - \tau')^k \tau'^{n-k} \hat{H}_{\text{MF}}^k \hat{X} \hat{H}_{\text{MF}}^{n-k} \quad (5.28)$$

Jetzt nutzen wir die Definition der Betafunktion [41, 8.38], um das Integral zu lösen:

$$= -\beta \hat{A} \sum_{n=0}^{\infty} (-\beta)^n \sum_{k=0}^n \frac{\Gamma(n-k+1)\Gamma(k+1)}{k!(n-k)!\Gamma(n-k+1+k+1)} \hat{H}_{\text{MF}}^k \hat{X} \hat{H}_{\text{MF}}^{n-k} \quad (5.29)$$

Zuletzt nutzen wir die Umwandlung der Γ -Funktion in Fakultäten und erhalten:

$$= \hat{A} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^{n+1}}{(n+1)!} \sum_{k=0}^n \hat{H}_{\text{MF}}^k \hat{X} \hat{H}_{\text{MF}}^{n-k} \quad . \quad (5.30)$$

So ist für den Fall $\hat{A} = \hat{a}^\dagger$ und $\hat{X} = \hat{H}_{\text{BH}} - \hat{H}_{\text{MF}}$ die Beziehung (5.24) bewiesen und so die Selbstkonsistenz gezeigt.

5.2 Korrekturen der ersten Ordnung

Jetzt wollen wir damit beginnen, die aus dem Variationansatz (5.1) folgende Phasengrenze zu berechnen. Dabei wollen wir lediglich die erste Ordnung in η betrachten. Weiterhin werden wir alle Terme vernachlässigen, die von höherer Ordnung als ψ^2 sind, da sie nicht zur Phasengrenze beitragen.

Dazu werden wir analog zu Abschnitt 3.4.2 vorgehen und die Zustandssumme mit der Dyson-Reihe approximieren. Wir verwenden also (3.72), wobei die einzelnen Terme mit dem Störoperator (5.3) berechnet werden, sodass wir die Form erhalten:

$$\mathcal{Z} = Z_0 + JZ_1 + J^2Z_2 + J^3Z_3 + \dots \quad (5.31)$$

Das erste Reihenglied enthält den Störoperator in nullter Potenz und ist damit trivial zu berechnen:

$$Z_0 = \prod_i \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta E'_{n_i}} \quad . \quad (5.32)$$

Als nächstes haben wir einen einzelnen Störoperator \hat{V} . Der Hubbard-Teil mit $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ ist nichtdiagonal und fällt damit bei der Spurbildung weg. Der Molekularfeldanteil hat den Vorfaktor $1 - \eta$, der für $\eta = 1$ verschwindet und somit folgt:

$$Z_1 = 0 \quad . \quad (5.33)$$

Kommen wir nun zum Term, der quadratisch im Störoperator \hat{V} ist. Der quadratische Hubbard-Teil ist von der Ordnung η^2 und die Mischterme sind nichtdiagonal. Mit $\vec{n} = (n_1, n_2, \dots)$ bleibt also:

$$\begin{aligned} Z_2 = \sum_{\vec{n}} e^{-\beta \sum_l E'_{n_l}} \frac{1}{\hbar^2} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 (1 - 2\eta) \\ \times \langle \vec{n} | \left[\sum_i \psi \hat{a}_{iD}(\tau) + \psi \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau) - \psi^2 \right] \left[\sum_j \psi \hat{a}_{jD}(\tau_1) + \psi \hat{a}_{jD}^\dagger(\tau_1) - \psi^2 \right] | \vec{n} \rangle \quad . \end{aligned} \quad (5.34)$$

Darin sind noch nichtdiagonale Terme enthalten, die beim Ausführen der quantenmechanischen Erwartungswerte wegfallen. Wir erhalten somit für $\eta = 1$:

$$Z_2 = - \sum_{\vec{n}} e^{-\beta \sum_l E'_{n_l}} \frac{\psi^2}{\hbar^2} \sum_i \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \langle n_i | \hat{a}_{iD}(\tau) \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau_1) + \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau) \hat{a}_{iD}(\tau_1) + N_S \psi^2 | n_i \rangle \quad . \quad (5.35)$$

Wenn wir den ψ^4 -Term wegfällen lassen, so sind die verbleibenden Integrale dieselben wie (3.85) und (3.86). Zusammen mit der Vereinfachung in (3.101) erhalten wir:

$$Z_2 = -\psi^2 \beta \sum_i \left[\sum_{n_i=0}^{\infty} \left(\frac{n_i}{E'_{n_i-1} - E'_{n_i}} + \frac{n_i + 1}{E'_{n_i+1} - E'_{n_i}} \right) e^{-E'_{n_i}} \prod_{l \neq i} \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E'_{n_l}} \right] \quad . \quad (5.36)$$

Im kubische \hat{V} -Beitrag können nur Beiträge auftreten, die den Hubbard-Beitrag nur einmal enthalten, da alle höheren Potenzen mindestens von der Ordnung η^2 sind. Außerdem kann der kubische Molekularfeldbeitrag nichts beitragen, da er nichtdiagonal ist oder höhere Potenzen als ψ^2 enthält. Damit bleiben die folgenden Mischterme übrig:

$$\begin{aligned}
Z_3 = & \sum_{\vec{n}} e^{-\beta \sum_l E'_{n_l}} \frac{-\psi^2}{\hbar^3} \int_0^\tau d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \eta \\
& \times \langle \vec{n} | \left[\sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_{iD}(\tau) \hat{a}_{jD}^\dagger(\tau_1) \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau_2) \hat{a}_{jD}(\tau_2) + \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_{jD}^\dagger(\tau) \hat{a}_{iD}(\tau_1) \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau_2) \hat{a}_{jD}(\tau_2) \right. \\
& + \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_{iD}(\tau) \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau_1) \hat{a}_{jD}(\tau_1) \hat{a}_{jD}^\dagger(\tau_2) + \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_{jD}^\dagger(\tau) \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau_1) \hat{a}_{iD}(\tau_1) \hat{a}_{jD}(\tau_2) \\
& \left. + \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau) \hat{a}_{jD}(\tau) \hat{a}_{iD}(\tau_2) \hat{a}_{jD}^\dagger(\tau_2) + \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_{iD}^\dagger(\tau) \hat{a}_{jD}(\tau) \hat{a}_{jD}^\dagger(\tau_1) \hat{a}_{iD}(\tau_2) \right] | \vec{n} \rangle. \tag{5.37}
\end{aligned}$$

Nach Ausführen des quantenmechanischen Erwartungswertes erhalten wir:

$$\begin{aligned}
Z_3 = & \sum_{\vec{n}} e^{-\beta \sum_l E'_{n_l}} \frac{-\psi^2}{\hbar^3} \int_0^\tau d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \sum_{\langle i,j \rangle} \\
& \times \left[n_j(n_i + 1) e^{(E'_{n_i} - E'_{n_{i+1}})\tau/\hbar} e^{(E'_{n_j} - E'_{n_{j-1}})\tau_1/\hbar} e^{(E'_{n_{i+1}} + E'_{n_{j-1}} - E'_{n_i} - E'_{n_j})\tau_2/\hbar} \right. \\
& + n_j(n_i + 1) e^{(E'_{n_j} - E'_{n_{j-1}})\tau/\hbar} e^{(E'_{n_i} - E'_{n_{i+1}})\tau_1/\hbar} e^{(E'_{n_{i+1}} + E'_{n_{j-1}} - E'_{n_i} - E'_{n_j})\tau_2/\hbar} \\
& + (n_j + 1)(n_i + 1) e^{(E'_{n_i} - E'_{n_{i+1}})\tau/\hbar} e^{(E'_{n_{i+1}} + E'_{n_j} - E'_{n_i} - E'_{n_{j+1}})\tau_1/\hbar} e^{(E'_{n_{j+1}} - E'_{n_j})\tau_2/\hbar} \\
& + n_j n_i e^{(E'_{n_j} - E'_{n_{j-1}})\tau/\hbar} e^{(E'_{n_i} + E'_{n_{j-1}} - E'_{n_{i-1}} - E'_{n_j})\tau_1/\hbar} e^{(E'_{n_{i-1}} - E'_{n_i})\tau_2/\hbar} \\
& + (n_j + 1) n_i e^{(E'_{n_i} + E'_{n_j} - E'_{n_{j+1}} - E'_{n_{i-1}})\tau/\hbar} e^{(E'_{n_{i-1}} - E'_{n_i})\tau_1/\hbar} e^{(E'_{n_{j+1}} - E'_{n_j})\tau_2/\hbar} \\
& \left. + (n_j + 1) n_i e^{(E'_{n_i} + E'_{n_j} - E'_{n_{j+1}} - E'_{n_{i-1}})\tau/\hbar} e^{(E'_{n_{j+1}} - E'_{n_j})\tau_1/\hbar} e^{(E'_{n_{i-1}} - E'_{n_i})\tau_2/\hbar} \right]. \tag{5.38}
\end{aligned}$$

Hier treten Integrale auf, die von derselben Form sind wie in Abschnitt 3.4.2 und wir können aus (3.80) die allgemeine Formel

$$\gamma \int_0^{\hbar\beta} d\tau e^{a\tau} \int_0^\tau d\tau_1 e^{b\tau_1} \int_0^{\tau_1} d\tau_2 e^{c\tau_2} = \gamma \left(\frac{e^{(a+b+c)\tau} - 1}{(a+b+c)(b+c)c} - \frac{e^{a\tau} - 1}{a(b+c)c} - \frac{e^{(a+b)\tau} - 1}{(a+b)bc} + \frac{e^{a\tau} - 1}{abc} \right) \tag{5.39}$$

ablesen. Damit können wir die Integrale in (5.38) lösen und erhalten:

$$\begin{aligned}
Z_3 = & -\psi^2 \beta \sum_{\vec{n}} e^{-\beta \sum_l E'_{n_l}} \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{n_i n_j}{(E'_{n_{i-1}} - E'_{n_i})(E'_{n_{j-1}} - E'_{n_j})} + \frac{n_i(n_j + 1)}{(E'_{n_{i-1}} - E'_{n_i})(E'_{n_{j+1}} - E'_{n_j})} \right. \\
& \left. + \frac{n_j(n_i + 1)}{(E'_{n_{i+1}} - E'_{n_i})(E'_{n_{j-1}} - E'_{n_j})} + \frac{(n_i + 1)(n_j + 1)}{(E'_{n_{i+1}} - E'_{n_i})(E'_{n_{j+1}} - E'_{n_j})} \right]. \tag{5.40}
\end{aligned}$$

Wenn wir nun die Summe über \vec{n} faktorisieren, sind die verschiedenen Gitterplätze entkoppelt. Damit können wir Z_3 schreiben als:

$$Z_3 = -\psi^2 \beta \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\sum_{n_i=0}^{\infty} \left(\frac{n_i}{E'_{n_i-1} - E'_{n_i}} + \frac{n_i+1}{E'_{n_i+1} - E'_{n_i}} \right) e^{-E'_{n_i}} \right. \\ \left. \times \sum_{n_j=0}^{\infty} \left(\frac{n_j}{E'_{n_j-1} - E'_{n_j}} + \frac{n_j+1}{E'_{n_j+1} - E'_{n_j}} \right) e^{-E'_{n_j}} \prod_{l \neq i,j} \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E'_{n_l}} \right]. \quad (5.41)$$

Gehen wir nun von einer Potenzreihe in J zu einer Potenzreihe in ψ über, so erhalten wir:

$$\mathcal{Z} = Z'_0 + \psi^2 Z'_2 + \dots \quad (5.42)$$

mit $Z'_0 = Z_0$ und $Z'_2 = (J^2 Z_2 + J^3 Z_3)/\psi^2$. Jetzt gehen wir analog zu (3.104) zum großkanonischen Potential über und erhalten das altbekannte Ergebnis:

$$\mathcal{F}(\psi) = a_0 + a_2 \psi^2 + \dots \quad (5.43)$$

mit neuen Koeffizienten. Es zeigt sich, dass sich der nullte Landau-Koeffizient durch die Quantenkorrekturen prinzipiell nicht ändert. Lediglich die Summe über alle Gitterplätze ist jetzt neu hinzugekommen:

$$a_0 = -k_B T \sum_i \ln \sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-E'_{n_i}/k_B T}. \quad (5.44)$$

Der zweite Koeffizient hingegen sieht komplett anders aus:

$$a_2 = -J^2 \sum_i \left[\frac{\sum_{n_i=0}^{\infty} \left(\frac{n_i}{E'_{n_i-1} - E'_{n_i}} + \frac{n_i+1}{E'_{n_i+1} - E'_{n_i}} \right) e^{-\beta E'_{n_i}}}{\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta E'_{n_i}}} \right] \\ - J^3 \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{\sum_{n_i=0}^{\infty} \left(\frac{n_i}{E'_{n_i-1} - E'_{n_i}} + \frac{n_i+1}{E'_{n_i+1} - E'_{n_i}} \right) e^{-\beta E'_{n_i}} \sum_{n_j=0}^{\infty} \left(\frac{n_j}{E'_{n_j-1} - E'_{n_j}} + \frac{n_j+1}{E'_{n_j+1} - E'_{n_j}} \right) e^{-\beta E'_{n_j}}}{\sum_{n_i=0}^{\infty} e^{-\beta E'_{n_i}} \sum_{n_j=0}^{\infty} e^{-\beta E'_{n_j}}} \right] \quad (5.45)$$

Da das chemische Potential eine Konstante ist, sind die Erwartungswerte ortsunabhängig und wir können die Summe über die benachbarten Gitterplätze explizit ausführen. Desweiteren können wir (3.38a) und (3.38b) verwenden, um die Summe der Brüche in bekannter Weise zusammenzufassen:

$$a_2 = J^2 N_S \left[\frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{U+\mu}{(\mu-Un)(U(n-1)-\mu)} e^{-\beta E'_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E'_n}} \right] - J^3 z N_S \left[\frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{U+\mu}{(\mu-Un)(U(n-1)-\mu)} e^{-\beta E'_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E'_n}} \right]^2. \quad (5.46)$$

Nun bestimmen wir die Phasengrenze aus der Landau-Bedingung $a_2 = 0$, die wir in Abschnitt 3.1 hergeleitet haben und erhalten:

$$Jz = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E'_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{U+\mu}{(\mu-Un)(U(n-1)-\mu)} e^{-\beta E'_n}}. \quad (5.47)$$

Dies ist trotz der Änderung in a_2 für die Phasengrenze dasselbe Ergebnis, das wir in (3.119) ohne den Variationsansatz erhalten haben. Es bleibt zu hoffen, dass in der Ordnung η^2 eine abweichende Phasengrenze auftritt.

Kapitel 6

Visibilität

In den Experimenten [8,14] wurden fast ausschließlich Time-of-Flight Bilder des expandierenden Gases, nachdem die Falle und das optische Gitter ausgeschaltet wurden, aufgenommen. Jetzt wollen wir versuchen, die dabei erhaltenen Bilder theoretisch zu erklären. Insbesondere werden wir die Visibilität betrachten, die den Kontrast von einzelnen Peaks zum Untergrund misst. Die Visibilität ist, wie in Abschnitt 1.2 bereits dargelegt, definiert als:

$$\mathcal{V} = \frac{n_{\max} - n_{\min}}{n_{\max} + n_{\min}} . \quad (6.1)$$

6.1 Dichteverteilung

Beobachtet werden bei all diesen Experimenten die Time-of-Flight Bilder. Dazu schaltet man die Falle aus und beobachtet die Gaswolke nach einer Expansionszeit t . Die Expansion selber beruht grundsätzlich auf zwei Prozessen. Offensichtlich werden zum einen alle Bosonen durch die Erdbeschleunigung gleichmäßig nach unten gezogen. Zum anderen werden alle Bosonen aufgrund der Trägheit eine gleichförmige Bewegung gemäß ihres derzeitigen Impulses ausführen. Dabei vernachlässigen wir Wechselwirkungen zwischen den Teilchen aufgrund der geringen Dichte, die sich bei der Ausbreitung noch weiter verringert. Desweiteren ist die Teilchenwolke nach der Ausbreitung erheblich größer als das Kondensat, sodass wir das Kondensat als punktförmig annehmen können. Die Dichteverteilung im Ortsraum des Time-of-Flight Bildes ist daher direkt abhängig von der Dichteverteilung im Impulsraum beim Ausschalten. Es gilt bei einer Fallzeit t , dass sich ein Boson mit einem Impuls $\hbar\mathbf{k}$ am Ort \mathbf{r} befindet, der gegeben ist durch:

$$\mathbf{k} = \frac{m\mathbf{r}}{\hbar t} . \quad (6.2)$$

Die Impulsraumverteilung ist gegeben durch:

$$n_{\mathbf{k}} = \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{k}) \hat{\psi}(\mathbf{k}) \rangle . \quad (6.3)$$

Nun führen wir eine Fourier-Transformation der Feldoperatoren durch:

$$\hat{\psi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^3}} \int d^3\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\psi}(\mathbf{r}) \quad (6.4)$$

und erhalten:

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iint d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle .$$

Anschließend zerlegen wir die Operatoren in die Wannier-Zustände gemäß (2.9)

$$n_{\mathbf{k}} = \sum_{i,j} \frac{1}{(2\pi)^3} \iint d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} w^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'} w(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle .$$

Schlussendlich wenden wir erneut eine Fourier-Transformation an und zwar auf die Wannier-Funktion:

$$n_{\mathbf{k}} = |w(\mathbf{k})|^2 \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle . \quad (6.5)$$

Wir führen nun die Quasiimpulsverteilung $S(\mathbf{k})$ ein als:

$$S(\mathbf{k}) = \sum_{i,j} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle \quad (6.6)$$

und erhalten damit [?]

$$n_{\mathbf{k}} = |w(\mathbf{k})|^2 S(\mathbf{k}) . \quad (6.7)$$

Die darin enthaltene Wannier-Funktion des Impulsraumes berechnen wir durch ausführen des Fourier-Integrals. Dabei können wir die Produkteigenschaft der Wannier-Funktionen benutzen, um das Raumintegral auf ein eindimensionales zu reduzieren:

$$w(k_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ik_x x} w(x) . \quad (6.8)$$

Die echten Wannier-Funktionen sind uns nicht bekannt, aber wir können auf die in Abschnitt 2.3.2 bestimmte harmonische Näherung (2.49) zurückgreifen. Daraus erhalten wir die normierten $w(k_x)$:

$$\begin{aligned} w(k_x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt[8]{\tilde{V}_0} \sqrt[4]{\frac{\pi}{a^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ik_x x} \exp \left[-\frac{\pi^2}{2} \sqrt{\tilde{V}_0} \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right] \\ &= \sqrt{\frac{a}{\pi^2}} \frac{\sqrt[4]{\pi}}{\sqrt[8]{\tilde{V}_0}} \exp \left(-\frac{a^2}{2\pi^2 \sqrt{\tilde{V}_0}} k_x^2 \right) . \end{aligned} \quad (6.9)$$

Damit ergibt sich:

$$|w(\mathbf{k})|^2 = \frac{a^3}{\pi^{9/2} \sqrt[4]{\tilde{V}_0^3}} \exp \left(-\frac{a^2}{\pi^2 \sqrt{\tilde{V}_0}} \mathbf{k}^2 \right) . \quad (6.10)$$

Gehen wir nun gemäß (6.2) in den Ortsraum über, müssen wir die Normänderung berücksichtigen, die in jeder Dimension zu einem Skalierungsfaktor von $m/\hbar t$ zwischen Orts- und Impulsraum führt:

$$|w(\mathbf{x})|^2 = \left(\frac{m}{\hbar t} \right)^3 \frac{a^3}{\pi^{9/2} \sqrt[4]{\tilde{V}_0^3}} \exp \left(-\frac{m^2 a^2}{\hbar^2 t^2 \pi^2 \sqrt{\tilde{V}_0}} \mathbf{x}^2 \right) . \quad (6.11)$$

Wie wir in (6.10) erkennen, hängt die Wannier-Funktion nur vom Betrag von \mathbf{k} ab. Wenn wir nun also, wie in Abschnitt 1.2 beschrieben, nur Wellenvektoren auf einem Kreis betrachten, dann ist der Wannier-Faktor an Maximum und Minimum gleich und die Visibilität (6.1) vereinfacht sich zu:

$$\mathcal{V} = \frac{S(k_{\max}) - S(k_{\min})}{S(k_{\max}) + S(k_{\min})} . \quad (6.12)$$

6.2 Molekularfeldtheorie

Bisher haben wir die Molekularfeldtheorie für die Berechnung des Phasendiagramms benutzt, da wir mit ihr lokal rechnen konnten. Nun müssen wir aber die nichtlokale Größe $\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle$ berechnen. Daher müssen wir im weiteren Verlauf mit dem vollen Hamiltonian (3.16) inklusive der Summe über die Gitterplätze i rechnen. Wir beginnen damit die Korrelationsfunktion

$$\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle = \mathcal{Z}_{\text{Ges}}^{-1} \text{Tr} \left\{ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j e^{-\beta \hat{H}_{\text{MF}}} \right\} \quad (6.13)$$

auszurechnen, wobei wir den gleichen Formalismus wie in Abschnitt 3.4 verwenden. Wir werden unsere Rechnung auf die zweite Ordnung von J beschränken. Die Zustandssumme für den lokalen Hamiltonian wurde bereits in (3.96) berechnet. Analog dazu erhalten wir die Zustandssumme des nichtlokalen Systems als:

$$\mathcal{Z}_{\text{Ges}} = \prod_l \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_l}} + \beta \psi^2 J^2 z^2 \sum_l \sum_{n_l=0}^{\infty} \left(\frac{n_l}{E_{n_l-1} - E_{n_l}} + \frac{n_l + 1}{E_{n_l+1} - E_{n_l}} \right) e^{-E_{n_l}} \prod_{k \neq l} \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_k}}. \quad (6.14)$$

Mit den Definitionen für den ungestörten Hamiltonian

$$\hat{H}_0 = \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i - Jz \psi^2 \quad (6.15)$$

und den Störoperator

$$\hat{V} = -Jz \sum_i \psi (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) \quad (6.16)$$

ergibt sich analog zu (3.72):

$$\text{Tr} \left\{ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j e^{-\beta \hat{H}} \right\} = \text{Tr} \left\{ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j e^{-\beta \hat{H}_0} \left[1 + \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \hat{V}_D(\tau) + \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \hat{V}_D(\tau) \hat{V}_D(\tau_1) + \dots \right] \right\}. \quad (6.17)$$

Das Ergebnis der nullten Ordnung in \hat{V}_D lässt sich sofort angeben:

$$\text{Tr} \left\{ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j e^{-\beta \hat{H}_0} \right\} = \delta_{ij} \sum_{n_i=0}^{\infty} n_i e^{-E_{n_i}} \prod_{l \neq i} \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_l}}. \quad (6.18)$$

Die erste Ordnung verschwindet aufgrund der ungeraden Potenz der Auf- bzw. Absteigeoperatoren. Damit kommen wir zur zweiten Ordnung:

$$\begin{aligned} A_2 &= \text{Tr} \left\{ \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j e^{-\beta \hat{H}_0} \left(\frac{-1}{\hbar} \right)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \hat{V}_D(\tau) \hat{V}_D(\tau_1) \right\} \\ &= \sum_{\vec{n}} \langle \vec{n} | \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j e^{-\beta \hat{H}_0} \left(\frac{Jz}{\hbar} \right)^2 \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \sum_l [\psi \hat{a}_{l,D}(\tau) + \psi \hat{a}_{l,D}^\dagger(\tau)] \sum_k [\psi \hat{a}_{k,D}(\tau_1) + \psi \hat{a}_{k,D}^\dagger(\tau_1)] | \vec{n} \rangle. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Jetzt sortieren wir die nichtdiagonalen Terme aus und benutzen die zyklische Vertauschbarkeit unter der Spur:

$$A_2 = \sum_{\vec{n}} \frac{\psi^2 J^2 z^2}{\hbar^2} \langle \vec{n} | e^{-\beta \hat{H}_0} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^\tau d\tau_1 \left\{ \delta_{i,j} \sum_l \left[\hat{a}_{l,D}^\dagger(\tau) \hat{a}_{l,D}(\tau_1) + \hat{a}_{l,D}(\tau) \hat{a}_{l,D}^\dagger(\tau_1) \right] \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \right. \\ \left. + \left[\hat{a}_{u,D}^\dagger(\tau) \hat{a}_{i,D}(\tau_1) + \hat{a}_{i,D}(\tau) \hat{a}_{j,D}^\dagger(\tau_1) \right] \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \right\} | \vec{n} \rangle . \quad (6.20)$$

Dabei ist das Integral des ersten Summanden bereits in (3.101) berechnet, wobei wir die dort beschriebene Vereinfachung nur durchführen können, wenn $i \neq l$ ist. Der zweite Summand berechnet sich analog zum Vorgehen in Abschnitt 3.4.2 mit (3.82) und ähnlichen Vereinfachungen wie diejenigen, die bei der Herleitung von (3.101) benutzt wurden:

$$A_2 = J^2 z^2 \psi^2 \left(\beta \delta_{i,j} \sum_l \sum_{n_l, n_i} n_l \left\{ \frac{n_l}{E_{n_l-1} - E_{n_l}} + \frac{n_l + 1}{E_{n_l+1} - E_{n_l}} \right\} \times e^{-\beta E_{n_l} + E_{n_i}} \prod_{k \neq i, l} e^{-\beta E_{n_k}} \right. \\ \left. + \sum_{n_i} \left[\frac{n_i}{E_{n_i-1} - E_{n_i}} + \frac{n_i + 1}{E_{n_i+1} - E_{n_i}} \right] e^{-\beta E_{n_i}} \sum_{n_j} \left[\frac{n_j}{E_{n_j-1} - E_{n_j}} + \frac{n_j + 1}{E_{n_j+1} - E_{n_j}} \right] e^{-\beta E_{n_j}} \prod_{k \neq i, j} e^{-\beta E_{n_k}} \right) \quad (6.21)$$

Betrachten wir die gesamte Korrelationsfunktion, so erhalten wir:

$$\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle = \frac{\delta_{i,j} \sum_{n_i=0}^{\infty} n_i e^{-E_{n_i}} \prod_{l \neq i} \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_l}} + A_2}{\prod_l \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_l}} + \beta \psi^2 J^2 z^2 \sum_l \sum_{n_l=0}^{\infty} \left(\frac{n_l}{E_{n_l-1} - E_{n_l}} + \frac{n_l+1}{E_{n_l+1} - E_{n_l}} \right) e^{-E_{n_l}} \prod_{k \neq l} \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_k}}}$$

Wir kürzen den Faktor $\prod_l \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_l}}$ und entwickeln den Bruch bis zu Termen der Ordnung J^2 . Dies liefert mit der Schreibweise (3.115):

$$\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \rangle = \delta_{i,j} \langle n_i \rangle_T + \psi^2 J^2 z^2 \left\langle \frac{n_i}{E_{n_i-1} - E_{n_i}} + \frac{n_i + 1}{E_{n_i+1} - E_{n_i}} \right\rangle_T \left\langle \frac{n_j}{E_{n_j-1} - E_{n_j}} + \frac{n_j + 1}{E_{n_j+1} - E_{n_j}} \right\rangle_T \\ + \psi^2 J^2 z^2 \beta \delta_{i,j} \left(\left\langle \frac{n_i^2}{E_{n_i-1} - E_{n_i}} + \frac{n_i(n_i + 1)}{E_{n_i+1} - E_{n_i}} + \frac{1}{\beta} \left[\frac{n_i}{(E_{n_i-1} - E_{n_i})^2} + \frac{n_i + 1}{(E_{n_i+1} - E_{n_i})^2} \right] \right\rangle_T \right. \\ \left. - \langle n_i \rangle_T \left\langle \frac{n_i}{E_{n_i-1} - E_{n_i}} + \frac{n_i + 1}{E_{n_i+1} - E_{n_i}} \right\rangle_T \right) . \quad (6.22)$$

Die Quasiimpulsverteilung ist also von der Form mit:

$$S(\mathbf{k}) = a + \psi^2 b \sum_i \sum_{h,k,l}^{N_S/2} \cos(k_x h a) + \cos(k_y k a) + \cos(k_z l a) \quad (6.23)$$

Koeffizienten a und b , die man zwar aus der obigen Rechnung bestimmen kann, deren tatsächliche Form aber keine Rolle spielt. In der Mott-Phase ($\psi = 0$) ist die Quasiimpulsverteilung vom Wellenvektor unabhängig und wir erhalten sofort nach (6.12) die Visibilität:

$$\mathcal{V} = \frac{a - a}{a + a} = 0 . \quad (6.24)$$

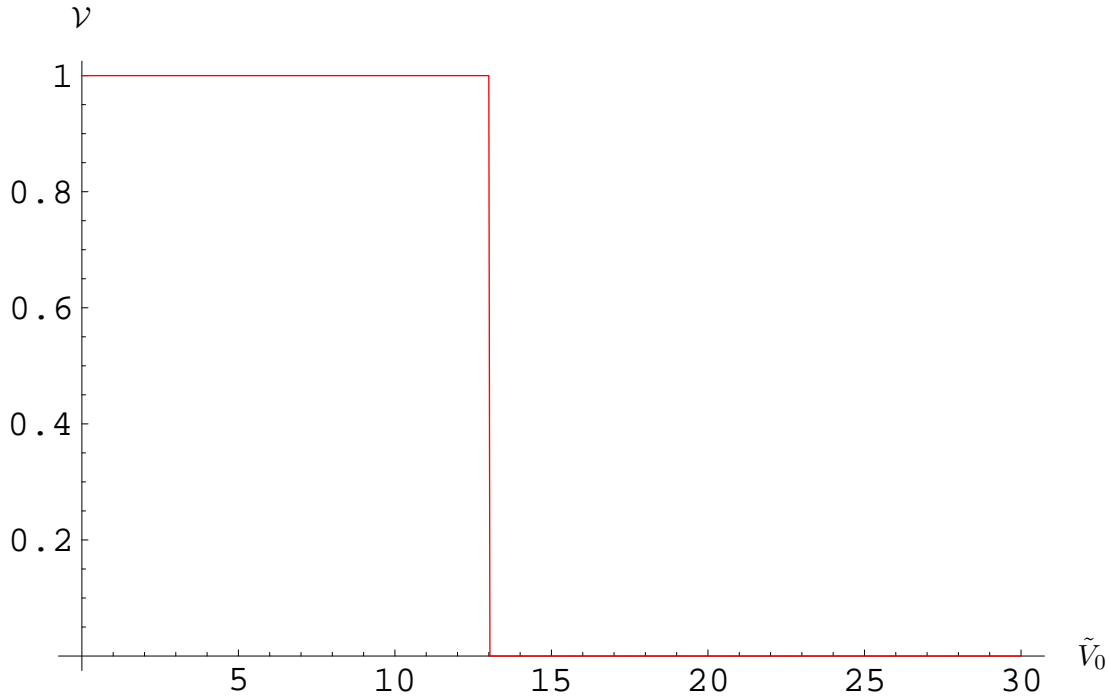


Abbildung 6.1: Visibilität in Abhängigkeit von V_0 gemäß der Molekularfeldtheorie für $\mu = 0,5$.

In der superfluiden Phase ($\psi > 0$) hingegen haben wir auch einen impulsabhängigen Anteil. Daher müssen wir die Dichte $n(\mathbf{k})$ nach (6.7) und anschließend deren Maxima bestimmen. Dabei erhalten wir eine transzendente Gleichung für das Maximum. Die Maxima der Quasiimpulsverteilung $S(\mathbf{k})$ sind schnell zu finden:

$$k_{x,y,z} = n \frac{2\pi}{a} \text{ mit: } n \in \mathbb{N} \quad . \quad (6.25)$$

Das erste Nebenmaximum ist also $\mathbf{k} = (2\pi/a, 0, 0)$. Die Wannier-Funktion $w(\mathbf{k})$ hingegen ist immer positiv und ändert sich im Vergleich zur Kosinusfunktion nur langsam. Daher können wir annehmen, dass sich das Maximum des Produktes in der Form $\mathbf{k}_{\max} = (2\pi/a, 0, 0) + \Delta$ mit einer kleinen Abweichung Δ darstellen lässt. Wir vernachlässigen nun diese Abweichung und setzen $\mathbf{k}_{\max} = (2\pi/a, 0, 0)$. Da wir bei $(0, 2\pi/a, 0)$ ein weiteres Maximum mit gleichem Radius haben, liegt das Minimum aus Symmetriegründen bei $\mathbf{k}_{\min} = (\sqrt{2}\pi/a, \sqrt{2}\pi/a, 0)$.

In (6.23) ist für $\psi > 0$ der hintere Term dominant, da er mit N_S^2 wächst:

$$\mathcal{V} = \frac{\sum_i \sum_{h,k,l}^{N_S/2} [\cos(2\pi h) + \cos(2\pi k) + \cos(2\pi l) - \cos(\sqrt{2}\pi h) + \cos(\sqrt{2}\pi k) + \cos(\sqrt{2}\pi l)]}{\sum_i \sum_{h,k,l}^{N_S/2} [\cos(2\pi h) + \cos(2\pi k) + \cos(2\pi l) + \cos(\sqrt{2}\pi h) + \cos(\sqrt{2}\pi k) + \cos(\sqrt{2}\pi l)]} \quad . \quad (6.26)$$

Da der Kosinus an den Maxima immer 1 ist, während an den Minima verschiedene positive und negative Werte auftreten, ist die Summe vernachlässigbar klein gegenüber der Summe über die Maxima und es gilt

$$\mathcal{V} = 1 \quad . \quad (6.27)$$

In Abbildung 6.1 sehen wir die so errechnete Visibilität dargestellt, wobei wir exemplarisch die für Phasengrenze $\mu = 0,5$ gewählt haben.

6.3 Visibilität der Mott-Phase

Die nach der Molekularfeldtheorie berechnete Visibilität liefert zwar die richtigen Grenzwerte für sehr große bzw. sehr kleine V_0 , aber die im Experiment beobachtete viel komplexere Struktur erhalten (siehe Abbildung 1.5) wir nicht. Daher versuchen wir im Folgenden mit dem Ansatz der Starkkopplungsreihe [22] ein besseres Ergebnis zu erzielen. Hierbei verwenden wir direkt den Bose-Hubbard Hamiltonian (2.1) und betrachten wie gehabt

$$\hat{H}_0 = \frac{U}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i - \mu \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad (6.28)$$

als ungestörtes System. Als Störoperator verwenden wir nun aber

$$\hat{V} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \quad (6.29)$$

Mit diesem Ansatz wollen wir nun in erster Ordnung rechnen.

6.3.1 Visibilität für $T = 0$

Wir benutzen die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie, um das System bei $T = 0$ zu lösen. Die Energie des ungestörten Problems ist einfach:

$$E_{\vec{n}} = \langle \vec{n} | \hat{H}_0 | \vec{n} \rangle = \sum_i \frac{U}{2} n_i (n_i - 1) - \mu n_i \quad (6.30)$$

Die erste Energiekorrektur nach (3.21a) verschwindet:

$$E_{\vec{n}}^{(1)} = \langle \vec{n} | \hat{V} | \vec{n} \rangle = 0 \quad (6.31)$$

Dazu gehört nach (3.21b) die Zustandskorrektur:

$$|\Psi_{\vec{n}}^{(1)}\rangle = -J \sum_{\vec{m} \neq \vec{n}} |\vec{m}\rangle \frac{\langle \vec{m} | \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j | \vec{n} \rangle}{E_{\vec{n}} - E_{\vec{m}}} = -\frac{J}{U} \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{\sqrt{n_j(n_i - 1)}}{n_i - n_j - 1} |\dots, n_i + 1, n_j - 1, \dots\rangle \quad (6.32)$$

In der ersten Ordnung sind unsere Zustandsvektoren $|\Psi_{\vec{n}}\rangle = |\vec{n}\rangle + |\Psi_{\vec{n}}^{(1)}\rangle$, mit denen wir nun die Korrelationsfunktion ausrechnen:

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \rangle &= \langle \Psi_{\vec{n}} | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k | \Psi_{\vec{n}} \rangle \\ &= \langle \vec{n} | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k | \vec{n} \rangle + \langle \vec{n} | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k | \Psi_{\vec{n}}^{(1)} \rangle + \langle \Psi_{\vec{n}}^{(1)} | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k | \vec{n} \rangle + \langle \Psi_{\vec{n}}^{(1)} | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k | \Psi_{\vec{n}}^{(1)} \rangle \quad (6.33) \end{aligned}$$

Wir setzen die in (6.32) erhaltenen Zustandskorrekturen ein und erhalten:

$$\langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \rangle = n_l \delta_{l,k} + \frac{J}{U} \frac{n_l(n_k + 1)}{n_k - n_l + 1} \delta_{d(l,k),1} + \frac{J}{U} \frac{n_k(n_l + 1)}{n_l - n_k + 1} \delta_{d(l,k),1} + O(J^2) \quad (6.34)$$

mit $d(l, k)$ als Abstand der Gitterplätze l und k in der Manhattannorm gemessen in Einheiten des Gitterabstandes a :

$$d(l, k) = \frac{|x_l - x_k| + |y_l - y_k| + |z_l - z_k|}{a} \quad (6.35)$$

Wir benutzen jetzt die Eigenschaft, dass in der Mott-Phase alle Gitterplätze gleich besetzt sind $n_l = n_k = n$ und gehen gemäß (6.6) zur Quasiimpulsverteilung über:

$$S(\mathbf{k}) = N_S n + 2n(n+1) \frac{J}{U} \sum_{\langle k, l \rangle} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l)} = N_S n + 4N_S n(n+1) \frac{J}{U} \sum_{i=1}^3 \cos(k_i a) \quad . \quad (6.36)$$

Daraus erhalten wir mit (6.2), (6.11) und (6.7) die Dichteverteilung im Ortsraum. Anschließend integrieren wir über die z -Achse, da im Experiment die Aufnahmetechnik immer nur zweidimensionale Bilder liefert und erhalten so:

$$n(x, y) = \frac{N_S m^2 w_0^2 \exp\left(-m^2 w_0^2 \frac{x^2 + y^2}{\hbar^2 t^2}\right)}{\pi \hbar^2 t^2} \times \left\{ n + n(n+1) \frac{J}{U} \left[\cos\left(\frac{mxa}{\hbar t}\right) + \cos\left(\frac{mya}{\hbar t}\right) + \exp\left(-\frac{a^2}{4w_0^2}\right) \right] \right\} \quad (6.37)$$

mit $w_0 = a/\pi \sqrt[4]{V_0}$. Daraus erhalten wir die in Abbildung 6.2 dargestellten Time-of-Flight Bilder, die den experimentellen Bildern in Abbildung 1.4 entsprechen.

Um die Visibilität zu bestimmen, nehmen wir wieder $\mathbf{k}_{\max} = (2\pi/a, 0, 0)$ und $\mathbf{k}_{\min} = (\sqrt{2}\pi/a, \sqrt{2}\pi/a, 0)$, da die Quasiimpulsverteilung in der Starkkopplungsreihe auch die Maxima bei $k_{x,y,z} = n2\pi/a$ mit $n \in \mathbb{N}$ hat. Aus (6.12) ergibt sich damit:

$$\mathcal{V} = \frac{n + 8n(n+1) \frac{J}{U} - [n + 8n(n+1) \frac{J}{U} \cos(\sqrt{2}\pi)]}{n + 8n(n+1) \frac{J}{U} + n + 8n(n+1) \frac{J}{U} \cos(\sqrt{2}\pi)} = \frac{8n(n+1) \frac{J}{U} [1 - \cos(\sqrt{2}\pi)]}{2n + 8n(n+1) \frac{J}{U} [1 + \cos(\sqrt{2}\pi)]} \quad . \quad (6.38)$$

Entwickeln wir den Bruch für kleine J/U , so erhalten wir:

$$\mathcal{V} = \frac{2 - 2 \cos(\sqrt{2}\pi)}{3} (n+1) \frac{zJ}{U} \quad . \quad (6.39)$$

Dieses Ergebnis steht im Widerspruch zu Referenz [14], wo der Vorfaktor aufgrund einer zu groben Näherung abweicht.

6.3.2 Visibilität für $T > 0$

Für endliche Temperaturen rechnen wir analog zu Abschnitt 3.4 im Wechselwirkungsbild. Als erstes brauchen wir die Zustandssumme \mathcal{Z} , für die nach (3.72) gilt:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} \left[1 + \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \hat{V}_D(\tau) + \dots \right] \right\} \quad . \quad (6.40)$$

Da der Störoperator keine Diagonalelemente enthält, verschwindet die erste Ordnung und es gilt:

$$\mathcal{Z} = \prod_l \sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_l}} \quad . \quad (6.41)$$

Nun können wir uns der Korrelationsfunktion zuwenden:

$$\langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \rangle = \mathcal{Z}^{-1} \text{Tr} \left\{ \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k e^{-\beta \hat{H}_0} \left[1 + \frac{-1}{\hbar} \int_0^{\hbar\beta} d\tau \hat{V}_D(\tau) + \dots \right] \right\} \quad . \quad (6.42)$$

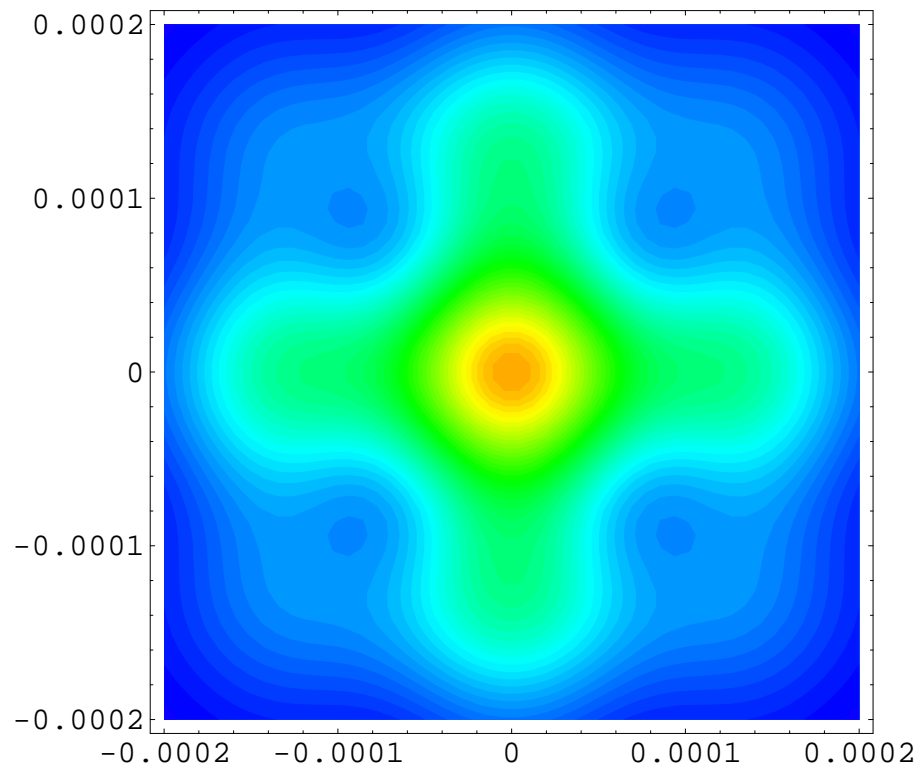
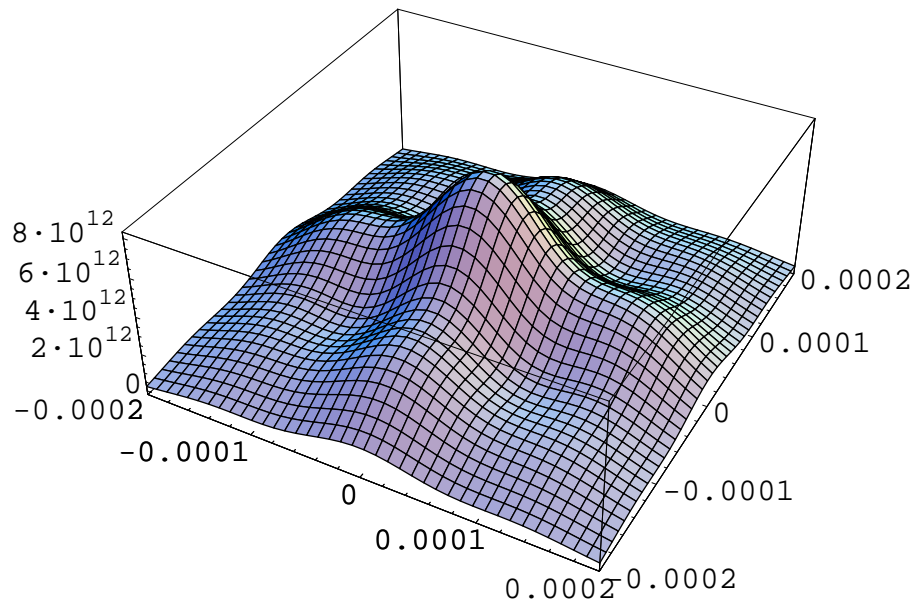


Abbildung 6.2: Theoretische Dichteverteilung für $\tilde{V}_0 = 15$ für ein reines Bose-Gas nach einer Expansionszeit von $t = 15$ ms in zwei verschiedenen Darstellungsweisen.

Wir führen die Spur aus, sodass nur folgende diagonalen Beiträge übrigbleiben:

$$\langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \rangle = \delta_{k,l} \frac{\sum_{n_l=0}^{\infty} n_l e^{-\beta E_{n_l}}}{\sum_{n_l=0}^{\infty} e^{-\beta E_{n_l}}} + \frac{J \delta_{d(l,k),1}}{\hbar \mathcal{Z}} \sum_{\vec{n}} \langle \vec{n} | \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k e^{-\beta \hat{H}_0} \int_0^{\hbar \beta} d\tau e^{\tau \hat{H}_0 / \hbar} \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l e^{-\tau \hat{H}_0 / \hbar} | \vec{n} \rangle \quad . \quad (6.43)$$

Ausrechnen des quantenmechanischen Erwartungswertes und lösen des Integrals liefert unter Verwendung von (3.115):

$$\langle \hat{a}_l^\dagger \hat{a}_k \rangle = \delta_{k,l} \langle n_l \rangle_T + \delta_{d(l,k),1} \frac{J}{U} \left\langle \frac{(n_l + 1)n_l + (n_k + 1)n_k}{(n_l - n_k + 1)(n_k - n_l + 1)} \right\rangle_T \quad . \quad (6.44)$$

Nun berechnen wir hiermit nach (6.6) die Quasimomentenverteilung:

$$S(\mathbf{k}, T) = S_0(T) + 2 \frac{J}{U} S_1(T) \sum_{i=1}^3 \cos(k_i a) \quad (6.45)$$

mit den Koeffizienten

$$S_0(T) = N_S \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\beta E_n}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n}} \quad (6.46)$$

und

$$S_1(T) = N_S \frac{\sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{(n+1)m + (m+1)n}{(n-m+1)(m-n+1)} e^{-\beta(E_n + E_m)}}{\sum_{n,m=0}^{\infty} e^{-\beta(E_n + E_m)}} \quad . \quad (6.47)$$

Damit hat die Quasimomentenverteilung die gleiche \mathbf{k} -Abhängigkeit wie bei verschwindender Temperatur (6.36). Daher folgt die Visibilität analog zu (6.39):

$$\mathcal{V} = \frac{zJ}{U} \frac{S_1(T)}{S_0(T)} \frac{1 - \cos(\sqrt{2}\pi)}{3} \quad . \quad (6.48)$$

Damit können wir feststellen, dass die Visibilität für alle Temperatur linear in zJ/U ist und die gesamte Temperaturabhängigkeit im Vorfaktor $S_1(T)[1 - \cos(\sqrt{2}\pi)]/3S_0(T)$ steckt. Daher schauen wir uns diesen Vorfaktor in Abbildung 6.3 genauer an. Wir erkennen, dass mit wachsender Temperatur der Vorfaktor und damit auch die Visibilität monoton abnimmt. Dieses Verhalten erklärt sich dadurch, dass die thermischen Fluktuationen die Korrelationen zerstören.

6.3.3 Vergleich mit dem Experiment

Nun können wir die hergeleiteten Formeln für die Visibilität (6.39) und (6.48) mit den experimentellen Daten der Sengstock-Gruppe aus Abbildung 1.5 vergleichen. Für die Theoriegerade bei $T = 0$ benötigen wir die Teilchenzahl, die wir aus dem in Abbildung 4.5 gegebenen Zusammenhang bestimmen. Bei den Daten wandeln wir die Auftragung in Abhängigkeit von der Laserstärke V_0 gemäß der Eichkurve in Abbildung 2.12 in eine Auftragung über Jz/U um und stellen beides in Abbildung 6.4 dar. Zusätzlich bestimmen wir eine Gerade, die wir an die hinteren, in der Mott-Phase liegenden Datenpunkte anfitzen. Diese Fitgerade liegt etwas unterhalb der Gerade bei verschwindender Temperatur und erfüllt so die in Abschnitt 6.3.2 gezeigte Eigenschaft, dass bei höheren Temperaturen die Visibilität sinkt. Desweiteren erkennen wir einen Knick in der Theoriegeraden. Die Ursache hierfür ist eine Änderung in der Teilchenzahl, wie sie in Abbildung 4.5 bei $\tilde{V}_0 \simeq 15$ zu erkennen ist. Ein derartige Knick ist an der gleichen Stelle auch in den Messdaten zu sehen und wurde auch in den Experimenten der

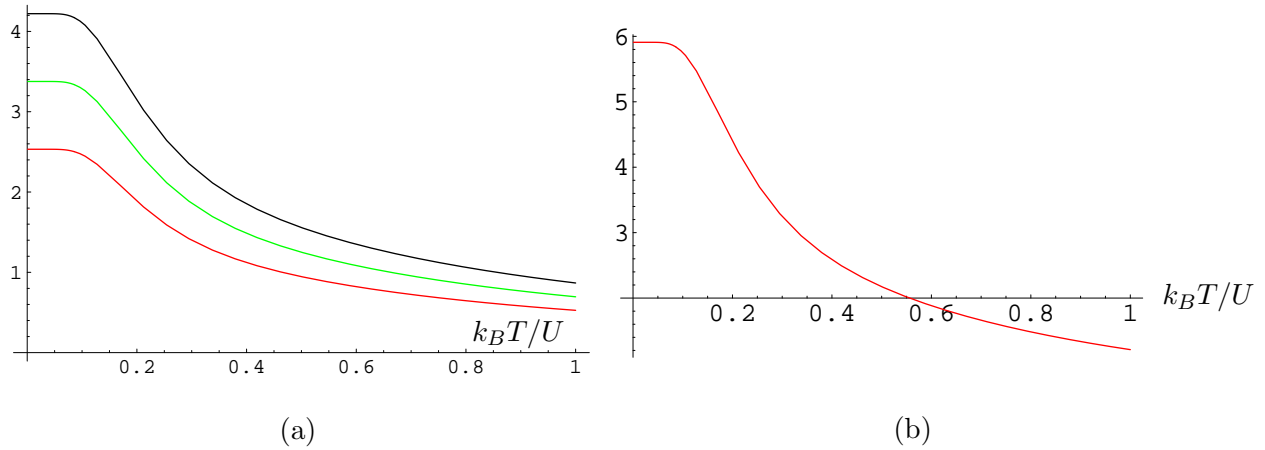


Abbildung 6.3: Vorfaktor $S_1(T)[1 - \cos(\sqrt{2}\pi)]/3S_0(T)$ der Visibilität (6.48) in Abhängigkeit von der Temperatur für $n = 2$ (rot), $n = 3$ (grün) und $n = 4$ (schwarz) (a), außerdem für $n = 6$ (b).

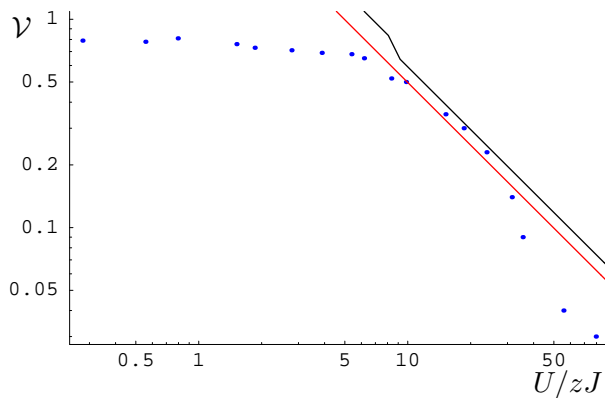


Abbildung 6.4: Vergleich der theoretischen Visibilität für $T = 0$ nach (6.39) (schwarz) mit den experimentellen Daten (blau) der Sengstock-Gruppe und einem linearen Fit an die Daten (rot).

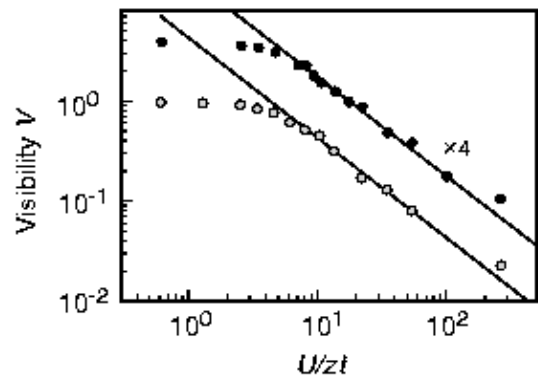


Abbildung 6.5: Visibilitätsmessung der Bloch-Gruppe [14].

Bloch-Gruppe beobachtet. Daher können wir annehmen, dass es sich um einen echten fallenbedingten physikalischen Effekt handelt. Alle weiteren in Abbildung 4.5 auftretenden Änderungen in der Teilchenzahl liegen im Bereich der superfluiden Phase und sind daher irrelevant.

Für die quantitative Analyse bestimmen wir die Steigung der angefitzten Gerade und lesen dann aus Abbildung 6.3(b) ab, welche Temperatur zu diesem Vorfaktor gehört. So erhalten wir $k_B T/U = 0.15$. Damit ist die Temperatur selber abhängig von der Gittertiefe \tilde{V}_0 . Dieses Verhalten lässt sich physikalisch anschaulich verstehen. Wenn wir die Gittertiefe erhöhen, so werden sich die Teilchen mehr im Zentrum der Gitterplätze aufhalten, was effektiv einem Verringern des Volumens entspricht. Da wir einen adiabatischen Prozess annehmen können, sollte sich die Temperatur erhöhen. Bei einer Gittertiefe von $\tilde{V}_0 = 20$, bei der wir nach Abbildung 2.4(c) eine Onsite-Energie von $\tilde{U} = 0.4$ haben, entspricht dies einer Temperatur von 612 nK.

Als letztes ist anzumerken, dass die Messpunkte in Abbildung 6.4, insbesondere die letzten zwei, nicht wirklich auf der Geraden liegen. Im Gegensatz dazu steht die Bloch-Messung in Abbildung 6.5, wo alle Punkte der Mott-Phase sehr gut auf der Geraden liegen. Ursache hierfür ist wahrscheinlich die Falle. Die sechsfache Tortonstruktur in der Sengstock-Messung lässt sich nur schwer mit dem homogenen Ergebnis für die Visibilität in Einklang bringen. Die Bloch-Messung hingegen wurde bei der viel geringeren Fallenfrequenz $\omega_m = 2\pi \times 15$ Hz und sehr viel breiteren Lasern $w = 130 \mu\text{m}$ durchgeführt. Bei diesen Verhältnissen sind nur zwei Mott-Schalen zu erwarten [15], was dem homogenen System viel näher kommt.

6.4 Visibilität in der superfluiden Phase

Bisher haben wir lediglich Rechnungen durchgeführt, die in der Mott-Phase und an der Phasengrenze gültig sind. Um einen bessere Übersicht über die Situation zu erhalten, wollen wir nun einen Blick auf die superfluide Phase werfen. Diese liegt für kleine Laserstärken V_0 vor. Hier gilt $U \approx 0$ (vgl. Abbildung 2.4). Damit reduziert sich der Bose-Hubbard Hamiltonoperator (2.1) auf [42]:

$$\hat{H}_{\text{BHM}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j - \mu \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \quad . \quad (6.49)$$

Offensichtlich hat (6.49) nicht mehr die Besetzungszustände $|\vec{n}\rangle$ als Eigenzustände. Verwenden wir nun die Fouriertransformierten der Erzeuger und Vernichter

$$\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad , \quad \hat{a}_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_S}} \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} \quad , \quad (6.50)$$

wobei die \mathbf{k} -Summe nur über die erste Brillouin-Zone läuft, so erhalten wir den Hamiltonian:

$$\hat{H}_{\text{SF}} = \sum_{\mathbf{k}} \left[-2J \sum_{i=1}^3 \cos(k_i a) - \mu \right] \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \quad . \quad (6.51)$$

Dieser hat als Eigenzustände die Besetzungszahlen im Impulsraum $|n_{\mathbf{k}}\rangle$ mit den dazugehörigen Eigenwerten:

$$E_{\text{SF}}(\mathbf{k}) = \left[-2J \sum_{i=1}^3 \cos(k_i a) - \mu \right] n_{\mathbf{k}} \quad . \quad (6.52)$$

Da wir uns in einem Bose-Kondensat befinden, erhalten wir das chemische Potential aus der Grundzustandsenergie. Dabei verwenden wir die Koordinationszahl $z = 6$:

$$E_G = -6J - \mu = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mu = -zJ \quad . \quad (6.53)$$

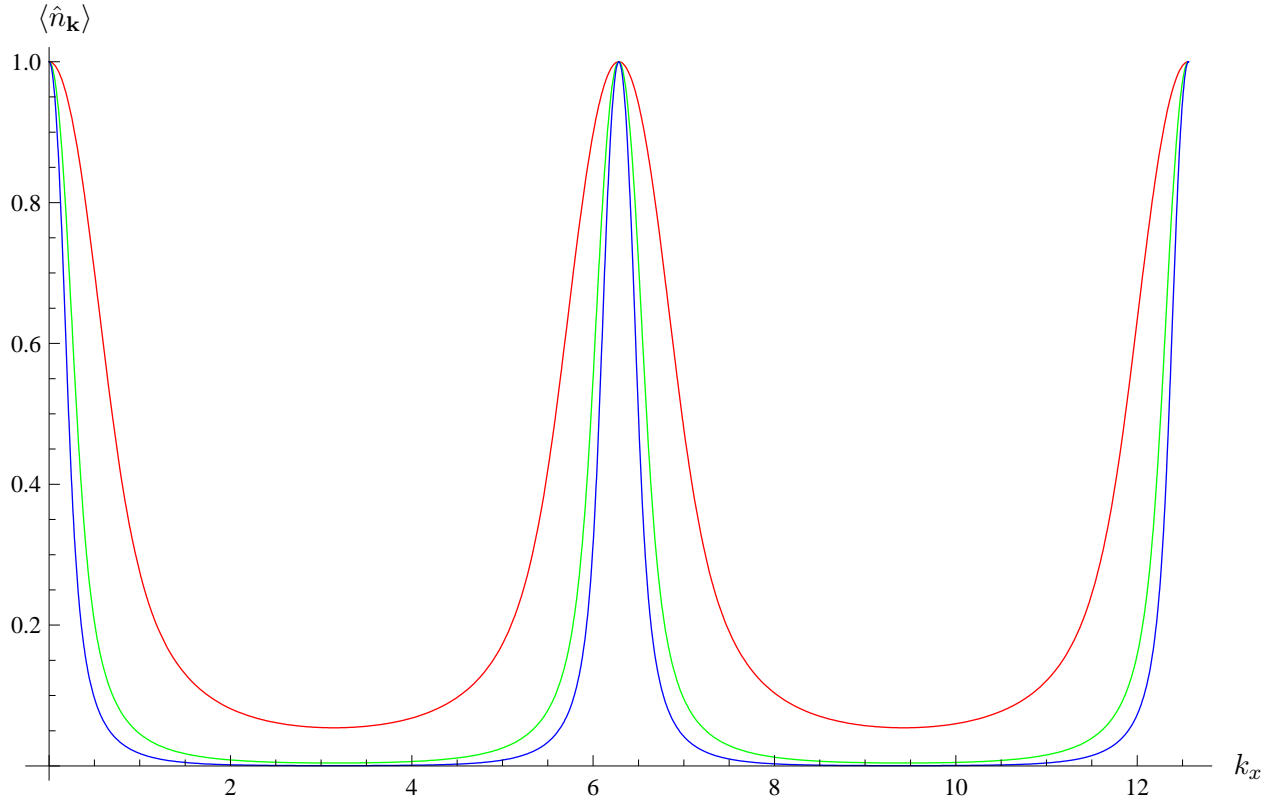


Abbildung 6.6: Besetzungszahl des Impulsraumes für verschiedene Temperaturen: $k_B T/U = 1$ (blau), $k_B T/U = 2$ (grün) und $k_B T/U = 10$ (rot).

Zur Bestimmung der Visibilität brauchen wir die Besetzungszahl des Impulsraumes. Im Fall $T = 0$ ist das Ergebnis schnell gefunden. Da wir uns an einem Energieminimum befinden müssen, sind die einzigen besetzten Impulszustände:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{a} \begin{pmatrix} n \\ l \\ k \end{pmatrix} \quad n, l, k = 0, 1, 2, \dots \quad (6.54)$$

Da nur an einzelnen Punkten die Besetzungszahl nicht verschwindet und das Integral über die Brillouin-Zone aber endlich sein soll, müssen an diesen Punkten δ -Peaks liegen. Die Visibilität ist folglich:

$$\mathcal{V} = 1 \quad (6.55)$$

Für endliche Temperaturen erhalten wir ein anderes Bild. Da unser Hamilton-Operator nun in Impulsdarstellung gegeben ist, müssen wir keine aufwendigen Rechnungen wie in Abschnitt 6.3 durchführen, sondern können die Impulsverteilung direkt ablesen:

$$\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{\text{Tr} \left\{ \hat{n}_{\mathbf{k}} e^{-\beta \hat{H}_{\text{SF}}} \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_{\text{SF}}} \right\}} = \frac{\sum_{n_{\mathbf{k}}} n_{\mathbf{k}} e^{-\beta E_{\text{SF}}(\mathbf{k})}}{\sum_{n_{\mathbf{k}}} e^{-\beta E_{\text{SF}}(\mathbf{k})}} \quad (6.56)$$

Diese ist in Abbildung 6.6 dargestellt. Dabei wurde die Normierung für jede Temperatur so gewählt, dass ihre Maxima alle gleich hoch sind. Wir erkennen, wie die Peaks mit wachsender Temperatur zum einen immer breiter werden, zum anderen steigt aber gerade die Besetzungszahl am Minimum. Letzteres führt zu einer Abnahme der Visibilität.

Dies können wir quantitativ untermauern, indem wir mit der Impulsverteilung (6.56) nun die Visibilität

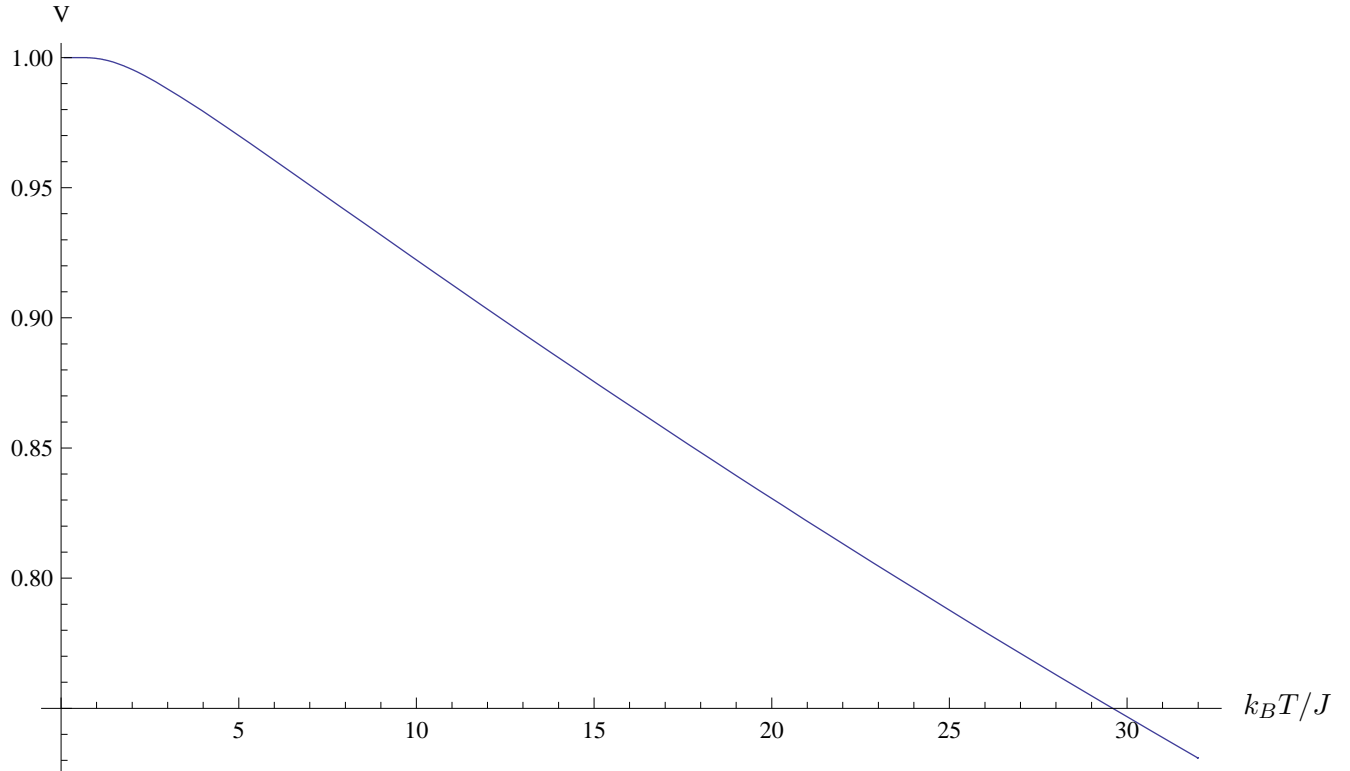


Abbildung 6.7: Visibilität in Abhängigkeit von der Temperatur.

nach der Definition (6.1) berechnen. Es ergibt sich das in Abbildung 6.7 gezeigte Bild, das eine eindeutig abfallende Sichtbarkeit für steigende Temperaturen zeigt. Dies entspricht dem experimentellen Bild, bei dem wir bei verschwindender Laserintensität nicht gegen eine Visibilität von 1 laufen. In Abbildung 1.5 lesen wir eine maximale Visibilität von 0.8 ab. Dies entspricht nach Abbildung 6.7 einer Temperatur von 624 nK. Das ist erheblich zu viel, da Rubidium bei dieser Temperatur nicht superfluid ist. Für verschwindende Gittertiefen entspricht das System einem normalen BEC in einer Falle dessen kritische Temperatur bekannt ist [43]:

$$T_c^{(0)} \approx 0.94 \frac{\hbar\omega}{k_B} N^{1/3} \quad , \quad (6.57)$$

was für unser Experiment den Werte $T_c^{(0)} = 132$ nK ergibt. Für diese Diskrepanz gibt es verschiedene Gründe. Zum einen können Unzulänglichkeiten unserer Theorie eine Rolle spielen. So haben wir in dieser Rechnung die Magnetfalle nicht berücksichtigt und außerdem verschwindet die Onsite-Energie selbst bei $\tilde{V}_0 = 0$ nicht völlig, sodass es zu einer Entvölkerung des Grundzustandes kommt (Depletion). Auf der anderen Seite gibt es experimentelle Probleme, die das genaue Bestimmen der Visibilität behindern. So kann man nicht direkt das Maximum und dessen Intensität bestimmen, sondern man muss die Intensität über einen endlichen Bereich mitteln, was zu einer Verringerung der Visibilität führt.

Auf den ersten Blick mag der in der superfluiden Phase bestimmte Zahlenwert 624 nK an die Temperatur 621 nK aus Abschnitt 6.3.3 erinnern, die in der Mott-Phase gilt. Dabei müssen wir aber bedenken, dass es sich bei Letzterem um den Wert bei $\tilde{V}_0 = 20$ handelt. Berechnen wir den Wert für $\tilde{V}_0 = 0$, wo unsere Onsite-Energie $\tilde{U}_0 = 0.01$ beträgt, so erhalten wir $T = 15.5$ nK. Dieser Wert erscheint unrealistisch klein. Wahrscheinlich ist die Extrapolation der adiabatischen Ausdehnung über den Phasenübergangspunkt nicht zulässig. Schließlich nimmt das Kondensat in der superfluiden Phase den ganzen Raum ein, sodass eine weitere Änderung der Laserstärke das Volumen nicht mehr ändert.

Kapitel 7

Bose-Fermi-Mischungen

Neben Experimenten mit einem reinen Bosegas in einem optischen Gitter existieren auch solche, in denen zu den Bosonen ein geringer Anteil an fermionischen Verunreinigungen hinzugesetzt wird [8,9]. Wir wollen in diesem Kapitel die Auswirkungen dieser Fermionen auf das Phasendiagramm betrachten.

7.1 Bose-Fermi-Hubbard-Modell

Durch die Fermionen erweitert sich der in (2.4) gegebene zweitquantisierte Hamiltonian um die folgenden Ausdrücke [30,44]:

$$\begin{aligned} \hat{H}_F = \int d^3x \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) & \left[-\frac{\hbar^2}{2m_F} \nabla^2 + \sum_{j=1}^3 V_F \sin(kx_j) - \mu_F \right] \hat{\phi}(\mathbf{x}) \\ & + \frac{2\pi a_{BF} \hbar^2 (m_F + m_B)}{m_F m_B} \int d^3x \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}) \hat{\phi}(\mathbf{x}) \quad . \end{aligned} \quad (7.1)$$

Dabei sind die $\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\phi}(\mathbf{x})$ die Feldoperatoren für Fermionen und $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\psi}(\mathbf{x})$ für Bosonen. Diese erfüllen die Antikommutatorrelationen

$$\{\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\phi}(\mathbf{x}')\} = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad \{\hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}), \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}')\} = 0, \quad \{\hat{\phi}(\mathbf{x}), \hat{\phi}(\mathbf{x}')\} = 0 \quad . \quad (7.2)$$

In (7.1) beschreibt der erste Beitrag die wechselwirkungsfreie Energie der Fermionen und der zweite die Kontaktwechselwirkung zwischen Fermionen und Bosonen. Eine Kontaktwechselwirkung zwischen den Fermionen tritt aufgrund des Pauli-Prinzips nicht auf.

Nun gehen wir analog zu Abschnitt 2.2 vor. Dabei erhalten wir viele Größen, die analog sind zu denen, die wir bei den Bosonen hatten. Daher werden wir im folgenden alle bosonischen Größen zur besseren Unterscheidung besonders kennzeichnen:

$$\begin{array}{ll} \mu \rightarrow \mu_B & m \rightarrow m_B \\ J \rightarrow J_B & U \rightarrow U_{BB} \\ n_i \rightarrow n_{B,i} & w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \rightarrow w_B(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \\ V_0 \rightarrow V_B & E_R \rightarrow E_{R,B} \quad . \end{array}$$

Die entsprechenden fermionischen Größen hingegen werden mit einem Index F gekennzeichnet. Nun entwickeln wir auch die fermionischen Feldoperatoren in Wannier-Zuständen

$$\hat{\phi}(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{b}_i w_F(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i), \quad \hat{\phi}^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_i \hat{b}_i^\dagger w_F^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \quad , \quad (7.3)$$

wobei $\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i$ die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren für Fermionen am Gitterplatz i sind. Für die analog zum Beweis bei ihren bosonischen Gegenstücken in Abschnitt 2.3 aus (7.2) folgt:

$$\{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j\} = \delta_{ij}, \quad \{\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger\} = 0, \quad \{\hat{b}_i, \hat{b}_j\} = 0 \quad . \quad (7.4)$$

So erhalten wir den Bose-Fermi-Hubbard-Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{BFH}} = & - \sum_{\langle i,j \rangle} (J_B \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + J_F \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j) + \frac{U_{BB}}{2} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_i \\ & + U_{BF} \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i - \mu_B \sum_i \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i - \mu_F \sum_i \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \quad . \end{aligned} \quad (7.5)$$

Dabei ist die Bose-Fermi-Wechselwirkungsenergie gegeben durch:

$$U_{BF} = \frac{2\pi a_{\text{BF}} \hbar^2 (m_F + m_B)}{m_F m_B} \int d^3x |w_B(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)|^2 |w_F(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)|^2 \quad (7.6)$$

und die Fermi-Hopping-Energie ist ganz analog zu (2.14) definiert als:

$$J_F = - \int d^3x w_F^*(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_F} \nabla^2 + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) \right] w_F(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) \quad . \quad (7.7)$$

Diese können wir wie in Abschnitt 2.3 sowohl numerisch als auch in harmonischen Näherung ausrechnen.

In der harmonischen Näherung sind die eindimensionalen Wannier-Funktionen mit der fermionischen Rückstoßenergie $E_{R,F} = \hbar^2 k_L^2 / 2m_F$ nach (2.49) gegeben:

$$w_B(x) = \sqrt[8]{\frac{V_B}{E_{R,B}}} \sqrt[4]{\frac{\pi}{a^2}} \exp \left[-\frac{\pi^2}{2} \sqrt{\frac{V_B}{E_{R,B}}} \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right] \quad , \quad (7.8)$$

$$w_F(x) = \sqrt[8]{\frac{V_F}{E_{R,F}}} \sqrt[4]{\frac{\pi}{a^2}} \exp \left[-\frac{\pi^2}{2} \sqrt{\frac{V_F}{E_{R,F}}} \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right] \quad . \quad (7.9)$$

Aufgrund der Analogie von (2.14) und (7.7) gilt:

$$\frac{J_F}{E_{R,F}} = \frac{J_B}{E_{R,B}} \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{J}_F = \frac{m_B}{m_F} \tilde{J}_B \quad . \quad (7.10)$$

Kommen wir nun zur Bose-Fermi-Wechselwirkungsenergie. Durch Einsetzen der Wannier-Funktionen in (7.6) erhalten wir:

$$U_{\text{BF}} = \frac{2\pi a_{\text{BF}} \hbar^2 (m_F + m_B)}{m_F m_B} \left[\frac{\pi}{a^2} \sqrt[4]{\frac{m_F}{m_B} \tilde{V}_F \tilde{V}_B} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{\pi^2}{a^2} (\sqrt{\tilde{V}_B} + \sqrt{\frac{m_F}{m_B} \tilde{V}_F}) x^2} \right]^3 \quad . \quad (7.11)$$

Nach Ausführen des Gaußintegrals und einigen Vereinfachungen ergibt sich:

$$U_{\text{BF}} = 4\sqrt{\pi} E_{R,B} \frac{a_{\text{BF}}}{a} \tilde{V}_F^{3/4} \tilde{V}_B^{3/4} \frac{1 + \frac{m_B}{m_F}}{\left(\sqrt{\tilde{V}_F} + \sqrt{\frac{m_B}{m_F} \tilde{V}_B} \right)^{3/2}} \quad . \quad (7.12)$$

Dies stimmt mit dem in Referenz [45] angegebenen Ausdruck überein. Befindet sich die Frequenz des Lasers nicht in der Nähe einer materialspezifischen Resonanz, gilt $V_B = V_F = V_0$. Damit vereinfacht sich diese Formel zu:

$$U_{\text{BF}} = 4\sqrt{\pi} E_{R,B} \frac{a_{\text{BF}}}{a} \tilde{V}_0^{3/4} \frac{1 + \frac{m_B}{m_F}}{\left(1 + \sqrt{\frac{m_B}{m_F}} \right)^{3/2}} \quad . \quad (7.13)$$

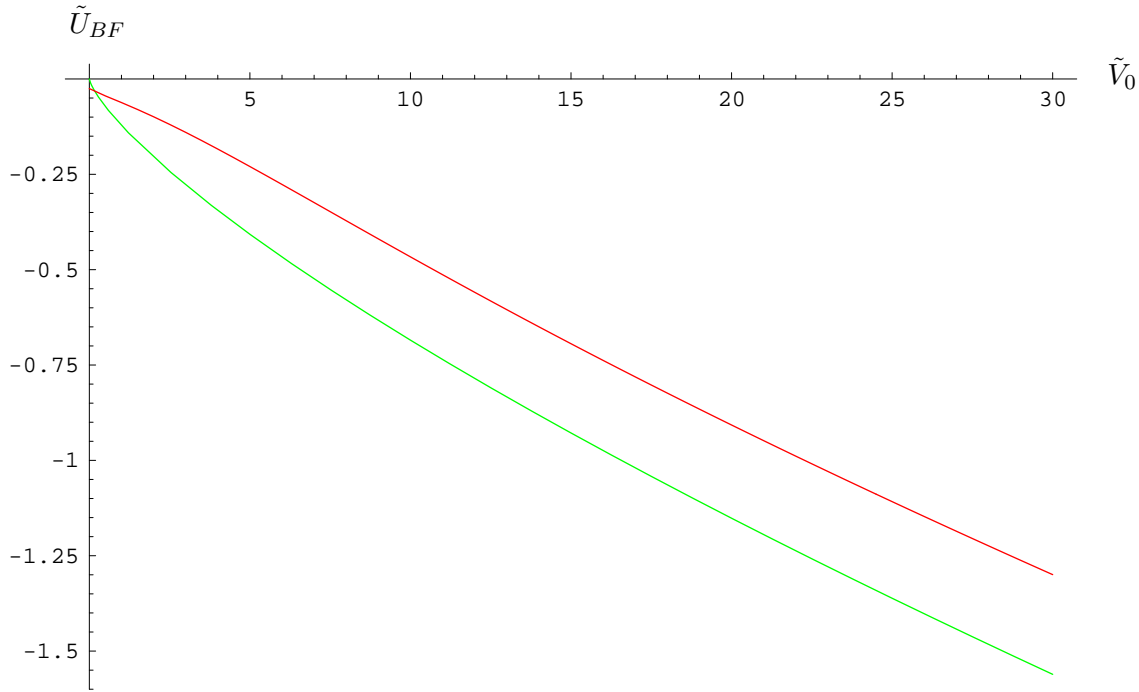


Abbildung 7.1: Boson-Fermion-Wechselwirkungsenergie U_{BF} in Abhängigkeit von der Laserstärke: Vergleich des numerisches Ergebnisses (rot) und der harmonische Näherung (grün).

Dieses Ergebnis können wir nun in Abbildung 7.1 mit dem numerisch berechneten vergleichen. Wie schon in Abschnitt 2.3.3 bei der Onsite- und der Hopping-Energie liefert die harmonische Näherung auch hier nur ein qualitativ richtiges Bild und ist für quantitative Aussagen ungeeignet. Da $U_{BF} < 0$ ist, ist die Wechselwirkung zwischen Bosonen und Fermionen in der von uns betrachteten experimentellen Situation anziehend.

7.2 Phasengrenze für $T = 0$

Auf Grundlage des Hamiltonoperators (7.5) werden wir nun die Phasengrenze des Bose-Fermi-Hubbard-Modells bei $T = 0$ berechnen. Dazu betrachten wir wie schon in Abschnitt 3.3 den Hoppinganteil als kleine Störung und setzen vorerst $J_B = J_F = 0$. Dadurch wird der Hamiltonoperator lokal und wir können jeden Platz einzeln betrachten. Schließlich definieren wir den Teilchenzahloperator der Fermionen $\hat{n}_{F,i} = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ und erhalten als ungestörten Hamiltonoperator:

$$\hat{H}_{0,i} = \frac{U_{BB}}{2} \hat{n}_{B,i} (\hat{n}_{B,i} - 1) + U_{BF} \hat{n}_{B,i} \hat{n}_{F,i} - \mu_B \hat{n}_{B,i} - \mu_F \hat{n}_{F,i} \quad . \quad (7.14)$$

Die Eigenzustände der Operatoren $\hat{n}_{F,i}$ und $\hat{n}_{B,i}$ sind bekannt. Da unser Hamiltonoperator eine Funktion dieser beiden Operatoren ist, ergeben sich die Eigenzustände des Hamiltonoperators als das direkte Produkt

$$|n_{F,i} n_{B,i}\rangle = |n_{F,i}\rangle \otimes |n_{B,i}\rangle \quad . \quad (7.15)$$

Aufgrund des Pauli-Prinzips kann dabei $n_{F,i}$ nur die Werte 0 und 1 annehmen. Damit haben wir zwei Arten von Gitterplätzen:

Fermionenfreie Gitterplätze, deren Energieeigenwerte genau die gleichen sind wie in (3.109):

$$E(n_{F,i} = 0) = \frac{U_{BB}}{2} n_{B,i} (n_{B,i} - 1) - \mu_B n_{B,i} \quad (7.16)$$

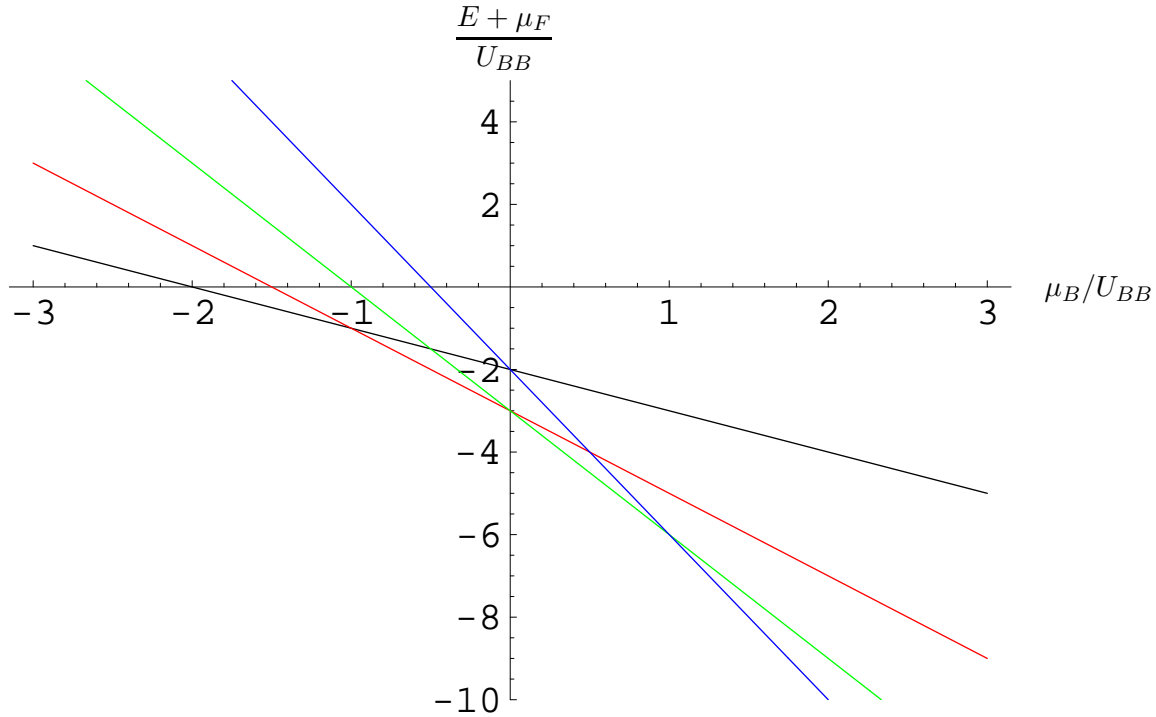


Abbildung 7.2: Ungestörte Energie für $n_{F,i} = 1$ bei $U_{BF}/U_{BB} = -2$ für $n_{B,i} = 1$ (schwarz), $n_{B,i} = 2$ (rot), $n_{B,i} = 3$ (grün) und $n_{B,i} = 4$ (blau).

und Gitterplätze, auf denen ein Fermion sitzt, und deren Energie folglich gegeben ist durch:

$$E(n_{F,i} = 1) = \frac{U_{BB}}{2} n_{B,i}(n_{B,i} - 1) - \mu_B n_{B,i} + U_{BF} n_{B,i} - \mu_F \quad . \quad (7.17)$$

Für die Gitterplätze ohne Fermion ist das Energieminimum und damit verbunden die Besetzungszahl schon in Abbildung 3.2 dargestellt. Ist nun ein Fermion auf einem Gitterplatz vorhanden, so gibt es gemäß (7.17) effektiv eine Verschiebung des chemischen Potentials durch die Bose-Fermi-Wechselwirkungsenergie, die in Abbildung 7.2 zu sehen ist. Da die Wechselwirkung zwischen Bosonen und Fermionen anziehend ist, erhalten wir auf den Gitterplätzen mit Fermionen verglichen mit denen ohne Fermion bei gleichem chemischen Potential mehr Bosonen.

Wenn wir nun das verschobene chemische Potential

$$\mu_B^1 = \mu_B - U_{BF} \quad (7.18)$$

definieren und die Besetzungszahl auf Gitterplätzen mit einem Fermion als n_B^1 bezeichnen, während wir die Besetzungszahl an Gitterplätzen ohne Fermion als n_B^0 benennen, so erhalten wir:

$$E(n_{F,i} = 0) = \frac{U_{BB}}{2} n_B^0(n_B^0 - 1) - \mu_B n_B^0 \quad , \quad (7.19)$$

$$E(n_{F,i} = 1) = \frac{U_{BB}}{2} n_B^1(n_B^1 - 1) - \mu_B^1 n_B^1 - \mu_F \quad . \quad (7.20)$$

Als nächstes machen wir uns daran die Phasengrenze auszurechnen. Dazu betrachten wir nur den Fall $J_F = 0$. Diese Annahme ist auf den ersten Blick unverständlich, da die verwendeten Fermionen leichter sind als die Bosonen und folglich nach (7.10) leichter tunneln sollten. Wenn wir aber annehmen, dass die Fermionen mit den von ihnen angezogenen Bosonen Kompositteilchen bilden [46], dann haben diese Kompositteilchen eine sehr große Masse und können demnach nicht tunneln. Außerdem könnte man durch Wahl der Laserwellenlänge in der Nähe einer Resonanz der Fermionen diese künstlich

festpinnen, und so ein Zufallsgitter zu erzeugen, in dem man Anderson-Lokalisation beobachten kann. Dies wurde in Referenz [47] vorgeschlagen. Anschließend verwenden wir den Molekularfeldansatz aus Kapitel 3, um das Bosonen-Hopping einzuschließen. So erhalten wir den Molekularfeldhamiltonian für Bose-Fermi-Mischungen als:

$$\hat{H}_{\text{MF}} = \frac{U_{BB}}{2} \hat{n}_{B,i} (\hat{n}_{B,i} - 1) + U_{BF} \hat{n}_{B,i} \hat{n}_{F,i} - \mu_B \hat{n}_{B,i} - \mu_F \hat{n}_{F,i} + Jz\psi^2 - Jz\psi (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger) \quad . \quad (7.21)$$

Dabei ist lediglich der letzte Term der Störoperator $\hat{V} = -Jz\psi (\hat{a}_i + \hat{a}_i^\dagger)$ und alles andere ist der ungestörte Hamiltonian, dessen Eigenwerte sich aus (7.16) und (7.17) ergeben. Da unser ungestörtes Problem prinzipiell dasselbe ist wie in Abschnitt 3.3 und sich lediglich im chemischen Potential (7.18) und im konstanten Anteil um $\mu_F \hat{n}_{F,i}$ unterscheidet, erhalten wir in der Störungstheorie für einen Gitterplatz dieselben Energien wie im Fall reiner Bosonen. Nehmen wir nun an, dass c Gitterplätze mit einem Fermion belegt sind, so erhalten wir für die Energien in der zweiten Ordnung in ψ :

$$E(\psi) = (1-c) \left\{ \frac{U_{BB}}{2} n_B^0 (n_B^0 - 1) - \mu_B n_B^0 + zJ_B \psi^2 + z^2 J_B^2 \left[\frac{n_B^0 + 1}{\mu_B - U n_B^0} + \frac{n_B^0}{U(n_B^0 - 1) - \mu_B} \right] \right\} \\ + c \left\{ \frac{U_{BB}}{2} n_B^1 (n_B^1 - 1) - \mu_B^1 n_B^1 - \mu_F + zJ_B \psi^2 + z^2 J_B^2 \left[\frac{n_B^1 + 1}{\mu_B^1 - U n_B^1} + \frac{n_B^1}{U(n_B^1 - 1) - \mu_B^1} \right] \right\} \quad . \quad (7.22)$$

Nun können wir diese Energie als Landau-Entwicklung

$$E(\psi) = a_{0,M} + a_{2,M} \psi^2 + \dots \quad (7.23)$$

darstellen mit dem Mischungskoeffizienten

$$a_{2,M} = zJ_B + (1-c) z^2 J_B^2 \frac{U_{BB} + \mu_B}{(\mu_B - U_{BB} n_B^0)(U_{BB}(n_B^0 - 1) - \mu_B)} \\ + c z^2 J_B^2 \frac{U_{BB} + \mu_B^1}{(\mu_B^1 - U_{BB} n_B^1)(U_{BB}(n_B^1 - 1) - \mu_B^1)} \quad . \quad (7.24)$$

Aus der Landau-Bedingung $a_{2,M} = 0$ erhalten wir die folgende Phasengrenze [32]:

$$\frac{zJ_B}{U} = \frac{(\frac{\mu_B}{U_{BB}} - n_B^0)(n_B^0 - 1 - \frac{\mu_B}{U_{BB}})(\frac{\mu_B^1}{U_{BB}} - n_B^1)(n_B^1 - 1 - \frac{\mu_B^1}{U_{BB}})}{(1-c)(1 + \frac{\mu_B}{U_{BB}})(\frac{\mu_B^1}{U_{BB}} - n_B^1)(n_B^1 - 1 - \frac{\mu_B^1}{U_{BB}}) + c(1 + \frac{\mu_B^1}{U_{BB}})(\frac{\mu_B}{U_{BB}} - n_B^0)(n_B^0 - 1 - \frac{\mu_B}{U_{BB}})} \quad . \quad (7.25)$$

Die darin auftretenden Besetzungszahlen n_B^0 und n_B^1 ergeben sich immer noch aus der Beziehung $n_B^i = \lceil \mu_B^i \rceil$ mit $i = \cdot, 1$, wobei die eckigen Klammern die nächste ganze Zahl bedeuten. Die durchschnittliche Teilchenzahl im gesamten Gitter ergibt sich dann durch:

$$\bar{n} = (1-c)n_B^0 + cn_B^1 = (1-c) \lceil \frac{\mu_B}{U_{BB}} \rceil + c \lceil \frac{\mu_B^1}{U_{BB}} \rceil \quad . \quad (7.26)$$

Diese Phasengrenze hängt nun von zwei Parametern ab: der Fermionenkonzentration c und der Bose-Fermi-Wechselwirkungsenergie U_{BF} . In Abbildung 7.3 ist sie für exemplarische Werte dargestellt. Dabei ist zu erkennen, dass sich für ganzzahliges U_{BF}/U_{BB} qualitativ ein gleiches Bild wie ohne Fermionen ergibt (vgl. Abbildung 3.4). Für nichtganzzahlige Werte erhalten wir zusätzliche Mott-Lobes. Eine quantitativer Vergleich gestaltet sich aber durch die neuen Mott-Lobes und die ungeraden durchschnittlichen Besetzungszahlen sehr schwierig. Im Experiment wird die Teilchenzahl festgehalten und nicht das chemische Potential. Daher werden wir uns beim Vergleich auf die Abbildung 7.3(c) beschränken. Diese besitzt keine neuen Lobes und hat ausschließlich ganzzahlige Besetzungszahlen. Ein

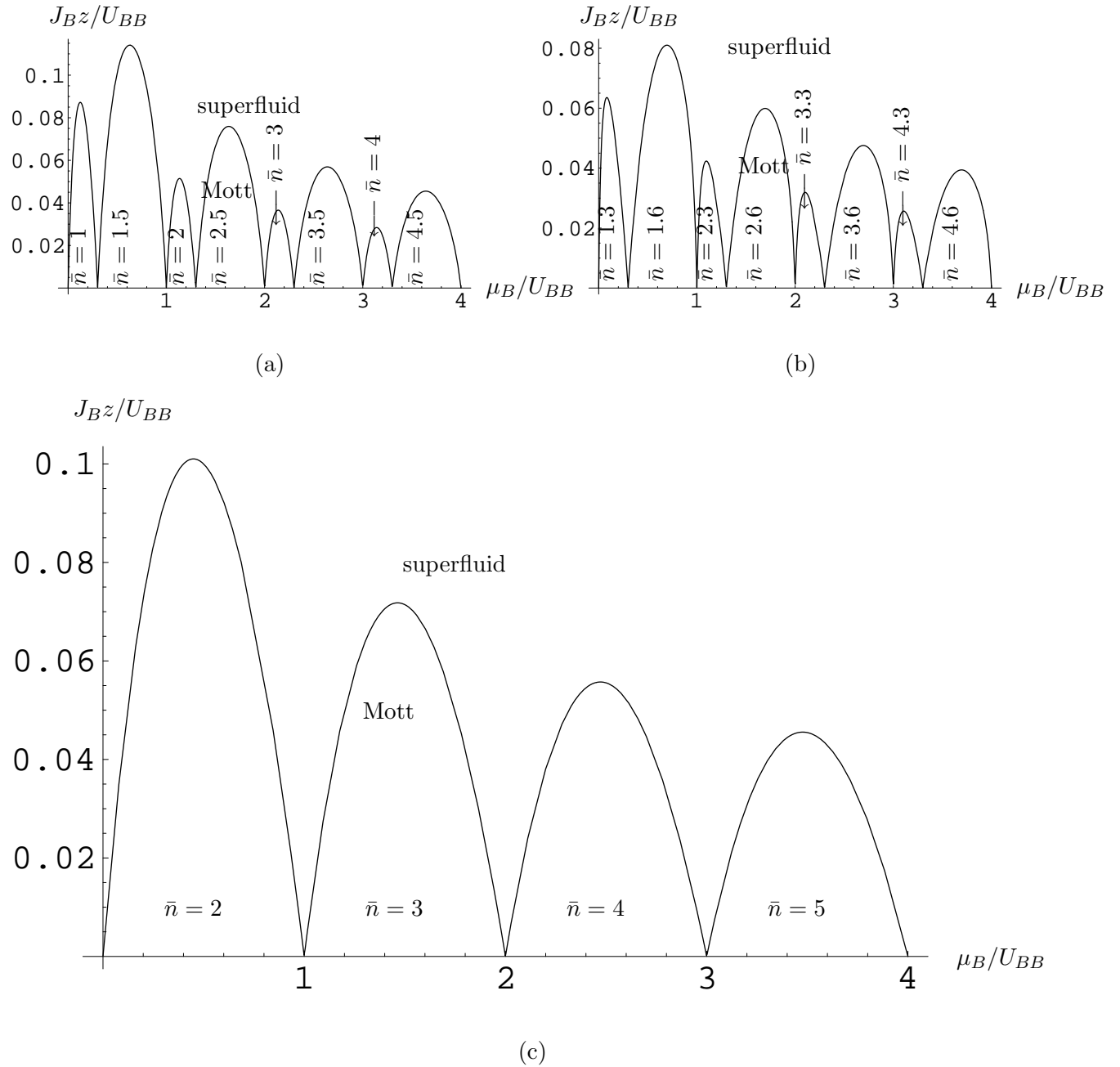


Abbildung 7.3: Phasendiagramm für verschiedene Fermionenkonzentrationen c und Wechselwirkungsstärken U_{BF} : (a) $c = 0.5$ und $U_{BF} = -0.7$, (b) $c = 0.3$ und $U_{BF} = -1.7$, (c) $c = 0.5$ und $U_{BF} = -2$.

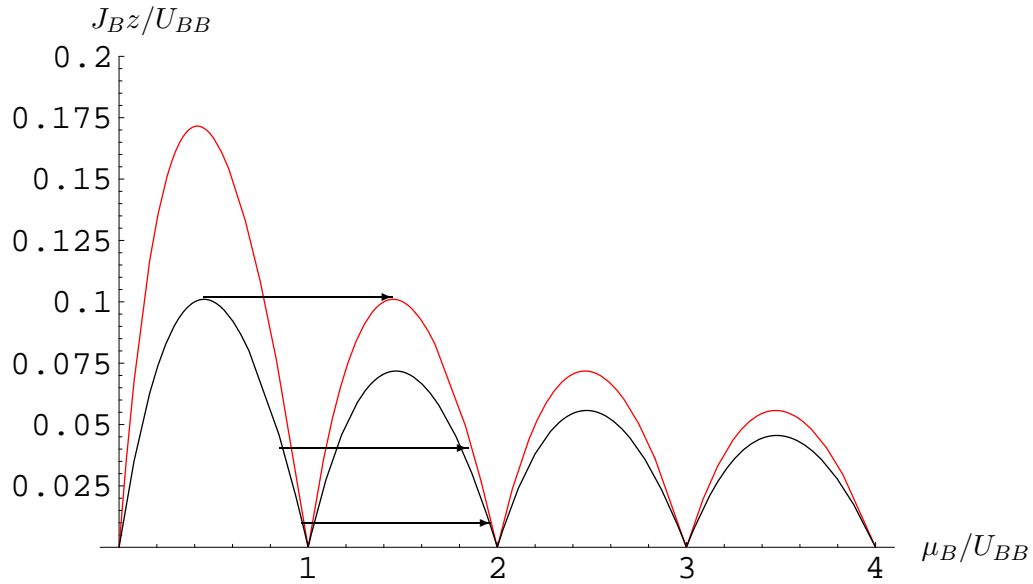


Abbildung 7.4: Phasengrenze für reine Bosonen (rot) und Bose-Fermi-Mischung bei $c = 0,5$ und $U_{BF} = -2$ (schwarz).

Übereinanderlegen in Abbildung 7.4 zeigt, dass bei gleichem chemischen Potential die Phasengrenze zugunsten der superfluiden Phase verschoben wurde. Man muss aber beachten, dass der erste Mott-Lobe bei der Bose-Fermi-Mischung zu $\bar{n} = 2$ gehört genauso wie der zweite Mott-Lobe des reinen Bosegases. Daher müssen wir diese beiden Lobes miteinander vergleichen. Dazu verschieben wir den ersten Mott-Lobe der Mischung entlang der Pfeile und stellen fest, dass diese identisch sind. Folglich gibt es keine Veränderung der Phasengrenze bei Hinzugabe der Fermionen. Dies ist insoweit verwunderlich, da man im Experiment schon bei kleinen Fermionenkonzentrationen eine starke Abnahme der Visibilität beobachtet [8,9].

7.3 Phasengrenze $T > 0$

Zur Bestimmung der Phasengrenze bei endliche Temperaturen brauchen wir keine neuen Rechnungen durchzuführen. Genauso wie bei der $T = 0$ -Betrachtung werden wir die Ergebnisse aus Abschnitt 3.4 wiederverwenden. Zusammen mit (7.18) erhalten wir analog zu (3.116):

$$\begin{aligned}
 a_{2,M}(T) = & Jz + (1-c)J^2 z^2 Z_0^{-1} \sum_{n_B^0=0}^{\infty} \left[\frac{U_{BB} + \mu_B}{(\mu_B - U_{BB} n_B^0)(U_{BB}(n_B^0 - 1) - \mu_B)} \right] e^{-E'_{n_B^0}/k_B T} \\
 & + cJ^2 z^2 Z_0^{-1} \sum_{n_B^1=0}^{\infty} \left[\frac{U_{BB} + \mu_B^1}{(\mu_B^1 - U_{BB} n_B^1)(U_{BB}(n_B^1 - 1) - \mu_B^1)} \right] e^{-E'_{n_B^1}/k_B T} .
 \end{aligned} \tag{7.27}$$

Die dazu gehörige Phasengrenze stellen wir in Abbildung 7.5 dar. Wir erkennen, dass sich auch für die Mischungen die aus Kapitel 3.4.3 bekannten Temperatureffekte ergeben. Die Unterscheidbarkeit der einzelnen Mott-Lobes verwischt sich und der Mott-Bereich dehnt sich aus.

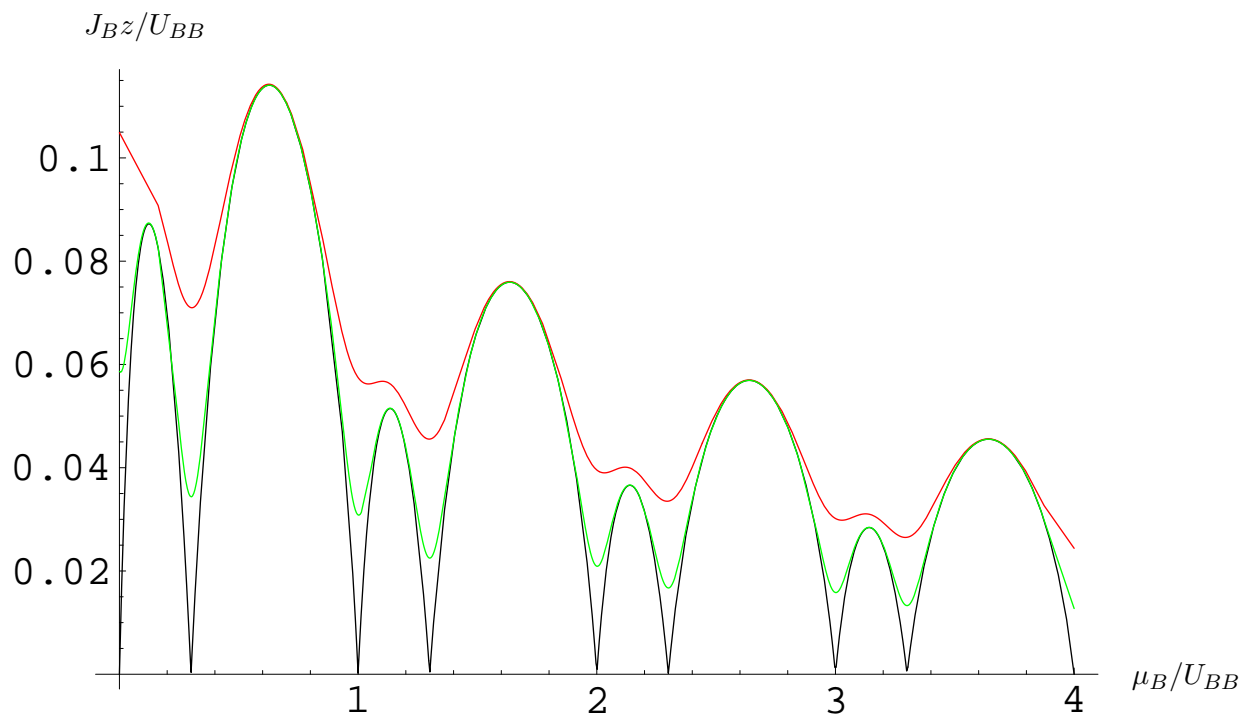


Abbildung 7.5: Phasengrenze für $c = 0,5$ und $U_{BF} = -0,7$ bei den Temperaturen $k_B T/U_{BB} = 0$ (schwarz), $k_B T/U_{BB} = 0,02$ (grün) und $k_B T/U_{BB} = 0,05$ (rot).

Kapitel 8

Zusammenfassung und Ausblick

Wir haben uns in dieser Diplomarbeit ausführlich mit Bosonen im optischen Gitter, die durch das Bose-Hubbard-Modell beschrieben werden, beschäftigt. Dabei sind wir daran interessiert gewesen, sowohl die Grenze zwischen der superfluiden Phase und der Mott-Phase als auch die Visibilität der Time-of-Flight-Interferenzbilder für endliche Temperaturen zu bestimmen. Unser Ziel ist es gewesen, aus der Visibilitätsmessung die Temperatur des Kondensates im Gitter zu bestimmen.

Auch wenn wir uns hauptsächlich nur auf den einfachen Fall eines homogenen, spinpolarisierten Bose-Gases beschränkt haben, so konnten wir viele interessante Eigenschaften feststellen. Während wir uns in Kapitel 2 mit der Herleitung des Bose-Hubbard-Hamiltonians beschäftigten, haben wir festgestellt, dass die in der Literatur häufig verwendete harmonische Näherung quantitativ nur sehr ungenau ist. Desweiteren haben wir in Kapitel 3 die Phasengrenze im Rahmen der Molekularfeldtheorie berechnet. Dabei ist es uns gelungen, das bekannte Ergebnis für $T = 0$, dargestellt in Abbildung 3.4, zu bestätigen und dieses anschließend für endliche Temperaturen zu verallgemeinern. Dazu haben wir das Wechselwirkungsbild der Quantenmechanik und die Dyson-Reihe benutzt, um das Phasendiagramm in der Form von (3.119) und Abbildung 3.9 zu erhalten. Im Vergleich mit Ergebnissen von Monte-Carlo-Simulationen konnten wir feststellen, dass die so berechnete Phasengrenze bei zu kleinen Werten liegt. Daher haben wir in Kapitel 5 versucht, durch die Berücksichtigung von Quantenkorrekturen zur Molekularfeldtheorie unser Ergebnis zu verbessern. Dabei haben wir das erstaunliche Ergebnis erhalten, dass die berechneten Korrekturen der ersten Ordnung zwar eine Veränderung des Landau-Koeffizienten a_2 von (3.119) nach (5.47) bewirken, die Phasengrenze aber nicht ändern. Es bleibt abzusehen, ob mit Korrekturen höherer Ordnung eine Verbesserung der Phasengrenze zu erreichen ist.

Weiterhin haben wir uns ausführlich mit der Berechnung der Visibilität beschäftigt. Dabei verwendeten wir für Rechnungen in der Mott-Phase die Starkkopplungstheorie, da die Molekularfeldtheorie gemäß Abbildung 6.1 ein zu ungenaues Resultat liefert. Hierbei konnten wir die theoretische Dichteverteilung im Time-of-Flight Bild berechnen (siehe Abbildung 6.2), die den experimentellen Bildern in Abbildung 1.4 entsprechen. Außerdem haben wir auch die Visibilität in der superfluiden Phase berechnet. Daraus gelang es uns erstmalig, analytische Ausdrücke für die Visibilität (6.48) bei endlichen Temperaturen zu finden. Diese hatten zwar qualitativ die richtigen Eigenschaften, aber eine quantitative Analyse von experimentellen Daten (vgl. Abbildung 6.4) lieferte nur unrealistische Temperaturen. Unser Ziel, ein Thermometer für die das Bose-Gas im optischen Gitter zu finden, haben wir nicht erreicht. Die Näherungen, die unserer Rechnung zugrunde liegen, sind offensichtlich zu grob gewesen. In diesem Zusammenhang ist zu erwähnen, dass wir bei diesen Rechnungen grundsätzlich homogen gerechnet und die im Experiment verwendete harmonische Falle vernachlässigt haben. Dabei haben wir in Kapitel 4 herausgefunden, dass gerade diese Zusatzfalle große Auswirkungen auf die Bosonenanordnung im Gitter hat. So bildet sich nämlich eine mehrschichtige Tortenstruktur von Mott-Isolatoren, die in Abbildung 4.2 zu sehen ist. Es ist anzunehmen, dass, wenn wir die vernachlässigte Tortenstruktur in unsere bisherigen Überlegungen miteinbeziehen, wir ein funktionstüchtiges Thermometer erhalten.

Zuletzt haben wir uns mit der Bose-Fermi-Mischung beschäftigt und auch hier Phasendiagramme für verschiedene Wechselwirkungsstärken und Konzentrationen berechnet, die in Abbildung 7.3 gezeigt werden. Dabei haben wir die Näherung verwendet, dass das Fermionen-Hopping vernachlässigbar ist. Diese Situation ist experimentell realisierbar und führt zu dem interessanten Phänomen der Anderson-Lokalisation [47]. Weiterhin wäre es im Hinblick auf die Experimente der Referenzen [8,9] interessant, auch ein System zu untersuchen, in dem die Fermionen beweglich sind. Die hier erhaltenen Phasendiagramme können nur unter bestimmten Bedingungen mit dem für das reine Bosonengas verglichen werden. Dann stellt man aber fest, dass sich die Phasengrenzen von Mischung und reinem System nicht unterscheiden. Die Berechnung der Visibilität der Mischung steht noch aus. Es ist zu hoffen, dass hierbei das experimentell beobachtete Absinken der Visibilität erklärt werden kann (siehe Abbildung 1.5).

Abbildungsverzeichnis

1.1	Formaler Aufbau des dreidimensionalen kubischen Gitters.	7
1.2	Potential des Optischen Gitters.	7
1.3	Eichkurve ω	7
1.4	Time-of-Flight Bilder	7
1.5	Visibilität experimentell	8
2.1	Konvergenz der Wannier-Funktion	21
2.2	Wannier-Funktion verschiedener Laserstärken	21
2.3	Vergleich von numerischer und genäherter Wannier-Funktion	22
2.4	Onsite-Energie für verschiedene Dimensionen	23
2.5	Fehleranalyse der Onsite-Energie	24
2.6	Vergleich der relativen Fehler verschiedener Dimensionen	25
2.7	Bandschema des optischen Gitter	26
2.8	Unterstes Band für verschiedene \tilde{V}_0	26
2.9	Hopping-Energie	26
2.10	Relativer Fehler der Hopping-Energie	27
2.11	Schematische Darstellung der harmonischen Näherung	27
2.12	Eichkurve von J/U	28
3.1	Großkanonisches Potential in Abhängigkeit des Ordnungsparameters	30
3.2	Energieminimum und Teilchenzahl	35
3.3	Energiedichte für rationale Teilchendichten	37
3.4	Phasengrenze für $T = 0$	37
3.5	Vergleich mit Monte-Carlo-Simulation	39
3.6	Temperaturabhängiges großkanonisches Potential	48
3.7	Temperaturabhängige Teilchenzahl (Ausschnitt)	48
3.8	Temperaturabhängige Teilchenzahl	48
3.9	Temperaturabhängige Phasengrenze	49

4.1	Fallenpotential	52
4.2	Teilchendichte in Abhängigkeit von μ	53
4.3	Teilchendichte für endliche Temperaturen	53
4.4	Gesamtteilchenzahl und Dichte	55
4.5	Chemische Potential in der Falle	56
6.1	Visibilität gemäß der Molekularfeldtheorie	69
6.2	Theoretische Dichteverteilung	72
6.3	Temperaturabhängigkeit des Visibilitätsvorfaktors	74
6.4	Vergleich der Visibilität mit den experimentellen Daten	74
6.5	Visibilitätsmessung der Bloch-Gruppe	74
6.6	Besetzungszahl des Impulsraumes	76
6.7	Visibilität in Abhängigkeit von der Temperatur.	77
7.1	Boson-Fermion-Wechselwirkungsenergie U_{BF}	81
7.2	Ungestörte Energie in Anwesenheit eines Fermions	82
7.3	Phasendiagramm für verschiedene Fermionenkonzentrationen	84
7.4	Vergleich der Phasengrenzen	85
7.5	Phasengrenze der Mischung bei endlicher Temperatur	86

Literaturverzeichnis

- [1] ANDERSON, M. H. ; ENSHER, J. R. ; MATTHEWS, M. R. ; WIEMAN, C. E. ; CORNELL, E. A.: Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. In: *Science* **269** (1995), S. 198
- [2] DAVIS, K. B. ; MEWES, M. O. ; ANDREWS, M. R. ; DRUTEN, N. J. ; DURFEE, D. S. ; KURN, D. M. ; KETTERLE, W.: Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. In: *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), S. 3969
- [3] STAMPER-KURN, D. M. ; ANDREWS, M. R. ; CHIKKATUR, A. P. ; INOUYE, S. ; MIESNER, H.-J. ; STENGER, J. ; KETTERLE, W.: Optical Confinement of a Bose-Einstein Condensate. In: *Phys. Rev. Lett.* **80** (1998), S. 2027
- [4] SCHRECK, F. ; KHAYKOVICH, L. ; CORWIN, K. L. ; FERRARI, G. ; BOURDEL, T. ; CUBIZOLLES, J. ; SALOMON, C.: Quasipure Bose-Einstein Condensate Immersed in a Fermi Sea. In: *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), S. 080403
- [5] FISHER, M. P. A. ; WEICHMAN, P. B. ; GRINSTEIN, G. ; FISHER, D. S.: Boson localization and the superfluid-insulator transition. In: *Phys. Rev. B* **40** (1989), S. 546
- [6] JAKSCH, D. ; BRUDER, C. ; CIRAC, J. I. ; GARDINER, C. W. ; ZOLLER, P.: Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. In: *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998), S. 3108
- [7] GREINER, M. ; MANDEL, O. ; ESSLINGER, T. ; HÄNSCH, T. W. ; BLOCH, I.: Quantum Phase Transition from a Superfluid to a Mott Insulator in a Gas of Ultracold Atoms. In: *Nature* **415** (2002), S. 39
- [8] OSPELKAUS, S. ; OSPELKAUS, C. ; WILLE, O. ; SUCCO, M. ; ERNST, P. ; SENGSTOCK, K. ; BONGS, K.: Localization of Bosonic Atoms by Fermionic Impurities in a Three-Dimensional Optical Lattice. In: *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006), S. 180403
- [9] GÜNTER, K. ; STÖFELE, T. ; MORITZ, H. ; KÖHL, M. ; ESSLINGER, T.: Bose-Fermi Mixtures in a Three-Dimensional Optical Lattice. In: *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006), S. 180402
- [10] TSUCHINA, S. ; KURIHARA, S. ; KIMURA, T.: Superfluid-Mott insulator transition of spin-1 Bosons in an optical lattice. In: *Phys. Rev. A* **70** (2004), S. 043628
- [11] BURGER, S. ; CATALIOTTI, F. S. ; FORT, C. ; MINARDI, F. ; INGUSCIO, M. ; CHIOFALO, M. L. ; TOSI, M. P.: Superfluid and Dissipative Dynamics of a Bose-Einstein Condensate in a Periodic Optical Potential. In: *Phys. Rev. Lett.* **86** (2001), S. 4447
- [12] HADZIBABIC, Z. ; STOCK, S. ; BATTELIER, B. ; BRETIN, V. ; DALIBARD, J.: Interference of an Array of Independent Bose-Einstein Condensates. In: *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004), S. 180403
- [13] GERBIER, F. ; FOELLING, S. ; WIDERA, A. ; BLOCH, I.: Visibility of a Bose-condensed gas released from an optical lattice at finite temperatures. In: <http://lanl.arxiv.org/pdf/cond-mat/0701420>

-
- [14] GERBIER, F. ; WIDERA, A. ; FÖLLING, S. ; MANDEL, O. ; GERICKE, T. ; BLOCH, I: Phase coherence of an atomic Mott insulator. In: *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005), S. 050404
- [15] GERBIER, F. ; WIDERA, A. ; FÖLLING, S. ; MANDEL, O. ; GERICKE, T. ; BLOCH, I: Interference pattern and visibility of a Mott insulator. In: *Phys. Rev. A* **72** (2005), S. 053606
- [16] BUONSANTE, P. ; VEZZANI, A.: Phase Diagram for Ultracold Bosons in Optical Lattices and Superlattices. In: *Phys. Rev. A* **70** (2004), S. 033608
- [17] KRUTITSKY, K. V. ; PELSTER, A. ; GRAHAM, R.: Mean-field Phase Diagram of Disordered Bosons in a Lattice at Nonzero Temperature. In: *New Journal of Physics* **8** (2006), S. 187
- [18] KLEINERT, H. ; SCHMIDT, S. ; PELSTER, A.: Reentrant Phenomenon in the Quantum Phase Transitions of a Gas of Bosons Trapped in an Optical Lattice. In: *Physical Review Letters* **93** (2004), S. 160402
- [19] WEISS, P.: L'hypothèse du champs moléculaire et la propriété ferromagnétique. In: *J. de Phys.* **6** (1907), S. 661
- [20] KLEINERT, H.: Systematic Corrections to Variational Calculation of Effective Classical Potential. In: *Phys. Lett. A* **137** (1993), S. 332
- [21] KLEINERT, H.: *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets*. Forth Edition. World Scientific, 2006
- [22] FREERICKS, J. K. ; MONIEN, H.: Strong-coupling expansion for the pure and disorderd Bose-Hubbard model. In: *Phys. Rev. B* **53** (1996), S. 2691
- [23] DAMSKI, B. ; ZAKRZEWSKI, J.: Mott-insulator phase of the one-dimensional Bose-Hubbard model: A high-order perturbative study. In: *Phys. Rev. A* **74** (2006), S. 043609
- [24] SCHWABL, F.: *Quantenmechanik für Fortgeschrittene(QM 2)*. Springer Verlag, 1997
- [25] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 5/2 Quantenmechanik - Methoden und Anwendungen*. 4. Auflage. Springer Verlag, 2002
- [26] ASHCROFT, N. W. ; MERMIN, N. D.: *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, 1976
- [27] KITTEL, C.: *Einführung in die Festkörperphysik*. 11. Auflage. Oldenbourg Verlag, München
- [28] HAKEN, H.: *Quantenfeldtheorie des Festkörpers*. Teubner, 1973
- [29] RISKEN, H.: *The Fokker-Panck-Equation*. Springer, 1996
- [30] ALBUS, A. ; ILLUMINATI, F. ; EISERT, J.: Mixtures of bosonic and fermionic atoms in optical lattices. In: *Phys. Rev. A* **68** (2003), S. 023606
- [31] ZWERGER, W.: Mott-Hubbard Transition of Cold Atoms in Optical Lattices. In: *Journal of Optics B* **5** (2003), S. S9
- [32] KRUTITSKY, K.: Private Kommunikation.
- [33] LANDAU, L. D. ; LIFSHITZ, E. M.: *Statistical Physics*. 3rd edition. Pergamon press, 1980
- [34] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 6 - Statistische Physik*. 4. Auflage. Springer Verlag, 2002
- [35] SACHDEV, S.: *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 1999

-
- [36] B.CAPOGROSSO-SANSONE ; KOZIK, E. ; PROKOF'EV, N. ; SVISTUNOV, B.: On-site number statistics of ultracold lattice bosons. In: *Phys. Rev. A* **75** (2007), S. 013619
- [37] NOLTING, W.: *Grundkurs Theoretische Physik 5/1 Quantenmechanik - Grundlagen*. 6. Auflage. Springer Verlag, 2004
- [38] SCHWABL, F.: *Quantenmechanik (QM I)*. 6.Auflage. Springer Verlag, 2002
- [39] BATROUNI, G. G. ; ROUSSEAU, V. ; SCALETTAR, R. T. ; RIGOL, M. ; MURAMATSU, A. ; DENTENEER, P. J. H. ; TROYER, M.: Mott Domains of Bosons Confined on Optical Lattices. In: *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002), S. 117203
- [40] FOLLING, S. ; WIDERA, A. ; MULLER, T. ; GERBIER, F. ; BLOCH, I.: Formation of Spatial Shell Structure in the Superfluid to Mott Insulator Transition. In: *Phys. Rev. Lett.* **97** (2006), S. 060403
- [41] GRADSHTEYN, I. S. ; RYZHIK, I. M.: *Table of Integrals, Series and Products*. Fourth Edition. Academic Press, 1965
- [42] OOSTEN, D. van ; STRATEN, P. van d. ; STOOF, H. T. C.: Quantum Phases in an Optical Lattice. In: *Phys. Rev. A* **63** (2001), S. 053601
- [43] PETHICK, C. J. ; SMITH, H.: *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002
- [44] CRAMER, M. ; EISERT, J. ; ILLUMINATI, F.: Inhomogeneous Atomic Bose-Fermi Mixtures in Cubic Lattices. In: *Phys. Rev. Lett.* **93** (2004), S. 190405
- [45] SENGUPTA, K. ; DUPUIS, N. ; MAJUMDAR, P.: Bose-Fermi mixtures in an optical lattice. In: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0603162>
- [46] LEWENSTEIN, M. ; SANTOS, L. ; BARANOV, M. A. ; FERHMAN, H.: Atomic Bose-Fermi Mixtures in a Optical Lattice. In: *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004), S. 050401
- [47] GAVISH, U. ; CASTIN, Y.: Matter-Wave Localization in Disordered Cold Atom Lattices. In: *Phys. Rev. Lett.* **95** (2005), S. 020401

Danksagung

Mein erster Dank geht an PD Dr. Axel Pelster für seine aufopfernde Betreuung. Obwohl er in Duisburg arbeitet, war er für mich jederzeit erreichbar und fand immer die Zeit, sich um meine Probleme zu kümmern. Ohne seine Anleitung und Erklärungen wäre es mir nicht möglich gewesen, eine halbwegs vernünftige Diplomarbeit anzufertigen.

Natürlich bin ich auch Prof. Dr. Hagen Kleinert zu Dank verpflichtet, da er es mir ermöglicht hat diese Diplomarbeit in seiner Gruppe anzufertigen. Bedauerlicherweise hat die intensive Betreuung durch PD Dr. Pelster dazu geführt, dass ich nur wenig Gelegenheit hatte von seiner Genialität und seinem unerschöpflichen Wissen, die ich in verschiedenen Vorlesungen erlebt habe, zu profitieren.

Ich bedanke mich bei Dr. Konstantin Krutitsky, der mir ein Mathematica-Programm zur Verfügung gestellt hat, das als Grundlage aller numerischen Rechnungen dieser Diplomarbeit diente. Außerdem haben mir die bei verschiedenen Gelegenheiten geführten Diskussionen viel zu meinem Verständnis beigetragen.

Weiterhin bedanke ich mich bei Dr. Kai Bongs aus der Sengstock-Gruppe für das Bereitstellen der experimentellen Daten und einer Reihe von Erklärungen, die mir ein Verständnis der Experimente ermöglichten.

Mein Dank geht auch an Konstantin Glaum, der mir unzählige kleine Fragen beantwortete und bei der Korrektur meiner Diplomarbeit hilfreich zur Seite stand.

Schlussendlich möchte ich mich bei allen Gruppenmitgliedern, die bis jetzt unerwähnt geblieben sind, für die freundliche Atmosphäre bedanken, die ein angenehmes Arbeiten ermöglichte. Besonders ist hier Sonja Overesch zu nennen, die alle mit ihren Backkünsten erfreute.