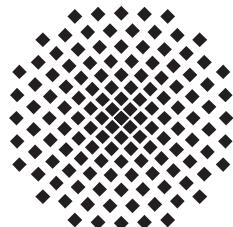


Dynamik von Solitonen in der eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung mit attraktiver Wechselwirkung

Bachelorarbeit von
Tobias Ilg

4. September 2015

Prüfer: Prof. Dr. Jörg Main



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

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	5
1.1 Einführung in das Thema	5
1.2 Aufbau der Arbeit	6
2 Bose-Einstein-Kondensation	7
2.1 Gross-Pitaevskii-Gleichung	7
2.1.1 Herleitung	7
2.1.2 Wahl geeigneter Einheiten	9
2.1.3 Helle Solitonen	11
2.2 Variationsprinzip nach McLachlan	12
2.2.1 Ansatz mit Gaußschen Wellenpaketen	13
2.2.2 Umschreiben der Bewegungsgleichungen	14
3 Stationäre Lösungen	17
3.1 Stationäre Lösung für eine Gaußfunktion	17
3.2 Gekoppelte Gaußfunktionen	20
3.2.1 Fixpunkte	21
3.2.2 Vergleich mit der analytischen Lösung	22
4 Dynamik einzelner Solitonen	25
4.1 Umschreiben des Ansatzes	26
4.2 Translation einer Gaußfunktion	28
4.3 Translation gekoppelter Gaußfunktionen	34
5 Stöße zwischen Solitonen	37
5.1 Stöße zwischen zwei Solitonen	38
5.1.1 Festlegung eines Koordinatensystems	38
5.1.2 Symmetrien der Wellenfunktion	39
5.1.3 Eine Gaußfunktion pro Soliton	40
5.1.4 Mehrere Gaußfunktionen pro Soliton	53
5.2 Stöße mehrerer Solitonen	57
5.2.1 Stöße zwischen drei Solitonen	57
5.2.2 Stöße zwischen vier Solitonen	59
6 Zusammenfassung und Ausblick	61

Inhaltsverzeichnis

Literaturverzeichnis	63
Danksagung	65

1 Einleitung

1.1 Einführung in das Thema

Teilchen mit halbzahligem Spin werden als Fermionen bezeichnet. Nach dem Pauli-Verbot dürfen sich zwei Fermionen nicht im selben quantenmechanischen Zustand befinden. Diese Einschränkung gilt jedoch nicht für Teilchen mit ganzzahligem Spin, auch Bosonen genannt. Durch den Wegfall dieser Einschränkung tritt in bosonischen Gasen bei sehr tiefen Temperaturen ein Phasenübergang auf, der so in einem Fermi-Gas oder einem klassischen Gas nicht zu beobachten ist. Die Teilchen des Bose-Gases kondensieren unterhalb einer kritischen Temperatur in den Grundzustand, wodurch dieser makroskopisch besetzt wird. Die Teilchen im Kondensat sind vollständig delokalisiert und können durch eine einzige Wellenfunktion beschrieben werden. Vorhergesagt wurde dieser neue Aggregatzustand von Albert Einstein [1, 2] im Jahre 1924 auf Grundlage der Arbeit von Satyendranath Bose [3] und wird als Bose-Einstein-Kondensat bezeichnet. Der experimentelle Nachweis blieb über 70 Jahre aus und folgte im Jahr 1995 [4–6].

In der vorliegenden Arbeit werden Bose-Einstein-Kondensate untersucht, die sich entlang einer Richtung frei bewegen können. Zwischen den Teilchen besteht eine attraktive Kontaktwechselwirkung. In Mean-Field-Näherung, die Korrelationen zwischen den Teilchen vernachlässigt, können die Kondensate durch die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung beschrieben werden [7, 8]. Stationäre analytische Lösungen der eindimensionalen Gross-Pitaevskii-Gleichung sind bekannt und werden für den Fall attraktiver Wechselwirkung als helle Solitonen bezeichnet. Allgemein sind Solitonen Wellenpakete, die sich ohne Änderung ihrer Form fortbewegen. Sie treten als Lösung von nichtlinearen Wellengleichungen auf und somit auch als Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung. Ziel der Arbeit ist es jedoch nicht nur stationäre Lösungen zu untersuchen, sondern auch auf die Dynamik von Solitonen sowie deren Stöße untereinander einzugehen. Dazu werden die hellen Solitonen durch Gaußfunktionen approximiert, für die nach dem Variationsprinzip nach McLachlan [9] Bewegungsgleichungen aufgestellt werden. Es gilt zum einen zu untersuchen, inwieweit sich die stationären Solitonen als Superposition von Gaußfunktionen beschreiben lassen und zum anderen wie effektiv sich die Dynamik von Stößen zwischen Solitonen mit gekoppelten Gaußfunktionen behandeln lässt. Für die Veranschaulichung der Dynamik wurden für einige Abbildungen der Arbeit zusätzlich Animationen angefertigt [10].

1.2 Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 wird auf die theoretischen Grundlagen für die Untersuchung der Dynamik eingegangen. Dazu wird die Herleitung der Gross-Pitaevskii-Gleichung kurz skizziert. Eine genauere Herleitung kann beispielsweise in der Masterarbeit von Haag [11] gefunden werden. Nach der Festlegung geeigneter Einheiten wird kurz auf die analytische stationäre Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung eingegangen. Das Variationsprinzip nach McLachlan sowie dessen Anwendung auf die Gross-Pitaevskii-Gleichung, unter Verwendung eines Ansatzes aus Gaußfunktionen, wird in diesem Kapitel ebenfalls erläutert. Kapitel 3 beschäftigt sich mit stationären Lösungen der Bewegungsgleichungen und vergleicht diese mit den hellen Solitonen. In Kapitel 4 werden den Solitonen Geschwindigkeiten zugewiesen. Kapitel 5 setzt sich mit Stößen zwischen Solitonen auseinander. Dazu werden zunächst Stöße aus zwei Solitonen betrachtet, um später auf weitere Stöße zwischen bis zu vier Solitonen einzugehen. Im letzten Kapitel, Kapitel 6, werden die Ergebnisse der Arbeit kurz zusammengefasst und es wird ein kurzer Ausblick auf mögliche, zukünftige Themen gegeben.

2 Bose-Einstein-Kondensation

2.1 Gross-Pitaevskii-Gleichung

2.1.1 Herleitung

Die Schrödinger-Gleichung für \mathcal{N} identische bosonische Teilchen der Masse m setzt sich aus den kinetischen Termen der einzelnen Teilchen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i \quad (2.1)$$

sowie den Wechselwirkungen zwischen den Teilchen

$$V_{\text{WW}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \quad (2.2)$$

zusammen. Äußere Kräfte, wie zum Beispiel die einer harmonischen Falle, werden in dieser Arbeit nicht diskutiert, sodass

$$V_{\text{ext}} = 0 \quad (2.3)$$

gesetzt wird. Die zeitunabhängige Schrödinger-Gleichung lautet somit

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{\mathcal{N}} V_{\text{WW}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \right]}_{=\hat{H}} \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{\mathcal{N}}) = E \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{\mathcal{N}}). \quad (2.4)$$

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, befinden sich die Teilchen in einem Bose-Einstein-Kondensat alle im selben Zustand. Als Ansatz für den Grundzustand kann somit in Mean-Field-Näherung ein Produktansatz aus \mathcal{N} identischen Einteilchenwellenfunktionen

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{\mathcal{N}}) = \prod_{i=1}^{\mathcal{N}} \varphi(\mathbf{r}_i) \quad (2.5)$$

gewählt werden. Bei diesem Ansatz ist allerdings zu beachten, dass er die Korrelationen zwischen den Teilchen vernachlässigt, da die Wellenfunktionen $\varphi(\mathbf{r}_i)$ jeweils nur von den

Koordinaten eines Teilchens abhängen. Zur Beschreibung des Grundzustandes muss die gewählte Wellenfunktion die Energie

$$E = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.6)$$

minimieren. Zur Minimierung wird der Lagrange-Multiplikator $\mu\mathcal{N}$ eingeführt. Als Nebenbedingung dient die Normierung der Wellenfunktion

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1. \quad (2.7)$$

Die Minimierungsbedingung lautet somit

$$\delta \left[E - \mu\mathcal{N} \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} - 1 \right) \right] \stackrel{!}{=} 0. \quad (2.8)$$

Variiert wird nach der Wellenfunktion ψ bzw. ψ^* und führt unter der Annahme $\mathcal{N} \gg 1$ auf die allgemeine zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mathcal{N} \int_{\mathbb{R}^3} |\varphi(\mathbf{r}')|^2 V_{WW}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \right) \varphi(\mathbf{r}) = \mu\varphi(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

Zur weiteren Vereinfachung wird angenommen, dass es sich bei der Wechselwirkung um eine kurzreichweite Kontaktwechselwirkung der Form

$$V_{WW} = \frac{4\pi\hbar^2}{m} a_s \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.10)$$

mit Streulänge a_s handelt. Für den Vorfaktor in Gleichung (2.10) wird die Kopplungskonstante

$$g = \frac{4\pi\hbar^2\mathcal{N}}{m} a_s \quad (2.11)$$

eingeführt. Einsetzen von Gleichung (2.10) sowie (2.11) in Gleichung (2.9) liefert die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + g|\varphi(\mathbf{r})|^2 \right) \varphi(\mathbf{r}) = \mu\varphi(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

wobei μ mit dem chemischen Potential identifiziert werden kann. Durch die Ersetzung $\mu \rightarrow i\hbar\partial_t$ folgt die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + g|\varphi(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \varphi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{r}, t). \quad (2.13)$$

Für stationäre Lösungen besteht der Zusammenhang

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \mu t} \quad (2.14)$$

zwischen den Lösungen der zeitabhängigen und zeitunabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung, wie durch Einsetzen gezeigt werden kann. Im Folgenden werden die Betrachtungen auf eine Dimension beschränkt. Die Normierungsbedingung der Wellenfunktion lautet in einer Dimension

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1. \quad (2.15)$$

Die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung aus Gleichung (2.12) wird in einer Dimension zu

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + g|\varphi(x)|^2 \right) \varphi(x) = \mu \varphi(x), \quad (2.16)$$

während sich die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung wiederum durch die Ersetzung $\mu \rightarrow i\hbar\partial_t$ zu

$$\underbrace{\left(\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + g|\varphi(x, t)|^2 \right)}_H \varphi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t) \quad (2.17)$$

ergibt. Es ist zu beachten, dass sich die Dimension der Kopplungskonstanten g beim Wechsel von drei Dimensionen zu einer Dimension ändert, da sich die eindimensionale Streutheorie von der dreidimensionalen unterscheidet und Gleichung (2.11) so nicht mehr gilt. Bei attraktiven Kontaktwechselwirkungen, wie sie hier untersucht werden, ist die Kopplungskonstante g negativ.

2.1.2 Wahl geeigneter Einheiten

Vor konkreten Untersuchungen ist es sinnvoll ein geeignetes Einheitensystem festzulegen. Wie in der Quantenmechanik üblich wird die Wirkung in Einheiten von \hbar , wobei

$$\hbar = 1 \quad (2.18)$$

gewählt wird, angegeben. Die mit dem Index 0 gekennzeichneten Größen bezeichnen im Folgenden die Einheit der jeweiligen Größe. So ist beispielsweise m_0 die Einheit der Masse und wird als

$$m_0 = 2m \quad (2.19)$$

gewählt. Wie der kinetische Term der Gross-Pitaevskii-Gleichung, besitzt auch der Kontaktwechselwirkungsterm

$$V = g|\varphi|^2 \quad (2.20)$$

aus Gleichung (2.17) die Einheit einer Energie. Als Energieeinheit wird

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 x_0^2} \quad (2.21)$$

angesetzt. Das Betragsquadrat der Wellenfunktion hat die Bedeutung einer Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte. Aus der Normierung der Wellenfunktion aus Gleichung (2.15) ergibt sich die Einheit der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte zu

$$[|\varphi|^2] = \frac{1}{x_0}. \quad (2.22)$$

Die Einheit der Kopplungskonstanten ist durch die Gleichungen (2.20), (2.21) sowie Gleichung (2.22) zu

$$g_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 x_0} \quad (2.23)$$

festgelegt. Es ist zu beachten, dass g_0 nur noch von der noch nicht festgelegten Längeneinheit x_0 abhängt. Die freie Wahl einer Längeneinheit kann somit genutzt werden, um die dimensionslose Kopplungskonstante im Folgenden zu $g = -1$ in der Einheit g_0 festzulegen. Dazu muss

$$x_0 = \frac{\hbar^2}{m_0 |g|} \quad (2.24)$$

gesetzt werden. Dies hat zur Folge, dass die Untersuchung der Dynamik für verschiedene dimensionslose Kopplungskonstanten kein physikalisch unterschiedliches Verhalten liefert, da eine Änderung von g gerade einer Änderung der Längeneinheit entspricht. Die Wahl $g = -1$ ist dabei willkürlich. Eine genauere Betrachtung der Wirkung

$$\hbar = x_0 p_0 = \frac{m_0 x_0^2}{t_0}, \quad (2.25)$$

wobei p_0 die Einheit für den Impuls p bezeichnet, liefert Rückschlüsse auf die Zeiteinheit. Einsetzen von Gleichung (2.19) sowie (2.24) in Gleichung (2.25) und Umformen nach t_0 liefert für die Zeiteinheit

$$t_0 = \frac{\hbar^3}{2m|g|^2}. \quad (2.26)$$

Die Einheit des Impulses p_0 ergibt sich durch Umformen von Gleichung (2.25) nach p_0 sowie Einsetzen von Gleichung (2.19) und (2.24) zu

$$p_0 = \frac{2m|g|}{\hbar}. \quad (2.27)$$

Alle Größen α sind im Folgenden als dimensionslos anzusehen. Sie ergeben sich aus den dimensionsbehafteten Größen $\tilde{\alpha}$ und deren Einheiten α_0 zu

$$\alpha = \frac{\tilde{\alpha}}{\alpha_0}. \quad (2.28)$$

In diesen Einheiten vereinfacht sich die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.17) zur dimensionslosen Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - |\varphi(x, t)|^2 \right) \varphi(x, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t). \quad (2.29)$$

Die dimensionslose zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung lautet in diesen Einheiten

$$\underbrace{\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - |\varphi(x)|^2 \right)}_{=H} \varphi(x) = \mu \varphi(x). \quad (2.30)$$

2.1.3 Helle Solitonen

Für attraktive Wechselwirkungen zwischen den Teilchen kann als stationäre Lösung ein Ansatz der Form

$$f = \frac{b}{\cosh(ax)} \quad (2.31)$$

gewählt werden [12]. Einsetzen des Ansatzes (2.31) in die dimensionslose zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.30) liefert

$$a^2 = -\mu \quad \text{und} \quad b^2 = -2\mu. \quad (2.32)$$

Die stationäre analytische Lösung der zeitunabhängigen dimensionslosen Gross-Pitaevskii-Gleichung ergibt sich durch Einsetzen von Gleichung (2.32) in Gleichung (2.31) zu

$$f = \sqrt{-2\mu} \frac{1}{\cosh(\sqrt{-\mu}x)}. \quad (2.33)$$

Aus der Normierungsbedingung der Wellenfunktion

$$\int_{-\infty}^{+\infty} -2\mu \frac{1}{\cosh^2(\sqrt{-\mu}x)} dx \stackrel{!}{=} 1 \quad (2.34)$$

lässt sich das chemische Potential zu

$$\mu = -\frac{1}{16} \quad (2.35)$$

bestimmen. Einsetzen von Gleichung (2.35) in Gleichung (2.33) liefert für die Wellenfunktion

$$f = \sqrt{\frac{1}{8}} \frac{1}{\cosh(x/4)}. \quad (2.36)$$

Das chemische Potential μ lässt sich andererseits auch als Erwartungswert des Hamiltonoperators aus Gleichung (2.30) berechnen

$$\mu = \langle \varphi | H | \varphi \rangle \quad (2.37)$$

und führt wiederum auf $\mu = -1/16$. Die Mean-Field-Energie E_{mf} der Gross-Pitaevskii-Gleichung ist definiert als [13]

$$E_{\text{mf}} = \left\langle -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\rangle - \frac{1}{2} \langle |\varphi|^2 \rangle, \quad (2.38)$$

wobei der Faktor $1/2$ vor dem Wechselwirkungsterm verhindert die Wechselwirkungsenergie zwischen zwei Teilchen doppelt zu werten. Sie entspricht der Energie des Systems und ist somit erhalten. Die Mean-Field-Energie der analytischen Lösung ergibt sich durch Einsetzen von Gleichung (2.36) in Gleichung (2.38) zu

$$E_{\text{mf}} = -\frac{1}{48}. \quad (2.39)$$

2.2 Variationsprinzip nach McLachlan

Ziel ist es, die stationäre Lösung aus Gleichung (2.36) durch einen Variationsansatz für die Wellenfunktion zu approximieren. Dazu wird das Variationsprinzip nach McLachlan [9] verwendet. Aus dem Variationsprinzip können Bewegungsgleichungen für die Variationsparameter aufgestellt werden, die die Dynamik des Systems beschreiben. Das Variationsprinzip minimiert das Funktional

$$I = \|i\phi - H\psi\|^2 = \langle \phi | \phi \rangle + i \langle \phi | H\psi \rangle - i \langle H\psi | \phi \rangle + \langle H\psi | H\psi \rangle, \quad (2.40)$$

wobei anschließend

$$\dot{\phi} = \dot{\psi} \quad (2.41)$$

gewählt wird. Der Hamiltonoperator H besteht im Allgemeinen aus einem kinetischen Term T sowie einem potentiellen Term V

$$H = T + V = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x). \quad (2.42)$$

Es wird angenommen, dass $\psi = \psi(\mathbf{z}(t))$ durch einen Satz komplexer Parameter $\mathbf{z}(t)$ parametrisiert ist, wodurch $\phi = \phi(\mathbf{z}(t), \dot{\mathbf{z}}(t))$ ist. Die Variation erfolgt nach ϕ , während ψ festgehalten wird. Durch das Festhalten von $\psi(\mathbf{z}(t))$ bei der Variation folgt

$$\delta \mathbf{z} = 0. \quad (2.43)$$

Die Variation nach ϕ ergibt

$$\delta I = \langle \delta\phi | \phi \rangle + \langle \phi | \delta\phi \rangle - i \langle H\psi | \delta\phi \rangle + i \langle \delta\phi | H\psi \rangle \stackrel{!}{=} 0, \quad (2.44)$$

wobei für

$$\begin{aligned}
 \delta\phi &= \delta\phi(\mathbf{z}(t), \dot{\mathbf{z}}(t)) = \underbrace{\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{z}}\delta\mathbf{z}}_{=0} + \frac{\partial\phi}{\partial\dot{\mathbf{z}}}\delta\dot{\mathbf{z}} \\
 &= \frac{\partial}{\partial\dot{\mathbf{z}}} \left(\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{z}} \dot{\mathbf{z}} \right) \delta\dot{\mathbf{z}} \\
 &= \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{z}} \delta\dot{\mathbf{z}}
 \end{aligned} \tag{2.45}$$

eingesetzt wird. Damit folgt aus Gleichung (2.44)

$$\left\langle \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{z}} \left| \dot{\psi} + iH\psi \right. \right\rangle \delta\dot{\mathbf{z}} + \left\langle \dot{\psi} + iH\psi \left| \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{z}} \right. \right\rangle \delta\dot{\mathbf{z}}^* = 0. \tag{2.46}$$

Gleichung (2.46) gilt für alle Variationen. Die Faktoren vor $\delta\dot{\mathbf{z}}$ bzw. $\delta\dot{\mathbf{z}}^*$ müssen somit jeweils für sich verschwinden, was auf die Bedingung

$$\left\langle \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{z}} \left| i\dot{\psi} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi - V\psi \right. \right\rangle = 0 \tag{2.47}$$

führt.

2.2.1 Ansatz mit Gaußschen Wellenpaketen

Zur Approximation der analytischen Lösung (2.36) wird ein Ansatz aus N_g Gaußschen Wellenpaketen

$$\psi = \sum_{n=1}^{N_g} e^{-a_n x^2 + b_n x + c_n} = \sum_{n=1}^{N_g} g_n \tag{2.48}$$

gewählt. Der Vektor \mathbf{z} besteht in diesem Fall aus den Einträgen

$$\mathbf{z} = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ \vdots \\ a_{N_g} \\ b_{N_g} \\ c_{N_g} \end{pmatrix}. \tag{2.49}$$

Die Parameter a_n legen die Breite der Gaußfunktion fest. Mit dem Realteil von b_n können die Gaußfunktionen verschoben werden, wobei der Imaginärteil später genutzt werden kann, um den Solitonen eine Geschwindigkeit zuzuweisen. Die Parameter c_n dienen zum

einen zur Normierung der Wellenfunktion, berücksichtigen allerdings auch relative Amplituden zwischen den Gaußfunktionen. Die Bewegungsgleichungen für die Parameter \mathbf{z} ergeben sich aus

$$i\dot{\psi} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi = \sum_{n=1}^{N_g} g_n \left[x^2 \underbrace{(-i\dot{a}_n + 4a_n^2)}_{\equiv V_2^n} + x \underbrace{(i\dot{b}_n - 4a_n b_n)}_{\equiv V_1^n} + \underbrace{(i\dot{c}_n + (b_n^2 - 2a_n))}_{\equiv V_0^n} \right] \quad (2.50)$$

zu

$$\dot{a}_n = -4ia_n^2 + iV_2^n, \quad (2.51a)$$

$$\dot{b}_n = -4ia_n b_n - iV_1^n, \quad (2.51b)$$

$$\dot{c}_n = -2ia_n + ib_n^2 - iV_0^n. \quad (2.51c)$$

Zur Lösung der Bewegungsgleichungen werden die Größen V_2^n , V_1^n sowie V_0^n benötigt. Einsetzen von Gleichung (2.50) in Gleichung (2.47) und Umformen liefert das $3N_g$ -dimensionale lineare Gleichungssystem

$$\left\langle \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{z}} \left| \sum_{n=1}^{N_g} g_n (x^2 V_2^n + x V_1^n + V_0^n) \right. \right\rangle = - \left\langle \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{z}} \left| \psi^* \psi \right| \psi \right\rangle, \quad (2.52)$$

dessen Lösungen die gesuchten Größen V_2^n , V_1^n sowie V_0^n sind.

2.2.2 Umschreiben der Bewegungsgleichungen

Der quadratische Term in Gleichung (2.51a) kann bei der numerischen Integration der Bewegungsgleichungen Schwierigkeiten verursachen [14]. Um die Schwierigkeiten zu umgehen, können die Bewegungsgleichungen umgeschrieben werden, indem ein Ansatz der Form

$$a_n = \frac{p_n}{q_n} \quad (2.53)$$

gewählt wird. Einsetzen von Gleichung (2.53) in Gleichung (2.51a) liefert

$$\frac{\dot{p}_n}{q_n} - \frac{p_n}{q_n^2} \dot{q}_n = -4i \frac{p_n^2}{q_n^2} + iV_2^n. \quad (2.54)$$

Multiplikation von Gleichung (2.54) mit q_n sowie Koeffizientenvergleich der Terme $\frac{p_n}{q_n}$ liefert die Bewegungsgleichungen

$$\dot{p}_n = iq_n V_2^n, \quad (2.55a)$$

$$\dot{q}_n = 4ip_n. \quad (2.55b)$$

Aus den drei Gleichungen der Bewegung (2.51a)-(2.51c) können so vier Bewegungsgleichungen

$$\dot{p}_n = iq_n V_2^n, \quad (2.56a)$$

$$\dot{q}_n = 4ip_n, \quad (2.56b)$$

$$\dot{b}_n = -4ia_n b_n - iV_1^n, \quad (2.56c)$$

$$\dot{c}_n = -2ia_n + ib_n^2 - iV_0^n \quad (2.56d)$$

gewonnen werden. Aus der Bewegungsgleichung (2.51a) für die Breitenparameter a_n werden so zwei Bewegungsgleichungen (2.56a) sowie (2.56b), wodurch zusätzliche Anfangsbedingungen gewählt werden müssen. Diese Anfangsbedingungen müssen mit $a_n = \frac{p_n}{q_n}$ verträglich sein. Als zusätzliche Anfangsbedingungen werden

$$p_n(0) = a_n(0) \quad \text{und} \quad q_n(0) = 1 \quad (2.57)$$

gewählt.

3 Stationäre Lösungen

Ziel dieser Arbeit ist es insbesondere die Dynamik der Solitonen zu untersuchen. Dazu ist es allerdings zwingend erforderlich zuerst stationäre Lösungen der Gleichungen (2.51) zu finden. Anschließend wird den stationären Lösungen eine Geschwindigkeit zugeordnet. Auf die Untersuchung stationärer Lösungen wird ebenfalls in der Arbeit von Tschüter [15] eingegangen.

3.1 Stationäre Lösung für eine Gaußfunktion

Im Spezialfall einer Gaußfunktion lautet die Wellenfunktion

$$\psi = e^{-a_1 x^2 + b_1 x + c_1}. \quad (3.1)$$

Die stationäre Solitonlösung aus Gleichung (2.36) ist rein reell. Es wird deshalb angenommen, dass auch die Größen a_1 und b_1 rein reell sind. Zudem kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Gaußfunktion im Ursprung zentriert werden, wodurch $b_1 = 0$ folgt. Der Realteil des Parameters c_1 ist im Spezialfall einer Gaußfunktion durch die Normierung festgelegt, wohingegen der Imaginärteil einer globalen Phase entspricht, die in der Quantenmechanik frei wählbar ist. Für die Fixpunktsuche wird die Phase gleich Null gesetzt. Die durch die 3 komplexen Größen a_1, b_1 sowie c_1 anfangs sechsdimensionale Nullstellensuche kann so auf eine eindimensionale Nullstellensuche für a_1 reduziert werden. Es gilt nun den Fixpunkt der Gleichung (2.51a)

$$0 = -4ia_1^2 + iV_2^1 \quad (3.2)$$

zu finden. Zunächst muss durch Gleichung (2.52) ein lineares Gleichungssystem aufgestellt werden, aus dem die Größen V_2^1, V_1^1 sowie V_0^1 bestimmt werden können. Im Fall einer Gaußfunktion lautet das Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \langle \frac{\partial \psi}{\partial a_1} | x^2 \psi \rangle & \langle \frac{\partial \psi}{\partial a_1} | x \psi \rangle & \langle \frac{\partial \psi}{\partial a_1} | \psi \rangle \\ \langle \frac{\partial \psi}{\partial b_1} | x^2 \psi \rangle & \langle \frac{\partial \psi}{\partial b_1} | x \psi \rangle & \langle \frac{\partial \psi}{\partial b_1} | \psi \rangle \\ \langle \frac{\partial \psi}{\partial c_1} | x^2 \psi \rangle & \langle \frac{\partial \psi}{\partial c_1} | x \psi \rangle & \langle \frac{\partial \psi}{\partial c_1} | \psi \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_2^1 \\ V_1^1 \\ V_0^1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \langle \frac{\partial \psi}{\partial a_1} | \psi^* \psi | \psi \rangle \\ \langle \frac{\partial \psi}{\partial b_1} | \psi^* \psi | \psi \rangle \\ \langle \frac{\partial \psi}{\partial c_1} | \psi^* \psi | \psi \rangle \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Auswerten der Integrale unter Berücksichtigung von $b_1 = 0$ führt auf

$$\begin{pmatrix} -\frac{3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{8a_1^5}}e^{2c_1} & 0 & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{8a_1^3}}e^{2c_1} \\ 0 & \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{8a_1^3}}e^{2c_1} & 0 \\ \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{8a_1^3}}e^{2c_1} & 0 & \sqrt{\frac{\pi}{2a_1}}e^{2c_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_2^1 \\ V_1^1 \\ V_0^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{16}\sqrt{\frac{\pi}{a_1^3}}e^{4c_1} \\ 0 \\ -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a_1}}e^{4c_1} \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Das Lösen des linearen Gleichungssystems (3.4) liefert die gesuchten Größen

$$V_2^1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}a_1 e^{2c_1}, \quad V_1^1 = 0 \quad \text{sowie} \quad V_0^1 = -\frac{5}{4}\frac{1}{\sqrt{2}}e^{2c_1}. \quad (3.5)$$

V_2^1 ist nun bekannt und kann in die Fixpunktgleichung (3.2) eingesetzt werden. Auflösen nach dem gesuchten Fixpunkt a_1 liefert

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{32}}e^{2c_1}. \quad (3.6)$$

Der Breitenparameter a_1 hängt jedoch noch vom Amplitudenparameter c_1 ab, welcher allerdings keine unabhängige Größe ist. Der Amplitudenparameter c_1 hängt über die Normierung der Wellenfunktion

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2a_1x^2+2c_1} dx = 1 \quad (3.7)$$

mit dem Breitenparameter a_1 zusammen. Auswerten des Gaußintegrals und Umformen nach c_1 liefert den Zusammenhang

$$c_1 = \frac{1}{4} \ln \left(\frac{2a_1}{\pi} \right) \quad (3.8)$$

zwischen a_1 und c_1 . Einsetzen von Gleichung (3.8) in Gleichung (3.6) liefert schließlich

$$a_1 = \frac{1}{16\pi} \quad (3.9)$$

und dies wiederum

$$c_1 = \ln \left(\sqrt{\frac{1}{\sqrt{8\pi}}} \right) = -\frac{1}{2} \ln (\sqrt{8\pi}). \quad (3.10)$$

Damit ergibt sich als Lösung

$$\psi = e^{-\frac{x^2}{16\pi} - \frac{1}{2} \ln (\sqrt{8\pi})}. \quad (3.11)$$

In den Abbildungen 3.1 sind die Betragsquadrate der analytischen Lösung aus Gleichung (2.36) sowie des Ansatzes aus einer Gaußfunktion aus Gleichung (3.11) zum Vergleich dargestellt. In Abbildung 3.1(a) sind die Abweichungen des Ansatzes zur analytischen Lösung deutlich zu erkennen. Der Ansatz aus einer Gaußfunktion besitzt eine niedrigere Amplitude, ist allerdings breiter als die analytische Lösung. Auf der logarithmischen Skala aus Abbildung 3.1(b)) ist zu sehen, dass die analytische Lösung deutlich schwächer abfällt als der gewählte Ansatz. Für große Entferungen zum Zentrum fällt der Term $1/\cosh(x/4)$ der analytischen Lösung wie $\exp(-x/4)$, auf einer logarithmischen Skala

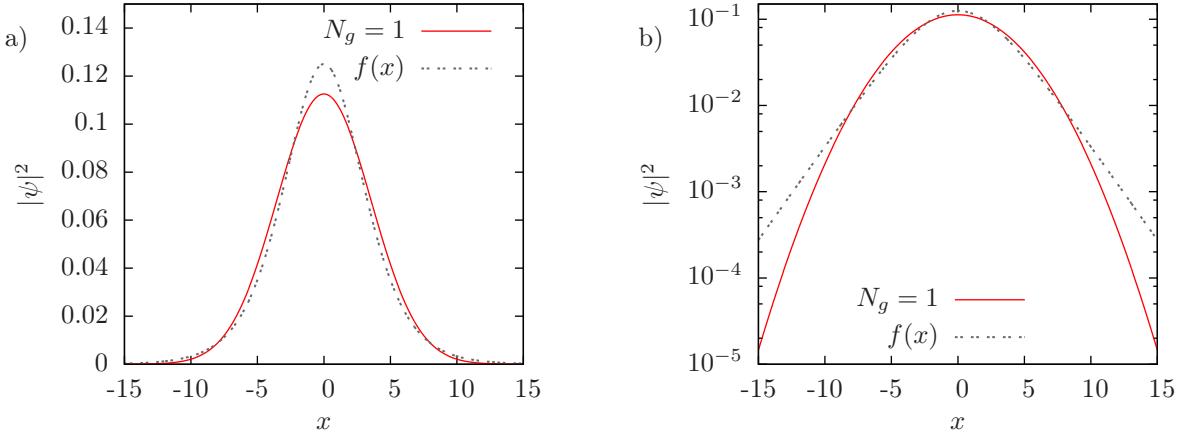


Abbildung 3.1: Vergleich der analytischen Lösung f mit dem Ansatz aus einer Gaußfunktion. Aufgetragen ist das Betragsquadrat der Wellenfunktionen gegen den Ort x mit a) linearer und b) logarithmischer Skala.

folglich linear. Der Ansatz aus Gaußfunktionen fällt immer wie $\exp(-x^2)$, auf einer logarithmischen Skala somit quadratisch, wodurch die deutlichen Unterschiede sichtbar werden.

Die gefundene Lösung (3.11) stellt einen Fixpunkt der Bewegungsgleichungen (2.51a) und (2.51b) dar, während sich die Phase der Wellenfunktion weiterhin zeitlich ändert. Die Änderung der Phase der Wellenfunktion ergibt sich durch Einsetzen von a_1 aus Gleichung (3.9) sowie V_0^1 aus Gleichung (3.5) in Gleichung (2.51c) zu

$$\dot{c}_1 = 3a_1 = \frac{3i}{16\pi} \quad (3.12)$$

und ist zeitlich konstant. Das chemische Potential μ und die Mean-Field-Energie E_{mf} können nun aus der gefundenen Lösung berechnet werden. Das chemische Potential μ entspricht dem Erwartungswert des Hamiltonoperators aus Gleichung (2.30)

$$\mu = \left\langle -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - |\psi|^2 \right\rangle \quad (3.13)$$

und berechnet sich zu

$$\mu = -3a_1 = -\frac{3}{16\pi}. \quad (3.14)$$

Wie nach Gleichung (2.14) zu erwarten ist, entspricht die Änderung der Phase der Wellenfunktion gerade dem negativen chemischen Potential μ . Die Mean-Field-Energie berechnet sich nach Gleichung (2.38) zu

$$E_{\text{mf}} = -a_1 = -\frac{1}{16\pi}. \quad (3.15)$$

3.2 Gekoppelte Gaußfunktionen

Zur besseren Approximation der hellen Solitonen werden im folgenden Ansätze aus mehreren Gaußfunktionen verglichen. Die Bestimmung der Fixpunkte erfolgt numerisch. Bei N_g Gaußfunktionen ergeben sich aus den drei komplexen Größen a_n , b_n sowie c_n $6N_g$ Gleichungen der Bewegung. Wie schon im Fall einer Gaußfunktion können die Größen a_n sowie b_n rein reell gewählt werden, da die analytische Lösung aus Gleichung (2.36) ebenfalls rein reell ist. Es verbleiben noch $4N_g$ Gleichungen. Die Gaußfunktionen werden im Ursprung zentriert, sodass die Größen b_n Null gesetzt werden können. Bei Gleichung (2.52) handelt es sich um ein reelles lineares Gleichungssystem, wodurch die Lösungen für die Größen V_2^n , V_1^n und V_0^n ebenfalls rein reelle Größen sind. Werden unter diesen Aspekten die Bewegungsgleichungen (2.51a) und (2.51c) für die Breitenparameter a_n bzw. Amplitudenparameter c_n betrachtet, so zeigt sich, dass die Änderungen \dot{a}_n sowie \dot{c}_n rein imaginär sind und so nur noch $2N_g$ Gleichungen betrachtet werden müssen. Der Realteil der Größen c_n war bei einer Gaußfunktion festgelegt durch deren Normierung. Bei mehreren Gaußfunktionen geben die Realteile die relativen Amplituden zwischen den Gaußfunktionen an, wobei wiederum ein Parameter c_n durch die Normierung festgelegt ist. Für die Imaginärteile der Größen c_n wird angenommen, dass diese zu jedem Zeitpunkt den selben Wert besitzen. Der Imaginärteil entspricht demnach, wie bei einer Gaußfunktion, einer globalen Phase, die Null gesetzt wird. Für die letztendliche Fixpunktsuche verbleiben noch $2N_g - 1$ Gleichungen. Mit zunehmender Anzahl an Gaußfunktionen müssen die Startwerte für die Fixpunktsuche immer genauer gewählt werden. Die Fixpunktsuche wurde für bis zu $N_g = 6$ Gaußfunktionen erfolgreich durchgeführt. Für mehr als sechs Gaußfunktionen gestaltet sich die Wahl der Startwerte als sehr aufwendig, auch wenn die Fixpunkte einem Schema folgen, auf das noch genauer eingegangen wird.

3.2.1 Fixpunkte

Die Fixpunkte für Ansätze aus bis zu sechs Gaußfunktionen sind in den Tabellen 3.1 aufgelistet. Die Amplitudenparameter c_n sind nach aufsteigender Größe sortiert. Die Sortierung der Werte innerhalb einer Reihe kann willkürlich gewählt werden. Es muss allerdings beachtet werden, dass zu einem Breitenparameter a_n jeweils ein Amplitudenparameter c_n gehört.

In Abbildung 3.2(a) sind die Breitenparameter a_n logarithmisch gegen die Anzahl N_g der Gaußfunktionen aufgetragen. Abbildung 3.2(b) zeigt die Amplitudenparameter c_n in Abhängigkeit der Anzahl N_g der Gaußfunktionen. Wie bereits zu Beginn von Abschnitt 3.2 erwähnt, zeigen die Abbildungen 3.2 ein Schema nach dem die Fixpunkte auftreten. Je größer a_n ist, desto schmäler werden die Gaußfunktionen. Umso kleiner c_n ist, desto geringer ist die Amplitude der Gaußfunktion. Bei einem Ansatz aus mehreren Gaußfunktionen besitzt die schmalste Gaußfunktion und die breiteste Gaußfunktion jeweils eine ähnliche Amplitude, ebenso wie die zweit schmalste und die zweit breiteste usw. Die Parameter c_n bilden somit Paare. Die Breitenparameter zeigen auf der logarithmischen Skala ein Aufspalten. Durch die geeignete Wahl von Farben zeigt sich auf der logarithmischen Skala ein gekrümmter Verlauf der Fixpunkte. Die Amplitudenparameter c_n weisen einen annähernd linearen Verlauf auf, wobei ein Paar jeweils eine ähnliche Steigung besitzt. Durch diese Eigenschaften lassen sich die Parameter weiterer Fixpunkte aus Ansätzen mit mehr als $N_g = 6$ Gaußfunktionen abschätzen.

Tabelle 3.1: Fixpunkte für die Breitenparameter a_n sowie Amplitudenparameter c_n für eine verschiedene Anzahl N_g an Gaußfunktionen.

N_g	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6
1	0,01989					
2	0,01081	0,04577				
3	0,00713	0,06948	0,02294			
4	0,00530	0,09203	0,01417	0,03687		
5	0,00422	0,11382	0,00993	0,05158	0,02295	
6	0,00351	0,13502	0,00752	0,06671	0,01583	0,03290

N_g	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6
1	-1,09223					
2	-1,78221	-1,69399				
3	-2,54697	-2,44995	-1,66726			
4	-3,32053	-3,22515	-1,99978	-1,94996		
5	-4,09030	-3,99993	-2,43675	-2,35571	-1,99344	
6	-4,85330	-4,76916	-2,92194	-2,82337	-2,21399	-2,16488

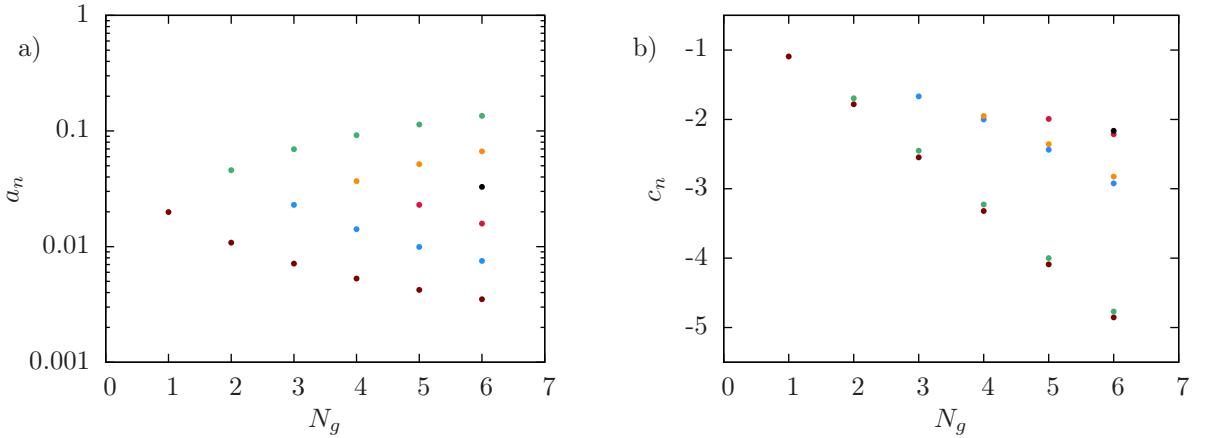


Abbildung 3.2: a) Breitenparameter a_n und b) Amplitudenparameter c_n in Abhängigkeit der Anzahl N_g an Gaußfunktionen. Die Wahl der Farben innerhalb eines festen N_g ist frei wählbar. Allerdings sind zueinander gehörige a_n sowie c_n mit der gleichen Farbe dargestellt.

3.2.2 Vergleich mit der analytischen Lösung

Um die Qualität der Ansätze zu beurteilen empfiehlt es sich, sie mit der analytischen Lösung zu vergleichen.

In Abbildung 3.3(a) sind die Betragsquadrate der Wellenfunktionen für die Ansätze aus $N_g = 1, 2$ und $N_g = 4$ Gaußfunktionen sowie die analytische Lösung f dargestellt. Während in Abbildung 3.3(a) bei $N_g = 2$ Gaußfunktionen gerade an der Amplitude noch Unterschiede zur analytischen Lösung feststellbar sind, lässt sich beim Ansatz aus $N_g = 4$ Gaußfunktionen in dieser Darstellung kein Unterschied zu der analytischen Lösung f feststellen. Aus diesem Grund wurde darauf verzichtet den Ansatz aus $N_g = 6$ Gaußfunktionen darzustellen.

Sichtbar werden die Unterschiede zur analytischen Lösung bei $N_g = 4$ Gaußfunktionen erst, wenn die Betragsquadrate logarithmisch aufgetragen werden. Die logarithmische Auftragung ist in Abbildung 3.3(b) zu sehen. Mit steigender Anzahl an Gaußfunktionen fallen die Ansätze zunehmend schwächer ab und überlagern die analytische Lösung auch noch weit entfernt vom Zentrum. Bei $N_g = 4$ Gaußfunktionen lässt sich der Unterschied zur analytischen Lösung erst ab ca. $x = \pm 30$ erkennen. Zwischen der Lösung aus $N_g = 6$ Gaußfunktionen und der analytischen Lösung lassen sich in dieser Darstellung keine Unterschiede mehr erkennen.

Für die analytische Lösung f wurde in Abschnitt 2.1.3 die Mean-Field-Energie zu $E_{\text{mf}} = -1/48$ sowie das chemische Potential zu $\mu = -1/16$ berechnet. Für die Ansätze aus Gaußfunktionen wurden die Mean-Field-Energie E_{mf} und das chemische Potential μ ebenso berechnet.

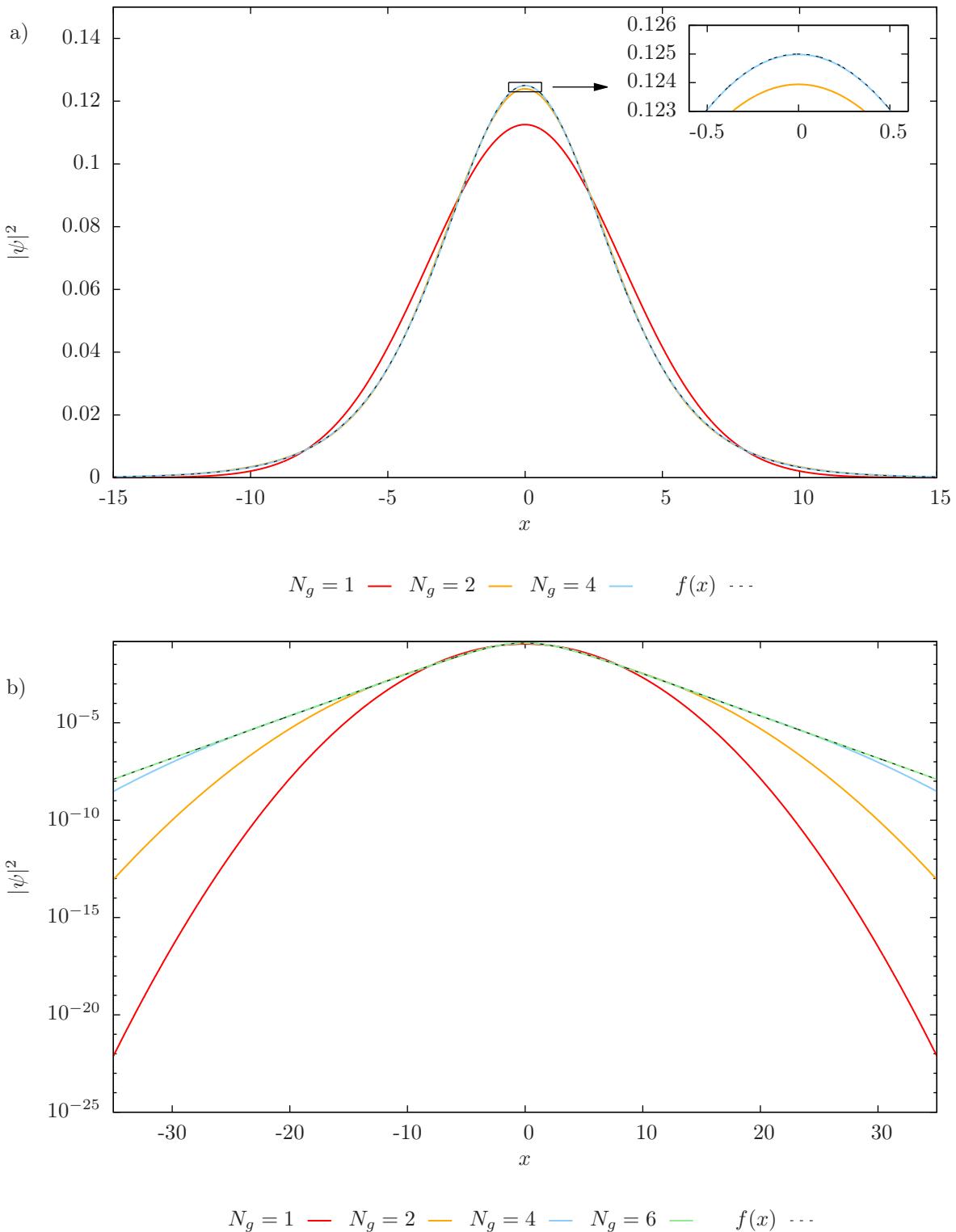


Abbildung 3.3: Vergleich der Wellenfunktionen für die verschiedenen Ansätze aus N_g Gaußfunktionen mit der analytischen Lösung f . Die Betragsquadrate sind in a) linear und in b) logarithmisch gegen den Ort x aufgetragen.

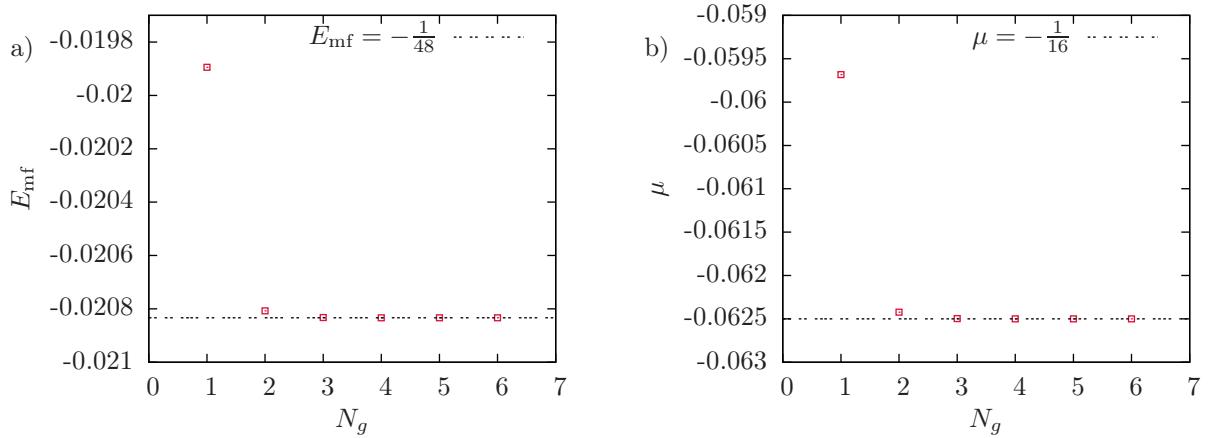


Abbildung 3.4: a) Mean-Field-Energie E_{mf} und b) chemisches Potential μ aufgetragen gegen die Anzahl N_g der Gaußfunktionen. Die gestrichelten Linien zeigen die Werte der analytischen Lösung.

Die Werte für die Mean-Field-Energie E_{mf} und das chemische Potential μ sind in den Abbildungen 3.4 gegen die Anzahl N_g der Gaußfunktionen aufgetragen. Die Werte konvergieren mit zunehmender Anzahl an Gaußfunktionen schnell gegen die analytische Lösung. Während der Ansatz aus einer Gaußfunktion noch recht weit von der analytischen Lösung abweicht, lassen sich schon bei mehr als zwei Gaußfunktionen keine Unterschiede zwischen dem Ansatz aus Gaußfunktionen und der analytischen Lösung mehr erkennen.

4 Dynamik einzelner Solitonen

Nachdem nun stationäre Lösungen der Gleichungen (2.51a)-(2.51c) bekannt sind, kann die Dynamik der Solitonen untersucht werden. Dazu wird sich in diesem Kapitel auf Translationen einzelner Solitonen beschränkt. Bei den Translationen werden, wie bei den stationären Lösungen, die Breitenparameter a_n reell gewählt. Grund dafür ist, dass die Translation eines Solitons als Transformation aus dem Ruhesystem gesehen werden kann. Diese Transformation ist durch die Ersetzung

$$\psi \rightarrow \psi e^{ipx} \quad (4.1)$$

gegeben. Die Ersetzung ändert nichts an den Breitenparametern a_n , die bei der stationären Lösung reell waren. Anders als bei den stationären Lösungen verschwinden die Größen b_n jedoch nicht mehr, sondern sind komplex gewählt.

Ein stationäres Soliton ist lokalisiert. Jedes der Teilchen muss nach der Heisenbergschen Unschärferelation einen Ruheimpuls besitzen. Der Ruheimpuls kann dazu verwendet werden, die Größenordnungen der Geschwindigkeiten besser abschätzen zu können. Er lässt sich aus dem Erwartungswert der kinetischen Energie

$$\left\langle -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right\rangle = \langle p^2 \rangle \quad (4.2)$$

bestimmen. Unter Verwendung der analytischen Lösung aus Gleichung (2.36) ergibt sich

$$\langle p^2 \rangle = \frac{1}{48}. \quad (4.3)$$

Klassisch besitzen die Teilchen im ruhenden Soliton somit gerade einen mittleren Impuls

$$p = \sqrt{\frac{1}{48}} \approx 0,144. \quad (4.4)$$

4.1 Umschreiben des Ansatzes

Zum besseren physikalischen Verständnis der Parameter a_n , b_n sowie c_n wird der Ansatz (2.48) umgeformt

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_{n=1}^{N_g} e^{-a_n x^2 + b_n x + c_n} \\ &= \sum_{n=1}^{N_g} e^{-a_n \left(x - \frac{\text{Re}(b_n)}{2a_n} \right)^2 + i\text{Im}(b_n) \left(x - \frac{\text{Re}(b_n)}{2a_n} \right) + \frac{\text{Re}(b_n)^2}{4a_n} + i \frac{\text{Re}(b_n)\text{Im}(b_n)}{2a_n} + c_n}.\end{aligned}\quad (4.5)$$

Aus dieser Darstellung des Ansatzes kann die Verschiebung des Solitons, dessen Impuls, Phase sowie Amplitude identifiziert werden. Die Breitenparameter werden als reell angenommen. Die Verschiebung des Solitons wird im Folgenden mit x_0 bezeichnet. Für x_0 gilt

$$x_0 = \frac{\text{Re}(b_n)}{2a_n}. \quad (4.6)$$

Das Verhältnis aus dem Realteil von b_n sowie dem Breitenparameter a_n muss somit für alle Gaußfunktionen denselben Wert besitzen. Die Geschwindigkeit des Solitons v ist damit gegeben durch

$$v = \dot{x}_0 = \frac{\text{Re}(\dot{b}_n)}{2a_n}, \quad (4.7)$$

unter der Annahme, dass sich die Breitenparameter a_n während der Translation zeitlich nicht ändern. Die Änderung des Realteils der Größen b_n kann aus den Bewegungsgleichungen abgelesen werden. Einsetzen von $b_n = \text{Re}(b_n) + i\text{Im}(b_n)$ in die Bewegungsgleichung (2.51b) liefert

$$\text{Re}(\dot{b}_n) + i\text{Im}(\dot{b}_n) = 4a_n \text{Im}(b_n) - i(4a_n \text{Re}(b_n) + V_1^n). \quad (4.8)$$

Der Vergleich von Real- und Imaginärteil liefert die Beziehung

$$\text{Re}(\dot{b}_n) = 4a_n \text{Im}(b_n). \quad (4.9)$$

Unter Verwendung von Gleichung (4.7) vereinfacht sich Gleichung (4.9) zu

$$\text{Im}(b_n) = \frac{1}{2}v. \quad (4.10)$$

Im Abschnitt 2.1.2 wurde die Masse als $m = 1/2$ gewählt. Der Impuls p kann damit als

$$p = mv = \text{Im}(b_n) \quad (4.11)$$

identifiziert werden. In der Gross-Pitaevskii-Gleichung treten keine äußeren Potentiale und somit keine externen Kräfte auf. Das Soliton sollte sich mit einer konstanten

Geschwindigkeit v und damit auch einem konstanten Impuls p fortbewegen. Der Term $\text{Im}(b_n)$ in Gleichung (4.8) verschwindet nur dann, wenn

$$V_1^n = -4a_n \text{Re}(b_n) \quad (4.12)$$

gilt. Innerhalb eines Solitons bewegen sich alle Gaußfunktionen gleich schnell, $\text{Im}(b_n)$ wird somit für alle Gaußfunktionen gleich gewählt. Die Phase der Gaußfunktionen in Gleichung (4.5) wird mit φ bezeichnet und ist gegeben durch

$$\varphi = \frac{\text{Re}(b_n)\text{Im}(b_n)}{2a_n} + \text{Im}(c_n). \quad (4.13)$$

Durch Einsetzen von Gleichung (4.6) sowie (4.11) in Gleichung (4.13) vereinfacht sich Gleichung (4.13) zu

$$\varphi = x_0 p + \text{Im}(c_n). \quad (4.14)$$

Der Impuls p sowie die Verschiebung x_0 besitzen bei allen Gaußfunktionen denselben Wert. Der Imaginärteil der Amplitudenparameter c_n entsprach bei den stationären Lösungen gerade einer globalen Phase und ist für alle Gaußfunktionen gleich groß. Die Phase φ besitzt folglich für alle Gaußfunktionen denselben Wert und trägt, wie der Impuls p und die Verschiebung x_0 , keinen Index n . Die Verschiebung der Wellenfunktion wirkt sich auch auf die Phase der Wellenfunktion aus. Die Phasenänderung ergibt sich durch Ableiten nach der Zeit

$$\dot{\varphi} = 2p^2 + \text{Im}(\dot{c}_n). \quad (4.15)$$

Diese Phasenänderung muss im Fall $p = 0$ in die stationäre Phasenänderung

$$\dot{\varphi}(p = 0) = -\mu \quad (4.16)$$

übergehen. Daraus folgt

$$\text{Im}(\dot{c}_n) = -\mu. \quad (4.17)$$

Die Phase der Wellenfunktion ändert sich demnach gemäß

$$\dot{\varphi} = 2p^2 - \mu \quad (4.18)$$

für alle Gaußfunktionen gleich schnell. Die neuen Amplitudenparameter der Gaußfunktionen in Gleichung (4.5) werden mit c'_n bezeichnet. Für sie gilt

$$c'_n = \frac{\text{Re}(b_n)^2}{4a_n} + \text{Re}(c_n). \quad (4.19)$$

Einsetzen von Gleichung (4.6) liefert

$$c'_n = a_n x_0^2 + \text{Re}(c_n). \quad (4.20)$$

Der Realteil von c_n muss so gewählt werden, dass c'_n den jeweiligen Fixpunkt aus Tabelle 3.1 annimmt. Die so eingeführten Größen x_0 , p , φ sowie c'_n sind rein reell und im Allgemeinen Funktionen der Zeit. Werden sie in den Ansatz (4.5) eingesetzt ergibt sich

$$\psi = \sum_{n=1}^{N_g} e^{-a_n(x-x_0)^2 + ip(x-x_0) + c'_n + i\varphi}. \quad (4.21)$$

4.2 Translation einer Gaußfunktion

Im Spezialfall einer Gaußfunktion lässt sich die Abhängigkeit des chemischen Potentials μ sowie der Mean-Field-Energie E_{mf} angeben. Dazu wird zuerst der Erwartungswert der kinetischen Energie, im folgenden mit T bezeichnet, nach

$$T = \left\langle \psi \left| -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right| \psi \right\rangle \quad (4.22)$$

berechnet. Es wird angenommen, dass sich das Soliton gerade im Ursprung befindet. Die Wellenfunktion kann somit als

$$\psi = \left(\frac{2a_1}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-a_1 x^2 + ipx} \quad (4.23)$$

geschrieben werden. Einsetzen der Wellenfunktion (4.23) in Gleichung (4.22) liefert

$$T = p^2 + a_1. \quad (4.24)$$

Mit a_1 aus Gleichung (3.9) folgt

$$T = p^2 + \frac{1}{16\pi}. \quad (4.25)$$

Durch die Translation wird die kinetische Energie somit um p^2 verschoben. Der Erwartungswert der Kontaktwechselwirkung wird im Folgenden mit V bezeichnet und berechnet sich aus

$$V = \langle \psi | \psi^* \psi | \psi \rangle. \quad (4.26)$$

Einsetzen der Wellenfunktion (4.23) unter Verwendung von $a_1 = 1/16\pi$ liefert

$$V = -4a_1 = -\frac{1}{4\pi}. \quad (4.27)$$

Das chemische Potential ergibt sich aus den Gleichungen (4.25) und (4.27) zu

$$\mu = T + V = p^2 - 3a_1 = p^2 - \frac{3}{16\pi} \quad (4.28)$$

und geht für $p \rightarrow 0$ in den stationären Fall (3.14) über. Die Mean-Field-Energie E_{mf} berechnet sich aus den Gleichungen (4.25) und (4.27) zu

$$E_{\text{mf}} = T + \frac{1}{2}V = p^2 - a_1 = p^2 - \frac{1}{16\pi}. \quad (4.29)$$

Weder im chemischen Potential noch bei der Mean-Field-Energie spielt das Vorzeichen des Impulses p eine Rolle, da dieser nur quadratisch auftritt. Dies ist bei einer freien Translation nicht verwunderlich, da es keine ausgezeichnete Richtung gibt.

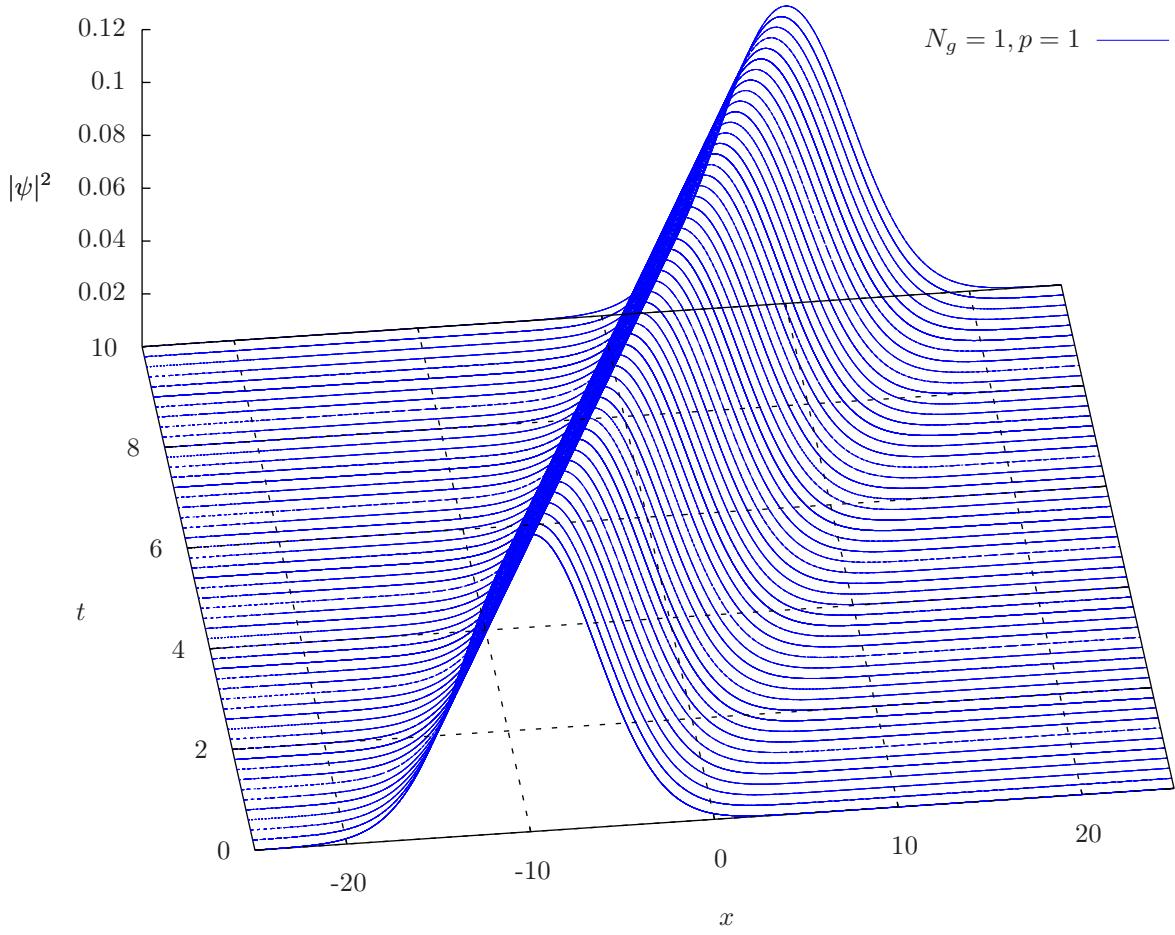


Abbildung 4.1: Translation der Wellenfunktion ψ aus einer Gaußfunktion. Aufgetragen ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion über die Zeit t sowie den Ort x . Der Impuls des Solitons beträgt $p = 1$. Animation siehe [10].

Das chemische Potential ist nun bekannt und es kann die Phasenänderung der Wellenfunktion durch Einsetzen von Gleichung (4.28) in Gleichung (4.18) berechnet werden

$$\dot{\varphi} = 2p^2 - \mu = p^2 + 3a_1 = p^2 + \frac{3}{16\pi}. \quad (4.30)$$

Die Translation einer Gaußfunktion ist beispielhaft für den Wert $p = 1$ in Abbildung 4.1 dargestellt. Gezeigt ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion. Während der gesamten Translation ändert sich die Form der Wellenfunktion nicht, sondern verschiebt sich nur in Ausbreitungsrichtung. Der Imaginär- und Realteil der Wellenfunktion aus Abbildung 4.1 sind in Abbildung 4.2(a) bzw. 4.2(b) dargestellt.

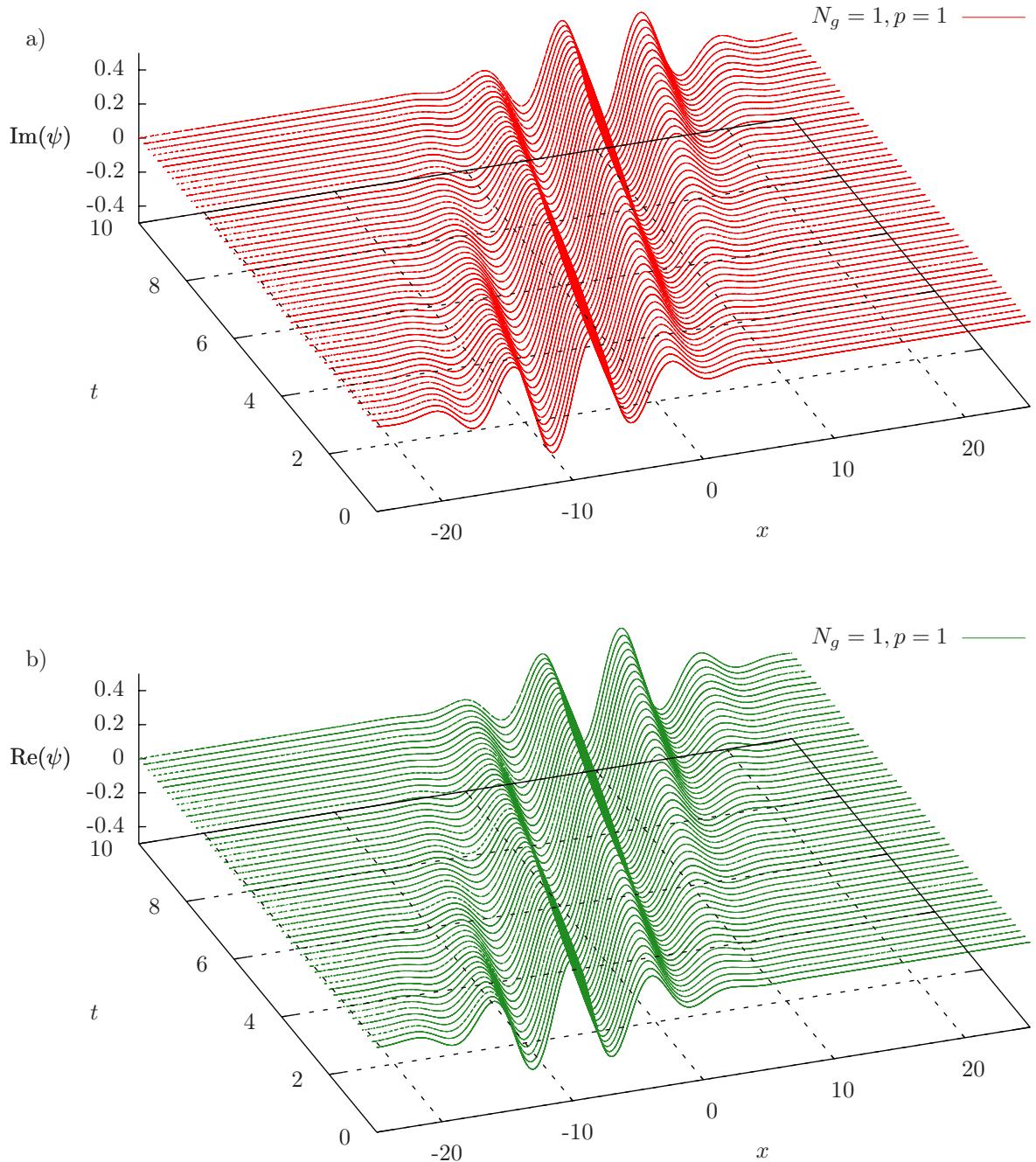


Abbildung 4.2: a) Imaginärteil und b) Realteil der Wellenfunktion aus Abbildung 4.1.
Der Impuls beträgt $p = 1$. Animation siehe [10].

Die Oszillationen, die der Imaginärteil aus Abbildung 4.2(a) zeigt, müssen auch im Realteil in Abbildung 4.2(b) zu sehen sein. Die Quadrate des Realteils und des Imaginärteils überlagern sich so, dass die Form des Betragsquadrats, wie in Abbildung 4.1 zu sehen, invariant bleibt.

In Gleichung (4.18) konnte eine Beziehung zwischen der Änderung der Phase der Wellenfunktion, dem Impuls p und dem chemischen Potential μ hergestellt werden. Zur besseren Übersicht werden die Wellenfunktionen mit dem Faktor

$$\psi \rightarrow \psi e^{-i(p^2 - \mu)t} \quad (4.31)$$

multipliziert. Der Faktor ändert am physikalisch relevanten Betragsquadrat der Wellenfunktion nichts, eliminiert allerdings die globale Phase der Wellenfunktion zu jedem Zeitpunkt. Die Auswirkungen auf Imaginär- und Realteil der Wellenfunktion sind in Abbildung 4.3(a) bzw. 4.3(b) zu sehen. Es sind, wie in den Abbildungen 4.2, Oszillationen des Imaginärteils als auch des Realteils zu erkennen. Anders als in den Abbildungen 4.2 bleiben Imaginär- und Realteil während der Translation forminvariant und verschieben sich, wie das Betragsquadrat, in Ausbreitungsrichtung. Im folgenden werden die Real- sowie Imaginärteile von Wellenfunktionen nur noch von ihrer globalen Phase bereinigt dargestellt.

Bei einer Änderung des Impulses p ändert sich nicht nur die Geschwindigkeit der Wellenfunktionen, sondern es lassen sich auch Änderungen im Real- und Imaginärteil feststellen. In den Abbildungen 4.4(a) und 4.4(b) sind die Imaginärteile der Wellenfunktion für Translationen mit $p = 0,5$ bzw. $p = 1,5$ dargestellt. Es wird darauf verzichtet das Betragsquadrat darzustellen, da sich kein qualitativ neues Verhalten im Vergleich zu Abbildung 4.1 zeigt. Zudem werden die Realteile nicht dargestellt, da sie dasselbe Verhalten wie die zugehörigen Imaginärteile zeigen. Im Vergleich zum Imaginärteil der Wellenfunktion für $p = 1$ in Abbildung 4.3(a) zeigt der Imaginärteil der Wellenfunktion für $p = 0,5$ aus Abbildung 4.4(a) weniger Oszillationen. Wie in Abbildung 4.4(b) zu sehen, erhöht sich die Anzahl der Oszillationen mit zunehmendem Impuls p .

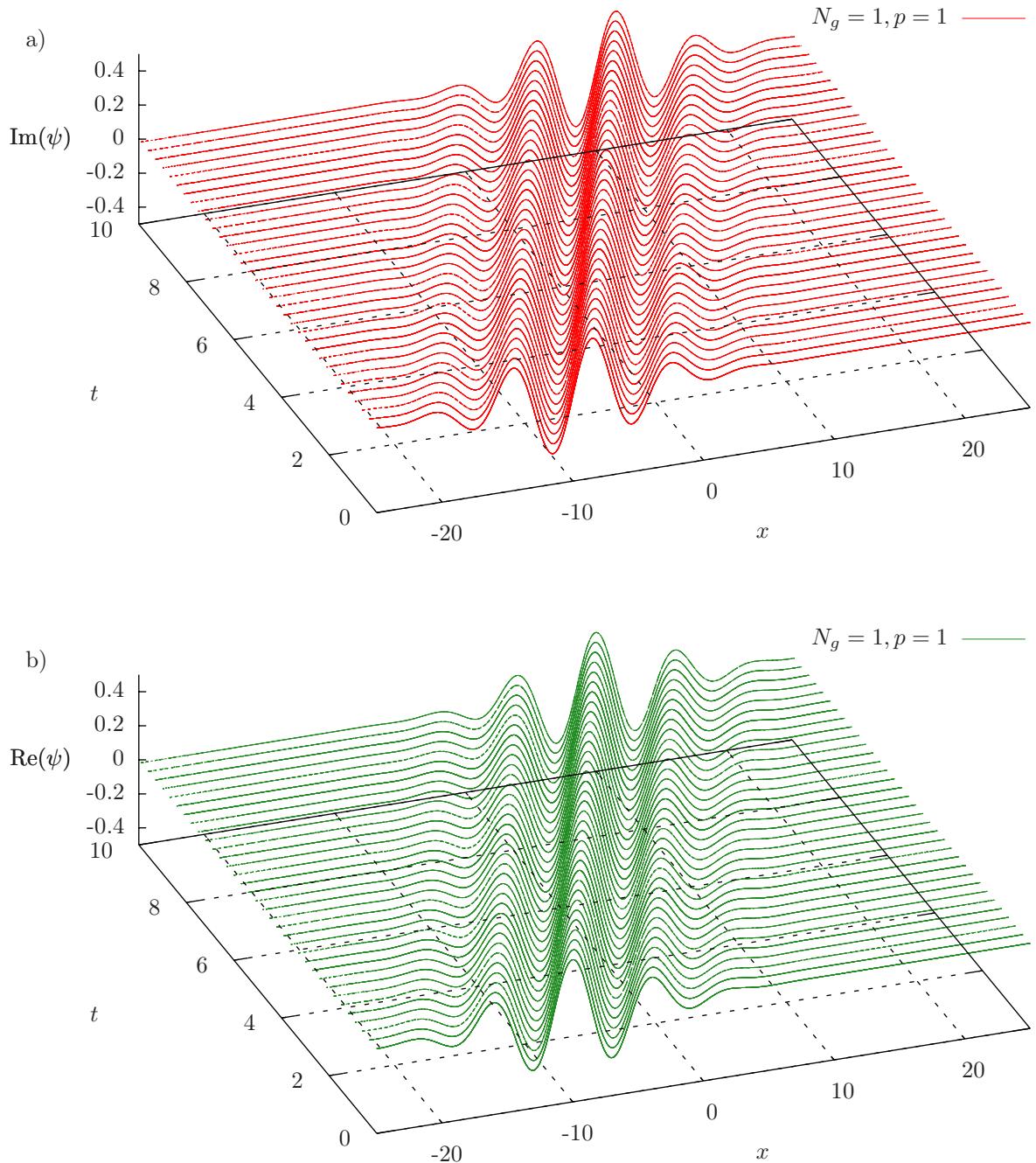


Abbildung 4.3: a) Von der globalen Phase bereinigter Imaginärteil und b) Realteil der Wellenfunktion aus Abbildung 4.1. Animation siehe [10].

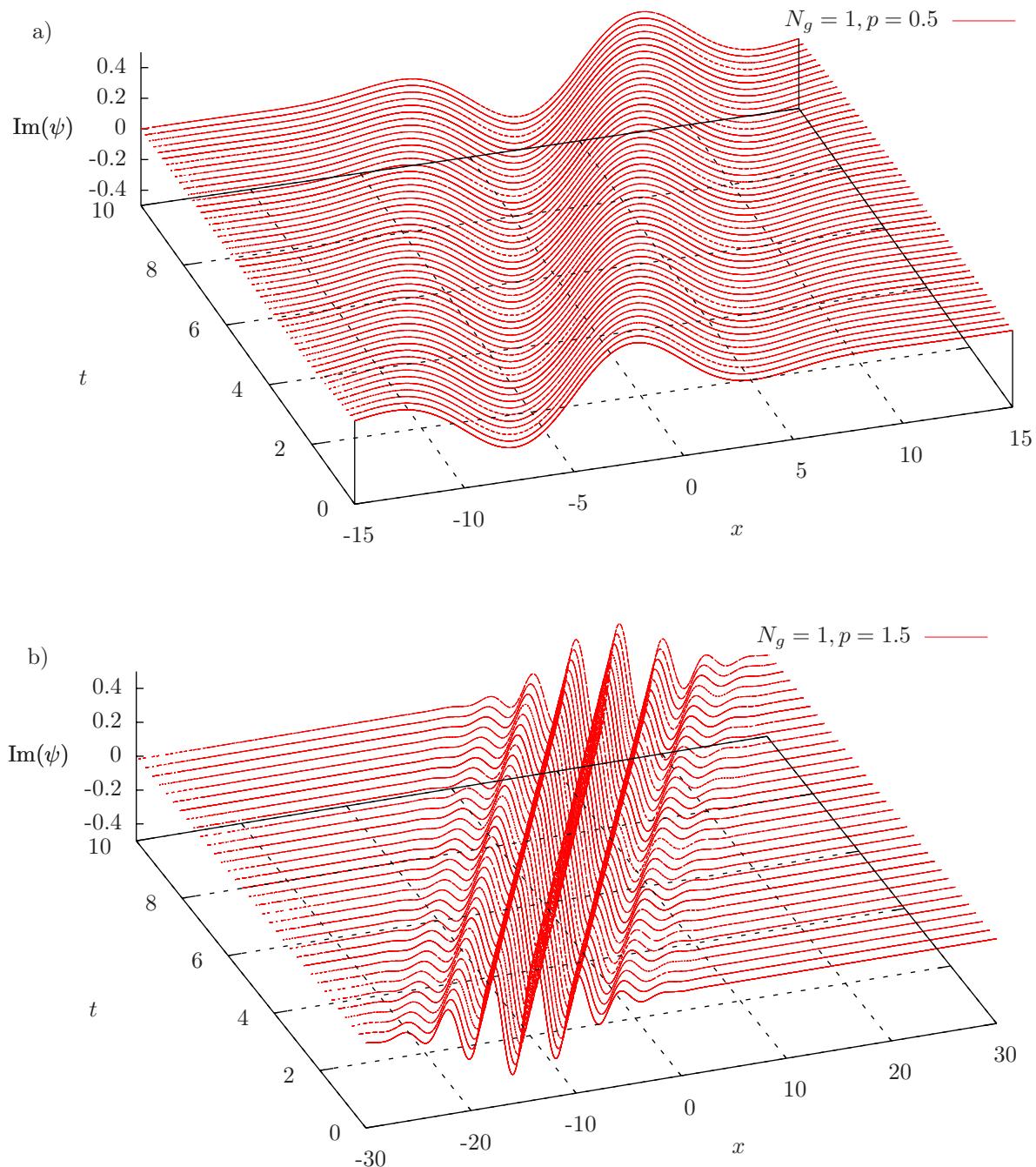


Abbildung 4.4: Imaginäre Teil der Wellenfunktion bei einem Impuls von a) $p = 0,5$ und b) $p = 1,5$. Animation siehe [10].

4.3 Translation gekoppelter Gaußfunktionen

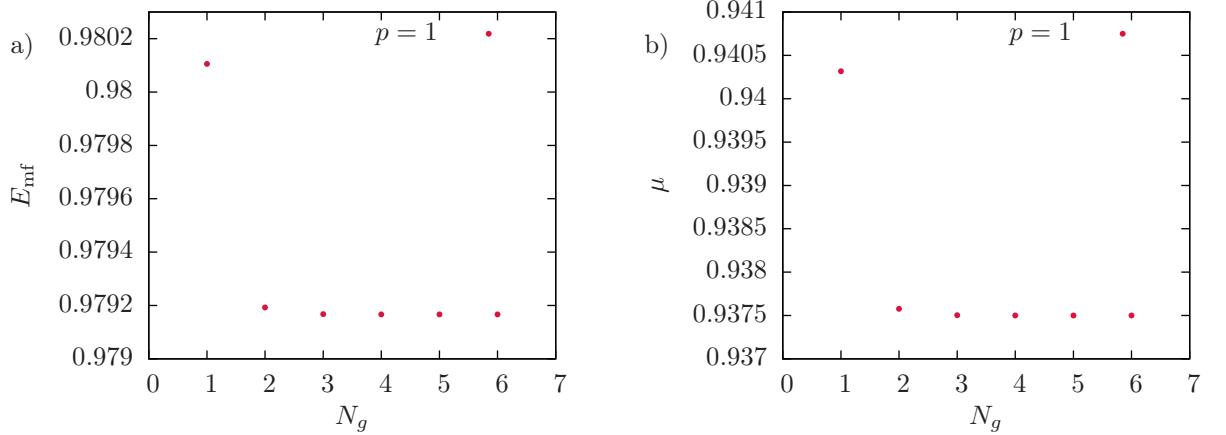


Abbildung 4.5: a) Mean-Field-Energie E_{mf} und b) chemisches Potential μ der Ansätze aus N_g Gaußfunktionen im Vergleich. Als Impuls wurde für alle Wellenfunktionen $p = 1$ gewählt.

Für die verschiedenen Ansätze aus Gaußfunktionen wurden, wie im stationären Fall, die Mean-Field-Energie sowie das chemische Potential numerisch berechnet. Als Impuls wurde dazu $p = 1$ gewählt. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 4.5 dargestellt. Abbildung 4.5 ähnelt sehr stark dem stationären Fall aus Abbildung 3.4. Die Werte für die Mean-Field-Energie und das chemische Potential konvergieren mit zunehmender Anzahl N_g an Gaußfunktionen schnell gegen eine untere Grenze. Beim Ansatz aus einer Gaußfunktion konnte gezeigt werden, dass die Translation die Mean-Field-Energie sowie das chemische Potential gerade um den Wert p^2 verschiebt (vgl. Gleichung (4.29) bzw. (4.28)). Innerhalb der numerischen Grenzen kann dieses Verhalten auch für die Ansätze aus mehreren Gaußfunktionen bestätigt werden. Der Vergleich von Abbildung 3.4 mit 4.5 zeigt, dass die Werte gerade um den Wert eins verschoben sind. Zudem spielt das Vorzeichen von p weder für das chemische Potential noch für die Mean-Field-Energie eine Rolle.

Auf der linearen Achse unterscheiden sich die Betragsquadrate der Ansätze aus $N_g \geq 2$ Gaußfunktionen kaum noch voneinander. Die Translation gekoppelter Gaußfunktionen wird im Folgenden deshalb auf den Fall $N_g = 6$ beschränkt. Dieser hat im stationären Fall die analytische Lösung am besten approximiert. Ansätze mit weniger Gaußfunktionen zeigen zudem kein qualitativ unterschiedliches Verhalten.

Abbildung 4.6 zeigt das Betragsquadrat der Wellenfunktion aus $N_g = 6$ Gaußfunktionen und einem Impuls $p = 1$. Im Vergleich zum Ansatz einer Gaußfunktion aus Abbildung 4.1 ändert sich die Form der Wellenfunktion wie im stationären Fall. Die Kopplung

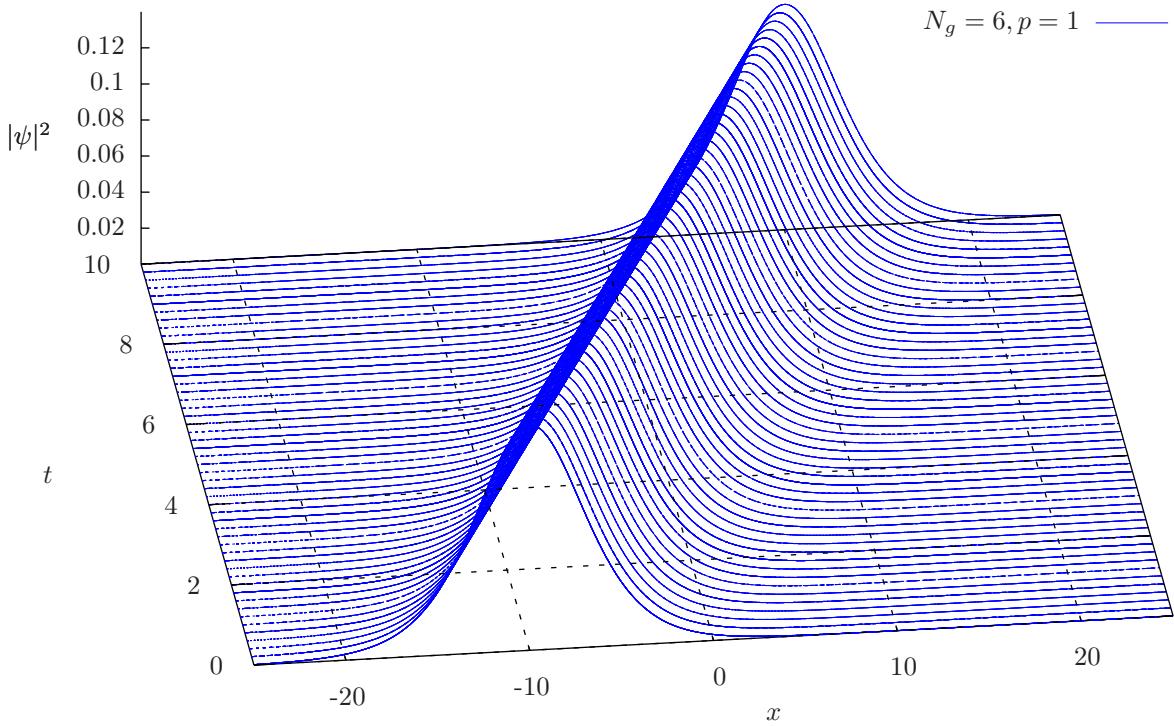


Abbildung 4.6: Betragsquadrat der Wellenfunktion aus $N_g = 6$ Gaußfunktionen bei einem Impuls von $p = 1$. Animation siehe [10].

der Gaußfunktionen hat ansonsten allerdings keine Auswirkungen auf die Dynamik einzelner Solitonen.

Abbildung 4.7(a) zeigt den Imaginärteil der Wellenfunktion aus Abbildung 4.6. Es wird auf die Darstellung des Realteils verzichtet, da dieser das qualitativ selbe Verhalten besitzt wie der Imaginärteil. Zudem wurde die globale Phase durch die Ersetzung (4.31) eliminiert.

Bei einer Änderung des Impulses nehmen, wie bei einer Gaußfunktion, die Oszillationen des Imaginärteils weiter zu. Beispielhaft ist dies für einen Ansatz aus $N_g = 6$ Gaußfunktionen und einen Impuls von $p = 1,5$ in Abbildung 4.7(b) dargestellt.

Die bisher betrachteten Impulse sind alle größer als der Ruheimpuls aus Gleichung (4.4). Auf die Darstellung von Translationen mit Impuls unterhalb des Ruheimpulses wird verzichtet, da sich kein neues Verhalten der Wellenfunktion zeigt und sehr große Zeiträume betrachtet werden müssen, um die Bewegung deutlich zu erkennen.

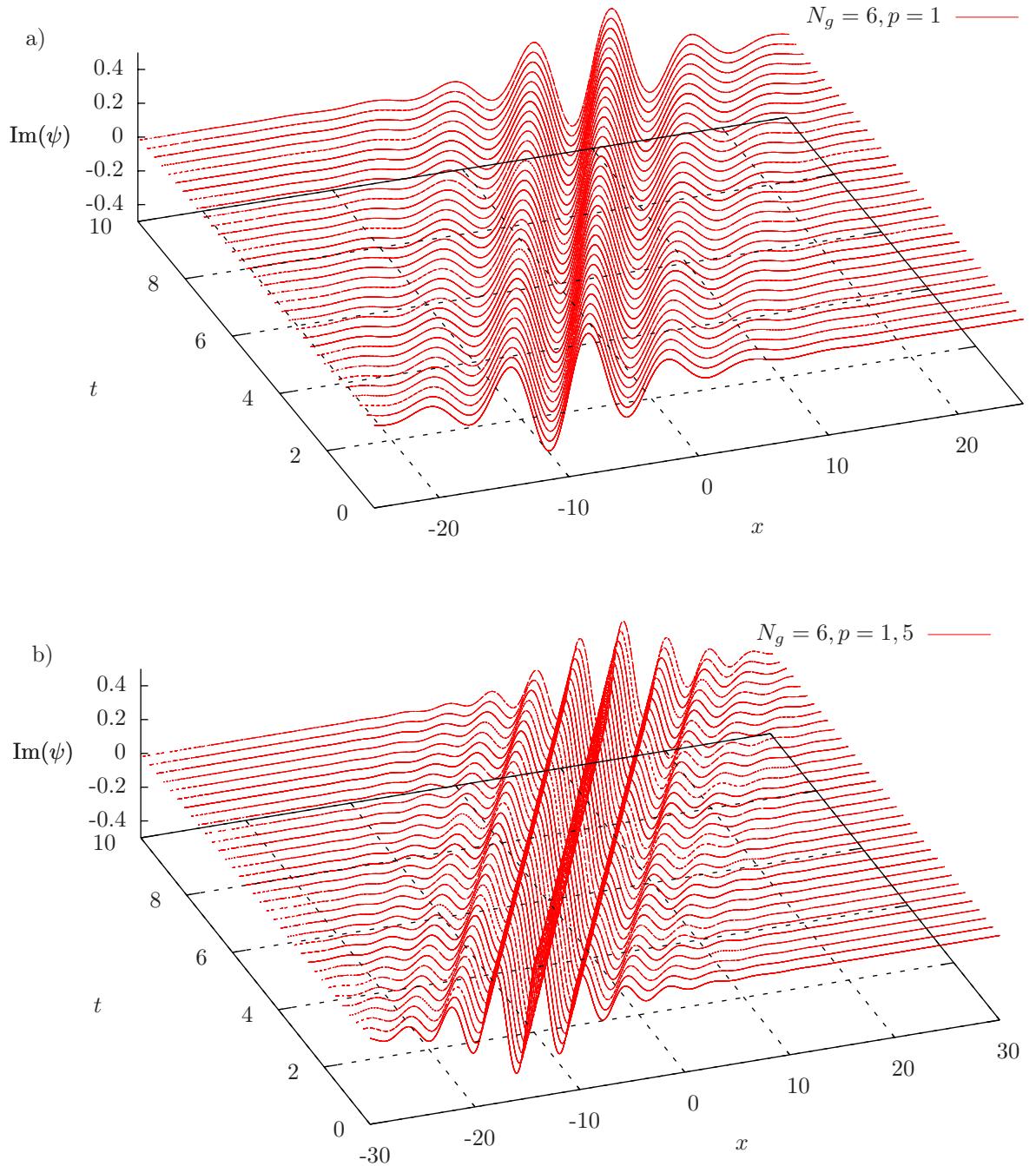


Abbildung 4.7: Imaginärteil der Wellenfunktion aus $N_g = 6$ Gaußfunktionen für den Impuls a) $p = 1$ und b) $p = 1, 5$. Animation siehe [10].

5 Stöße zwischen Solitonen

Zur weiteren Untersuchung der Dynamik werden nun Stöße zwischen Solitonen betrachtet. Für deren Zustandekommen müssen zuerst mehrere Solitonen durch eine Wellenfunktion beschrieben werden. Wie schon bei den Translationen wird dazu der Ansatz (4.21)

$$\psi = \sum_{n=1}^{N_g} \underbrace{e^{-a_n(x-x_0)^2 + ip(x-x_0) + c'_n + i\varphi}}_{=g_n}$$

verwendet. Allerdings beschreiben die N_g Gaußfunktionen nicht mehr nur ein Soliton, sondern mehrere. Die Gesamtwellenfunktion ist somit als Summe der Wellenfunktionen ψ_k der N_s einzelnen Solitonen zu verstehen. Jedes Soliton besteht dabei aus N_{gs} Gaußfunktionen

$$\psi = \sum_{k=1}^{N_s} \psi_k = \sum_{n=1}^{N_{gs}} g_n + \sum_{l=N_{gs}+1}^{2N_{gs}} g_l + \cdots + \sum_{m=(N_s-1)N_{gs}+1}^{N_{gs}N_s} g_m. \quad (5.1)$$

Die Solitonen ψ_k sind jeweils für sich normiert

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_k|^2 dx = 1. \quad (5.2)$$

Das bedeutet, dass nur auf Stöße zwischen Solitonen mit gleicher Teilchenzahl eingegangen wird. Prinzipiell können auch Stöße zwischen Solitonen unterschiedlicher Teilchenzahl untersucht werden. Dann gilt Gleichung (5.2) jedoch nicht mehr.

Die Startbedingungen werden so gewählt, dass die Solitonen zu Beginn weit voneinander entfernt sind. Dadurch ist der Überlapp der Wellenfunktionen ψ_k sehr klein und das Überlappintegral

$$\langle \psi_k | \psi_l \rangle \approx 0 \quad \text{mit} \quad k \neq l. \quad (5.3)$$

Die Norm der Gesamtwellenfunktion ψ lässt sich dadurch zu

$$\begin{aligned}\langle \psi | \psi \rangle &= \left\langle \sum_{k=1}^{N_s} \psi_k \middle| \sum_{l=1}^{N_s} \psi_l \right\rangle \\ &= \sum_{m=1}^{N_s} \langle \psi_m | \psi_m \rangle + \sum_{\substack{k,l=1 \\ l \neq k}}^{N_s} \langle \psi_k | \psi_l \rangle \\ &\approx \sum_{m=1}^{N_s} 1 = N_s\end{aligned}\tag{5.4}$$

annähern. Analog zu Gleichung (5.4) lässt sich das chemische Potential und die Mean-Field-Energie der Gesamtwellenfunktion durch die chemischen Potentiale μ_k sowie Mean-Field-Energien $E_{\text{mf},k}$ der Wellenfunktionen ψ_k zu

$$\mu \approx \sum_{k=1}^{N_s} \mu_k \quad \text{bzw.} \quad E_{\text{mf}} \approx \sum_{k=1}^{N_s} E_{\text{mf},k}.\tag{5.5}$$

annähern.

5.1 Stöße zwischen zwei Solitonen

5.1.1 Festlegung eines Koordinatensystems

Bei zwei Solitonen bietet es sich an, als Koordinatensystem das Schwerpunktsystem der beiden Solitonen zu wählen. Im Schwerpunktsystem bewegen sich beide Solitonen mit dem betragsmäßig gleichen Impuls

$$p_1 = -p_2 \equiv p\tag{5.6}$$

aufeinander zu und treffen sich im Ursprung. Die Verschiebung $x_{0,k}$ der Solitonen wird deshalb als

$$x_{0,2} = -x_{0,1} \equiv x_0\tag{5.7}$$

gewählt. Die Translationen der beiden Solitonen unterscheiden sich nur in deren Richtung. Die beiden Solitonen besitzen dasselbe chemische Potential. Die Änderung der Phase $\dot{\varphi}_k$ der beiden Wellenfunktionen ist folglich nach Gleichung (4.18) gleich groß. Die Phasendifferenz

$$\Delta\varphi = \varphi_2 - \varphi_1,\tag{5.8}$$

die durch die Startbedingungen festgelegt werden kann, ändert sich während der Translation nicht. Der anfängliche Abstand der Solitonen spielt somit keine Rolle für die

Phasenbeziehung während des Stoßes. Für die Phase des ersten Solitons kann $\varphi_1 = 0$ gewählt werden, sodass sich die Phasendifferenz aus Gleichung (5.8) zu

$$\Delta\varphi = \varphi_2 \quad (5.9)$$

vereinfacht. Die Wellenfunktion lautet schließlich

$$\psi = \underbrace{\sum_{n=1}^{N_{gs}} e^{-a_n(x+x_0)^2 + ip(x+x_0) + c'_n}}_{\psi_1} + \underbrace{\sum_{n=1}^{N_{gs}} e^{-a_n(x-x_0)^2 - ip(x-x_0) + c'_n + i\Delta\varphi}}_{\psi_2}. \quad (5.10)$$

Die Wellenfunktion ψ_1 bewegt sich mit dem Impuls p und ist zu Beginn bei $-x_0$ zentriert. Die Wellenfunktion ψ_2 bewegt sich mit Impuls $-p$, ist jedoch zu Beginn bei x_0 zentriert. Die bereits in Kapitel 4 erwähnte Ersetzung

$$\psi \rightarrow \psi e^{ipx} \quad (5.11)$$

ändert das physikalisch relevante Betragsquadrat der Wellenfunktion nicht, beschreibt aber eine Bewegung des Koordinatensystems mit der Geschwindigkeit

$$v = 2p. \quad (5.12)$$

So können Stöße auch außerhalb des Schwerpunktssystems betrachtet werden. Während der Stoß ist nicht sicher gewährleistet, dass sich die Breitenparameter a_n zeitlich nicht ändern. Die im Kapitel 4.1 aufgestellte Beziehung (4.7) gilt darum nicht mehr, sondern es muss die zeitliche Änderung von a_n miteinbezogen werden. Es gilt nun

$$v = \dot{x}_0 = \frac{\text{Re}(\dot{b}_n)}{2a_n} - \frac{\text{Re}(b_n)}{2a_n^2} \dot{a}_n. \quad (5.13)$$

5.1.2 Symmetrien der Wellenfunktion

Durch die geeignete Wahl der Phasendifferenz $\Delta\varphi$ kann die Wellenfunktion ψ vor dem Stoß unter anderem als symmetrisch oder antisymmetrisch festgelegt werden. Wird die Phasendifferenz der Wellenfunktionen ψ_1 und ψ_2 als $\Delta\varphi = 0$ festgelegt, so vereinfacht sich die Wellenfunktion ψ aus Gleichung (5.10) zu

$$\psi = \sum_{n=1}^{N_{gs}} e^{-a_n(x+x_0)^2 + ip(x+x_0) + c'_n} + \sum_{n=1}^{N_{gs}} e^{-a_n(x-x_0)^2 - ip(x-x_0) + c'_n}. \quad (5.14)$$

Die so aufgestellte Wellenfunktion ist symmetrisch, d.h. es gilt

$$\psi(x) = \psi(-x). \quad (5.15)$$

Wird $\Delta\varphi$ hingegen als $\Delta\varphi = \pi$ gewählt, so wird die Wellenfunktion (5.10) zu

$$\psi = \sum_{n=1}^{N_{gs}} e^{-a_n(x+x_0)^2 + ip(x+x_0) + c'_n} - \sum_{n=1}^{N_{gs}} e^{-a_n(x-x_0)^2 - ip(x-x_0) + c'_n}. \quad (5.16)$$

Die Wellenfunktion ist in diesem Fall antisymmetrisch, d.h. es gilt

$$\psi(x) = -\psi(-x). \quad (5.17)$$

5.1.3 Eine Gaußfunktion pro Soliton

Im Fall einer Gaußfunktion pro Soliton $N_{gs} = 1$ vereinfacht sich die Wellenfunktion aus Gleichung (5.10) zu

$$\psi = e^{-a(x+x_0)^2 + ip(x+x_0) + c'} + e^{-a(x-x_0)^2 - ip(x-x_0) + c' + i\Delta\varphi}. \quad (5.18)$$

Der Breitenparameter a sowie der Amplitudenparameter c' sind für beide Solitonen gleich groß und wurden in Abschnitt 3.1 zu

$$a = \frac{1}{16\pi} \quad \text{sowie} \quad c' = \ln\left(\sqrt{\frac{1}{\sqrt{8}\pi}}\right) = -\frac{1}{2}\ln(\sqrt{8}\pi)$$

berechnet. Die Wellenfunktion (5.18) lässt sich damit als

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{8}\pi}} \left(e^{-\frac{(x+x_0)^2}{16\pi} + ip(x+x_0)} + e^{-\frac{(x-x_0)^2}{16\pi} - ip(x-x_0) + i\Delta\varphi} \right) \quad (5.19)$$

schreiben. Als freie Parameter für die Untersuchung der Stöße bleiben somit noch der Impuls p und die Phasendifferenz $\Delta\varphi$ übrig. x_0 wird zu $x_0 = 20$ gewählt, sodass der Überlapp der Wellenfunktionen zu Beginn zu vernachlässigen ist.

Der Stoß zweier Solitonen für $p = 1$ sowie $\Delta\varphi = 0$ ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Während des Stoßes interferieren die Solitonen miteinander und es bilden sich Maxima und Minima der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte aus. Der größte Peak tritt dabei im Ursprung auf. Dargestellt ist der Bereich für $0 \leq t \leq 20$. In dieser Zeit könnten Solitonen bei reiner Translation eine Strecke von $\Delta x = 40$ zurücklegen. Die zurückgelegte Strecke der Solitonen in Abbildung 5.1 ist allerdings größer und beträgt ca. $\Delta x \approx 40, 23$. Die Betrachtung der Impulse p der Solitonen in den Abbildungen 5.2 liefert dafür eine Erklärung. Nähern sich die Solitonen an, so ist zu erkennen, dass sich der Impuls der Solitonen betragsmäßig erhöht. Entfernen sich die Solitonen wieder von einander, so werden sie langsamer und besitzen nach dem Stoß den selben Impuls wie zuvor. Die Impulse der Solitonen ändern während des Stoßes ihr Vorzeichen nicht. Die Solitonen scheinen einander zu durchdringen. Durch die erhöhte Geschwindigkeit während des Stoßes kommt die größere zurückgelegte Strecke zustande. Der Grund für die Beschleunigung ist die attraktive Kontaktwechselwirkung der Solitonen, welche die Solitonen aufeinander zu beschleunigt, die Geschwindigkeit jedoch verringert, wenn sich die Solitonen voneinander entfernen.

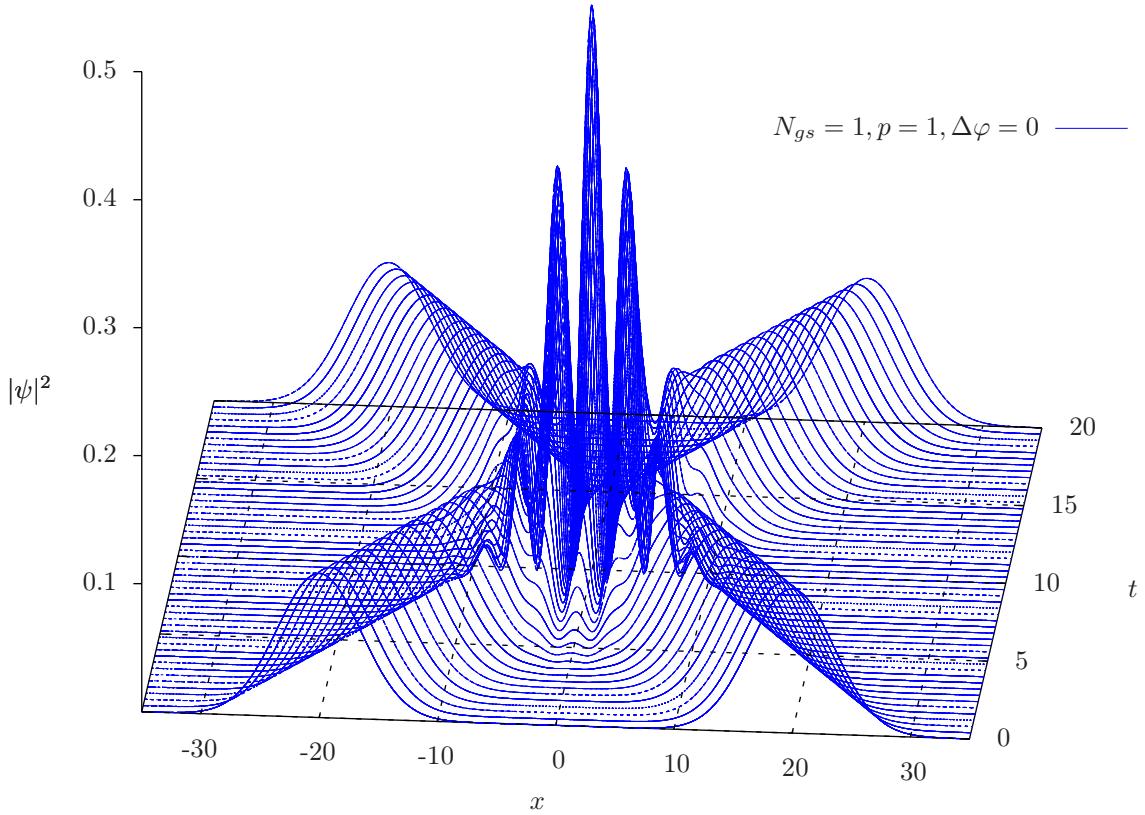


Abbildung 5.1: Stoß zweier Solitonen mit dem Impuls $p = 1$ und der Phasendifferenz $\Delta\varphi = 0$. Aufgetragen ist das Betragsquadrat der Geamtwellenfunktion ψ gegen den Ort x sowie die Zeit t . Animation siehe [10].

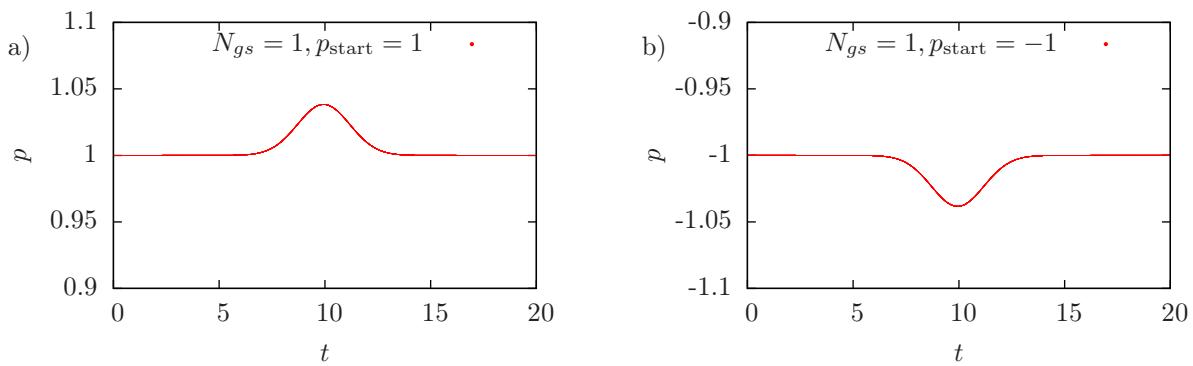


Abbildung 5.2: Impuls der Solitonen aufgetragen gegen die Zeit für $\Delta\varphi = 0$ und $p = 1$.

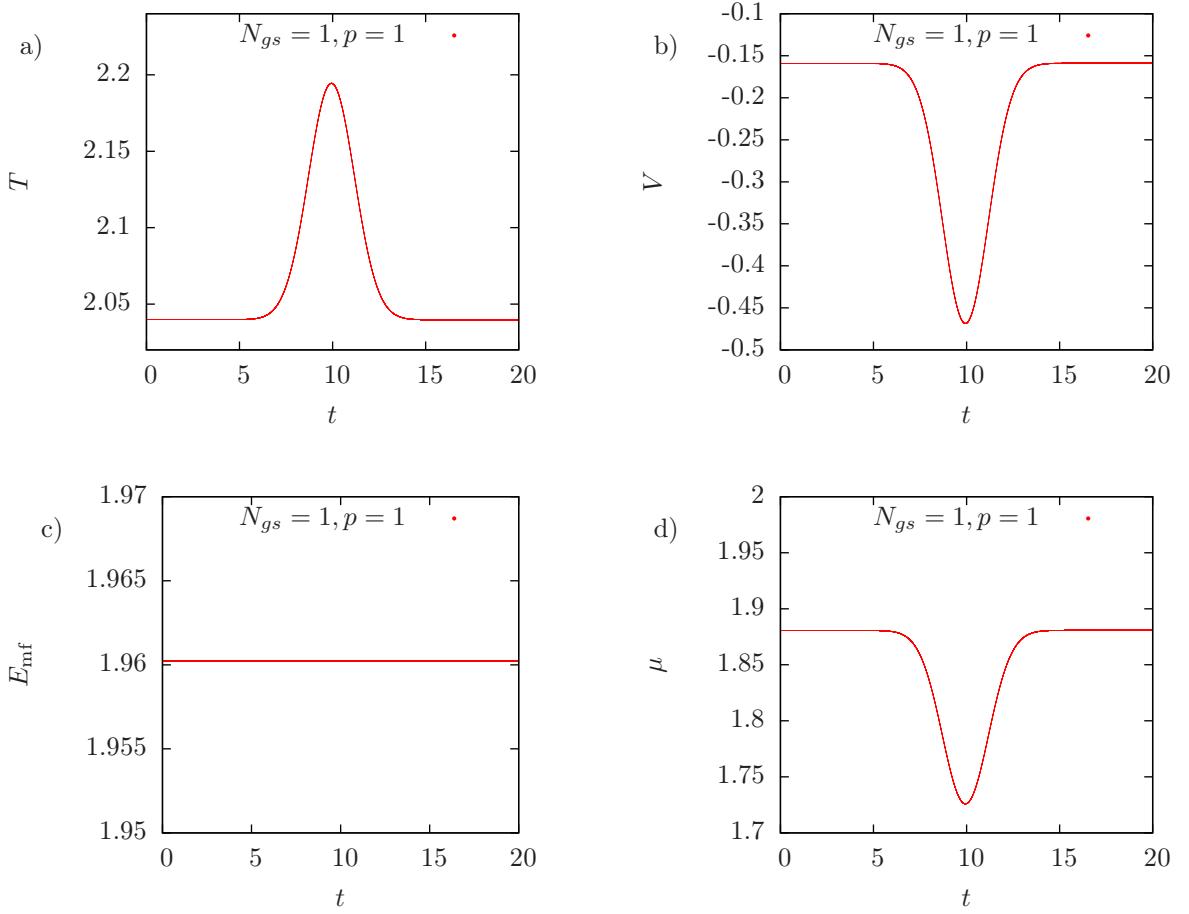


Abbildung 5.3: Erwartungswert der kinetischen Energie T und der Kontaktwechselwirkungsenergie V sowie Mean-Field-Energie E_{mf} und chemisches Potential μ aufgetragen gegen die Zeit t .

Die höhere Geschwindigkeit der Solitonen zeigt sich auch bei der Betrachtung der Energien in Abbildung 5.3. Während des Stoßes zeigt sich in Abbildung 5.3(a) eine Erhöhung der kinetischen Energie der Gesamtwellenfunktion. Gleichzeitig nimmt allerdings die Kontaktwechselwirkungsenergie in Abbildung 5.3(b) ab. Die Abnahme der Kontaktwechselwirkungsenergie ist stets doppelt so groß wie die Zunahme der kinetischen Energie, wodurch die Mean-Field-Energie erhalten ist, das chemische Potential allerdings abnimmt. Alle Graphen in Abbildung 5.3 zeigen einen symmetrischen Verlauf bezüglich des Zeitpunktes $t \approx 10$, zu dem sich die Solitonen komplett überlagern. Durch die Wahl der Phasendifferenz $\Delta\varphi = 0$ ist die Gesamtwellenfunktion symmetrisch. Diese Symmetrieeigenschaft bleibt auch während und nach dem Stoß erhalten. Unter Zeitumkehr bleibt der Stoß invariant, was sich auch an den Energien T , V , E_{mf} und μ zeigt.

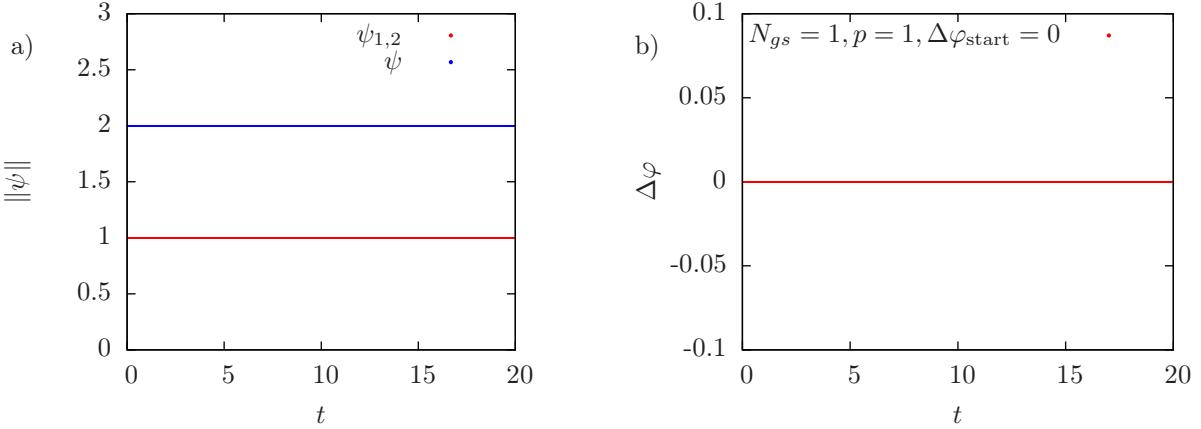


Abbildung 5.4: a) Norm $\|\psi\|$ und b) Phasendifferenz $\Delta\varphi$ aufgetragen gegen die Zeit t . Der Impuls der Solitonen beträgt $p = 1$ und die Wellenfunktion wurde vor dem Stoß symmetrisch gewählt ($\Delta\varphi_{\text{start}} = 0$).

Während des Stoßes sollte neben der Mean-Field-Energie auch die Norm der Wellenfunktion erhalten sein. Abbildung 5.4(a) zeigt die Norm der Gesamtwellenfunktion ψ im Verlauf des Stoßes. In Abbildung 5.4(a) wird deutlich, dass nicht nur die Norm der Gesamtwellenfunktion ψ , sondern auch die Norm der Wellenfunktionen ψ_1 bzw. ψ_2 während des Stoßes erhalten bleibt. In Abbildung 5.4(b) ist die Phasendifferenz der beiden Wellenfunktionen gegen die Zeit aufgetragen. Als Startbedingung wurde $\Delta\varphi = 0$ gewählt. Wie auch bei den Translationen ändert sich die Phasendifferenz zwischen den beiden Solitonen während des Stoßes nicht.

In Abbildung 5.5 ist die Phasendifferenz zwischen den Solitonen zu $\Delta\varphi = \pi$ gewählt, wodurch die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch ist und im Ursprung verschwindet

$$\psi(x = 0) = 0. \quad (5.20)$$

Das Betragsquadrat der Wellenfunktion ist zwar, wie im Fall einer symmetrischen Gesamtwellenfunktion, symmetrisch, verschwindet allerdings durch Gleichung (5.20) im Ursprung. Anders als in Abbildung 5.1 befindet sich somit in Abbildung 5.5 der größte Wert des Betragsquadrats nicht im Ursprung, sondern es entstehen zwei symmetrische Peaks der gleichen Höhe. Der Verlauf der Geschwindigkeiten, Energien als auch der Norm und der Phasendifferenz in den Abbildungen 5.2, 5.3 sowie 5.4 bleibt in sehr guter Näherung invariant unter der Änderung der Phase.

Während die Abbildungen 5.1 und 5.5 symmetrische bzw. antisymmetrische Gesamtwellenfunktionen zeigen, können auch Stöße zwischen Solitonen betrachtet werden, deren Gesamtwellenfunktion keine weiteren Symmetrieeigenschaften besitzt. In Abbildung 5.6 beträgt die Phase zwischen den Solitonen $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2}$. Wie in den Fällen $\Delta\varphi = 0$ bzw. $\Delta\varphi = \pi$ interferieren die Solitonen und es bilden sich Maxima sowie Minima aus.

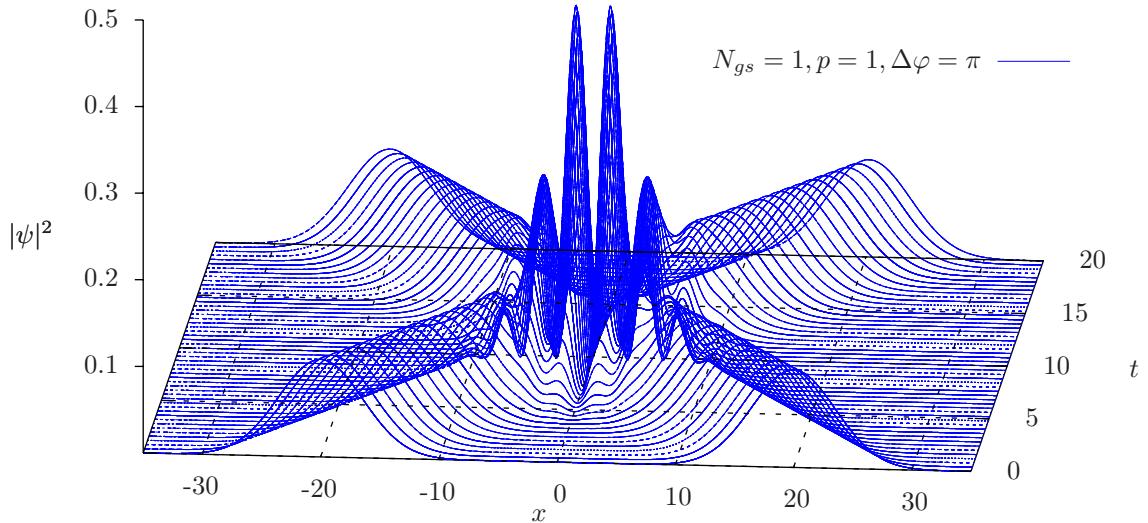


Abbildung 5.5: Stoß zweier Solitonen mit Impuls $p = 1$ und Phasendifferenz $\Delta\varphi = \pi$.
Animation siehe [10].

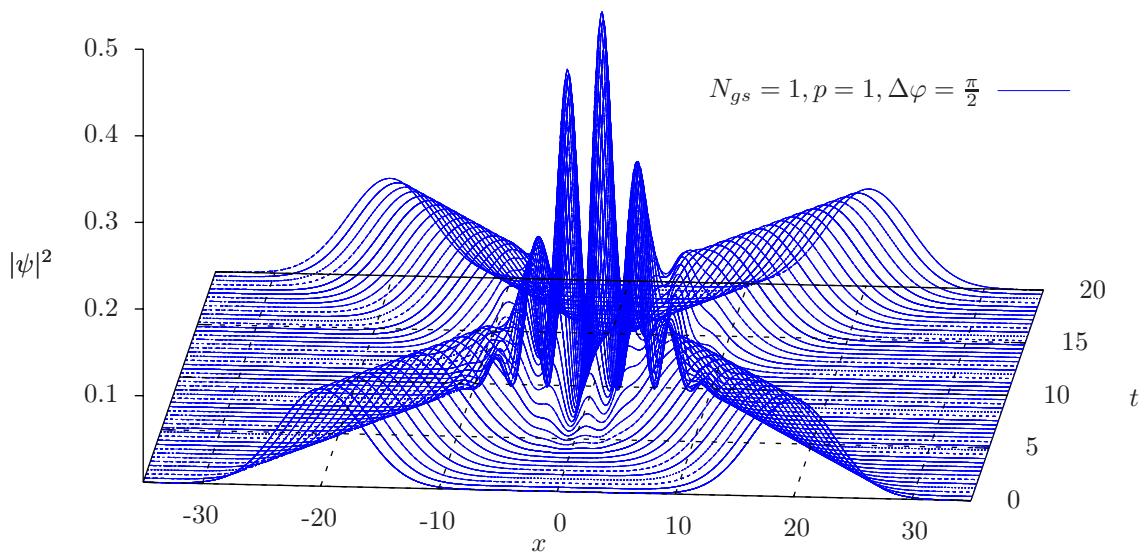


Abbildung 5.6: Stoß zweier Solitonen mit Impuls $p = 1$ und Phasendifferenz $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2}$.
Animation siehe [10].

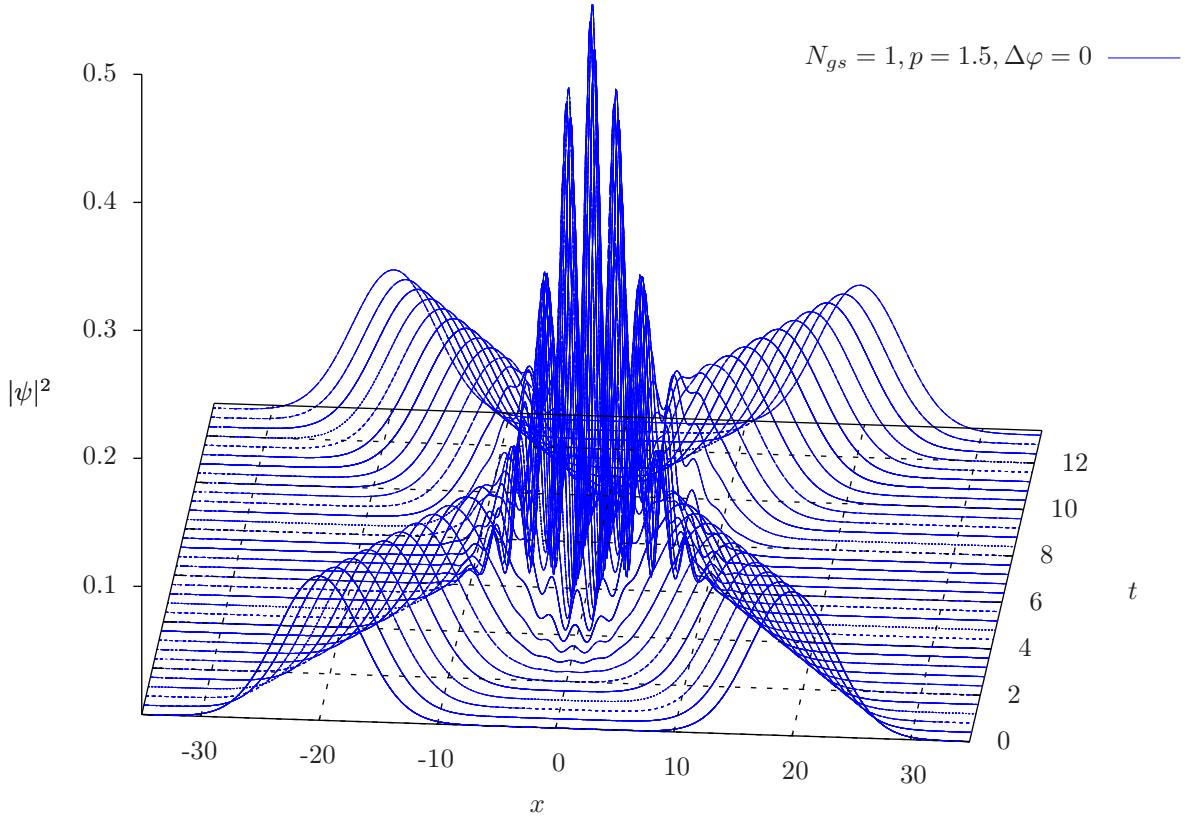


Abbildung 5.7: Sto β zweier Solitonen mit dem Impuls $p = 1,5$ und einer Phasendifferenz von $\Delta\varphi = 0$. Animation siehe [10].

Allerdings besitzen die Peaks f \ddot{u} r $x \leq 0$ eine gr \ddot{o} ßere Amplitude als die Peaks f \ddot{u} r $x \geq 0$ und es sind keine Symmetrien der Sto β e zu erkennen. Wiederum bleiben die Abbildungen 5.2, 5.3 sowie 5.4 in sehr guter N \ddot{a} herung invariant unter der \ddot{A} nderung der Phase.

Nachdem Sto β e f \ddot{u} r verschiedene Phasendifferenzen $\Delta\varphi$ bei dem gleichen Impuls p untersucht wurden, wird nun ein gr \ddot{o} ßerer Impuls gew \ddot{a} hlt. Im Folgenden betr \ddot{a} gt der Impuls der beiden Kondensate jeweils $p = 1,5$. Abbildung 5.7 zeigt den Sto β zweier Solitonen mit einer Phasendifferenz $\Delta\varphi = 0$. Durch die symmetrisch gew \ddot{a} hlte Gesamtwellenfunktion bildet sich im Ursprung, wie auch in Abbildung 5.1, ein globales Maximum aus und das Betragsquadrat der Gesamtwellenfunktion ist zu jedem Zeitpunkt symmetrisch. Allerdings zeigen sich durch den erh \ddot{o} hten Impuls eine gr \ddot{o} ßere Anzahl an Peaks im Betragsquadrat. Mit steigendem Impuls nimmt die Anzahl der Peaks zu. Ein \ddot{a} hnliches Verhalten zeigten die Real- und Imagin \ddot{a} rteile der Wellenfunktionen bei reinen

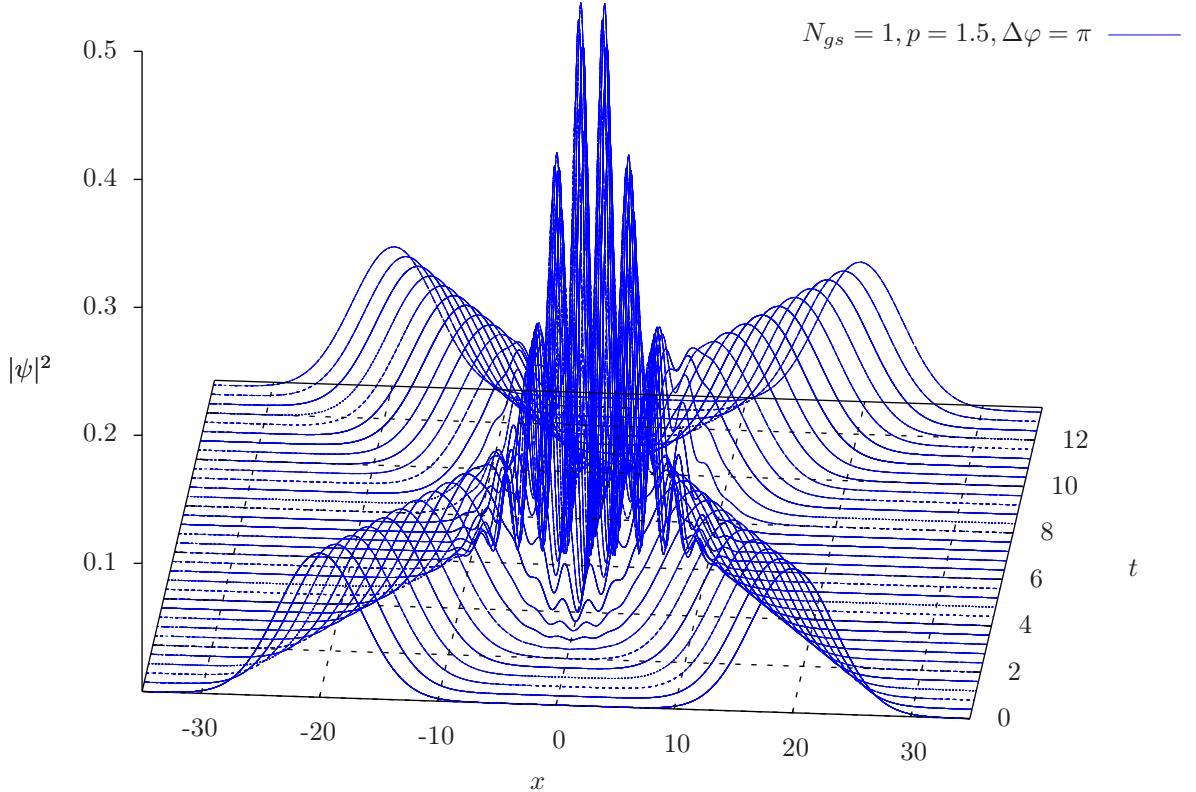


Abbildung 5.8: Stoß zweier Solitonen mit dem Impuls $p = 1,5$ und antisymmetrisch gewählter Gesamtwellenfunktion ($\Delta\varphi = \pi$). Animation siehe [10].

Translationen in Kapitel 4. Dort erhöhte sich die Anzahl der Oszillationen mit steigendem Impuls. Die beobachtete Zunahme der Geschwindigkeit der Solitonen während des Stoßes ist für größere Startimpulse p jedoch geringer. Durch den höheren Startimpuls vergeht weniger Zeit, bis sich die beiden Solitonen komplett überlagern. Folglich ist die Zeit, in der die attraktive Kontaktwechselwirkung die Solitonen aufeinander zu beschleunigen kann geringer, wodurch auch die Erhöhung des Impulses geringer ist.

Die antisymmetrische Wellenfunktion für den Fall $\Delta\varphi = \pi$ ist in Abbildung 5.8 zu sehen. Die Gesamtwellenfunktion behält auch für größere Impulse ihre Symmetrieeigenschaften. Wie in Abbildung 5.5 befindet sich auch in Abbildung 5.8 zu jedem Zeitpunkt im Ursprung ein Minima der Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte. Durch den erhöhten Impuls treten, wie im Fall der symmetrischen Gesamtwellenfunktion, eine größere Anzahl an Peaks auf.

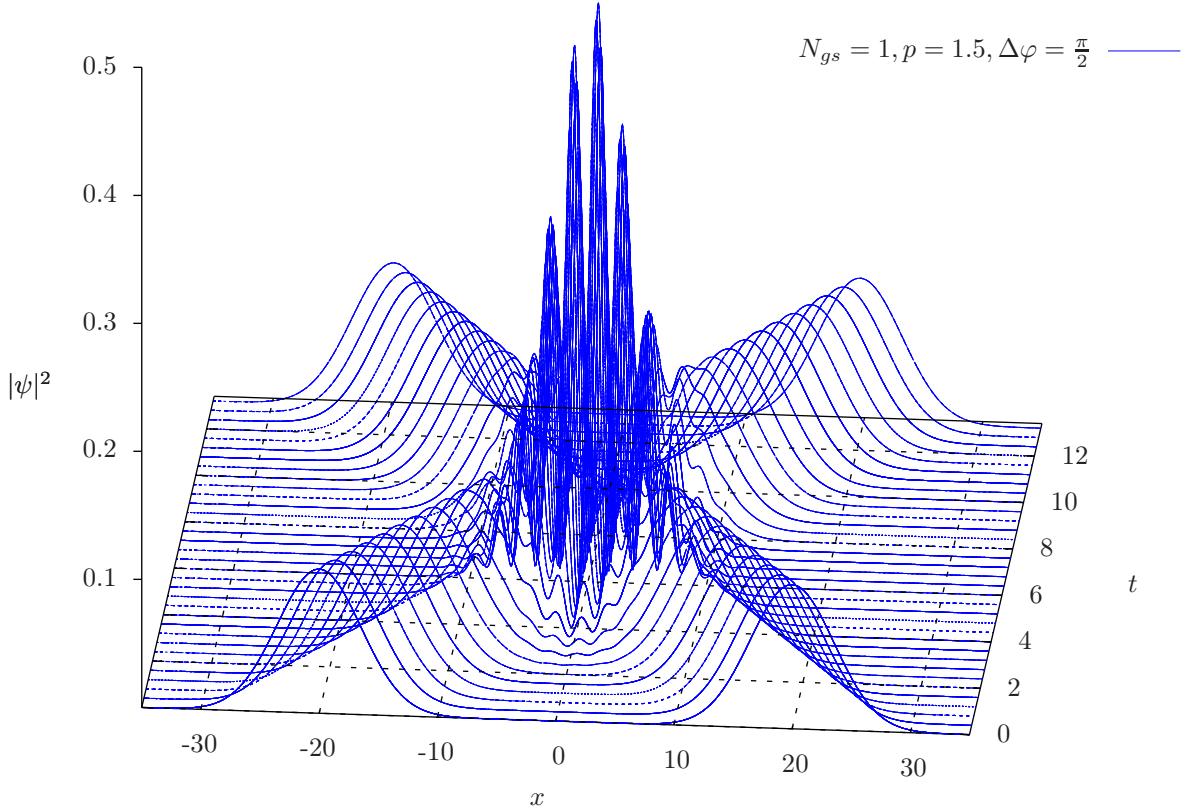


Abbildung 5.9: Stoß zweier Solitonen mit dem Impuls $p = 1,5$ sowie der Phasendifferenz $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2}$. Animation siehe [10].

In Abbildung 5.9 ist zudem der Stoß für den Fall $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2}$ dargestellt. Wie im Fall für $p = 1$ lassen sich auch für $p = 1,5$ keinerlei Symmetrien feststellen. Die Anzahl der Peaks ist, wie bei der symmetrischen Wellenfunktion in Abbildung 5.7 und der antisymmetrischen Wellenfunktion in Abbildung 5.8, erhöht.

Für höhere Geschwindigkeiten zeigt sich bei den Stößen kein qualitativ anderes Verhalten und die numerische Integration der Bewegungsgleichungen liefert keinerlei Anzeichen für Schwierigkeiten. Die Änderung der Phasendifferenz der Solitonen hat in sehr guter Näherung keine Auswirkung auf den Verlauf der Energien. Selbiges gilt für die Norm sowie für die Phasendifferenz der Solitonen. Die bisher betrachteten Impulse waren alle größer als der berechnete Ruheimpuls aus Gleichung (4.4). Werden allerdings sehr geringe Impulse gewählt, die unterhalb des Ruheimpulses liegen, zeigen sich Effekte, die in den bisherigen Abbildungen noch nicht beobachtet werden konnten.

Stöße mit geringer Geschwindigkeit

$$N_{gs} = 1, p = 0.05, \Delta\varphi = 0$$

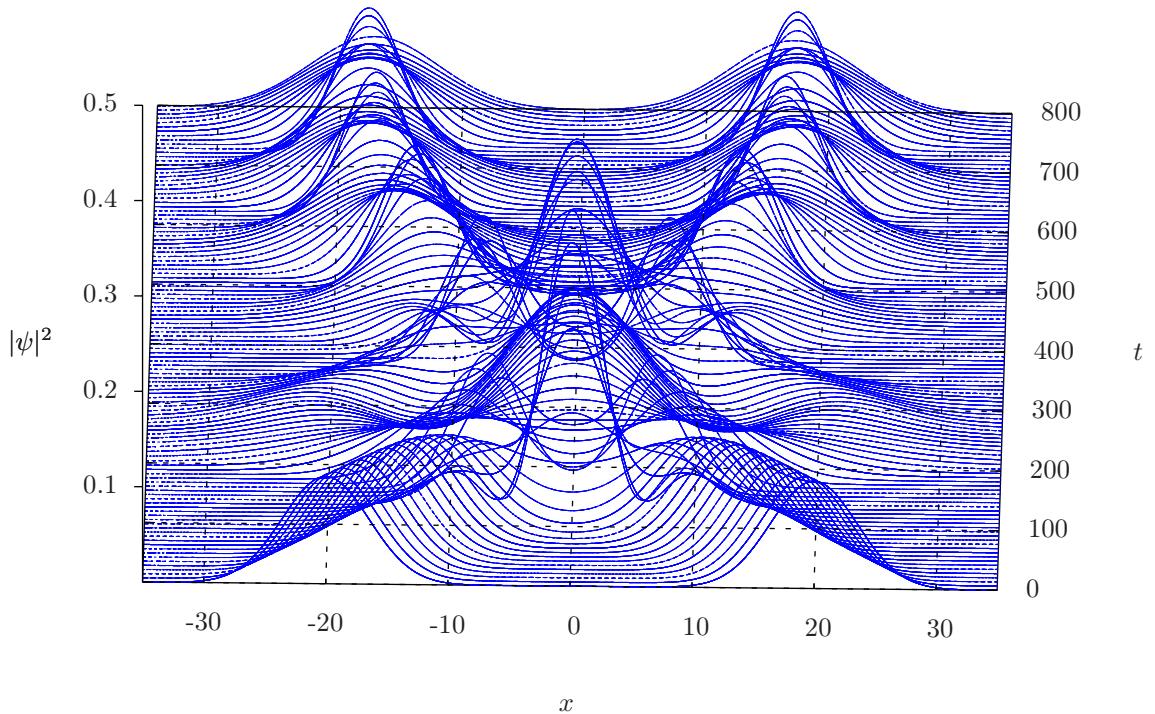


Abbildung 5.10: Betragsquadrat der Gesamtwellenfunktion ψ aufgetragen gegen die Zeit t und den Ort x bei einem Impuls $p = 0,05$ und einer Phasendifferenz von $\Delta\varphi = 0$. Animation siehe [10].

Im Folgenden wird als Impuls der Solitonen $p = 0,05$ gewählt. Der Impuls beträgt damit etwa ein Drittel des in Gleichung (4.4) berechneten Ruheimpulses und ist deutlich geringer als bei den bisherigen Betrachtungen. Das hat zur Folge, dass die Integrationszeit der Bewegungsgleichungen deutlich ansteigt. Wiederum werden Stöße für symmetrische, antisymmetrische und Gesamtwellenfunktionen ohne Symmetrieeigenschaften betrachtet.

In Abbildung 5.10 ist das Aufeinandertreffen zweier Solitonen mit Phasendifferenz $\Delta\varphi = 0$ dargestellt. Treffen zwei sehr langsame Solitonen der Phasendifferenz $\Delta\varphi = 0$ aufeinander, so bleiben die Solitonen aneinander haften. Bei einem Impuls $p = 0,05$ trennen sich die Solitonen kurze Zeit später wieder, sind dann jedoch nicht mehr formin-

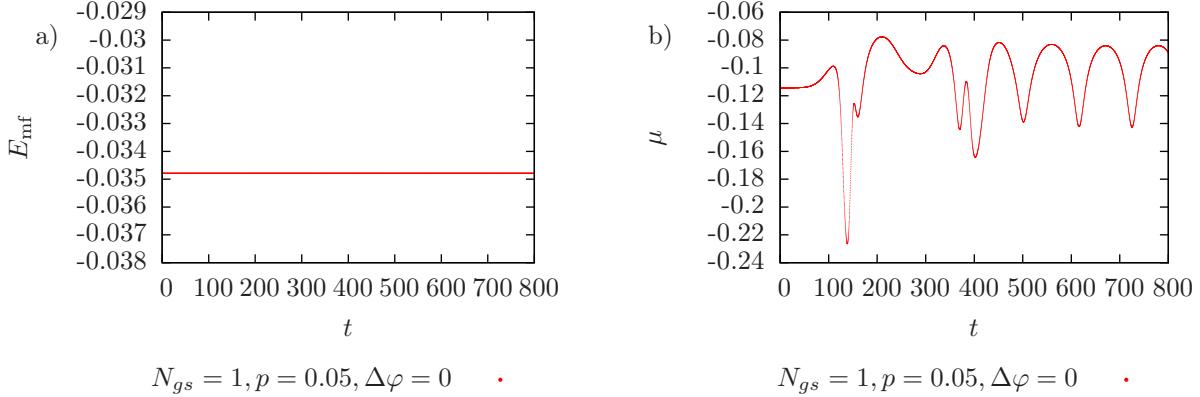


Abbildung 5.11: a) Mean-Field-Energie E_{mf} und b) chemisches Potential μ aufgetragen gegen die Zeit während eines Stoßes mit Impuls $p = 0,05$. Die Phasendifferenz zwischen den Solitonen beträgt $\Delta\varphi = 0$.

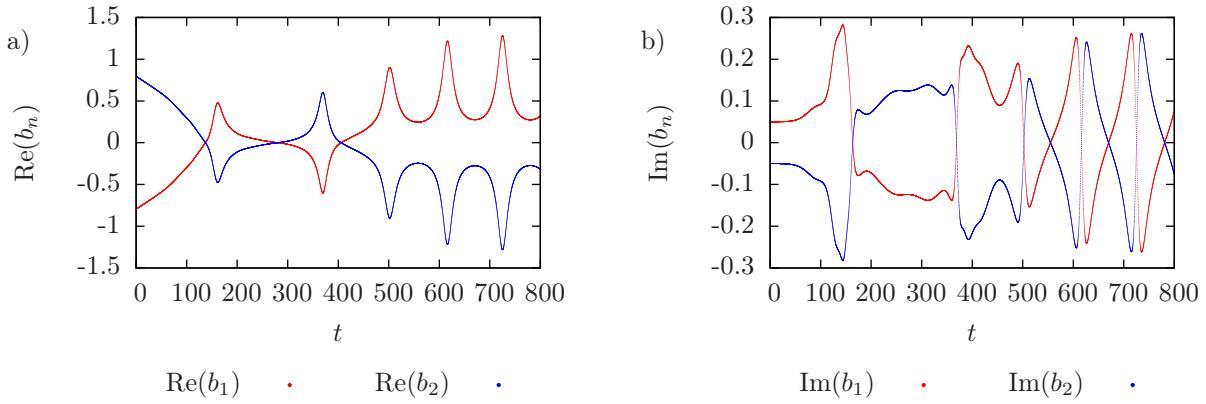


Abbildung 5.12: a) Realteil und b) Imaginärteil der Variationsparameter b_n aufgetragen gegen die Zeit. Der Impuls beträgt $p = 0,05$ während die Phase zu $\Delta\varphi = 0$ gewählt wurde.

variant. Die Solitonen führen nach dem Stoß Schwingungen aus. Die Symmetrie bleibt zu jedem Zeitpunkt erhalten. Die Mean-Field-Energie sowie das chemische Potential sind in Abbildung 5.11(a) und 5.11(b) dargestellt. Die Mean-Field-Energie E_{mf} ist trotz der hohen Integrationszeit erhalten. Das chemische Potential zeigt während des Stoßes allerdings kein systematisches Verhalten. Haben sich die Solitonen wieder voneinander getrennt, so führt das chemische Potential Oszillationen aus, die aus den Oszillationen der Wellenfunktion resultieren. Die Norm der Gesamtwellenfunktion ist ebenfalls erhalten. Erstaunlich ist dieses reguläre Verhalten, wenn statt der Wellenfunktion die Variationsparameter betrachtet werden. Bisher wurde auf deren Darstellung verzichtet.

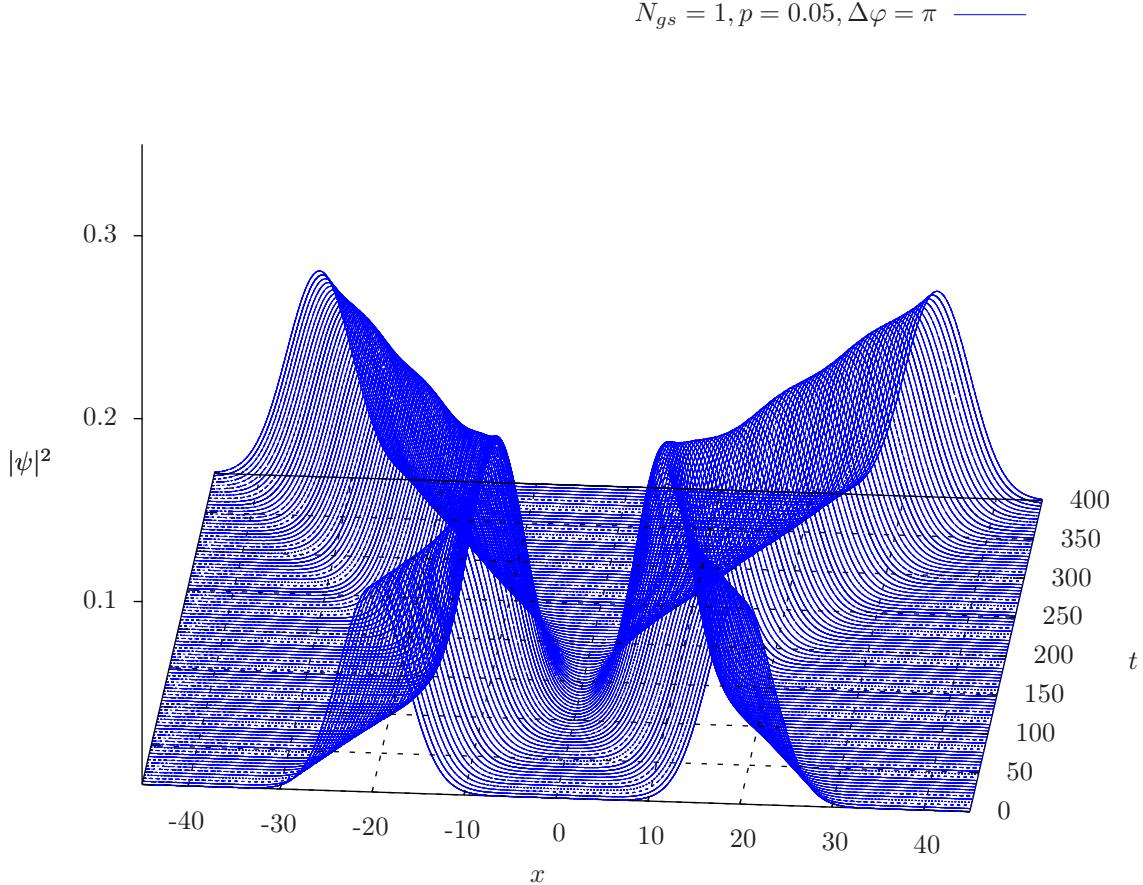


Abbildung 5.13: Stoß zweier Solitonen mit antisymmetrischer Gesamtwellenfunktion und einem Impuls $p = 0,05$. Animation siehe [10].

Um nun jedoch einen Eindruck über deren Dynamik zu gewinnen, ist der Realteil sowie der Imaginärteil der Größen b_n in Abbildung 5.12(a) bzw. 5.12(b) dargestellt. Aus den Abbildungen wird klar, warum bisher auf eine Darstellung der Variationsparameter verzichtet wurde. Sowohl der Realteil als auch der Imaginärteil der beiden Größen b_n führen symmetrische Oszillationen bezüglich der Geraden $\text{Re}(b_n) = 0$ bzw. $\text{Im}(b_n) = 0$ aus. Gerade der Verlauf der Imaginärteile ist allerdings recht unregelmäßig. Die Darstellung der Wellenfunktionen liefert weitaus anschaulichere Informationen über die Stöße und wird weiterhin der Darstellung der Variationsparameter vorgezogen.

Wird die Phasendifferenz zu $\Delta\varphi = \pi$ gewählt, so ändert sich das Verhalten nochmals stark. Der Stoß der antisymmetrischen Wellenfunktion ist in Abbildung 5.13 zu sehen. Die Solitonen scheinen sich abzustoßen. Norm und Mean-Field-Energie sind wiederum erhalten. In Abbildung 5.14 sind die Impulse der beiden Solitonen gegen die Zeit aufge-

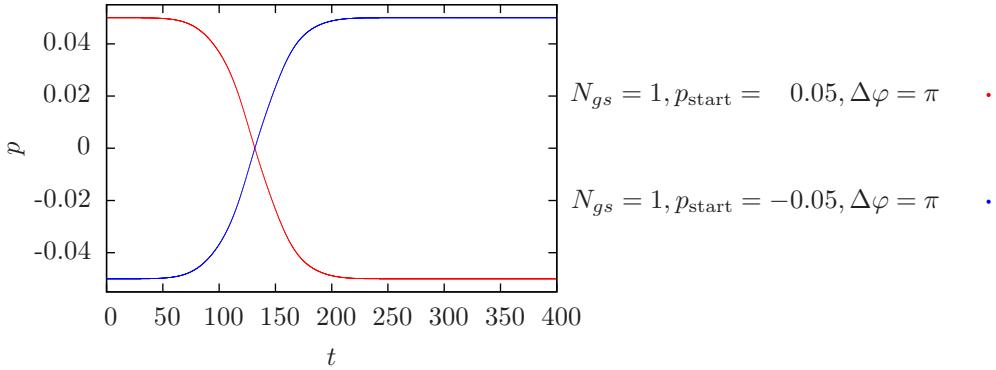


Abbildung 5.14: Impulse der beiden Solitonen während des Stoßes aufgetragen gegen die Zeit. Die Phasendifferenz der Solitonen beträgt $\Delta\varphi = \pi$.

tragen. Die Impulse der Solitonen tauschen während des Stoßes ihr Vorzeichen, bewegen sich aber mit dem gleichen Betrag weiter. Anders als bei hohen Geschwindigkeiten werden die Solitonen während des Stoßes abgebremst. Dieses Verhalten tritt in dieser Form nur bei einer Phasendifferenz von $\Delta\varphi = \pi$ auf und war in keinem weiteren hier behandelten Szenario zu beobachten. Die Erhaltung der Mean-Field-Energie sowie der Norm der Wellenfunktion spricht für eine sinnvolle numerische Integration der Bewegungsgleichungen.

Wird hingegen der Fall $\Delta\varphi = \frac{\pi}{8}$ betrachtet kommt es zu erheblichen Schwierigkeiten. Abbildung 5.15 zeigt den Stoß zweier Solitonen mit dem Impuls $p = 0,05$ und Phasendifferenz $\Delta\varphi = \frac{\pi}{8}$. Die Solitonen treffen aufeinander, jedoch zerfließen die Gaußfunktionen, was für ein Versagen der Numerik spricht. Für das Versagen spricht zudem, dass sowohl Mean-Field-Energie als auch Norm der Gesamtwellenfunktion ab $t \approx 135$ schlagartig nicht mehr erhalten sind, wie in Abbildung 5.16(a) und 5.16(b) zu sehen ist. Zu diesem Zeitpunkt kommt es sowohl bei der Mean-Field-Energie als auch bei der Norm der Wellenfunktion zu einem sprunghaften Anstieg. Die Integration wurde sowohl für die Bewegungsgleichungen aus Abschnitt 2.2.1 als auch für die umgeschriebenen Bewegungsgleichungen aus Abschnitt 2.2.2 durchgeführt. Zur Intergration wurde zum einen ein klassisches Runge-Kutta-Verfahren und zum anderen ein Integrator mit adaptiver Schrittweise genutzt. Die Integration führte jedoch immer auf das gleiche Ergebnis.

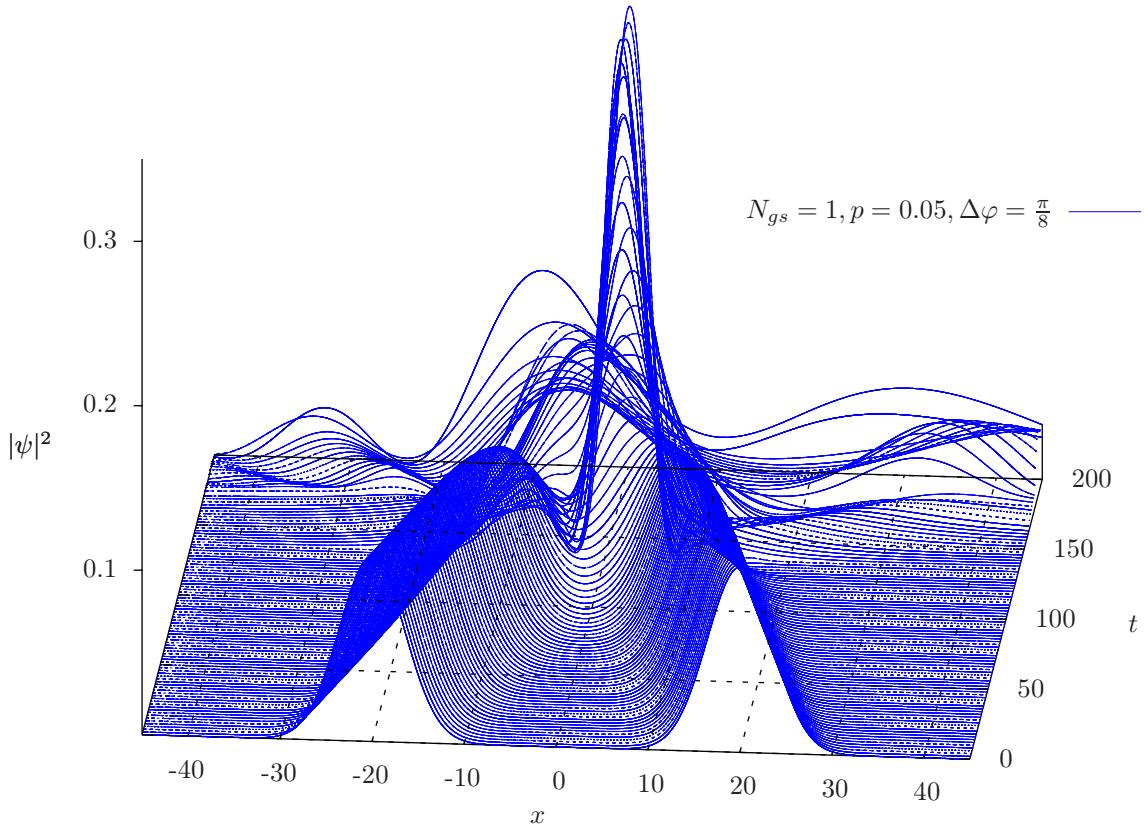


Abbildung 5.15: Betragsquadrat $|\psi|^2$ der Gesamtwellenfunktion für den Impuls $p = 0, 05$ und der Phasendifferenz $\Delta\varphi = \frac{\pi}{8}$. Animation siehe [10].

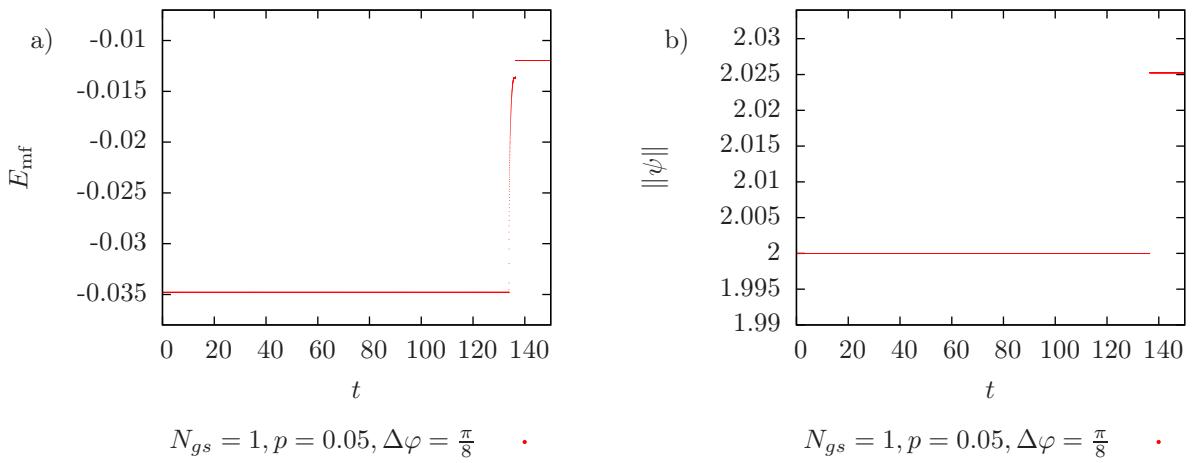


Abbildung 5.16: a) Mean-Field-Energie E_{mf} und b) Norm $\|\psi\|$ während eines Stoßes mit Impuls $p = 0, 05$ und Phasendifferenz $\Delta\varphi = \frac{\pi}{8}$.

5.1.4 Mehrere Gaußfunktionen pro Soliton

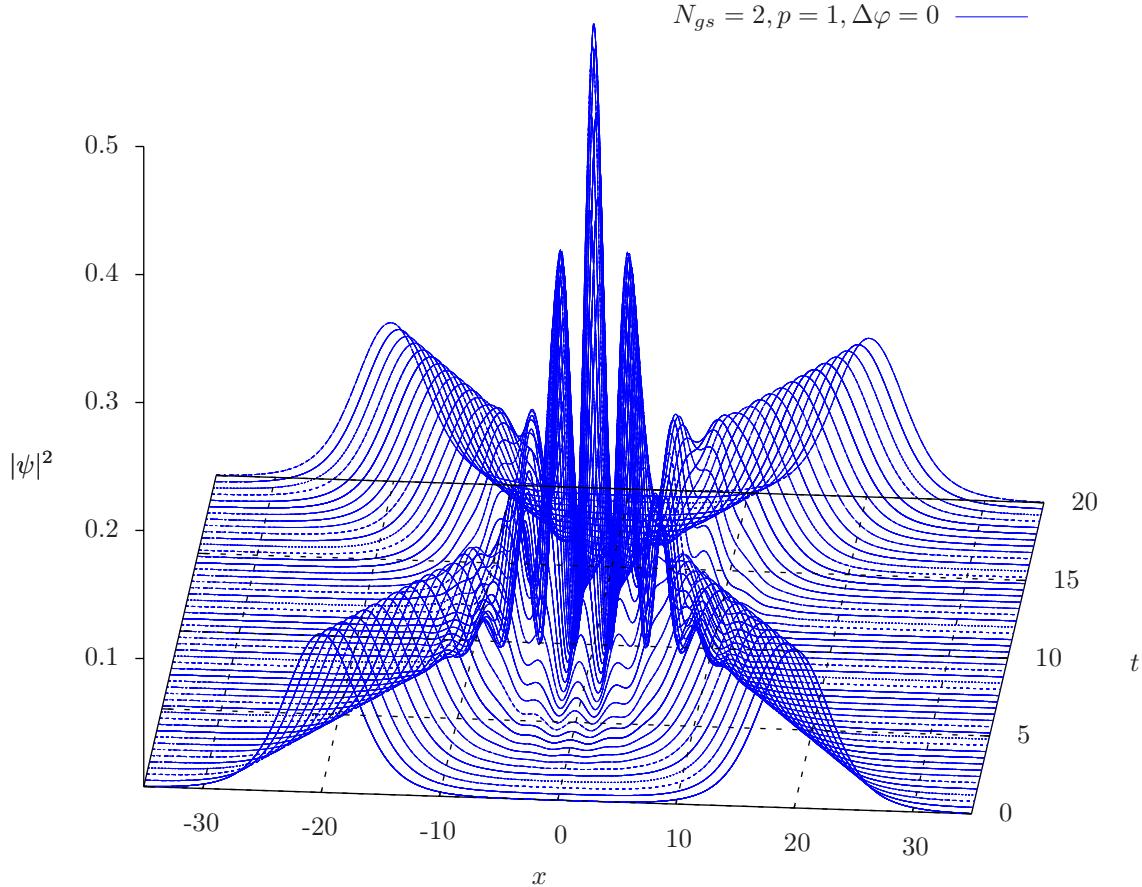


Abbildung 5.17: Betragsquadrat der Gesamtwellenfunktion ψ während eines Stoßes zwischen zwei Solitonen. Die Anzahl der Gaußfunktionen beträgt $N_{gs} = 2$. Der Impuls wurde zu $p = 1$ und die Phasendifferenz zu $\Delta\varphi = 0$ gewählt. Animation siehe [10].

In Abschnitt 3 wurde deutlich, dass Solitonen, die aus mehreren Gaußfunktionen bestehen, die stationäre analytische Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung deutlich genauer approximieren, als Ansätze mit nur einer Gaußfunktion. Wie sich die Anzahl der Gaußfunktionen pro Soliton auf die Stöße auswirkt, soll im Folgenden betrachtet werden.

In Abbildung 5.17 ist der Stoß zweier Solitonen mit dem Impuls $p = 1$ und der Phasendifferenz $\Delta\varphi = 0$ zu sehen. Anders als in Abbildung 5.1 ist in Abbildung 5.17 die Anzahl der Gaußfunktionen pro Soliton von $N_{gs} = 1$ auf $N_{gs} = 2$ erhöht. Die Erhöhung der Anzahl der Gaußfunktionen pro Soliton ändert zwar die Form der Solitonen, während des Stoßes tritt jedoch kein qualitativ anderes Verhalten auf. Auf die Darstellung

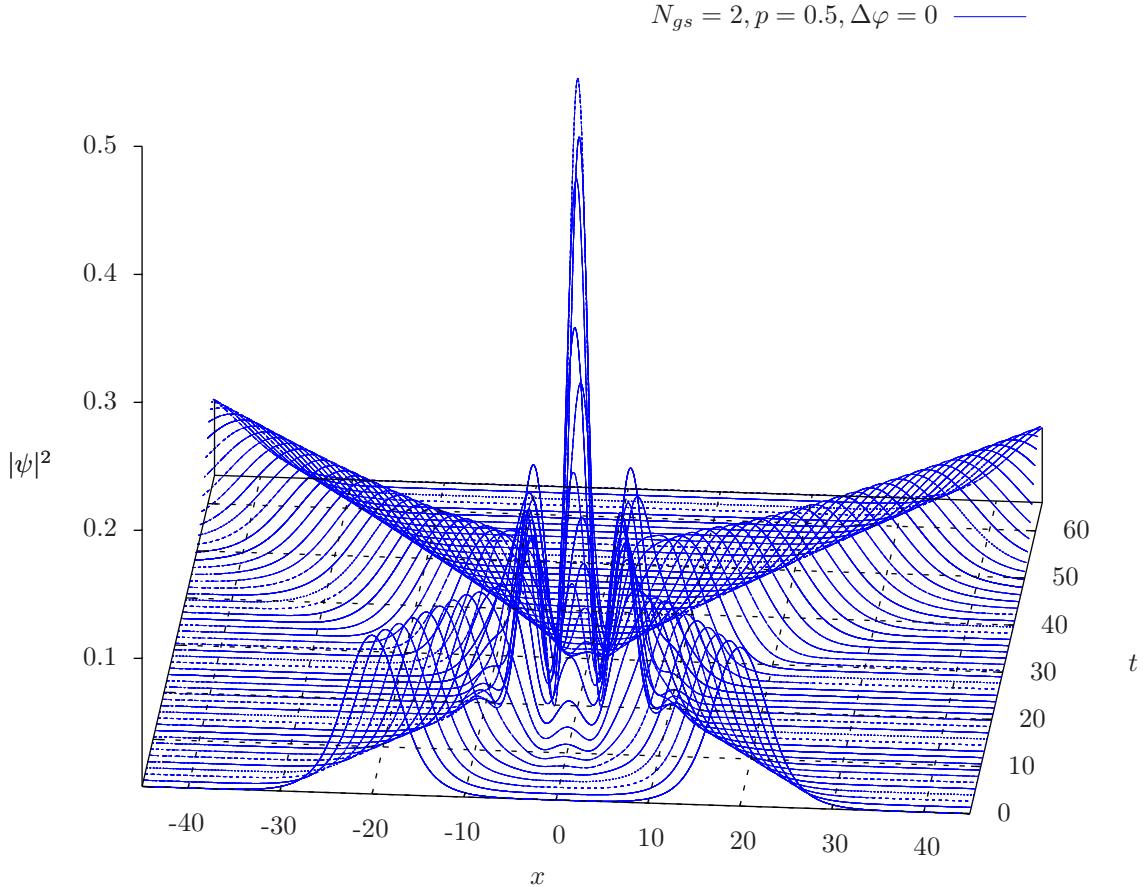


Abbildung 5.18: Stoß zweier Solitonen mit $N_{gs} = 2$ sowie Impuls $p = 0,5$ und symmetrischer Gesamtwellenfunktion. Animation siehe [10].

des Stoßes mit antisymmetrischer und Gesamtwellenfunktion ohne weitere Symmetrieeigenschaften wird deshalb verzichtet. Die Symmetrie der Gesamtwellenfunktion sowie deren Norm und Mean-Field-Energie bleiben beim Stoß erhalten. Die Solitonen werden beim Annähern aufeinander zu beschleunigt und abgebremst, wenn sie sich voneinander entfernen. Wie auch im Fall einer Gaußfunktion pro Soliton nimmt die Zahl der Peaks durch die Erhöhung des Impulses zu. Die Erhöhung des Impulses stellt wiederum für die numerische Integration der Bewegungsgleichungen keinerlei Schwierigkeiten dar. Die numerischen Schwierigkeiten bei langsamem Stoßen werden jedoch verschärft. Durch die Wahl zweier Gaußfunktionen pro Soliton kommt es schon bei einem Impuls von $p = 0,5$ zu erheblichen Schwierigkeiten bei der Integration der Bewegungsgleichungen. Für den Fall $p = 0,5$ ist der Stoß in Abbildung 5.18 dargestellt. Die Symmetrie der Wellenfunktion bleibt zwar erhalten, allerdings gilt dies numerisch nicht mehr für die Erhaltungs-

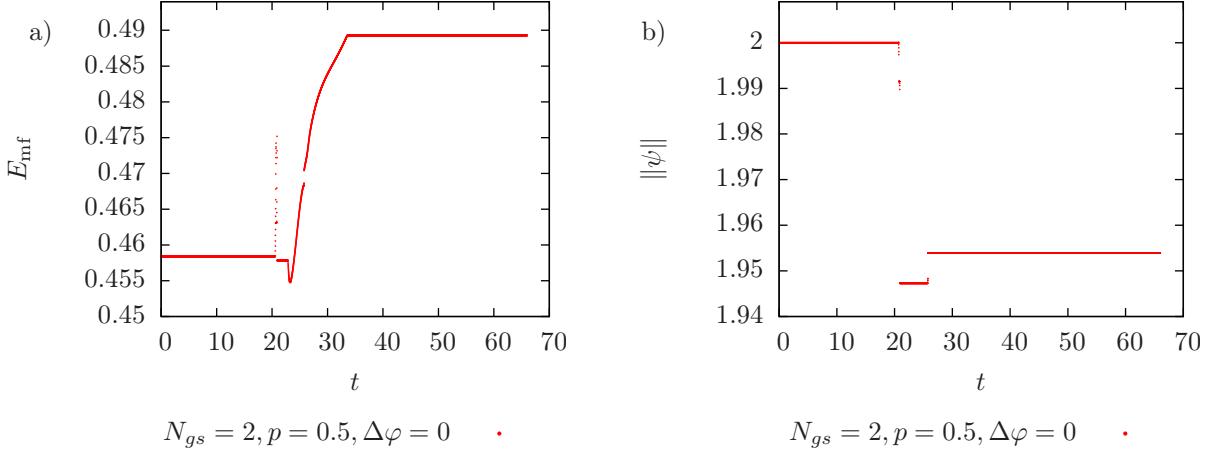


Abbildung 5.19: a) Mean-Field-Energie E_{mf} und b) Norm $\|\psi\|$ der Wellenfunktion während des Stoßes zweier Solitonen mit $N_{gs} = 2$ Gaußfunktionen pro Soliton und einem Impuls $p = 1$. Die Phasendifferenz beträgt $\Delta\varphi = 0$.

größen des Systems. Die Mean-Field-Energie als auch die Norm der Wellenfunktion sind in Abbildung 5.19(a) und 5.19(b) gegen die Zeit aufgetragen. Wie auch bei einer Gaußfunktion pro Soliton kommt es zu einer sprunghaften Änderung der Mean-Field-Energie und der Norm der Gesamtwellenfunktion ψ . Dieses Verhalten tritt allerdings schon bei deutlich größeren Impulsen auf. Wird die Anzahl der Gaußfunktionen auf $N_{gs} = 4$ erhöht, so kommt es sogar schon bei $p = 1$ zu numerischen Schwankungen der Norm sowie der Mean-Field-Energie.

Der Stoß für $N_{gs} = 4$ und $p = 1$ mit symmetrischer Gesamtwellenfunktion ist in Abbildung 5.20 dargestellt und ähnelt stark dem aus Abbildung 5.1. Die Mean-Field-Energie und die Norm sind in Abbildung 5.21(a) bzw. 5.21(b) dargestellt. Beide ändern sich während des Stoßes. Durch geringere Schrittweiten des klassischen Runge-Kutta-Verfahrens und durch geringere Fehlertoleranzen bei der Integration mit adaptiver Schrittweite konnte dieses Verhalten nur gering beeinflusst werden.

Die Erhöhung der Anzahl der Gaußfunktionen pro Soliton stellt eine Herausforderung an die numerische Integration der Bewegungsgleichungen dar. So kommt es bei der Erhöhung der Anzahl N_{gs} der Gaußfunktionen schon bei immer größeren Impulsen p zu Schwierigkeiten bei der Integration. Durch die geringen Impulse werden die Integrationszeiten der Bewegungsgleichungen recht hoch, was mit einer Erklärung für die auftretenden Probleme sein kann. Bei einer Gaußfunktion konnten die Breitenparameter a_n sowie Amplitudenparameter c_n analytisch berechnet werden, was wiederum die Stabilität der Integration der Stöße aus einer Gaußfunktion pro Soliton erhöhen kann. Sehr hohe Impulse stellen hingegen für die numerische Integration kein Problem dar, auch wenn Ansätze aus mehreren Gaußfunktionen pro Soliton betrachtet werden.

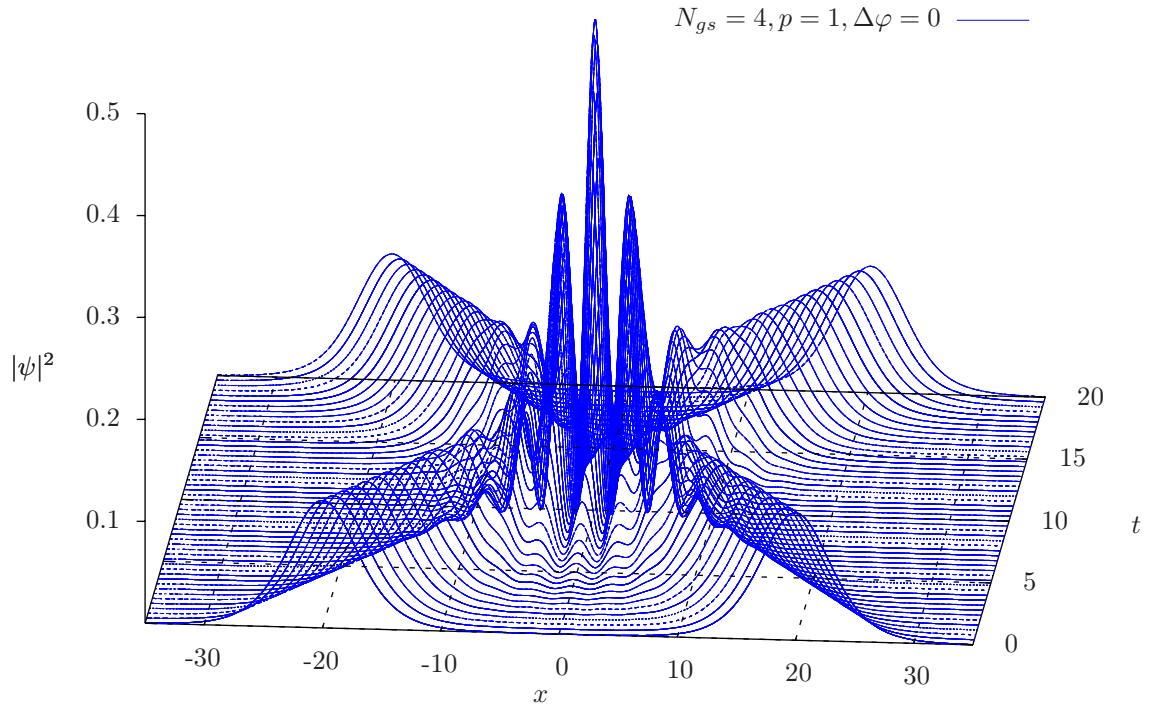


Abbildung 5.20: Betragsquadrat der Gesamtwellenfunktion ψ während des Stoßes zweier Solitonen aus $N_{gs} = 4$ Gaußfunktionen, einem Impuls von $p = 1$ und symmetrischer Gesamtwellenfunktion. Animation siehe [10].

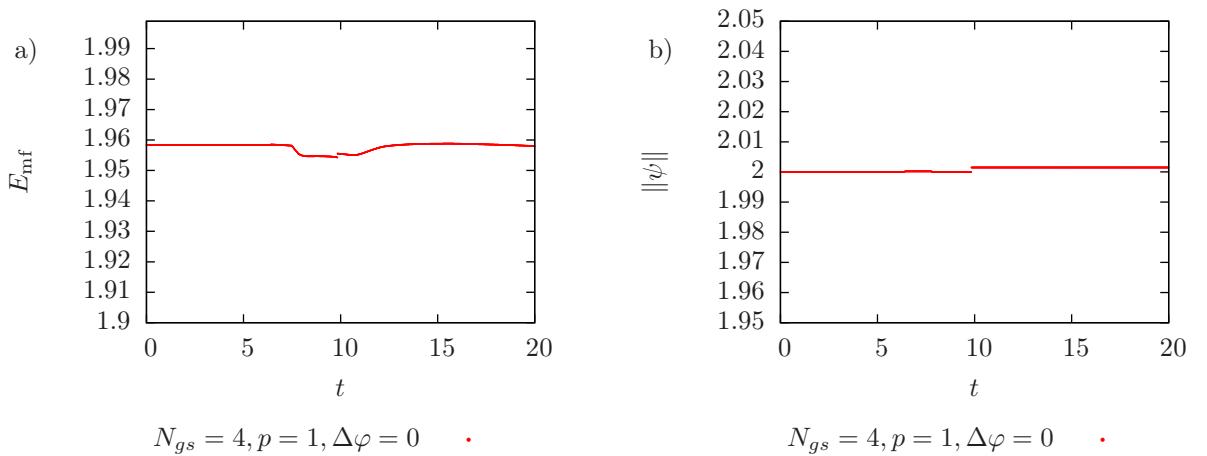


Abbildung 5.21: Mean-Field Energie E_{mf} sowie Norm der Gesamtwellenfunktion aufgetragen gegen die Zeit, während eines Stoßes zweier Solitonen aus $N_{gs} = 4$ Gaußfunktionen pro Soliton und einem Impuls $p = 1$.

5.2 Stöße mehrerer Solitonen

In Abschnitt 5.1 beschränkten sich die Betrachtungen auf Stöße zwischen zwei Solitonen. Auf Systeme mit mehr als zwei Solitonen soll im Folgenden eingegangen werden. Die Beschränkung auf eine Gaußfunktion pro Soliton grenzt die numerischen Schwierigkeiten ein. Die Anzahl der möglichen Szenarien ist beliebig groß. Es wird beispielhaft auf zwei interessante Fälle eingegangen.

5.2.1 Stöße zwischen drei Solitonen

Werden drei Solitonen betrachtet, so können Stöße realisiert werden, bei denen zwei Solitonen gleichzeitig auf ein weiteres Soliton treffen. Es wird angenommen, dass sich zwei der Solitonen mit dem betragsmäßig selben Impuls $\pm p$ auf den Ursprung zu bewegen und zu jedem Zeitpunkt den gleichen Abstand x_0 zum Ursprung besitzen. Das dritte Soliton ist im Ursprung zentriert und ruht. Das so gewählte Koordinatensystem entspricht dem Schwerpunktsystem der drei Solitonen. Mit den Breitenparametern a und Amplitudenparametern c' aus Abschnitt 3.1

$$a = \frac{1}{16\pi} \quad \text{sowie} \quad c' = \ln \left(\sqrt{\frac{1}{\sqrt{8}\pi}} \right) = -\frac{1}{2} \ln(\sqrt{8}\pi)$$

lässt sich die Wellenfunktion als

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{8}\pi}} \left(\underbrace{e^{-\frac{(x+x_0)^2}{16\pi} + ip(x+x_0) + i\varphi_1}}_{\propto \psi_1} + \underbrace{e^{-\frac{x^2}{16\pi} + i\varphi_2}}_{\propto \psi_2} + \underbrace{e^{-\frac{(x-x_0)^2}{16\pi} - ip(x-x_0) + i\varphi_3}}_{\propto \psi_3} \right) \quad (5.21)$$

schreiben. φ_1 , φ_2 und φ_3 bezeichnen dabei die Phase der jeweiligen Wellenfunktion ψ_1 , ψ_2 und ψ_3 . Die beiden bewegten Solitonen besitzen den gleichen Impuls, wodurch sich ihre Phase nach Gleichung (4.30) gleich schnell ändert. Die bewegten Solitonen besitzen folglich eine konstante Phasenbeziehung, die zu Beginn festgelegt werden kann. Die Phasenänderung des ruhenden Solitons unterscheidet sich von der Phasenänderung der bewegten Solitonen. Durch die Zentrierung des ruhenden Solitons im Ursprung, ist dessen Wellenfunktion symmetrisch, unabhängig von der Phase φ_2

$$\psi_2(x) = \psi_2(-x). \quad (5.22)$$

Wird die Phasendifferenz $\Delta\varphi$ der beiden bewegten Solitonen zu $\Delta\varphi = 0$ gewählt, so ist die Gesamtwellenfunktion ebenso symmetrisch. Im Folgenden werden als Startbedingung die Phasen φ_1 , φ_2 und φ_3 Null gesetzt. Die Wellenfunktion lautet so zu Beginn

$$\psi = \sqrt{\frac{1}{\sqrt{8}\pi}} \left(e^{-\frac{(x+x_0)^2}{16\pi} + ip(x+x_0)} + e^{-\frac{x^2}{16\pi}} + e^{-\frac{(x-x_0)^2}{16\pi} - ip(x-x_0)} \right). \quad (5.23)$$

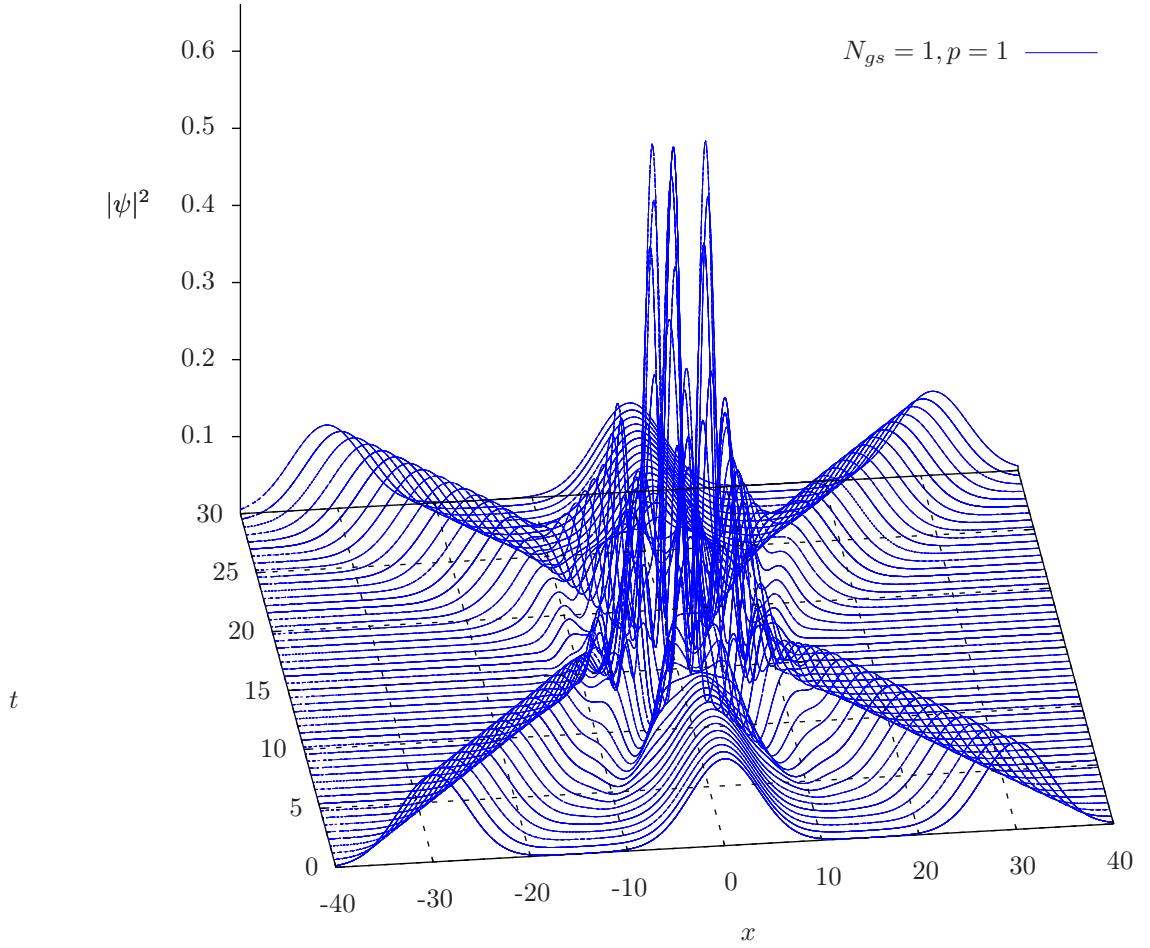


Abbildung 5.22: Stoß dreier Solitonen mit symmetrisch gewählter Gesamtwellenfunktion. Die beiden bewegten Solitonen besitzen den Impuls $p = 1$ bzw. $p = -1$. Animation siehe [10].

Der Abstand der bewegten Solitonen zum Ursprung wird am Anfang als $x_0 = 30$ gewählt, damit der Überlapp der Wellenfunktionen zu vernachlässigen ist.

Der Stoß der symmetrischen Wellenfunktion ist in Abbildung 5.22 dargestellt, wobei die bewegten Solitonen einen Impuls von $p = \pm 1$ besitzen. Die Solitonen überlagern sich wie beim Stoß zweier Solitonen und bilden ein Interferenzmuster aus. Die Symmetrie bleibt während des gesamten Stoßes erhalten. Das Verhalten während des Stoßes ist in Abbildung 5.22 nur schwer zu erkennen, findet sich aber als Animation wieder [10]. Nach dem Stoß befindet sich, wie vor dem Stoß, ein ruhendes Soliton im Ursprung. Die beiden weiteren Solitonen bewegen sich mit dem gleichen Impuls wie zuvor und scheinen einander zu durchdringen. Norm und Mean-Field-Energie sind während des gesamten Stoßes erhalten.

5.2.2 Stöße zwischen vier Solitonen

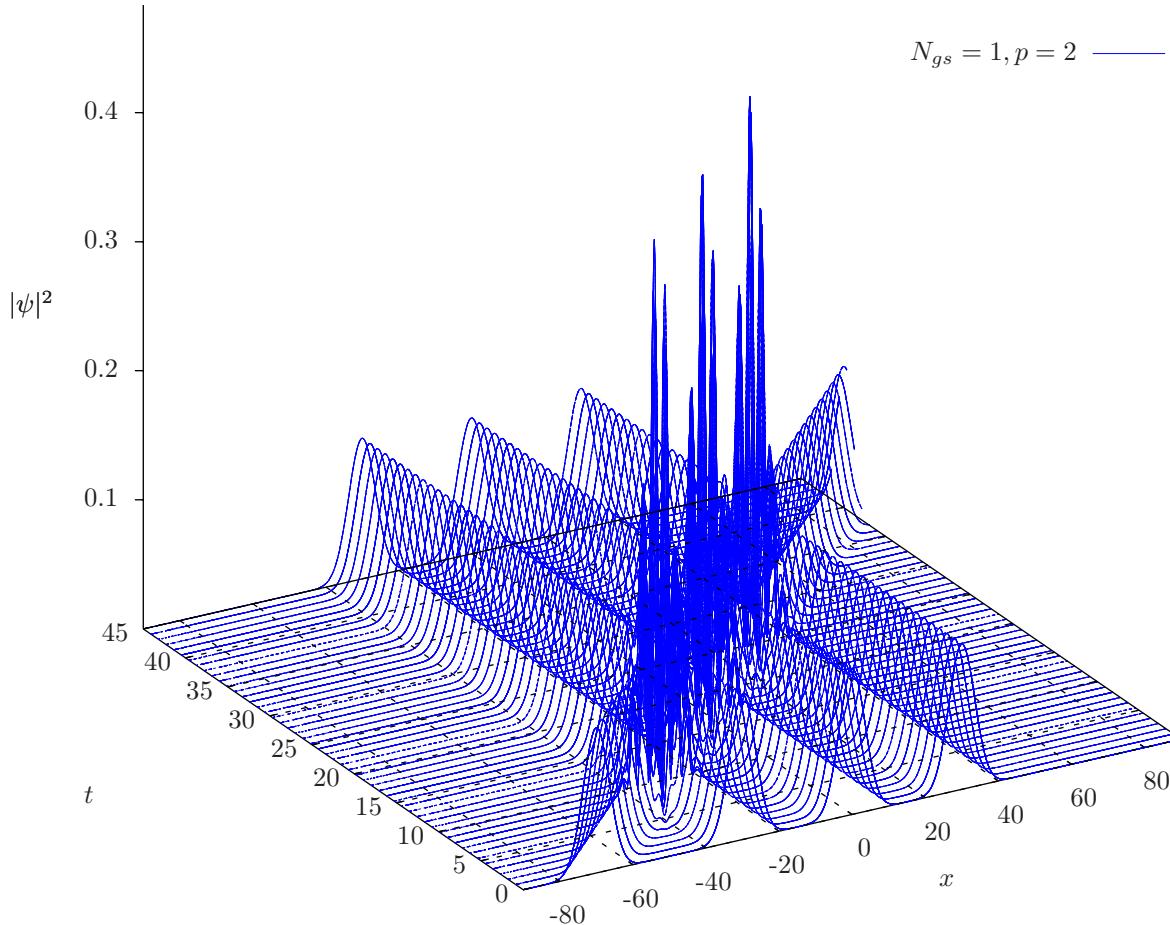


Abbildung 5.23: Aufeinanderfolgende Stöße von Solitonen. Der Impuls des bewegten Solitons wurde zu $p = 2$ gewählt. Animation siehe [10].

Als letztes wird ein System aus vier Solitonen betrachtet, bei dem ein Soliton nacheinander mit den anderen Solitonen stößt. Anders als beim Stoß dreier Solitonen geht es dabei nicht darum, die Überlagerung mehrerer Solitonen zu untersuchen, sondern wie gut sich mehrere Stöße hintereinander beschreiben lassen. Der Impuls von drei der vier Solitonen wird gleich gewählt, während das letzte Soliton nacheinander mit den Anderen stößt. Die Festlegung dreier gleich schneller Solitonen verhindert, dass eine Gesamtwellenfunktion mit zusätzlichen Symmetrieeigenschaften festgelegt werden kann. Es wird deshalb auf die Wahl des Schwerpunktsystems verzichtet und die Solitonen so angeordnet, dass sich die Stöße gut beobachten lassen. Dazu wird das Ruhesystem der drei Solitonen gewählt. Die Änderung der Phase ist für die drei ruhenden Solitonen gleich groß, unterscheidet sich aber von der Phasenänderung des bewegten Solitons. Die ruhenden Solitonen werden

5 Stöße zwischen Solitonen

bei $x = -30$, $x = 0$ und $x = 30$ zentriert, wodurch der Überlapp der Wellenfunktionen zu vernachlässigen ist. Der Impuls des bewegten Solitons beträgt $p = 2$ und das Soliton ist am Anfang bei $x = -70$ zentriert. Die Phasen aller Solitonen werden zu Beginn Null gesetzt. Die Stöße sind in Abbildung 5.23 zu sehen. Die Solitonen interferieren während des Stoßes, befinden sich nach den Stößen allerdings wieder im selben Bewegungszustand wie zuvor. Obwohl das bewegte Soliton teilweise mit zwei Solitonen überlappt, verlaufen die einzelnen Stöße wie die Stöße aus Kapitel 5.1. Das bewegte Soliton durchdringt die ruhenden Solitonen, wobei die einzelnen Stöße unterschiedlich verlaufen. Grund dafür ist die unterschiedlich schnell oszillierende Phase der Wellenfunktionen. Die Phasenbeziehung zwischen dem bewegten Soliton und den einzelnen ruhenden Solitonen ist bei allen drei Stößen unterschiedlich, wodurch sich das Interferenzmuster der Stöße unterscheidet.

Sind die Geschwindigkeiten der Soltionen bei den Stößen hinreichend groß, so zeigt sich bei allen behandelten Szenarien, sowohl bei einer Gaußfunktion pro Soliton als auch bei mehreren Gaußfunktionen pro Soliton, eine Erhaltung der Struktur der Solitonen vor und nach dem Stoß. Ebenso ist die Anzahl der Solitonen vor und nach dem Stoß erhalten. Dieses Verhalten wäre auch klassisch zu erwarten. Die Betragsquadrate der Wellenfunktionen können als Teilchendichten interpretiert werden. Treffen die Wellenfunktionen aufeinander, so stoßen klassisch die einzelnen Teilchen der Solitonen miteinander. Für all diese Stöße muss der klassische Impuls- und Energiesatz erfüllt sein, sodass sich die Solitonen selbst wie klassische Teilchen verhalten. Für geringe Impulse verglichen mit dem Ruheimpuls der Solitonen aus Gleichung (4.4) spielen quantenmechanische Effekte eine immer größer werdende Rolle und es kommt, wie in Abbildung 5.10 erkennbar, zu Abweichungen von der klassischen Stoßdynamik.

6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Dynamik von Bose-Einstein Kondensaten untersucht. Die Bewegung der Teilchen beschränkte sich dabei auf eine Raumrichtung, sodass die Dynamik eindimensional behandelt wurde. Zwischen den Teilchen besteht eine attraktive Kontaktwechselwirkung. In verdünnten Gasen kann durch eine Mean-Field-Näherung die eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung aufgestellt werden, die das System beschreibt. Anders als die Schrödinger-Gleichung ist die Gross-Pitaevskii-Gleichung allerdings nicht linear. Die Stärke der Kontaktwechselwirkung geht dabei durch die Kopplungskonstante g vor dem nichtlinearen Term ein. Eine genauere Betrachtung der Einheiten offenbart allerdings, dass die Kopplungskonstante g kein freier Parameter für spätere Untersuchungen ist, sondern durch die Wahl der Einheiten beeinflusst werden kann. Eine Änderung von g entspricht so nur einer Skalierung der Längeneinheit. Analytische Lösungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung sind bekannt, beschränken sich jedoch auf stationäre Lösungen, die als helle Solitonen bezeichnet werden. Die stationären Lösungen können durch einen Ansatz aus Gaußfunktionen approximiert werden. Mit Hilfe des Variationsprinzips nach McLachlan können für diesen Ansatz Bewegungsgleichungen für die Variationsparameter aufgestellt werden, die die Dynamik der Solitonen beschreiben.

Für die Untersuchung der Dynamik müssen zuerst Fixpunkte der Bewegungsgleichungen gefunden werden. Für den Fall, dass die hellen Solitonen nur durch eine Gaußfunktion beschrieben werden, können die Fixpunkte analytisch berechnet werden. Wird zur Beschreibung der hellen Solitonen allerdings mehr als eine Gaußfunktion herangezogen, so erfolgt die Fixpunktssuche numerisch. Werden die gefundenen Fixpunkte über die Anzahl der verwendeten Gaußfunktionen aufgetragen, so zeigt sich ein Muster, welches die weitere Fixpunktssuche vereinfacht. Die Fixpunkte wurden für Ansätze aus bis zu sechs Gaußfunktionen pro Soliton bestimmt. Ein Vergleich des Ansatzes mit den hellen Solitonen zeigt allerdings schon bei vier Gaußfunktionen pro Soliton eine sehr präzise Approximation.

Sind die Fixpunkte der Bewegungsgleichungen bekannt, so kann den Solitonen durch geeignete Wahl der Variationsparameter eine Geschwindigkeit zugeordnet werden. Die Oszillation der Phase der Wellenfunktionen wird durch die Geschwindigkeit beeinflusst. Solitonen unterschiedlicher Geschwindigkeit besitzen somit keine feste Phasenbeziehung. Durch die Erhöhung der Geschwindigkeit zeigen Real- sowie Imaginärteil der Wellenfunktionen zunehmend Oszillationen. Die Erhöhung der Anzahl der Gaußfunktionen pro Soliton wirkt sich auf die Form der Solitonen sowie deren Energie aus, es wird allerdings kein qualitativ anderes Verhalten beobachtet.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Für die Untersuchung von Stößen müssen mehrere Solitonen durch eine Wellenfunktion beschrieben werden. Formal geschieht dies, indem die Gaußfunktionen des Ansatzes unterschiedliche Solitonen beschreiben, die jeweils für sich normiert sind. Bei Stößen zwischen zwei Solitonen kann als Koordinatensystem das Schwerpunktsystem gewählt werden, indem sich beide Solitonen betragsmäßig gleich schnell bewegen und somit eine konstante Phasenbeziehung zwischen ihnen besteht. Durch die Festlegung dieser Phasenbeziehung kann die Gesamtwellenfunktion unter anderem symmetrisch als auch antisymmetrisch gewählt werden. Für hinreichend große Stoßgeschwindigkeiten treten bei den Stößen keinerlei numerische Schwierigkeiten auf. Die Solitonen überlagern sich und bilden Interferenzmuster aus. Die Stoßgeschwindigkeit beeinflusst dabei die Anzahl der Interferenzpeaks. Während des Stoßes bleiben die Symmetrieeigenschaften der Wellenfunktion erhalten. Besitzt die Wellenfunktion keine weiteren Symmetrieeigenschaften, so verlaufen auch die Stöße asymmetrisch. Bei langsamem Stößen wird bei einer Gaußfunktion pro Soliton ein weiterer Effekt beobachtet. Die Solitonen haften aneinander, können sich nach kurzer Zeit aber auch wieder, abhängig von der Stoßgeschwindigkeit, voneinander trennen. Nachdem sich die Solitonen voneinander getrennt haben schwingen die Solitonen und sind nicht wie vor dem Stoß forminvariant. Dieses Phänomen kann bei Ansätzen aus mehreren Gaußfunktionen jedoch nicht beobachtet werden, da es zu numerischen Schwierigkeiten kommt. Durch die steigende Anzahl an Gaußfunktionen wird die Stoßgeschwindigkeit, bei der es zu numerischen Schwierigkeiten kommt immer größer. Die Stoßgeschwindigkeit, bei der die Solitonen aneinander haften konnte schon bei zwei Gaußfunktionen pro Soliton nicht mehr untersucht werden. Stöße zwischen mehreren Solitonen konnten ebenfalls simuliert werden. Die Anzahl der möglichen Stoßszenarien ist dabei beliebig groß und es wurde sich auf zwei interessante Fälle beschränkt.

Es verbleibt somit gerade bei langsamem Stößen als auch bei Stößen mehrerer Solitonen Untersuchungsbedarf für folgende Arbeiten. Ein Vergleich der Ergebnisse des Variationsansatzes und numerisch exakten Simulationen auf einem Gitter kann zudem weitere Abschätzungen über die Güte des Variationsansatzes liefern.

Literaturverzeichnis

- [1] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1924, 261–267 (1924).
- [2] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases II. *Sitzungsberichte der preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1925, 3–14 (1925).
- [3] S. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik* 26, 178–181 (1924).
- [4] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science* 269, 198–201 (1995).
- [5] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett und R. G. Hulet. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions. *Phys. Rev. Lett.* 75, 1687–1690 (1995).
- [6] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev. Lett.* 75, 3969–3973 (1995).
- [7] E. P. Gross. Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems. *Il Nuovo Cimento* 20, 454–477 (1961).
- [8] L. P. Pitaevskii. Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas. *Soviet Physics JETP* 13, 451–454 (1961).
- [9] A. D. McLachlan. A variational solution of the time-dependent Schrodinger equation. *Molecular Physics* 8, 39–44(6) (1964).
- [10] Tobias Ilg. Animationen zur Bachelorarbeit,
<https://www.itp1.uni-stuttgart.de/institut/mitarbeiter/ilg/animationen/> (2015).
- [11] Daniel Haag. Numerische Behandlung von Bose-Einstein-Kondensaten im PT-symmetrischen Doppelmuldenpotential. *Masterarbeit, Universität Stuttgart* (2012).

Literaturverzeichnis

- [12] C. J. Pethick und H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University (2008).
- [13] Rüdiger Matthias Fortanier. Variational approaches to dipolar Bose-Einstein condensates. *Dissertation, Universität Stuttgart* (2014).
- [14] Eric J. Heller. Classical S-matrix limit of wave packet dynamics. *The Journal of Chemical Physics* 65, 4979–4989 (1976).
- [15] Ramona Tschüter. Solitonen in der eindimensionalen nichtlinearen Schrödinger-Gleichung mit attraktiver Wechselwirkung. *Staatsexamensarbeit, Universität Stuttgart* (2015).

Danksagung

Nach Abschluss meiner Arbeit ist es Zeit den Personen zu danken, die mich während der gesamten Zeit unterstützt haben.

Mein Dank gilt vor allem Herrn Prof. Dr. Jörg Main für die Betreuung der Arbeit und die Abnahme der Prüfung. Durch viele anregende Gespräche ergaben sich immer neue, interessante Aspekte des Themas, die untersucht werden konnten. Außerdem möchte ich Herrn Prof. Dr. Günter Wunner danken, dass ich meine Arbeit am 1. Institut für Theoretische Physik an der Universität Stuttgart anfertigen durfte. Weiterhin möchte ich Ramona Tschüter, Robin Gutöhrlein und Priv.-Doz. Dr. Holger Cartarius danken, die bei auftretenden Problemen stets hilfreich zur Seite standen. Bei meinen Kommilitonen Marcel Wagner und Sascha Polatkan möchte ich mich für die Diskussion vieler Probleme in unserem gemeinsamen Büro bedanken, die viel zu meinem Verständnis beigetragen haben. Artur Skljarow gilt mein Dank für wichtige Anmerkungen zu meiner Arbeit. Danken möchte ich zudem Desirée Rausch, die stets hinter mir stand und mich mit viel Geduld unterstützt hat. Abschließend möchte ich mich bei meinen Eltern bedanken, die mir mein Studium ermöglichen und mich tatkräftig unterstützen.

Ehrenwörtliche Erklärung

Ich erkläre,

- dass ich diese Bachelorarbeit selbständig verfasst habe,
- dass ich keine anderen als die angegebenen Quellen benutzt und alle wörtlich oder sinngemäß aus anderen Werken übernommenen Aussagen als solche gekennzeichnet habe,
- dass die eingereichte Arbeit weder vollständig noch in wesentlichen Teilen Gegenstand eines anderen Prüfungsverfahrens gewesen ist,
- dass ich die Arbeit weder vollständig noch in Teilen bereits veröffentlicht habe, es sei denn, der Prüfungsausschuss hat die Veröffentlichung vorher genehmigt
- und dass der Inhalt des elektronischen Exemplars mit dem des Druckexemplars übereinstimmt.

Stuttgart, den 4. September 2015

Tobias Ilg