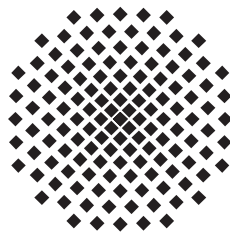


Bifurkationen in den Eigenwertspektren $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Bose-Einstein-Kondensate

Bachelorarbeit von
Daniel Dizdarevic

08. August 2014

Prüfer: Prof. Dr. Jörg Main



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

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
1.1. Motivation und Einführung in das Thema	1
1.2. Aufbau der Arbeit	2
2. Bose-Einstein-Kondensate	5
2.1. Gross-Pitaevskii-Gleichung	5
2.1.1. Gross-Pitaevskii-Gleichung mit kurzreichweitiger Wechselwirkung	6
2.1.2. Nichtlinearität der Gross-Pitaevskii-Gleichung	7
2.2. Bifurkationen	7
2.2.1. Tangentenbifurkation und Heugabelbifurkation	8
2.2.2. Cusp-Bifurkation	10
3. Bikomplexe Zahlen	13
3.1. Einführung der bikomplexen Zahlen	13
3.2. Komplexe Konjugationen	15
3.2.1. Betragsquadrat	16
3.3. Elementare Operationen	16
3.4. Exponentialfunktion	17
3.4.1. Phasenfaktor	18
4. $\mathcal{PT}$-symmetrische Quantenmechanik	19
4.1. Antilineare Operatoren	19
4.1.1. $\mathcal{PT}$ -Operator	20
4.2. Komplexe Potentiale	21
4.2.1. Eigenschaften komplexer Potentiale	22
4.2.2. Das $\mathcal{PT}$ -symmetrische Doppelmuldenpotential	22
4.3. Nichtlineare Quantensysteme	24
4.3.1. Gross-Pitaevskii-Gleichung	25
4.3.2. Symmetrien der Gross-Pitaevskii-Gleichung	26
5. Das zeitabhängige Variationsprinzip	31
5.1. Variationsprinzip nach McLachlan	31
5.1.1. Gauß'sche Wellenpakete	32
5.1.2. Symmetrien der Gauß'schen Parameter	35

5.1.3. Variationsparameter in drei Dimensionen	36
5.2. Stationäre Lösungen	37
6. Eigenwertspektrum	39
6.1. Reelles Eigenwertspektrum	39
6.2. Analytische Fortsetzung	41
6.2.1. Bikomplexes Eigenwertspektrum in idempotenter Darstellung . .	43
6.3. Symmetrien	45
6.4. Gauß'sche Parameter	47
7. Bifurkationen	53
7.1. Cusp-Bifurkation	53
8. Wellenfunktionen	57
9. Zusammenfassung und Ausblick	61
9.1. Ausblick	62
A. Gaußfunktionen	63
A.1. Gaußintegrale	63
B. Wellenfunktionen in Vektordarstellung	65
Literaturverzeichnis	67
Danksagung	71

1. Einleitung

1.1. Motivation und Einführung in das Thema

Die Forderung nach reellen Messwerten wird in der Quantenmechanik durch Verwendung hermitescher Operatoren gewährleistet. Jedoch ist die Behandlung dissipativer oder offener Systeme in der hermiteschen Quantenmechanik oft schwierig [1]. Eine elegante Möglichkeit offene Systeme zu betrachten, ist die Verwendung nicht-hermitescher Hamiltonoperatoren mit komplexen Potentialen [2]. Komplexe Potentiale verletzen die Wahrscheinlichkeitserhaltung und führen so zu einem Gewinn oder Verlust der Wahrscheinlichkeitsdichte. Für Bose-Einstein-Kondensate, die sich bei tiefen Temperaturen sehr gut durch die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung beschreiben lassen [3–5], kann dies als Ein- und Auskopplung von Teilchen interpretiert werden [6]. Eine nicht-hermitesche Gross-Pitaevskii-Gleichung wird unter anderem verwendet, um inelastische Dreikörperstöße von Bose-Einstein-Kondensaten zu untersuchen [2, 7], den Zerfall von Kondensaten zu beschreiben [8, 9] oder um Transportphänomene zu berücksichtigen [10].

Aus physikalischer Sicht ist eine spezielle Klasse der nicht-hermiteschen Systeme von Interesse, die eine Paritäts-Zeit-Symmetrie ($\mathcal{PT}$ -Symmetrie) aufweisen. $\mathcal{PT}$ -Symmetrie bedeutet, dass der Hamiltonoperator des Systems mit dem $\mathcal{PT}$ -Operator vertauscht. Es zeigt sich, dass solche Systeme in bestimmten Parameterbereichen ein rein reelles Eigenwertspektrum besitzen können und stationäre Zustände möglich sind [11].

Die experimentelle Realisierung eines $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Systems gelang bereits in optischen Wellenleitern [12, 13], in denen die formale Äquivalenz der Wellengleichung zur Schrödingergleichung für die Transversalmode des elektrischen Feldes ausgenutzt wird und komplexe Brechungsindizes den komplexen Potentialen entsprechen. Die Umsetzung eines echten $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Quantensystems steht noch aus. Ein Bose-Einstein-Kondensat mit Ein- und Auskopplung von Teilchen ist hierfür ein vielversprechender Kandidat [14]. Ein einfaches und potentiell experimentell zugängliches System ist das dreidimensionale $\mathcal{PT}$ -symmetrische Doppelmuldenpotential [15–21].

In dieser Arbeit werden die Bifurkationen im Eigenwertspektrum eines Bose-Einstein-Kondensates in einem solchen dreidimensionalen $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Doppelmuldenpotential studiert. Ziel ist die Aufklärung des Verhaltens und der charakteristischen Änderungen der Eigenwertstruktur bei verschiedenen Systemparametern. Dafür wird die nichtlineare

Gross-Pitaevskii-Gleichung in den Raum der bikomplexen Zahlen analytisch fortgesetzt. Die bikomplexen Zahlen werden hierbei in der sogenannten idempotenten Darstellung verwendet, welche die Rechnungen effektiv auf eine komplexe Algebra zurückführen. Die bikomplexe Algebra und allgemein die hyperkomplexe Algebra bieten Vorteile bei der Verallgemeinerung und Untersuchung quantenmechanischer Systeme [22–24].

1.2. Aufbau der Arbeit

- In KAPITEL 2 wird die Mean-Field Beschreibung von Bose-Einstein-Kondensaten behandelt. Dafür wird eine kurze Herleitung der Gross-Pitaevskii-Gleichung mit kurzreichweitiger Wechselwirkung gezeigt und im Speziellen auf deren Nichtlinearität eingegangen. Da in nichtlinearen Systemen häufig Bifurkationen auftreten, werden diese allgemein behandelt und die für diese Arbeit wichtigen Bifurkationstypen vorgestellt.
- Die bikomplexen Zahlen sowie ihre idempotente Darstellung werden in KAPITEL 3 eingeführt. Die Eigenschaften und Regeln dieser idempotenten Darstellung werden ausführlich behandelt und wichtige Elemente der Quantenmechanik, wie das Betragsquadrat und die Phase, verallgemeinert.
- KAPITEL 4 befasst sich mit der $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Quantenmechanik. Nach einer kurzen Einführung zu den Eigenschaften antilinearer Operatoren wird der $\mathcal{PT}$ -Operator betrachtet. Außerdem werden die in der nicht-hermiteschen Quantenmechanik auftretenden komplexen Potentiale motiviert, sowie eine physikalische Interpretation gegeben. Anschließend wird das in dieser Arbeit verwendete $\mathcal{PT}$ -symmetrische Doppelmuldenpotential vorgestellt. Die folgende Betrachtung nichtlinearer Quantensysteme beinhaltet die bikomplexe Verallgemeinerung der Gross-Pitaevskii-Gleichung auf die idempotente Darstellung und die Betrachtung der auftretenden Symmetrien, insbesondere der $\mathcal{PT}$ -Symmetrie.
- Zur Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung wird das zeitabhängige Variationsprinzip nach McLachlan verwendet, welches in KAPITEL 5 für bikomplexe Zahlen in idempotenter Darstellung hergeleitet wird. Als Ansatz für die Wellenfunktion dient eine Superposition aus Gauß'schen Wellenpaketen. Durch Symmetrien lässt sich die Anzahl der Variationsparameter einschränken. Zuletzt werden die stationären Zustände und die daraus folgenden Bedingungen an die Gauß'schen Parameter betrachtet.
- In KAPITEL 6 werden dann die Eigenwertspektren der Gross-Pitaevskii-Gleichung mit einem $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Doppelmuldenpotential ausgewertet. Außerdem wird auf die Beziehungen und Symmetrien der Gauß'schen Parameter eingegangen.

- KAPITEL 7 befasst sich mit den Bifurkationen des Eigenwertspektrums. Ziel ist ein besseres Verständnis der Struktur und Entwicklung des Bifurkationsszenarios bei verschiedenen Systemparametern. Dazu werden die im System auftretenden Bifurkationen mit bekannten Bifurkationstypen verglichen.
- In KAPITEL 8 werden schließlich die Form und die Symmetrien der Wellenfunktionen in der idempotenten Darstellung diskutiert und mit den Symmetrien der Eigenwerte und der Gauß'schen Parameter verglichen.
- Die wesentlichen Ergebnisse sind in KAPITEL 9 zusammengefasst und abschließend wird ein kurzer Ausblick gegeben.

2. Bose-Einstein-Kondensate

Die Kondensation idealer Bose-Gase bei tiefen Temperaturen wurde bereits 1924/25 von Einstein [25, 26], basierend auf den Arbeiten von Bose [27], vorhergesagt. Da Bosonen nicht dem Pauli-Prinzip unterliegen, kann eine beliebige Anzahl Bosonen denselben quantenmechanischen Zustand besetzen. Der Vorgang, dass unterhalb einer kritischen Temperatur der Grundzustand makroskopisch besetzt wird, bezeichnet man als Bose-Einstein-Kondensation.

Aufgrund der geringen Teilchendichte in Bose-Einstein-Kondensaten (*Bose-Einstein condensate*, BEC) genügt es, Zweikörperkräfte zu berücksichtigen. Die Wechselwirkung zwischen mehr als zwei Teilchen kann vernachlässigt werden. Die Vielteilchen-Schrödingergleichung für N Teilchen lautet

$$\sum_{n=1}^N \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}_n} + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}, t) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^N V(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m) \right] \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = E \Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N), \quad (2.1)$$

mit dem Fallenpotential $V_{\text{ext}}(\mathbf{x}, t)$ und dem Wechselwirkungspotential $V(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_m)$ zwischen zwei Teilchen an den Orten $\mathbf{x}_n$ und $\mathbf{x}_m$. Der Faktor $1/2$ berücksichtigt, dass jede Zweiteilchenwechselwirkung doppelt aufsummiert wird.

2.1. Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die Vielteilchen-Schrödingergleichung (2.1) besitzt keine analytische Lösung und die numerische Behandlung ist aufgrund der großen Teilchenzahl sehr aufwendig. Der übliche Produktansatz separiert die Gleichung wegen des Zweiteilchenwechselwirkungspotentials nicht. Da die Bose-Einstein-Kondensation bei geringer Temperatur stattfindet, stellt ein Mean-Field-Ansatz eine geeignete Näherung dar. Dabei wird die Wirkung auf ein Teilchen aufgrund des Potential aller anderen Teilchen im System durch ein mittleres Feld genähert (*mean-field approximation*). Für Bosonen kann die Vielteilchenwellenfunktion im Grenzfall $T \rightarrow 0$ durch ein Produkt identischer Einteilchenwellenfunktionen ersetzt werden,

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \prod_{n=1}^N \psi(\mathbf{x}_n). \quad (2.2)$$

Dies entspricht der Anschauung, dass sich alle Teilchen für $T = 0$ im Grundzustand befinden, also vollständig kondensiert sind. Es wird die Minimierung der Mean-Field-Energie E_{mf} mit der Nebenbedingung, dass die Norm $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ erhalten bleibt, betrachtet,

$$\delta \left(E_{\text{mf}} - \mu N \left[\langle \psi | \psi \rangle - 1 \right] \right) = 0, \quad E_{\text{mf}} = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (2.3)$$

wobei die Nebenbedingung durch den Lagrange-Parameter μN in die Variation eingeht. Die Variation (2.3) liefert die im Jahr 1961 von Gross [3] und Pitaevskii [4] unabhängig entwickelte zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (*Gross-Pitaevskii equation*, GPE),

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} \Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}, t) + N \int d^3x' V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') |\psi(\mathbf{x}')|^2 \right] \psi(\mathbf{x}) = \mu \psi(\mathbf{x}). \quad (2.4)$$

Aus der Variation geht hervor, dass μ der Definition des chemischen Potentials entspricht und damit die Energie bezeichnet, die notwendig ist, um dem System ein Teilchen hinzuzufügen. Für eine ausführliche Behandlung der GPE sei auf [5, 28] verwiesen.

2.1.1. Gross-Pitaevskii-Gleichung mit kurzreichweitiger Wechselwirkung

In dieser Arbeit wollen wir uns auf die GPE mit kurzreichweitiger Wechselwirkung beschränken. Diese Wechselwirkung ist für ungeladene Atome durch ein van der Waals-Potential gegeben. Unter Verwendung der Näherung, dass nur Kontaktwechselwirkungen $V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 8\pi a \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ zwischen den Kondensateteilchen auftreten sollen und der Einführung einer definierten Längenskala sowie weiterer Einheiten ergibt sich die zeitunabhängige dimensionslose GPE mit kurzreichweitiger Wechselwirkung,

$$\left[-\Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + 8\pi N a |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t) = \mu \psi(\mathbf{x}, t), \quad (2.5)$$

mit der Teilchenzahl N und der Streulänge a . Analog zur linearen Schrödingergleichung ergibt sich die zeitabhängige GPE durch die Zeitentwicklung der stationären Zustände $\psi(\mathbf{x}, t) = e^{-i\mu t} \psi(\mathbf{x})$ und die Substitution $\mu \psi(\mathbf{x}) \rightarrow i \partial_t \psi(\mathbf{x}, t)$,

$$\left[-\Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + 8\pi N a |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \right] \psi(\mathbf{x}, t) = i \partial_t \psi(\mathbf{x}, t). \quad (2.6)$$

Eine alternative Herleitung über Feldoperatoren führt zum selben Ergebnis [5].

2.1.2. Nichtlinearität der Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die GPE (2.5) lässt sich durch einen linearen Anteil $\mathcal{H}_{\text{lin}}$ und einen nichtlinearen Anteil $\mathcal{H}_{\text{nonlin}}$ ausdrücken,

$$[\mathcal{H}_{\text{lin}} + \mathcal{H}_{\text{nonlin}}] \psi(\mathbf{x}) = \mu \psi(\mathbf{x}), \quad (2.7)$$

wobei

$$\mathcal{H}_{\text{lin}} = -\Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}), \quad (2.8a)$$

$$\mathcal{H}_{\text{nonlin}} = g |\psi(\mathbf{x})|^2, \quad (2.8b)$$

und $g = 8\pi Na$ den Nichtlinearitätsparameter bezeichnet.

Der nichtlineare Anteil der GPE ist durch das Betragsquadrat $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ der im Allgemeinen komplexen Wellenfunktion $\psi(\mathbf{x})$ gegeben und erfüllt nicht die Cauchy-Riemann'schen Differentialgleichungen, wie im Folgenden gezeigt wird.

Für eine komplexe Zahl $z = x + iy$ folgt

$$|z|^2 = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2, \quad (2.9)$$

das reelle Betragsquadrat.

Mit $u(x,y) = \text{Re } |z|^2 = x^2 + y^2$ und $v(x,y) = \text{Im } |z|^2 = 0$ folgt

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 2x \neq 0 = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad (2.10a)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = 2y \neq 0 = \frac{\partial v}{\partial x}. \quad (2.10b)$$

Die Cauchy-Riemann'schen Differentialgleichungen (2.10) sind also nur für $x = y = 0$ erfüllt. Da das Betragsquadrat jedoch in einer Umgebung von $z = 0$ nicht komplex differenzierbar ist, lässt sich $|z|^2$ lokal nicht in eine Potenzreihe entwickeln. Das Betragsquadrat ist in keinem Punkt der komplexen Ebene holomorph und damit auch nicht analytisch. Aus physikalischer Sicht sind nichtanalytische Funktionen ungünstig, was Anlass für eine analytische Fortsetzung gibt.

2.2. Bifurkationen

In nichtlinearen dynamischen Systemen treten häufig Bifurkationen auf. Dabei bezeichnet eine Bifurkation eine qualitative Veränderung des Verhaltens einer Größe in Abhängigkeit bestimmter Parameter. Bifurkationspunkte weisen meist charakteristische Eigenschaften auf und treten oft in Verbindung mit Stabilitätsänderungen auf.

Betrachtet wird nun die zeitliche Entwicklung einer Größe x , beschrieben durch die nichtlineare eindimensionale Bewegungsgleichung

$$\dot{x} = v(x, \boldsymbol{\rho}) \quad (2.11)$$

mit einem Parametersatz $\boldsymbol{\rho}$. Der Einfachheit halber wollen wir im Folgenden den Fall betrachten, dass (2.11) nur von einem Parameter ρ abhängt. Falls x für $\rho < \rho_b$ ein qualitativ anderes Verhalten wie für $\rho > \rho_b$ zeigt, so ist ρ_b ein Bifurkationspunkt. Eine typische Veränderung ist hierbei beispielsweise die Änderung der Zustandszahl oder ein Stabilitätswechsel.

Um die Stabilität einer stationären Lösung $\dot{x} = 0$ zu bestimmen, wird eine lineare Stabilitätsanalyse der Zustandsgleichung (2.11) durchgeführt. Dazu wird eine kleine Auslenkung δx des stationären Zustandes x_0 betrachtet,

$$\dot{x}_0 + \delta \dot{x} = v(x_0 + \delta x, \rho) = v(x_0, \rho) + \delta x \partial_x v(x, \rho)|_{x_0} + \mathcal{O}(\delta x^2). \quad (2.12)$$

Für den ungestörten stationären Zustand muss $\dot{x}_0 = v(x_0, \rho) = 0$ gelten, sodass (2.12) näherungsweise die Lösung

$$\delta x(t) = \delta x(0) e^{\partial_x v(x, \rho)|_{x_0} t} \quad (2.13)$$

besitzt. Die Störung (2.13) der stationären Lösung fällt für negative reelle Exponenten exponentiell ab. Die Lösung ist dann stabil unter kleinen Auslenkungen δx . Für positive reelle Exponenten wächst eine Störung exponentiell an, der Zustand ist somit instabil. Für die Bewegungsgleichung (2.11) gilt die lineare Stabilitätsbedingung

$$\operatorname{Re} \partial_x v(x, \rho)|_{x_0} \begin{cases} < 0, \text{ stabil} \\ > 0, \text{ instabil} \end{cases} \quad (2.14)$$

Der kritische Fall $\operatorname{Re} \partial_x v(x, \rho)|_{x_0} = 0$ liefert in linearer Näherung keine Informationen über die Stabilität, sodass höhere Ordnungen betrachtet werden müssen.

2.2.1. Tangentenbifurkation und Heugabelbifurkation

Im Folgenden sollen nun zwei wichtige und häufig auftretende Bifurkationstypen betrachtet werden. Wird ein dynamisches System durch die Bewegungsgleichung

$$\dot{x} = v(x, \rho) = x^2 + \rho \quad (2.15)$$

beschrieben, so besitzt dieses offensichtlich die stationären Lösungen $x_0^{(1),(2)} = \pm\sqrt{-\rho}$, dargestellt in Abbildung (2.1). Für $\rho > 0$ existieren jedoch keine reellen stationären Zustände. Nur durch komplexe Erweiterung lassen sich für $\rho > 0$ die imaginären Lösungen

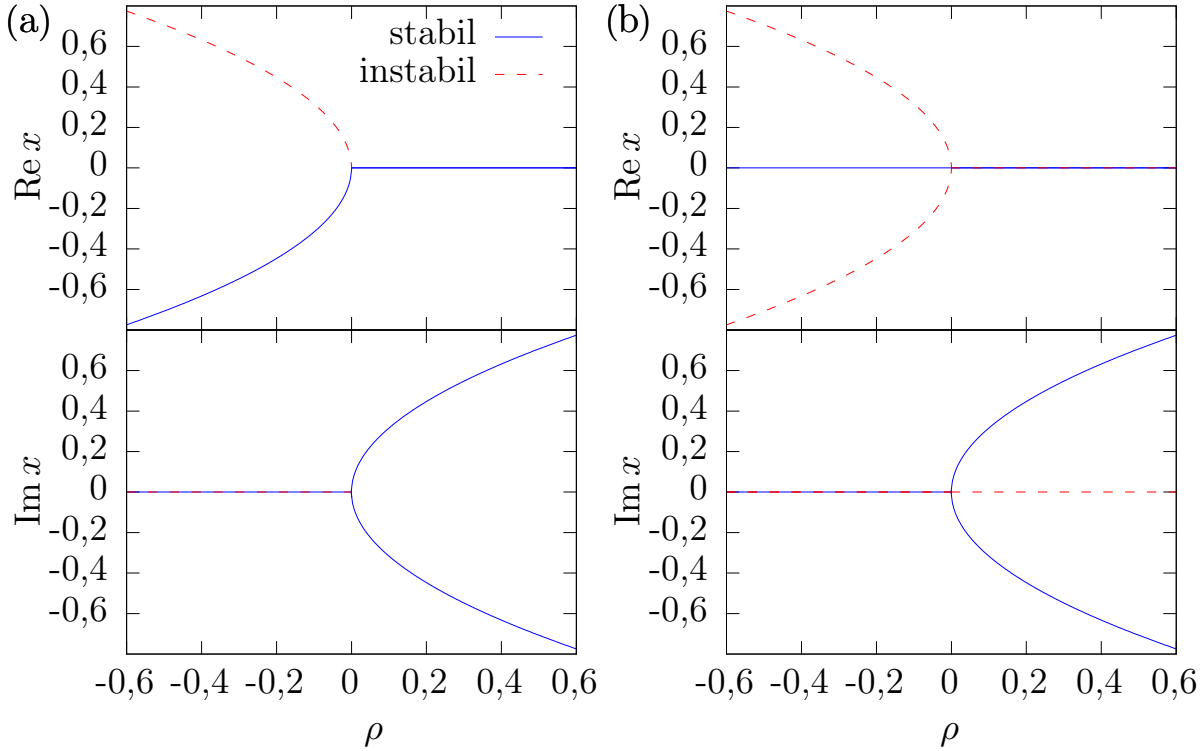


Abbildung 2.1: Häufige Bifurkationsarten sind die Tangentenbifurkation (a) und die Heugabelbifurkation (b).

$x_0^{(1),(2)} = \pm i\sqrt{\rho}$ finden. Zur Untersuchung der Stabilität wird die lineare Stabilitätsbedingung (2.14) betrachtet,

$$\partial_x v(x, \rho)|_{x_0} = 2x_0. \quad (2.16)$$

Es ist also nur die negative Lösung $x_0^{(1)} = -\sqrt{\rho}$ stabil, die positive Lösung $x_0^{(2)} = \sqrt{\rho}$ hingegen ist instabil. Die rein imaginären Lösungen können als stabile Lösungen angesehen werden, da sie lediglich zu einer Oszillation um die stationäre Lösung führen. Diese Oszillation ist dominant für kleine Störungen auf einer relevanten Zeitskala. Viele physikalische Systeme, auch das in dieser Arbeit betrachtete System, bestätigen diese Ansicht.

Ein System, welches durch die Bewegungsgleichung höherer Ordnung

$$\dot{x} = v(x, \rho) = x^3 + \rho x \quad (2.17)$$

beschrieben wird, weist im Gegensatz zu (2.15) noch eine weitere, vom Parameter ρ unabhängige Lösung $x_0^{(3)} = 0$ auf. Die lineare Stabilitätsanalyse zeigt ein gänzlich anderes Verhalten,

$$\partial_x v(x, \rho)|_{x_0} = 3x_0^2 + \rho. \quad (2.18)$$

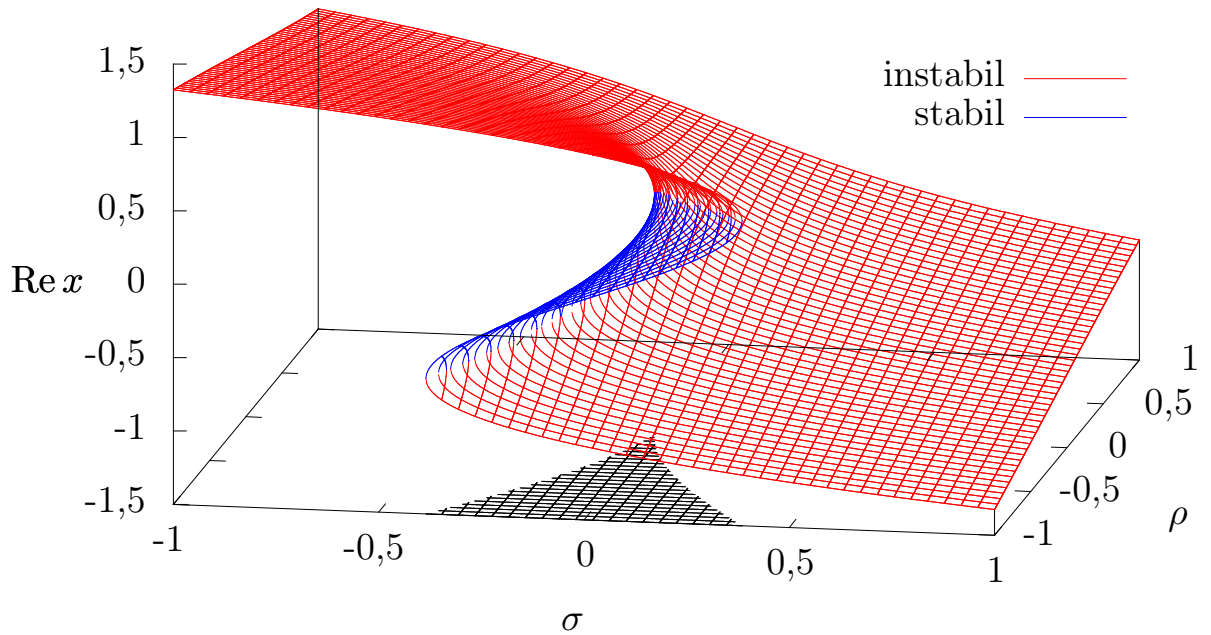


Abbildung 2.2: Die Cusp-Bifurkation, dargestellt im Parameterraum. Wird die instabile Lösung in die $\rho\sigma$ -Ebene projiziert, so zeigt sich die Spitze (cusp), durch welche dieser Bifurkationstyp seinen Namen erhält.

Die bereits von der Tangentenbifurkation bekannten stationären Lösungen sind nun für beide instabil für $\rho < 0$ und stabil für $\rho > 0$. Der Exponent (2.18) der linearen Störung (2.13) ist immer reell, auch für die komplexen stationären Lösungen. Nur $x_0^{(3)} = 0$ stellt für $\rho < 0$ eine stabile Lösung dar. Abbildung 2.1 zeigt die Tangentenbifurkation und die Heugabelbifurkation sowie ihr Stabilitätsverhalten.

2.2.2. Cusp-Bifurkation

Es wird nun ein dynamisches System betrachtet, welches durch die Zustandsgleichung

$$\dot{x} = v(x, \rho, \sigma) = x^3 + \rho x + \sigma \quad (2.19)$$

mit den Parametern ρ und σ beschrieben wird. Die stationären Zustände entsprechen den Nullstellen eines Polynoms dritten Grades, sodass die Lösungen mithilfe der Cardanischen

Formeln bestimmt werden können,

$$x_0^{(1),(2)} = \left(1 \pm i\sqrt{3}\right) \frac{\rho}{\sqrt[3]{12}\xi} - \left(1 \mp i\sqrt{3}\right) \frac{\xi}{2\sqrt[3]{18}}, \quad (2.20a)$$

$$x_0^{(3)} = -\sqrt[3]{\frac{2}{3}} \frac{\rho}{\xi} + \frac{\xi}{\sqrt[3]{18}}, \quad (2.20b)$$

$$\xi = \left[-9\sigma + \sqrt{12\rho^3 + 81\sigma^2}\right]^{\frac{1}{3}}.$$

Die Realteile der Lösungen (2.20) sind in Abbildung 2.2 im Parameterraum dargestellt. Eine lineare Stabilitätsanalyse wie in Abschnitt 2.2.1 zeigt, dass die Lösung $x_0^{(3)}$ instabil ist. Die Lösungen $x_0^{(1),(2)}$ sind stabil. Die Projektion der instabilen Lösung auf die Parameterebene zeigt eine spitz zulaufende Fläche, deren Rand die Bifurkationen zwischen der instabilen und den stabilen Lösungen angibt. Im Ursprung liegt die namensgebende Spitze (cusp). René Thom beschrieb diesen Bifurkationstyp 1972 als Cusp-Katastrophe im Rahmen der Katasrophentheorie [29]. Dabei bildet die Cusp-Katastrophe eine von sieben Normalformen zur Klassifizierung dynamischer Systeme. Für den Spezialfall $\sigma = 0$ entspricht die Cusp-Bifurkation gerade der Heugabelbifurkation.

3. Bikomplexe Zahlen

Bikomplexe Zahlen [30] stellen eine Verallgemeinerung der komplexen Zahlen dar. Deshalb ist es möglich, eine komplexe Größe wie das Betragsquadrat aus Abschnitt 2.1.2 im Raum der bikomplexen Zahlen analytisch fortzusetzen. Im Gegensatz zu den bekannteren Quaternionen [31] sind die bikomplexen Zahlen kommutativ bezüglich der Multiplikation, jedoch nicht nullteilerfrei und bilden daher keine Divisionsalgebra. In jüngster Zeit wird vermehrt hyperkomplexe Algebra zur Formulierung quantenmechanischer Probleme verwendet [22]. Es wurde bereits gezeigt, dass die fundamentalen Bestandteile der Quantenmechanik, sowie die Schrödingergleichung und der Hilbertraum selbst, in bikomplexer Erweiterung formuliert werden können und insbesondere die Verwendung der idempotenten Darstellung der bikomplexen Zahlen Vorteile mit sich bringt [23, 24]. Im Folgenden wird daher eine kurze Einführung der bikomplexen Zahlen und ihrer elementaren Operationen und Funktionen gegeben.

3.1. Einführung der bikomplexen Zahlen

Für eine gewöhnliche komplexe Zahl $z \in \mathbb{C}$ gilt

$$z = x + iy, \quad (3.1)$$

mit $x, y \in \mathbb{R}$ und $i^2 = -1$ der imaginären Einheit. Eine bikomplexe Zahl kann nun konstruiert werden, indem Real- und Imaginärteil von z selbst zu komplexen Zahlen bezüglich einer weiteren unabhängigen imaginären Einheit j mit $j^2 = -1$ erweitert werden. Mit $x = (x_1 + jx_j)$ und $y = (y_1 + jy_j)$ folgt

$$z = x + iy = (x_1 + jx_j) + i(y_1 + jy_j) \equiv z_1 + iz_i + jz_j + \kappa z_k, \quad (3.2)$$

wobei $\kappa = ij$ und $z \in \mathbb{BC}$ nun eine bikomplexe Zahl darstellt. Ein äquivalentes Resultat wird durch Verwendung der imaginären Einheiten j und Darstellung der Koeffizienten als komplexe Zahlen bezüglich i erreicht. Die imaginären Einheiten sind also völlig unabhängig und gleichberechtigt. Gleichung (3.2) wird als Vektordarstellung der bikomplexen Zahlen bezeichnet.

Für die bikomplexen Zahlen

$$e_{\pm} = \frac{1 \pm \kappa}{2} \quad (3.3)$$

3. Bikomplexe Zahlen

gelten wegen $\kappa^2 = i^2 j^2 = 1$ die folgenden Identitäten,

$$e_+ + e_- = 1, \quad (3.4a)$$

$$e_+ - e_- = \kappa, \quad (3.4b)$$

$$e_+ e_- = 0, \quad (3.4c)$$

$$e_{\pm}^2 = e_{\pm}. \quad (3.4d)$$

Eigenschaft (3.4c) zeigt, dass es sich bei $e_{\pm}$ um Nullteiler handelt. Die Existenz von Nullteilern bedeutet, dass die bikomplexen Zahlen im Gegensatz zu den komplexen Zahlen keinen Körper bilden. Weiterhin können die Elemente aufgrund der Eigenschaft (3.4c) als orthogonale Basis aufgefasst werden, wobei sie durch (3.4d) nur in erster Ordnung auftreten. Die Elemente $e_{\pm}$ werden daher auch als idempotente Basis bezeichnet. Wie im Folgenden gezeigt wird, lassen sich die bikomplexen Zahlen $z \in \mathbb{BC}$ eindeutig darstellen als

$$z = z_+ e_+ + z_- e_-, \quad (3.5)$$

mit $z_{\pm} \in \mathbb{C}$. Unter Verwendung von (3.2) und (3.3) ergibt sich nach einfacher Umformung

$$z_1 + i z_i + j z_j + \kappa z_k = \left(\frac{z_+ + z_-}{2} \right) + \kappa \left(\frac{z_+ - z_-}{2} \right). \quad (3.6)$$

Da die imaginären Einheiten i und j unabhängig und gleichberechtigt sind und $\kappa = ij$, können die idempotenten Komponenten aus (3.5) auf zwei Arten dargestellt werden,

- bezüglich der imaginären Einheit i ,

$$z_+ = (z_1 + z_k) + i (z_i - z_j), \quad (3.7a)$$

$$z_- = (z_1 - z_k) + i (z_i + z_j). \quad (3.7b)$$

- bezüglich der imaginären Einheit j ,

$$z_+ = (z_1 + z_k) - j (z_i - z_j), \quad (3.8a)$$

$$z_- = (z_1 - z_k) + j (z_i + z_j). \quad (3.8b)$$

Die Darstellungen (3.7) in $\mathbb{C}_i$ und (3.8) in $\mathbb{C}_j$ sind gleichwertig und der Übergang erfolgt durch die Identitäten

$$i e_{\pm} = \mp j e_{\pm}, \quad (3.9)$$

die einem Wechsel der komplexen Ebene sowie einer zusätzlichen Konjugation in der $+$ Komponente entsprechen.

Die Eigenschaften (3.4) zeigen außerdem die lineare Unabhängigkeit der idempotenten Elemente $e_{\pm}$ und garantieren so die Eindeutigkeit der Darstellung in (3.7) oder (3.8).

Durch die Eindeutigkeit wiederum folgt für eine konsequente Wahl der Darstellung bezüglich einer imaginären Einheit

$$z = w \iff z_{\pm} = w_{\pm}, \quad (3.10)$$

mit $z, w \in \mathbb{C}_i$ oder aber $z, w \in \mathbb{C}_j$.

Wählt man nun $z_{\pm} \in \mathbb{C}_i$, so ergibt sich aus den Gleichungen (3.7) durch Addition und Subtraktion die Umkehrabbildung von der idempotenten Darstellung auf die Vektordarstellung. Die Komponenten der Vektordarstellung bilden dabei Real- und Imaginärteile der Linearkombinationen $(z_+ \pm z_-)/2$ der idempotenten Komponenten,

$$z_+ + z_- = 2(z_1 + i z_i), \quad (3.11a)$$

$$z_+ - z_- = 2(z_k - i z_j). \quad (3.11b)$$

Die Umkehrabbildung kann für $z_{\pm} \in \mathbb{C}_j$ analog bestimmt werden,

$$z_+ + z_- = 2(z_1 + j z_j), \quad (3.12a)$$

$$z_+ - z_- = 2(z_k - j z_i). \quad (3.12b)$$

3.2. Komplexe Konjugationen

Aus (3.2) geht hervor, dass eine bikomplexe Zahl z zwei gleichberechtigte imaginäre Einheiten i und j enthält. Von den komplexen Zahlen ist bereits die komplexe Konjugation z^* nach i bekannt. Die Einführung einer zusätzlichen imaginären Einheit j bringt eine weitere mögliche komplexe Konjugation $\bar{z}$ bezüglich j mit sich,

$$z^* : i \longrightarrow -i \implies \mathcal{K} \longrightarrow -\mathcal{K}, \quad (3.13a)$$

$$\bar{z} : j \longrightarrow -j \implies \mathcal{K} \longrightarrow -\mathcal{K}. \quad (3.13b)$$

Aus der Definition der Abkürzung $\mathcal{K}$ folgt, dass die komplexen Konjugationen (3.13) immer auf zwei Komponenten wirken. Es ist nun möglich (3.13a) und (3.13b) gleichzeitig anzuwenden und damit eine bikomplexe Konjugation $\bar{z}^*$ bezüglich i und j zu definieren,

$$\bar{z}^* : i \longrightarrow -i \quad \wedge \quad j \longrightarrow -j \implies \mathcal{K} \longrightarrow \mathcal{K}. \quad (3.13c)$$

Auch die bikomplexe Konjugation (3.13c) wirkt auf zwei Komponenten.

Auf die idempotenten Basiselemente (3.3) hat die bikomplexe Konjugation (3.13c) keinen Einfluss, da $\mathcal{K}$ hierbei in sich selbst übergeht, die bikomplexe Konjugation wirkt somit nur auf die Koeffizienten einer bikomplexen Zahl $z = z_+ e_+ + z_- e_-$,

$$\bar{z}^* = \left(\overline{z_+ e_+} \right)^* + \left(\overline{z_- e_-} \right)^* = \bar{z}_+^* e_+ + \bar{z}_-^* e_-. \quad (3.14)$$

Bei den gewöhnlichen komplexen Konjugationen hingegen geht $\mathcal{K}$ in $-\mathcal{K}$ über und somit folgen

$$z^* = z_-^* e_+ + z_+^* e_- , \quad (3.15)$$

$$\bar{z} = \bar{z}_- e_+ + \bar{z}_+ e_- . \quad (3.16)$$

Da die Komponenten der idempotenten Darstellung gemäß (3.7) und (3.8) sowohl als Elemente aus $\mathbb{C}_i$ sowie als Elemente aus $\mathbb{C}_j$ gewählt werden können, lassen sich komplexe Konjugationen durch entsprechende Wahl der Koeffizienten in der jeweils anderen komplexen Ebene vermeiden. Da eine komplexe Konjugation bezüglich i auf $z_{\pm} \in \mathbb{C}_j$ und umgekehrt eine komplexe Konjugation bezüglich j auf $z_{\pm} \in \mathbb{C}_i$ keinen Einfluss hat, muss dann lediglich der Basiswechsel $e_{\pm} \rightarrow e_{\mp}$ beachtet werden.

3.2.1. Betragsquadrat

In der Quantenmechanik ist die Definition einer Norm unabdingbar. Im Raum der gewöhnlichen komplexen Zahlen ist diese über das Betragsquadrat $|z|^2$ für $z \in \mathbb{C}$ definiert. Zugleich bildet das Betragsquadrat die Nichtlinearität der GPE. In der hermiteschen Quantenmechanik lautet das Betragsquadrat

$$|z|^2 = z z^* , \quad (3.17)$$

wobei $*$ die komplexe Konjugation bezüglich i bezeichnet. Diese Eigenschaft bleibt in der bikomplexen Erweiterung erhalten, sodass (3.13a) gilt. Es können gemäß (3.13) analog zu (3.17) weitere Betragsquadrate bezüglich j oder bezüglich beider imaginärer Einheiten definiert werden. Dabei projiziert das Betragsquadrat bezüglich i nach $\mathbb{C}_j$ und bezüglich j nach $\mathbb{C}_i$. Das Betragsquadrat durch die bikomplexe Konjugation (3.13c) nach i und j wird in den Raum der bikomplexen Zahlen mit verschwindenden i und j Komponenten abgebildet. Physikalisch ist nur die komplexe Konjugation, und damit die Norm, bezüglich i relevant. Durch diese Wahl der Norm wird die imaginäre Einheit i gegenüber j ausgezeichnet. Für die idempotente Darstellung lautet das Betragsquadrat

$$|z|^2 = z_+ z_-^* e_+ + z_- z_+^* e_- . \quad (3.18)$$

3.3. Elementare Operationen

Die grundlegenden Operationen auf dem Raum der bikomplexen Zahlen ergeben sich für die Vektordarstellung (3.2) analog zu den gewöhnlichen komplexen Zahlen [30]. Aufgrund der Eigenschaften (3.4) der idempotenten Basis sind die Operationen und Regeln in dieser Darstellung von besonderem Interesse.

Für $z, w \in \mathbb{BC}$ gilt

$$z \circ w = (z_+ \circ w_+) e_+ + (z_- \circ w_-) e_-, \quad (3.19)$$

wobei die Verknüpfung $\circ$ repräsentativ für die Addition, Subtraktion und Multiplikation steht. Die vollständige Trennung von e_+ und e_- Koeffizienten bei der Multiplikation kommt durch die Eigenschaft (3.4c) zustande. Für das inverse Element z^{-1} einer bikomplexen Zahl z folgt mit 1 dem neutralen Element

$$zz^{-1} = z_+ z_+^{-1} e_+ + z_- z_-^{-1} e_- \stackrel{!}{=} 1. \quad (3.20)$$

Wegen (3.4a) muss $(z_{\pm})^{-1} = 1/z_{\pm}$ gelten und damit

$$z^{-1} = \frac{1}{z_+} e_+ + \frac{1}{z_-} e_-. \quad (3.21)$$

Somit wird deutlich, dass (3.19) gleichermaßen für die Division gilt, jedoch nur für $z_{\pm} \neq 0$. Für $z_+ = 0$ oder $z_- = 0$ stellt die bikomplexe Zahl z nach (3.4c) einen Nullteiler dar. In idempotenter Darstellung ist also leicht ersichtlich, dass nicht für jede bikomplexe Zahl ein Inverses existiert.

Die Operationen (3.19) gehorchen den Regeln der gewöhnlichen komplexen Zahlen, was einen großen Vorteil der idempotenten Darstellung gegenüber der Vektordarstellung der bikomplexen Zahlen darstellt.

3.4. Exponentialfunktion

Wie in Abschnitt 3.3 gezeigt wurde, wirken die elementaren Operationen getrennt in den $\pm$ Komponenten. Es ist also zu erwarten, dass Funktionen, welche auf die elementaren Operationen aus Abschnitt 3.3 zurückgeführt werden können, ebenfalls separat in den $\pm$ Komponenten wirken. Da eine analytische Fortsetzung im Allgemeinen durch Potenzreihen definiert wird, stellt dies keine Beschränkung dar. Im Folgenden soll diese Wirkung exemplarisch anhand der Exponentialfunktion gezeigt werden.

Die Exponentialfunktion kann über den Grenzwert der Folge

$$e^z = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{z}{n}\right)^n \quad (3.22)$$

definiert werden. Für $z \in \mathbb{BC}$ und $1 = e_+ + e_-$ folgt

$$\begin{aligned} e^z &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\left(1 + \frac{z_+}{n}\right) e_+ + \left(1 + \frac{z_-}{n}\right) e_- \right)^n \\ &\stackrel{(3.4)}{=} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{z_+}{n}\right)^n e_+ + \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{z_-}{n}\right)^n e_- \\ &= e^{z_+} e_+ + e^{z_-} e_- . \end{aligned} \tag{3.23}$$

Damit ist gezeigt, dass auch die Exponentialfunktion in idempotenter Darstellung vollständig separiert. Analog kann dies für beliebige Potenzreihen gezeigt werden.

3.4.1. Phasenfaktor

Für die spätere Anwendung der bikomplexen Zahlen erscheint es sinnvoll, einen wichtigen Bestandteil der Quantenmechanik in idempotenter Darstellung zu betrachten. In der Quantenmechanik ist die Wahl einer Phase der Form $e^{i\alpha}$ mit $\alpha \in \mathbb{R}$ frei. Beim Übergang zu bikomplexen Zahlen werden alle Parameter verdoppelt, so sollte es in der bikomplexen Darstellung zwei frei wählbare Phasenfaktoren geben. Diese lassen sich analog zur Einführung der bikomplexen Zahlen nach wie vor schreiben als Phasenfaktor $e^{i\alpha}$, wobei nun $\alpha \in \mathbb{C}_j$.

In idempotenter Darstellung lautet der Phasenfaktor

$$e^{i\alpha} = e^{\tilde{\alpha}_+ e_+ + \tilde{\alpha}_- e_-} \stackrel{(3.23)}{=} e^{\tilde{\alpha}_+} e_+ + e^{\tilde{\alpha}_-} e_- , \tag{3.24}$$

mit $\tilde{\alpha}_\pm \in \mathbb{C}_i$ oder $\tilde{\alpha}_\pm \in \mathbb{C}_j$. Da nur zwei reelle Phasenfaktoren wählbar sind, müssen α_+ und α_- abhängig sein. Durch Vergleich mit (3.7) und (3.8) zeigt sich, dass die idempotente Komponenten $\tilde{\alpha}_\pm$ unabhängig von der gewählten Darstellung die Relation

$$\tilde{\alpha}_+ = -\tilde{\alpha}_-^* \tag{3.25}$$

erfüllen müssen, und damit folgt

$$e^{i\alpha} = e^{\tilde{\alpha}} e_+ + e^{-\tilde{\alpha}^*} e_- , \tag{3.26}$$

mit $\tilde{\alpha}$ aus $\mathbb{C}_i$ oder $\mathbb{C}_j$.

Die imaginäre Einheit i wird hierbei durch die Wahl der Normierung ausgezeichnet, die weiterhin über das Betragsquadrat (3.17) gegeben ist. Es treten somit nur komplexe Konjugationen $*$ bezüglich i auf.

4. $\mathcal{PT}$ -symmetrische Quantenmechanik

Die Postulate der Quantenmechanik fordern, dass Observablen, welche physikalische Größen repräsentieren, rein reelle Eigenwerte besitzen müssen. Hermitesche Operatoren erfüllen diese Forderung, jedoch können auch nicht-hermitesche Operatoren vollkommen reelle Eigenwertspektren besitzen, wenn diese eine Paritäts-Zeit-Symmetrie ($\mathcal{PT}$ -Symmetrie) erfüllen [11]. Die grundlegenden Konzepte der Quantenmechanik wurden für die schwächere Forderung nach $\mathcal{PT}$ -Symmetrie bereits verallgemeinert, dazu gehört die Bildung eines angepassten Skalarproduktes, welches zu einer unitären Zeitentwicklung führt [32]. Mit einer unitären Zeitentwicklung lässt sich zeigen, dass die $\mathcal{PT}$ -symmetrische Quantenmechanik äquivalent zur hermiteschen Quantenmechanik ist [33] und somit in den Bereich der pseudo-hermiteschen Quantenmechanik fällt [34–36]. Die $\mathcal{PT}$ -symmetrische Quantenmechanik kann hingegen auch als effektive Beschreibung offener Quantensysteme verstanden werden und weniger als eine prinzipielle Verallgemeinerung der hermiteschen Quantenmechanik. Diese Intention liegt der vorliegenden Arbeit zugrunde.

4.1. Antilineare Operatoren

Ein nicht-hermitescher Hamiltonoperator kann in einem Quantensystem reelle Eigenwerte besitzen, wenn das System symmetrisch bezüglich eines beliebigen antilinearen Operators ist. Für einen antilinearen Operator $\mathcal{O}$ gilt

$$\mathcal{O}(\mu\psi + \epsilon\varphi) = \mu^*\mathcal{O}\psi + \epsilon^*\mathcal{O}\varphi. \quad (4.1)$$

Besitzt das System eine $\mathcal{O}$ -Symmetrie,

$$[\mathcal{O}, \mathcal{H}] = 0, \quad (4.2)$$

so liefert die Anwendung des Operators $\mathcal{O}$ auf die Schrödingergleichung $\mathcal{H}\psi = E\psi$

$$\mathcal{O}(\mathcal{H}\psi) = \mathcal{O}(E\psi), \quad (4.3)$$

$$\mathcal{H}(\mathcal{O}\psi) = E^*(\mathcal{O}\psi). \quad (4.4)$$

Ist der Zustand ψ Eigenzustand zum Operator $\mathcal{O}$,

$$\mathcal{O}\psi = c\psi, \quad c \in \mathbb{C}, \quad (4.5)$$

so muss $E^* = E$ gelten, also $E \in \mathbb{R}$.

Im Allgemeinen existiert für nicht-hermitesche Hamiltonoperatoren kein orthogonaler Satz von Eigenvektoren und die Eigenwerte sind komplex.

4.1.1. $\mathcal{PT}$ -Operator

Der $\mathcal{PT}$ -Operator (*Parity, Time*) ist ein solcher antilinearer Operator. Die Betrachtung der Raum-Zeit-Symmetrie erscheint aus physikalischer Sicht reizvoll, da diese im Gegensatz zu der Forderung nach Hermitizität nicht rein mathematischer Natur ist.

Der Paritätsoperator $\mathcal{P}$ und der Zeitumkehroperator $\mathcal{T}$ sind über ihre Wirkung im Ortsraum definiert,

$$\mathcal{P} : \quad \hat{x} \rightarrow -\hat{x}, \quad \hat{p} \rightarrow -\hat{p}, \quad (4.6)$$

$$\mathcal{T} : \quad \hat{p} \rightarrow -\hat{p}, \quad i \rightarrow -i, \quad (4.7)$$

für die Wirkung des $\mathcal{PT}$ -Operators folgt

$$\mathcal{PT} : \quad \hat{x} \rightarrow -\hat{x}, \quad i \rightarrow -i. \quad (4.8)$$

Die Raum-Zeitspiegelung wird also formal durch eine Punktspiegelung am Ursprung in den Ortskoordinaten und eine komplexe Konjugation erreicht. Aufgrund der komplexen Konjugation in (4.7) entspricht die Wirkung des Zeitumkehroperators der Definition (4.1) und ist im Gegensatz zum Paritätsoperator antilinear. Damit ist auch der Paritäts-Zeit-Operator, bestehend aus einem linearen und einem antilinearen Operator, selbst antilinear.

Eigenwerte des $\mathcal{PT}$ -Operators

Seien ϵ die Eigenwerte des $\mathcal{PT}$ -Operators zum Eigenzustand $|\psi\rangle$,

$$\mathcal{PT}|\psi\rangle = \epsilon|\psi\rangle. \quad (4.9)$$

Aus der Wirkung des $\mathcal{PT}$ -Operators (4.8) ist ersichtlich, dass die zweimalige Anwendung den ursprünglichen Zustand wiederherstellen muss, also

$$\mathcal{PTPT}|\psi\rangle = \mathcal{PT}\epsilon|\psi\rangle = \epsilon^*\mathcal{PT}|\psi\rangle = \epsilon^*\epsilon|\psi\rangle \stackrel{!}{=} |\psi\rangle. \quad (4.10)$$

Die Bedingung $|\epsilon|^2 = 1$ an einen Eigenwert des $\mathcal{PT}$ -Operators liefert

$$\epsilon = e^{i\alpha}. \quad (4.11)$$

Eigenwerte des $\mathcal{PT}$ -Operators sind also formal Phasenfaktoren und liegen auf dem Einheitskreis der komplexen Zahlenebene. Da die Quantenmechanik eine Freiheit in der Phasenwahl besitzt, ist insbesondere

$$\mathcal{PT}|\psi\rangle = 1|\psi\rangle \quad (4.12)$$

durch die Phasenwahl $|\psi\rangle \rightarrow |\tilde{\psi}\rangle = e^{i\alpha/2}|\psi\rangle$ immer möglich, denn

$$\begin{aligned} \mathcal{PT}|\tilde{\psi}\rangle &= e^{-i\alpha/2}\mathcal{PT}|\psi\rangle \\ &= e^{-i\alpha/2}e^{i\alpha}|\psi\rangle \\ &= e^{i\alpha/2}|\psi\rangle \\ &= |\tilde{\psi}\rangle. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Zustände mit Eigenwert 1 werden als exakt $\mathcal{PT}$ -symmetrisch bezeichnet. Die Freiheit der globalen Phase garantiert die Äquivalenz von $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Quantenmechanik und hermitescher Quantenmechanik [33].

4.2. Komplexe Potentiale

Die Forderung nach $\mathcal{PT}$ -Symmetrie bedeutet, dass der Hamiltonoperator die Kommutatorrelation

$$[\mathcal{PT}, \mathcal{H}] = \mathcal{PT}\mathcal{H} - \mathcal{H}\mathcal{PT} = 0 \quad (4.14)$$

erfüllen muss.

Für einen allgemeinen linearen Hamiltonoperator in Ortsdarstellung $\mathcal{H}_{\text{lin}} = -\Delta + V(\mathbf{x})$ mit dem komplexen Potential $V(\mathbf{x})$ folgt

$$\begin{aligned} [\mathcal{PT}, \mathcal{H}_{\text{lin}}] &= \mathcal{PT}(-\Delta + V(\mathbf{x})) - (-\Delta + V(\mathbf{x}))\mathcal{PT} \\ &= (-\Delta + V^*(-\mathbf{x}))\mathcal{PT} - (-\Delta + V(\mathbf{x}))\mathcal{PT} \\ &= (V^*(-\mathbf{x}) - V(\mathbf{x}))\mathcal{PT}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Damit lauten die Bedingungen an das Potential $V(\mathbf{x}) = V_1(\mathbf{x}) + iV_i(\mathbf{x})$,

$$V_1(\mathbf{x}) = V_1(-\mathbf{x}), \quad (4.16a)$$

$$V_i(\mathbf{x}) = -V_i(-\mathbf{x}). \quad (4.16b)$$

Für ein $\mathcal{PT}$ -symmetrisches System muss das Potential also eine symmetrische Funktion des Ortes im Realteil und eine antisymmetrische Funktion des Ortes im Imaginärteil sein.

4.2.1. Eigenschaften komplexer Potentiale

Eine fundamentale Eigenschaft der hermiteschen Quantenmechanik ist die Wahrscheinlichkeitserhaltung, gewährleistet durch Verwendung selbstadjungierter Hamiltonoperatoren. Wird die Forderung nach hermiteschen Operatoren verworfen, so existieren gemäß (4.16) komplexe Potentiale, sodass der Hamiltonoperator die schwächere Forderung nach $\mathcal{PT}$ -Symmetrie erfüllt.

Um die Auswirkung komplexer Potentiale zu untersuchen, wird die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho = \langle \psi | \psi \rangle$ eines Eigenzustandes $|\psi\rangle$ betrachtet,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \langle \dot{\psi} | \psi \rangle + \langle \psi | \dot{\psi} \rangle. \quad (4.17)$$

Mit der dimensionslosen zeitabhängigen Schrödingergleichung $i\partial_t |\psi\rangle = \mathcal{H} |\psi\rangle$ folgt

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = i \langle \mathcal{H} \psi | \psi \rangle - i \langle \psi | \mathcal{H} \psi \rangle. \quad (4.18)$$

Der Realteil des komplexen Potentials $V = V_1 + iV_i$ braucht nicht weiter beachtet zu werden, da durch die komplexe Konjugation der Bra-Vektoren in (4.18) nur das imaginäre Potential iV_i in beiden Termen dasselbe Vorzeichen besitzt. Durch Einsetzen des Hamiltonoperators $\mathcal{H} = -\Delta + iV_i$ ergibt sich im Ortsraum

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 2V_i |\psi(\mathbf{x})|^2 - i [(\Delta \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x})) - \psi^*(\mathbf{x}) (\Delta \psi(\mathbf{x}))]. \quad (4.19)$$

Der letzte Term in (4.19) gibt die Divergenz der dimensionslosen Wahrscheinlichkeitsstromdichte $\mathbf{j} = i(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$ an und somit gilt

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 2V_i \rho. \quad (4.20)$$

Für ein reelles Potential ist $V_i = 0$ und damit gibt (4.20) gerade die Kontinuitätsgleichung an. Durch die Verwendung komplexer Potentiale tritt ein zusätzlicher Term auf, der je nach Vorzeichen als Wahrscheinlichkeitsquelle oder Wahrscheinlichkeitessenke interpretiert werden kann.

4.2.2. Das $\mathcal{PT}$ -symmetrische Doppelmuldenpotential

In Abschnitt 4.2 wurde gezeigt, dass die GPE (2.5) nur dann $\mathcal{PT}$ -symmetrisch ist, wenn das Potential die Bedingungen (4.16) erfüllt, also bezüglich des Ortes $\mathbf{x}$ symmetrisch im Realteil und antisymmetrisch im Imaginärteil ist. Der Imaginärteil des Potentials führt gemäß (4.20) zu einer Zu- oder Abnahme von Aufenthaltswahrscheinlichkeit, wobei ein

positiver Imaginärteil eine Wahrscheinlichkeitsquelle, ein negativer Imaginärteil hingegen eine Wahrscheinlichkeitssenke darstellt. Die Verletzung der Wahrscheinlichkeitserhaltung kann für ein offenes System als Ein- und Auskopplung von Teilchen interpretiert werden [6]. Im Folgenden soll ein möglichst einfaches $\mathcal{PT}$ -symmetrisches System betrachtet werden.

Das Doppelmuldenpotential

$$V(\mathbf{x}) = \frac{1}{4} \left(x^2 + \omega^2 (y^2 + z^2) \right) + v_0 e^{-\sigma x^2} + i\gamma x e^{-\rho x^2} \quad (4.21)$$

aus [21] erfüllt offensichtlich die geforderten Eigenschaften, wenn alle Parameter reell sind. Im Realteil treten die Ortskoordinaten dann nur quadratisch auf, was einer geraden Funktion entspricht. Der Imaginärteil ist eine ungerade Funktion in x und unabhängig von y und z . Das $\mathcal{PT}$ -symmetrische Doppelmuldenpotential ist in Abbildung 4.1 in einer Dimension als Funktion von x , sowie zweidimensional als Funktion von x und y dargestellt.

Das Doppelmuldenpotential (4.21) stellt eine dreidimensionale harmonische Falle mit Fallenfrequenz 1 in x -Richtung und Fallenfrequenz ω in y - und z -Richtung dar. Die beiden Mulden sind in x -Richtung durch eine Gauß'sche Potentialbarriere mit Höhe v_0 und Breitenparameter σ getrennt. Der Einfluss des Imaginärteils ist durch den Gewinn-Verlust Parameter γ bestimmt, welche die Stärke der Ein- und Auskopplung von Teilchen angibt. Der Parameter ρ soll so gewählt werden, dass in einer Mulde eine Einkopplung von Teilchen, in der anderen Mulde eine Auskopplung stattfindet. Dazu werden die Extrema von Real- und Imaginärteil in x -Richtung bestimmt,

$$x_{\text{real}} = \pm \sqrt{\frac{\ln(4\sigma v_0)}{\sigma}}, \quad (4.22a)$$

$$x_{\text{imag}} = \pm \sqrt{\frac{1}{2\rho}}. \quad (4.22b)$$

Durch die Forderung $x_{\text{real}} = x_{\text{imag}}$, dass die Minima von Real- und Imaginärteil zusammen fallen, ergibt sich für den Parameter ρ ,

$$\rho = \frac{\sigma}{2 \ln(4\sigma v_0)}. \quad (4.23)$$

Das Doppelmuldenpotential ist rotationsinvariant um die x -Achse und entspricht in y - und z -Richtung dem Potential eines harmonischen Oszillators. Die höher angeregten Zustände des harmonischen Oszillators liegen weit über dem in dieser Arbeit betrachteten Energiebereich. Für kleine Nichtlinearitäten ist zu erwarten, dass dies auch für die Zustände in y - und z -Richtung eines BECs in einem Doppelmuldenpotential (4.21) zutrifft und somit keine Entartung auftritt.

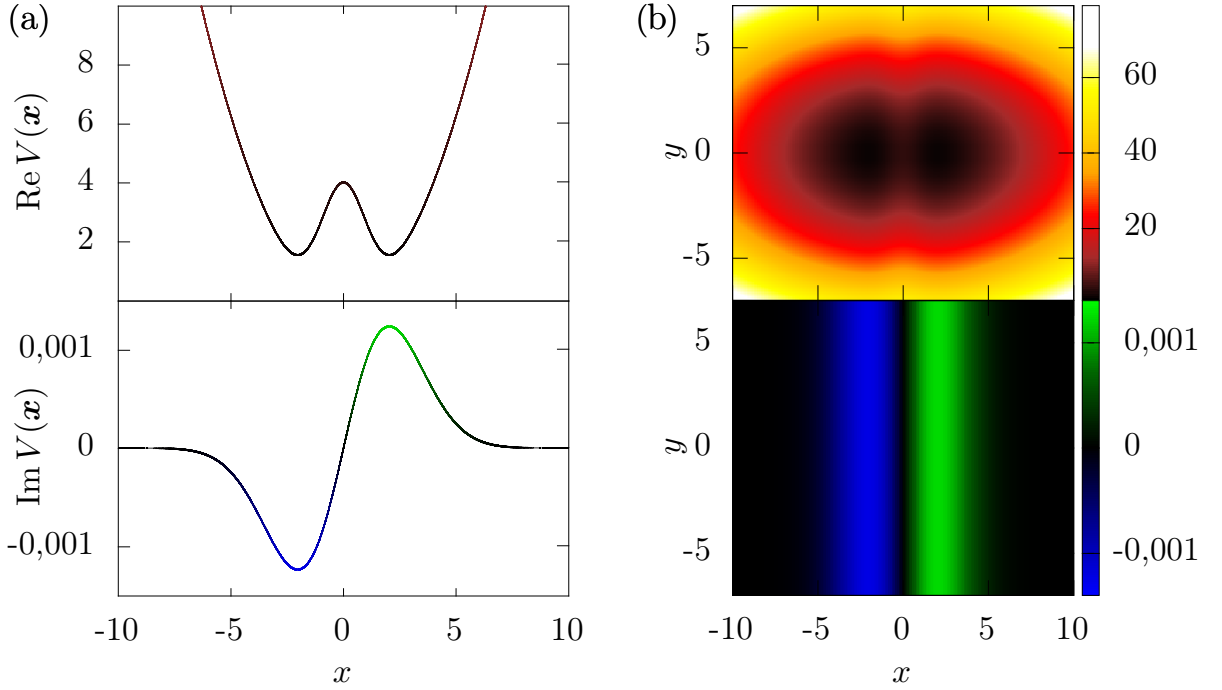


Abbildung 4.1: Das $\mathcal{PT}$ -symmetrische Doppelmuldenpotential (4.21) für $\omega = 2$, $v_0 = 4$, $\sigma = 1/2$ und ρ entsprechend (4.23). (a) Real- und Imaginärteil für $y = z = 0$. Der Realteil ist symmetrisch, der Imaginärteil antisymmetrisch. (b) Real- und Imaginärteil für $z = 0$. Der Realteil zeigt die Mulden, die durch eine Gauß'sche Potentialbarriere getrennt sind. Der Imaginärteil ist unabhängig von y und z und zeigt die Wahrscheinlichkeitsquelle in der rechten Mulde, sowie die Wahrscheinlichkeitssenke in der linken Mulde.

4.3. Nichtlineare Quantensysteme

In Abschnitt 4.2 wurden bereits die Bedingungen für das komplexe Potential eines linearen Hamiltonoperators festgelegt, sodass dieser mit dem $\mathcal{PT}$ -Operator vertauscht. Um nichtlineare $\mathcal{PT}$ -symmetrische Quantensysteme, beschrieben durch eine nichtlineare Gleichung wie die GPE, untersuchen zu können, muss dieselbe Forderung auch an den nichtlinearen Anteil des Hamiltonoperators gestellt werden. Es muss also gelten

$$[\mathcal{PT}, \mathcal{H}_{\text{nonlin}}] = 0. \quad (4.24)$$

Die Bedingung (4.24) ist erfüllt, wenn der nichtlineare Anteil des Hamiltonoperators unter Anwendung des $\mathcal{PT}$ -Operators invariant ist. Die Nichtlinearität $g|\psi|^2$ der GPE erfüllt diese Bedingung im Allgemeinen nicht, denn

$$\mathcal{PT} |\psi(\mathbf{x})|^2 = \mathcal{PT} (\psi(\mathbf{x})\psi^*(\mathbf{x})) = \psi^*(-\mathbf{x})\psi(-\mathbf{x}) = |\psi(-\mathbf{x})|^2. \quad (4.25)$$

Es existieren jedoch Wellenfunktionen, sodass $|\psi(\mathbf{x})|^2 = |\psi(-\mathbf{x})|^2$. Dies ist insbesondere für $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zustände erfüllt. Die $\mathcal{PT}$ -Symmetrie der GPE soll im folgenden Abschnitt diskutiert werden.

4.3.1. Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die GPE (2.5) erfüllt die $\mathcal{PT}$ -Symmetrie mit einem Potential der Form (4.16) und bestimmten Wellenfunktionen. Wie in Abschnitt 2.1 gezeigt, stellt das nichtlineare Betragsquadrat der GPE jedoch eine nichtanalytische Funktion dar. Dies ist auf die komplexe Konjugation zurückzuführen, über die das Betragsquadrat definiert ist. Um die GPE analytisch fortzusetzen, können die bikomplexen Zahlen aus KAPITEL 3 verwendet werden.

Zuerst soll lediglich das Betragsquadrat $|\psi|^2$ der Wellenfunktion ψ betrachtet werden. Das Betragsquadrat wird genau dann zu einer analytischen Funktion, wenn ψ und ψ^* unabhängige Funktionen darstellen, also

$$\psi(\mathbf{x}) \longrightarrow \varphi(\mathbf{x}), \quad (4.26a)$$

$$\psi^*(\mathbf{x}) \longrightarrow \vartheta(\mathbf{x}). \quad (4.26b)$$

Offensichtlich ist dies im Raum der komplexen Zahlen nicht möglich, da φ und ϑ dort durch die komplexe Konjugation $*$ verknüpft sind und das Betragsquadrat auf die reelle Achse abgebildet wird. Ist die Wellenfunktion jedoch eine bikomplexe Größe $\psi \in \mathbb{BC}$ so kann die Wellenfunktion durch die idempotenten Komponenten ψ_+ und ψ_- dargestellt werden,

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_+(\mathbf{x})e_+ + \psi_-(\mathbf{x})e_- . \quad (4.27)$$

Die komplexe Konjugation bewirkt nach (3.15) einen Tausch der Basiselemente e_+ und e_- und für das Betragsquadrat ergibt sich

$$|\psi(\mathbf{x})|^2 = \psi_+(\mathbf{x})\psi_-^*(\mathbf{x})e_+ + \psi_-(\mathbf{x})\psi_+^*(\mathbf{x})e_- . \quad (4.28)$$

Die komplexe Konjugation in der $+$ Komponente tritt nur bei ψ_- auf und umgekehrt. Mit der bikomplex erweiterten Wellenfunktion ψ ergibt sich aus der GPE (2.5)

$$\begin{aligned} & \left[-\Delta + \left(V_{\text{ext}}^+(\mathbf{x}) + g\psi_+\psi_-^* \right) e_+ + \left(V_{\text{ext}}^-(\mathbf{x}) + g\psi_-\psi_+^* \right) e_- \right] (\psi_+e_+ + \psi_-e_-) \\ & = \mu (\psi_+e_+ + \psi_-e_-) . \end{aligned} \quad (4.29)$$

Da μ den Eigenwert der bikomplexen Wellenfunktion ψ bezeichnet, muss nun auch μ eine bikomplexe Größe $\mu = \mu_+e_+ + \mu_-e_-$ sein. Mit (3.4c) folgt

$$\left[-\Delta + V_{\text{ext}}^+(\mathbf{x}) + g\psi_+\psi_-^* \right] \psi_+e_+ = \mu_+\psi_+e_+ , \quad (4.30a)$$

$$\left[-\Delta + V_{\text{ext}}^-(\mathbf{x}) + g\psi_-\psi_+^* \right] \psi_-e_- = \mu_-\psi_-e_- . \quad (4.30b)$$

Wenn die $\pm$ Koeffizienten derselben komplexen Ebene $\mathbb{C}_i$ oder $\mathbb{C}_j$ angehören, ergibt sich die erweiterte GPE in den $\pm$ Komponenten nach (3.10) durch einen Koeffizientenvergleich,

$$\left[-\Delta + V_{\text{ext}}^+(\mathbf{x}) + g\psi_+\psi_-^* \right] \psi_+ = \mu_+ \psi_+, \quad (4.31a)$$

$$\left[-\Delta + V_{\text{ext}}^-(\mathbf{x}) + g\psi_-\psi_+^* \right] \psi_- = \mu_- \psi_-. \quad (4.31b)$$

Diese gekoppelten Differentialgleichungen sind analytisch, die komplexe Konjugation wirkt auf die Wellenfunktion der jeweils anderen Komponente. Die $\pm$ Koeffizienten der idempotenten Darstellung sind gemäß (3.7) komplexe Zahlen aus $\mathbb{C}_i$ oder aus $\mathbb{C}_j$ gemäß (3.8). Durch die Wahl $\psi_{\pm} \in \mathbb{C}_j$ lassen sich komplexe Konjugationen nach i gänzlich vermeiden.

4.3.2. Symmetrien der Gross-Pitaevskii-Gleichung

Ausgehend von der GPE (2.5) sollen im Folgenden die Symmetriebeziehungen der bikomplexen GPE,

$$[-\Delta + V_{\text{ext}} + g\psi\psi^*] \psi = \mu\psi, \quad (4.32)$$

betrachtet werden. Hierbei beschränken wir uns auf nichtentartete Systeme. Wird ein Operator $\mathcal{O}$ auf die GPE (4.32) angewandt,

$$\mathcal{O}([-\Delta + V_{\text{ext}} + g\psi\psi^*] \psi) = \mathcal{O}(\mu\psi), \quad (4.33)$$

und die Wirkung des Operators auf die Wellenfunktion ψ sei durch $\mathcal{O}\psi = \tilde{\psi}$, die Wirkung auf den Eigenwert μ entsprechend durch $\mathcal{O}\mu = \tilde{\mu}$ gegeben, dann folgt

$$[-\Delta + V_{\text{ext}} + g\tilde{\psi}\tilde{\psi}^*] \tilde{\psi} = \tilde{\mu}\tilde{\psi}. \quad (4.34)$$

Der Laplace-Operator, das komplexwertige Potential V_{ext} und der Parameter g sollen invariant sein.

Durch Vergleich von (4.34) mit (4.32) können die folgenden Fälle unterschieden werden:

1. $\mu \neq \tilde{\mu}$,
 $\mathcal{O}\psi = \tilde{\psi}$ ist ein weiterer Eigenzustand der GPE mit Eigenwert $\mathcal{O}\mu = \tilde{\mu}$.
2. $\mu = \tilde{\mu}$,

Gleichung (4.34) muss in (4.32) übergehen, und damit

$$\tilde{\psi} = \epsilon\psi, \quad (4.35a)$$

$$\tilde{\psi}\tilde{\psi}^* = \psi\psi^*. \quad (4.35b)$$

Aus Gleichung (4.35a) geht hervor, dass die Wellenfunktion $\tilde{\psi}$ einen Eigenzustand zu $\mathcal{O}$ mit Eigenwert $\epsilon \in \mathbb{BC}$ darstellt. Durch Einsetzen von (4.35a) in (4.35b) ergibt sich die Bedingung $\epsilon\epsilon^* = 1$. Diese Forderung wird gerade durch eine Phase der Form (3.24) erfüllt,

$$\epsilon = e^\alpha e_+ + e^{-\alpha^*} e_-, \quad \alpha \in \mathbb{C}. \quad (4.36)$$

Wird hingegen ein Eigenzustand zu $\mathcal{O}$ in die GPE (4.34) eingesetzt, mit ϵ entsprechend (4.36), so zeigt ein erneuter Vergleich mit (4.32),

$$\tilde{\mu} = \mu, \quad (4.37)$$

Daher gilt die Äquivalenz

$$\mu = \tilde{\mu} \iff \mathcal{O}\psi = \epsilon\psi, \quad \epsilon = e^\alpha e_+ + e^{-\alpha^*} e_-. \quad (4.38)$$

Gleichung (4.35a) kann durch die Eigenschaften des Operators $\mathcal{O}$ noch weitere Einschränkungen an den Eigenwert ϵ liefern, jedoch muss die Bedingung (4.36) immer erfüllt sein.

$\mathcal{PT}$ -Symmetrie

Die GPE ist genau dann $\mathcal{PT}$ -symmetrisch, wenn das Potential die Bedingung (4.16) erfüllt. Durch die Wirkung des $\mathcal{PT}$ -Operators (4.8) bleiben der Laplace-Operator und der Parameter g wie gefordert invariant. Für $\mathcal{O} = \mathcal{PT}$ folgen

$$(\mathcal{PT}\mu)_\pm = \mu_\mp^*, \quad (4.39)$$

$$(\mathcal{PT}\psi(\mathbf{x}))_\pm = \psi_\mp^*(-\mathbf{x}), \quad (4.40)$$

in idempotenter Darstellung. Aufgrund der komplexen Konjugation durch den Zeitumkehroperator vertauschen die Basiselemente, $e_\pm \rightarrow e_\mp$ und man erhält Beziehungen zwischen den $+$ und $-$ Komponenten.

$$1. \quad \mu_\pm \neq \mu_\mp^*,$$

Es existiert ein weiterer Eigenzustand der GPE $(\mathcal{PT}\psi(\mathbf{x}))_\pm = \psi_\mp^*(-\mathbf{x})$ mit Eigenwert $\mu_\mp^*$.

$$2. \quad \mu_\pm = \mu_\mp^*,$$

Aus den Gleichungen (4.35) und (4.36) ist bekannt, dass sich $\psi(\mathbf{x})$ und $\psi^*(-\mathbf{x})$ nur um eine Phase unterscheiden dürfen. Der $\mathcal{PT}$ -Operator hat jedoch die Eigenschaft, dass eine zweimalige Anwendung den Ausgangszustand wiederherstellt. Deshalb muss auch

$$\mathcal{PT}(\mathcal{PT}(\psi(\mathbf{x}))) = \mathcal{PT}(\epsilon\psi_\pm(\mathbf{x})) = \epsilon\epsilon^*\psi(\mathbf{x}) \stackrel{!}{=} \psi(\mathbf{x}) \quad (4.41)$$

gelten. Die Phase (4.36) erfüllt diese Bedingung bereits, und es folgt aus (4.38) die Äquivalenz

$$\mu_{\pm} = \mu_{\mp}^* \quad \Leftrightarrow \quad \psi_{\mp}^*(-\mathbf{x}) = e^{\alpha_{\pm}} \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad \alpha_+ = -\alpha_-^*. \quad (4.42)$$

Für die $\mathcal{PT}$ -Symmetrie ist bereits bekannt, dass durch die globale Phase immer der Fall der exakten $\mathcal{PT}$ -Symmetrie mit $\alpha_{\pm} = 0$ gewählt werden kann, da der $\mathcal{PT}$ -Operator antilinear ist.

Weitere Symmetrien

Die bikomplexe GPE besitzt bikomplexe Eigenwerte und Eigenfunktionen, daher kann ähnlich der $\mathcal{PT}$ -Symmetrie aus Abschnitt 4.3.2 eine Symmetrie bezüglich der komplexen Konjugation (3.13b) nach j betrachtet werden [20]. Wird die komplexe Konjugation auf die GPE angewandt, so bleiben der Laplace-Operator, der Parameter g sowie das externe Potential unverändert, da diese keine bikomplexen Größen sind. Wie bei der komplexen Konjugation nach i findet bei der komplexen Konjugation nach j eine Vertauschung $e_{\pm} \rightarrow e_{\mp}$ statt. Falls die Koeffizienten der idempotenten Darstellung als komplexe Zahlen in $\mathbb{C}_i$ gewählt werden, besteht die Wirkung der komplexen Konjugation (3.13b) allein in der $e_{\pm}$ -Vertauschung. In der idempotenten Darstellung bedeutet dies, dass (4.31a) in (4.31b) übergeht und umgekehrt.

1. $\mu_{\pm} \neq \overline{\mu_{\mp}}$,

$\overline{\psi_{\mp}}(\mathbf{x})$ ist ein weiterer Eigenzustand der GPE mit dem nach j komplex konjugierten Eigenwert $\overline{\mu_{\mp}}$.

2. $\mu_{\pm} = \overline{\mu_{\mp}}$,

Per Definition muss die komplexe Konjugation nach j die Bedingung

$$\overline{\overline{\psi}} = \overline{\epsilon \psi} = \bar{\epsilon} \bar{\psi} = \bar{\epsilon} \epsilon \psi \stackrel{!}{=} \psi \quad (4.43)$$

erfüllen. Deshalb ist die sich aus (4.35) ergebende Phase (4.36) einer zusätzlichen Bedingung unterworfen,

$$\overline{(\psi(\mathbf{x}))}_{\pm} = \overline{\psi_{\mp}}(\mathbf{x}) = e^{\alpha_{\pm}} \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad \alpha_+ \stackrel{(4.36)}{=} -\alpha_-^*, \quad \alpha_+ \stackrel{(4.43)}{=} -\overline{\alpha_-}. \quad (4.44)$$

Daraus folgt $\alpha_{\pm} = \overline{\alpha_{\mp}}^*$ und daher ist die Bedingung (4.44) nur dann erfüllt, wenn die $\pm$ Komponenten von α , unabhängig von der Darstellung, nur einen Realteil besitzen. Daraus ergibt sich gemäß (4.38)

$$\mu_{\pm} = \overline{\mu_{\mp}} \quad \Leftrightarrow \quad \overline{\psi_{\mp}}(\mathbf{x}) = e^{\alpha_{\pm}} \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad \alpha_+ = -\alpha_- \in \mathbb{R}. \quad (4.45)$$

Ist ein Zustand symmetrisch bezüglich der kombinierten Wirkung des $\mathcal{PT}$ -Operators und der komplexen Konjugation nach j , sodass

$$(\mathcal{PT}\bar{\mu})_{\pm} = \bar{\mu}_{\pm}^*, \quad (4.46)$$

$$\left(\mathcal{PT}\overline{\psi(\mathbf{x})}\right)_{\pm} = \overline{\psi}_{\pm}^*(-\mathbf{x}), \quad (4.47)$$

dann tritt durch die bikomplexe Konjugation (3.13c) keine Vertauschung in den idempotenten Komponenten auf. Auch für diese Zustände muss

$$\left(\mathcal{PT}\overline{\mathcal{PT}\overline{\psi(\mathbf{x})}}\right)_{\pm} = \psi_{\pm}(\mathbf{x}) \quad (4.48)$$

gelten, wodurch sich eine zusätzliche Bedingung an die Wellenfunktionen ergibt,

$$\overline{\psi}_{\pm}^*(-\mathbf{x}) = e^{\alpha_{\pm}} \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad \alpha_{+} \stackrel{(4.36)}{=} -\alpha_{-}^*, \quad \alpha_{\pm} \stackrel{(4.48)}{=} -\overline{\alpha_{\pm}}^*. \quad (4.49)$$

Die Bedingung (4.49) für einen solchen Zustand wird nur durch diejenigen $\alpha_{\pm}$ erfüllt, welche keinen Realteil besitzen. Diese Zahlen liegen je nach Darstellung auf einer der beiden imaginären Achsen. Es gilt die Äquivalenz

$$\mu_{\pm} = \bar{\mu}_{\mp}^* \quad \Leftrightarrow \quad \overline{\psi}_{\pm}^*(-\mathbf{x}) = e^{\alpha_{\pm}} \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad \alpha_{+} = \alpha_{-}^* \in \mathbb{C} : \operatorname{Re} \alpha_{\pm} = 0. \quad (4.50)$$

5. Das zeitabhängige Variationsprinzip

Zur Lösung der zeitabhängigen GPE (2.6) wird in dieser Arbeit das von McLachlan vorgeschlagene zeitabhängige Variationsprinzip (*time-dependent variational principle*, TDVP) für zeitabhängige Schrödingergleichungen verwendet [37]. Das Ziel dieses TDVP ist die Vereinfachung einer partiellen Differentialgleichung auf einen Satz von Bewegungsgleichungen. Für komplexe Zahlen ist das TDVP mit einem Ansatz aus Gaußfunktionen bereits bekannt [38, 39]. Im Folgenden wird das TDVP für bikomplexe Zahlen in idempotenter Darstellung verallgemeinert. Zu diesem Zweck soll die dem zeitabhängigen Variationsprinzip zugrundeliegende Idee an dieser Stelle kurz dargelegt werden.

5.1. Variationsprinzip nach McLachlan

Als Ansatz wird eine Testwellenfunktion $\psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}, \mathbf{z}(t))$ verwendet, die durch den endlichen Satz zeitabhängiger Variationsparameter $\mathbf{z}(t)$ beschrieben wird und im Allgemeinen die zeitabhängige dimensionslose Schrödingergleichung $i\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \mathcal{H}\psi(\mathbf{x}, t)$ nicht erfüllt. Bei dem Variationsprinzip nach McLachlan muss das Funktional

$$I = \|i\varphi(t) - \mathcal{H}\psi(t)\|^2 \quad (5.1)$$

durch Variation der Wellenfunktion φ verschwinden und anschließend wird $\varphi = \partial_t\psi = \dot{\psi}$ gesetzt, wobei ψ als bekannt angenommen wird. Dies entspricht der Minimierung eines reellen Potentials. Mit den Wellenfunktionen $\psi = \psi_+e_+ + \psi_-e_-$, $\varphi = \varphi_+e_+ + \varphi_-e_-$ und dem Hamiltonoperator $\mathcal{H} = \mathcal{H}_+e_+ + \mathcal{H}_-e_-$ in idempotenter Darstellung lautet dieses Funktional

$$\begin{aligned} I &= \langle i\varphi_- - \mathcal{H}_-\psi_-(t) | i\varphi_+ - \mathcal{H}_+\psi_+(t) \rangle_{e_+} \\ &\quad + \langle i\varphi_+ - \mathcal{H}_+\psi_+(t) | i\varphi_- - \mathcal{H}_-\psi_-(t) \rangle_{e_-} \\ &= I_+e_+ + I_-e_- . \end{aligned} \quad (5.2)$$

Die Koeffizienten sind lediglich komplex konjugiert zueinander, sodass die Betrachtung des Funktional $\tilde{I} = I_+ = I_-^*$ die volle Information enthält. Es treten nur gewöhnliche komplexe Operationen innerhalb der $+$ und $-$ Komponenten auf, die durch komplexe

Konjugationen, beispielsweise durch Bra-Vektoren, gekoppelt werden. Für die Variation dieses Funktionals muss also gelten,

$$\begin{aligned}\delta\tilde{I} &= \langle i\delta\varphi_- | i\varphi_+ - \mathcal{H}_+\psi_+ \rangle + \langle i\varphi_- - \mathcal{H}_-\psi_- | i\delta\varphi_+ \rangle \\ &= \langle i\partial_{z_-}\psi_- | i\dot{\psi}_+ - \mathcal{H}_+\psi_+ \rangle \delta\dot{z}_- + \langle i\dot{\psi}_- - \mathcal{H}_-\psi_- | i\partial_{z_+}\psi_+ \rangle \delta\dot{z}_+.\end{aligned}\quad (5.3)$$

$\delta\dot{z}_+$ und $\delta\dot{z}_-$ sind unabhängig, sodass die Koeffizienten verschwinden müssen,

$$\langle \partial_{z_-}\psi_- | i\dot{\psi}_+ - \mathcal{H}_+\psi_+ \rangle = \langle i\dot{\psi}_- - \mathcal{H}_-\psi_- | \partial_{z_+}\psi_+ \rangle = 0. \quad (5.4)$$

Da sich diese Bedingungen lediglich durch eine Vertauschung von $+$ und $-$ unterscheiden, lässt sich eine kompakte Schreibweise verwenden,

$$\langle i\dot{\psi}_\mp - \mathcal{H}_\mp\psi_\mp | \partial_{z_\pm}\psi_\pm \rangle = 0. \quad (5.5)$$

Aus (5.4) folgt mit der Aufteilung des Hamiltonoperators in einen kinetischen und einen potentiellen Anteil, $\mathcal{H}_\pm = T + V_\pm$ mit $T = -\Delta$,

$$\langle \partial_{z_\mp}\psi_\mp | (i\partial_t - T)\psi_\pm \rangle = \langle \partial_{z_\mp}\psi_\mp | V_\pm\psi_\pm \rangle. \quad (5.6)$$

5.1.1. Gauß'sche Wellenpakete

Als Testwellenfunktion $\psi(t)$ wird im Folgenden eine Superposition aus N Gauß'schen Wellenpaketen verwendet,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_+(\mathbf{x}, t)e_+ + \psi_-(\mathbf{x}, t)e_-, \quad (5.7a)$$

$$\psi_\pm(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=1}^N e^{-\left((\mathbf{x}-\mathbf{q}_\pm^n)^T A_\pm^n (\mathbf{x}-\mathbf{q}_\pm^n) - i(\mathbf{p}_\pm^n)^T (\mathbf{x}-\mathbf{q}_\pm^n) + \varphi_\pm^n\right)} \quad (5.7b)$$

mit $A_\pm^n \in \mathbb{C}^{d \times d}$ symmetrisch, $\mathbf{q}_\pm^n, \mathbf{p}_\pm^n \in \mathbb{C}^d$ mit $\mathbf{q}_+^n = \mathbf{q}_-^n$, $\mathbf{p}_+^n = \mathbf{p}_-^n$ und $\varphi_\pm^n \in \mathbb{C}$. Eine Gaußfunktion besitzt jeweils für die $+$ und die $-$ Komponente (d^2+3d+2) reelle Parameter. Dabei sind die symmetrischen Matrizen $A_\pm^n$ die idempotenten Breitenparameter der Gaußfunktionen und legen deren Rotation im Raum fest. Die Vektoren $\mathbf{q}_\pm^n = \langle g_\mp^n | \hat{x} | g_\pm^n \rangle$ geben die räumliche Verschiebung der Gaußfunktion zum Ursprung an, die Vektoren $\mathbf{p}_\pm^n = \langle g_\mp^n | \hat{p} | g_\pm^n \rangle$ beschreiben den Impulserwartungswert. Der Realteil der $\varphi_\pm^n$ bestimmt die Amplitude der Wellenfunktion, der Imaginärteil die Phase. Es wurde bereits gezeigt, dass die Verwendung eines Ansatzes der Form (5.7), mit einer Überlagerung weniger Gaußfunktionen, gute Ergebnisse im Vergleich zu numerisch exakten Rechnungen liefert, mit deutlich geringerem Aufwand [21, 38–43].

Zur Vereinfachung der weiteren Gleichungen ist es sinnvoll, den Ansatz (5.7) auf die allgemeinere Form

$$\psi_\pm(\mathbf{x}, t) = \sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T A_\pm^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}_\pm^n)^T \mathbf{x} + c_\pm^n} \equiv \sum_{n=1}^N g_\pm^n \quad (5.8)$$

mit den unabhängigen idempotenten Komponenten $\mathbf{b}_+^n$ und $\mathbf{b}_-^n$ zu bringen. Die Transformationsvorschrift ist in Anhang A gegeben. Hierbei geht, bis auf die Breitenmatrix A , die physikalische Anschaulichkeit der Parameter verloren. Durch die Darstellung (5.8) werden in der weiteren Rechnung Real- und Imaginärteildarstellungen, bedingt durch die explizit auftretende imaginäre Einheit i , vermieden. Real- und Imaginärteil werden über die komplexe Konjugation definiert und bedeuten für die bikomplexen Zahlen einen Basiswechsel in der idempotenten Darstellung. Es ist daher hilfreich diese zu umgehen.

Da alle Parameter in (5.8) gewöhnliche komplexe Größen sind, muss für die Variation nach McLachlan die Gleichung (5.6) für den Ansatz (5.8) ausgewertet werden.

Die Ableitungen nach den Variationsparameter,

$$\frac{\partial \psi_{\pm}}{\partial \mathbf{z}_{\pm}} = \sum_{n=1}^N \frac{\partial g_{\pm}^n}{\partial \mathbf{z}_{\pm}^n}, \quad (5.9)$$

liefern für eine Gaußfunktion

$$\frac{\partial g_{\pm}^n}{\partial (A_{\pm}^n)_{\alpha\beta}} = -x_{\alpha} x_{\beta} g_{\pm}^n, \quad (5.10a)$$

$$\frac{\partial g_{\pm}^n}{\partial (b_{\pm}^n)_{\alpha}} = x_{\alpha} g_{\pm}^n, \quad (5.10b)$$

$$\frac{\partial g_{\pm}^n}{\partial c_{\pm}^n} = g_{\pm}^n. \quad (5.10c)$$

Außerdem muss der Ket-Vektor auf der linken Seite der Gleichung (5.6) berechnet werden. Dazu wird zuerst die Zeitableitung einer Gaußfunktion $g_{\pm}^n$ betrachtet,

$$\begin{aligned} \dot{g}_{\pm}^n &= \sum_{\alpha,\beta=1}^d (\dot{A}_{\pm}^n)_{\alpha\beta} \frac{\partial g_{\pm}^n}{\partial (A_{\pm}^n)_{\alpha\beta}} + \sum_{\alpha=1}^d (\dot{b}_{\pm}^n)_{\alpha} \frac{\partial g_{\pm}^n}{\partial (b_{\pm}^n)_{\alpha}} + \dot{c}_{\pm}^n \frac{\partial g_{\pm}^n}{\partial c_{\pm}^n} \\ &= \left(-\mathbf{x}^T \dot{A}_{\pm}^n \mathbf{x} + (\dot{\mathbf{b}}_{\pm}^n)^T \mathbf{x} + \dot{c}_{\pm}^n \right) g_{\pm}^n. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Mit dem kinetischen Anteil $T = -\Delta$ folgt

$$T g_{\pm}^n = -\Delta g_{\pm}^n = \left(2 \operatorname{Sp} A_{\pm}^n - 4 \left(\mathbf{x}^T (A_{\pm}^n)^2 - (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T A_{\pm}^n \right) \mathbf{x} - (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{b}_{\pm}^n \right) g_{\pm}^n. \quad (5.12)$$

Mit (5.11) und (5.12) ergibt sich schließlich

$$\begin{aligned} i \dot{g}_{\pm}^n - T g_{\pm}^n &= \left[-\mathbf{x}^T \left(i \dot{A}_{\pm}^n - 4 (A_{\pm}^n)^2 \right) \mathbf{x} + (i \dot{\mathbf{b}}_{\pm}^n - 4 A_{\pm}^n \mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{x} \right. \\ &\quad \left. + (i \dot{c}_{\pm}^n - 2 \operatorname{Sp} A_{\pm}^n + (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{b}_{\pm}^n) \right] g_{\pm}^n \end{aligned} \quad (5.13a)$$

$$\equiv \left[\mathbf{x}^T V_{2\pm}^n \mathbf{x} + \mathbf{v}_{1\pm}^{nT} \mathbf{x} + v_{0\pm}^n \right] g_{\pm}^n, \quad (5.13b)$$

5. Das zeitabhängige Variationsprinzip

Die komplexen zeitabhängigen Koeffizienten in (5.13b) können als effektives idempotentes Potential aufgefasst werden, in dem sich das Gauß'sche Wellenpaket zeitlich entwickelt.

Die Bewegungsgleichungen lauten dann

$$i\dot{A}_{\pm}^n = 4(A_{\pm}^n)^2 - V_{2\pm}^n, \quad (5.14a)$$

$$i\dot{\mathbf{b}}_{\pm}^n = 4A_{\pm}^n \mathbf{b}_{\pm}^n + \mathbf{v}_{1\pm}^n, \quad (5.14b)$$

$$i\dot{c}_{\pm}^n = 2\text{Sp } A_{\pm}^n - (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{b}_{\pm}^n + v_{0\pm}^n. \quad (5.14c)$$

Da die Matrizen $A_{\pm}^n$ symmetrisch sind, gilt dies auch für $V_{2\pm}^n$. Die Gleichung (5.6) lässt sich für den Ansatz (5.8) mit dem Potential

$$\begin{aligned} V &= V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + g |\psi(\mathbf{x})|^2 \\ &= \left(V_{\text{ext}}^+(\mathbf{x}) + g \psi_+(\mathbf{x}) \psi_-^*(\mathbf{x}) \right) e_+ \\ &\quad + \left(V_{\text{ext}}^-(\mathbf{x}) + g \psi_-(\mathbf{x}) \psi_+^*(\mathbf{x}) \right) e_- \end{aligned} \quad (5.15)$$

der GPE (2.5), wobei $g = 8\pi N_0 a$, und dem effektiven Potential (5.13) in eine kompakte Schreibweise bringen,

$$\begin{aligned} &\sum_{n=1}^N \left\langle x_{\alpha}^k x_{\beta}^l g_{\mp}^m \middle| \left(\mathbf{x}^T V_{2\pm}^n \mathbf{x} + \mathbf{v}_{1\pm}^{nT} \mathbf{x} + v_{0\pm}^n \right) g_{\pm}^n \right\rangle \\ &= \sum_{n=1}^N \left\langle x_{\alpha}^k x_{\beta}^l g_{\mp}^m \middle| \left(V_{\text{ext}}^{\pm}(\mathbf{x}) + g \psi_{\mp}(\mathbf{x})^* \psi_{\pm}(\mathbf{x}) \right) g_{\pm}^n \right\rangle, \end{aligned} \quad (5.16)$$

mit $\alpha, \beta = 1, \dots, d$, mit $m = 1, \dots, N$ und mit $k + l = 0, 1, 2$. Die Gleichungen (5.16) lassen sich als Matrixgleichungen

$$K_{\pm} \mathbf{v}_{\pm} = \mathbf{r}_{\pm} \quad (5.17)$$

darstellen. Dabei sind $\mathbf{v}_{\pm} = (v_{0\pm}^n, \mathbf{v}_{1\pm}^n, V_{2\pm}^n)$, die Vektoren mit den Koeffizienten des effektiven Potentials, die Lösungen dieser Matrixgleichungen. Die beiden Gleichungssysteme besitzen jeweils $N(d^2 + 3d + 2)$ Zeilen und Spalten.

Für die Gaußintegrale gilt

$$\left\langle g_{\mp}^m \middle| x_{\alpha} x_{\beta} g_{\pm}^n \right\rangle = \left(\left\langle g_{\pm}^n \middle| x_{\alpha} x_{\beta} g_{\mp}^m \right\rangle \right)^*, \quad (5.18)$$

sodass $K_{\pm}$ eine „idempotente Hermitizität“ erfüllen,

$$K_{\pm} = (K_{\mp}^*)^T \equiv (K_{\mp})^{\dagger}. \quad (5.19)$$

Die Lösungen der Gaußintegrale in $K_{\pm}$ und $\mathbf{r}_{\pm}$ sind im Anhang A.1 angegeben.

5.1.2. Symmetrien der Gauß'schen Parameter

In Abschnitt 4.3.2 wurden die Symmetrien der Wellenfunktionen diskutiert. Für den Ansatz aus gekoppelten Gaußfunktionen können nun die entsprechenden Relationen für die Gauß'schen Parameter abgelesen werden. Die Anwendung einer Symmetrieoperation auf einen Eigenzustand zum Symmetrieoperator $\mathcal{O}$ gemäß Abschnitt 4.3.2 liefert für den Ansatz (5.8) mit N Gaußfunktionen

$$\sum_{n=1}^N \mathcal{O} e^{-\mathbf{x}^T A_{\pm}^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{x} + c_{\pm}^n} = e^{\alpha_{\pm}} \sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T A_{\pm}^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{x} + c_{\pm}^n}, \quad (5.20)$$

wobei $\alpha = \alpha_+ e_+ + \alpha_- e_-$ eine Phase der Form (3.24) mit $\alpha_+ = -\alpha_-^*$ ist und weiteren Einschränkungen durch den Symmetrieoperator $\mathcal{O}$ unterliegen kann.

- Für $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zustände folgt aus (5.20) mit $\mathcal{O} = \mathcal{PT}$ die Bedingung

$$\sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T (A_{\mp}^n)^* \mathbf{x} - (\mathbf{b}_{\mp}^n)^*{}^T \mathbf{x} + (c_{\mp}^n)^*} = \sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T A_{\pm}^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{x} + (c_{\pm}^n + \alpha_{\pm})}. \quad (5.21)$$

Die Gaußfunktionen dürfen hierbei nicht alle in sich selbst übergehen. Wenn jede Gaußfunktion bei Anwendung des $\mathcal{PT}$ -Operators in sich selbst übergehen würde, so müsste jede Gaußfunktion zum Ursprung symmetrisch sein, wegen der Ortsspiegelung durch den Paritätsoperator. Durch Verwendung eines Doppelmuldenpotentials sind jedoch die meisten Gaußfunktionen in verschiedenen Mulden lokalisiert, diese müssen dann paarweise identisch sein. Weiterhin wird für die $\mathcal{PT}$ -Symmetrie keine weitere Forderung an den Phasenfaktor gestellt, sodass $e^{i\alpha} = e^{\tilde{\alpha}} e_+ + e^{-\tilde{\alpha}^*} e_-$ eine gewöhnliche freie Phase darstellt.

Die Symmetrien der Parameter ergeben sich direkt aus (5.21),

$$(A_{\mp}^n)^* = A_{\pm}^m, \quad (5.22a)$$

$$(\mathbf{b}_{\mp}^n)^* = -\mathbf{b}_{\pm}^m, \quad (5.22b)$$

$$(c_{\mp}^n)^* = c_{\pm}^m + \alpha_{\pm}, \quad (5.22c)$$

für Paare mit $n, m = 1, \dots, N$ und $\alpha_+ = -\alpha_-^*$ wegen (4.41) einer komplexen Zahl aus $\mathbb{C}_i$ oder $\mathbb{C}_j$. Für die Gaußfunktionen, die nicht am Ursprung lokalisiert sind, muss $n \neq m$ gelten.

- Für einen Zustand, der symmetrisch bezüglich der komplexen Konjugation nach j ist, folgt

$$\sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T \overline{A_{\mp}^n} \mathbf{x} + (\overline{\mathbf{b}_{\mp}^n})^T \mathbf{x} + \overline{c_{\mp}^n}} = \sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T A_{\pm}^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{x} + (c_{\pm}^n + \beta_{\pm})}. \quad (5.23)$$

Im Gegensatz zur $\mathcal{PT}$ -Symmetrie tritt hierbei keine Ortsspiegelung auf, sodass jede Gaußfunktion in sich selbst oder eine andere Gaußfunktion am selben Ort übergehen muss. Daraus folgen

$$\overline{A_{\pm}^n} = A_{\pm}^m, \quad (5.24a)$$

$$\overline{\mathbf{b}_{\pm}^n} = \mathbf{b}_{\pm}^m, \quad (5.24b)$$

$$\overline{c_{\pm}^n} = c_{\pm}^m + \beta_{\pm}, \quad (5.24c)$$

mit $n, m = 1, \dots, N$, wobei die n -te und m -te Gaußfunktion am selben Ort liegen und $\beta_+ = -\beta_-$ nach (4.44) reell ist.

- Für einen Zustand, der symmetrisch bezüglich der gleichzeitigen Wirkung von $\mathcal{PT}$ und der komplexen Konjugation nach j ist, gilt entsprechend

$$\sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T \left(\overline{A_{\pm}^n}\right)^* \mathbf{x} - \left(\overline{\mathbf{b}_{\pm}^n}\right)^{*T} \mathbf{x} + \left(\overline{c_{\pm}^n}\right)^*} = \sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T A_{\pm}^n \mathbf{x} + \left(\mathbf{b}_{\pm}^n\right)^T \mathbf{x} + (c_{\pm}^n + \gamma_{\pm})}. \quad (5.25)$$

Wie im rein $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Fall müssen die Gaußfunktionen paarweise identisch sein, wenn sie nicht zum Ursprung symmetrisch sind. Da hierbei gleichzeitig komplexe Konjugationen nach i und j auftreten, bleiben die Basiselemente $e_{\pm}$ invariant. Für die Parameter folgt

$$\left(\overline{A_{\pm}^n}\right)^* = A_{\pm}^m, \quad (5.26a)$$

$$\left(\overline{\mathbf{b}_{\pm}^n}\right)^* = -\mathbf{b}_{\pm}^m, \quad (5.26b)$$

$$\left(\overline{c_{\pm}^n}\right)^* = c_{\pm}^m + \gamma_{\pm}, \quad (5.26c)$$

für Paare mit $n, m = 1, \dots, N$. Gaußfunktionen, die nicht am Ursprung liegen müssen paarweise identisch sein, also $n \neq m$. Nach (4.49) muss für die Koeffizienten des Phasenfaktors $\gamma_+ = -\bar{\gamma}_-^*$ mit $\text{Re } \gamma_{\pm} = 0$ gelten, sodass diese rein imaginäre Zahlen bezüglich i oder j darstellen. Eine der komplexen Konjugationen in (5.26) entfällt immer, da die Koeffizienten entweder in $\mathbb{C}_i$ oder in $\mathbb{C}_j$ liegen.

5.1.3. Variationsparameter in drei Dimensionen

Von nun an wollen wir uns auf ein dreidimensionales System beschränken. Außerdem ist das $\mathcal{PT}$ -symmetrische Doppelmuldenpotential aus Abschnitt 4.2.2 rotationssymmetrisch. Dies ermöglicht die Reduzierung der Anzahl der Variationsparameter. Der verallgemeinerte Ansatz (5.8) aus zwei gekoppelten Gaußfunktionen soll nun ebenfalls eine Rotationsinvarianz um die x -Achse erfüllen,

$$\psi(\mathbf{x}, \mathbf{z}(t)) \stackrel{!}{=} \psi(R(\vartheta)\mathbf{x}, \mathbf{z}(t)), \quad (5.27)$$

wobei $R(\vartheta)$ eine reelle Drehmatrix um die x -Achse mit dem Winkel ϑ ist,

$$R(\vartheta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \vartheta & -\sin \vartheta \\ 0 & \sin \vartheta & \cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (5.28)$$

Durch die Bedingung (5.27) mit (5.28) ergeben sich für die Gauß'sche Parameter

$$A_{\pm}^n = R^T(\vartheta) A_{\pm}^n R(\vartheta), \quad (5.29a)$$

$$\mathbf{b}_{\pm}^n = R^T(\vartheta) \mathbf{b}_{\pm}^n. \quad (5.29b)$$

Gleichung (5.29a) zeigt, dass die Breitenmatrizen $A_{\pm}^n$ nur Diagonaleinträge besitzen, aus Symmetriegründen muss außerdem $(A_{\pm}^n)_{yy} = (A_{\pm}^n)_{zz}$ gelten, sodass

$$A_{\pm}^n = \begin{pmatrix} (A_{\pm}^n)_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & (A_{\pm}^n)_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & (A_{\pm}^n)_{yy} \end{pmatrix}. \quad (5.30)$$

Gleichung (5.29b) wiederum zeigt, dass die Vektoren $\mathbf{b}_{\pm}^n$ nur eine x -Komponente besitzen,

$$\mathbf{b}_{\pm}^n = \begin{pmatrix} (b_{\pm}^n)_x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.31)$$

Insgesamt reduziert sich die Zahl der komplexen idempotenten Parameter einer Gaußfunktion damit von 20 auf 8, es müssen also 16 reelle Komponenten variiert werden.

5.2. Stationäre Lösungen

Die zeitliche Entwicklung eines BECs wird durch die Bewegungsgleichungen (5.14) beschrieben. Um diese Entwicklung ausgehend von einem Startparametersatz $\mathbf{z}(t=0)$ iterativ zu berechnen, werden die Bewegungsgleichungen mit einem numerischen Integrationsverfahren aufintegriert. Dazu müssen in jedem Schritt die Matrixgleichung (5.17) aufgestellt und gelöst werden. Die Lösungen der dabei auftretenden Gaußintegrale sind im Anhang A.1 gegeben.

Eine notwendige Bedingung für das Auftreten stationärer Lösungen ist, dass die Zeitableitungen der Parameter $A_{\pm}^n$ und $\mathbf{b}_{\pm}^n$ in (5.14) verschwinden, die Parameter also zeitunabhängig sind. Aus der zeitabhängigen GPE (2.6) mit dem Ansatz (5.8) folgt dann für die idempotenten Komponenten

$$i \sum_{n=1}^N \dot{g}_{\pm}^n = i \sum_{n=1}^N \dot{c}_{\pm}^n \partial_{c_{\pm}^n} g_{\pm}^n = i \sum_{n=1}^N g_{\pm}^n \dot{c}_{\pm}^n \stackrel{!}{=} \mu_{\pm} \sum_{n=1}^N g_{\pm}^n. \quad (5.32)$$

Die Zeitableitungen der Parameter $c_{\pm}^n$ müssen für stationäre Lösungen alle gleich sein und entsprechen den idempotenten Komponenten des chemischen Potentials, $\dot{c}_{\pm}^n = -i\mu_{\pm}$ für $n = 1, \dots, N$. Für die Variation der idempotenten Parameter ergeben sich also im stationären Fall die hinreichenden Bedingungen

$$\dot{A}_{\pm}^n = 0, \dot{\mathbf{b}}_{\pm}^n = 0, n = 1, \dots, N, \quad (5.33a)$$

$$\dot{c}_{\pm}^n - \dot{c}_{\pm}^N = 0, n = 1, \dots, N - 1. \quad (5.33b)$$

Mit den in Abschnitt 5.1.3 diskutierten Symmetrien sind das $2(4N - 1)$ komplexe, also $(16N - 4)$ reelle Bedingungen. Dazu müssen ebensoviele Parameter variiert werden. Die stationären Lösungen sind durch das Nullstellenproblem (5.33) gegeben. Zur Bestimmung der stationären Zustände muss also im Allgemeinen eine $(16N - 4)$ -dimensionale Nullstellensuche durchgeführt werden. Durch die globale Phasenwahl der Quantenmechanik entfällt jedoch ein Parameter und ein weiterer durch die Normierungsbedingung,

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1. \quad (5.34)$$

Wird der Ansatz für die Wellenfunktion (5.8) umgeschrieben,

$$\psi(\mathbf{x}, t) = e^{c_{\pm}^N} \sum_{n=1}^N e^{-\mathbf{x}^T A_{\pm}^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}_{\pm}^n)^T \mathbf{x} + (c_{\pm}^n - c_{\pm}^N)}, \quad (5.35)$$

so kann die Normierungsbedingung (5.34) durch entsprechende Wahl der Realteile der $c_{\pm}^N$ erfüllt werden. Die Imaginärteile der $c_{\pm}^N$ stellen dann die globale Phase dar,

$$e^{c_{\pm}^N} \equiv e^{c_{\pm}^{\text{norm}} + i c_{\pm}^{\text{phase}}}. \quad (5.36)$$

Damit müssen also für die + und die - Komponente zusammen $(8N - 2)$ komplexe Parameter variiert werden,

$$A_{\pm}^n, \mathbf{b}_{\pm}^n, n = 1, \dots, N, \quad (5.37a)$$

$$(c_{\pm}^n - c_{\pm}^N), n = 1, \dots, N - 1, \quad (5.37b)$$

Für das bikomplexe Variationsprinzip in idempotenter Darstellung gehen also insgesamt $2(8N - 2)$ reelle Variationsparameter in die Nullstellensuche ein.

6. Eigenwertspektrum

Das in KAPITEL 5 vorgestellte zeitabhängige Variationsprinzip liefert einen Satz von Bewegungsgleichungen (5.14), den es für stationäre Zustände zu lösen gilt. Für die Testwellenfunktion wird der Ansatz (5.8) mit zwei gekoppelten Gaußfunktionen verwendet. Es wurde gezeigt, dass bereits zwei Gaußfunktionen eine gute Näherung darstellen und qualitativ präzise Ergebnisse liefern [21, 39]. Zusammen führt das für bikomplexe Parameter gemäß Abschnitt 5.2 für zwei Gaußfunktionen auf eine 28-dimensionale reelle Nullstellensuche. Dafür wird das modifizierte Powell-Hybridverfahren verwendet [44].

Ist ein stationärer Zustand erreicht, erfüllen also die Variationsparameter die Bedingungen (5.33), so ist das chemische Potential gegeben durch die negativen Zeitableitungen der Parameter $c_{\pm}^{1,2}$ der beiden Gaußfunktionen,

$$\mu_{\pm} = -i\dot{c}_{\pm}^1 = -i\dot{c}_{\pm}^2. \quad (6.1)$$

6.1. Reelles Eigenwertspektrum

Vor der Untersuchung der bikomplexen Zustände sollen die $\mathcal{PT}$ -symmetrischen stationären Zustände des Eigenwertspektrums für das reelle Potential mit $\gamma = 0$ aus [21] betrachtet werden. Zum besseren Verständnis werden die bekannten Ergebnisse hier noch einmal zusammengefasst.

In Abbildung 6.1 sind die vier reellen Zustände für einen verschwindenden Gewinn-Verlust Parameter ($\gamma = 0$) in Abhängigkeit der Nichtlinearität dargestellt. Zusätzlich existieren noch zwei *macroscopic quantum self-trapping* Zustände [45, 46], die hier jedoch nicht gezeigt oder behandelt werden. Die Nichtlinearität gibt die Stärke der Wechselwirkung der Kondensatteilchen an und wird durch den Nichtlinearitätsparameter Na beschrieben, der proportional zur Teilchenzahl und der Streulänge ist. In dieser Arbeit werden nur attraktive Wechselwirkungen mit $Na < 0$ betrachtet.

An den Bifurkationspunkten bei $Na \approx -1,35$ und $Na \approx -1,36$ entstehen jeweils zwei Zustände, wobei die Zustände bei $Na \approx -1,36$ eine gerade Parität, die Zustände bei $Na \approx -1,35$ eine ungerade Parität besitzen. Am Bifurkationspunkt sind die Zustände stark in den jeweiligen Mulden lokalisiert. Für stärkere attraktive Wechselwirkungen oder eine größere Teilchenzahl N kollabiert das Kondensat und es existieren keine Lösungen

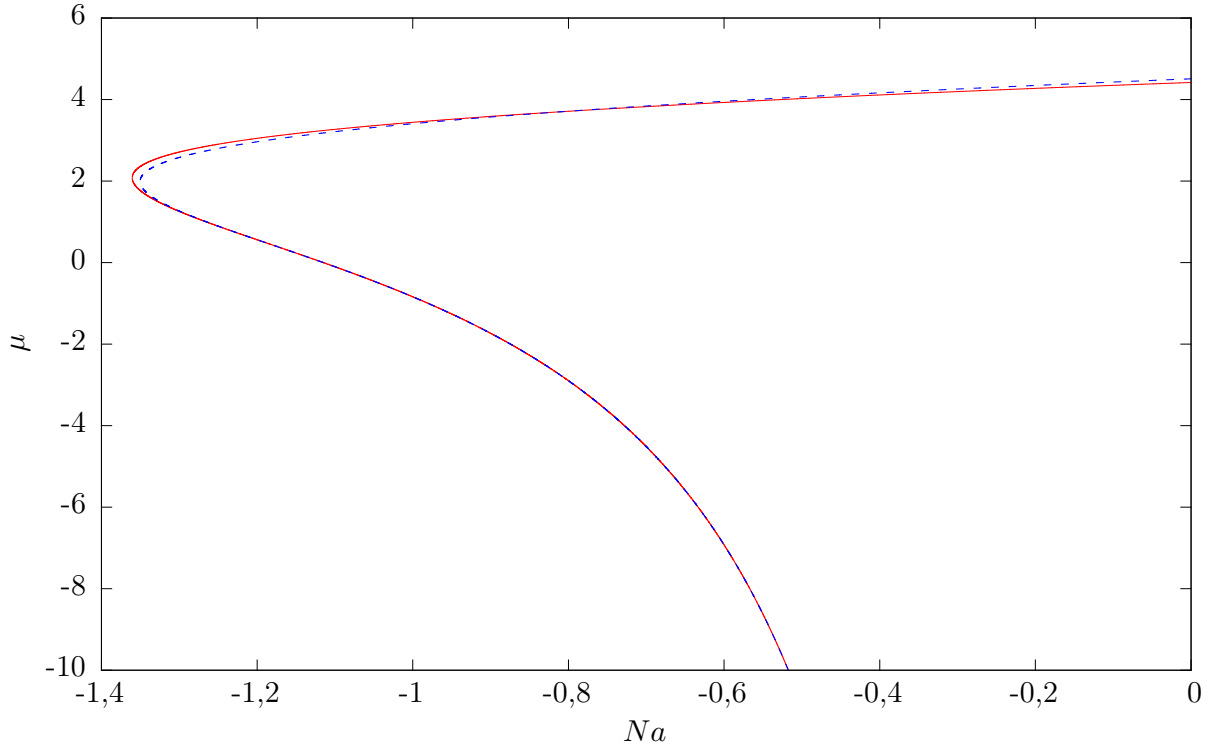


Abbildung 6.1: Das $\mathcal{PT}$ -symmetrische Eigenwertspektrum für einen verschwindenden Gewinn-Verlust Parameter $\gamma = 0$ zeigt vier Zustände, die paarweise eine Bifurkation bilden. Die oberen Zustände überkreuzen sich bei einem Nichtlinearitätsparameter $Na \approx -0,8$. Die *macroscopic quantum self-trapping* Zustände sind hier nicht dargestellt.

mehr [47, 48]. Für schwächere attraktive Wechselwirkungen überkreuzen sich die oberen Zustände bei $Na \approx -0,8$ und gehen für $Na \rightarrow 0$ in den Grundzustand und den ersten angeregten Zustand des Doppelmuldenpotentials über.

Für $\gamma \neq 0$ ändert sich das Eigenwertspektrum grundlegend, wie in Abbildung 6.2 für verschiedene Gewinn-Verlust Parameter gezeigt ist. Die zwei unteren, energetisch tieferen Zustände bilden nun eine Bifurkation, die oberen Zustände bleiben qualitativ gleich. Der Kreuzungspunkt bei $Na \approx -0,8$ ist nach wie vor vorhanden. Ist γ sehr klein, so verlaufen die Zustände erwartungsgemäß sehr ähnlich wie für ein verschwindendes γ . Für steigende Werte des Gewinn-Verlust Parameters nähert sich der neu hinzugekommene Bifurkationspunkt den anderen beiden Bifurkationen an. Für ausreichend große Werte von γ verschwinden die beiden rechten Bifurkationen und es existiert nur noch ein Bifurkationspunkt. Dieser verschiebt sich für einen steigenden Gewinn-Verlust Parameter hin zu größeren Parametern Na . Alle hier gezeigten Zustände besitzen reelle Eigenwerte, obwohl das Potential komplex ist.

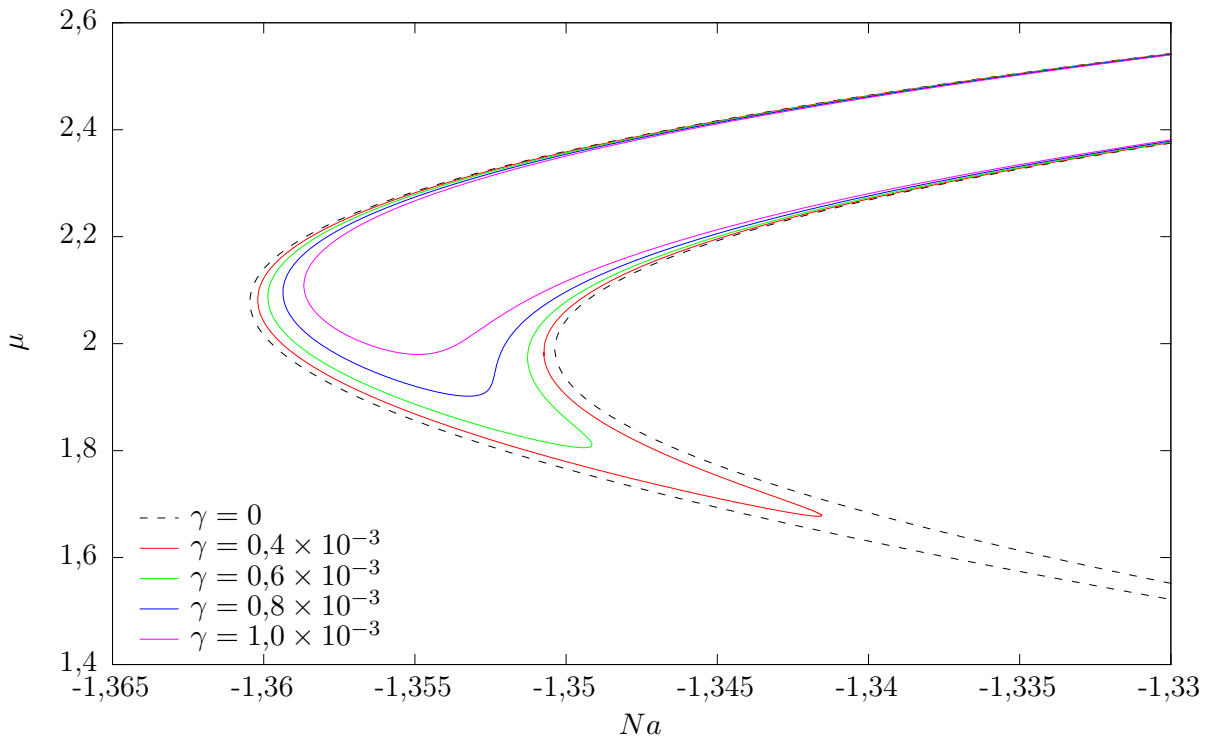


Abbildung 6.2: Das reelle Eigenwertspektrum der GPE für verschiedene Gewinn-Verlust Parameter γ in Abhängigkeit des Nichtlinearitätsparameters Na . Für ein imaginäres Potential bilden die Lösungen mit ursprünglich gerader und ungerade Parität eine zusätzliche Bifurkation. Im Grenzfall eines reellen Potentials ($\gamma = 0$) trennen sich die Lösungen und der Bifurkationspunkt verschwindet.

Um die Struktur des Eigenwertspektrums zu verstehen, wird die GPE analytisch fortgesetzt. Auf das Bifurkationsverhalten wird in KAPITEL 7 näher eingegangen.

6.2. Analytische Fortsetzung

Unter Abschnitt 2.2 wurde bereits anhand der Tangenten- und Heugabelbifurkation gezeigt, dass ein Verschwinden von Lösungen im Raum der reellen Zahlen von der Entstehung imaginärer Lösungen im Raum der komplexen Zahlen begleitet wird. Dieses Verhalten ist typisch für Funktionen, die nicht analytisch in einem bestimmten Raum, wie dem der reellen Zahlen, jedoch analytisch in einen allgemeineren Raum, wie dem der komplexen Zahlen, sind. Um das Bifurkationsszenario in Abbildung 6.2 verstehen zu können, muss also ein erweiterter Raum betrachtet werden. Der Quantenmechanik liegen bereits die komplexen Zahlen zugrunde. Das betrachtete Spektrum ist jedoch ausschließlich reell, sodass der Imaginärteil keine weiteren Informationen liefern kann.

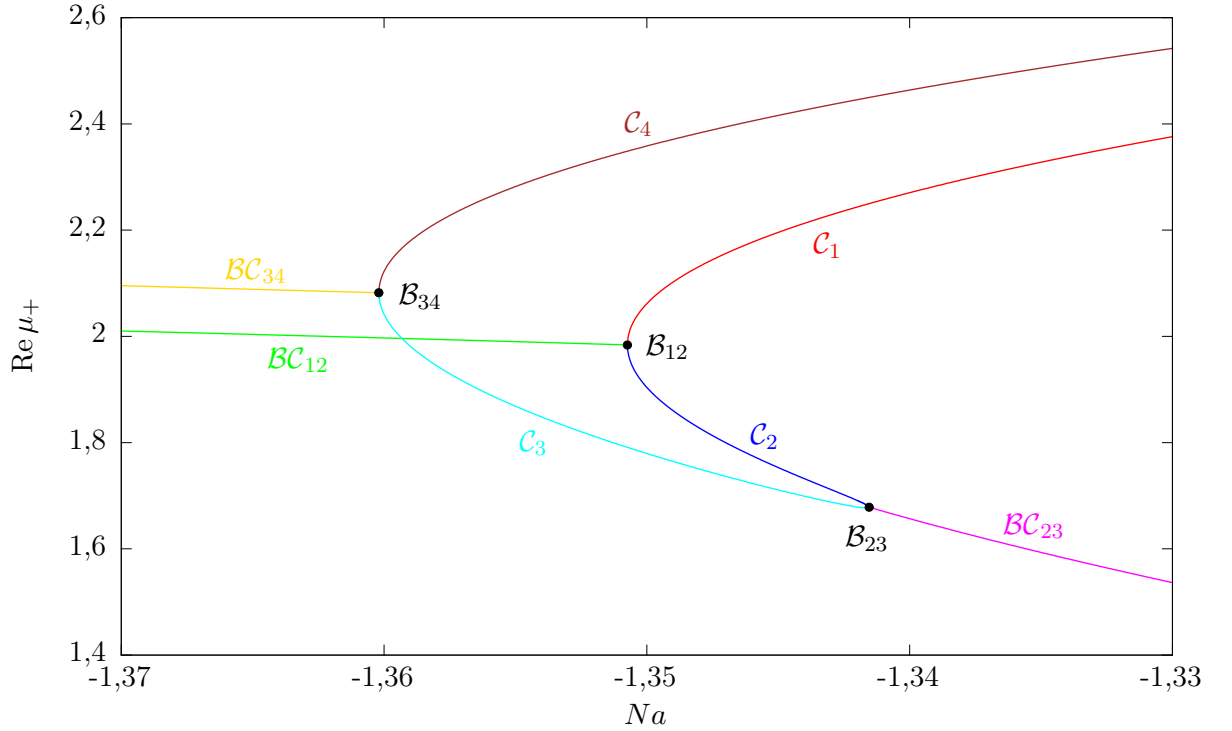


Abbildung 6.3: Realteil der + Komponente des bikomplexen Eigenwertspektrums in idempotenter Darstellung in Abhängigkeit des Nichtlinearitätsparameters Na bei $\gamma = 0,4 \times 10^{-3}$. Die gewöhnlichen komplexen Lösungen werden mit $\mathcal{C}$, die zusätzlichen, nur in bikomplexer Erweiterung existierenden Lösungen mit $\mathcal{BC}$ bezeichnet. Die bikomplexen Lösungen $\mathcal{BC}$ und die Bifurkationspunkte $\mathcal{B}$ erhalten einen Index, der angibt, welche komplexen Lösungen $\mathcal{C}$ an dieser Bifurkation beteiligt sind.

In KAPITEL 3 wurden die bikomplexen Zahlen als Verallgemeinerung der komplexen Zahlen vorgestellt und in KAPITEL 5 bereits auf das TDVP angewandt. Es wird nun das bikomplexe Eigenwertspektrum mit zusätzlichen, nur in der analytischen Fortsetzung existierenden Lösungen betrachtet.

Für die weiteren Betrachtungen ist es zur Übersichtlichkeit zweckmäßig, die einzelnen Zustände des Bifurkationsszenarios zu benennen. Abbildung 6.3 zeigt ein mögliches Namensschema. Dabei werden die in der gewöhnlichen komplexen TDVP existierenden Zustände mit $\mathcal{C}$ (*complex*) und die zusätzlichen bikomplexen Zustände mit $\mathcal{BC}$ (*bicomplex*) bezeichnet. Die Eigenwerte der Zustände $\mathcal{C}_1$ bis $\mathcal{C}_4$ sind weiterhin reell.

Jeweils zwei komplexe Zustände gehen an einem Bifurkationspunkt in zwei bikomplexe Zustände über, die im Realteil von $\mu_{\pm}$ identisch sind. Dabei erhalten der bikomplexe Zustand und der Bifurkationspunkt als Index die Nummern der beiden an der Bifurkation beteiligten komplexen Zustände. So gehen etwa die komplexen Lösungen $\mathcal{C}_1$ und $\mathcal{C}_2$ im Bifurkationspunkt $\mathcal{B}_{12}$ in die bikomplexen Lösungen $\mathcal{BC}_{12}$ über.

Die Vorteile der idempotenten Darstellung der bikomplexen Zahlen im Allgemeinen und zur Lösung der GPE wurden bereits ausführlich in den KAPITELN 3 und 5 sowie im Abschnitt 4.3.1 diskutiert. Gemäß (3.7) und (3.8) existieren zwei mögliche Arten der idempotenten Darstellung bezüglich unterschiedlicher imaginärer Einheiten. Obwohl diese im mathematischen Sinne gleichberechtigt sind, ist die imaginäre Einheit i im physikalischen Sinne dahingehend ausgezeichnet, dass die Wellenfunktionen weiterhin durch das Betragsquadrat $|\psi|^2 = \psi\psi^*$ bezüglich der komplexen Konjugation nach i normiert werden sollen. Außerdem tauchen explizit imaginäre Einheiten i im Potential (4.21) und den Bewegungsgleichungen (5.14) auf. Diese müssen ebenfalls in die idempotente Darstellung überführt werden,

$$i \longrightarrow ie_+ + ie_-, \quad (6.2a)$$

$$i \longrightarrow -je_+ + je_-. \quad (6.2b)$$

Die Darstellung bezüglich j erscheint verlockend, da komplexe Konjugationen nach i dann keinen Einfluss auf die Komponenten selbst nehmen, sondern lediglich die Basiselemente vertauschen. Jedoch muss beachtet werden, dass nach (6.2b) jede explizite imaginäre Einheit i mit verschiedenem Vorzeichen in die $\pm$ Komponenten eingeht. Diese Eigenschaft ist für die praktische Anwendung ungünstig. Wird hingegen die Darstellung der Komponenten als komplexe Zahlen bezüglich i verwendet, behalten alle Gleichungen in der bikomplexen Erweiterung ihre Form bei. Die komplexen Konjugationen nach i wirken dann auf alle idempotenten Koeffizienten und werden von einer Vertauschung $e_\pm \rightarrow e_\mp$ der idempotenten Basiselemente begleitet. Insbesondere gilt dann $V_{\text{ext}}^+ = V_{\text{ext}}^- = V_{\text{ext}}$, da $V_{\text{ext}} \in \mathbb{C}_i$, und die GPE in idempotenter Darstellung geht über in

$$[-\Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + g\psi_+\psi_-^*] \psi_+ = \mu_+ \psi_+, \quad (6.3a)$$

$$[-\Delta + V_{\text{ext}}(\mathbf{x}) + g\psi_-\psi_+^*] \psi_- = \mu_- \psi_-. \quad (6.3b)$$

Im Folgenden sind die $\pm$ Koeffizienten stets als komplexe Zahlen bezüglich i zu verstehen.

6.2.1. Bikomplexes Eigenwertspektrum in idempotenter Darstellung

Das bikomplexe Eigenwertspektrum wird durch den Real- und Imaginärteil der $\pm$ Komponenten in Abbildung 6.4 dargestellt. Für das Eigenwertspektrum gilt $\mu_+ = \mu_-^*$, wobei der Imaginärteil symmetrisch um $\mu = 0$ ist. Aus diesem Grund werden lediglich $\text{Re } \mu_+ = \text{Re } \mu_-$ und $\text{Im } \mu_+ = -\text{Im } \mu_-$ gezeigt. Die Erklärung hierfür folgt in Abschnitt 6.3.

Das erweiterte Spektrum in Abbildung 6.4 weist im Vergleich zu Abbildung 6.2 neue Lösungen auf, die einen nicht verschwindenden Imaginärteil besitzen. Zuerst soll wieder der Fall eines reellen Potentials ($\gamma = 0$) betrachtet werden. Die aus Abbildung 6.2 bereits bekannten komplexen Zustände $\mathcal{C}_1$ bis $\mathcal{C}_4$ sind unverändert. An den Bifurkationspunkten

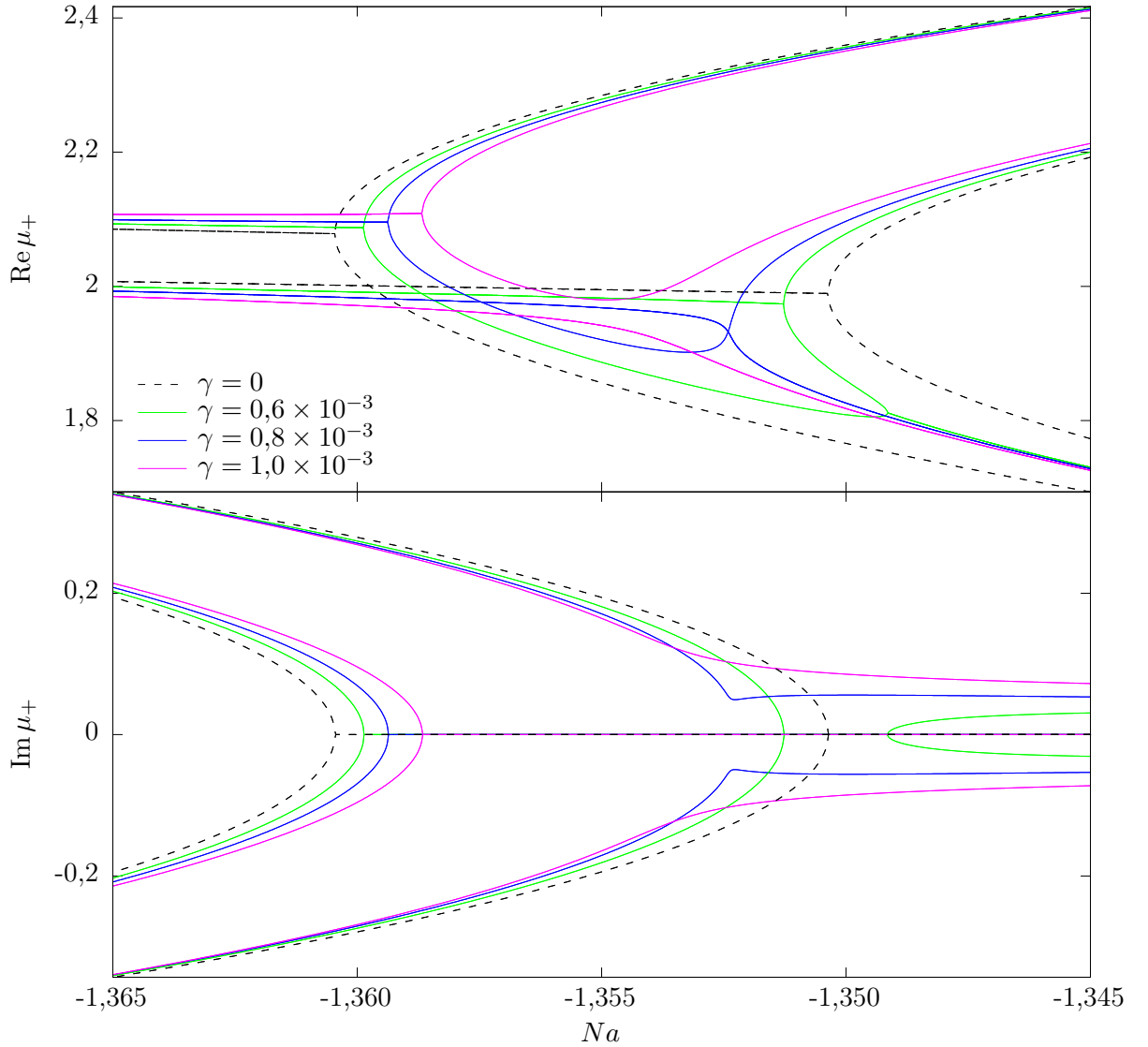


Abbildung 6.4: Das vollständig bikomplex erweiterte Eigenwertspektrum für verschiedene Gewinn-Verlust Parameter γ in Abhängigkeit des Nichtlinearitätsparameters Na . Es wird nur $\mu_+ = \mu_-^*$ dargestellt, der Imaginärteil ist symmetrisch um $\mu = 0$.

$\mathcal{B}_{12}$ bei $Na \approx -1,35$ und $\mathcal{B}_{34}$ bei $Na \approx -1,36$ spalten die bikomplexen Zustände $\mathcal{BC}_{12}$ und $\mathcal{BC}_{34}$ ab, die einen von Null verschiedenen Imaginärteil besitzen. Ein solcher bikomplexer Zustand umfasst selbst zwei im Realteil identische Lösungen mit verschiedenen Imaginärteilen. Dadurch ist die Anzahl der Zustände für jeden Wert von Na konstant 4. Die Bifurkationen zeigen das für Tangentenbifurkationen in analytischer Fortsetzung typische Verhalten, dargestellt in Abbildung 2.1. Der Bifurkationspunkt $\mathcal{B}_{23}$ sowie die bikomplexen Zustände $\mathcal{BC}_{23}$ existieren nicht, $\mathcal{C}_2$ und $\mathcal{C}_3$ bleiben also unabhängige Lösungen.

Werden Teilchen ein- und ausgekoppelt ($\gamma \neq 0$), so entsteht der neue Bifurkationspunkt $\mathcal{B}_{23}$ zwischen den Zuständen $\mathcal{C}_2$ und $\mathcal{C}_3$. Dort spalten sich die bikomplexen Zustände $\mathcal{BC}_{23}$ ab, die im Realteil in denselben Verlauf übergehen wie die Lösungen $\mathcal{C}_2$ und $\mathcal{C}_3$ für $\gamma = 0$. Auch die übrigen Eigenwerte nähern sich vor und hinter den Bifurkationen den Lösungen im Falle verschwindender Gewinne und Verluste an.

Für einen zunehmenden Gewinn-Verlust Parameter γ nähern sich die Bifurkationspunkte $\mathcal{B}_{12}$ und $\mathcal{B}_{23}$ einander an, bis sie auf einen Punkt fallen und dann verschwinden. Dabei entkoppeln die komplexen Zustände $\mathcal{C}_1$, $\mathcal{C}_2$ und $\mathcal{C}_3$ von den bikomplexen Lösungen $\mathcal{BC}_{12}$ und $\mathcal{BC}_{23}$. Dies ist insbesondere deutlich im Imaginärteil bei $\gamma = 0,8 \times 10^{-3}$ zu sehen. Die bikomplexen Lösungen $\mathcal{BC}_{12}$ und $\mathcal{BC}_{23}$ bilden ein Paar neuer bikomplexer Zustände, die an keiner Bifurkation beteiligt sind und ohne analytische Fortsetzung nicht existieren. Dieses Lösungspaar kreuzt die komplexen Lösungen im Realteil, jedoch nicht im Imaginärteil, die Zustände sind also völlig getrennt. Für einen noch stärkeren Gewinn-Verlust Parameter entfernen sich die Zustände voneinander, sowohl im Real- als auch im Imaginärteil.

6.3. Symmetrien

Die idempotenten Komponenten sind festgelegt als Elemente aus $\mathbb{C}_i$. Die in Abschnitt 4.3.2 diskutierten Symmetrien können also dahingehend vereinfacht werden, dass die komplexen Konjugationen nach j nun keinen Einfluss auf die $\pm$ Koeffizienten haben, sondern nur noch als $e_{\pm}$ Vertauschung wirken. Die relevanten Symmetriebedingungen sollen an dieser Stelle noch einmal für eine Wellenfunktion aus zwei gekoppelten Gaußfunktionen rekapituliert werden. Anstatt der Parameter c^1 und c^2 wird nur deren Differenz betrachtet, diese ist entsprechend (5.35) von der Wahl der Phase sowie der Normierung unabhängig. Für die Wellenfunktionen wird die globale Phase im Folgenden so gewählt, dass der Eigenwert bezüglich einer Symmetrieoperation stets 1 ist.

- Aufgrund der Paritätsspiegelung durch den $\mathcal{PT}$ -Operator müssen die Gaußfunktionen aus unterschiedlichen Mulden ineinander übergehen. Für zwei Gaußfunktionen ist das nur möglich, wenn die Gaußfunktionen paarweise identisch sind. Für die $\mathcal{PT}$ -Symmetrie folgt dann

$$\mu_{\pm} = \mu_{\mp}^* \quad \Leftrightarrow \quad \psi_{\mp}^*(-\mathbf{x}) = \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad (6.4a)$$

$$(A_{\mp}^1)^* = A_{\pm}^2, \quad (6.4b)$$

$$(b_{\mp}^1)^* = -b_{\pm}^2, \quad (6.4c)$$

$$(c_{\mp}^1 - c_{\mp}^2)^* = -(c_{\pm}^1 - c_{\pm}^2). \quad (6.4d)$$

- Die komplexen Konjugationen nach j bewirken eine Vertauschung der Elemente $e_{\pm}$, sodass lediglich die idempotenten Komponenten der GPE (4.31) vertauscht werden. Die beiden Gaußfunktionen müssen jeweils in sich selbst übergehen. Übertragen auf die Parameter lautet die Symmetrie bezüglich der $e_{\pm}$ Vertauschung also

$$\mu_{\pm} = \mu_{\mp} \quad \Leftrightarrow \quad \psi_{\mp}(\mathbf{x}) = \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad (6.5a)$$

$$A_{\mp}^n = A_{\pm}^n, \quad (6.5b)$$

$$\mathbf{b}_{\mp}^n = \mathbf{b}_{\pm}^n, \quad (6.5c)$$

$$(c_{\mp}^1 - c_{\mp}^2) = (c_{\pm}^1 - c_{\pm}^2), \quad (6.5d)$$

für $n = 1, 2$. Diese Symmetrie soll im Folgenden als „ $\pm$ Symmetrie“ bezeichnet werden.

- Sind die Zustände symmetrisch bezüglich der gleichzeitigen Wirkung des $\mathcal{PT}$ -Operators sowie der $\pm$ Vertauschung, so tritt im Gegensatz zum $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Fall eine zweifache Vertauschung der Basiselemente auf,

$$\mu_{\pm} = \mu_{\pm}^* \quad \Leftrightarrow \quad \psi_{\pm}^*(-\mathbf{x}) = \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad (6.6a)$$

$$(A_{\pm}^1)^* = A_{\pm}^2, \quad (6.6b)$$

$$(\mathbf{b}_{\pm}^1)^* = -\mathbf{b}_{\pm}^2, \quad (6.6c)$$

$$(c_{\pm}^1 - c_{\pm}^2)^* = -(c_{\pm}^1 - c_{\pm}^2). \quad (6.6d)$$

Diese Symmetrie wird fortan als $\mathcal{PT}_{\pm}$ Symmetrie bezeichnet. Die Bedingung (6.6a) zeigt, dass $\mathcal{PT}_{\pm}$ symmetrische Zustände nur reelle Energieeigenwertkomponenten besitzen. Auch die weiteren Parameter sind entweder reell oder rein imaginär.

In Abbildung 6.5 ist das chemische Potential für zwei verschiedene Gewinn-Verlust Parameter dargestellt. In den Abbildungen 6.5 – 6.9 sind die $\mathcal{PT}_{\pm}$ symmetrischen Lösungen durchgezogen, die Lösungen mit $\text{Im } \mu_{+} < 0$ gestrichelt und die Lösungen mit $\text{Im } \mu_{+} > 0$ gepunktet dargestellt, um eine Überprüfung der Symmetrien zu ermöglichen. Man erkennt, dass für alle Zustände $\mu_{+} = \mu_{-}^*$ gilt. Die Realteile stimmen also überein, während die Imaginärteile umgekehrtes Vorzeichen haben. Dies zeigt, dass alle Lösungen $\mathcal{PT}$ -symmetrisch sind. Es ist leicht zu erkennen, dass nur diejenigen Lösungen zusätzlich eine Symmetrie bezüglich einer Vertauschung der $\pm$ Komponenten besitzen, die einen verschwindenden Imaginärteil besitzen. Diese entsprechen genau den komplexen Lösungen $\mathcal{C}_1$ bis $\mathcal{C}_4$ aus Abbildung 6.2, die bereits ohne bikomplexe Erweiterung existieren. Die zusätzlichen bikomplexen Lösungspaare $\mathcal{BC}_{12}$, $\mathcal{BC}_{23}$ und $\mathcal{BC}_{34}$ brechen diese $\pm$ Symmetrie und gehen durch Vertauschung der idempotenten Komponenten ineinander über. Das heißt, wenn ein bikomplexer Zustand $\psi = \psi_{+}e_{+} + \psi_{-}e_{-}$ mit Eigenwert $\mu = \mu_{+}e_{+} + \mu_{-}e_{-}$ bekannt ist, so stellt auch $\tilde{\psi} = \psi_{-}e_{+} + \psi_{+}e_{-}$ mit Eigenwert $\tilde{\mu} = \mu_{-}e_{+} + \mu_{+}e_{-}$ eine Lösung dar.

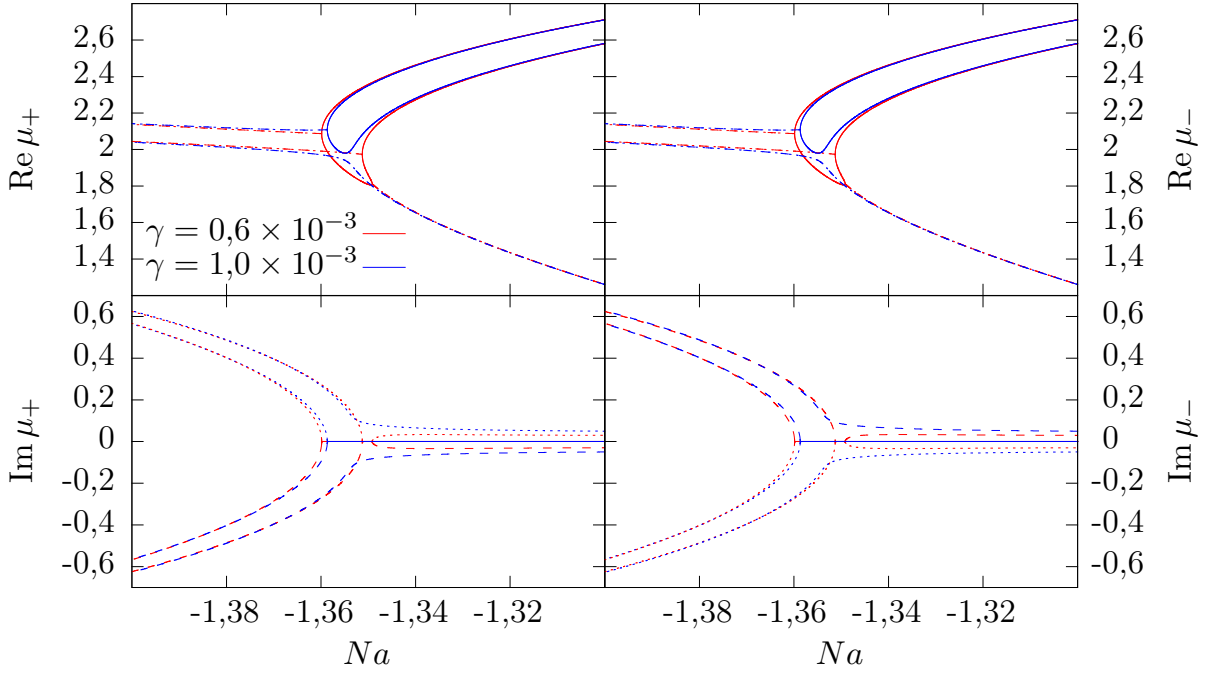


Abbildung 6.5: Das chemische Potential in idempotenter Darstellung für $\gamma = 0,6 \times 10^{-3}$ und $\gamma = 1,0 \times 10^{-3}$ mit unterschiedlichem Verhalten. Die $\mathcal{PT}_{\pm}$ symmetrischen Zustände sind durchgezogen dargestellt. Die $\mathcal{PT}_{\pm}$ gebrochenen Zustände mit $\text{Im } \mu_{+} < 0$ sind gestrichelt und mit $\mu_{+} > 0$ gepunktet dargestellt und zeigen die Symmetrien zwischen den $\pm$ Komponenten auf.

6.4. Gauß'sche Parameter

Die weiteren Gauß'schen Parameter sind in den Abbildungen 6.6 – 6.9 dargestellt, wobei für die Parameter c^1 und c^2 nur die Differenz gezeigt wird. Entsprechend (5.35) ist diese Differenz unabhängig von der spezifischen Norm- und Phasenwahl. Man kann leicht überprüfen, dass auch die Gauß'schen Parameter die Bedingungen (6.4) für die $\mathcal{PT}$ -Symmetrie erfüllen. Eine $\pm$ Symmetrie besitzen wiederum nur die Lösungen mit einem verschwindenden Imaginärteil in den Parametern $A_{\pm}^{1,2}$ und $\mathbf{b}_{\pm}^{1,2}$ und einem verschwindendem Realteil in den Differenzen $(c_{\pm}^1 - c_{\pm}^2)$. Diese Zustände erfüllen folglich auch die Bedingungen (6.6) für die $\mathcal{PT}_{\pm}$ Symmetrie.

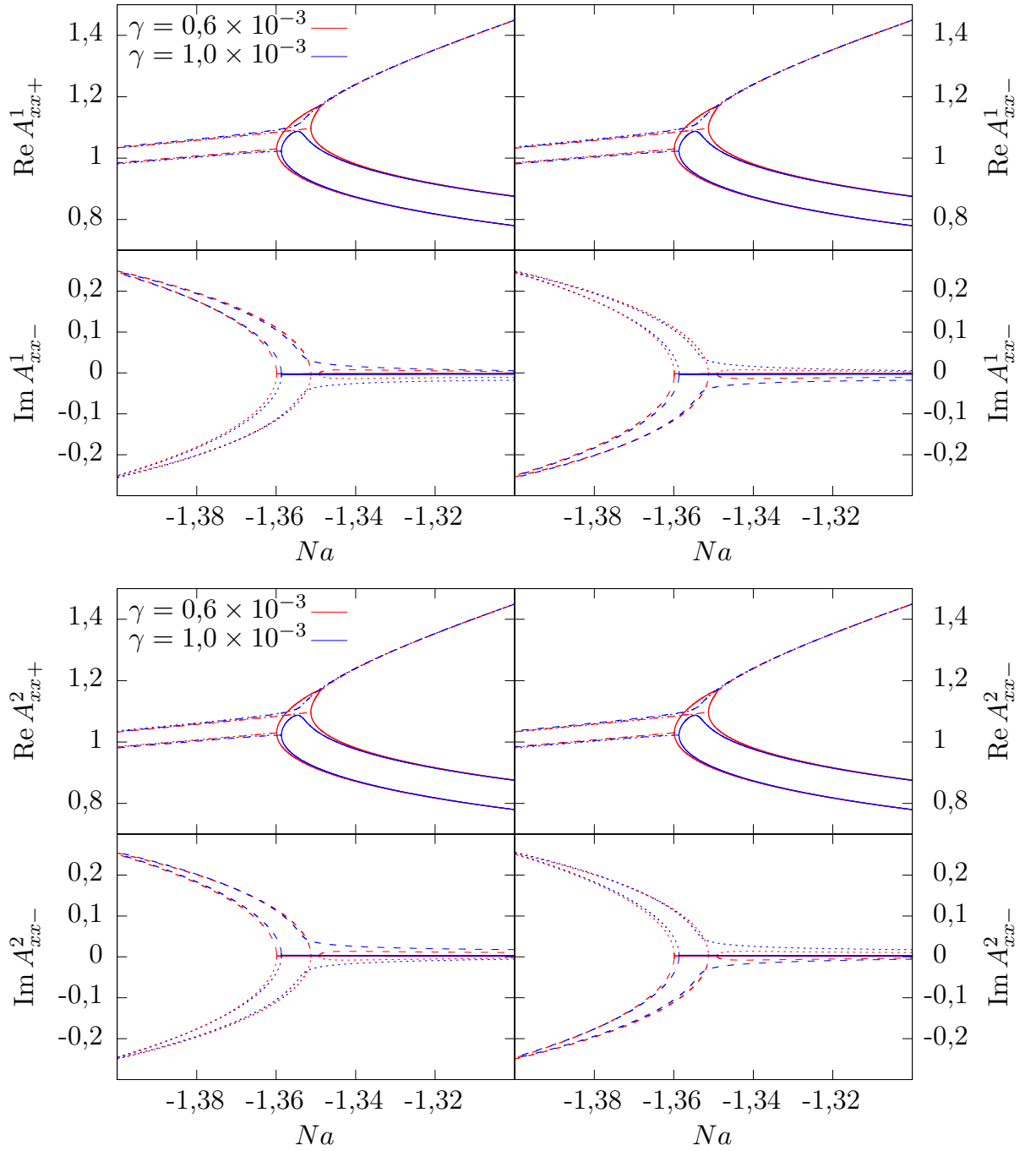


Abbildung 6.6: Die xx -Komponenten der Breitenparameter A der beiden Gaußfunktionen in idempotenter Darstellung weisen dieselben Bifurkationen auf wie das Eigenwertspektrum. Alle Zustände sind $\mathcal{PT}$ -symmetrisch, sodass jeweils die $+$ und die $-$ Komponente der verschiedenen Gaußfunktionen komplex konjugiert zueinander sind. Die $\mathcal{PT}_{\pm}$ symmetrischen Zustände besitzen keinen Imaginärteil. Damit die Symmetrien erkennbar werden, sind die $\mathcal{PT}_{\pm}$ gebrochenen Zustände mit $\text{Im } \mu_{+} < 0$ ($\text{Im } \mu_{+} > 0$) gestrichelt (gepunktet) dargestellt.

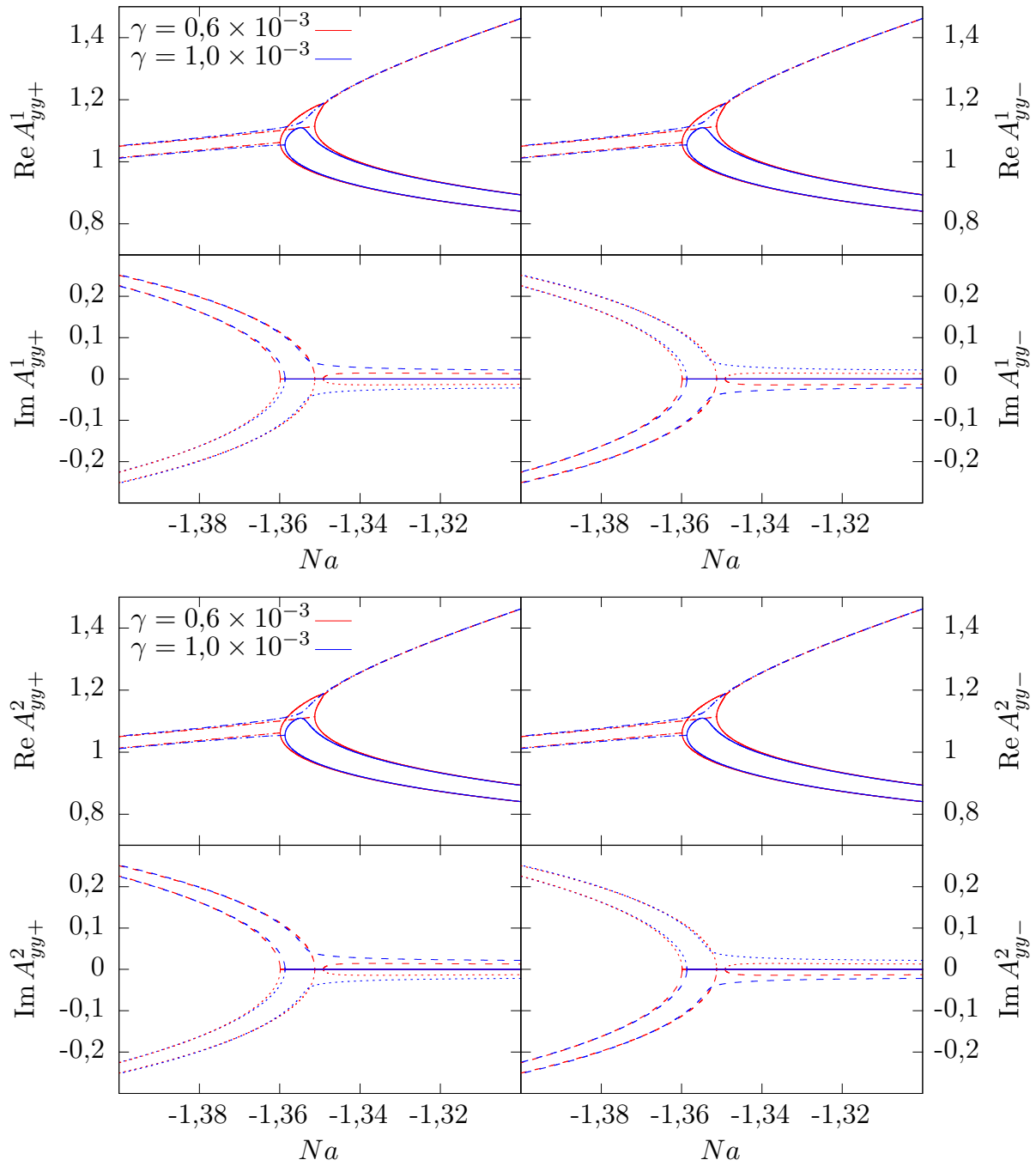


Abbildung 6.7: Die yy -Komponenten der Breitenparameter A der beiden Gaußfunktionen in idempotenter Darstellung verhalten sich analog zu den xx -Komponenten aus Abbildung 6.6.

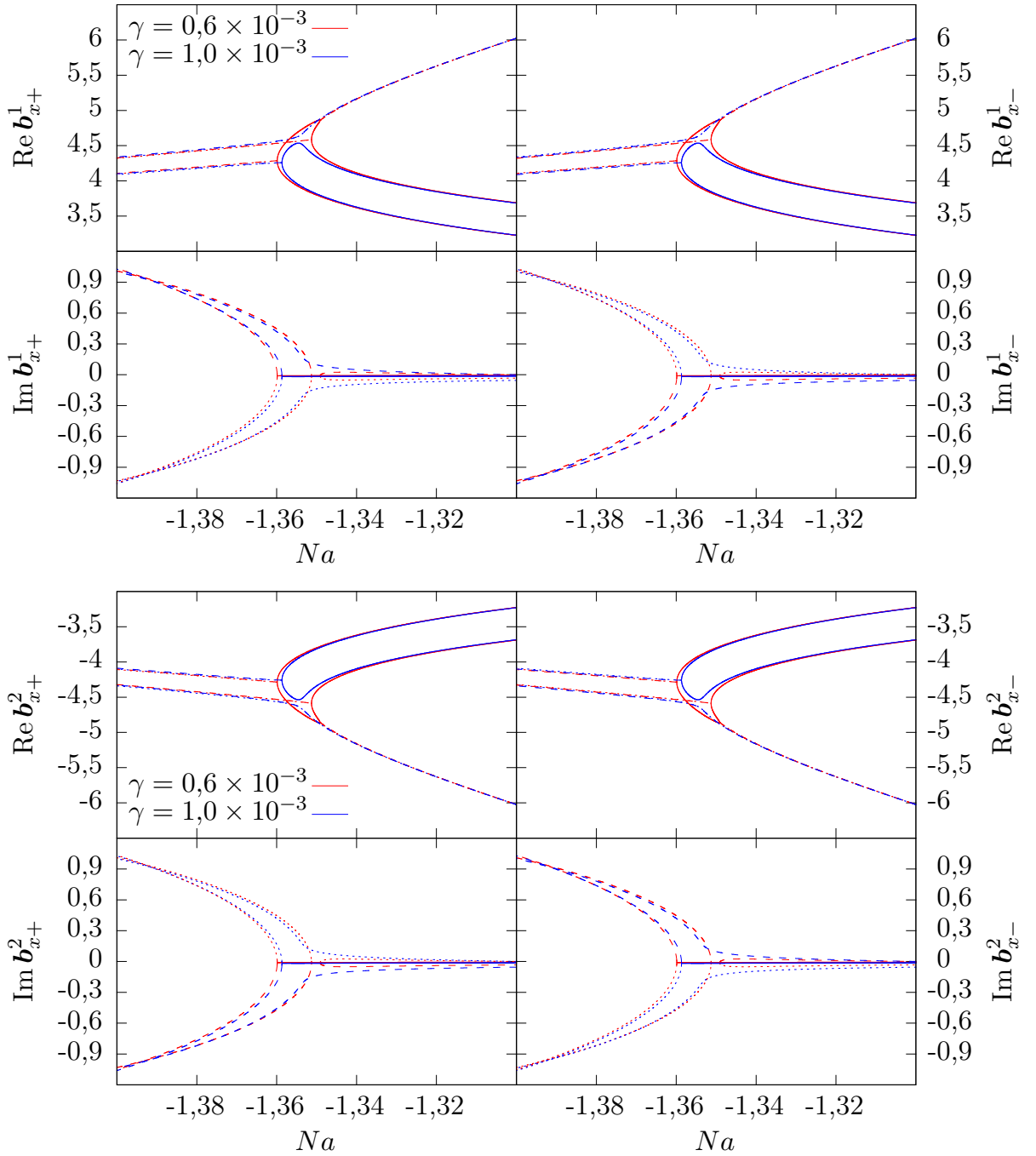


Abbildung 6.8: Die x -Komponente des Parameters $\mathbf{b}$ für die beiden Gaußfunktionen in idempotenter Darstellung weisen dieselben Bifurkationen auf wie die übrigen Parameter. Alle Zustände sind $\mathcal{PT}$ -symmetrisch, die $+$ Komponente ist das negativ komplex Konjugierte der $-$ Komponente bei unterschiedlichen Gaußfunktionen. Wie zuvor besitzen die $\mathcal{PT}_{\pm}$ symmetrischen Zustände keinen Imaginärteil und die $\mathcal{PT}_{\pm}$ gebrochenen Zustände mit $\text{Im } \mu_+ < 0$ ($\text{Im } \mu_+ > 0$) sind gestrichelt (gepunktet) dargestellt.

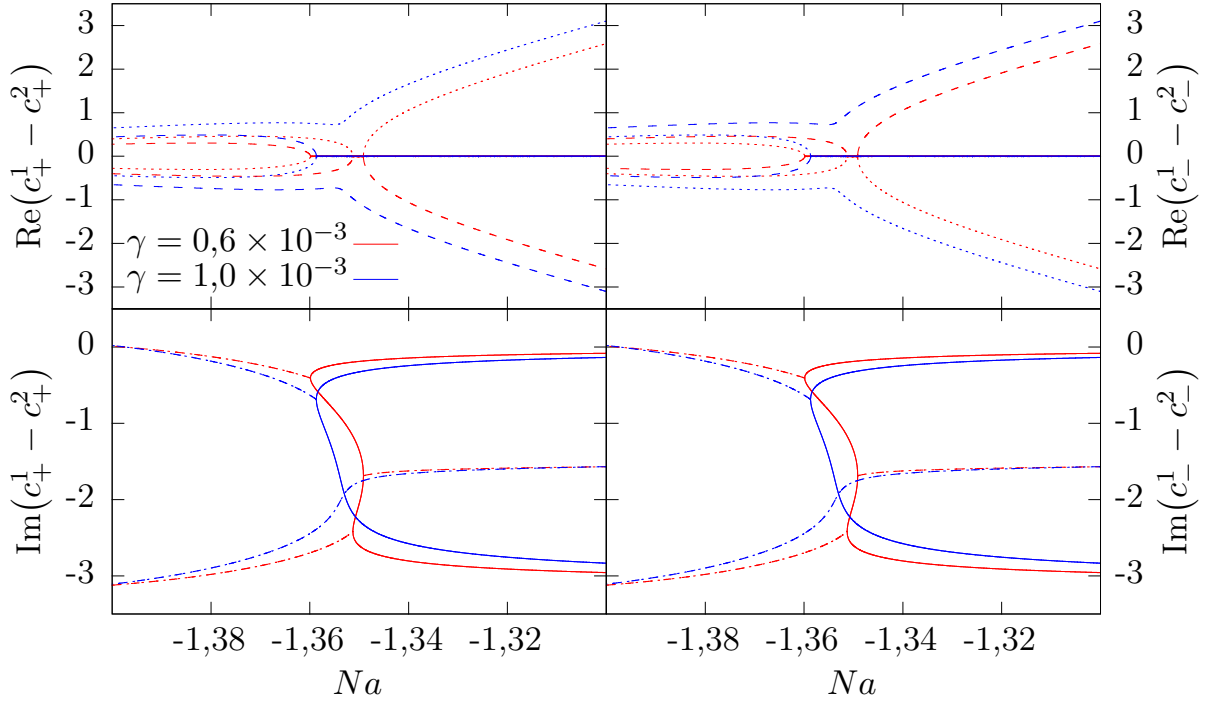


Abbildung 6.9: Die Differenzen der Gauß'schen Parameter $c_{\pm}^{1,2}$ weisen erwartungsgemäß wiederum dasselbe Bifurkationsszenario auf. Durch die Differenzbildung ist die Darstellung unabhängig von der Normierung und der spezifischen Wahl der globalen Phase. Die $+$ Komponenten sind negativ komplex konjugiert zu den $-$ Komponenten und somit $\mathcal{PT}$ -symmetrisch. Die $\mathcal{PT}_{\pm}$ symmetrischen Zustände besitzen keinen Realteil, die $\mathcal{PT}_{\pm}$ gebrochenen Zustände sind wie bei den anderen Parametern gestrichelt ($\text{Im } \mu_+ < 0$) und gepunktet ($\text{Im } \mu_+ > 0$) dargestellt.

7. Bifurkationen

In diesem Kapitel sollen die in Abbildung 6.2 auftretenden Bifurkationen näher betrachtet und mit den Bifurkationstypen aus Abschnitt 2.2 verglichen werden.

In KAPITEL 6 wurde bereits festgestellt, dass abhängig von dem Gewinn-Verlust Parameter γ mindestens eine und maximal drei Bifurkationen existieren. Alle Bifurkationen sind typische Beispiele für die Tangentenbifurkation aus Abschnitt 2.2.1. Bei einem bestimmten Wert des Parameters Na verschwinden zwei reelle Zustände und bilden eine Bifurkation, an der zwei imaginäre Zustände entstehen oder umgekehrt. Der Vergleich von Abbildung 6.4 mit Abbildung 2.1 zeigt, dass dieses Verhalten ebenso im Real- und Imaginärteil der idempotenten Komponenten zu sehen ist. Das Spektrum in Abbildung 6.4 stellt die bikomplexe Erweiterung des Spektrums in Abbildung 6.2 dar. In den Bifurkationspunkten selbst sind die reellen und imaginären Eigenwerte gleich. Die Gauß'schen Parameter weisen Bifurkationen bei denselben Werten wie das Eigenwertspektrum auf, sodass die Wellenfunktionen dort ebenfalls identisch sind. Es ist bekannt, dass an den Bifurkationspunkten meist nicht nur Änderungen in der Zustandszahl, sondern gleichzeitig Stabilitätswechsel erfolgen. Die Stabilitätseigenschaften dieser Bifurkationen werden in dieser Arbeit nicht betrachtet. Wir werden daher auf die Stabilitäten der einzelnen Zustände in der weiteren Diskussion nicht eingehen.

Die Anzahl der Bifurkationspunkte ist bei verschiedenen Werten von γ nicht konstant. Für $\gamma = 0$, also den Fall ohne Gewinn und Verlust, bilden je zwei komplexe Zustände $\mathcal{C}$ mit je zwei bikomplexen Zuständen $\mathcal{BC}$ eine Bifurkation. Für kleine Gewinn-Verlust Parameter $\gamma \neq 0$ existieren drei Bifurkationen, wobei die Zustände $\mathcal{C}_2$ und $\mathcal{C}_3$ mit niedrigerer Energie eine zusätzliche Bifurkation bilden. Für stärkere Gewinne und Verluste existiert nur noch eine Bifurkation, $\mathcal{B}_{34}$. Die Bifurkationspunkte $\mathcal{B}_{12}$ und $\mathcal{B}_{23}$ verschwinden.

7.1. Cusp-Bifurkation

Um diesen Übergang besser zu verstehen, werden die Tangentenbifurkationen $\mathcal{B}_{12}$ und $\mathcal{B}_{23}$ im Parameterraum Na und γ betrachtet. Die in Abbildung 7.1 dargestellten Verläufe besitzen eine gegensätzliche Krümmung und nähern sich einander an, bis die beiden Bifurkationspunkte in einem Punkt zusammenfallen. Dabei beschreiben sie die Form einer Spitze im Parameterraum. Dieses Verhalten, dass zwei Tangentenbifurkationen

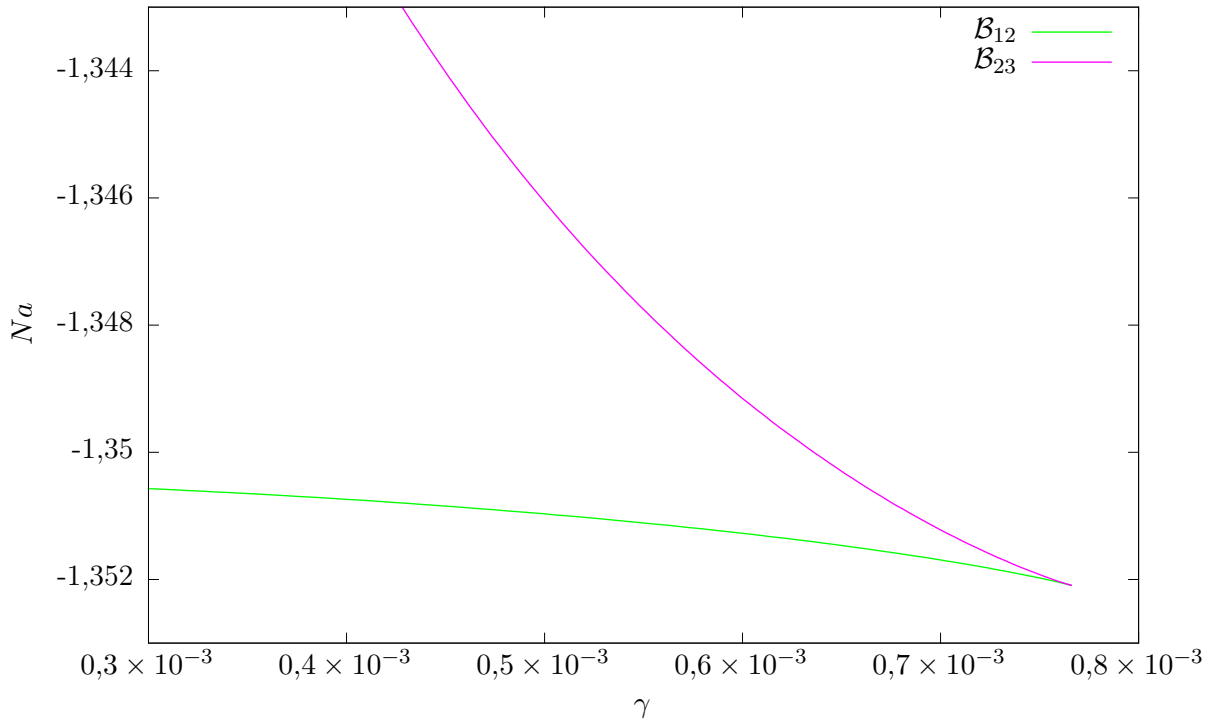


Abbildung 7.1: Die Tangentenbifurkationen $\mathcal{B}_{12}$ und $\mathcal{B}_{23}$ über den zugehörigen Systemparametern Na und γ . Die Bifurkationspunkte existieren nur in einem bestimmten Teil des Phasenraumes. Die Trajektorien bilden eine Cusp-Bifurkation.

zusammenfallen und verschwinden, wird als Cusp-Bifurkation bezeichnet, diese wurde bereits in Abschnitt 2.2.2 besprochen. Die Verläufe in Abbildung 7.1 existieren nur für bestimmte Parameterpaare γ und Na . Für den kritischen Wert des Gewinn-Verlust Parameters $\gamma_c \approx 0,766 \times 10^{-3}$ verschwinden die Tangentenbifurkationen.

Eine Cusp-Bifurkation wird durch die Differentialgleichung

$$\dot{x} = v(x, \rho, \sigma) = x^3 + \rho x + \sigma \quad (2.19)$$

beschrieben. Ein Vergleich der Lösung dieser Gleichung mit dem Eigenwertspektrum des Systems ist in Abbildung 7.2 dargestellt. Dabei wird der Parameter ρ festgehalten und die Lösungen (2.20) als Funktionen von σ angesehen. Der kritische Punkt, die Cusp-Bifurkation bei $\rho = \sigma = 0$, kann nicht dargestellt werden, da die Gleichung (2.19) dann nur die Lösungen $x^{1,2,3} = 0$ besitzt. Die Ebene mit $\rho = -10^{-3}$ in Abbildung 7.2 beschreibt das Verhalten der Lösungen an der Cusp-Bifurkation jedoch ausreichend gut. Der Vergleich zeigt, dass die komplexen Zustände $\mathcal{C}_1$ und $\mathcal{C}_2$ sowie die bikomplexen Zustände $\mathcal{BC}_{12}$ und $\mathcal{BC}_{23}$ im Real- und Imaginärteil lokal das Verhalten einer Cusp-Bifurkation widerspiegeln. Die Symmetrie der Normalform ist nicht vorhanden, da noch eine weitere Bifurkation auftritt und das Bifurkationsszenario somit komplizierter ist.

Für eine Wahl des Parameters ρ weiter vom Bifurkationspunkt entfernt, weisen die Lösungen x der Normalform in Abbildung 7.2 ebenfalls zwei Bifurkationen für $\rho < 0$ und keine Bifurkation für $\rho > 0$ auf. Dass die Zustände keine Bifurkation mehr bilden, ist insbesondere an der vollständigen Trennung der Lösungen im Imaginärteil zu erkennen. Im Parameterraum innerhalb der Spitze existieren drei reelle Lösungen, außerhalb nur eine. Diese charakteristische Eigenschaft der Cusp-Katastrophe wird durch Betrachtung der Lösungen als Fläche im Parameterraum klar, welche in Abbildung 2.2 dargestellt ist.

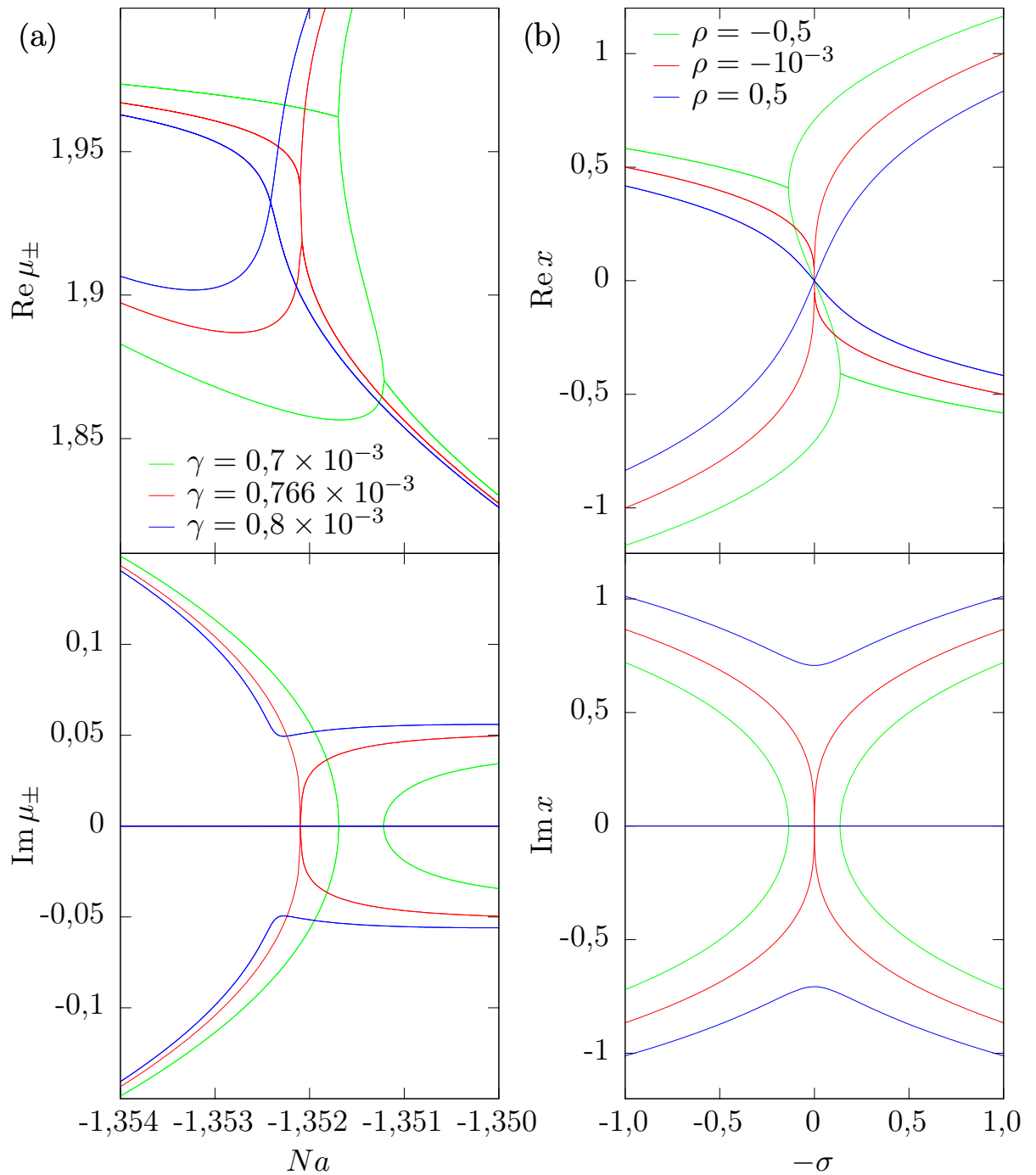


Abbildung 7.2: (a) Für kleinere γ besitzt das Eigenwertspektrum drei Tangentenbifurkationen, für größere γ nur eine Tangentenbifurkation. (b) Normalform der Cusp-Bifurkation in Abhängigkeit des Parameters σ für verschiedene Parameterwerte ρ . Die rote Kurve zeigt den Verlauf der Lösungen in der Nähe des Cusp-Punktes. Die Übereinstimmung der Eigenwerte mit den Lösungen der Normalform ist deutlich zu erkennen.

8. Wellenfunktionen

In Abschnitt 6.3 wurden die Symmetrien des Eigenwertspektrums und der zugehörigen Parameter besprochen. Diese Erkenntnisse sollen nun durch Betrachtung der Wellenfunktionen bestätigt werden. Im System treten die folgenden Symmetrien auf.

- $\mathcal{PT}$ -Symmetrie

$$\psi_{\mp}^*(-\mathbf{x}) = \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad (8.1)$$

- $\pm$ Symmetrie

$$\psi_{\mp}(\mathbf{x}) = \psi_{\pm}(\mathbf{x}), \quad (8.2)$$

- $\mathcal{PT}_{\pm}$ Symmetrie

$$\psi_{\pm}^*(-\mathbf{x}) = \psi_{\pm}(\mathbf{x}). \quad (8.3)$$

Alle Zustände erfüllen die $\mathcal{PT}$ -Symmetrie und sind somit „idempotent symmetrisch“ im Realteil mit $\text{Re } \psi_{\pm}(\mathbf{x}) = \text{Re } \psi_{\mp}(\mathbf{x})$ und „idempotent antisymmetrisch“ im Imaginärteil mit $\text{Im } \psi_{\pm}(\mathbf{x}) = \text{Im } \psi_{\mp}^*(-\mathbf{x})$. Es treten daher keine Zustände mit reiner $\pm$ Symmetrie auf. Diese ergibt sich dann bereits eindeutig aus den anderen Symmetrien und wird im Folgenden nicht weiter betrachtet. Stattdessen wird direkt die $\mathcal{PT}_{\pm}$ Symmetrie untersucht. Die Wellenfunktionen müssen hierfür „echt symmetrisch“ im Realteil mit $\text{Re } \psi_{\pm}(\mathbf{x}) = \text{Re } \psi_{\pm}(\mathbf{x})$ und „echt antisymmetrisch“ im Imaginärteil mit $\text{Im } \psi_{\pm}(\mathbf{x}) = -\text{Im } \psi_{\pm}^*(-\mathbf{x})$ sein. Damit die Wellenfunktionen exakt diese Symmetrien erfüllen, muss die globale Phase so gewählt werden, dass die Zustände exakte $\mathcal{PT}$ -symmetrisch sind. Damit folgt für

- $\mathcal{PT}$ -Symmetrie

$$c_{\pm}^1 \stackrel{(5.22c)}{=} (c_{\mp}^2)^*, \quad (8.4)$$

- $\mathcal{PT}_{\pm}$ Symmetrie

$$c_{\pm}^1 \stackrel{(5.26c)}{=} (c_{\pm}^2)^*. \quad (8.5)$$

Exakte $\mathcal{PT}$ -Symmetrie ergibt sich entsprechend (4.13) und (3.24) durch die Multiplikation mit der globale Phase $e^{\gamma} = e^{\gamma_+} e_+ + e^{\gamma_-} e_-$, wobei

$$\gamma_+ = \frac{(c_-^2)^* - c_+^1}{2}, \quad \gamma_- = -\gamma_+^*. \quad (8.6)$$

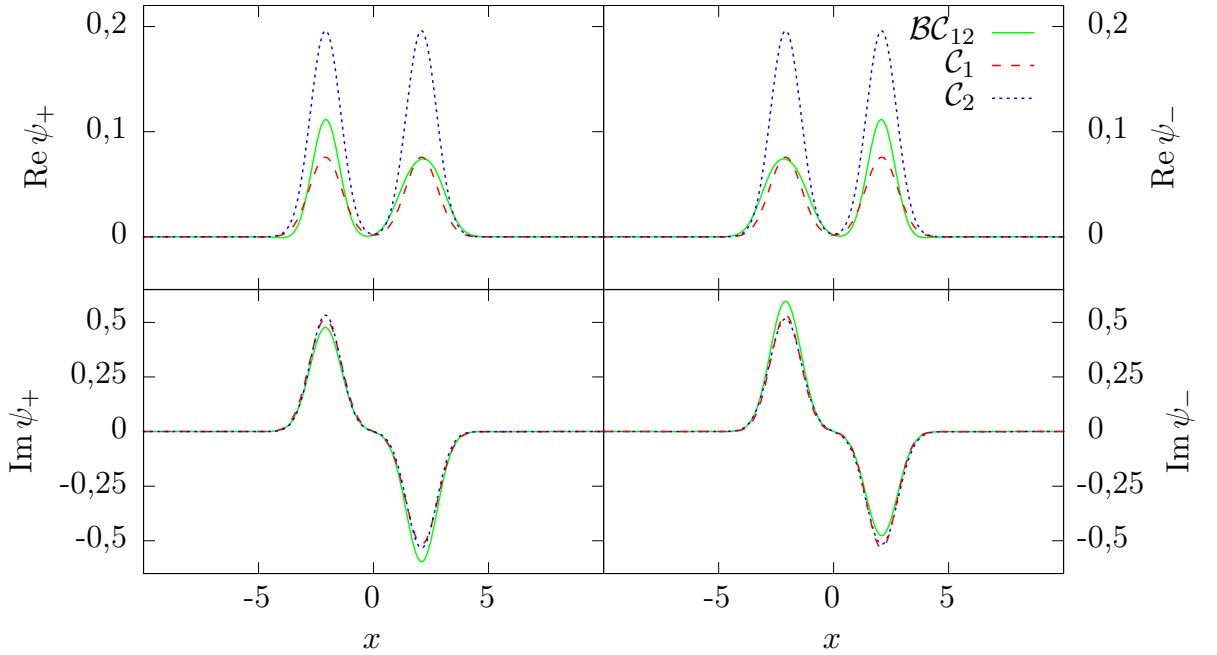


Abbildung 8.1: Wellenfunktionen der an der Bifurkation $\mathcal{B}_{12}$ beteiligten Zustände für $\gamma = 0,4 \times 10^{-3}$. Die komplexen Lösungen $\mathcal{C}_1$ und $\mathcal{C}_2$ bei $Na = -1,345$ sind $\mathcal{PT}_{\pm}$ symmetrisch und besitzen echt symmetrische Real- und echt antisymmetrische Imaginärteile. Die bikomplexen Lösungen $\mathcal{BC}_{12}$ bei $Na = -1,355$ sind nur $\mathcal{PT}$ -symmetrisch und gehen durch $\pm$ Vertauschung ineinander über. Die Farben der Wellenfunktionen entsprechen den Zuständen in Abbildung 6.3.

Gleichung (8.5) ergibt sich durch die Wahl (8.6) automatisch, denn wird (8.4) in (5.26c) eingesetzt,

$$(c_{\pm}^n)^* = (c_{\mp}^n)^* + \gamma_{\pm}, \quad n = 1, 2 \quad (8.7)$$

so folgt $\gamma_+ = -\gamma_-$. Da γ in (5.26) eine idempotente Phase darstellt, gilt jedoch auch $\gamma_+ = -\gamma_-^*$ und damit $\gamma_{\pm} = \gamma_{\pm}^*$. Die $\gamma_{\pm}$ dürfen also lediglich einen Realteil besitzen, dieser ist jedoch nach (5.26) gerade Null, sodass (8.5) folgt.

Es werden nun jeweils die Wellenfunktionen zweier komplexer Zustände $\mathcal{C}$ und eines $\pm$ symmetriebrochenen bikomplexen Zustandes $\mathcal{BC}$ betrachtet, die eine Bifurkation bilden. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird der zugehörige zweite bikomplexe Zustand nicht dargestellt, da dieser lediglich aus einer $\pm$ Vertauschung folgt. Grund hierfür ist der Bruch der $\pm$ Symmetrie aus Abschnitt 4.3.2. Die Abbildung 8.1 zeigt die komplexen Zustände $\mathcal{C}_1$ und $\mathcal{C}_2$ sowie den bikomplexen Zustand $\mathcal{BC}_{12}$. In den Abbildungen 8.2 und 8.3 sind die Zustände $\mathcal{C}_2$, $\mathcal{C}_3$ und $\mathcal{C}_4$ sowie die entsprechenden fortgesetzten Zustände $\mathcal{BC}_{23}$ und $\mathcal{BC}_{34}$ an den Bifurkationspunkten $\mathcal{B}_{23}$ und $\mathcal{B}_{34}$ dargestellt.

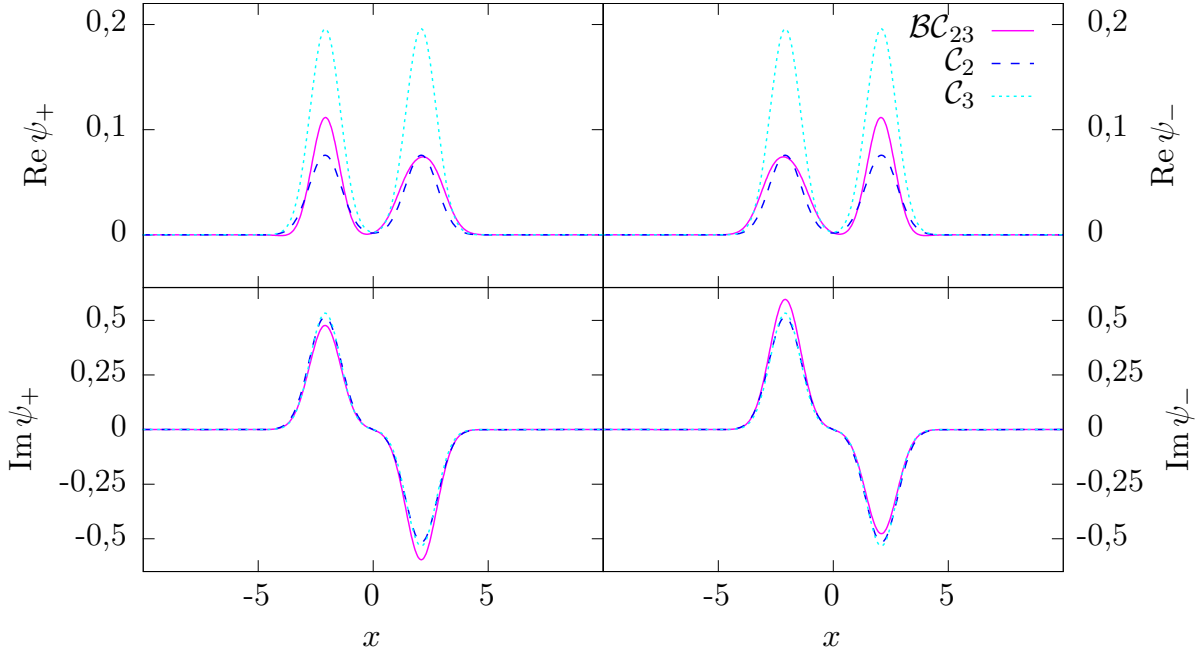


Abbildung 8.2: Wellenfunktionen der an der Bifurkation $\mathcal{B}_{23}$ beteiligten Zustände für $\gamma = 0,4 \times 10^{-3}$, in Analogie zur Abbildung 8.1. Die komplexen Lösungen $\mathcal{C}_2$ und $\mathcal{C}_3$ werden für einen Nichtlinearitätsparameter $Na = -1,345$, das bikomplexe Lösungspaar $\mathcal{BC}_{23}$ für $Na = -1,335$ gezeigt.

Erwartungsgemäß besitzen alle komplexen Lösungen einen echt symmetrischen Realteil und einen echt antisymmetrischen Imaginärteil und erfüllen damit die $\mathcal{PT}_{\pm}$ Symmetrie (8.3). Die bikomplexen Zustände brechen diese Symmetrie und sind nur $\mathcal{PT}$ -symmetrisch. Sie besitzen einen idempotent symmetrischen Realteil und einen idempotent antisymmetrischen Imaginärteil, also $\psi_{\pm}(\mathbf{x}) = \psi_{\mp}^*(-\mathbf{x})$. Der Realteil der + Komponente muss unter Punktspiegelung am Ursprung den Realteil der – Komponente ergeben. Gleichzeitig muss der Imaginärteil der + Komponente gleich dem negativen Imaginärteil der – Komponente sein. Außerdem neigen die bikomplexen Äste zu einer komplexeren Struktur, wie die Wellenfunktion $\mathcal{BC}_{34}$ in Abbildung 8.3 zeigt.

In Anhang B werden die Wellenfunktionen in der Vektordarstellung der bikomplexen Zahlen gezeigt. Dies ermöglicht einen Vergleich mit [20]. Dort wurde gefunden, dass jede der vier Vektorkomponenten für sich symmetrisch oder antisymmetrisch sein muss. Die vorliegenden Resultate bestätigen das. Weiterhin zeigt [20], dass analytisch fortgesetzte Zustände $\mathcal{PT}$ -symmetrischer Spektren selbst $\mathcal{PT}$ -symmetrisch sind, die Fortsetzungen $\mathcal{PT}$ -gebrochener Zustände wiederum $\mathcal{PT}$ -gebrochen. In dieser Arbeit wurden nur $\mathcal{PT}$ -symmetrische Lösungen betrachtet und die bikomplexe Erweiterung liefert auch hier wieder ein $\mathcal{PT}$ -symmetrisches Eigenwertspektrum.

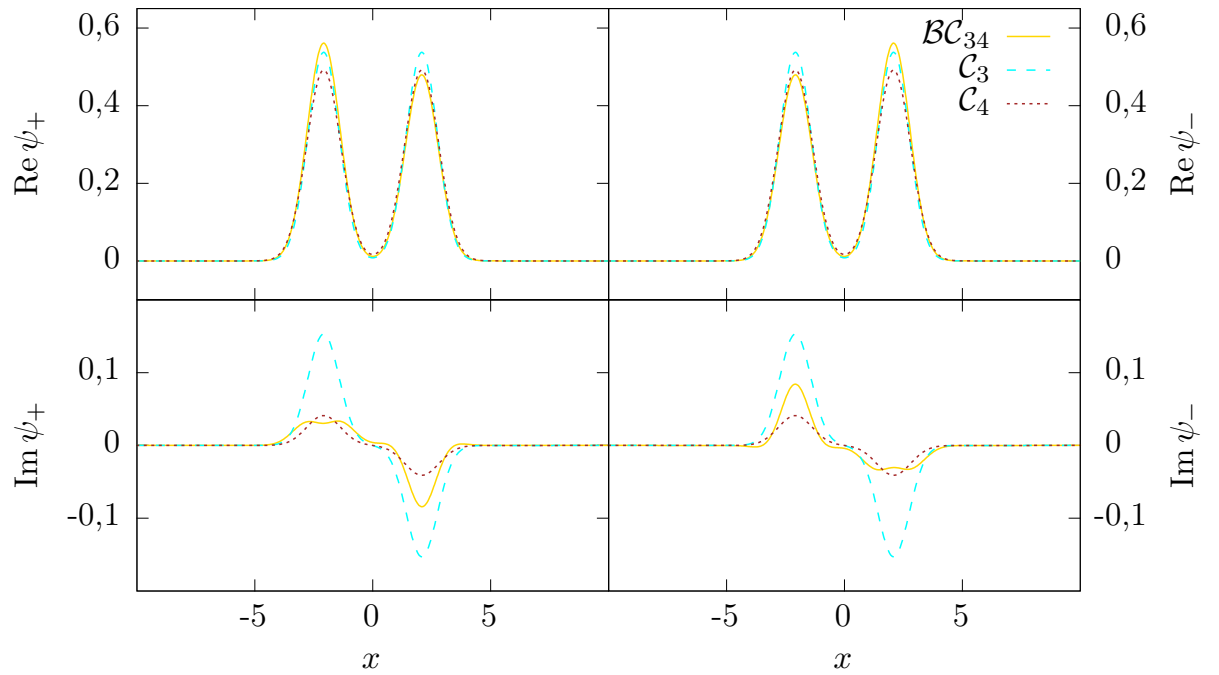


Abbildung 8.3: Wellenfunktionen der an der Bifurkation $\mathcal{B}_{34}$ beteiligten Zustände analog zu Abbildung 8.1 für $\gamma = 0,4 \times 10^{-3}$. Die Wellenfunktion der bikomplexen Lösung $\mathcal{BC}_{34}$ bei $Na = -1,365$ besitzt weitere Extrema. Die komplexen Lösungen $\mathcal{C}_3$ und $\mathcal{C}_4$ sind für $Na = -1,355$ dargestellt.

9. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde das $\mathcal{PT}$ -symmetrische Eigenwertspektrum eines Bose-Einstein-Kondensates, beschrieben durch die nichtlineare Gross-Pitaevskii-Gleichung, in Abhängigkeit der Nichtlinearitätsstärke untersucht. Dazu wurde ein nicht-hermitesches System mit einem komplexen Potential als Modell eines offenen Quantensystems betrachtet. Ein imaginäres Potential erzeugt Quellen und Senken der Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Teilchen. Ein einfaches $\mathcal{PT}$ -symmetrisches Potential ist das hier verwendete Doppelmuldenpotential mit antisymmetrischem Imaginärteil, dieser bewirkt in einer Mulde eine Einkopplung und in der anderen Mulde eine Auskopplung von Teilchen. Die Gross-Pitaevskii-Gleichung wurde numerisch durch ein zeitabhängiges Variationsprinzip gelöst, mit einem Ansatz für die Wellenfunktion aus zwei gekoppelten Gaußfunktionen. Dieser Ansatz liefert qualitativ präzise Ergebnisse unter geringem numerischen Aufwand. Durch eine mehrdimensionale Nullstellensuche können die stationären Zustände bestimmt werden.

Von besonderem Interesse sind die für nichtlineare Systeme charakteristischen Bifurkationen und deren Veränderungen für unterschiedlich starke Teilchengewinne und -verluste. Um diese Bifurkationen besser zu verstehen, wurde die Gross-Pitaevskii-Gleichung mithilfe bikomplexer Zahlen analytisch fortgesetzt. In der analytischen Erweiterung ist die Zahl der Lösungen für alle Parameter konstant, wohingegen ohne die Erweiterung Lösungen im Spektrum bei Variation der Parameter entstehen oder verschwinden. Für die bikomplexen Zahlen wurde die idempotente Darstellung mit den Basiselementen $e_+e_- = 0$ und $e_{\pm}^2 = e_{\pm}$ verwendet. Der Vorteil dieser idempotenten Darstellung ist die Vereinfachung bikomplexer Rechnungen auf komplexe Operationen. Alle Rechnungen können getrennt in den idempotenten Koeffizienten durchgeführt werden, solange keine komplexen Konjugationen auftreten, denn diese bewirken eine Vertauschung der idempotenten Basiselemente, $e_{\pm} \rightarrow e_{\mp}$. Es wurde gezeigt, dass sich das zeitabhängige Variationsprinzip mit einem Ansatz aus gekoppelten Gaußfunktionen in die idempotente Darstellung übertragen lässt. Dabei erhält man die doppelte Zahl komplexer Gleichungen.

Betrachtet wurde das $\mathcal{PT}$ -symmetrische Eigenwertspektrum der Gross-Pitaevskii-Gleichung. Es war bereits bekannt, dass sich das Spektrum durch die Einführung von Gewinnen und Verlusten qualitativ ändert und die Zahl der Lösungen nicht konstant ist. Das reelle Spektrum zeigt, dass durch eine Kopplung an die Umgebung eine zusätzliche Bifurkation entsteht, welche die zuvor getrennten Zustände verbindet. In der analytischen Fortsetzung tauchen an den Bifurkationspunkten zusätzliche bikomplexe Zustände

auf, sodass für alle Nichtlinearitätsstärken dieselbe Zahl an Lösungen existiert. Diese zusätzlichen Zustände brechen die idempotente $\pm$ Symmetrie und gehen paarweise durch $\pm$ Vertauschung ineinander über. Es wurde damit das bekannte Resultat bestätigt, dass $\mathcal{PT}$ -symmetrische Lösungen an den Bifurkationspunkten wieder in $\mathcal{PT}$ -symmetrische analytisch fortgesetzte Lösungen übergehen [20]. Durch die Betrachtung der Wellenfunktionen konnten die in der Theorie hergeleiteten Symmetrien und Symmetriebrechungen der Lösungen bestätigt werden.

Alle im Spektrum enthaltenen Bifurkationen konnten als Tangentenbifurkationen identifiziert werden. Unterhalb eines kritischen Gewinn-Verlust Parameters existieren drei Bifurkationen, darüber nur noch eine. Im Parameterraum der Nichtlinearitätsstärke und des Gewinn-Verlust Parameters konnte dieses Verhalten auf eine Cusp-Bifurkation zurückgeführt werden. Für zunehmende Gewinne und Verluste nähern sich zwei Tangentenbifurkationen einander an und fallen beim Cusp-Punkt zusammen. Für größere Gewinne und Verluste treten diese Bifurkationen nicht mehr auf.

9.1. Ausblick

Bifurkationen sind oft mit Stabilitätswechseln verbunden und weisen charakteristische Eigenschaften exzeptioneller Punkte auf. Die Stabilitätseigenschaften dieser Bifurkationen und exzeptionellen Punkte wurden in dieser Arbeit nicht betrachtet. Es wäre insbesondere interessant, die Cusp-Bifurkationen näher zu untersuchen und deren Stabilitätseigenschaften zu bestimmen, da dort sechs Zustände des bikomplexen Spektrums zusammentreffen. Die Cusp-Bifurkation kann im Parameterraum umkreist und damit die Vertauschung der Zustände untersucht werden. In dieser Arbeit sind die Nichtlinearitätsstärke und der Gewinn-Verlust Parameter reelle Größen. Um die weiteren, im System auftretenden Bifurkationen im Parameterraum zu umkreisen und als exzeptionelle Punkte zu klassifizieren, müssen diese Parameter ebenfalls bikomplex erweitert werden.

In dieser Arbeit wurden ausschließlich $\mathcal{PT}$ -symmetrische Zustände behandelt. Es ist naheliegend, auch eine analytische Fortsetzung der $\mathcal{PT}$ -gebrochenen Zustände durchzuführen. Dabei wird erwartet, dass die fortgesetzten Lösungen eine $\mathcal{PT}_{\pm}$ Symmetrie besitzen, jedoch sowohl die $\mathcal{PT}$ -Symmetrie als auch die $\pm$ Symmetrie brechen [20]. Desweiteren bietet sich die Verwendung der idempotenten Darstellung für die analytische Fortsetzung komplexerer Systeme, wie den dipolaren Bose-Einstein-Kondensaten an, die zusätzliche Effekte zeigen [49, 50]. Da mit dem Doppelmuldenpotential ein sehr einfaches $\mathcal{PT}$ -symmetrisches Quantensystem behandelt wurde, ist als Erweiterung die Einführung eines komplizierteren Potentials mit weiteren Gewinn- und Verlusttermen denkbar.

A. Gaußfunktionen

Die in Abschnitt 5.1.1 eingeführten Gaußfunktionen werden auf eine allgemeine Form transformiert,

$$g^n(\mathbf{x}) = e^{-((\mathbf{x}-\mathbf{q}^n)^T A^n (\mathbf{x}-\mathbf{q}^n) - i(\mathbf{p}^n)^T (\mathbf{x}-\mathbf{q}^n) + \varphi^n)} \equiv e^{-\mathbf{x}^T A^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}^n)^T \mathbf{x} + c^n} . \quad (\text{A.1})$$

Für die Parameter gelten die folgenden Beziehungen,

$$\mathbf{b}^n = 2A\mathbf{q}^n + i\mathbf{p}^n , \quad (\text{A.2a})$$

$$c^n = -(\mathbf{q}^n)^T A^n \mathbf{q}^n - i(\mathbf{p}^n)^T \mathbf{q}^n - \varphi^n , \quad (\text{A.2b})$$

$$\mathbf{q}^n = \frac{1}{2} \text{Re} \left((A^n)^{-1} \mathbf{b}^n \right) , \quad (\text{A.2c})$$

$$\mathbf{p}^n = \text{Im} \mathbf{b}^n - 2\text{Im} (A^n \mathbf{q}^n) . \quad (\text{A.2d})$$

A.1. Gaußintegrale

Zur Berechnung der Koeffizienten der Matrixgleichung im zeitabhängigen Variationsprinzip aus Abschnitt 5.1.1 müssen Gaußintegrale,

$$G_m^n = \langle g^m | g^n \rangle = \int d^3x e^{-\mathbf{x}^T A_m^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}_m^n)^T \mathbf{x} + c_m^n} = \sqrt{\frac{\pi^3}{\|A_m^n\|}} e^{\frac{1}{4}(\mathbf{b}_m^n)^T (A_m^n)^{-1} \mathbf{b}_m^n + c_m^n} , \quad (\text{A.3})$$

mit

$$A_m^n = (A^m)^* + A^n , \quad (\text{A.4a})$$

$$\mathbf{b}_m^n = (\mathbf{b}^m)^* + \mathbf{b}^n , \quad (\text{A.4b})$$

$$c_m^n = (c^m)^* + c^n , \quad (\text{A.4c})$$

gelöst werden.

Die benötigten dreidimensionalen Integrale sind von der Form

$$\langle g^m | x_1^o x_2^k x_3^l | g^n \rangle = \int d^3x x_1^o x_2^k x_3^l e^{-\mathbf{x}^T A_m^n \mathbf{x} + (\mathbf{b}_m^n)^T \mathbf{x} + c_m^n} = \partial_{b_1}^o \partial_{b_2}^k \partial_{b_3}^l G_m^n . \quad (\text{A.5})$$

Die Lösung ist durch die verallgemeinerte Kettenregel nach Faà di Bruno gegeben,

$$\partial_x^N f(g(x)) = \sum_{i_1+\dots+i_N=N} \frac{n!}{i_1! \dots i_N!} f^{(N)}(g(x)) \prod_{j=1}^N \left(\frac{g^{(j)}(x)}{j!} \right)^{i_j}. \quad (\text{A.6})$$

Für das Gaußintegral (A.3) folgt mit $\partial_\rho \equiv \partial_{b_\rho}$ und $G \equiv G_m^n$,

$$\partial_\rho^N G = G \sum_{i_1+i_2=N} \frac{N!}{i_1! i_2!} \underbrace{\left(\frac{1}{2} \left((A_m^n)^{-1} \mathbf{b}_m^n \right)_\rho \right)^{i_1}}_{\equiv Q_\rho} \underbrace{\left(\frac{1}{2} (A_m^n)^{-1}_{\rho\rho} \right)^{i_2}}_{\equiv K_{\rho\rho}}. \quad (\text{A.7})$$

In dieser Arbeit werden nur die folgenden Ableitungen benötigt,

$$\partial_\rho G = Q_\rho G, \quad (\text{A.8a})$$

$$\partial_\rho^2 G = (Q_\rho^2 + K_{\rho\rho}) G, \quad (\text{A.8b})$$

$$\partial_\rho^3 G = (Q_\rho^3 + 3Q_\rho K_{\rho\rho}) G, \quad (\text{A.8c})$$

$$\partial_\rho^4 G = (Q_\rho^4 + 6Q_\rho^2 K_{\rho\rho} + 3K_{\rho\rho}^2) G, \quad (\text{A.8d})$$

mit $\partial_\sigma Q_\rho = K_{\rho\sigma}$ folgt

$$\partial_\sigma \partial_\rho G = (K_{\rho\sigma} + Q_\rho Q_\sigma) G, \quad (\text{A.8e})$$

$$\partial_\sigma \partial_\rho^2 G = (2Q_\rho K_{\rho\sigma} + Q_\rho (Q_\sigma^2 + K_{\rho\rho})) G, \quad (\text{A.8f})$$

$$\partial_\sigma \partial_\rho^3 G = (3(Q_\rho^2 K_{\rho\sigma} + K_{\rho\sigma} K_{\rho\rho}) + Q_\rho (Q_\sigma^3 + 3Q_\rho K_{\rho\rho})) G, \quad (\text{A.8g})$$

$$\partial_\sigma^2 \partial_\rho^2 G = (2K_{\rho\sigma} (K_{\rho\sigma} + 2Q_\rho Q_\sigma) + (Q_\rho^2 + K_{\rho\rho}) (Q_\sigma^2 + K_{\sigma\sigma})) G, \quad (\text{A.8h})$$

$$\partial_\tau \partial_\sigma \partial_\rho G = (Q_\tau K_{\rho\sigma} + Q_\sigma K_{\rho\tau} + Q_\rho K_{\sigma\tau} + Q_\tau Q_\sigma Q_\rho) G, \quad (\text{A.8i})$$

$$\begin{aligned} \partial_\tau \partial_\sigma \partial_\rho^2 G = & (2K_{\rho\tau} (K_{\rho\sigma} + Q_\rho Q_\sigma) + 2Q_\rho Q_\tau K_{\rho\sigma} \\ & + (Q_\rho^2 + K_{\rho\rho}) (Q_\sigma Q_\tau + K_{\sigma\tau})) G. \end{aligned} \quad (\text{A.8j})$$

B. Wellenfunktionen in Vektordarstellung

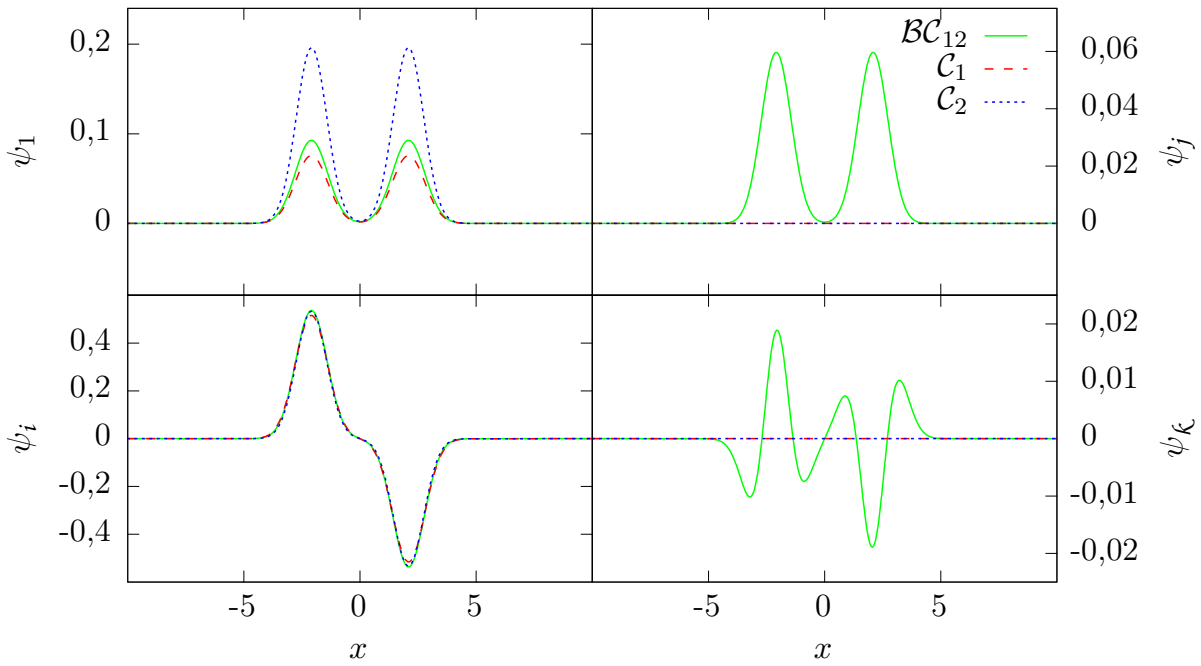


Abbildung B.1: Wellenfunktionen der am Bifurkationspunkt $\mathcal{B}_{12}$ beteiligten Zustände bei $\gamma = 0,4 \times 10^{-3}$ in Vektordarstellung. Die Lösungen $\mathcal{C}_1$ und $\mathcal{C}_2$ bei $Na = -1,345$ sind gleichzeitig symmetrisch bezüglich der kombinierten Wirkung des $\mathcal{PT}$ -Operators und einer komplexen Konjugation nach j . Die nur in der analytischen Fortsetzung existierenden Lösungen $\mathcal{BC}_{12}$ bei $Na = -1,355$ brechen diese Symmetrie und sind nur $\mathcal{PT}$ -symmetrisch, was an den nichtverschwindenden j und κ -Komponenten zu erkennen ist.

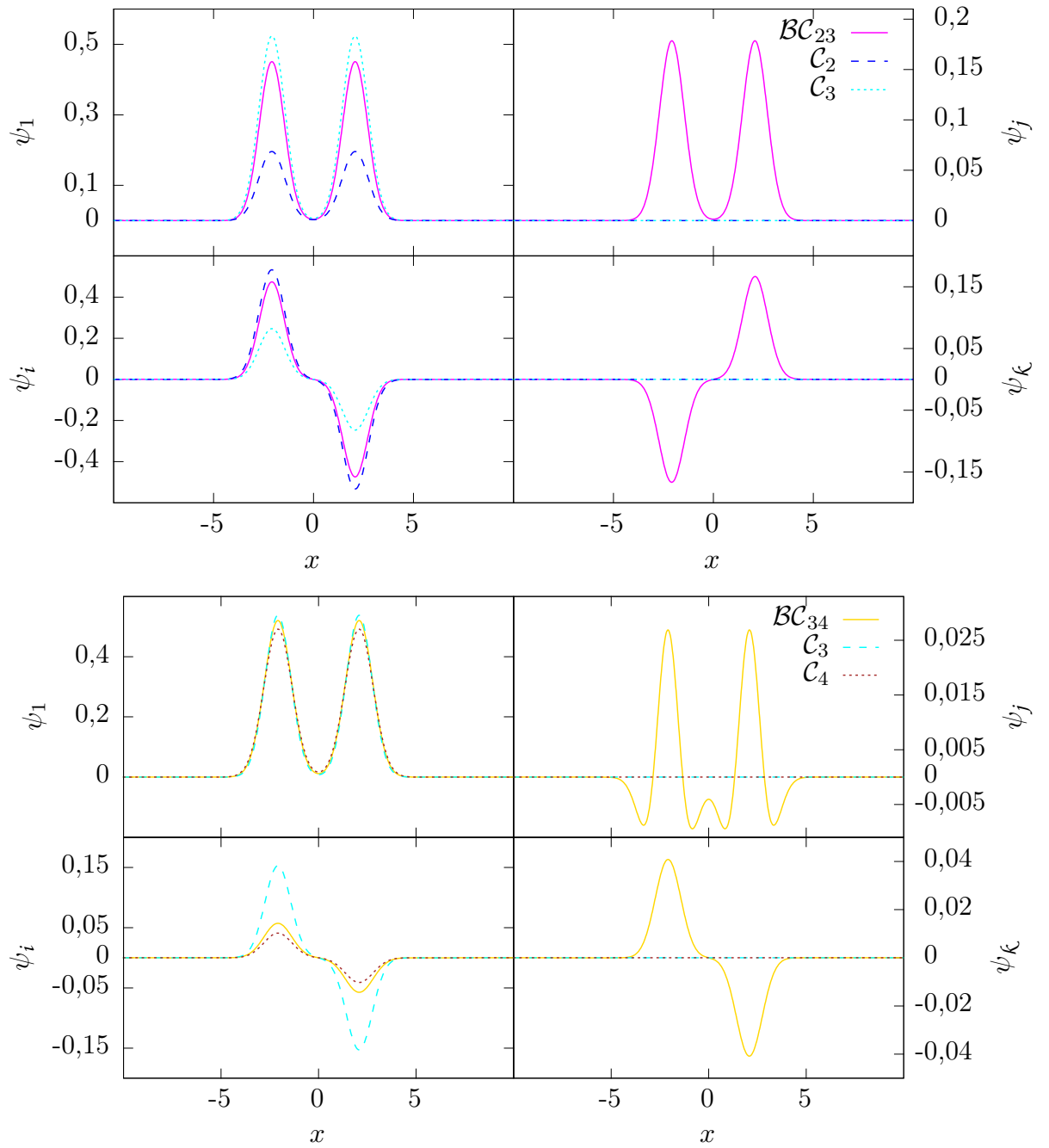


Abbildung B.2: Wellenfunktionen der an den Bifurkationspunkten $\mathcal{B}_{23}$ (bei $Na = -1,335$ und $Na = -1,345$) und $\mathcal{B}_{34}$ (bei $Na = -1,355$ und $Na = -1,365$) beteiligten Zustände in Vektordarstellung für $\gamma = 0,4 \times 10^{-3}$. Es gelten dieselben Symmetrieeigenschaften für die Lösungen $\mathcal{C}$ und $\mathcal{BC}$ wie in Abbildung B.1.

Literaturverzeichnis

- [1] U. Weiss. *Quantum Dissipative Systems*. Modern Condensed Matter Physics. World Scientific (1993).
- [2] N. Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge (2011).
- [3] E. P. Gross. Structure of a Quantized Vortex in Boson Systems. *Nuovo Cimento* 20, 454 (1961).
- [4] L. P. Pitaevskii. Vortex Lines in an Imperfect Bose Gas. *Sov. Phys. JETP* 13, 451 (1961).
- [5] L. P. Pitaevskii, S. Stringari. *Bose-Einstein Condensation*. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press (2003).
- [6] S. Weigert. The Physical Interpretation of PT -invariant Potentials. *Czech J. Phys.* 54, 1139–1142 (2004).
- [7] Y. Kagan, A. E. Muryshev, G. V. Shlyapnikov. Collapse and Bose-Einstein Condensation in a Trapped Bose Gas with Negative Scattering Length. *Phys. Rev. Lett.* 81, 933–937 (1998).
- [8] N. Moiseyev, L. S. Cederbaum. Resonance solutions of the nonlinear Schrödinger equation: Tunneling lifetime and fragmentation of trapped condensates. *Phys. Rev. A* 72, 033605 (2005).
- [9] P. Schlagheck, T. Paul. Complex-scaling approach to the decay of Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 73, 023619 (2006).
- [10] T. Paul, M. Hartung, K. Richter, P. Schlagheck. Nonlinear transport of Bose-Einstein condensates through mesoscopic waveguides. *Phys. Rev. A* 76, 063605 (2007).
- [11] C. M. Bender, S. Boettcher. Real Spectra in Non-Hermitian Hamiltonians Having PT Symmetry. *Phys. Rev. Lett.* 80, 5243–5246 (1998).
- [12] A. Guo, G. J. Salamo, D. Duchesne, R. Morandotti, M. Volatier-Ravat, V. Aimez, G. A. Siviloglou, D. N. Christodoulides. Observation of PT -Symmetry Breaking in Complex Optical Potentials. *Phys. Rev. Lett.* 103, 093902 (2009).

- [13] C. E. Rüter, K. G. Makris, R. El-Ganainy, D. N. Christodoulides, M. Segev, D. Kip. Observation of parity-time symmetry in optics. *Nat. Phys.* 6, 192 (2010).
- [14] M. Kreibich, J. Main, H. Cartarius, G. Wunner. Hermitian four-well potential as a realization of a $\mathcal{PT}$ -symmetric system. *Phys. Rev. A* 87, 051601(R) (2013).
- [15] S. Klaiman, U. Günther, N. Moiseyev. Visualization of Branch Points in $\mathcal{PT}$ -Symmetric Waveguides. *Phys. Rev. Lett.* 101, 080402 (2008).
- [16] Y. Shin, G.-B. Jo, M. Saba, T. A. Pasquini, W. Ketterle, D. E. Pritchard. Optical Weak Link between Two Spatially Separated Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.* 95, 170402 (2005).
- [17] H. Cartarius, G. Wunner. Model of a $\mathcal{PT}$ -symmetric Bose-Einstein condensate in a δ -function double-well potential. *Phys. Rev. A* 86, 013612 (2012).
- [18] H. Cartarius, D. Haag, D. Dast, G. Wunner. Nonlinear Schrödinger equation for a $\mathcal{PT}$ -symmetric delta-function double well. *J. Phys. A* 45, 444008 (2012).
- [19] H. Cartarius, D. Dast, D. Haag, G. Wunner, R. Eichler, J. Main. Stationary and dynamical solutions of the Gross-Pitaevskii equation for a Bose-Einstein condensate in a $\mathcal{PT}$ -symmetric double well. *Acta Polytechnica* 53, 259–267 (2013).
- [20] D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, J. Main, G. Wunner. Eigenvalue structure of a Bose-Einstein condensate in a $\mathcal{PT}$ -symmetric double well. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* 46, 375301 (2013).
- [21] D. Haag, D. Dast, A. Löhle, H. Cartarius, J. Main, G. Wunner. Nonlinear quantum dynamics in a $\mathcal{PT}$ -symmetric double well. *Phys. Rev. A* 89, 023601 (2014).
- [22] T. Hertig, P. Höhmann, R. Otte. Hypercomplex Algebras and their application to the mathematical formulation of Quantum Theory (2014). arXiv:1406.1014.
- [23] D. Rochon, S. Tremblay. Bicomplex Quantum Mechanics: I. The generalized Schrödinger Equation. *Advances in Applied Clifford Algebras* 14, 231–248 (2004).
- [24] D. Rochon, S. Tremblay. Bicomplex Quantum Mechanics: II. The Hilbert Space. *Advances in Applied Clifford Algebras* 16, 135–157 (2006).
- [25] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsberichte der Preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1924, 261–267 (1924).
- [26] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases II. *Sitzungsberichte der preußischen Akademie der Wissenschaften, phys.-math. Kl.* Jahrgang 1925, 3–14 (1925).

- [27] S. Bose. Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese. *Zeitschrift für Physik A* 26, 178–181 (1924).
- [28] J. Rogel-Salazar. The Gross-Pitaevskii Equation and Bose-Einstein condensates. *Eur. J. Phys.* 34, 247 (2013).
- [29] René Thom. Stabilité structurelle et morphogénèse. *Poetics* 3, 7–19 (1974).
- [30] G. Baley Price. *An Introduction to Multicomplex Spaces and Functions*. Marcel Dekker, New York (1991).
- [31] W. R. Hamilton. LXIX. On quaternions; or on a new system of imaginaries in algebra. *Philosophical Magazine Series 3* 30, 458–461 (1847).
- [32] C. M. Bender. Making Sense of Non-Hermitian Hamiltonians. *Rep. Prog. Phys.* 70 (2007).
- [33] A. Mostafazadeh. Exact PT -symmetry is equivalent to Hermiticity. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 36, 7081–7091 (2003).
- [34] A. Mostafazadeh. Pseudo-Hermiticity versus PT symmetry: The necessary condition for the reality of the spectrum of a non-Hermitian Hamiltonian. *J. Math. Phys.* 43, 205–214 (2002).
- [35] A. Mostafazadeh. Pseudo-Hermiticity versus PT -symmetry. II. A complete characterization of non-Hermitian Hamiltonians with a real spectrum. *J. Math. Phys.* 43, 2814–2816 (2002).
- [36] A. Mostafazadeh. Pseudo-Hermiticity versus PT -symmetry III: Equivalence of pseudo-Hermiticity and the presence of antilinear symmetries. *J. Math. Phys.* 43, 3944–3951 (2002).
- [37] A. D. McLachlan. A variational solution of the time-dependent Schrodinger equation. *Molecular Physics* 8, 39–44 (1964).
- [38] S. Rau. Variational methods with coupled Gaussian functions for Bose-Einstein condensates with long-range interaction (2010).
- [39] Dennis Dast. *Variationsrechnungen zu Bose-Einstein-Kondensaten in PT -symmetrischen Doppelmuldenpotentialen*. Masterarbeit, Universität Stuttgart (2012).
- [40] S. Rau, J. Main, P. Köberle, G. Wunner. Pitchfork bifurcations in blood-cell-shaped dipolar Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* 81, 031605(R) (2010).
- [41] S. Rau, J. Main, G. Wunner. Variational methods with coupled Gaussian functions for Bose-Einstein condensates with long-range interactions. I. General concept. *Phys. Rev. A* 82, 023610 (2010).

- [42] S. Rau, J. Main, H. Cartarius, P. Köberle, G. Wunner. Variational methods with coupled Gaussian functions for Bose-Einstein condensates with long-range interactions. II. Applications. *Phys. Rev. A* 82, 023611 (2010).
- [43] Daniel Haag. *Numerische Behandlung von Bose-Einstein-Kondensaten im $\mathcal{PT}$ -symmetrischen Doppelmuldenpotential*. Masterarbeit, Universität Stuttgart (2012).
- [44] M. J. D. Powell. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives. *The Computer Journal* 7, 155–162 (1964).
- [45] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani, M. K. Oberthaler. Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a Single Bosonic Josephson Junction. *Phys. Rev. Lett.* 95, 010402 (2005).
- [46] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni, S. R. Shenoy. Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates: Josephson effects, π oscillations, and macroscopic quantum self-trapping. *Phys. Rev. A* 59, 620–633 (1999).
- [47] E. A. Donley, N. R. Claussen, S. L. Cornish, J. L. Roberts, E. A. Cornell, C. E. Wieman. Dynamics of collapsing and exploding Bose-Einstein condensates. *Nature* 412, 295–299 (2011).
- [48] A. Gammal, T. Frederico, L. Tomio. Critical number of atoms for attractive Bose-Einstein condensates with cylindrically symmetrical traps. *Phys. Rev. A* 64, 055602 (2001).
- [49] T. Lahaye, C. Menotti, L. Santos, M. Lewenstein, T. Pfau. The physics of dipolar bosonic quantum gases. *Rep. Prog. Phys.* 72, 126401 (2009).
- [50] R. Fortanier, D. Dast, D. Haag, H. Cartarius, J. Main, G. Wunner, R. Gutöhrlein. Dipolar Bose-Einstein condensates in a $\mathcal{PT}$ -symmetric double-well potential. *Phys. Rev. A* 89, 063608 (2014).

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei all den Personen bedanken, die mich unterstützt haben und ohne die die Anfertigung der vorliegenden Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Mein Dank gilt allen Mitarbeitern des 1. Instituts für Theoretische Physik an der Universität Stuttgart, für die nette Aufnahme und die interessanten Diskussionen. Ich möchte mich dabei insbesondere bei Dennis Dast und Daniel Haag bedanken, für die ausgezeichnete Betreuung, die vielen Korrekturen und Vorschläge und die unterhaltsamen Gespräche, die meine Arbeit sehr geprägt haben. Weiterhin muss ich mich bei Prof. Dr. Jörg Main bedanken, nicht nur für die Übernahme der Prüfung, sondern auch für die große Unterstützung und die spannenden Diskussionen und Ideen, die mir stets geholfen haben. Mein Dank gebührt außerdem Dr. habil. Holger Cartarius, der mich erst dazu inspirierte, mich der theoretischen Physik zu widmen und der immer Zeit zur Beantwortung meiner Fragen und zur Besprechung meiner Probleme hatte. Nicht zuletzt durch sein großes Engagement in Form von Seminaren fühlte ich mich dieser Herausforderung überhaupt gewachsen.

Weiterhin möchte ich mich bei meinen Kommilitonen bedanken, die mich bei meinem bisherigen Studium begleitet und dieses unterhaltsam gestaltet haben. Dabei gilt mein Dank insbesondere Sebastian Erfort, für seine Unterstützung und seinen Rat, die gute Atmosphäre und die tolle Zeit, nicht nur während der Anfertigung dieser Arbeit, sondern auch darüber hinaus.

Zuletzt möchte ich mich noch bei meiner Familie bedanken, die mich immer unterstützt hat. Insbesondere bedanke ich mich bei meinen Eltern, Rudi und Annemarie, die stets an mich geglaubt haben und immer für mich da waren, die mir dieses Studium überhaupt erst ermöglicht haben und ohne die ich es nicht soweit geschafft hätte.

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 08. August 2014

Daniel Ditzdorn