

Singuläre Diffusionsgleichung

Bachelorarbeit

Johanna Meumertzheim



Institut für Theoretische Physik
Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät
Universität zu Köln

Februar 2013, Köln

Erstgutachter:

Prof. Dr. Achim Rosch

Zweitgutachter:

Priv.-Doz. Dr. Markus Garst

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen	3
2.1	Kühlung	3
2.1.1	Laserkühlung	3
2.1.2	Evaporatives Kühlen	3
2.2	Optisches Potential	4
2.2.1	Optische Falle	4
2.2.2	Optisches Gitter	4
2.3	Streuung an ultrakalten Atomen	5
2.4	Feshbachresonanzen	7
2.5	Hubbard-Modell	8
2.6	Umklappstreuung	9
2.7	Boltzmann-Gleichung	10
2.7.1	Relaxationszeitnäherung	10
2.8	Experimentelle Realisierung	11
3	Singuläre Diffusionsgleichung	13
3.1	Motivation der singulären Diffusionsgleichung	13
3.2	Änderung der Teilchenzahl	16
3.2.1	Lösungen im eindimensionalen Fall	16
3.2.2	Universelle Verlustrate im zweidimensionalen Fall	17
4	Regularisierung der singulären Diffusionsgleichung	19
4.1	Annahme einer maximalen Geschwindigkeit	19
4.2	Annahme einer maximalen Geschwindigkeit ohne Rückwärtsbewegung	20
5	Telegraphengleichungen	23
5.1	Grenzfälle	24
5.2	Änderung des Radius mit der Zeit in zwei Dimensionen	25
5.3	Numerische Simulation	26
5.4	Negative Dichten im zweidimensionalen Fall	29
6	Kreisförmige Verteilungsfunktion	33
6.1	Ballistischer Grenzfall	36
6.2	Diffusiver Grenzfall	38
6.3	Numerische Simulation	38
6.4	Vergleich mit den Telegraphengleichungen	42
7	Zusammenfassung	43
	Literaturverzeichnis	I

1 Einleitung

Transporteigenschaften wie z.B. die elektrische Leitfähigkeit sind meist besonders für stark korrelierte Elektronensysteme nur schwer zu berechnen. In realen Festkörpern entstehen zusätzliche Komplikationen z.B. durch Fremdatome und Gitterdefekte. [1]. Schon 1982 schlug Richard P. Feynman vor, Festkörper mit Quantensystemen zu simulieren [2].

Ein System ultrakalter Atome in einem optischen Gitter eignet sich als Quantensimulator für einen Festkörper. Auf fermionische Atome wirken in solch einem System Kräfte, die mit den Kräften, die auf Elektronen in einem Festkörper wirken, vergleichbar sind. Durch ein optisches Gitter lässt sich ein perfekter Kristall erzeugen, welcher frei von Störstellen ist. Außerdem können alle wichtigen Parameter leicht geändert werden. Durch Ändern der Intensität und der Wellenlänge der Laser lassen sich z.B. die Potentialtiefe des Gitters und der Gitterabstand verstellen. Durch Feshbachresonanzen können sowohl attraktive als auch repulsive Wechselwirkungen verschiedener Stärken zwischen den Atomen eingestellt werden. Die maximale Geschwindigkeit von sich frei ausbreitenden Atome ist nur von der Tiefe des Gitters und der Gitterkonstanten abhängig. Kleine Wechselwirkungen führen zu einer stark verringerten Ausbreitungsgeschwindigkeit [1].

Im Bereich hoher Dichte, in dem die Atome oft an anderen Atomen stoßen, lässt sich die Zeitentwicklung der Dichte durch eine Differentialgleichung, welche in der Dichte singular ist, beschreiben. In den äußeren Bereichen der Atomwolke ist die Dichte sehr gering. Lösungen der Differentialgleichung beschreiben Atome, deren Geschwindigkeit im niedrigen Dichtebereich sehr groß wird.

In Dimensionen größer gleich zwei sagt die Differentialgleichung ein komplett unphysikalisches Verhalten voraus: In diesen Dimensionen existieren keine Lösungen der Differentialgleichung, welche die Teilchenzahl erhalten. In zwei Dimensionen verschwinden die Teilchen mit einer konstanten Rate im Unendlichen und in drei Dimensionen verschwinden die Atome in einem infinitesimalen Zeitschritt [2].

In Kapitel 2 geben wir eine Einführung in die Grundlagen der experimentellen Realisierung von kalten Gasen in optischen Gittern und stellen Modelle zur Beschreibung der Bewegung der Atome vor.

Im darauffolgenden Kapitel der Arbeit (Kap.3) beschäftigen wir uns mit Lösungen der singulären Diffusionsgleichung, insbesondere mit der universellen Verlustrate im Zweidimensionalen. Im Hauptteil der Arbeit stellen wir Ideen vor, wie man die Bewegung der Atome sowohl im ballistischen als auch im diffusiven Bereich gut beschreiben kann.

Dazu versuchen wir zunächst die singuläre Diffusionsgleichung zu regularisieren (Kap.4). Für geringe Dichten streuen die Atome nur noch sehr selten, sodass ihre Bewegung nahezu ballistisch ist. Durch die Annahme einer maximalen Geschwindigkeit der Atome, die durch die maximale Geschwindigkeit der ballistischen Bewegung gegeben ist, sollen physikalisch sinnvolle Lösungen gefunden werden.

In den Kapiteln 5 und 6 versuchen wir eine geeignete Verteilungsfunktion für die Dichte der Wolke zu finden. Hierzu werden zwei verschiedene Ansätze für die Verteilungsfunktion vorgestellt. Mithilfe der Boltzmann-Gleichung erhalten wir gekoppelte Differentialgleichungen, welche numerisch gelöst werden.

2 Grundlagen

In dieser Bachelorarbeit wird die Expansion kalter Atome im optischen Gitter betrachtet. Dieses Kapitel diskutiert die experimentellen Grundlagen als auch die Modelle, mit denen die Atome im Gitter beschrieben werden können.

Große Teile des einführenden Kapitels orientieren sich an [2].

2.1 Kühlung

2.1.1 Laserkühlung

Erst mit Hilfe der Laserkühlung ist es möglich geworden, Atome bis in den Mikrokkelvinbereich hin abzukühlen. Für die Entwicklung von Verfahren zur Laserkühlung wurde 1997 der Nobelpreis an Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji und William D. Phillips vergeben.

Das Prinzip der Laserkühlung beruht auf der Absorption und Emission von Photonen, bei denen Impulse auf die Atome übertragen werden. Da die spontane Emission isotrop erfolgt, ist der mittlere Impulsübertrag der spontanen Emission null.

Betrachten wir im Folgenden Atome mit zwei verschiedenen Zuständen, dem Grundzustand und einem angeregten Zustand.

Bestrahlt man die Atome mit einem rotverstimmten Laser (d.h. die Frequenz der Photonen liegt unterhalb der Übergangsfrequenz), so können aufgrund des Dopplereffekts nur Atome, die mit einer bestimmten Geschwindigkeit dem Laser entgegenlaufen, Photonen absorbieren. Die Atome nehmen dabei einen Impuls, der ihrer Bewegungsrichtung entgegengerichtet ist, auf und werden somit abgebremst.

Verwendet man drei Paare von jeweils zwei gegenläufigen Lasern und ordnet diese orthogonal an, erfahren die Atome unabhängig davon, in welche Raumrichtung sie sich bewegen, eine abbremsende Kraft. Da die Laserphotonen nur Atome mit bestimmten Geschwindigkeiten abbremsen können, muss die Frequenz der Photonen mit Zeit geändert werden. Alternativ können durch ein äußeres angelegtes Magnetfeld auch die Energieniveaus der Atome relativ zueinander verschoben werden [3].

Eine Grenze der erreichbaren tiefen Temperaturen ist durch den Impuls gegeben, den die Atome bei der Reemission von Photonen erhalten.

2.1.2 Evaporatives Kühlen

Mit Hilfe des evaporativen Kühlens kann man die Temperaturen weiter absenken.

Die Atome sind in einem Potential gefangen, welches eine endliche Tiefe hat. Durch Stöße können einzelne Atome Energien erreichen, die ausreichen um die Falle zu verlassen. Die zurückbleibenden Teilchen haben dann eine geringere mittlere Temperatur. Durch schrittweises Absenken der Falltiefe kann man Temperaturen im Nanokelvinbereich erreichen [4].

2.2 Optisches Potential

Neutrale Atome können mit Laserlicht aufgrund der Dipolkraft eingefangen werden. Ein oszillierendes elektrisches Feld induziert in den Atomen ein oszillierendes Dipolmoment, welches proportional zum elektrischen Feld ist.

$$\vec{p} = \alpha(\omega_L)\vec{E} \quad (1)$$

Der Proportionalitätsfaktor α heißt Polarisierbarkeit und hängt von der Frequenz des elektrischen Feldes ab. Die Frequenz des Laserlichts wird hier mit ω_L bezeichnet. Das Atom spürt ein Potential, welches proportional zur Intensität des angelegten elektrischen Feldes ist.

$$V_{dip}(\vec{r}) = -\vec{p}(\vec{r})\vec{E}(\vec{r}) = -\alpha(\omega_L)\left|\vec{E}(\vec{r})\right|^2 \propto I(\vec{r}) \quad (2)$$

Betrachten wir wieder ein Atom mit zwei Zuständen, dem Grundzustand $|g\rangle$ und einem angeregten Zustand $|e\rangle$ und bezeichnen im Folgenden mit ω_0 die Resonanzfrequenz. In der Nähe der Resonanz kann die Polarisierbarkeit durch

$$\alpha(\omega_L) = -\frac{\Gamma}{\hbar(\omega_L - \omega_0)} \quad (3)$$

angenähert werden. Γ ist proportional zu $\left|\langle e|\hat{d}_{\vec{E}}|g\rangle\right|^2$, wobei $\hat{d}_{\vec{E}}$ der Polarisationsoperator in Richtung des Feldes ist [5].

Das Vorzeichen der Polarisierbarkeit hängt nur von der Differenz $\Delta = \omega_L - \omega_0$ ab. Ist die Frequenz des Lichts kleiner als die Übergangsfrequenz ($\Delta < 0$), so ist das Potential attraktiv ($V_{dip} < 0$) und das Laserlicht heißt rotverschoben. Für Frequenzen, die größer als die Übergangsfrequenz sind, ist das Potential repulsiv ($V_{dip} > 0$) und das Laserlicht heißt blauverschoben. Ist das Laserlicht rotverschoben, so werden die Atome zu den Intensitätsmaxima hingezogen, andernfalls zu den Intensitätsminima.

2.2.1 Optische Falle

Optische Fallen sind optische Potentiale, welche die Atome aufgrund der Dipolkraft gefangen halten. Die Intensität eines Laserstrahls fällt normalerweise gaußförmig in radialer Richtung ab [2].

$$I(r) = I_0 e^{-2r^2/\omega_S^2} \quad (4)$$

Der Strahlradius ω_S gibt den Abstand an, bei dem die Intensität auf $\frac{1}{e^2}$ abgefallen ist. Wie im obigen Abschnitt erläutert, werden die Atome je nach der Differenz $\Delta = \omega_L - \omega_0$ ins Zentrum der Falle gezogen (rotverschobene Falle) oder aus dem Zentrum herausgeschoben (blauverschobene Falle).

2.2.2 Optisches Gitter

Optische Gitter sind spezielle optische Potentiale. Im einfachsten Fall entsteht ein optisches Gitter durch Überlagerung von zwei gegenläufigen Laserstrahlen derselben Frequenz, welche

eine stehende Welle mit Periode $\frac{\lambda}{2}$ (λ : Wellenlänge) bilden. Das Potential, welches durch eine einzelne stehende Welle in x-Richtung entsteht, hat die Form (s. Abb.1)

$$V(r, x) \approx V_0 e^{-2r^2/\omega_s^2} \sin^2(kx) \quad (5)$$

mit dem Wellenvektor $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ und $r = \sqrt{y^2 + z^2}$.

Für ausreichend große Potentialtiefen sind die Atome in Ebenen senkrecht zur x-Richtung eingesperrt [2].

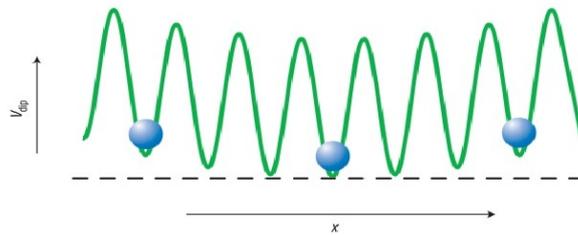


Abbildung 1: optisches Gitter- und Fallenpotential im eindimensionalen Fall entnommen aus [6]

Zwei- und dreidimensionale Gitter werden erzeugt, indem zwei bzw. drei gegenläufige Paare von Laserstrahlen verwendet werden (s. Abb. 2). Für orthogonale Polarisationsvektoren treten keine zusätzlichen Interferenzterme auf, sodass das Potential durch die Summe der Beiträge der einzelnen stehenden Wellen gegeben ist. In der Mitte der Falle können die Terme e^{-2r^2/ω_s^2} vernachlässigt werden, sodass das Potential durch

$$V(x, y, z) = V_0 (\sin^2(kx) + \sin^2(ky) + \sin^2(kz)) \quad (3 \text{ dim}) \quad (6)$$

angenähert werden kann [5].

2.3 Streuung an ultrakalten Atomen

In ultrakalten Gasen ist die Reichweite des Wechselwirkungspotentials deutlich kleiner als der mittlere Atomabstand. Daher reicht es aus, nur Stöße zweier Teilchen zu betrachten.

Die Beschreibung zweier streuender Teilchen kann durch einen Wechsel ins Schwerpunktsystem auf die Streuung eines Teilchens mit reduzierter Masse zurückgeführt werden.

Das Wechselwirkungspotential zwischen zwei Atomen ist drehimpulsabhängig. Ein von null verschiedener Drehimpuls führt zu einem Beitrag $\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}$ (μ : reduzierte Masse) zum effektiven Potential. Dieser zusätzliche Beitrag wird Drehimpulsbarriere genannt. Um die Barriere zu überwinden, benötigt man Temperaturen im Millikelvinbereich. Unterhalb dieser Temperaturen ist ausschließlich s-Wellenstreuung möglich, sodass wir uns hier auf diese beschränken können [2].

Nach dem Pauliprinzip ist s-Wellenstreuung bei ununterscheidbaren fermionischen Atomen nicht möglich. Daher benötigt man für Stöße zwischen Fermionen bei sehr niedrigen Temperaturen ein Gemisch aus Fermionen, welche sich in verschiedenen inneren Zuständen (z.B. in zwei verschiedenen Hyperfeinzuständen) befinden.

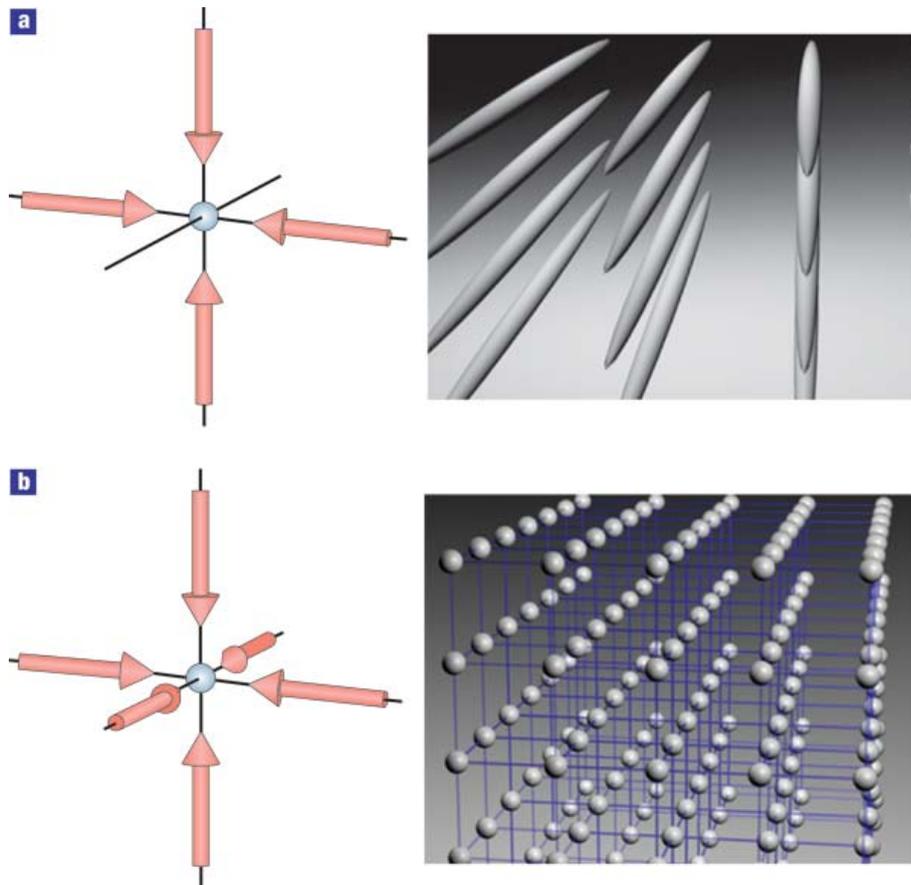


Abbildung 2: optisches Gitter in (a) zwei und (b) drei Dimensionen entnommen aus [5]

Die s-Wellen-Streuung zweier Atome kann dann durch den Ansatz

$$\psi(k, t) \approx e^{ikz} + \frac{f(k)}{r} e^{ikr} \quad (7)$$

beschrieben werden. Der Term e^{ikz} beschreibt eine in z-Richtung einlaufende ebene Welle. Der Term $\frac{f(k)}{r} e^{ikr}$ beschreibt eine auslaufende Kugelwelle, die um das Streuzentrum (hier: den Ursprung) rotationsinvariant ist. In dem hier betrachteten Bereich sehr geringer Temperaturen und für kleine Impulse gilt in guter Näherung für die Streuamplitude [5]

$$f(k) \approx \frac{-a}{1 + ika} \quad (8)$$

Die Streuamplitude hängt nur noch von dem Parameter a, der sogenannten s-Wellen-Streulänge ab. Die Stärke der Wechselwirkung wird durch die Streulänge charakterisiert. Bei positiver Streulänge ist die Wechselwirkung repulsiv, bei negativer Streulänge attraktiv.

2.4 Feshbachresonanzen

Feshbachresonanzen traten das erste Mal 1958 im Zusammenhang mit Kernreaktionen auf. Ihre Benutzung in ultrakalten Gasen wurde 1993 von Tiesinga et al. vorgeschlagen als einfache Möglichkeit in diesen Systemen die Streulänge zu ändern. Die experimentelle Realisierung erfolgte fünf Jahre später [2].

Die Streulänge kann häufig durch ein von außen angelegtes Magnetfeld verändert werden. Ein Anlegen eines äußeren Magnetfeldes führt zu einer Energieänderung eines Energieniveaus, sofern dieses ein magnetisches Moment μ besitzt.

$$\text{Zeeman-Effekt: } \Delta E = \mu B \quad (9)$$

Zwei Energieniveaus mit verschiedenen magnetischen Momenten erfahren unterschiedliche Zeemanverschiebungen und können dadurch relativ zueinander verschoben werden. Experimentell werden dazu häufig zwei verschiedene Hyperfeinzustände der Zwei-Teilchen-Wellenfunktion benutzt, welche unterschiedliche magnetische Momente besitzen [2].

Feshbachresonanzen entstehen, wenn ein gebundener Zustand energetisch mit einem Streuzustand übereinstimmt. Wenn die Energien der beiden Zustände nahezu übereinstimmen, können die Atome zwischen den Zuständen wechseln. Je näher die Energien der Niveaus beieinander liegen, desto länger können die Atome in dem gebundenen Zustand bleiben. An der Resonanzposition divergiert die Streulänge und die Wechselwirkung wird sehr stark. Die gestreuten Teilchen sind dann zeitweise in einem quasi-gebundenen Zustand gefangen (s. Abb.3).

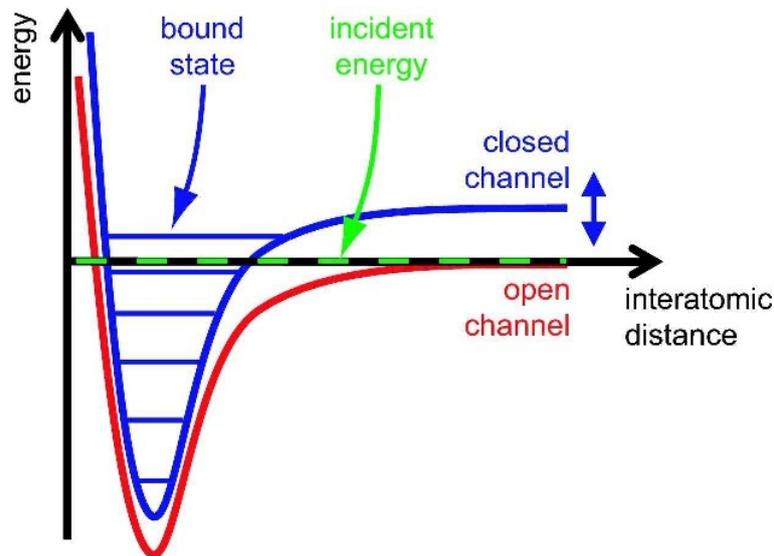


Abbildung 3: schematisches Modell für Feshbachresonanzen
entnommen aus [5]

Wir bezeichnen mit B_0 die Magnetfeldstärke, bei der sich die Zustände in Resonanz befinden. Für die Streuamplitude gilt dann näherungsweise (s. Abb.4):

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta B}{B - B_0} \right) \quad (10)$$

a_{bg} bezeichnet die Hintergrundstrelänge, d.h. die Strelänge weit entfernt von der Resonanz, ΔB beschreibt die Breite und B_0 die Position der Resonanz. Die Breite der Resonanz ist die Differenz zwischen Resonanzposition und Nulldurchgang der Strelänge. Bei der Resonanzposition divergiert die Strelänge [5].

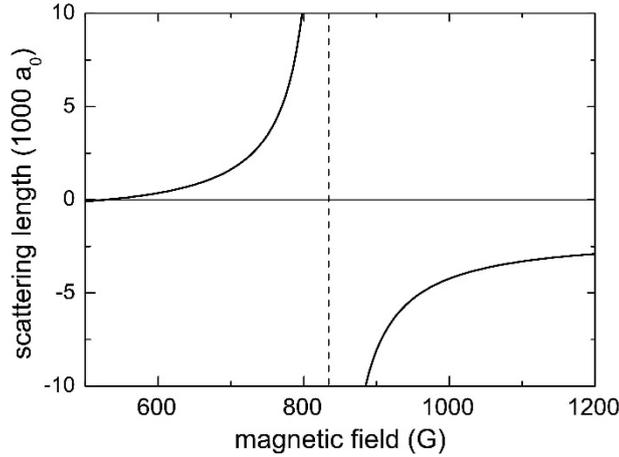


Abbildung 4: Abhängigkeit der Strelänge vom magnetischen Feld (s. Gl.(10)) (hier für ${}^6\text{Li}$ mit Resonanzposition bei $B_0 = 834\text{G}$, Nulldurchgang der Strelänge bei 534 G , $a_{bg} = -1405a_0$ a_0 : Bohrscher Radius) entnommen aus [5]

2.5 Hubbard-Modell

Das Hubbard-Modell wurde 1963 von J.Hubbard als Modell für wechselwirkende Fermionen in einem Gitter vorgeschlagen [2]. Der Hamiltonoperator lautet

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} . \quad (11)$$

Dabei ist $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$ der fermionische Erzeugungsoperator und $\hat{c}_{i\sigma}$ der Vernichtungsoperator. Für Elektronen gibt σ den Spin dieser an und für fermionische Atome verschiedene Hyperfeinzustände. Der erste Term des Hamiltonoperators beschreibt das Tunneln der Teilchen von einem Gitterplatz zu einem benachbarten Platz.

Der Operator $n_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}$ zählt die Anzahl der Teilchen mit Spin σ am i -ten Gitterplatz. Wenn beide Zustände am gleichen Gitterplatz besetzt sind, wechselwirken die fermionischen Atome und man erhält einen Beitrag zum Hamiltonian, wobei U die Wechselwirkungsenergie angibt. Für $U < 0$ werden doppelt besetzte Gitterplätze begünstigt, und für $U > 0$ einfach besetzte Gitterplätze. In Anwesenheit von einem äußeren Potential, z.B. einem Fallenpotential $V(\vec{r}) = V_0 |\vec{r}|^2$ gibt es einen weiteren Beitrag zum Hamiltonian [2]: $V_0 \sum_i (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) |\vec{r}|^2$

Das Hubbard-Modell lässt sich auch auf Bosonen erweitern. Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + \frac{U}{2} \sum_i n_i(n_i - 1) \quad (12)$$

2.6 Umklappstreuung

Wir betrachten den Streuprozess zweier Atome. Addieren sich die Impulse der streuenden Atome zu einem Impulsvektor auf, der außerhalb der ersten Brillouinzone liegt, so ist dieser äquivalent zu einem Impuls innerhalb der ersten Brillouinzone (s. Abb.5). Dabei wird ein Impuls auf das Gitter übertragen. Für kubische Gitter sind die Impulse, die auf das Gitter übertragen werden Vielfache von $\frac{2\pi}{a}$ (a : Gitterkonstante). Der Gesamtimpuls ist daher nur modulo reziproke Gittervektoren erhalten. Prozesse von der Form

$$\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4 + \vec{G} \quad (13)$$

mit $G \neq 0$ werden als Umklappprozesse (U-Prozesse) bezeichnet (G : reziproker Gittervektor). Prozesse, bei denen kein Impuls auf das Gitter übertragen wird, heißen Normalprozesse (N-Prozesse) [7]. In dem hier betrachteten Temperaturbereich hat das System im Vergleich zur Bandbreite des optischen Gitters eine hohe Temperatur, sodass Umklappstreuung auftritt. Das Auftreten von Umklappstreuung ermöglicht eine Relaxation des Stroms.

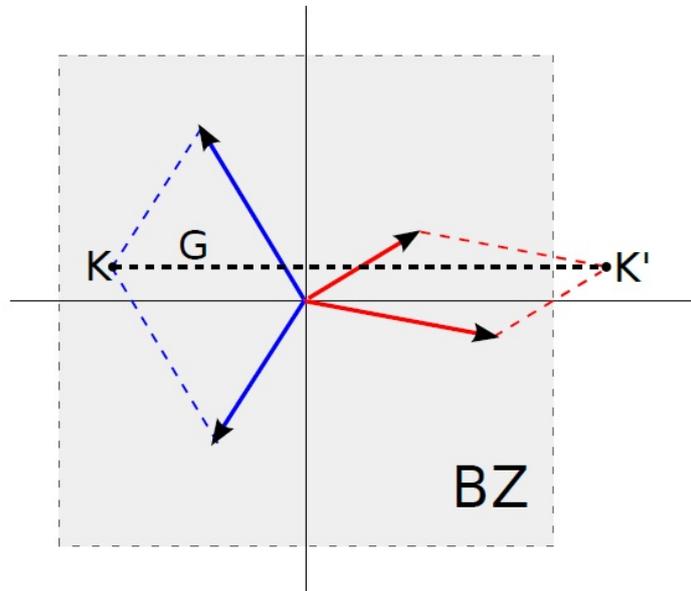


Abbildung 5: In rot sind die Impulse zweier einlaufender Teilchen gezeichnet. Diese addieren sich zu einem Impuls K' auf, der außerhalb der Brillouinzone liegt. Dieser ist äquivalent zu einem Impuls K innerhalb der Brillouinzone. In Folge dessen kehren beide Teilchen ihre Impulse um (blau). entnommen aus [2]

2.7 Boltzmann-Gleichung

Um die Expansion der Atome zu beschreiben, ist die Unterscheidung zwischen hohem und niedrigem Dichtebereich wichtig. Im hohen Dichtebereich, dem diffusiven Bereich, stoßen die Atome sehr oft aneinander, im Niedrigdichtebereich, dem ballistischen Bereich, bewegen sich die Atome nahezu frei.

Eines der einfachsten Modelle, welches sowohl den ballistischen Bereich als auch den diffusiven Bereich gut beschreiben kann, ist die Boltzmann-Gleichung [2].

Die Boltzmann-Gleichung ist eine Differentialgleichung für eine Verteilungsfunktion $f_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$.

$f_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$ gibt die Besetzungszahl der Teilchen am Ort \vec{r} zur Zeit t mit Impuls \vec{k} an. Das totale Differential von f ist gegeben durch

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} \quad (14)$$

mit der Geschwindigkeit $\vec{v}_{\vec{k}}$ und einer Kraft \vec{F} . Der zweite Term beschreibt die Bewegung der Teilchen aufgrund äußerer Felder, der dritte Term beschreibt die Bewegung der Teilchen aufgrund ihrer Geschwindigkeit. Im ballistischen Bereich, d.h. in Abwesenheit von Stößen, ist die Zeitentwicklung der Verteilungsfunktion gegeben durch [8]

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = 0. \quad (15)$$

In der semiklassischen Betrachtung streuen die Teilchen nur lokal im Ortsraum, d.h. zum Zeitpunkt des Stoßes ändern die Teilchen nur ihren Impuls, nicht aber ihren Ort. Berücksichtigen wir die Stöße der Teilchen, erhalten wir einen zusätzlichen Term $I_{coll}[f]_{\vec{k}}$.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = -I_{coll}[f]_{\vec{k}} \quad (16)$$

2.7.1 Relaxationszeitnäherung

Die Relaxationszeitnäherung ist eine einfache Näherung für das Kollisionsfunktional. Die Verteilungsfunktion im Gleichgewicht ist durch $f_{\vec{k}}^0$ gegeben. Diese muss so gewählt werden, dass die Teilchenzahl erhalten ist.

$$\int d^d k f_{\vec{k}}^0 = \int d^d k f_{\vec{k}} \quad (17)$$

Stöße bringen ein System ins Gleichgewicht. Die Relaxationszeit τ beschreibt die charakteristische Zeit, mit der ein System sich nach Abschalten der äußeren Kräfte seinem Gleichgewichtszustand annähert. $\frac{1}{\tau}$ ist somit eine Rate mit der das System ins Gleichgewicht gebracht wird. Als einfache Näherung kann man für das Kollisionsfunktional $I_{coll}[f]_{\vec{k}} \approx \frac{1}{\tau}(f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}}^0)$ verwenden. Für die Verteilungsfunktion ist dann die Gleichung

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{k}} + \vec{v}_{\vec{k}} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} = -\frac{1}{\tau}(f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}}^0) \quad (18)$$

zu lösen [2].

2.8 Experimentelle Realisierung

Eine mögliche experimentelle Realisierung der Expansion von kalten Atomen in optischen Gittern ist in [2] beschrieben. In dem dort beschriebenen Experiment werden Fermionen in zwei verschiedenen Hyperfeinzuständen betrachtet.

Zuerst werden die Atome in einer rotverschobenen Falle eingefangen und abgekühlt.

Anschließend wird ein blauverschobenes optisches Gitter hochgefahren. Wird das Gitter langsam genug hochgefahren, können Übergänge in höhere Bänder vermieden werden.

Um das System in einen Zustand bei unendlicher Temperatur zu bringen, wird das Gitter auf eine Gittertiefe hochgefahren, die deutlich tiefer ist als die Gittertiefe zum Startpunkt des Experiments und die das Tunneln der Atome nahezu unterdrückt. Die Atome sind jetzt stark lokalisiert und daher sind die Impulszustände gleich besetzt (Ort-Impuls-Unschärferelation). Dies entspricht einem Zustand bei unendlicher Temperatur.

Das magnetische Feld, welches die Streulänge des Systems beeinflusst, kann jetzt eingestellt werden.

Danach wird das Gitterpotential sehr schnell auf die gewünschte Tiefe zurückgestellt und das Fallenpotential soweit zurückgefahren, dass sich das einsperrende rotverschobene Fallenpotential und das aussperrende blauverschobene Gitterpotential ausgleichen. Es entsteht ein Gitterpotential für das gilt:

$$V(x_1, \dots, x_d) = V_0 \sum_{i=1}^d \sin^2(kx_i) \quad (19)$$

Die Teilchenwolke kann sich jetzt ausbreiten.

3 Singuläre Diffusionsgleichung

3.1 Motivation der singulären Diffusionsgleichung

Wir möchten die Expansion von kalten Atomen in einem Gitter beschreiben und benötigen dazu eine Differentialgleichung, welche die zeitliche Entwicklung der Dichte beschreibt. Im folgenden motivieren wir diese Differentialgleichung.

Die Hydrodynamik nutzt Erhaltungssätze wie Teilchenzahl-, Impuls- und Energieerhaltung aus, um ein System zu beschreiben. In dem von uns betrachteten System ist die Teilchenzahl und die Energie erhalten, während der Impuls aufgrund des Auftretens von Umklappstreuung nicht erhalten ist. Im Limes unendlicher Temperatur können wir die Energieerhaltung vernachlässigen, sodass wir hier nur die Teilchenzahlerhaltung berücksichtigen müssen [2]. Die Teilchenzahlerhaltung wird durch die Kontinuitätsgleichung beschrieben

$$\partial_t n(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0, \quad (20)$$

wobei $n(\vec{r}, t)$ die Dichte und $\vec{j}(\vec{r}, t)$ der Teilchenstrom ist. Wir entwickeln den Strom nach Ableitungen der Dichte.

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = D_0(n)n(\vec{r}, t) + D_1(n)\nabla n(\vec{r}, t) + D_2(n)\nabla(\nabla n(\vec{r}, t)) + \dots \quad (21)$$

Die Terme, die eine gerade Anzahl an Ableitungen enthalten, sind Skalare. Da der Strom eine vektorielle Größe ist, sind alle skalaren Terme null.

Für eine genügend glatte Funktion, d.h. in der Fouriertransformierten der Dichte haben Terme großer Wellenzahlen wenig Gewicht, können die Terme höherer Ableitungen vernachlässigt werden, sodass

$$j(\vec{r}, t) = D_1(n)\nabla n \quad (22)$$

mit $D_1(n) = -D(n)$, wobei $D(n)$ die Diffusionskonstante ist. Im hydrodynamischen Grenzfall (Wellenzahl $\rightarrow 0$) ist die Theorie exakt, solange keine Singularitäten in der Dichte oder dem Dichtegradienten auftreten [9].

Motivation der Diffusionskonstanten

In diesem Abschnitt betrachten wir ein sehr vereinfachtes Modell.

Unter Diffusion versteht man die Entstehung eines Stroms aufgrund der Bewegung von Teilchen in zufällige Richtungen.

Wir betrachten den Randomwalk eines Teilchens in einer Dimension. Mit τ bezeichnen wir die typische Zeit, die zwischen zwei Stößen vergeht, und mit $\langle v^2 \rangle$ die mittlere quadratische Geschwindigkeit der Teilchen. Im Zeitintervall τ legt das Teilchen im Mittel eine Strecke

$$\Delta x = \sqrt{\langle v^2 \rangle} \tau \quad (23)$$

zurück. Die in N Zeitintervallen der Größe τ im Mittel zurückgelegte Strecke x ist gegeben durch

$$x = \Delta x \sqrt{N} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} \tau \sqrt{N}, \quad (24)$$

wobei die Wurzel über N durch den Randomwalk entsteht und $t = N\tau$ die betrachtete Gesamtzeit bezeichnet.

Wir nehmen an, dass nahe beim Ursprung die Änderung der Dichte näherungsweise linear ist.

$$n(x) = n_0 + x \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=0} \quad (25)$$

In einem kleinen Zeitintervall $[0, t_0]$ betrachten wir den Strom der Teilchen durch den Ursprung.

Die Teilchen legen in der Zeit t_0 im Mittel eine Strecke $x_0 = \sqrt{\langle v^2 \rangle} \tau t_0$ zurück. Die Teilchen, die den Ursprung von negativen zu positiven x-Werten durchfließen, sind näherungsweise gegeben durch

$$N^- = \frac{1}{2} \int_{-x_0}^0 n(x) dx = \frac{1}{2} n_0 x_0 - \frac{1}{4} x_0^2 \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=0}, \quad (26)$$

wobei der Faktor $\frac{1}{2}$ aus den zwei möglichen Bewegungsrichtungen in einer Dimension stammt. Nicht alle Teilchen werden nach der Zeit t_0 die Strecke x_0 in eine der beiden möglichen Richtungen zurückgelegt haben. Ebenso werden auch Teilchen, die zum Zeitpunkt t_0 weiter als x_0 vom Ursprung entfernt waren, den Ursprung durchqueren, sodass wir nicht erwarten können den richtigen Vorfaktor der Diffusionskonstanten mit dieser Abschätzung zu erhalten.

Analog nähern wir die Zahl der Teilchen, welche den Ursprung von positiven zu negativen x-Werten durchfließen, an durch

$$N^+ = \frac{1}{2} \int_0^{x_0} n(x) dx = \frac{1}{2} n_0 x_0 + \frac{1}{4} x_0^2 \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=0}. \quad (27)$$

Wir erhalten den Fluss durch den Ursprung durch

$$j(x=0) = \frac{N^- - N^+}{t_0} = -\frac{1}{2} \frac{x_0^2}{t_0} \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=0} = -\frac{1}{2} \langle v^2 \rangle \tau \left. \frac{dn}{dx} \right|_{x=0}. \quad (28)$$

Der hier erhaltene Faktor ist um einen Faktor zwei zu klein.

Die Diffusionskonstante in d Dimensionen mit richtigen Vorfaktoren ist gegeben durch [1]

$$D(n) = \frac{\langle v^2 \rangle}{d} \tau(n). \quad (29)$$

Für kleine Dichten ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein Atom an einem anderen streut, proportional zur Dichte und somit gilt

$$\tau(n) = \frac{\tau_0}{n}. \quad (30)$$

Wir erhalten für den Strom

$$j(r, t) = -D_0 \frac{1}{n} \nabla n(r, t) \quad (31)$$

und damit für die Differentialgleichung

$$\partial_t n(r, t) = D_0 \nabla \left(\frac{1}{n} \nabla n(r, t) \right), \quad (32)$$

wobei D_0 der Vorfaktor der Diffusionskonstanten ist ($D_0 = D(n)n$).

In dem im vorherigen Teil beschriebenen Experiment betrachten wir Fermionen bei unendlicher Temperatur, deren Bewegung näherungsweise durch das Hubbard-Modell beschrieben

wird. Im Limes unendlicher Temperatur ist die mittlere quadratische Geschwindigkeit in zwei Dimensionen gegeben durch [1]

$$\langle v^2 \rangle = 4J^2 \frac{a_{Git}^2}{\hbar^2} \quad (33)$$

und wir erhalten für die Diffusionsgleichung

$$\partial_t n(r, t) = \frac{2J^2 a_{Git}^2 \tau_0}{\hbar^2} \nabla \left(\frac{1}{n} \nabla n(r, t) \right), \quad (34)$$

wobei a_{Git} die Gitterkonstante und J die Tunnelamplitude ist.

Die Wechselwirkungsenergie U ist quadratisch in τ_0 enthalten: $U^2 \sim 1/\tau_0$ (s. [2])

Durch eine Skalierung der Zeit

$$t \mapsto \frac{2J^2 a_{Git}^2 \tau_0}{\hbar^2} t \quad (35)$$

lässt sich der Vorfaktor mit in die Differentialgleichung aufnehmen. Somit beeinflusst die Stärke der Wechselwirkung nur die Geschwindigkeit der Expansion.

Daher betrachten wir im Folgenden häufig nur die Differentialgleichung

$$\partial_t n(r, t) = \nabla \left(\frac{1}{n} \nabla n(r, t) \right). \quad (36)$$

Außerdem werden wir manchmal die Betrachtung auf radialsymmetrische Anfangswertwertprobleme beschränken.

Radialsymmetrisches Anfangswertproblem

Für radialsymmetrische Anfangswertprobleme lässt sich die Diffusionsgleichung vereinfachen. Für ein d -dimensionales Anfangswertproblem und mit $r=|\vec{r}|$ und r_i der i -ten Ortskoordinate lässt sich schreiben

$$\partial_t n = \nabla \left(\frac{1}{n} \nabla n \right) = \sum_{i=1}^d \partial_{r_i} \left(\frac{1}{n} \partial_{r_i} n \right). \quad (37)$$

Die Betrachtung des i -ten Summanden ergibt:

$$\partial_{r_i} \left(\frac{1}{n} \partial_{r_i} n \right) = \left(\frac{\partial_r^2 n}{n} - \frac{(\partial_r n)^2}{n^2} \right) \frac{r_i^2}{r^2} + \frac{\partial_r n}{n} \left(\frac{1}{r} - \frac{r_i^2}{r^3} \right) \quad (38)$$

Insgesamt erhalten wir:

$$\partial_t n = \frac{\partial_r^2 n}{n} - \frac{(\partial_r n)^2}{n^2} + \frac{d-1}{r} \frac{\partial_r n}{n} = \frac{1}{r^{d-1}} \partial_r \left(\frac{r^{d-1}}{n} \partial_r n \right) \quad (39)$$

3.2 Änderung der Teilchenzahl

Nur Lösungen, welche die Gesamtzahl der Teilchen erhalten, können physikalisch sinnvoll sein. Wir folgen dabei [2]. Um eine Abschätzung für die Änderung der Teilchenzahl zu erhalten integrieren wir Gl.(39):

$$\begin{aligned}
 \partial_t N &= \int \partial_t n(\tilde{r}, t) d^d \tilde{r} = \lim_{r \rightarrow \infty} C_d \int_0^r \partial_t n \tilde{r}^{d-1} d\tilde{r} \\
 &\stackrel{(39)}{=} \lim_{r \rightarrow \infty} C_d \int_0^r \left(\frac{1}{\tilde{r}^{d-1}} \partial_{\tilde{r}} \left(\frac{\tilde{r}^{d-1}}{n} \partial_{\tilde{r}} n \right) \right) \tilde{r}^{d-1} d\tilde{r} = \lim_{r \rightarrow \infty} C_d \int_0^r \partial_{\tilde{r}} \left(\frac{\tilde{r}^{d-1}}{n} \partial_{\tilde{r}} n \right) d\tilde{r} \\
 &= \lim_{r \rightarrow \infty} C_d \frac{r^{d-1}}{n} \partial_r n(r, t) = \lim_{r \rightarrow \infty} C_d r^{d-1} \partial_r \log(n) \tag{40}
 \end{aligned}$$

Der Vorfaktor C_d ist die Oberfläche einer d-dimensionalen Einheitskugel. Beim vorletzten Schritt haben wir ausgenutzt, dass aus Symmetriegründen die Ortsableitung der Dichte im Ursprung verschwindet.

Damit die Teilchenzahl erhalten bleibt, muss der Term $C_d r^{d-1} \partial_r \log(n(r, t))$ für $r \rightarrow \infty$ verschwinden. Daher existiert ein $r_0 > 0$, sodass für alle $r \geq r_0$ gilt:

$$|\partial_r \log(n(r, t))| < \frac{1}{r^{d-1}} \tag{41}$$

Wir nehmen an, dass wir einen Ort finden, ab dem $\partial_r n(r, t)$ negativ oder null ist, und somit $\partial_r \log(n(r, t))$ keinen Vorzeichenwechsel mehr hat. Dann können wir Gl.(41) integrieren.

$$|\log(n(r, t)) - \log(n(r_0, t))| < \int_{r_0}^r \frac{1}{r^{d-1}} = \begin{cases} \frac{1}{-d+2} (r^{-d+2} - r_0^{-d+2}) & d \neq 2 \\ \log(r) - \log(r_0) & d = 2 \end{cases} \tag{42}$$

Da im Limes $r \rightarrow \infty$ die Dichte gegen null konvergiert, divergiert die linke Seite der Gl.(42) gegen unendlich. Daher muss die rechte Seite ebenfalls divergieren. Dies geschieht aber nur für $d \leq 2$. Teilchenzahlerhaltung ist daher für $d > 2$ nicht möglich. Im Fall $d < 2$ wird in [10] gezeigt, dass Lösungen, welche die Teilchenzahl erhalten, existieren. Die Fälle $d=1$ und $d=2$ werden im Folgenden genauer betrachtet.

3.2.1 Lösungen im eindimensionalen Fall

Im eindimensionalen Fall lautet die Diffusionsgleichung

$$\partial_t n(r, t) = \partial_r \left(\frac{1}{n(r, t)} \partial_r n(r, t) \right) = \partial_r^2 \log(n(r, t)). \tag{43}$$

Diese Gleichung ist analytisch lösbar. Wie sich leicht überprüfen lässt, sind Lösungen dieser Gleichung gegeben durch

$$n(r, t) = \frac{2t}{v^2 t^2 + r^2} \tag{44}$$

für beliebige $v \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ (s. Abb.6) [10].

Für alle $t \in \mathbb{R}$ gilt:

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2t}{v^2 t^2 + r^2} dr = \frac{4}{v} \left[\arctan \left(\frac{r}{vt} \right) \right]_0^{\infty} = \frac{2\pi}{|v|} \quad (45)$$

Diese Lösungen erhalten also die Teilchenzahl.

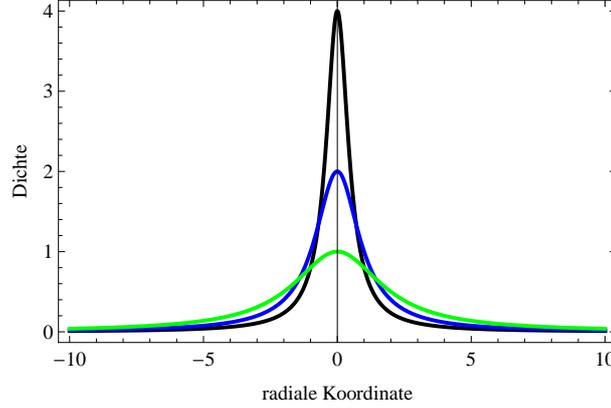


Abbildung 6: Änderung der Dichte im eindimensionalen Fall für $v=1$ und $t \in \{0.5, 1, 2\}$

3.2.2 Universelle Verlustrate im zweidimensionalen Fall

In [10] wird gezeigt, dass im Zweidimensionalen eine Verlustrate unabhängig von der Form der Anfangsverteilung existiert. Dies möchten wir nachvollziehen und folgen dabei [2]. Zunächst benötigen wir ein paar Vorbemerkungen.

Wir benutzen den Ansatz $n(r, t) = v(s, t) e^{-2s}$ mit $r = e^s$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \partial_s \log(v(s, t)) &= \partial_s \log(n(e^s, t) e^{2s}) = \frac{\partial_r n(e^s, t) e^{3s} + 2n(e^s, t) e^{2s}}{n(e^s, t) e^{2s}} \\ &= 2 + \frac{e^s \partial_r n(e^s, t)}{n(e^s, t)} = 2 + r \partial_r \log(n) \end{aligned} \quad (46)$$

Aus Symmetriegründen ist $\partial_r n(r, t) \Big|_{r=0} = 0$.

$$\lim_{s \rightarrow -\infty} \partial_s \log(v(s, t)) = \lim_{s \rightarrow -\infty} 2 + \frac{\partial_r n(e^s, t) e^s}{n(e^s, t)} = 2 \quad (47)$$

Sei $n(r, t)$ eine Lösung der Diffusionsgleichung im zweidimensionalen Fall (s. Gl.(39)). Dann ist $v(s, t) = n(r, t) e^{2s}$ eine Lösung für die eindimensionale Diffusionsgleichung. Denn:

$$\begin{aligned} \partial_t v(s, t) &= e^{2s} \partial_t n(r, t) = e^{2s} \frac{1}{r} \partial_r \left(\frac{r^3}{v(\log(r), t)} \partial_r \frac{v(\log(r), t)}{r^2} \right) \\ &= \partial_s \left(\frac{e^{2s}}{v(s, t)} \partial_s (v(s, t) e^{-2s}) \right) = \partial_s^2 \log(v(s, t)) \end{aligned} \quad (48)$$

Damit die Anzahl der Teilchen endlich ist, muss wegen $N(r, t) = C_2 \int_0^\infty rn(r, t)dr$ die Dichte für genügend große r kleiner als $\frac{1}{r^2}$ sein, d.h es existieren c und \tilde{r} mit

$$n(r, t) < \frac{c}{r^2} \quad \text{für alle } r \geq \tilde{r}. \quad (49)$$

Wir nehmen zusätzlich an, dass die Dichte stärker als $\frac{c}{r^2}$ abfällt:

$$\partial_r n(r, t) \leq \partial_r \left(\frac{c}{r^2} \right) = \frac{-2c}{r^3} \leq 0 \quad \text{für alle } r \geq \tilde{r} \quad (50)$$

Es folgt:

$$\partial_r \log(n(r, t)) = \frac{\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} \leq \frac{-2c r^2}{r^3 c} \leq \frac{-2}{r} \quad (51)$$

$$\text{und } \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{\partial_s v(s, t)}{v(s, t)} = \lim_{s \rightarrow \infty} \partial_s \log(v(s, t)) \stackrel{(46)}{=} \lim_{r \rightarrow \infty} 2 + r \partial_r \log n(r, t) \stackrel{(51)}{\leq} 0 \quad (52)$$

Jetzt können wir folgern:

$$\begin{aligned} \partial_t N(r, t) &= 2\pi \int_0^\infty \partial_t n(r, t) r dr = 2\pi \int_0^\infty \partial_t \frac{v(\log r, t)}{r} dr \\ &= 2\pi \int_{-\infty}^\infty \partial_t v(s, t) ds \stackrel{(48)}{=} 2\pi \int_{-\infty}^\infty \partial_s^2 \log(v(s, t)) ds = 2\pi [\partial_s \log(v(s, t))]_{-\infty}^\infty \\ &\stackrel{(47)}{=} 2\pi \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{\partial_s v(s, t)}{v(s, t)} - 4\pi \stackrel{(52)}{\leq} -4\pi \end{aligned} \quad (53)$$

Wir haben gezeigt, dass im zweidimensionalen Fall eine minimale Verlustrate von 4π unabhängig von der Form der Anfangsverteilung existiert.

Unter Berücksichtigung der Vorfaktoren ist die Verlustrate für $\partial_t n = \nabla (D(n)\nabla n)$ gegeben durch

$$\partial_t N \leq -D_0 4\pi = -2\pi \tau_0 \langle \bar{v}^2 \rangle. \quad (54)$$

mit $D_0 = D(n)n = \frac{\langle \bar{v}^2 \rangle \tau_0}{2}$ dem Vorfaktor der Diffusionskonstanten.

Für eine Anfangsverteilung, bei der die Dichte für $r \rightarrow \infty$ verschwindet, gilt sogar (s. [2], [10])

$$\partial_t N = -D_0 4\pi = -2\pi \tau_0 \langle \bar{v}^2 \rangle. \quad (55)$$

4 Regularisierung der singulären Diffusionsgleichung

Die singuläre Diffusionsgleichung liefert in zwei und größeren Dimensionen keine physikalisch sinnvollen Lösungen mehr (s. Kap.3.2). Aufgrund der Singularität in der Dichte ist die Bewegung der Teilchen im Niedrigdichtebereich nicht durch die hydrodynamische Näherung beschreibbar. Im Folgenden werden verschiedene Vorschläge skizziert, die singuläre Diffusionsgleichung

$$\partial_t n(\vec{r}, t) = \nabla \left(\frac{1}{n} \nabla n(\vec{r}, t) \right) \quad (56)$$

zu „regularisieren“. Im Niedrigdichtebereich lösen wir dann nicht mehr die singuläre Diffusionsgleichung, sondern beschreiben die Bewegung der Teilchen durch eine andere Gleichung, welche im Folgenden motiviert wird.

Der Strom $\vec{j} = -\frac{1}{n} \nabla n$ divergiert für $n \rightarrow 0$. Die Differentialgleichung beschreibt somit Teilchen, die im Niedrigdichtebereich immer schneller werden.

Die Geschwindigkeit der Atome im optischen Gitter ist durch die maximale Geschwindigkeit von sich ballistisch bewegenden Atomen nach oben beschränkt. Für die maximale Geschwindigkeit gilt

$$v_{max} = 2\sqrt{d} \frac{J}{\hbar} a_{Git}, \quad (57)$$

wobei a_{Git} die Gitterkonstante, d die Dimension, und J die Tunnelamplitude (s. Gl.(11)) angibt [1].

Im Folgenden betrachten wir radialsymmetrische Anfangswertprobleme, d.h. $\vec{j}(\vec{r}, t) = j(r)\hat{r}$ und $n(\vec{r}) = n(r)$, und bezeichnen mit v_{max} die maximale Geschwindigkeit der Atome.

4.1 Annahme einer maximalen Geschwindigkeit

Wir nehmen an, dass die singuläre Diffusionsgleichung die Bewegung der Atome so lange gut beschreibt, solange der Strom, der durch die Diffusionsgleichung gegeben ist, kleiner ist als der maximale Strom, der von sich frei bewegenden Atomen erzeugt wird.

Im Niedrigdichtebereich nehmen wir an, dass alle Atome sich mit der maximalen Geschwindigkeit fortbewegen.

Dies führt zu dem Ansatz:

$$\vec{j}(r, t) \approx \hat{r} \begin{cases} -\frac{\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} & \left| \frac{-\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} \right| \leq n(r, t)v_{max} \\ n(r, t)v_{max} & \frac{-\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} \geq n(r, t)v_{max} \\ -n(r, t)v_{max} & \frac{-\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} \leq -n(r, t)v_{max} \end{cases} \quad (58)$$

Der Strom ist jetzt stetig, aber nicht differenzierbar. Da wir aber die Kontinuitätsgleichung lösen wollen, benötigen wir einen Strom, der mindestens einmal stetig differenzierbar ist. Daher können wir nicht $\min \left(\left| \frac{\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} \right|, n(r, t)v_{max} \right)$ betrachten, sondern müssen eine glättende

Funktion benutzen. Wir benutzen $\min(a, b) = b \min\left(\frac{a}{b}, 1\right)$ und wählen eine Funktion $\widetilde{\min}$ mit $\widetilde{\min}(1, x) \approx \min(1, x)$, welche die Minimumsfunktion glättet und wie folgt definiert ist:

$$\widetilde{\min}(1, x) = \begin{cases} x & |x| \leq \frac{1}{1+e} \\ 1 & x \geq 1+e \\ -1 & x \leq -1-e \\ g_1(x, e) & x \geq 0 \text{ und } \frac{1}{1+e} \leq x \leq 1+e \\ g_2(x, e) & x \leq 0 \text{ und } -(1+e) \leq x \leq -\frac{1}{1+e} \end{cases} \quad (59)$$

g_1 und g_2 sind Polynome dritten Grades, sodass $\widetilde{\min}$ stetig differenzierbar ist (s. Abb.7).

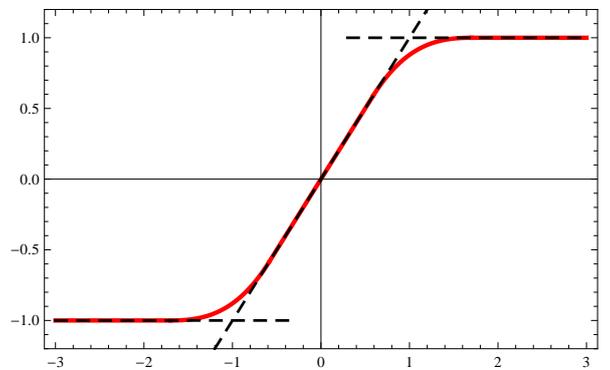


Abbildung 7: Aufgetragen sind die Funktionen 1,-1 und x (schwarz gestrichelt) gegen x und in rot $\widetilde{\min}(x, 1)$ für $e=0.7$

Mit unserer numerischen Simulation erhalten wir einen Strom $r \mapsto -\frac{\partial_r n}{n}$, der nicht stetig ist. Damit sind auch die Funktionen $r \mapsto g_i\left(\frac{\partial_r n/n}{nv_{max}}, e\right)$ nicht stetig. Wir erhalten eine stark ansteigende Teilchenzahl.

Wir testen den Ansatz aus Gl.(58) mit einer anderen Interpolationsmöglichkeit, bei der das interpolierende Polynom nur noch von den Werten des Stroms und dessen Ableitung an den Interpolationsrändern abhängt. Numerische Probleme führen dazu, dass sich große Zacken in der Dichte ausbilden.

Die mit beiden Interpolationsmöglichkeiten erhaltenen Ergebnisse sind daher nicht brauchbar.

Ein großer Nachteil des Ansatzes ist außerdem, dass der Strom im Niedrigdichtebereich negativ werden kann (falls $\partial_r n > 0$). Die Atome bewegen sich dann in Richtung Ursprung zurück und nicht vom Ursprung weg. Dies führt zum nächsten Ansatz.

4.2 Annahme einer maximalen Geschwindigkeit ohne Rückwärtsbewegung

Unter Berücksichtigung, dass alle Atome sich im Niedrigdichtebereich vom Ursprung wegbe-
 wegen sollen, erhalten wir einen Strom, der bis auf glättende Funktionen gegeben ist durch

$$\vec{j}(r, t) \approx \hat{r} \begin{cases} -\frac{\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} & \left| \frac{-\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} \right| \leq n(r, t) v_{max} \\ n(r, t) v_{max} & \left| \frac{-\partial_r n(r, t)}{n(r, t)} \right| \geq n(r, t) v_{max} \end{cases} . \quad (60)$$

Analog zum vorherigen Teil können wir eine glättende Minimumfunktion benutzen (s. Abb.8). Nachteil dieses Ansatzes ist, dass Atome, die vom hohen Dichtebereich in den niedrigen Dichtebereich wechseln und die sich im hohen Dichtebereich zum Ursprung hinbewegt haben, eine starke Geschwindigkeitsänderung erfahren.

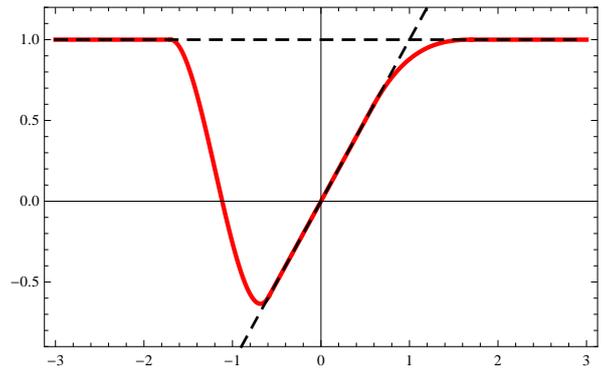


Abbildung 8: Aufgetragen sind die Funktionen 1,-1 und x (schwarz gestrichelt) gegen x und in rot $\widetilde{\min}(x, 1)$ für $\epsilon=0.7$, im negativen Bereich ändern sich die Funktionswerte durch das Interpolationspolynom sehr stark

Wir erhalten ähnliche numerische Probleme wie in Kapitel 4.1. Die Ergebnisse sind ebenfalls nicht brauchbar.

Im Folgenden beschreiben wir jetzt unser System durch eine Verteilungsfunktion, mit der wir die Boltzmann-Gleichung lösen können.

5 Telegraphengleichungen

Wir beschreiben das System sich ausbreitender Atome jetzt durch eine Verteilungsfunktion $f_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$. Dabei folgen wir dem Ansatz und der Rechnung von S. Mandt in [11] und wählen für $f_{\vec{k}}$ eine im Impulsraum nahezu konstante Funktion. Da alle Impulse gleich besetzt sind, entspricht dies einem Zustand bei unendlicher Temperatur, wie auch in der experimentellen Realisierung (s. Kap.2.8).

$$f_{\vec{k}}(\vec{r}) = n(\vec{r}) + \delta f_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (61)$$

Für $\delta f_{\vec{k}} = 0$ ist das System lokal im Gleichgewicht, d.h. $I_{coll}[n]_{\vec{k}} = 0$. Wir entwickeln $I_{coll}[n + \delta f]_{\vec{k}}$ bis zur Ordnung $\delta f_{\vec{k}}$:

$$I_{coll}[n + \delta f]_{\vec{k}} \approx \underbrace{I_{coll}[n]_{\vec{k}}}_{=0} + \int d\vec{k}' M_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta f_{\vec{k}'} \quad (62)$$

Da die Teilchenzahl erhalten ist, gilt

$$\int d\vec{k}' M_{\vec{k}, \vec{k}'} \delta f_{\vec{k}'} = \int d\vec{k}' M_{\vec{k}, \vec{k}'} f_{\vec{k}'} - \underbrace{\int d\vec{k}' M_{\vec{k}, \vec{k}'} n(\vec{r})}_{=0} \quad (63)$$

und wir erhalten (s. Gl.(16))

$$\partial_t f + \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \nabla_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} f = - \int M_{\vec{k}, \vec{k}'} f_{\vec{k}'} d^d k'. \quad (64)$$

Wir definieren ein Skalarprodukt für impulsabhängige Funktionen durch

$$\langle h_{\vec{k}} | g_{\vec{k}} \rangle = \int \frac{1}{(2\pi)^d} h(\vec{k}) g(\vec{k}) d^d k. \quad (65)$$

Teilchenzahl n , Teilchenstrom \vec{j} , Energie e und Energiestrom \vec{h} sind gegeben durch

$$n(\vec{r}, t) = \langle 1 | f_{\vec{k}} \rangle \quad \vec{j}(\vec{r}, t) = \langle \vec{v}_{\vec{k}} | f_{\vec{k}} \rangle \quad e(\vec{r}, t) = \langle \epsilon_{\vec{k}} | f_{\vec{k}} \rangle \quad \vec{h}(\vec{r}, t) = \langle \epsilon_{\vec{k}} \vec{v}_{\vec{k}} | f_{\vec{k}} \rangle. \quad (66)$$

Aus Gl.(64) erhalten wir die beiden Gleichungen

$$\langle 1 | \left(\partial_t + \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \nabla_{\vec{r}} + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} \right) f \rangle = - \langle 1 | M | f_{\vec{k}} \rangle \quad (67)$$

$$\langle \vec{v}_{\vec{k}} | \left(\partial_t + \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \nabla_{\vec{r}} + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} \right) f \rangle = - \langle \vec{v}_{\vec{k}} | M | f_{\vec{k}} \rangle. \quad (68)$$

Wir verwenden als Ansatz für $f_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$

$$f_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = n(\vec{r}, t) + \frac{e(\vec{r}, t)}{2J^2 d} \epsilon_{\vec{k}} + \frac{\vec{j}(\vec{r}, t) \hbar^2}{2J^2 a_{Git}^2} \vec{v}_{\vec{k}} + \frac{\vec{h}(\vec{r}, t) \hbar^2}{6J^4 a_{Git}^2} \vec{v}_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}. \quad (69)$$

In [2] wird gezeigt, dass man in führender Ordnung die ersten beiden Terme für die Gleichgewichtsfunktion erhält, wenn man die Hochtemperaturentwicklung betrachtet

$$f_{\vec{k}}^0(\vec{r}, t) \approx n(\vec{r}, t) + \frac{e(\vec{r}, t)}{2J^2 d} \epsilon_{\vec{k}} + \mathcal{O}(e^2), \quad (70)$$

wobei $e = \mathcal{O}\left(\frac{1}{T}\right)$.

Da wir hier die Bewegung der Teilchen in Abwesenheit von einer Kraft betrachten wollen, setzen wir $\vec{F} = 0$

Betrachten wir zunächst die rechte Seite von Gl.(67). Es gilt

$$\langle 1 | M | f_{\vec{k}} \rangle = 0, \quad (71)$$

da Stöße die Teilchenzahl nicht ändern.

Die Betrachtung der linken Seite von Gl.(67) ergibt:

$$\left\langle 1 \left| \left(\partial_t + \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \nabla_{\vec{r}} + \vec{F} \cdot \nabla_{\vec{k}} \right) f \right. \right\rangle = \partial_t \langle 1 | f_{\vec{k}} \rangle + \nabla_{\vec{r}} \langle \vec{v}_{\vec{k}} | f_{\vec{k}} \rangle = \partial_t n + \nabla_{\vec{r}} \vec{j} \quad (72)$$

Insgesamt erhalten wir also aus Gl.(67) die Kontinuitätsgleichung.

S. Mandt zeigt in [11], dass man mit der Definition $\tau^{-1}(n) := \frac{\hbar^2}{2J^2 a_{Git}^2} \langle \vec{v}_{\vec{k}} | M | v_{\vec{k}} \rangle$ näherungsweise für die zweite Gleichung

$$\dot{\vec{j}} + \frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \nabla_{\vec{r}} n \approx -\tau^{-1}(n) \vec{j} \quad (73)$$

erhält. Unter der Benutzung, dass wir für kleine Dichten $\tau^{-1}(n) = \tau_0^{-1} n$ schreiben können, erhalten wir die beiden gekoppelten Differentialgleichungen:

$$\dot{n} + \nabla_{\vec{r}} \vec{j} = 0 \quad (74)$$

$$\dot{\vec{j}} + \frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \nabla_{\vec{r}} n \approx -\frac{1}{\tau_0} n \vec{j} \quad (75)$$

Falls $\tau(n)$ nicht von der Dichte abhängt, vereinfachen sich die Gleichungen zu

$$\ddot{n} - \frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \Delta n + \frac{1}{\tau} \dot{n} = 0. \quad (76)$$

Die Telegraphengleichung ist eine allgemeine Form der Wellengleichung, wie zum Beispiel Gl.(76). Im Folgenden bezeichnen wir aber die Gleichungen (74) und (75) als Telegraphengleichungen.

5.1 Grenzfälle

Im diffusiven Bereich ist die zeitliche Änderung des Stroms klein im Vergleich zum Stoßterm $\tau_0^{-1} n \vec{j}$. Die Gleichungen lauten dann wie folgt:

$$\dot{n} + \nabla_{\vec{r}} \vec{j} = 0 \quad (77)$$

$$\frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \nabla_{\vec{r}} n = -\tau_0^{-1} n \vec{j} \quad \Rightarrow \quad \vec{j} = -\frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \tau_0 \frac{1}{n} \nabla_{\vec{r}} n \quad (78)$$

Wir erhalten also das gewünschte Verhalten im diffusiven Bereich (vgl. Gl.(34)).

Im ballistischen Bereich ist $\tau_0^{-1} n \vec{j} \ll \dot{\vec{j}}$. Wir erhalten für die Dichte die Gleichung

$$0 = \partial_t \left(\dot{n} + \nabla_{\vec{r}} \vec{j} \right) = \ddot{n} - \frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \Delta n. \quad (79)$$

Im ballistischen Bereich ist also die Wellengleichung zu lösen. Eine genauere Betrachtung erfolgt in Kapitel 5.4.

Durch Vernachlässigen des Terms $\frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \nabla_{\vec{r}} n$ erhält man einen exponentiellen Abfall des Stroms.

$$\dot{\vec{j}} \approx -\tau^{-1}(n) \vec{j} \quad \Rightarrow \quad \vec{j} = e^{-\tau^{-1}(n)t} \quad (80)$$

5.2 Änderung des Radius mit der Zeit in zwei Dimensionen

Wir schätzen analytisch ab, wie sich der Radius mit der Zeit ändert. In späteren Kapiteln starten wir die numerischen Simulationen mit einem Strom, der zu Beginn der Simulation identisch null ist. Dies entspricht einer Anfangsverteilung für die gilt $\partial_t n(r, t) \Big|_{t=0} = 0$.

Für kleine Zeiten betrachten wir die Taylorentwicklung der Dichte bis zur zweiten Ordnung und berechnen den Erwartungswert des Radius, wobei N die Gesamtzahl der Teilchen ist.

$$\begin{aligned} \langle \langle r^2 \rangle \rangle^{1/2}(t) &= \frac{1}{N} \left(\int d^d r r^2 n(r, t) \right)^{1/2} \\ &\approx \frac{1}{N} \left(\int d^d r r^2 n(r, 0) + \underbrace{\int d^d r r^2 \partial_t n(r, 0) t}_{=0 \text{ wg. Anfangsbed.}} + \int d^d r r^2 \frac{1}{2} \partial_t^2 n(r, 0) t^2 \right)^{1/2} \\ &\approx \frac{1}{N} \left(\int d^d r r^2 n(r, 0) \right)^{1/2} + \frac{t^2}{N} \frac{1}{2 \left(\int d^d r r^2 n(r, 0) \right)^{1/2}} \int d^d r r^2 \frac{1}{2} \partial_t^2 n(r, 0) \end{aligned} \quad (81)$$

Im letzten Schritt haben wir ausgenutzt, dass die Taylorentwicklung für $\sqrt{A + Bx^2}$ bis zur zweiten Ordnung durch $\sqrt{A} + \frac{Bx^2}{2\sqrt{A}}$ gegeben ist.

Wir erwarten also für sehr kleine Zeiten, dass $\langle \langle r^2 \rangle \rangle^{1/2}(t) \sim t^2 + \text{const.}$

Als nächstes schätzen wir das Wachstum des Radius in zwei Dimensionen für Zeiten ab, zu denen noch Teilchen im diffusiven Bereich vorhanden sind.

Wie in Kapitel 3.2.2 gezeigt wurde, existiert im Zweidimensionalen eine universelle Verlustrate von $4\pi D_0$. S. Mandt zeigt in [2] mit Hilfe von numerischen Simulationen der Boltzmann-Gleichung, dass die Rate, mit der Teilchen vom diffusiven in den ballistischen Bereich wechseln, ebenfalls nahezu konstant ist.

Wir nehmen an, dass die Rate, mit der die Teilchen vom diffusiven in den ballistischen Bereich wechseln, genau mit der universellen Verlustrate übereinstimmt und folgen [2]. Der Zeitpunkt, an dem alle Teilchen im Unendlichen verschwunden sind, ist gegeben durch

$$t_{max} = -\frac{N}{\dot{N}}. \quad (82)$$

Wir bezeichnen mit $W(t)$ die Rate, mit der die Teilchen vom diffusiven in den ballistischen Bereich wechseln, und erhalten mit der obigen Annahme, dass die Rate konstant ist

$$W(t) = \begin{cases} \frac{N}{t_{max}} & t < t_{max} \\ 0 & t \geq t_{max} \end{cases} . \quad (83)$$

Die Dichte im ballistischen Bereich ist gegeben durch

$$n_{ball}(\vec{r}, t) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \int_0^t dt' W(t') \delta(\vec{r} - \vec{v}_{\vec{k}}(t - t')). \quad (84)$$

Die Teilchen im diffusiven Bereich liefern nahezu keinen Beitrag zum Radius und können daher vernachlässigt werden. Wir setzen für den Radius für Zeiten $t < t_{max}$ an:

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle(t) &\approx \frac{1}{N} \int d^2r r^2 n_{ball}(\vec{r}, t) \\ &= \frac{1}{N} \int_0^t dt' W(t') \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dr \int_0^{2\pi} d\varphi r^3 \delta(\vec{r} - \vec{v}_{\vec{k}}(t - t')) \\ &= \frac{1}{N} \int_0^t dt' W(t') \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dr \frac{r^3}{v_{\vec{k}}(t - t')} \delta(r - v_{\vec{k}}(t - t')) \\ &= \frac{1}{N} \int_0^t dt' W(t') \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} v_{\vec{k}}^2 (t - t')^2 = \frac{1}{N} \int_0^t dt' W(t') (t - t')^2 \underbrace{\int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} v_{\vec{k}}^2}_{\langle \vec{v}^2 \rangle} \\ &= \frac{\langle \vec{v}^2 \rangle}{t_{max}} \int_0^t dt' (t - t')^2 = \frac{1}{3} \langle \vec{v}^2 \rangle \frac{t^3}{t_{max}} \end{aligned} \quad (85)$$

Insgesamt erhalten wir für den Radius in zwei Dimensionen:

$$\sqrt{\langle r^2 \rangle}(t) = \begin{cases} t^2 & t \rightarrow 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3} \langle \vec{v}^2 \rangle \frac{1}{t_{max}}} t^{3/2} & t < t_{max} \\ \sqrt{\langle \vec{v}^2 \rangle} t & t \gg t_{max} \end{cases} \quad (86)$$

5.3 Numerische Simulation

Skalierung der Parameter

Die zeitliche Entwicklung der Dichte ist abhängig von der Wahl der Streuzeit und von der Wahl der Anfangsverteilung. Wir möchten betrachten, wie eine Änderung dieser Werte das System beeinflusst. Wir skalieren Dichte, Strom, Ort und Zeit wie folgt:

$$t = a\tilde{t} \quad (87)$$

$$n = n(0, 0) \tilde{n} \quad (88)$$

$$j = c\tilde{j} \quad (89)$$

$$x = r_0\tilde{x} \quad (90)$$

mit $n(r=0,t=0)$ dem Wert der Anfangsdichte im Ursprung und r_0 dem Anfangsradius der Wolke. In den skalierten Koordinaten hat die Teilchenwolke jetzt eine Höhe von eins (d.h. $\tilde{n}(0,0) = 1$) und einen Anfangsradius von eins.

Aus Gl.(74) und Gl.(75) erhalten wir folgende Gleichungen für die dimensionslosen Parameter:

$$\frac{n(0,0)}{a} \dot{\tilde{n}} + \frac{c}{r_0} \nabla \vec{j} = 0 \quad (91)$$

$$\frac{c}{a} \dot{\vec{j}} + \frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \frac{n(0,0)}{r_0} \nabla \tilde{n} = -\frac{n(0,0)c}{\tau_0} \vec{j} \tilde{n} \quad (92)$$

Die Wahl von $\frac{n(0,0)}{a} = \frac{c}{r_0}$ und $\frac{c}{a} = \frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \frac{n(0,0)}{r_0}$ führt auf die Gleichungen

$$\dot{\tilde{n}} + \nabla \vec{j} = 0 \quad (93)$$

$$\dot{\vec{j}} + \nabla \tilde{n} = -f \tilde{n} \vec{j} \quad \text{mit} \quad f = \frac{r_0 n(0,0) \hbar}{\sqrt{2} J a_{Git} \tau_0} \quad (94)$$

und Zeit und Strom skalieren wie folgt:

$$t = \frac{r_0 \hbar}{\sqrt{2} J a_{Git}} \tilde{t} \quad (95)$$

$$\vec{j} = \frac{\sqrt{2} J a_{Git}}{\hbar} n(0,0) \tilde{j} \quad (96)$$

Der Parameter f ist der einzige freie Parameter in den Gleichungen (93) und (94). Durch die Wahl von f können beliebige Situationen simuliert werden.

Für die numerische Simulation wählen wir radiale Koordinaten und betrachten nur radialsymmetrische Probleme, sodass wir $n(\vec{r}, t) = n(r, t)$ und $\vec{j}(\vec{r}, t) = j(r, t) \hat{r}$ schreiben können. Die beiden Gleichungen lauten dann:

$$\partial_t n + \partial_r j + \frac{d-1}{r} j = 0 \quad (97)$$

$$\partial_t j + \partial_r n = -f n j \quad (98)$$

Wir starten die numerische Simulation stets mit einer nahezu gaußförmigen Anfangsdichte

$$n(r, 0) = \exp(-(r-h)^2) - \exp(-(L-h)^2) \quad (99)$$

mit der Systemgröße L und der Ortsdiskretisierung h . Um numerische Probleme zu verringern, ist die Anfangsdichte aufgrund der Singularität in r leicht verschoben (s. Gl.(97)). Wir lösen die Differentialgleichungen dann für Werte zwischen h und L für die radiale Koordinate. Subtraktion des Terms $\exp(-(L-h)^2)$ führt dazu, dass die Dichte an den Systemrändern verschwindet.

Abb.9 zeigt die Entwicklung der Dichte im ballistischen Grenzfall ($\frac{1}{\tau_0} \approx 0$) in einer (Abb.9a) und in zwei Dimensionen (Abb.9b) aufgetragen gegen die radiale Koordinate. In beiden Dimensionen ist die Entwicklung der Dichte für genügend feine Orts- und Zeitdiskretisierungen unabhängig von diesen.

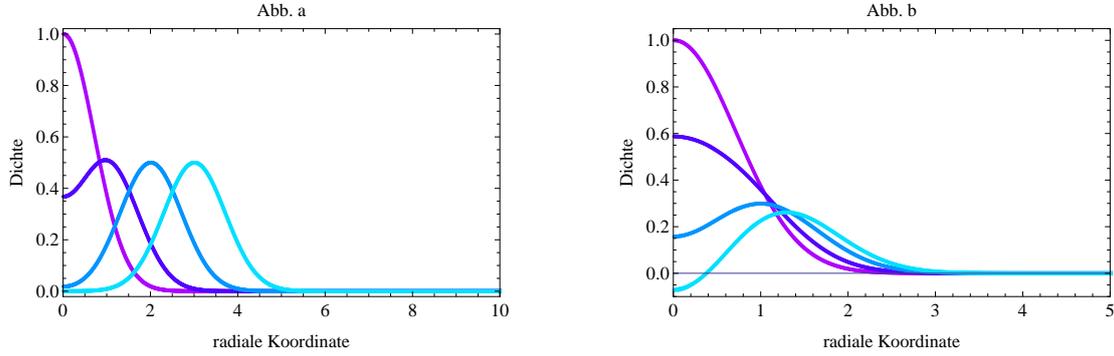


Abbildung 9: a) Aufgetragen ist die Dichte zu den Zeiten $t \in \{0, 0.5, 0.8, 1\}$ für die Systemgröße $L=50$, Ortsdiskretisierung $h=0.01$, Zeitdiskretisierung 10^{-6} im ballistischen Fall (d.h. $f=0$) in einer Dimension

b) Aufgetragen ist die Dichte zu den Zeiten $t \in \{0, 1.0, 2.0, 3.0\}$ für die Systemgröße $L=50$, Ortsdiskretisierung $h=0.01$, Zeitdiskretisierung 10^{-6} im ballistischen Fall (d.h. $f=0$) in zwei Dimensionen

Überraschenderweise wird die Dichte im Zweidimensionalen negativ. Eine analytische Rechnung zeigt, dass dies kein numerisches Problem ist, sondern eine Eigenschaft der Gleichungen (s. Kap.5.4).

Für große Werte von f bleibt die Dichte positiv. Es treten jedoch für längere Zeitentwicklungen numerische Probleme nahe beim Ursprung auf, sodass wir nicht beliebig lange Zeitentwicklungen betrachten können. Im Folgenden betrachteten wir nur Zeiten, zu denen noch keine numerischen Probleme vorhanden sind, und die erhaltenen Ergebnisse sind unabhängig von Orts- und Zeitdiskretisierung.

Alle Abbildungen sind in den skalierten Orts- und Zeitkoordinaten für Dimension zwei aufgetragen. Für eine Wahl von $\frac{J_{aG}t}{h} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und für eine Anfangsbedingung wie in Gl.(99) stimmen die skalierten Koordinaten mit den reskalierten bis auf Einheiten überein.

In Abb.10a ist die Dichte für drei verschiedene Zeiten und festes f ($f=10$) gegen die radiale Koordinate aufgetragen.

Die Dichte zum Zeitpunkt $t=1.5$ ist in Abb.10b vergrößert aufgetragen. An der Stelle, an der die Dichteverteilung einen Knick hat ($r \approx 1.8$), lässt sich ein Wechsel zwischen diffusivem und ballistischem Bereich vermuten.

Abb.10c zeigt den Erwartungswert des Radius in Abhängigkeit von der Zeit für verschiedene Werte von f . Da f reziprok zur Streuzeit ist, sehen wir, dass der Radius wie erwartet für kleinere Werte von τ_0 schwächer wächst.

In Kapitel 5.2 haben wir eine Abschätzung für das Wachstum des Radius mit der Zeit gegeben. Unsere numerischen Ergebnisse wollen wir jetzt mit dieser Abschätzung vergleichen.

Die Verlustrate in zwei Dimensionen ist gegeben durch (s. Gl.(55))

$$\dot{N} = -2\pi\tau_0 \langle \vec{v}^2 \rangle . \tag{100}$$

Die Geschwindigkeit im Hubbard-Modell ist gegeben durch

$$\langle \vec{v}^2 \rangle = \frac{4J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2}. \quad (101)$$

Somit erwarten wir, dass für den Radius bis zu einer Zeit

$$t_{max} = -\frac{N}{\dot{N}} = \frac{\pi}{2\pi\tau_0 \langle v^2 \rangle} = \frac{\hbar^2}{8J^2 a_{Git}^2 \tau_0} \quad (102)$$

gilt (s. Gl.(86)):

$$r(t) \sim t^{1.5} + \text{const} \quad (103)$$

Für sehr große Zeiten erwarten wir einen Exponenten von eins.

Für kleine Zeitintervalle fitten wir an den Radius eine Kurve der Form

$$r(t) = bt^a + c. \quad (104)$$

Die hier gewählten Zeitintervalle haben eine Breite von 0.3.

Der Exponent a ist für f=10 in Abb.10d aufgetragen. Für die Wahl von $\frac{Ja_{Git}}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ und f=10 erhalten wir $\tau_0 = 0.1$ und $t_{max} = 2.5$ und die skalierten Ort-und Zeitkoordinaten stimmen mit den reskalierten bis auf Einheiten überein.

In unserer numerischen Simulation startet der Exponent wie erwartet mit zwei. Wir erhalten aber keinen Bereich, in dem der Exponent 1.5 ist. Stattdessen fällt der Exponenten sehr schnell auf einen Wert von ca. 1.15 ab. Es ist gut möglich, dass der Exponent in Abb.10d für längere Zeiten gegen eins konvergiert. Aufgrund numerischer Probleme haben wir dies nicht untersucht.

Für andere Werte von f erhalten wir fast die gleichen Ergebnisse für den Exponenten.

5.4 Negative Dichten im zweidimensionalen Fall

Um auszuschließen, dass die negativen Dichten im Zweidimensionalen nicht durch ein numerisches Problem entstehen, lösen wir jetzt die Telegraphengleichungen im ballistischen Fall. Im ballistischen Fall ist die Wellengleichung

$$\ddot{n} = \frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \Delta n \quad (105)$$

zu lösen (s. Gl.(79)). Wir bezeichnen mit $n_0(r)$ die Anfangsverteilung der Dichte. Für eine numerische Simulation wählen wir als Anfangsbedingung für den Strom $j(r,0)=0$. Dies ist äquivalent zu $\partial_t n|_{t=0} = 0$.

Die Fouriertransformierte der Anfangsverteilung ist gegeben durch

$$n_{\vec{k}}(t=0) = \int d^2r n_0(r) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (106)$$

und die Zurücktransformierte durch

$$n(r,t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2k n_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k}\vec{r}}. \quad (107)$$

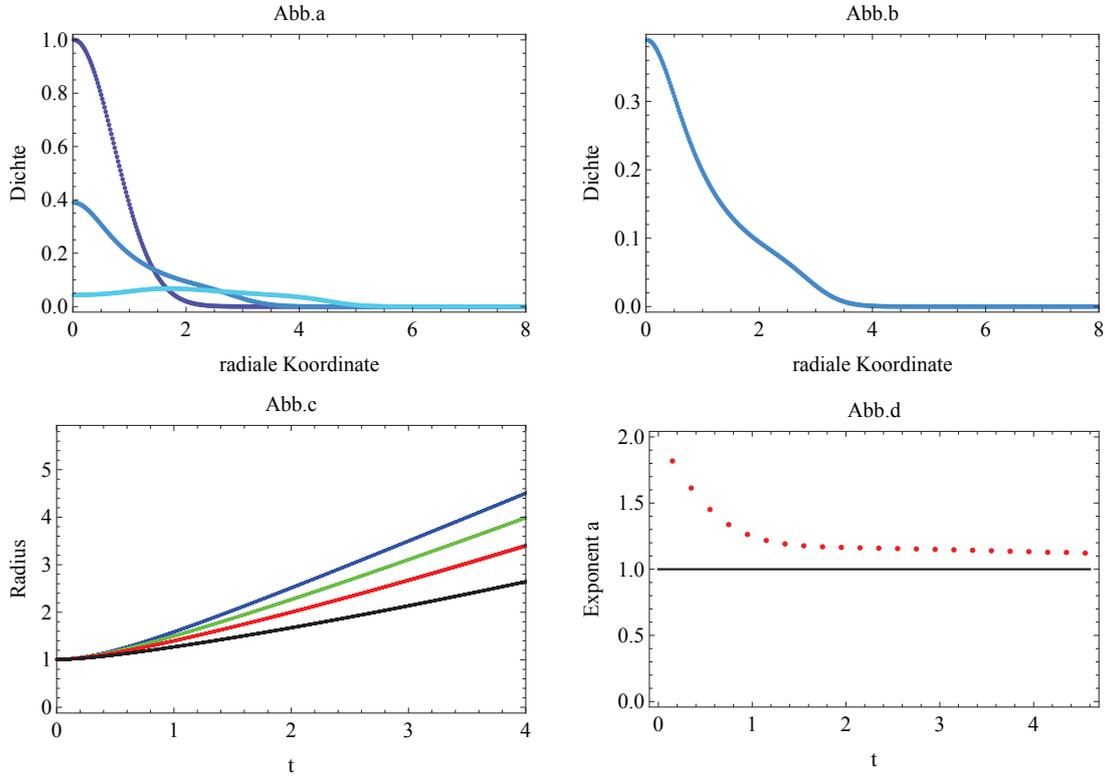


Abbildung 10: alle Abb. in Dimension zwei und für Ortsdiskretisierung $h=0.02$, und Zeitdiskretisierung $= 10^{-7}$ und Systemgröße $L=50$

- a) Aufgetragen ist die Dichte zur Zeit $t \in \{0, 1.5, 3\}$, $f=10$
 b) Vergrößerung der Dichte zur Zeit $t=1.5$
 c) Aufgetragen ist der Erwartungswert des Radius gegen die Zeit für $f=5$ (blau), $f=10$ (grün), $f=20$ (rot), $f=50$ (schwarz)
 d) Aufgetragen ist der Exponent gegen die Zeit (s. Gl.(104)) für $f=10$, zusätzlich zum Vergleich eine Gerade bei 1.0

Durch Einsetzen von Gl.(107) in Gl.(105) erhalten wir eine Differentialgleichung für $n_{\vec{k}}(t)$.

$$\partial_t^2 n_{\vec{k}}(t) = -\frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} k^2 n_{\vec{k}}(t) \quad (108)$$

Lösungen dieser Gleichung sind gegeben durch

$$C_1(\vec{k}) \cos(\omega_k t) + C_2(\vec{k}) \sin(\omega_k t) \quad \text{mit} \quad \omega_k = \frac{\sqrt{2} J a_{Git}}{\hbar} k \quad \text{und} \quad C_1(\vec{k}), C_2(\vec{k}) \in \mathbb{C}. \quad (109)$$

Da $\partial_t n(r, 0) = 0$ ist, ist auch $\partial_t n_{\vec{k}}(0) = 0$. Daraus folgt sofort $C_2(\vec{k}) = 0$. Wir erhalten für die Fouriertransformierte der Dichte

$$n_{\vec{k}}(t) = C_1(\vec{k}) \cos(\omega_k t) \quad \text{mit} \quad C_1 = n_{\vec{k}}(t=0) = \int d^2 r \, n_0(r) e^{-i\vec{k}\vec{r}} \quad (110)$$

und für die Dichte

$$n(r, t) = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} n_{\vec{k}}(t=0) \cos(kt) e^{i\vec{k}\vec{r}} = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(\int d^2 r' \, n_0(r') e^{-i\vec{k}\vec{r}'} \right) \cos(kt) e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (111)$$

Wir haben numerisch gezeigt, dass im Zweidimensionalen negative Dichten entstehen, wenn wir als Anfangsverteilung eine Gaußverteilung wählen.

Im ballistischen Grenzfall erwarten wir, dass die Teilchen lokal eine nahezu gleiche Geschwindigkeit haben. Die Verteilungsfunktion ist dann lokal näherungsweise durch eine Deltafunktion im Impulsraum gegeben. Der gewählte Ansatz bei der Herleitung der Telegraphengleichungen gibt dies aber nicht wieder, sondern geht von einer im Impulsraum nahezu konstanten Funktion aus.

Mit der im nächsten Kapitel gewählten Verteilungsfunktion berücksichtigen wir, dass die Teilchen im ballistischen Fall lokal nahezu gleiche Geschwindigkeiten haben.

6 Kreisförmige Verteilungsfunktion

Da der Ansatz aus Kapitel 5 zu negativen Dichten im ballistischen Fall führt, beschreiben wir in diesem Kapitel das System mit einer anderen Verteilungsfunktion.

Wir benutzen die semiklassische Boltzmann-Gleichung in Relaxationszeitnäherung (s. Gl.(18)):

$$\underbrace{\partial_t f_{\vec{k}}}_{\text{I}} + \underbrace{(\vec{v} \cdot \nabla_r) f_{\vec{k}}}_{\text{II}} = - \underbrace{\frac{1}{\tau} (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}}^0)}_{\text{III}} \quad (112)$$

Als Ansatz für die Verteilungsfunktion $f_{\vec{k}}(\vec{r})$ wählen wir

$$f_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \frac{n(\vec{r}, t)}{V_d} \Theta \left(k_c^2 - \left(\vec{k} - \vec{\Delta}k(\vec{r}, t) \right)^2 \right). \quad (113)$$

mit V_d dem Volumen einer d-dimensionalen Kugel mit Radius k_c , wobei k_c eine Systemkonstante ist. Die Gleichgewichtsverteilung ist gegeben durch

$$f_{\vec{k}}^0(\vec{r}, t) = \frac{n(\vec{r}, t)}{V_d} \Theta(k_c^2 - \vec{k}^2). \quad (114)$$

Die Impulse innerhalb der Kugel um $\vec{\Delta}k$ sind alle gleich stark besetzt, Impulse, die außerhalb der Kugel liegen, sind nicht besetzt.

Im ballistischen Limes stoßen die Atome nur sehr selten und Δk kann groß werden. Für großes Δk haben die Atome dann lokal alle eine ähnliche Geschwindigkeit. Für die Geschwindigkeit wählen wir eine quadratische Dispersionsrelation (d.h. $\omega = \frac{1}{2m}k^2$) und damit $\vec{v}_k = \frac{\partial \omega}{\partial \vec{k}} = \frac{\vec{k}}{m}$.

Zunächst berechnen wir die mittlere quadratische Geschwindigkeit der Gleichgewichtsverteilung. Wir bezeichnen wieder mit C_d die Oberfläche einer d-dimensionalen Einheitskugel und nutzen aus, dass das Verhältnis von der Oberfläche einer Kugel zum Volumen gerade durch die Dimension gegeben ist.

$$\begin{aligned} \langle v^2 \rangle &= \frac{1}{N} \int d^d r \int d^d k \frac{n}{V_d} \frac{k^2}{m^2} \Theta(k_c^2 - k^2) \\ &= \frac{1}{N} \int d^d r \frac{n}{V_d} \underbrace{\int_0^{k_c} dk \frac{k^{d+1}}{m^2}}_{\frac{k_c^{d+2}}{(d+2)m^2}} \underbrace{\int d\Omega_k 1}_{C_d} = \frac{d}{d+2} \frac{k_c^2}{m^2} \end{aligned} \quad (115)$$

k_c^2 ist daher ein Maß für den mittleren quadratischen Impuls.

Durch Integration von Gl.(112) über \vec{k} erhält man die Kontinuitätsgleichung:

$$\text{Term I: } \int \partial_t f_{\vec{k}}(\vec{r}) d^d k = \partial_t \left(\frac{n}{V_d} \int \Theta(k_c^2 - (\vec{k} - \Delta\vec{k})^2) d^d k \right) = \dot{n} \quad (116)$$

$$\text{Term II: } \int \sum_{i=1}^d v_i \frac{\partial}{\partial r_i} f_{\vec{k}}(\vec{r}) d^d k = \sum_{i=1}^d \frac{\partial}{\partial r_i} \int \frac{k_i}{m} f_{\vec{k}}(\vec{r}) d^d k = \nabla \cdot \vec{j} \quad \text{mit} \quad j_i = \int \frac{k_i}{m} f_{\vec{k}}(\vec{r}) d^d k \quad (117)$$

$$\text{Term III: } \int -\frac{1}{\tau} (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}}^0) d^d k = -\frac{1}{\tau} (n - n) = 0 \quad (118)$$

Die Berechnung des Stroms ergibt:

$$\vec{j} = \int \frac{\vec{k}}{m} f_{\vec{k}}(\vec{r}) d^d k = \frac{n}{V_d} \int \frac{\vec{k} + \Delta\vec{k}}{m} \Theta(k_c^2 - \vec{k}^2) d^d k = n \frac{\Delta\vec{k}}{m} \quad (119)$$

Eine Gleichung für $\partial_t \vec{j}$ erhält man durch Multiplikation von Gl.(112) mit $\vec{v}_{\vec{k}}$ und Integration über \vec{k} .

$$\text{Term I: } \int \frac{\vec{k}}{m} \partial_t f_{\vec{k}} d^d k = \partial_t \vec{j} \quad (120)$$

Zur Vereinfachung der Notation setzen wir $f_{\vec{k}}(\vec{r}) = n(\vec{r}) g(\vec{k}, \Delta\vec{k}(\vec{r}))$.

$$\begin{aligned} \text{Term II: } & \int \frac{\vec{k}}{m^2} (\vec{k} \cdot \nabla_{\vec{r}}) f_{\vec{k}} d^d k \\ &= \int \frac{\vec{k}}{m^2} \left((\vec{k} \cdot \nabla_{\vec{r}}) n(\vec{r}) \right) g(\vec{k}, \Delta\vec{k}) d^d k + \sum_{l=1}^d \int \frac{\vec{k}}{m^2} \left((\vec{k} \cdot \nabla_{\vec{r}}) \Delta k_l \right) \frac{\partial g}{\partial \Delta k_l} n(\vec{r}) d^d k \\ &= \sum_{j=1}^d \begin{pmatrix} A_{1j} \\ \vdots \\ A_{dj} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r_j} n(\vec{r}) + \sum_{j,l=1}^d n(\vec{r}) \begin{pmatrix} B_{1jl} \\ \vdots \\ B_{djl} \end{pmatrix} \frac{\partial \Delta k_l}{\partial r_j} \end{aligned} \quad (121)$$

mit

$$A_{ij} = \frac{1}{m^2} \int k_i k_j g(\vec{k}, \Delta\vec{k}) d^d k \quad (122)$$

$$B_{ijl} = \frac{1}{m^2} \int k_i k_j \frac{\partial g}{\partial \Delta k_l} d^d k \quad (123)$$

Berechnung von A_{ij} und B_{ijl} :

$$\begin{aligned}
 A_{ij} &= \frac{1}{m^2 V_d} \int k_i k_j \Theta(k_c^2 - (\vec{k} - \vec{\Delta k})^2) d^d k = \frac{1}{m^2 V_d} \int (k_i + \Delta k_i)(k_j + \Delta k_j) \Theta(k_c^2 - \vec{k}^2) d^d k \\
 &= \frac{1}{m^2} \Delta k_i \Delta k_j + \frac{1}{m^2 V_d} \delta_{ij} \frac{1}{d} \int \vec{k}^2 \Theta(k_c^2 - \vec{k}^2) d^d k = \frac{1}{m^2} \Delta k_i \Delta k_j + \delta_{ij} \frac{1}{m^2} \frac{d}{k_c^d} \frac{1}{d+2} k_c^2 \\
 &= \frac{1}{m^2} \Delta k_i \Delta k_j + \delta_{ij} \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2}
 \end{aligned} \tag{124}$$

$$\begin{aligned}
 B_{ijl} &= \frac{1}{m^2} \int k_i k_j \frac{\partial g}{\partial \Delta k_l} d^d k = -\frac{1}{m^2 V_d} \int (k_i + \Delta k_i)(k_j + \Delta k_j) \frac{\partial}{\partial k_l} \Theta(k_c^2 - \vec{k}^2) d^d k \\
 &= \int \frac{1}{m^2 V_d} (k_i + \Delta k_i) (k_j + \Delta k_j) \hat{k}_l \delta(k_c - k) d^d k \\
 &= \frac{1}{m^2 V_d} \int (k_c \hat{k}_i + \Delta k_i) (k_c \hat{k}_j + \Delta k_j) \hat{k}_l k_c^{d-1} d\Omega_k = \frac{1}{m^2} (\delta_{il} \Delta k_j + \delta_{jl} \Delta k_i)
 \end{aligned} \tag{125}$$

Insgesamt erhalten wir für den dritten Term:

$$\begin{aligned}
 \int \frac{\vec{k}}{m^2} (\vec{k} \cdot \nabla_{\vec{r}}) f_{\vec{k}} d^d k &= \sum_{j=1}^d \begin{pmatrix} A_{1j} \\ \vdots \\ A_{dj} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r_j} n(\vec{r}) + \sum_{j,l=1}^d n(\vec{r}) \begin{pmatrix} B_{1jl} \\ \vdots \\ B_{djl} \end{pmatrix} \frac{\partial \Delta k_l}{\partial r_j} \\
 &= \sum_{j=1}^d \begin{pmatrix} \frac{1}{m^2} \Delta k_1 \Delta k_j + \delta_{1j} \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \\ \vdots \\ \frac{1}{m^2} \Delta k_d \Delta k_j + \delta_{dj} \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r_j} n + \sum_{j,l=1}^d \frac{1}{m^2} n \begin{pmatrix} \delta_{1l} \Delta k_j + \delta_{jl} \Delta k_1 \\ \vdots \\ \delta_{dl} \Delta k_j + \delta_{jl} \Delta k_d \end{pmatrix} \frac{\partial \Delta k_l}{\partial r_j} \\
 &= \sum_{j=1}^d \frac{1}{m^2} \vec{\Delta k} \Delta k_j \frac{\partial}{\partial r_j} n + \sum_{j=1}^d \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \hat{e}_j \frac{\partial}{\partial r_j} n + \sum_{j,l=1}^d \frac{1}{m^2} n \hat{e}_l \Delta k_j \frac{\partial \Delta k_l}{\partial r_j} + \sum_{j=1}^d \frac{1}{m^2} n \vec{\Delta k} \frac{\partial \Delta k_j}{\partial r_j} \\
 &= \frac{1}{m^2} \vec{\Delta k} (\vec{\Delta k} \cdot \nabla n) + \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \nabla n + \frac{1}{m^2} n (\vec{\Delta k} \cdot \nabla) \vec{\Delta k} + \frac{1}{m^2} n \vec{\Delta k} (\nabla \cdot \vec{\Delta k}) \\
 &= \frac{\vec{j}}{n} \left(\frac{\vec{j}}{n} \cdot \nabla n \right) + \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \nabla n + (\vec{j} \cdot \nabla) \frac{\vec{j}}{n} + \vec{j} \left(\nabla \cdot \frac{\vec{j}}{n} \right)
 \end{aligned} \tag{126}$$

$$\text{Term III: } -\frac{1}{\tau} \int \frac{\vec{k}}{m} (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}}^0) d^d k = -\frac{1}{\tau} \vec{j} \tag{127}$$

Die mit diesem Ansatz erhaltenen gekoppelten Differentialgleichungen lauten:

$$\partial_t n + \nabla \cdot \vec{j} = 0 \quad \text{mit} \quad \vec{j} = \frac{n \vec{\Delta k}}{m} \tag{128}$$

$$\partial_t \vec{j} + \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \nabla n + \frac{\vec{j}}{n} \left(\frac{\vec{j}}{n} \cdot \nabla n \right) + (\vec{j} \cdot \nabla) \frac{\vec{j}}{n} + \vec{j} \left(\nabla \cdot \frac{\vec{j}}{n} \right) = -\frac{\vec{j}}{\tau(n)} \tag{129}$$

Wir definieren

$$u^{ik} = \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \delta_{ik} n + \frac{j_i j_k}{n}. \quad (130)$$

Mit dieser Definition können wir für die k-te Komponente der Gl.(129) schreiben

$$\partial_t j_k + \nabla_i u^{ik} = -\frac{j_k}{\tau(n)}. \quad (131)$$

Wir sehen, dass im ballistischen Grenzfall ($-\frac{j}{\tau(n)} \approx 0$) der Strom erhalten ist.

6.1 Ballistischer Grenzfall

Wir möchten überprüfen, ob das Verhalten der Teilchen im Fall $\frac{1}{\tau_0} \approx 0$ mit dem erwarteten Verhalten im ballistischen Fall übereinstimmt. Dafür wählen wir als Ansatz

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{t^b} n_s \left(\frac{\vec{r}}{t^a} \right) \quad (132)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{t^c} \vec{j}_s \left(\frac{\vec{r}}{t^e} \right) \quad (133)$$

mit noch zu bestimmenden Konstanten a,b,c,e. Für eine physikalische sinnvolle Lösung muss die Teilchenzahl erhalten sein.

$$\text{const} = N = \int d^d r n(\vec{r}, t) = \frac{1}{t^b} \int d^d r n_s \left(\frac{\vec{r}}{t^a} \right) = t^{ad-b} \underbrace{\int d^d x n_s(\vec{x})}_{\text{const}} \quad (134)$$

$$\Rightarrow ad = b \quad (135)$$

Wir setzen in die Kontinuitätsgleichung unseren gewählten Ansatz ein und ersetzen $\vec{x} = \frac{\vec{r}}{t^a}$.

$$t^{-ad-1} (-ad n_s(\vec{x}) - a \vec{x} \cdot \nabla_{\vec{x}} n_s(\vec{x})) + t^{-c-e} \nabla_{\vec{x}} \cdot \vec{j}_s \left(\frac{\vec{x}}{t^{e-a}} \right) = 0 \quad (136)$$

Die Funktion j_s soll nicht mehr explizit von t abhängen. Daher wählen wir e=a und erhalten

$$t^{-ad-1} (-ad n_s(\vec{x}) - a \vec{x} \cdot \nabla_{\vec{x}} n_s(\vec{x})) + t^{-c-a} \nabla_{\vec{x}} \cdot \vec{j}_s(\vec{x}) = 0 \quad (137)$$

Damit wir auch nicht triviale Lösungen finden können, welche die Gleichung für alle Zeiten erfüllen, muss gelten:

$$-c - a = -ad - 1 \quad \Rightarrow \quad c = a(d - 1) + 1 \quad (138)$$

Wir setzen nun die Gleichungen

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{t^{ad}} n_s \left(\frac{\vec{r}}{t^a} \right) \quad (139)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{t^{a(d-1)+1}} \vec{j}_s \left(\frac{\vec{r}}{t^a} \right) \quad (140)$$

in Gl.(129) ein und suchen eine Bedingung für a .

$$\begin{aligned}
 & t^{-a(d-1)-2} \left(-(a(d-1) + 1) \vec{j}_s(\vec{x}) - a(\vec{x} \cdot \nabla_{\vec{x}}) \vec{j}_s(\vec{x}) \right) + t^{-a(d+1)} \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \nabla_{\vec{x}} n_s(\vec{x}) \\
 & + t^{-a(d-1)-2} \frac{\vec{j}_s(\vec{x})}{n_s(\vec{x})^2} \left(\vec{j}_s(\vec{x}) \cdot \nabla_{\vec{x}} n_s(\vec{x}) \right) + t^{-a(d-1)-2} \left(\vec{j}_s(\vec{x}) \cdot \nabla_{\vec{x}} \right) \frac{\vec{j}_s(\vec{x})}{n_s(\vec{x})} \\
 & + t^{-a(d-1)-2} \vec{j}_s(\vec{x}) \left(\nabla_{\vec{x}} \cdot \frac{\vec{j}_s(\vec{x})}{n_s(\vec{x})} \right) = 0
 \end{aligned} \tag{141}$$

Damit wir nicht triviale Lösungen finden können, darf Gl.(141) nicht explizit von der Zeit abhängen. Wir erhalten daher als weitere Bedingung:

$$-a(d-1) - 2 = -a(d+1) \quad \Rightarrow \quad a = 1 \tag{142}$$

Wir erhalten für j und n

$$n(\vec{r}, t) = \frac{1}{t^d} n_s \left(\frac{\vec{r}}{t} \right) \tag{143}$$

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{1}{t^d} \vec{j}_s \left(\frac{\vec{r}}{t} \right). \tag{144}$$

Falls nicht triviale Lösungen der Form wie in Gl.(132) und Gl.(133) existieren, kennen wir auch die notwendigen Exponenten. Allerdings können wir bis jetzt keine Aussage über die Existenz treffen.

Unter der Annahme der Existenz einer Lösung der oben genannten Form, können wir den Erwartungswert des Radius berechnen.

$$\langle r^2 \rangle (t) = \int d^d r \, r^2 \, n(\vec{r}, t) = \frac{1}{t^d} \int d^d r \, r^2 \, n_s \left(\frac{\vec{r}}{t} \right) = t^2 \underbrace{\int d^d x \, x^2 \, n_s(\vec{x})}_{\text{const}} \tag{145}$$

Wir erhalten also, dass $\sqrt{\langle r^2 \rangle}(t) \sim t$. Dies entspricht dem erwarteten Anwachsen des Radius im ballistischen Fall (s. Gl.(86)).

Um eine Aussage über die Existenz einer Lösung treffen zu können, müssen die gewöhnlichen Differentialgleichungen (137) und (141) für n_s und \vec{j}_s gelöst werden. Dazu betrachten wir wieder radialsymmetrische Anfangswertprobleme. Für physikalisch sinnvolle Lösungen müssen $n_s(\vec{x})$ und $\vec{j}_s(\vec{x})$ für $x \rightarrow \infty$ verschwinden (z.B. wegen endlicher Teilchenzahl).

Durch numerisches Lösen der Differentialgleichungen für verschiedene Anfangsbedingungen für $\vec{j}_s(0)$ konnten wir keine Lösungen, welche das gewünschte Verhalten zeigen, finden. Dies schließt aber deren Existenz nicht aus. An dieser Stelle haben wir die Existenz nicht näher untersucht.

6.2 Diffusiver Grenzfall

Falls die gewählte Verteilungsfunktion eine gute Näherung für unser Problem ist, muss der Strom für kleine Streuzeiten mit dem Strom, den die singuläre Diffusionsgleichung liefert, übereinstimmen. Für kleine τ_0 soll der Strom dann durch

$$\vec{j} = -\tau_0 \frac{k_c^2}{m^2(d+2)} \frac{1}{n} \nabla n \quad (146)$$

gegeben sein. Für eine geeignet gewählte Anfangsbedingung und im hohen Dichtebereich sind die Terme $\frac{\nabla n}{n}$ klein im Vergleich zu $\frac{1}{\tau_0}$. Alle Terme der Gl.(129), in die \vec{j} quadratisch eingeht, können vernachlässigt werden.

$$\frac{\vec{j}}{n} \left(\frac{\vec{j}}{n} \cdot \nabla n \right) = \mathcal{O}(\tau_0^2) \quad (147)$$

$$\left(\vec{j} \cdot \nabla \right) \frac{\vec{j}}{n} = \mathcal{O}(\tau_0^2) \quad (148)$$

$$\vec{j} \left(\nabla \cdot \frac{\vec{j}}{n} \right) = \mathcal{O}(\tau_0^2) \quad (149)$$

Wir sehen, dass der Strom in Gl.(146) unter Vernachlässigung der Terme $\mathcal{O}(\tau_0^2)$ eine stationäre Lösung der Gl.(129) ist. Änderungen in der Dichte führen zu einer Änderung des Stroms, sodass wir zeigen müssen, dass die Änderung des Stroms klein bleibt. Wir berechnen die Zeitableitung von j in Abhängigkeit von n und ∇n , wobei wir die Kontinuitätsgleichung ausnutzen.

$$\begin{aligned} \partial_t \vec{j} &= -\frac{\tau_0}{k_c^2 m^2 (d+2)} \partial_t \left(\frac{\nabla n}{n} \right) \\ &= -\frac{\tau_0}{k_c^2 m^2 (d+2)} \left(\frac{-\Delta j}{n} + \frac{\nabla n}{n^2} \nabla j \right) \\ &= \left(\frac{\tau_0}{k_c^2 m^2 (d+2)} \right)^2 \left(-\frac{1}{n} \Delta \left(\frac{1}{n} \nabla n \right) + \frac{\nabla n}{n^2} \nabla \left(\frac{1}{n} \nabla n \right) \right) \\ &= \mathcal{O}(\tau_0^2) \end{aligned} \quad (150)$$

Da τ_0 quadratisch in die Zeitableitung von j eingeht, ist dieser Term ebenfalls vernachlässigbar. Wir haben gezeigt, dass der Strom in Gl.(146) näherungsweise eine Lösung der Gleichung (129) für kleine Streuzeiten ist.

6.3 Numerische Simulation

Im Folgenden betrachten wir wieder radialsymmetrische Anfangswertprobleme, d.h. $\vec{j}(\vec{r}) = j(r)\hat{r}$ und $n(\vec{r}) = n(r)$. Die Gleichungen (128) und (129) vereinfachen sich dann zu:

$$\partial_t n + \partial_r j + \frac{d-1}{r} j(r) = 0 \quad (151)$$

$$\partial_t j + \left(\frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} + \frac{j^2}{n^2} \right) \partial_r n + 2j(r) \partial_r \frac{j}{n} + \frac{d-1}{r} \frac{j^2}{n} = -\frac{j}{\tau} \quad (152)$$

Wir setzen in der numerischen Simulation $k_c = 1$ und $m=1$ und starten wie im vorherigen Teil mit einer nahezu gaußförmigen Anfangsverteilung (s. Gl.(99)).

Analog zu Kapitel 5.3 berechnen wir im Zweidimensionalen die Zeit, bis zu der der Radius mit $t^{1.5}$ wächst. In diesem Modell ist die mittlere quadratische Geschwindigkeit gegeben durch (s. Gl.(115))

$$\langle \bar{v}^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{k_c^2}{m^2} . \quad (153)$$

Wir erhalten als Abschätzung für die Zeit, bis zu der der Radius mit $t^{1.5}$ wächst

$$t_{max} = -\frac{N}{\dot{N}} = \frac{\pi}{2\pi\tau_0 \langle \bar{v}^2 \rangle} = \frac{1}{\tau_0} . \quad (154)$$

Schon nach kurzen Zeiten erhalten wir im Ursprung numerische Probleme aufgrund der Singularität in r . Wir betrachten dennoch den Erwartungswert des Radius auch zu Zeiten, zu denen schon numerische Probleme im Ursprung vorhanden sind, da die Dichte im Ursprung kaum zum Radius beiträgt.

Die Abbildung 11 zeigt die Ergebnisse der numerischen Simulation für Dimension zwei. In Abb.11a ist die Dichte für verschiedene Zeiten für $\tau_0 = 0.2$ aufgetragen. Abb.11b zeigt die Zeitabhängigkeit des Radius für verschiedene τ_0 . Wie erwartet wächst der Radius für kleinere Streuzeiten langsamer.

Die Abhängigkeit des Exponenten a von der Zeit (s. Gl.(104)) ist in Abb.11c und Abb.11d gezeigt.

In Abb.11c ist $\tau_0 = 100$ gewählt. Nach obiger Abschätzung sind schon nach einer sehr kurzen Zeit ($t_{max} = 0.01$) alle Atome im ballistischen Bereich, sodass wir nicht erwarten einen längeren Bereich zu sehen, in dem der Exponent 1.5 ist. Mit der analytischen Abschätzung übereinstimmend sehen wir, dass der Exponent mit zwei startet und dann abfällt. Für längere Zeiten erhalten wir aufgrund numerischer Probleme keine Ergebnisse, sodass wir den Exponenten im ballistischen Bereich nicht bestimmen können. Es ist aber möglich, dass die Kurve des Exponenten in Abb.11c für längere Zeiten gegen eins konvergiert.

Abb. 11d zeigt den Exponenten für kleinere Streuzeiten. Wie erwartet, startet der Exponent bei zwei. Für alle Streuzeiten erhalten wir einen Bereich, in dem der Exponent sich nur langsam ändert. In diesem Bereich ist der Wert des Exponenten für kleine Streuzeiten nahe bei 1.5. Für spätere Zeiten ($t \approx 11$) nimmt der Exponent mit der Zeit wieder stärker ab. Der Zeitpunkt, an dem der Exponent den fast konstanten Bereich verlässt, ist in der numerischen Simulation nahezu von der Streuzeit unabhängig .

Für die in den Abbildungen gewählte Streuzeiten haben wir erwartet, dass der Zeitpunkt, bis zu dem der Radius mit $t^{1.5}$ wächst, jeweils durch 2, 5 und 20 gegeben ist (s. Gl(154)). Eine Beziehung zwischen t_{max} und τ_0 können wir mit unseren numerischen Ergebnissen nicht erkennen.

In drei Dimensionen entstehen noch früher numerische Probleme, sodass die hier betrachteten Zeiten nochmal deutlich kürzer sind. Die Ergebnisse der numerischen Simulation sind in Abb.12 zu finden.

In Abb.12c ist der Exponent a im ballistischen Fall aufgetragen. Zum Vergleich ist der Exponent sowohl für eine Simulation in drei Dimensionen (blau) und für eine Simulation in zwei

Dimensionen (orange) eingezeichnet. Die Werte des Exponenten unterscheiden sich in zwei und in drei Dimensionen nur sehr wenig.

Für eine Streuzeit von $\tau_0 = 0.05$ erhalten wir ebenfalls einen Bereich, in dem der Exponent sich nur wenig ändert. Diesmal ist der Exponent in diesem Bereich etwas größer als 1.5. Für größere Streuzeiten treten die numerischen Probleme früher auf, sodass wir nicht erkennen können, ob wir ebenfalls Bereiche erhalten, in denen der Exponent ebenfalls nahezu konstant ist.

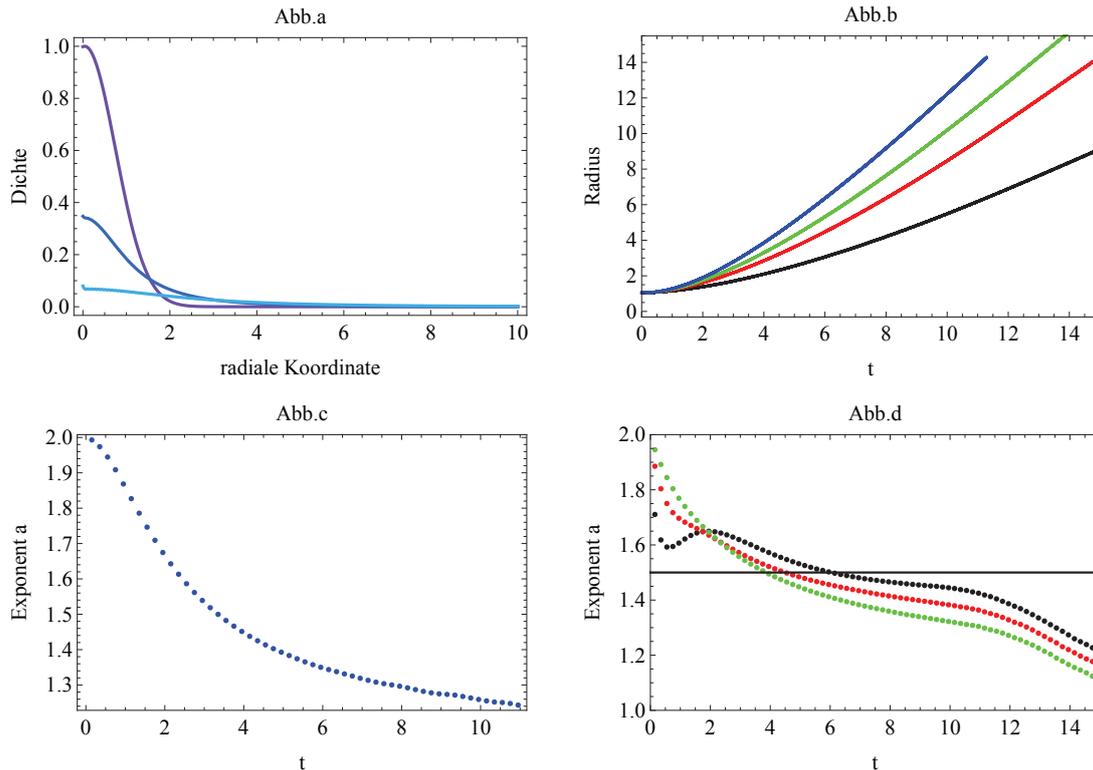


Abbildung 11: Dimension zwei, alle Abbildungen für Ortsdiskretisierung $h=0.04$, Zeitdiskretisierung $5 * 10^{-7}$ und Systemgröße $L=50$

- a) Aufgetragen ist die Dichte gegen die radiale Koordinate zu den Zeiten 0.0, 4.0, 8.0 für $\tau_0 = 0.2$
- b) Aufgetragen ist der Radius gegen die Zeit für $\tau_0 = 0.05$ (schwarz), $\tau_0 = 0.2$ (rot), $\tau_0 = 0.5$ (grün) und $\tau_0 = 100$ (blau)
- c) Aufgetragen ist der Exponent gegen die Zeit, (s. Gl(104)) für $\tau_0 = 100$ (blau)
- d) Aufgetragen ist der Exponent gegen die Zeit, (s. Gl(104)) für $\tau_0 = 0.05$ (schwarz), $\tau_0 = 0.2$ (rot) und $\tau_0 = 0.5$ (grün), zusätzlich zum Vergleich der Werte eine Gerade bei 1.5

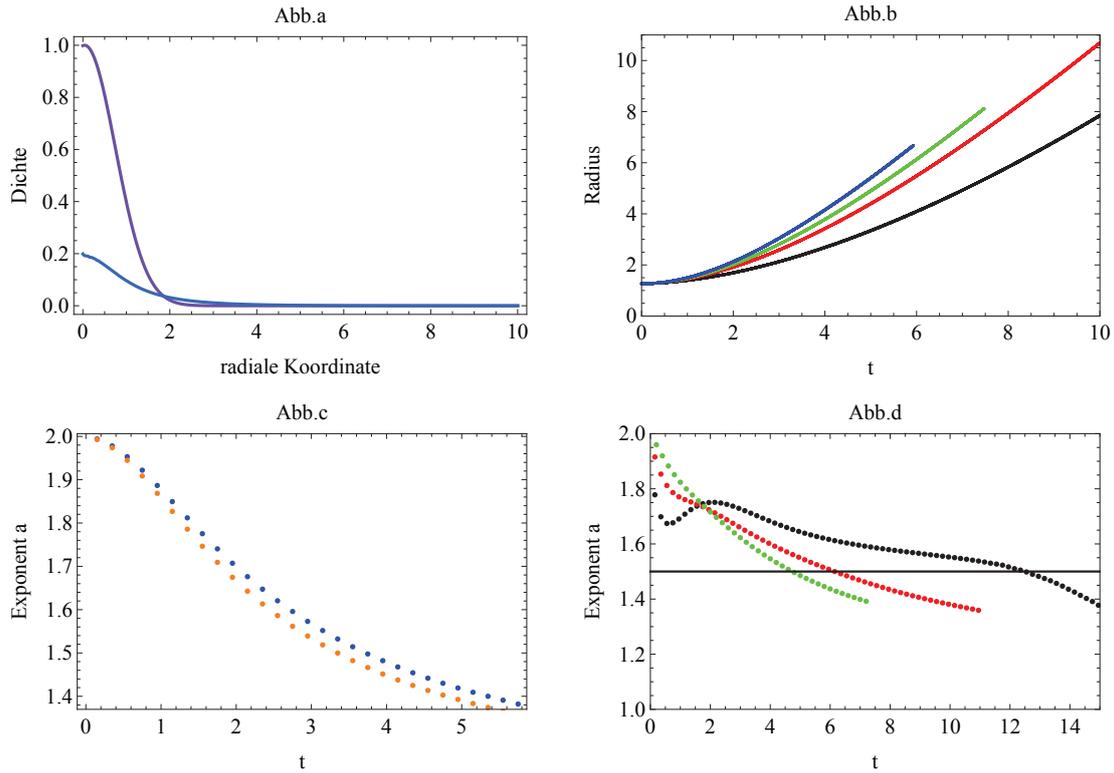


Abbildung 12: Dimension drei: alle Abbildungen für die Ortsdiskretisierung $h=0.04$, Zeitdiskretisierung 10^{-7} und Systemgröße $L=50$

- a): Aufgetragen ist die Dichte gegen den Abstand zum Zentrum zu den Zeiten 0.0 und 4.0 für $\tau_0 = 0.2$
b): Aufgetragen ist der Radius gegen die Zeit für $\tau_0 = 0.05$ (schwarz), $\tau_0 = 0.2$ (rot), $\tau_0 = 0.5$ (grün) und $\tau_0 = 100$ (blau)
c): Aufgetragen ist der Exponent gegen die Zeit, (s. Gl.(104)) für $\tau_0 = 100$ in drei Dimensionen in blau und in zwei Dimensionen in orange
d): Aufgetragen ist der Exponent gegen die Zeit, (s. Gl.(104)) für $\tau_0 = 0.05$ (schwarz), $\tau_0 = 0.2$ (rot) und $\tau_0 = 0.5$ (grün), zusätzlich zum Vergleich der Werte eine Gerade bei 1.5

6.4 Vergleich mit den Telegraphengleichungen

Wir vergleichen die Telegraphengleichungen (s. Gl.(155)) mit den Gleichungen, die wir mit dem Ansatz einer kreisförmigen Verteilungsfunktion erhalten haben (s. Gl.(156)). Mit dem Ansatz aus diesem Kapitel erhalten wir alle Terme, die wir mit dem Ansatz aus dem vorherigen Kapitel erhalten haben. Zusätzlich bekommen wir drei weitere Terme.

$$\partial_t \vec{j} + \frac{2J^2 a_{Git}^2}{\hbar^2} \nabla_{\vec{r}} n = -\frac{\vec{j}}{\tau} \quad (155)$$

$$\partial_t \vec{j} + \frac{1}{m^2} \frac{k_c^2}{d+2} \nabla n + \frac{\vec{j}}{n} \left(\frac{\vec{j}}{n} \cdot \nabla n \right) + (\vec{j} \cdot \nabla) \frac{\vec{j}}{n} + \vec{j} \left(\nabla \cdot \frac{\vec{j}}{n} \right) = -\frac{\vec{j}}{\tau} \quad (156)$$

Um die Ergebnisse, die wir auf beiden Wegen in zwei Dimensionen erhalten haben, zu vergleichen, tragen wir den Erwartungswert des Radius auf. Die Wahl von $k_c = 1$ und $m = 1$ entspricht $\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}$. Die durch das Hubbard-Modell gegebene mittlere quadratische Geschwindigkeit bei unendlicher Temperatur ist $4J^2 \frac{a_{Git}^2}{\hbar^2}$, sodass wir $\frac{Ja_{Git}}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{8}}$ wählen. Die Ergebnisse der Telegraphengleichungen müssen zum Vergleichen erst reskaliert werden.

Wir sehen, dass wir für den Erwartungswert des Radius für kleine Zeiten für beide Verteilungsfunktionen das gleiche Ergebnis erhalten. Für größere Zeiten wächst der Radius, den wir durch die Telegraphengleichungen erhalten haben, deutlich langsamer. Mögliche Ursache könnte sein, dass die Geschwindigkeit im Hubbard-Modell begrenzt ist, während wir für die kreisförmige Verteilungsfunktion eine quadratische Dispersionsrelation gewählt haben.

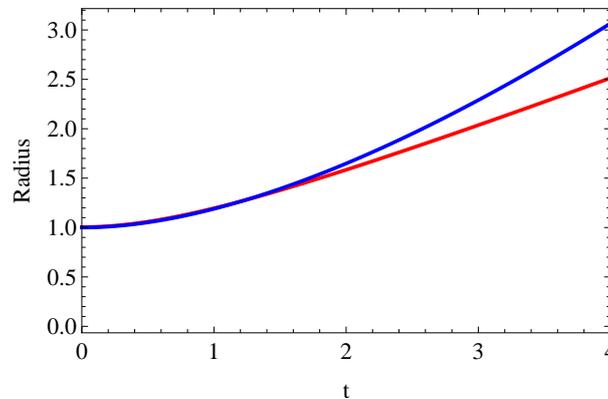


Abbildung 13: Aufgetragen ist der Erwartungswert des Radius für $\tau_0 = 0.4$ in rot durch Simulation der Telegraphengleichungen, in blau durch Simulation der Gleichungen dieses Abschnitts, $k_c = 1$, $f=5$, Ortsdiskretisierung $h=0.01$, Zeitdiskretisierung 10^{-7}

7 Zusammenfassung

In dieser Bachelorarbeit haben wir verschiedene Ansätze vorgestellt, die Expansion ultrakalter Atome sowohl im diffusiven Bereich als auch im ballistischen Bereich zu beschreiben.

Ein möglicher Ansatz ist, die singuläre Diffusionsgleichung zu regularisieren. Dazu haben wir eine maximale Geschwindigkeit der Atome im ballistischen Bereich angenommen. Wir konnten zeigen, dass eine naive Regularisierung der singulären Diffusionsgleichung zu numerischen Problemen führt.

Eine andere Möglichkeit, um die Expansion der Atome zu beschreiben, ist, die Boltzmann-Gleichung für eine geeignete Verteilungsfunktion zu lösen.

Dazu haben wir eine im Impulsraum nahezu konstante Verteilungsfunktion gewählt. Die erhaltenen gekoppelten Differentialgleichungen produzieren im ballistischen Bereich negative Dichten. Für kleinere Streuzeiten bleiben die Dichten positiv. Für diese haben wir den Erwartungswert des Radius genauer betrachtet. Für kleine Zeitintervalle haben wir an den Radius eine Kurve der Form $r(t) = bt^a + c$ gefittet. Ob der Exponent a für große Zeiten gegen eins konvergiert, wie wir das im ballistischen Bereich erwarten, konnten wir hier aufgrund numerischer Probleme nicht betrachten.

Als eine andere mögliche Verteilungsfunktion haben wir eine Funktion gewählt, bei der alle Impulszustände innerhalb einer Kreisscheibe gleichmäßig besetzt sind, und außerhalb dieser keine. Für die Geschwindigkeit haben wir eine quadratische Dispersionsrelation gewählt. Hierbei haben wir Zeitintervalle erhalten, in denen der Exponent a nahezu konstant ist. Dies entspricht unseren Erwartungen für Zeiten, zu denen sowohl Atome im ballistischen als auch im diffusiven Bereich sind.

Die mit beiden Verteilungsfunktionen erhaltenen numerischen Ergebnisse haben wir miteinander verglichen. Für kleine Zeiten stimmt der Erwartungswert des Radius für beide Verteilungsfunktionen genau überein. Im ballistischen Bereich wächst der Erwartungswert des Radius für die zweite Verteilungsfunktion stärker an. Ursache könnte die für dieses System gewählte quadratische Dispersionsrelation sein, welche eine nicht beschränkte Geschwindigkeit liefert.

Literatur

- [1] U. Schneider, *et al.* “Fermionic transport and out-of-equilibrium dynamics in a homogeneous Hubbard model with ultra cold atoms.” *Nature Physics* 8 pp. 213–218 (2012).
- [2] S. Mandt. *Transport and Non-Equilibrium Dynamics in Optical Lattices: from Expanding Atomic Clouds to Negative Absolute Temperatures.* Dissertation, Universität zu Köln (2012).
- [3] D. Lühmann. *Ultrakalte Atome in optischen Gittern.* Diplomarbeit, Universität Hamburg (2006).
- [4] T. Berg. *Aufbau einer kombinierten Magneto-Optischen Falle für ^{40}K und ^{87}Rb .* Diplomarbeit, Universität Mainz (2005).
- [5] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger. “Many-body physics with ultracold gases.” *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885–964 (2008).
- [6] I. Bloch. “Ultracold quantum gases in optical lattices.” *Nature Physics* 1 pp. 23–30 (2005).
- [7] C. Kittel. *Einführung in die Festkörperphysik* (Oldenbourg Verlag, 2006).
- [8] D. Rasch. *Transport Theory in Low Dimensional Systems: from Thermoelectric Effects in Luttinger Liquids to Hydrodynamic Expansion of Cold Atoms.* Dissertation, Universität zu Köln (2010).
- [9] P. D. H. Pleiner. “Hydrodynamik komplexer Fluide.” <http://www2.mpip-mainz.mpg.de/~pleiner/papers/MKFA.pdf>.
- [10] J. Vázquez. *Smoothing and Decay Estimates for Nonlinear Diffusion Equations: Equations of Porous Medium Type.* Oxford lecture series in mathematics and its applications (Oxford University Press, 2006).
- [11] S. Mandt. “Expanding atomic clouds in optical lattices obey a nonlinear telegrapher’s equation.” (2012).
- [12] U. Schneider. *Interacting Fermionic Atoms in Optical Lattices- A Quantum Simulator for Condensed Matter Physics.* Dissertation, Universität Mainz (2010).
- [13] I. Bloch. “Quantum coherence and entanglement with ultracold atoms in optical lattices.” *Nature* 453 pp. 1016–1022 (2008).

Danksagung

Herrn Prof. Dr. Achim Rosch danke ich herzlich für die Betreuung meiner Bachelorarbeit, insbesondere für die Auswahl eines sehr interessanten Themas und die ständige Unterstützung.

Weiter danke ich besonders Robert Bamler und Christoph Schütte, die jederzeit bereit waren, mir bei numerischen Problemen weiterzuhelfen und physikalische Fragestellungen zu diskutieren.

Robert Bamler danke ich für das abschließende Lesen meiner Arbeit.

Für die schöne Zeit danke ich der gesamten Arbeitsgruppe.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Johanna Meumertzheim

Köln, den 14. Februar 2013