

**Lokalisierte Zustände kalter bosonischer Atome
in kreuzförmigen Geometrien von Quantenwellenleitern**

Dissertation

der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Eberhard Karls Universität Tübingen
zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt von
Alexander Markowsky
aus Helsinki

Tübingen
2014

Tag der mündlichen Qualifikation:

27.03.2014

Dekan:

Prof. Dr. Wolfgang Rosenstiel

1. Berichterstatter

Prof. Dr. Nils Schopohl

2. Berichterstatter

Prof. Dr. Thomas Dahm

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Kalte Gase in Prototypen von Wellenleitern	1
1.2	Zwei- oder dreidimensionaler Laplace- Operator?	4
2	Lokalisierte Moden	7
2.1	Symmetrieklassifizierung der lokalisierten Moden	7
2.2	Energie und Lokalisierungslänge der lokalisierten Moden	10
3	Analytisches Modell	19
3.1	Effektive Bindung im Wellenleiter \mathcal{C}	19
3.2	Effektive Bindung im Wellenleiter \mathcal{L}	22
3.3	Effektive Bindung im Wellenleiter \mathcal{T}	25
4	BEC-Grundzustand	29
4.1	Splitting-Methode für die Gross-Piaevskii- Gleichung	29
4.2	Profile der Hartree-Orbitale	31
4.3	Eigenschaften der Hartree-Orbitale	31
5	Erklärung der Skalierungsgesetze	43
6	Binäre Mischung	47
7	Zusammenfassung	55
A	Der Wärmeleitungskern im Wellenleiter \mathcal{C}	59
B	Operator-Splitting	81
C	Baryzentrische Interpolation	83
D	Variationslösung	89

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	ii
E Moden mit B_{1u}- und A_u-Symmetrie	93
F Optische Erzeugung kreuzförmiger Fallen	99

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Kalte Gase in Prototypen von Wellenleitern

In einem Gas (hinreichend vieler) massebehafteter Teilchen, die der Bose-Statistik genügen und deren Gesamtzahl erhalten bleibt, gibt es eine kritische Temperatur, unterhalb derer eine makroskopische Zahl dieser Bosonen sich im gleichen Quantenzustand befindet. Dieses Phänomen wurde durch Einstein vorhergesagt [1] und wird als Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet. Bose-Einstein-Kondensate (BEC) konnten 1995 in Systemen aus Alkali-Gasen beobachtet werden ([2],[3]).

Im Rahmen von Experimenten im Bereich der Tieftemperaturphysik können neben ultrakalten Neutronen ([4], [5]) auch Bose-Einstein-Kondensate dazu verwendet werden, das Verhalten von Materiewellen in Wellenleitern zu untersuchen. Hierzu sind Experimente in hohlen optischen Wellenleitern durchgeführt worden ([6], [7], [8], [9], [10], [11]). Auch durch evaneszente Lichtfelder um dünne Wellenleiter, in denen blau- und rotverstimmte Moden überlagert werden, können Atome gefangen und kontrolliert werden ([12], [13], [14], [15]). Sog. “atomic cladding waveguides” (ACWG), welche die Wechselwirkung einer Wolke von Atomen mit evaneszenten Lichtwellen im dielektrischen Wellenleiter an dessen Oberfläche ausnutzen, ermöglichen Experimente auf der Skala von einigen hundert Nanometern [16]. Weiterhin können mit Hilfe von Laguerre-Gauss-Laserstrahlen Atomfallen erzeugt werden ([17], [18]). Es stehen also verschiedene Arten von Wellenleitern für Materiewellen zur Verfügung. Dann ergibt sich die Frage, welche Effekte auftreten, wenn sich solche Wellenleiter kreuzen oder verzweigen. Hierzu sind umfangreiche theoretische Untersuchungen durchgeführt worden ([19], [20], [21], [22], [23], [24], [25], [26], [27]). Insbesondere können Deformationen von Wellenleitern wie Krümmungen oder Verzweigungen zum Auftreten lokalisierter Moden führen [28].

Die lokalisierten Zustände beruhen auf Interferenzeffekten und treten daher in der klassischen Punktmechanik nicht auf. Die Energien dieser Moden liegen unterhalb der Anregungsschwelle $\varepsilon_{xt} > 0$, oberhalb derer die Moden propagieren können. Der Wert der Anregungsschwelle hängt von der Geometrie des Wellenleiters ab. Im Fal-

le von Materiewellen können die lokalisierten Zustände mit einer endlichen Anzahl bosonischer Teilchen besetzt werden, die allerdings bei repulsiver Wechselwirkung zwischen den Teilchen auf einen kritischen Wert N_c begrenzt ist [29]. In dieser Arbeit werden gebundene Zustände in drei für Krümmungen und Verzweigungen repräsentativen Typen von Quantenwellenleitern betrachtet. Unter Quantenwellenleitern sollen hier Wellenleiter verstanden werden, in denen die Teilchen, die sich in ihnen befinden, eine thermische de-Broglie-Wellenlänge λ_{th} haben, die vergleichbar zur transversalen Ausdehnung der Wellenleiter ist. Im ersten Falle besteht der Quantenwellenleiter aus vier sich im rechten Winkel schneidenden Armen, so daß sich die Form eines Kreuzes \mathcal{C} ergibt. Der zweite Typ, im Folgenden \mathcal{L} genannt, hat die Form eines L , im Falle eines Quantenwellenleiters vom Typ \mathcal{T} liegt die Form eines T vor. Diese Wellenleiter sind in Abb. 1.1 dargestellt. Ein schematischer Vorschlag, wie ein Wellenleiter vom Typ \mathcal{C} optisch erzeugt werden kann, findet sich in Anhang F. Im Folgenden sollen charakteristische Eigenschaften von lokalisierten Materiewellen in solchen Quantenwellenleitern untersucht werden.

Im Gegensatz zur klassischen Punktmechanik existieren propagierende Lösungen der Schrödingergleichung nur oberhalb der Anregungsschwelle für Materiewellen $\varepsilon_{xt}^{(\Gamma)}$, welche von den Parametern des Wellenleitertyps $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ abhängt. Darunter bleiben die Zustände lokalisiert und die Wellenfunktionen weisen einen exponentiellen Abfall auf. Um diese lokalisierten Zustände für kalte Atomgase zu untersuchen, kann man von einem Hartree-Ansatz für den Vielteilchen-Zustand ausgehen, also einem symmetrisierten Produkt der Einteilchen-Orbitale:

$$\Psi_G^{(\Gamma)}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)}) = \psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}^{(1)})\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}^{(2)}) \dots \psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}^{(N)}), \quad (1.1)$$

wobei N die Zahl der Teilchen bezeichnet. Die Normierungsbedingung lautet dann:

$$\int_{\Gamma} d^3r |\Psi_G^{(\Gamma)}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)})|^2 = \int_{\Gamma} d^3r |\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}^{(1)})|^2 \dots \int_{\Gamma} d^3r |\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}^{(N)})|^2 = 1 \quad (1.2)$$

Vereinfacht wird der Spezialfall der Kontaktwechselwirkung zwischen zwei Teilchen angenommen:

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{4\pi a_s \hbar^2}{m} \cdot \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g_s \cdot \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (1.3)$$

Mit der effektiven Wechselwirkungskonstante

$$g_s = \frac{4\pi \hbar^2 a_s}{m}, \quad (1.4)$$

wobei m die Masse und a_s die s -Wellen-Streulänge der Atome darstellt, läßt sich der Erwartungswert des Vielteilchen-Hamiltonoperators

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}^{(j)}}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\substack{j,l=1 \\ j \neq l}}^N U(\mathbf{r}^{(j)} - \mathbf{r}^{(l)}) + V_T^{(\Gamma)}(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

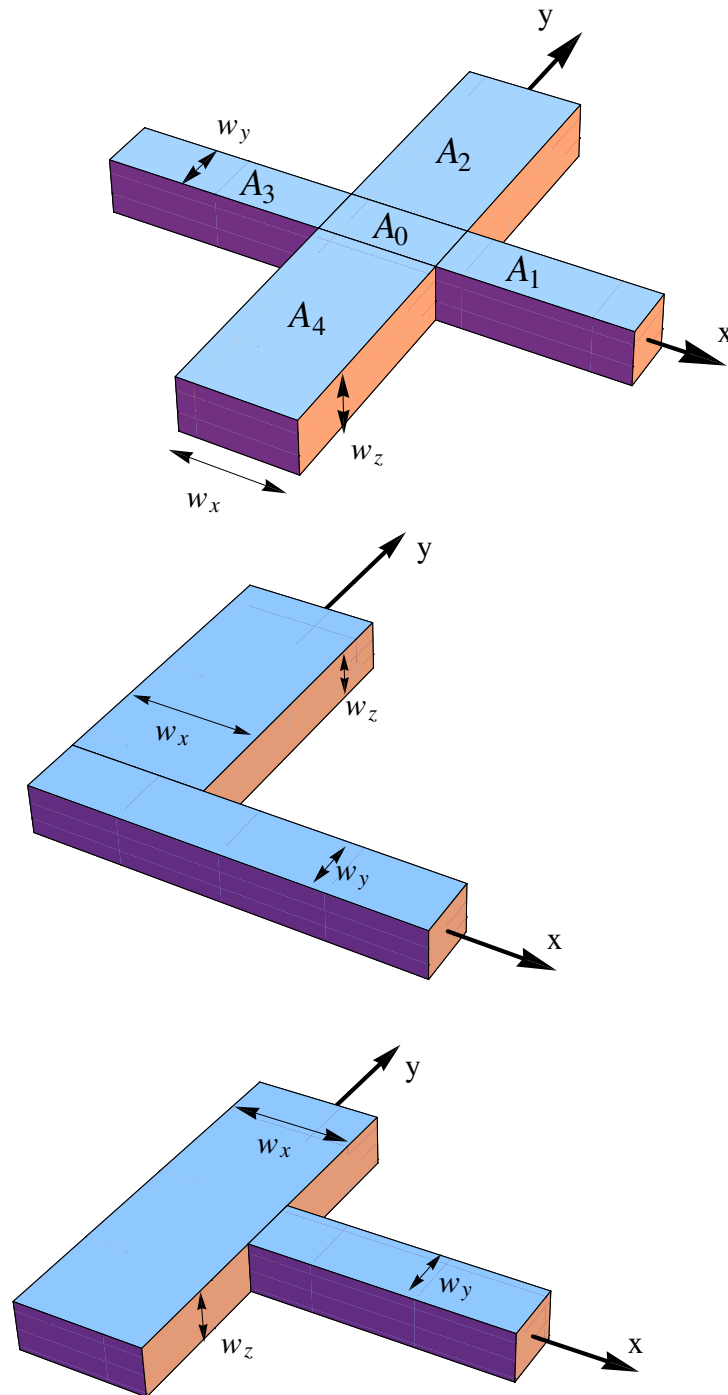


Abbildung 1.1: Drei Prototypen von Wellenleitern mit gebrochener Translations-symmetrie. 1) Kreuzförmiger Wellenleiter \mathcal{C} , dessen Arme einen rechteckigen Querschnitt aufweisen. 2) L-förmiger Wellenleiter \mathcal{L} . 3) T-förmiger Wellenleiter \mathcal{T} . Die jeweiligen Breiten- und Höhenparameter werden mit w_x , w_y und w_z bezeichnet.

bezogen auf den Vielteilchen-Zustand $\Psi_G^{(\Gamma)}(\mathbf{r}^{(1)}, \mathbf{r}^{(2)}, \dots, \mathbf{r}^{(N)})$ angeben als:

$$\langle \hat{H} \rangle_N = N \int d^3r \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|^2 + V_T^{(\Gamma)}(\mathbf{r}) |\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|^2 \right\} + \frac{1}{2} N(N-1) g_s \int d^3r |\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|^4 \quad (1.6)$$

Die Minimierung dieses Erwartungswertes unter der Nebenbedingung

$$\int_{\Gamma} d^3r |\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|^2 = 1 \quad (1.7)$$

und eine Division durch N ergeben dann die Gross-Pitaevskii-Gleichung zur Bestimmung des optimalen Einteilchen-Orbitals $\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})$ im Wellenleiter $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ [30]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_T^{(\Gamma)}(\mathbf{r}) + (N-1) \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|^2 \right) \psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}) = \mu_N^{(\Gamma)} \psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}) \quad (1.8)$$

Hierbei ist $\mu_N^{(\Gamma)}$ ein zur Erhaltung der Normierungsbedingung eingeführter Lagrange-Parameter, der mit dem chemischen Potential identifiziert werden kann, siehe Gl. (4.12).

Zur Vereinfachung soll der Spezialfall der harten Wände angenommen werden, d.h. es soll gelten:

$$V_T^{(\Gamma)}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \text{if } \mathbf{r} \in \Gamma \\ \infty & \text{if } \mathbf{r} \notin \Gamma \end{cases} \quad (1.9)$$

An solchen harten Wänden gelten dann Dirichlet-Randbedingungen:

$$\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|_{\mathbf{r} \in \partial\Gamma} = 0 \quad (1.10)$$

Bezogen auf eine Längeneinheit L und Energieeinheit $\varepsilon_L = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$ werden folgende Skalierungen eingeführt: $r_a \rightarrow r_a/L$, $\mu_N^{(\Gamma)} \rightarrow \mu_N^{(\Gamma)}/\varepsilon_L$, $a_s \rightarrow a_s/L$ und $w_a^{(\Gamma)} \rightarrow w_a^{(\Gamma)}/L$ für $a \in \{x, y, z\}$. Für die Wechselwirkungskonstante gilt dann $\frac{4\pi\hbar^2}{m} a_s = \frac{8\pi a_s}{L} \times [\varepsilon_L L^3] \rightarrow 8\pi a_s$.

1.2 Zwei- oder dreidimensionaler Laplace-Operator?

Es soll nun kurz erläutert werden, wann die Verwendung von zwei- oder dreidimensionalen Laplace-Operatoren sinnvoll ist [31]. Im Einteilchen-Fall $N = 1$ reduziert sich die Gross-Pitaevskii-Gleichung auf die Schrödinger-Eigenwertgleichung :

$$\begin{aligned} H_{kin} \psi_0^{(\Gamma)}(\mathbf{r}) &= E_0^{(\Gamma)} \psi_0^{(\Gamma)}(\mathbf{r}) & (1.11) \\ H_{kin} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \\ \nabla^2 &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{aligned}$$

Für große Höhenparameter $w_z^{(\Gamma)} \gg \max(w_x^{(\Gamma)}, w_y^{(\Gamma)})$ liefert der transversale Anteil $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ des Hamiltonian H_{kin} einen verschwindenden Beitrag, so daß der Laplace-Operator effektiv zweidimensional wird. Einige theoretische Arbeiten zu Materiewellen in Wellenleitern beschränken sich auf solche planaren Geometrien, z.B. ([20], [21], [22], [23], [25], [26], [27], [28], [32]). Dies beschreibt allerdings nicht einen realistisch dünnen Film.

Um diesen Sachverhalt zu verdeutlichen, kann man sich den dünnen Film als Kasten mit den Breitenparametern w_x, w_y und dem Höhenparameter $w_z \ll \min(w_x, w_y)$ vorstellen. Wenn die kinetische Energie eines Teilchens klein im Vergleich zum Abstand der Energieniveaus $E_{n_x, n_y, n_z=2}^{(3)} - E_{n_x, n_y, n_z=1}^{(3)}$ ist, kann die Bewegung in dem Niveau $n_z = 1$ als effektiv zweidimensional betrachtet werden. Die Energie des Teilchens kann geschrieben werden als:

$$E_{n_x, n_y, n_z=1}^{(3)} = E_{n_x, n_y}^{(2)} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{w_z} \right)^2 \quad (1.12)$$

wobei $E_{n_x, n_y}^{(2)}$ der Eigenwert des zweidimensionalen kinetischen Energie-Operators in einer planaren Geometrie für $w_z \rightarrow \infty$ ist:

$$E_{n_x, n_y}^{(2)} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{n_x \pi}{w_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{w_y} \right)^2 \right] \quad (1.13)$$

Mit steigender Filmdicke gilt dann $E_{n_x, n_y, n_z=1}^{(3)} \rightarrow E_{n_x, n_y}^{(2)}$. Die Beziehung (1.12) gilt für ein einzelnes Teilchen $N = 1$. Da für eine Teilchenzahl $N > 1$ die Gross-Pitaevskii-Gleichung nichtlinear ist, ergibt sich hier der Wert von $\mu_N^{(\Gamma)}$ für einen endlichen Wert $w_z^{(\Gamma)}$ nicht notwendigerweise aus dem planaren Fall durch eine einfache Addition des Beitrags aus der z -Richtung, vgl. Gl. (1.12). Daher ist für die folgenden Betrachtungen eine volle dreidimensionale Rechnung notwendig [33].

Kapitel 2

Lokalisierte Moden von Materiewellen in den Verzweigungsbereichen der Wellenleiter $\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}$

In den Wellenleitern $\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}$ bilden sich unterhalb der Anregungsschwelle für Materiewellen $\varepsilon_{xt}^{(\Gamma)}$, $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ lokalisierte Zustände aus [34]. In diesem Abschnitt werden die Symmetrien und Energiewerte dieser lokalisierten Moden im Einteilchen-Fall diskutiert. Ferner wird dargestellt, wie sich die Variation der Breitenverhältnisse der Arme auf die Lokalisierungslängen und die Energie der Orbitale auswirkt.

2.1 Symmetrieklassifizierung der lokalisierten Moden

Im Wellenleiter \mathcal{C} haben die Arme alle einen rechteckigen Querschnitt. Die Anregungsschwelle für Materiewellen ([28], [29]) (unterhalb derer die Moden in die Arme hinein exponentiell abfallen) wird dann durch die Breitenparameter $w_x^{(\mathcal{C})}$, $w_y^{(\mathcal{C})}$ und den Höhenparameter $w_z^{(\mathcal{C})}$ des Wellenleiters bestimmt:

$$\frac{\varepsilon_{xt}^{(\mathcal{C})}}{\varepsilon_L} = \left[\frac{\pi L}{\max(w_x^{(\mathcal{C})}, w_y^{(\mathcal{C})})} \right]^2 + \left(\frac{\pi L}{w_z^{(\mathcal{C})}} \right)^2 \quad (2.1)$$

mit $\varepsilon_L = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$. Die lokalisierten Zustände mit Energien unterhalb dieser Anregungsschwelle werden mit dem in Anhang A beschriebenen iterativen Verfahren bestimmt. Ausgehend von einer Startverteilung $\psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}; \tau_0)$, welche zur Anfangszeit τ_0 auf den Subdomänen $\mathcal{A}_l \subset \mathcal{C}$ vorgegeben werden, lassen sich für $j \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ Konfigurationen $\psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau_n)$ zu den Zeiten τ_n finden gemäß der Rekursionsvorschrift:

$$\begin{aligned}\tau_{n+1} &= \tau_n + \Delta\tau \text{ for } n = 0, 1, 2, 3, \dots \\ \psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau_{n+1}) &= \sum_{l=0}^4 \int_{\mathcal{A}_l} d^3r' \mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \Delta\tau) \psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}'; \tau_n)\end{aligned}\quad (2.2)$$

Die Ausdrücke für die Kernel-Funktionen $\mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}$ lassen sich für kurze Zeiten aus dem auf der Domäne \mathcal{C} definierten Wärmeleitungskern explizit herleiten und sind in Anhang A angegeben.

Wie in Anhang A beschrieben, ergibt sich die gesuchte Grundzustandsmode $\psi_0^{(C)}(\mathbf{r})$ zum Energieeigenwert $E_0^{(C)}$ durch:

$$\psi_0^{(C)}(\mathbf{r}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\psi(\mathbf{r}; \tau_n)}{\sqrt{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi(\mathbf{r}'; \tau_n)|^2}} \quad (2.3)$$

Die diedrische Punktgruppe D_{2h} umfaßt alle Symmetrieeoperationen, welche das Gebiet \mathcal{C} invariant lassen. Sie besteht aus acht diskreten Symmetrieeoperationen: der Identität E und der Inversion I , den Drehungen um π an der x -, y - und z -Achse, bezeichnet mit $C_2(x)$, $C_2(y)$, $C_2(z)$, sowie den Spiegelungen an den xy -, xz - und yz -Ebenen, bezeichnet mit $\sigma(xy)$, $\sigma(xz)$ und $\sigma(yz)$.

Da sich die Symmetrieeigenschaften des Wellenleiters \mathcal{C} auf den Wärmeleitungskern übertragen, bleibt dieser unter den genannten Symmetrieeoperationen invariant. Wenn die Wellenfunktion $\psi_\gamma^{(in)}(\mathbf{r})$ zur Zeit $\tau = 0$ eine Darstellung der Gruppe D_{2h} ist, so werden die iterierten Wellenfunktionen $\psi_\gamma^{(in)}(\mathbf{r}, \tau_n)$ ihre ursprüngliche Parität ± 1 beibehalten, d.h. ihre Symmetrie ändert sich nicht [33]. Die Symmetrieeigenschaften des Wellenleiters vom Typ $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$, siehe Abb. 1.1, übertragen sich auf die jeweilige Grundzustandsmode.

Hierbei bezeichnet $\gamma \in \{A_g, B_{1g}, B_{2g}, B_{3g}, A_u, B_{1u}, B_{2u}, B_{3u}\}$ die irreduziblen Darstellungen von D_{2h} . Zunächst sollen die Betrachtungen auf Moden mit gerader Parität unter Spiegelung an der xy -Ebene bei $z = 0$ beschränkt werden, Moden ungerader Parität unter Spiegelung an dieser Ebene werden in Anhang E besprochen. Außerdem wird o.B.d.A. für die Breiten der Wellenleiter $w_y^{(C)} \leq w_x^{(C)}$ angenommen. Neben dem Grundzustand existieren weitere gebundene Zustände $\gamma \in \{B_{1g}, B_{2u}, B_{3u}\}$ mit Eigenwerten $E_{0,\gamma}^{(C)} > \epsilon_{xt}^{(C)}$. Diese Energieeigenwerte gehören also zum Punktspektrum des Hamiltonoperators H_{kin} auf der Domäne \mathcal{C} , obwohl sie über der Anregungsschwelle $\epsilon_{xt}^{(C)}$ der Zustände mit A_g -Symmetrie liegen, welche in diesem Energiebereich ein kontinuierliches Spektrum aufweisen.

Im Falle der A_g -Symmetrie ist die Mode $\psi_{0,A_g}^{(C)}(\mathbf{r})$ invariant unter allen Symmetrieeoperationen der Gruppe D_{2h} . Sie hat keine Knotenlinien und fällt in den Armen exponentiell ab. Außerdem bleibt sie für alle Verhältnisse der Armbreiten $w_x^{(C)}$ und $w_y^{(C)}$ lokalisiert. Ihr Energieeigenwert liegt unterhalb der Anregungsschwelle, $0 < E_{0,A_g}^{(C)} < \epsilon_{xt}^{(C)}$. Bei dieser Mode handelt es sich um den hochsymmetrischen Grundzustand $\psi_0^{(C)}(\mathbf{r}) \equiv \psi_{0,A_g}^{(C)}(\mathbf{r})$ zum Hamiltonoperator H_{kin} auf der Domäne \mathcal{C} .

Im Falle der B_{1g} -Symmetrie weist die Mode $\psi_{0,B_{1g}}^{(C)}(\mathbf{r})$ eine ungerade Parität unter Spiegelung an der xz - und yz -Ebene auf:

$$\begin{aligned}\psi_{0,B_{1g}}^{(C)}(x, y, z) &= -\psi_{0,B_{1g}}^{(C)}(-x, y, z) \\ \psi_{0,B_{1g}}^{(C)}(x, y, z) &= -\psi_{0,B_{1g}}^{(C)}(x, -y, z)\end{aligned}\quad (2.4)$$

Diese Mode weist zwei Knotenflächen auf, die mit den Symmetrieebenen $x = 0$ und $y = 0$ zusammenfallen. Sie ist für alle $w_z^{(C)}$ nur in einem bestimmten Wertebereich der Breitenverhältnisse $\kappa_{c,B_{1g}}^{(C)} < \kappa^{(C)} \leq 1$ lokalisiert mit $\kappa^{(C)} = \frac{w_y^{(C)}}{w_x^{(C)}}$ und $\kappa_{c,B_{1g}}^{(C)} \approx 0.89$, vgl. nächsten Abschnitt (2.2).

Lokalisierte Moden gibt es auch im Falle der B_{3u} -Symmetrie. Die Mode $\psi_{0,B_{3u}}^{(C)}(\mathbf{r})$ besitzt gerade Parität bei Spiegelung an der xz -Ebene und ungerade Parität bei Spiegelung an der yz -Ebene:

$$\begin{aligned}\psi_{0,B_{3u}}^{(C)}(x, y, z) &= -\psi_{0,B_{3u}}^{(C)}(-x, y, z) \\ \psi_{0,B_{3u}}^{(C)}(x, y, z) &= \psi_{0,B_{3u}}^{(C)}(x, -y, z)\end{aligned}\quad (2.5)$$

Diese Mode weist eine Knotenfläche auf, die mit der Symmetrieebene $y = 0$ zusammenfällt. Sie ist (unabhängig von $w_z^{(C)}$) für Breitenverhältnisse $\kappa^{(C)} < \kappa_{c,B_{3u}}^{(C)}$ lokalisiert, wobei $\kappa_{c,B_{3u}}^{(C)} \simeq 0.63$, vgl. nächsten Abschnitt (2.2). Ähnliche Ergebnisse wurden von Nazarov [35] und Amore [36] gefunden. Der Fall der B_{2u} -Symmetrie ergibt sich aus der B_{3u} -Symmetrie durch Austausch der Koordinaten x und y .

Als nächstes werden zwei Teilgebiete von \mathcal{C} betrachtet, die T -förmige Unterdomäne \mathcal{T} und die L -förmige Unterdomäne \mathcal{L} , siehe Abbildung 1.1:

$$\begin{aligned}\mathcal{T} &= \{(x, y, z) \in \mathcal{C} \mid x \geq 0\} \\ \mathcal{L} &= \{(x, y, z) \in \mathcal{C} \mid (x \geq 0) \wedge (y \geq 0)\}\end{aligned}\quad (2.6)$$

Die Domäne \mathcal{T} besteht aus der Hälfte der Domäne \mathcal{C} , die Domäne \mathcal{L} aus einem Viertel. Dadurch ergeben sich für die jeweiligen Breiten- und Höhenparameter folgende Beziehungen:

$$\begin{aligned}w_z^{(\mathcal{L})} &= w_z^{(\mathcal{T})} = w_z^{(C)} \\ 2w_y^{(\mathcal{L})} &= w_y^{(\mathcal{T})} = w_y^{(C)} \\ 2w_x^{(\mathcal{L})} &= 2w_x^{(\mathcal{T})} = w_x^{(C)}\end{aligned}\quad (2.7)$$

Der Grundzustand $\psi_0^{(\mathcal{L})}(\mathbf{r})$ zu H_{kin} auf der Domäne \mathcal{L} fällt mit der lokalisierten Mode $\psi_{0,B_{1g}}^{(C)}(\mathbf{r})$ zusammen, falls die Wirkung des Operators H_{kin} auf Wellenfunktionen mit einem Träger identisch mit \mathcal{L} beschränkt ist:

$$\psi_0^{(\mathcal{L})}(\mathbf{r}) = \psi_{0,B_{1g}}^{(C)}(\mathbf{r})|_{\mathbf{r} \in \mathcal{L}}\quad (2.8)$$

Da die Knotenebenen $x = 0$ und $y = 0$ zum Rand $\partial\mathcal{L}$ von \mathcal{L} gehören, sind die Dirichlet-Randbedingungen durch $\psi_0^{(\mathcal{L})}(\mathbf{r})$ erfüllt. Innerhalb von \mathcal{L} weist die Mode

$\psi_0^{(\mathcal{L})}(\mathbf{r})$ keine Knoten auf. Ihr Energieeigenwert $E_0^{(\mathcal{L})} \equiv E_{0,B_{1g}}^{(\mathcal{C})}$ liegt unter der zur Domäne \mathcal{L} gehörenden Anregungsschwelle, $E_0^{(\mathcal{L})} < \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{L})}$, vgl. nächsten Abschnitt (2.2).

Auf gleiche Weise fällt die lokalisierte Mode $\psi_{0,B_{3u}}^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r})$ mit dem Grundzustand $\psi_0^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r})$ zu H_{kin} zusammen, falls sie auf die Domäne \mathcal{T} beschränkt bleibt und H_{kin} nur auf einem Träger identisch mit \mathcal{T} wirkt. Die Funktion

$$\psi_0^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r}) = \psi_{0,B_{3u}}^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r})|_{\mathbf{r} \in \mathcal{T}} \quad (2.9)$$

erfüllt am Rand $\partial\mathcal{T}$ von \mathcal{T} die Dirichlet-Randbedingungen und ist innerhalb von \mathcal{T} frei von Knoten. Ihr Energieeigenwert $E_0^{(\mathcal{T})} \equiv E_{0,B_{3u}}^{(\mathcal{C})}$ liegt unter der zur Domäne \mathcal{T} gehörenden Anregungsschwelle, $E_0^{(\mathcal{T})} < \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{T})}$.

In Abbildung 2.1 wird der hochsymmetrische Grundzustand auf der Domäne \mathcal{C} für zwei verschiedene Breitenverhältnisse $\kappa^{(\mathcal{C})} = \frac{w_y^{(\mathcal{C})}}{w_x^{(\mathcal{C})}}$ gezeigt. Das Maximum liegt bei $\mathbf{r}_M = (0, 0, 0)$. Die Mode erfüllt die Dirichlet-Randbedingungen und fällt in den Armen exponentiell ab.

In Abbildung 2.2 wird der Grundzustand auf der Domäne \mathcal{L} für zwei verschiedene Breitenverhältnisse $\kappa^{(\mathcal{L})} = \frac{w_y^{(\mathcal{L})}}{w_x^{(\mathcal{L})}}$ gezeigt. Das Maximum liegt im Zentrum des Eckbereichs des Wellenleiters \mathcal{L} . Die Mode erfüllt die Dirichlet-Randbedingungen und fällt in den Armen exponentiell ab.

In Abbildung 2.3 wird der Grundzustand auf der Domäne \mathcal{T} für zwei verschiedene Breitenverhältnisse $\kappa^{(\mathcal{T})} = \frac{w_y^{(\mathcal{T})}}{w_x^{(\mathcal{T})}}$ gezeigt. Das Maximum liegt im Zentrum des Verzweigungsbereichs des Wellenleiters \mathcal{T} . Die Mode erfüllt die Dirichlet-Randbedingungen und fällt in den Armen exponentiell ab.

2.2 Energie und Lokalisierungslänge der lokalisierten Moden

In Abbildung 2.4 wird für die drei Typen von Wellenleitern $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{T}, \mathcal{L}\}$ das Verhältnis des Energieeigenwertes zur Anregungsschwelle, also $E_0^{(\Gamma)}/\varepsilon_{xt}^{(\Gamma)}$, für $\kappa^{(\Gamma)} = 1$ dargestellt. Im Limes $w_z^{(\Gamma)} \rightarrow 0$ gilt $E_0^{(\Gamma)} \rightarrow \varepsilon_{xt}^{(\Gamma)}$. Im Limes $w_z^{(\Gamma)} \rightarrow \infty$ finden wir $E_0^{(\mathcal{C})} = 0.659 \times \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{C})}$ und $E_0^{(\mathcal{L})} = 0.929 \times \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{L})}$, vgl. ([19], [25], [36], [37], [38]), wo diese Werte im Rahmen planarer Rechnungen festgestellt wurden. Während die Energieeigenwerte für realistisch dünne Filme von der Höhe des Films und den Verhältnissen der Armbreiten abhängen, s. Abb.(2.4, 2.5, 2.6, 2.7), sind die Lokalisierungslängen von $w_z^{(\Gamma)}$ unabhängig, s. Abb. 2.8, da in den Armen und in genügend weiter Entfernung vom zentralen Bereich \mathcal{A}_0 die Schrödinger-Eigenwertgleichung separabel ist. Falls die Wellenleiter ungleiche Armbreiten aufweisen, also $w_y^{(\Gamma)} \neq w_x^{(\Gamma)}$, vgl. Abb. 1.1, ist die Abklinglänge des exponentiellen Abfalls kleiner in Armen mit kleinerer Breite, siehe Abb. 2.9 und Abb. (2.1, 2.2, 2.3).

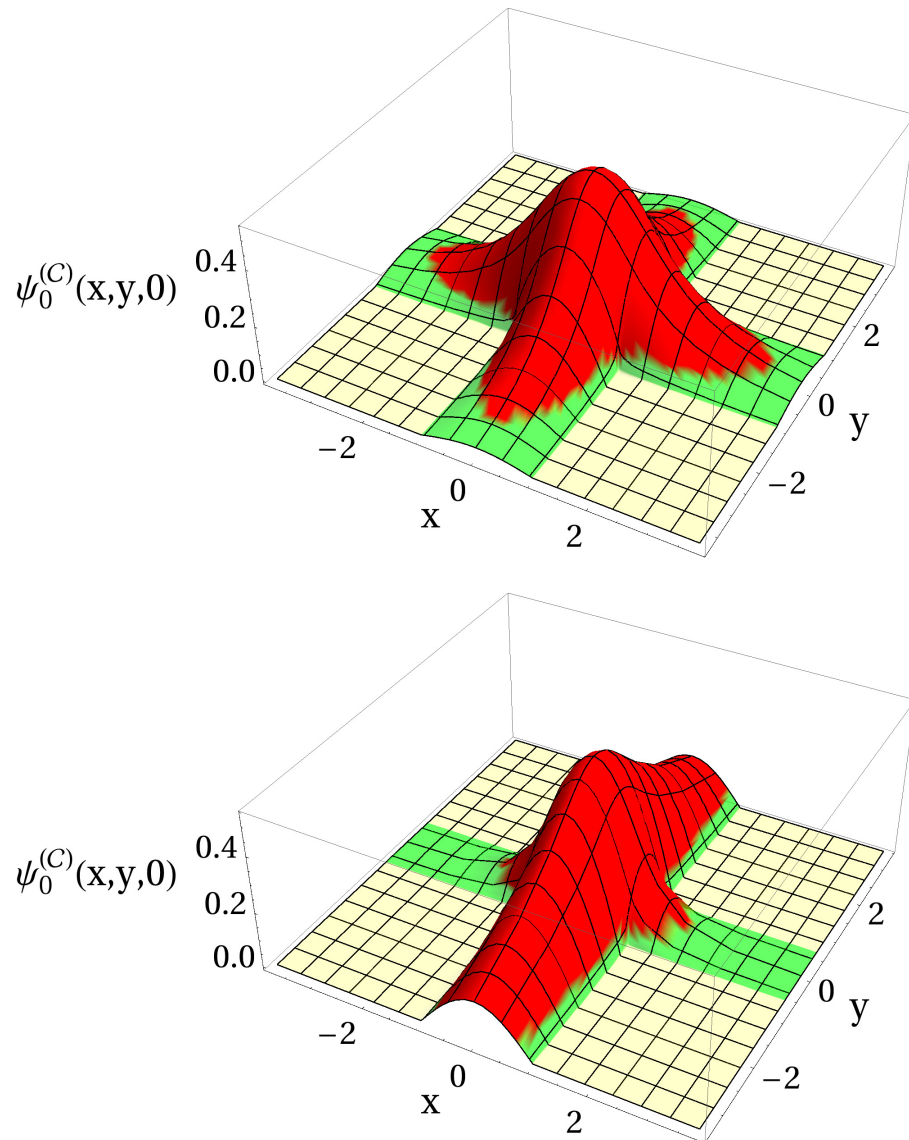


Abbildung 2.1: Der lokalisierte hochsymmetrische Grundzustand $\psi_0^{(C)}(\mathbf{r})$ im zentralen Kreuzungsbereich des Wellenleiters \mathcal{C} für verschiedene Breitenparameter. Die obere Abbildung zeigt den Fall $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = w_z^{(C)} = 2L$, die untere zeigt den Fall $w_x^{(C)} = w_z^{(C)} = 2L$ und $w_y^{(C)} = 0.6w_x^{(C)}$. In beiden Fällen wird die Mode in der Ebene $z = 0$ gezeigt. Die Länge wird in Einheiten von L gemessen.

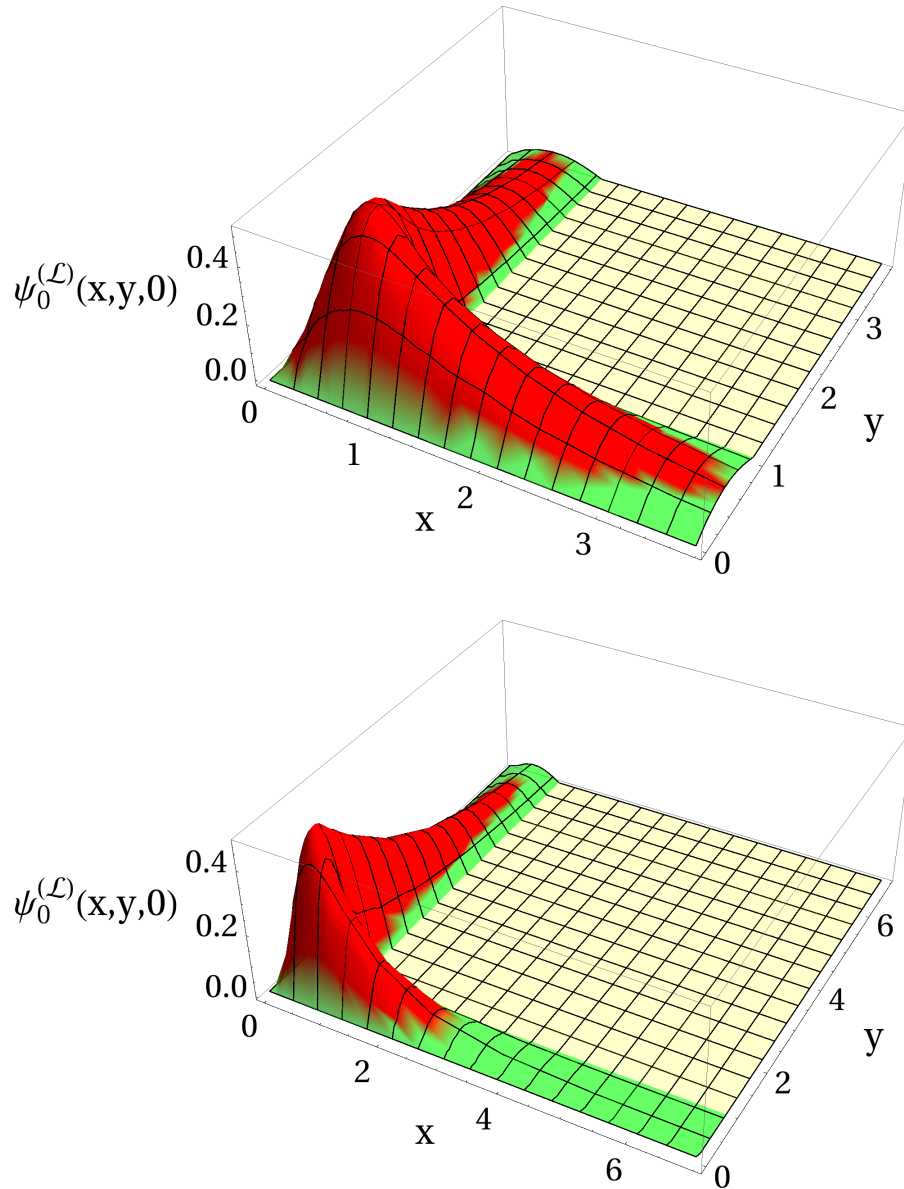


Abbildung 2.2: Der lokalisierte Grundzustand $\psi_0^{(\mathcal{L})}(\mathbf{r})$ im Bereich der Ecke eines L -förmigen Wellenleiters \mathcal{L} für verschiedene Breitenparameter. Die obere Abb. zeigt den Fall $w_x^{(\mathcal{L})} = w_y^{(\mathcal{L})} = L$ und $w_z^{(\mathcal{L})} = 2L$, die untere Abb. $w_x^{(\mathcal{L})} = L$, $w_z^{(\mathcal{L})} = 2L$ und $w_y^{(\mathcal{L})} = 0.95w_x^{(\mathcal{L})}$. In beiden Fällen wird die Mode in der Ebene $z = 0$ gezeigt. Die Länge wird in Einheiten von L gemessen.

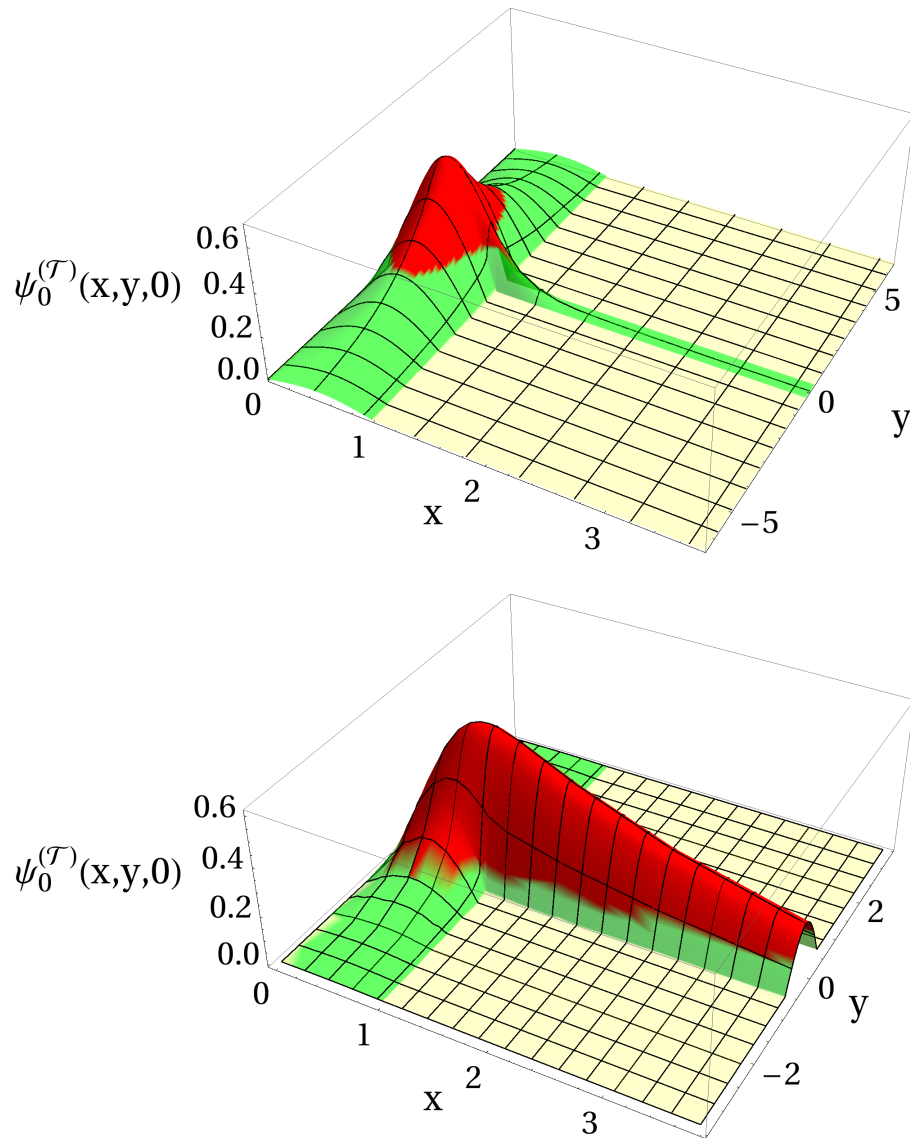


Abbildung 2.3: Der lokalisierte Grundzustand $\psi_0^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r})$ im Verzweigungsbereich des T -förmigen Wellenleiters \mathcal{T} für verschiedene Parameterwerte. Die obere Abb. zeigt den Fall $w_x^{(\mathcal{T})} = L$, $w_y^{(\mathcal{T})} = 0.6L$ und $w_z^{(\mathcal{T})} = 2L$, die untere Abb. $w_y^{(\mathcal{T})} = 1.2L$, $w_x^{(\mathcal{T})} = L$ und $w_z^{(\mathcal{T})} = 2L$. In beiden Fällen wird die Mode in der Ebene $z = 0$ gezeigt. Die Länge wird in Einheiten von L gemessen.

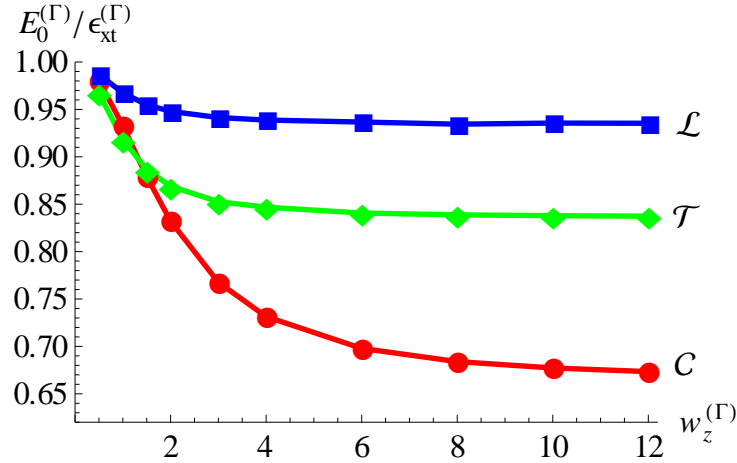


Abbildung 2.4: Das Verhältnis $E_0^{(\Gamma)} / \epsilon_{xt}^{(\Gamma)}$ des Eigenwertes $E_0^{(\Gamma)}$ zur Anregungsschwelle $\epsilon_{xt}^{(\Gamma)}$, welche mit der lokalisierten Grundzustandsmode $\psi_0^{(\Gamma)}(\mathbf{r})$ in der jeweiligen Wellenleitergeometrie $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{T}, \mathcal{L}\}$ korrespondiert, dargestellt als Funktion des Höhenparameters $w_z^{(\Gamma)}$, wobei feste Breitenparameter $w_x^{(\Gamma)} = w_y^{(\Gamma)}$ angenommen werden. Die Länge wird in Einheiten von L gemessen.

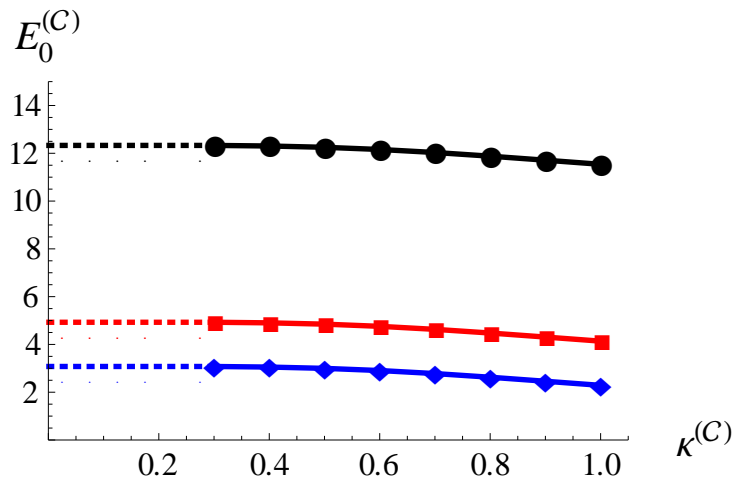


Abbildung 2.5: Der Eigenwert $E_0^{(C)}$ der lokalisierten Grundmode $\psi_0^{(C)}(\mathbf{r})$ in der \mathcal{C} -förmigen Wellenleitergeometrie in Abhängigkeit vom Verhältnis der Breitenparameter $\kappa^{(C)} = w_y^{(C)} / w_x^{(C)}$ für die Höhenparameter: $w_z^{(C)} = L$ (schwarz), $w_z^{(C)} = 2L$ (rot), $w_z^{(C)} = 4L$ (blau). Die Energie wird in Einheiten von ϵ_L gemessen.

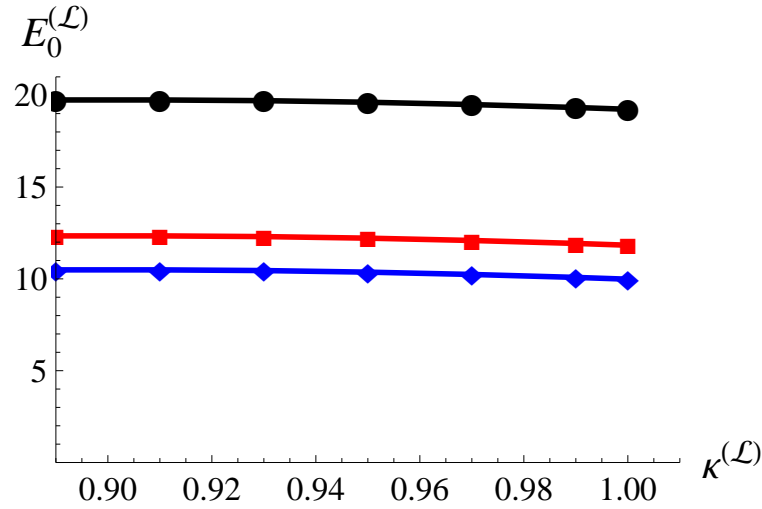


Abbildung 2.6: Der Eigenwert $E_0^{(L)}$ der lokalisierten Grundmode $\psi_0^{(L)}(\mathbf{r})$ in der L -förmigen Wellenleitergeometrie in Abhängigkeit vom Verhältnis der Breitenparameter $\kappa^{(L)} = w_y^{(L)}/w_x^{(L)}$ für die Höhenparameter: $w_z^{(L)} = L$ (schwarz), $w_z^{(L)} = 2L$ (rot), $w_z^{(L)} = 4L$ (blau). Dargestellt ist der Bereich $\kappa^{(L)} > \kappa_c^{(L)} \simeq 0.89$, für kleinere Werte von $\kappa^{(L)}$ existiert kein lokalisierter Grundzustand $\psi_0^{(L)}(\mathbf{r})$. Die Energie wird in Einheiten von ε_L gemessen.

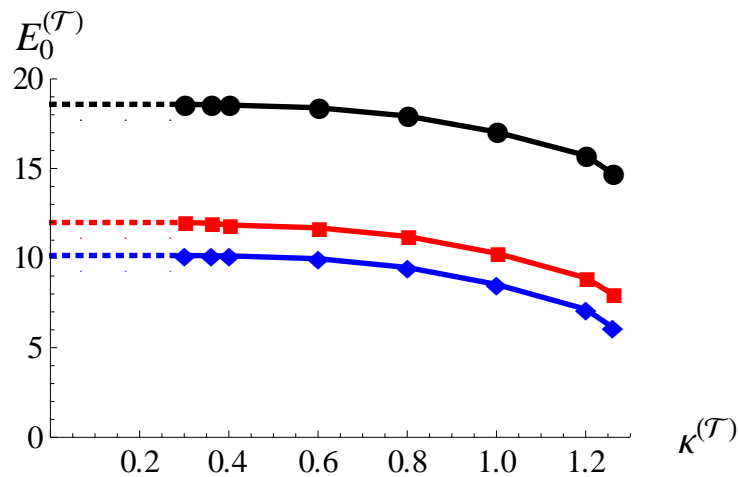


Abbildung 2.7: Der Eigenwert $E_0^{(T)}$ der lokalisierten Grundmode $\psi_0^{(T)}(\mathbf{r})$ in der T -förmigen Wellenleitergeometrie in Abhängigkeit vom Verhältnis der Breitenparameter $\kappa^{(T)} = w_y^{(T)}/w_x^{(T)}$ für die Höhenparameter: $w_z^{(T)} = L$ (schwarz), $w_z^{(T)} = 2L$ (rot), $w_z^{(T)} = 4L$ (blau). Die Energie wird in Einheiten von ε_L gemessen.

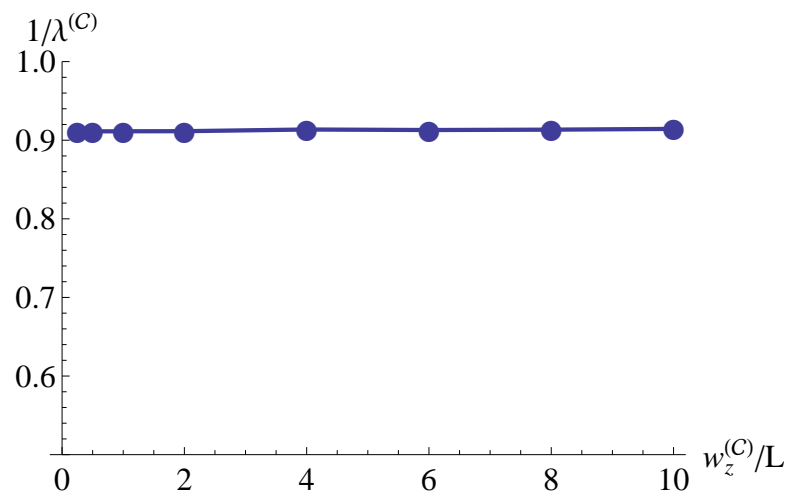


Abbildung 2.8: Inverse Lokalisierungslänge als Funktion des Höhenparameters $w_z^{(C)}$ für eine symmetrische kreuzförmige Domäne \mathcal{C} mit den Parameterwerten $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = 2L$.

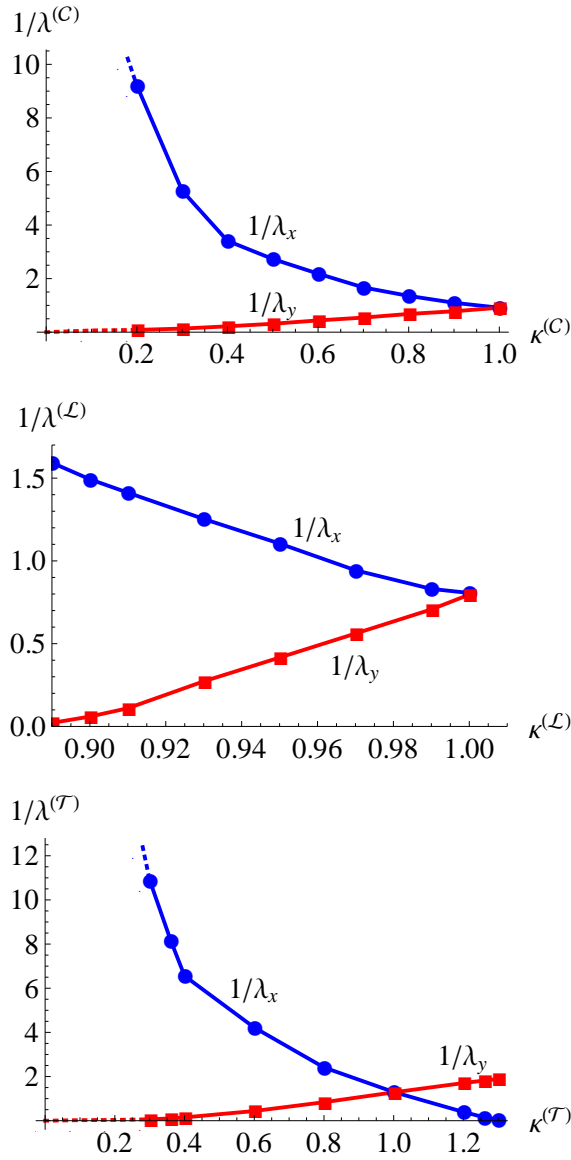


Abbildung 2.9: Inverse Lokalisierungslängen $1/\lambda_y^{(\Gamma)}$ entlang der Achse \mathbf{e}_y (rote Kurve) und $1/\lambda_x^{(\Gamma)}$ entlang der Achse \mathbf{e}_x (blaue Kurve) der Wellenleiter $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ als Funktion der jeweiligen Breitenverhältnisse $\kappa^{(\Gamma)} = w_y^{(\Gamma)}/w_x^{(\Gamma)}$ für den Höhenparameter $w_z^{(\Gamma)} = 2L$. In der obersten Abb. ist $w_x^{(C)} = 2L$, in der mittleren Abb. ist $w_x^{(L)} = L$, in der unteren Abb. $w_x^{(T)} = L$. Falls $\kappa^{(L)} < \kappa_c^{(L)} \simeq 0.89$ existiert kein lokalisierter Grundzustand $\psi_0^{(L)}(\mathbf{r})$, falls $\kappa^{(T)} > \kappa_c^{(T)} \simeq 1.26$ existiert kein lokalisierter Grundzustand $\psi_0^{(T)}(\mathbf{r})$. Die Längen werden in Einheiten von L gemessen.

Kapitel 3

Analytisches Modell zur Erklärung der effektiven Bindung in den Wellenleitern $\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}$

Das Auftreten der lokalisierten Zustände kann durch Einführung effektiver Pseudopotentiale verstanden werden, die sich durch die Integration der Schrödinger-Eigenwertgleichung in x - und z -Richtung ergeben [34]. Daraus resultiert eine eindimensionale Schrödingergleichung, die unter Berücksichtigung der Randbedingungen der jeweiligen Wellenleitergeometrien gelöst werden kann. Aus den Bindungsstärken der effektiven Pseudopotentiale läßt sich besser verstehen, warum in der kreuzförmigen Wellenleitergeometrie die lokalisierten Zustände im Intervall $0 < \kappa^{(\mathcal{C})} \leq 1$ von Breitenverhältnissen existieren, während in der L -förmigen Geometrie die Breitenverhältnisse nur wenig vom symmetrischen Fall $\kappa^{(\mathcal{L})} = 1$ abweichen dürfen.

3.1 Effektive Bindung im Wellenleiter \mathcal{C}

Zu einer Diskussion der Frage, warum sich im zentralen Kreuzungsbereich \mathcal{A}_0 lokalisierte Zustände ausbilden, während sich in der klassischen (Punkt-)Mechanik Teilchen innerhalb von \mathcal{C} frei bewegen können, wird das effektive Pseudopotential betrachtet, in welchem sich ein Teilchen an verschiedenen Punkten einer der Symmetrieachsen, beispielsweise der y -Achse, befindet. Da in den Armen die Schrödinger-Eigenwertgleichung separabel ist, läßt sich hier die Wellenfunktion schreiben als $\psi_0^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r}) = \psi_{\perp}^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r}_{\perp}) \phi_0^{(\mathcal{C})}(y)$. Diese Form legt es nahe, das Skalarprodukt der Wellenfunktion mit einer passenden Gewichtsfunktion $\psi_{\perp}^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r})$ zu bilden, welche in den einzelnen Teilbereichen \mathcal{A}_j unabhängig von der y -Koordinate ist und am Rand den Dirichlet-Randbedingungen genügen soll:

$$\psi_{\perp}^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r}) = 0 \text{ if } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{C} \quad (3.1)$$

Dann ergibt sich aus Gleichung (1.11):

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-L_z}^{L_z} dz \psi_{\perp}^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r}) \left[-\partial_y^2 - (\partial_x^2 + \partial_z^2) - E_0^{(\mathcal{C})} \right] \psi_0^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.2)$$

Mit Hilfe der neuen Funktion

$$\phi_0^{(c)}(y) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-L_z}^{L_z} dz \psi_{\perp}^{(c)}(\mathbf{r}) \psi_0^{(c)}(\mathbf{r}) \quad (3.3)$$

ergibt sich das eindimensionale Schrödinger-Eigenwertproblem:

$$\left[-\partial_y^2 + V_{\perp}^{(c)}(y) \right] \phi_0^{(c)}(y) = E_0^{(c)} \phi_0^{(c)}(y) \quad (3.4)$$

mit einem effektiven Pseudopotential, welches durch die transversale kinetische Energie erzeugt wird:

$$V_{\perp}^{(c)}(y) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-L_z}^{L_z} dz \psi_0^{(c)}(\mathbf{r}) (-\partial_x^2 - \partial_z^2) \psi_{\perp}^{(c)}(\mathbf{r})}{\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-L_z}^{L_z} dz \psi_0^{(c)}(\mathbf{r}) \psi_{\perp}^{(c)}(\mathbf{r})} \quad (3.5)$$

Im Falle des symmetrischen Kreuzes mit den Parameterwerten $w_x^{(c)} = w_y^{(c)} = w_z^{(c)} = 2L$ läßt sich die räumliche Variation des transversalen Anteils $\psi_{\perp}^{(c)}(\mathbf{r})$ der numerisch berechneten Wellenfunktion $\psi_0^{(c)}(\mathbf{r})$ in guter Näherung schreiben als:

$$\begin{aligned} \psi_{\perp}^{(c)}(\mathbf{r}) &= \Theta(|y| - L) \psi_{\perp,24}(\mathbf{r}_{\perp}) + \Theta(L - |y|) \psi_{\perp,013}(\mathbf{r}_{\perp}) \\ \mathbf{r} &= (x, y, z) \text{ and } \mathbf{r}_{\perp} = (x, z) \end{aligned} \quad (3.6)$$

mit

$$\begin{aligned} \psi_{\perp,24}(\mathbf{r}_{\perp}) &= a_{\perp} \cos\left(\frac{\pi}{2L}x\right) \cos\left(\frac{\pi}{2L_z}z\right) \\ \psi_{\perp,013}(\mathbf{r}_{\perp}) &= \frac{a_{\perp}}{\cosh^2\left(\frac{x}{2\lambda}\right)} \cos\left(\frac{\pi}{2L_z}z\right), \end{aligned} \quad (3.7)$$

wobei λ die numerisch bestimmte Lokalisierungslänge der Wellenfunktion $\psi_0^{(c)}(\mathbf{r})$ darstellt.

Wie in Abb. 3.1 gezeigt, ergibt sich dann ein näherungsweise topfförmiges effektives Pseudopotential $V_{\perp}^{(c)}(y)$:

$$V_{\perp}^{(c)}(y) = \begin{cases} V_{\perp,0}^{(c)} & \text{for } |y| < L \\ \varepsilon_{xt}^{(c)} & \text{for } |y| > L \end{cases}, \quad (3.8)$$

wobei $\varepsilon_{xt}^{(c)} = \lim_{|y| \rightarrow \infty} V_{\perp}^{(c)}(y) > V_{\perp,0}^{(c)} \geq 0$ die Anregungsschwelle in den Armen $\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_4$ ist. Da durch die sprunghafte Änderung der Randbedingungen beim Übergang von den Armen in den zentralen Bereich und die damit verbundene Ausdehnung der Wellenfunktion für alle kreuzförmigen Domänen \mathcal{C} die Beziehung $\varepsilon_{xt}^{(c)} > V_{\perp,0}^{(c)}$ gilt, ist das effektive Pseudopotential $V_{\perp}^{(c)}(y)$ immer attraktiv und hat eine endliche Bindungsstärke

$$b_{\perp}^{(c)} = L \sqrt{\varepsilon_{xt}^{(c)} - V_{\perp,0}^{(c)}}. \quad (3.9)$$

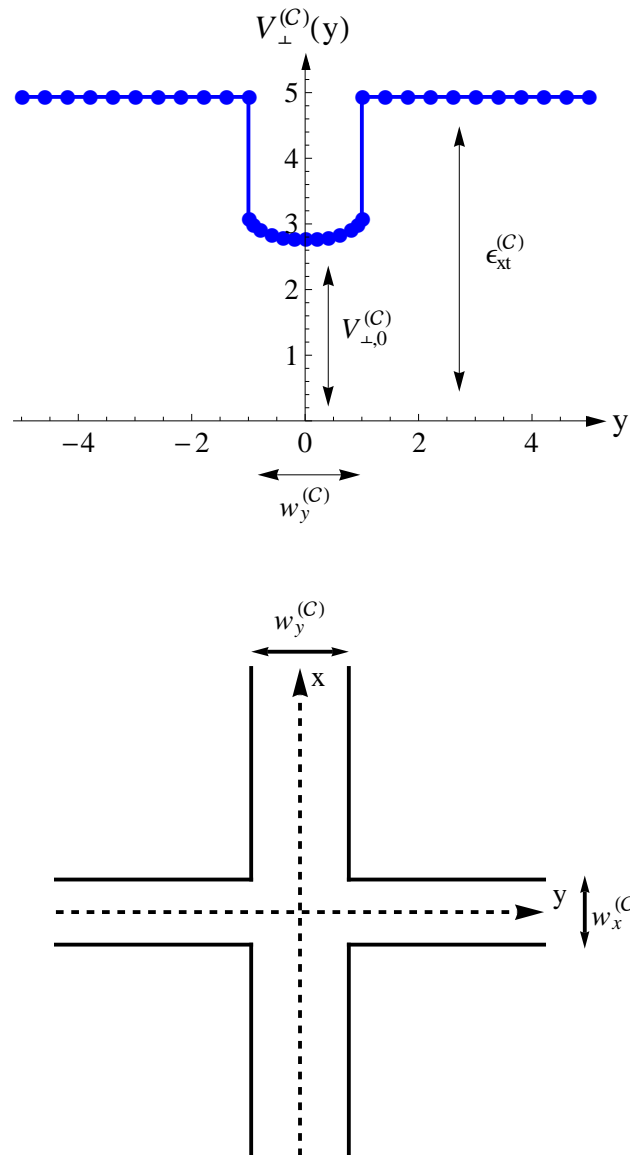


Abbildung 3.1: Effektives eindimensionales Pseudopotential $V_{\perp}^{(C)}(y)$ als Funktion der y -Koordinate für ein Teilchen in den Armen und dem zentralen Bereich des Wellenleiters \mathcal{C} . Länge und Energie werden in Einheiten von L und ϵ_L gemessen.

Daher existiert immer ein gebundener Zustand gerader Parität. Es ist also der Sprung der transversalen kinetischen Energie, der für die Lokalisierung eines Teilchens im zentralen Bereich \mathcal{A}_0 der kreuzförmigen Geometrie sorgt. Um das asymptotische Verhalten des lokalisierten Zustandes zu beschreiben, läßt sich das effektive Pseudopotential vereinfachend durch ein δ -Potential ersetzen:

$$V_{\perp}^{(c)}(y) \rightarrow \tilde{V}_{\perp}(y) = \varepsilon_{xt}^{(c)} - \frac{2}{\lambda} \delta(y) \quad (3.10)$$

Daraus ergibt sich für die Wellenfunktion des gebundenen Zustandes:

$$\tilde{\phi}_0^{(c)}(y) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \exp\left(-\frac{|y|}{\lambda}\right) \quad (3.11)$$

Für den Zusammenhang zwischen Energie und Abklinglänge läßt sich dann angeben:

$$E_0^{(c)} = \varepsilon_{xt}^{(c)} - \frac{1}{\lambda^2} \quad (3.12)$$

Diese Beziehung wird durch die numerischen Rechnungen bestätigt.

Vorbedingung für ein solches vereinfachtes Modell ist die Relation $\lambda > L$, welche aber im Fall der (symmetrischen) Kreuzgeometrie in den numerischen Rechnungen erfüllt ist.

3.2 Effektive Bindung im Wellenleiter \mathcal{L}

Die Breitenparameter im Falle des Wellenleiters \mathcal{L} sind gegeben durch $w_x^{(\mathcal{L})} = \frac{w_x^{(c)}}{2} = L_x$ und $w_y^{(\mathcal{L})} = \frac{w_y^{(c)}}{2} = L_y$, der Höhenparameter nimmt den gleichen Wert an, $w_z^{(\mathcal{L})} = w_z^{(c)} = 2L_z$. Für ein Teilchen, welches sich beispielsweise auf der x -Achse befindet, siehe Abb. 3.2, ergibt sich mit einem Potentialtopfmodell wie im vorigen Falle ein eindimensionales Schrödinger-Eigenwertproblem:

$$\left[-\partial_x^2 + V_{\perp}^{(\mathcal{L})}(x)\right] \phi_0^{(\mathcal{L})}(x) = E_0^{(\mathcal{L})} \phi_0^{(\mathcal{L})}(x) \quad (3.13)$$

Der Träger von $\phi_0^{(\mathcal{L})}(x)$ ist in diesem Falle auf die Halbachse $x > 0$ beschränkt, wobei das effektive Pseudopotential, Gl. (3.5), nun den Abfall der transversalen kinetischen Energie bei $x = L_x$ beschreibt:

$$V_{\perp}^{(\mathcal{L})}(x) = \begin{cases} \infty & \text{for } x = 0 \\ V_{\perp,0}^{(\mathcal{L})} & \text{for } 0 < x < L_x \\ \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{L})} & \text{for } L_x < x \end{cases} \quad (3.14)$$

Hierbei wird die Konstante $V_{\perp,0}^{(\mathcal{L})} < \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{L})}$ eingeführt, da die transversale kinetische Energie im zentralen Bereich \mathcal{A}_0 einen endlichen Wert annehmen kann. Um den Grundzustand als Lösung des Schrödinger-Eigenwertproblems auf der Halbachse

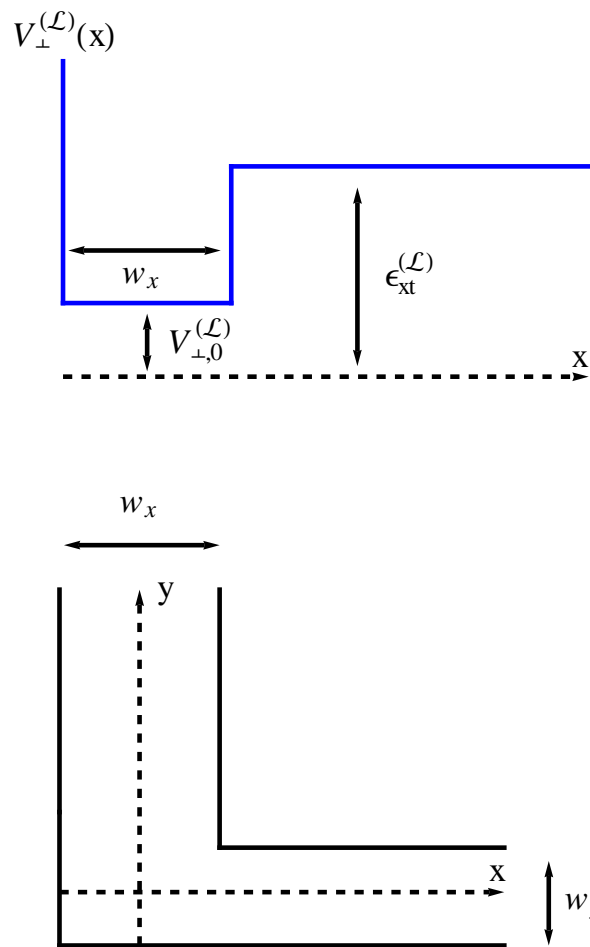


Abbildung 3.2: Effektives eindimensionales Pseudopotential $V_{\perp}^{(\mathcal{L})}(x)$ als Funktion der x -Koordinate für ein Teilchen im Eckbereich des L -förmigen Wellenleiters \mathcal{L} . Länge und Energie werden in Einheiten von L und ε_L gemessen.

$x > 0$ zu finden, kann äquivalent der niedrigste Eigenzustand ungerader Parität auf der ganzen reellen Achse $-\infty < x < \infty$ gesucht werden. Damit ergibt sich für $x > 0$ der Ansatz:

$$\phi_0^{(\mathcal{L})}(x) = \begin{cases} a_{\perp} \sin(qx) & \text{für } 0 < x < L_x \\ a_{\perp} \sin(qL_x) \exp\left(-\frac{x-L_x}{\lambda}\right) & \text{für } L_x < x \end{cases} \quad (3.15)$$

Aus diesem Ansatz ergibt sich die Lösung des Schrödinger-Eigenwertproblems, falls gilt:

$$E_0^{(\mathcal{L})} = \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{L})} - \frac{1}{\lambda^2} = q^2 + V_{\perp,0}^{(\mathcal{L})} \quad (3.16)$$

Der Ansatz ist stetig bei $x = L_x$. Damit auch die Ableitung bei $x = L_x$ stetig ist, muß gelten:

$$q \cos(qL_x) = -\frac{1}{\lambda} \sin(qL_x) \quad (3.17)$$

Aus den beiden Stetigkeitsbedingungen ergibt sich dann:

$$\begin{aligned} \frac{L_x}{\lambda} &= -qL_x \cot(qL_x) \\ \left(\frac{L_x}{\lambda}\right)^2 + (qL_x)^2 &= L_x^2 \left(\varepsilon_{xt}^{(\mathcal{L})} - V_{\perp,0}^{(\mathcal{L})}\right) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Damit $-\cot(qL_x) > 0$ ist, muß gelten $\frac{\pi}{2} < qL_x < \pi$. Daraus folgt, daß eine Lösung der beiden Gleichungen für die Unbekannten q und $\frac{L_x}{\lambda}$, und damit ein gebundener Zustand, nur existieren kann, falls für die Bindungsstärke gilt:

$$b_{\perp}^{(\mathcal{L})} = L_x \sqrt{\varepsilon_{xt}^{(\mathcal{L})} - V_{\perp,0}^{(\mathcal{L})}} > \frac{\pi}{2} \quad (3.19)$$

Dieses Modell legt nahe, daß wenn sich das Verhältnis der Breitenparameter $\kappa^{(\mathcal{L})} = \frac{w_y^{(\mathcal{L})}}{w_x^{(\mathcal{L})}}$ von oben einem kritischen Wert $\kappa_c^{(\mathcal{L})}$ annähert, die Bindungsstärke abnimmt, bis sie bei $\kappa_c^{(\mathcal{L})}$ den kritischen Wert $\frac{\pi}{2}$ erreicht.

3.3 Effektive Bindung im Wellenleiter \mathcal{T}

Das effektive Pseudopotential im Wellenleiter \mathcal{T} nimmt je nach Armachse eine unterschiedliche Form an, die sich aus den beiden zuvor betrachteten Fällen der Wellenleiter \mathcal{C} und \mathcal{L} ergeben. Wenn der Wellenleiter \mathcal{T} entlang der y -Achse durchlaufen wird, ergibt sich ein effektives Pseudopotential $V_{\perp}^{(\mathcal{T})}(y)$ wie im Falle des Wellenleiters \mathcal{C} , siehe Abb. 3.3. Man erhält also wieder ein effektives Pseudopotential in der Form eines Topfes, vgl. Abb. 3.1. Entlang der x -Achse allerdings ergibt sich ein effektives Pseudopotential $V_{\perp}^{(\mathcal{T})}(x)$ wie im Falle des Wellenleiters \mathcal{L} , siehe Abb. 3.4. In dieser Richtung liegt also bei $x = 0$ wieder eine harte Wand vor, vgl. Gl. (3.14). Der Grundzustand ergibt sich dann wieder als der niedrigste Eigenzustand ungerader Parität für ein attraktives topfförmiges effektives Pseudopotential entlang der ganzen reellen Achse $-\infty < x < \infty$.

Entlang der y -Achse ist also wie im Falle des Wellenleiters \mathcal{C} jede positive Bindungsstärke des effektiven Pseudopotentials hinreichend für das Auftreten eines lokalisierten Zustandes. Hingegen muß entlang der x -Achse wieder eine minimale Bindungsstärke $b_{\perp}^{(\mathcal{T})} > \frac{\pi}{2}$ vorliegen, so daß lokalisierte Zustände nur vorliegen, falls das Verhältnis der Breitenparameter $\kappa^{(\mathcal{T})} = \frac{w_y^{(\mathcal{T})}}{w_x^{(\mathcal{T})}}$ nicht zu groß ist.

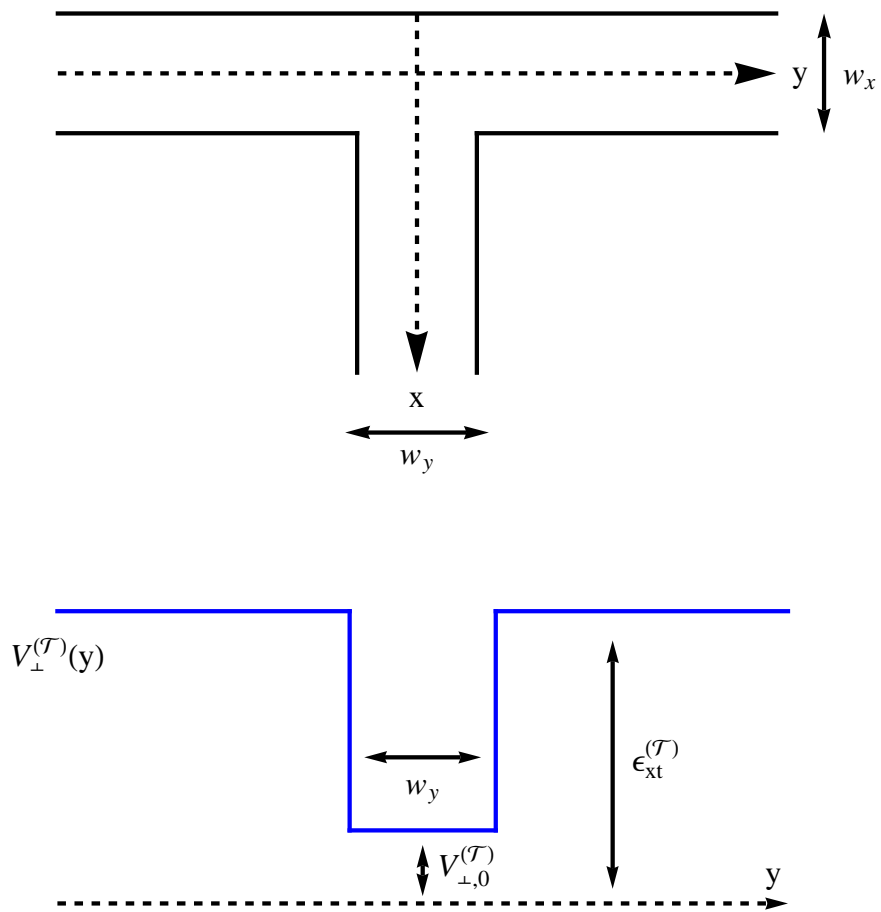


Abbildung 3.3: Effektives eindimensionales Pseudopotential $V_{\perp}^{(\mathcal{T})}(y)$ als Funktion der y -Koordinate für ein Teilchen im zentralen Bereich des T -förmigen Wellenleiters \mathcal{T} . Länge und Energie werden in Einheiten von L und ϵ_L gemessen.

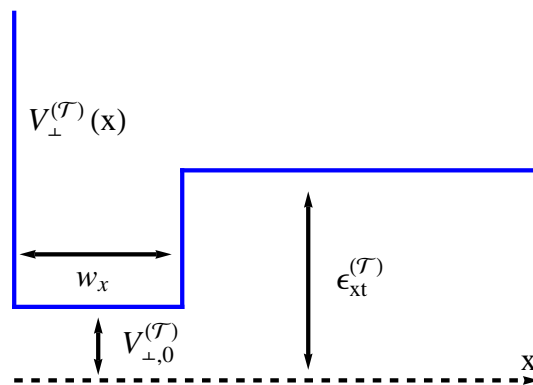
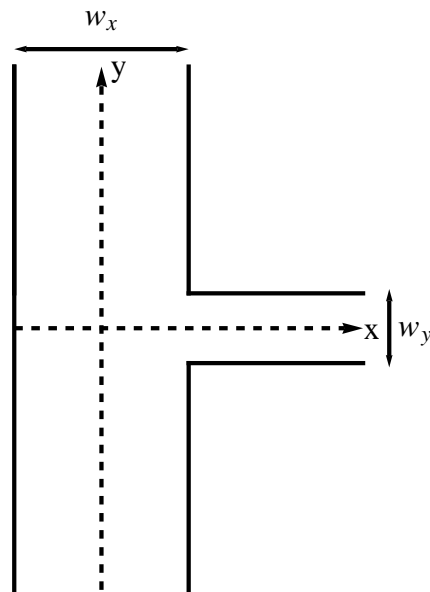


Abbildung 3.4: Effektives eindimensionales Pseudopotential $V_{\perp}^{(\mathcal{T})}(x)$ als Funktion der x -Koordinate für ein Teilchen im zentralen Bereich des T -förmigen Wellenleiters \mathcal{T} . Länge und Energie werden in Einheiten von L und ϵ_L gemessen.

Kapitel 4

BEC-Grundzustand in Verzweigungsbereichen der Wellenleiter $\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}$

Die lokalisierten Moden in den verschiedenen Wellenleitergeometrien können durch eine endliche Zahl von Teilchen besetzt werden [34]. In diesem Kapitel sollen die Profile der Orbitale gezeigt und einige ihrer charakteristischen Eigenschaften diskutiert werden. Insbesondere werden die Abhängigkeiten der Lokalisierungslänge und des chemischen Potentials von der Teilchenzahl untersucht sowie das Verhältnis von Wechselwirkungsenergie zu kinetischer Energie. Hierbei ergeben sich deutliche Unterschiede zum Fall eines harmonischen Fallenpotentials. Auch die Existenz der lokalisierten Orbitale für verschiedene Breitenverhältnisse der Arme bei endlichen Teilchenzahlen wird untersucht.

4.1 Splitting-Methode für die Gross-Pitaevskii-Gleichung

Wir betrachten nun das Vielteilchen-Problem in drei Dimensionen. Analog zum Einteilchen-Fall kann die volle Gross-Pitaevskii-Gleichung gelöst werden, indem der folgende Diffusionsprozeß mit der Diffusionszeit τ betrachtet wird:

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\mathbf{r}, \tau) = [H_{kin} + U_\psi(\mathbf{r}, \tau)] \psi(\mathbf{r}, \tau) \quad (4.1)$$

Das selbstkonsistente Potential $U_\psi(\mathbf{r}, \tau)$ lautet unter Berücksichtigung der richtigen Normierung [39]:

$$\begin{aligned} U_\psi(\mathbf{r}, \tau) &= g_N \frac{\psi(\mathbf{r}, \tau) \psi(\mathbf{r}, \tau)^\dagger}{\int |\psi(\mathbf{r}', \tau)|^2 d^3 r'} \\ g_N &= (N - 1) g_s, \end{aligned} \quad (4.2)$$

mit $g_s = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}$. Für große Diffusionszeiten wird $U_\psi(\mathbf{r}, \tau)$ zeitunabhängig. Den gesuchten normierten Grundzustand erhält man im Limes langer Diffusionszeiten τ :

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\psi(\mathbf{r}, \tau)}{\sqrt{\int |\psi(\mathbf{r}', \tau)|^2 d^3 r'}} \quad (4.3)$$

Mit $\psi(\mathbf{r}, \tau) = \langle \mathbf{r} | \psi(\tau) \rangle$ und unter Verwendung des Zeitordnungsoperators T_τ kann die Diffusionsgleichung in eine nichtlineare Integralgleichung umgeschrieben werden:

$$|\psi(\tau)\rangle = T_\tau \exp \left[- \int_0^\tau d\tau' (H_{kin} + U_\psi(\tau')) \right] |\psi(\tau=0)\rangle \quad (4.4)$$

Für große Diffusionszeiten wird der Wechselwirkungsterm $U_\psi(\mathbf{r}, \tau)$ von τ unabhängig. Bei einer gegebenen Anfangskonfiguration $\psi(\mathbf{r}, 0)$ zur Zeit $\tau = 0$ lassen sich damit numerisch Konfigurationen $\psi(\mathbf{r}, \tau_n)$ zu späteren Zeitpunkten τ_n mit $n = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$ und $\tau_{n+1} = \tau_n + \Delta\tau$ finden. Hierzu approximiert man das Integral für kleine $\Delta\tau$ als:

$$|\psi(\tau_{n+1})\rangle \approx \exp[-\Delta\tau H_{kin} - \Delta\tau U_\psi(\tau_n)] |\psi(\tau_n)\rangle \quad (4.5)$$

Wie sich zeigt, ist die kinetische Energie in den hier betrachteten Wellenleitergeometrien wesentlich größer als die Wechselwirkungsenergie, im Gegensatz zu harmonischen Fallenpotentialen. In diesem Fall läßt sich vorteilhaftes ein Splitting-Verfahren anwenden, welches in Anhang B näher beschrieben wird. Unter Verwendung des Magnus-Theorems läßt sich zeigen, daß für $n \in \{0, 1, 2, 3, \dots\}$ gilt (siehe Anhang B):

$$|\psi(\tau_{n+1})\rangle = \begin{cases} \exp \left[-\frac{\Delta\tau}{6} U_\psi(\tau_n) \right] \circ \exp \left[-\frac{\Delta\tau}{2} H_{kin} \right] \circ \exp \left[-\frac{2\Delta\tau}{3} U_\psi(\tau_n) \right] \circ \\ \quad \circ \exp \left[-\frac{\Delta\tau}{2} H_{kin} \right] \circ \exp \left[-\frac{\Delta\tau}{6} U_\psi(\tau_n) \right] |\psi(\tau_n)\rangle \\ \quad + O(\Delta\tau^2 \|U_\psi(\tau_n)\|^2 + \Delta\tau^4 \|H_{kin}\|^4) \end{cases} \quad (4.6)$$

Um von einer Funktion $\psi(\mathbf{r}, \tau_n)$ zum Zeitschritt $\tau = \tau_n$ auf die Funktion $\psi(\mathbf{r}, \tau_{n+1})$ zum Zeitschritt $\tau = \tau_{n+1}$ zu schließen, werden also (in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C}) folgende Schritte durchgeführt:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, \tau_0) &= \psi^{(in)}(\mathbf{r}) \\ \tau_{n+1} &= \tau_n + \Delta\tau \text{ for } n = 0, 1, 2, \dots \\ \psi^{(IV)}(\mathbf{r}, \tau_n) &= e^{-\frac{\Delta\tau}{6} U_\psi(\mathbf{r}, \tau_n)} \psi(\mathbf{r}, \tau_n) \\ \psi^{(III)}(\mathbf{r}, \tau_n) &= \int_{\mathcal{C}} d^3 \mathbf{r}' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \frac{\Delta\tau}{2}) \psi^{(IV)}(\mathbf{r}', \tau_n) \\ \psi^{(II)}(\mathbf{r}, \tau_n) &= e^{-\frac{2\Delta\tau}{3} U_\psi(\mathbf{r}, \tau_n)} \psi^{(III)}(\mathbf{r}, \tau_n) \\ \psi^{(I)}(\mathbf{r}, \tau_n) &= \int_{\mathcal{C}} d^3 \mathbf{r}' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \frac{\Delta\tau}{2}) \psi^{(II)}(\mathbf{r}', \tau_n) \\ \psi(\mathbf{r}, \tau_{n+1}) &= e^{-\frac{\Delta\tau}{6} U_\psi(\mathbf{r}, \tau_n)} \psi^{(I)}(\mathbf{r}, \tau_n) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Die Wirkung des Einteilchen-Wärmeleitungskerns $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \frac{\Delta\tau}{2})$ auf die Funktionen $\psi^{(IV)}(\mathbf{r}, \tau_n)$ und $\psi^{(II)}(\mathbf{r}, \tau_n)$ wird in Anhang A beschrieben.

4.2 Profile der Hartree-Orbitale

Aus den Rechnungen ergibt sich, daß auch für das Vielteilchen-Problem lokalisierte optimale Gross-Pitaevskii-Orbitale in allen drei Wellenleitergeometrien $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ existieren. Die Zustände niedrigster Energie weisen in der jeweiligen Geometrie wiederum keine Knoten auf und zeigen das gleiche Verhalten wie im Einteilchen-Problem. Die Zustände bleiben für $1 \leq N \leq N_c^{(\Gamma)}$ lokalisiert, wobei $N_c^{(\Gamma)}$ eine kritische Teilchenzahl bezeichnet, die von der Streulänge a_s der Bosonen und den Breiten- und Höhenparametern der Arme abhängt. Die kritische Teilchenzahl ist also die maximale Zahl von Bosonen, die im zentralen Bereich \mathcal{A}_0 gefangen werden können. In den Abb.(4.1, 4.2, 4.3, 4.4) werden Profile der optimierten Orbitale $\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})$ des Hartree-Grundzustandes im Wellenleiter $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ für verschiedene normierte Teilchenzahlen $N/N_c^{(\Gamma)}$ gezeigt. In allen Fällen nimmt die Abklinglänge des exponentiellen Abfalls in die Arme mit steigender Teilchenzahl zu. Die Position des Maximums wird in allen Fällen durch die Teilchenzahl nicht merklich beeinflusst. Die kritische Teilchenzahl $N_c^{(\Gamma)}$ steigt mit wachsendem Höhenparameter $w_z^{(\Gamma)}$ linear an, siehe Abb. 4.5.

4.3 Eigenschaften der Hartree-Orbitale

Nach Berechnung des optimierten Gross-Pitaevskii-Orbitals $\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})$ läßt sich der zugehörige Lagrange-Parameter $\mu_N^{(\Gamma)}$, welcher sich aus der Erhaltung der Norm der Wellenfunktion ergibt, durch das Skalarprodukt mit dem adjungierten Orbital $[\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})]^\dagger$ aus Gleichung (1.8) berechnen [40]:

$$\mu_N^{(\Gamma)} = \frac{E_{kin}^{(\Gamma)}(N) + 2E_{int}^{(\Gamma)}(N)}{N}, \quad (4.8)$$

wobei die Wechselwirkungsenergie gegeben ist durch

$$E_{int}^{(\Gamma)}(N) = \frac{N(N-1)}{2} \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} \int_{\Gamma} d^3r |\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|^4 \quad (4.9)$$

und die kinetische Energie durch

$$E_{kin}^{(\Gamma)}(N) = N \int_{\Gamma} d^3r [\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})]^\dagger H_{kin} \psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}). \quad (4.10)$$

Mit der Gesamtenergie

$$E^{(\Gamma)}(N) = E_{kin}^{(\Gamma)}(N) + E_{int}^{(\Gamma)}(N) \quad (4.11)$$

läßt sich zeigen, daß gilt [33]:

$$\mu_N^{(\Gamma)} = E^{(\Gamma)}(N) - E^{(\Gamma)}(N-1) \quad (4.12)$$

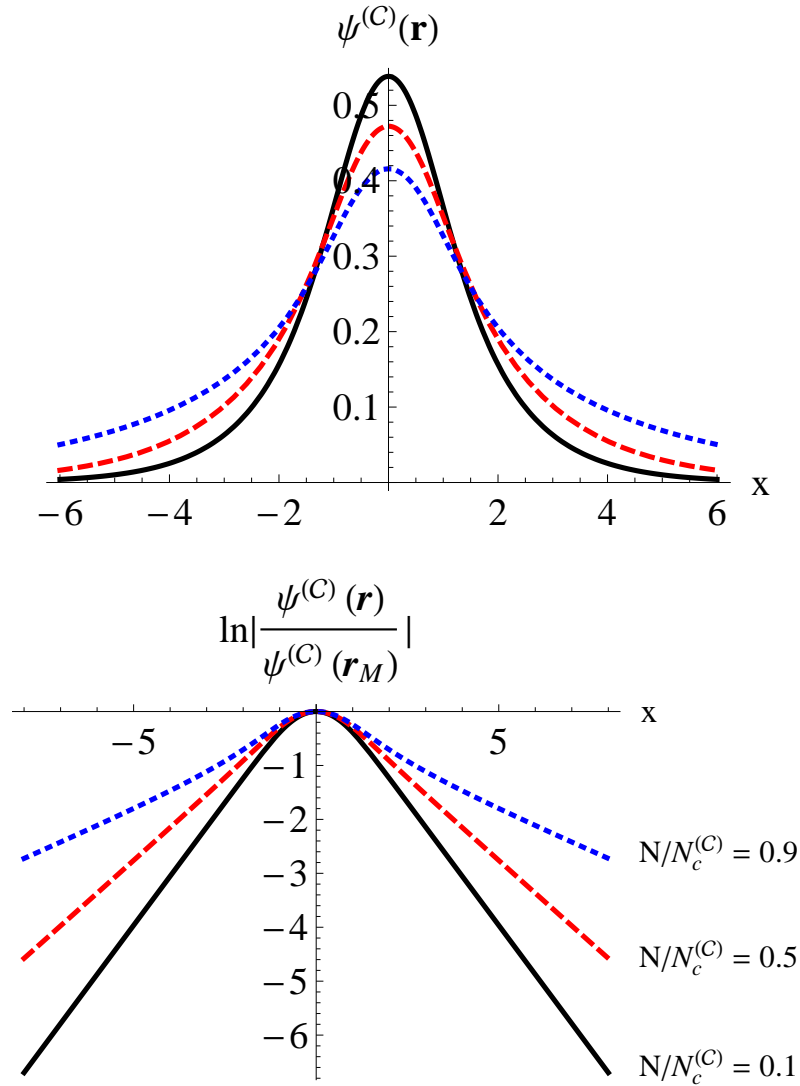


Abbildung 4.1: Profil des GP-Orbitals $\psi^{(C)}(\mathbf{r})$ des lokalisierten Hartree-Grundzustandes im zentralen Bereich des Wellenleiters \mathcal{C} für verschiedene Teilchenzahlen $N/N_c^{(C)}$: schwarze Kurve $N/N_c^{(C)} = 0.1$, rote Kurve $N/N_c^{(C)} = 0.5$, blaue Kurve $N/N_c^{(C)} = 0.9$. Die Moden wurden berechnet für $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = w_z^{(C)} = 2L$. Die Längen werden in Einheiten von L gemessen.

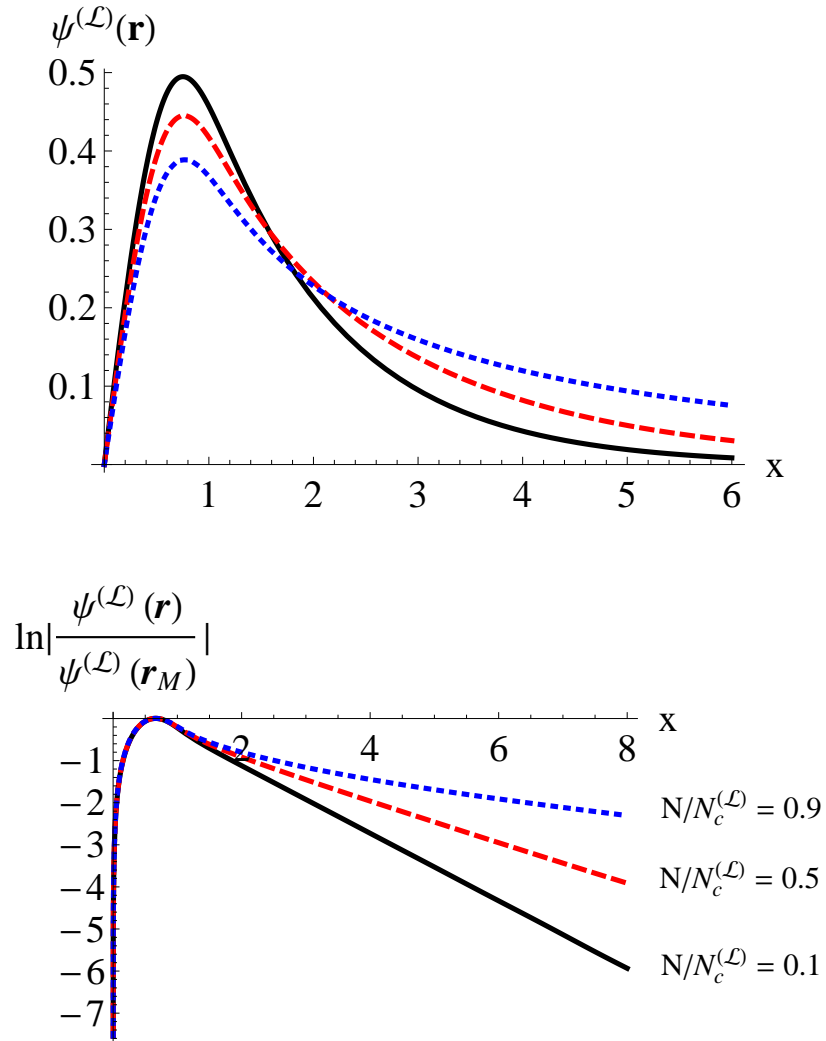


Abbildung 4.2: Profil des GP-Orbitals $\psi^{(\mathcal{L})}(\mathbf{r})$ des lokalisierten Hartree-Grundzustandes im Eckbereich des Wellenleiters \mathcal{L} für verschiedene Teilchenzahlen $N/N_c^{(\mathcal{L})}$: schwarze Kurve $N/N_c^{(\mathcal{L})} = 0.1$, rote Kurve $N/N_c^{(\mathcal{L})} = 0.5$, blaue Kurve $N/N_c^{(\mathcal{L})} = 0.9$. Die Moden wurden berechnet für $w_x^{(\mathcal{L})} = w_y^{(\mathcal{L})} = L$, $w_z^{(\mathcal{L})} = 2L$. Die Längen werden in Einheiten von L gemessen.

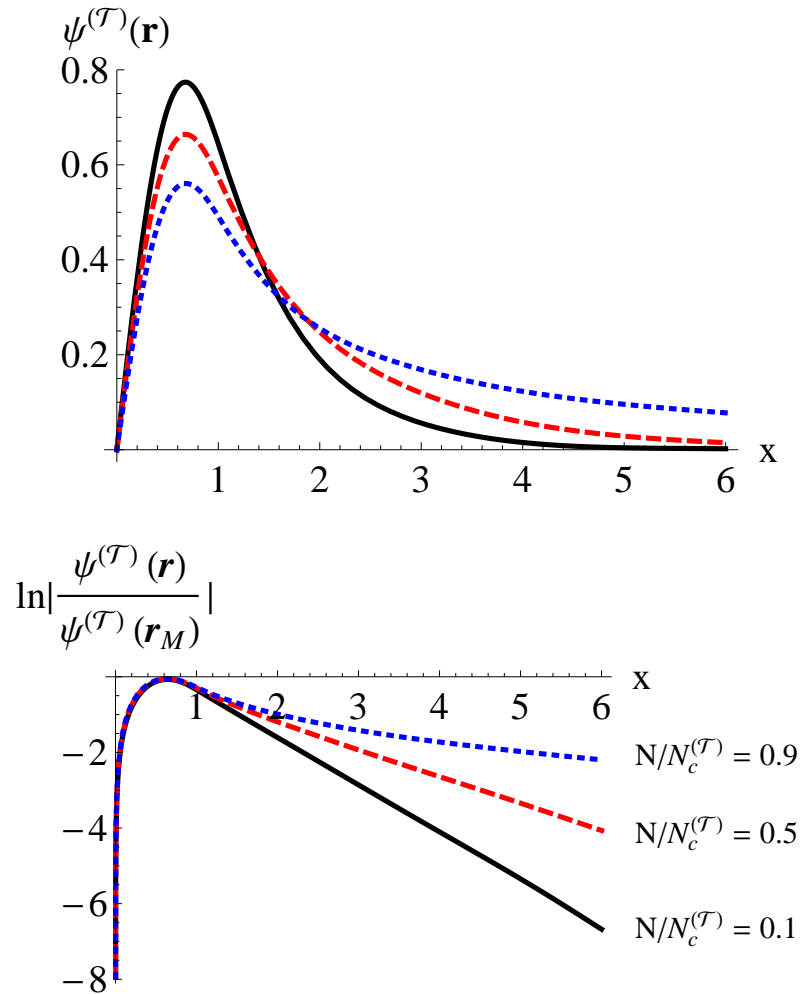


Abbildung 4.3: Profil entlang der Achsenrichtung \mathbf{e}_x des GP-Orbitals $\psi^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r})$ des lokalisierten Hartree-Grundzustandes im Verzweigungsbereich des Wellenleiters \mathcal{T} für verschiedene Teilchenzahlen $N/N_c^{(\mathcal{T})}$: schwarze Kurve $N/N_c^{(\mathcal{T})} = 0.1$, rote Kurve $N/N_c^{(\mathcal{T})} = 0.5$, blaue Kurve $N/N_c^{(\mathcal{T})} = 0.9$. Die Moden wurden berechnet für $w_x^{(\mathcal{T})} = w_y^{(\mathcal{T})} = L$, $w_z^{(\mathcal{T})} = 2L$. Die Längen werden in Einheiten von L gemessen.

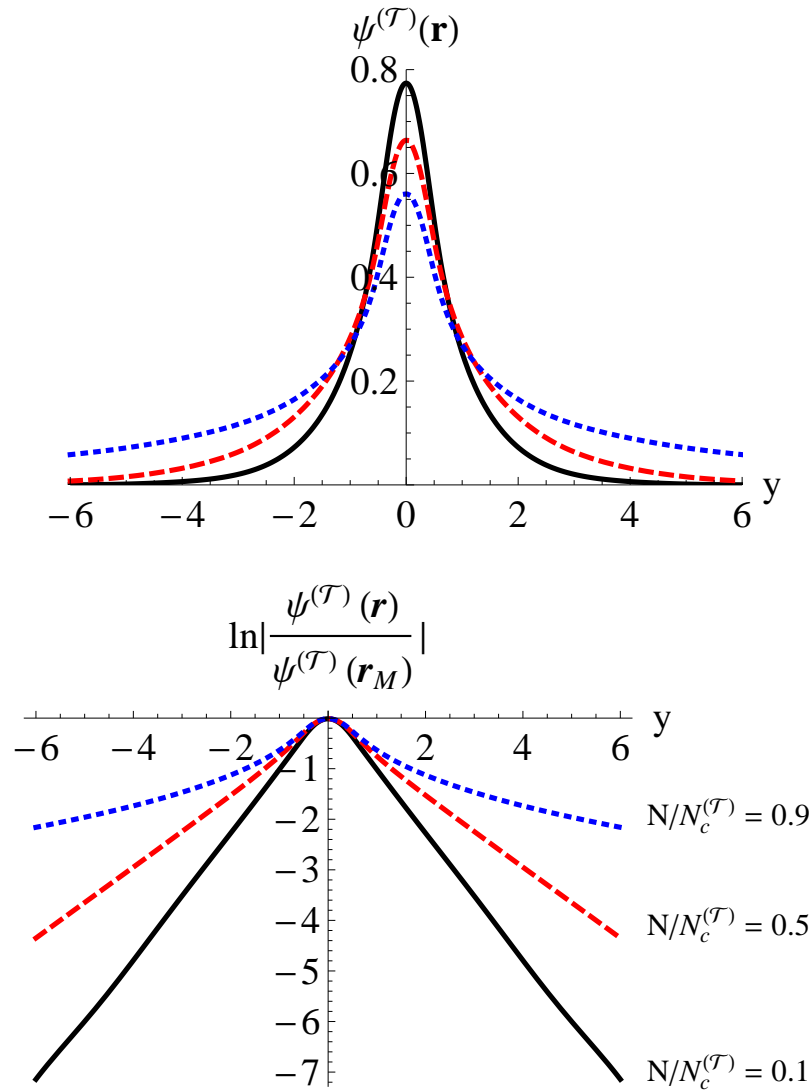


Abbildung 4.4: Profil entlang der Achsenrichtung \mathbf{e}_y des GP-Orbitals $\psi^{(\mathcal{T})}(\mathbf{r})$ des lokalisierten Hartree-Grundzustandes im Verzweigungsbereich des Wellenleiters \mathcal{T} für verschiedene Teilchenzahlen $N/N_c^{(\mathcal{T})}$: schwarze Kurve $N/N_c^{(\mathcal{T})} = 0.1$, rote Kurve $N/N_c^{(\mathcal{T})} = 0.5$, blaue Kurve $N/N_c^{(\mathcal{T})} = 0.9$. Die Moden wurden berechnet für $w_x^{(\mathcal{T})} = w_y^{(\mathcal{T})} = L$, $w_z^{(\mathcal{T})} = 2L$. Die Längen werden in Einheiten von L gemessen.

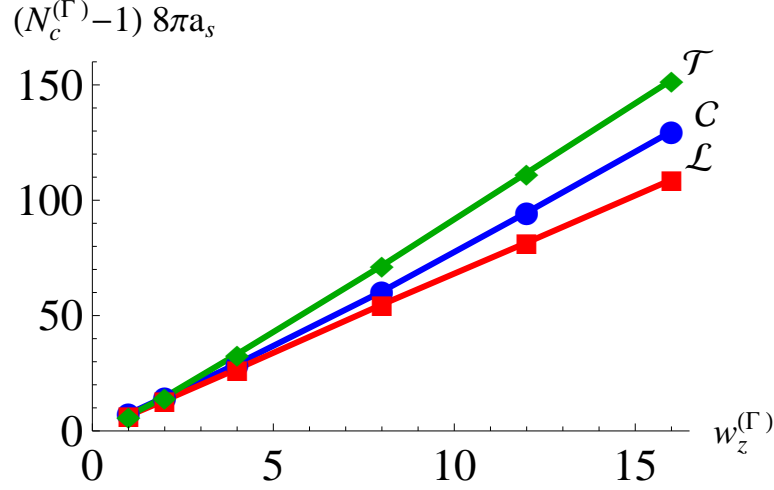


Abbildung 4.5: Kritische Teilchenzahl $N_c^{(\Gamma)} - 1$ als Funktion des Höhenparameters $w_z^{(\Gamma)}$ für die kreuzförmige Geometrie \mathcal{C} (blaue Kurve), T -förmige Geometrie \mathcal{T} (grüne Kurve) und L -förmige Geometrie \mathcal{L} (rote Kurve). Die Parameterwerte lauten: $w_x^{(\mathcal{C})} = w_y^{(\mathcal{C})} = 2L$, $w_x^{(\mathcal{T})} = w_y^{(\mathcal{T})} = L$ und $w_x^{(\mathcal{L})} = w_y^{(\mathcal{L})} = L$. In Wellenleitern mit T -förmiger Geometrie sind die Orbitale am stärksten lokalisiert, vgl. Abb. 4.8. Der Höhenparameter $w_z^{(\Gamma)}$ ist in Einheiten von L angegeben.

Das heißt, dem Lagrange-Parameter $\mu_N^{(\Gamma)}$ kommt tatsächlich die Bedeutung eines chemischen Potentials zu. In Abb. 4.6 wird das Verhältnis von Wechselwirkungsenergie $E_{int}^{(\mathcal{C})}$ zu kinetischer Energie $E_{kin}^{(\mathcal{C})}$ im Wellenleiter \mathcal{C} für verschiedene Parameterwerte $w_z^{(\mathcal{C})}$ gezeigt. Selbst für große Teilchenzahlen dominiert die kinetische Energie, im Gegensatz zu kalten Gasen in harmonischen Fallen, wo die kinetische Energie bei großen Teilchenzahlen N im Verhältnis zur potentiellen und Wechselwirkungsenergie vernachlässigbar ist ([40], [41]). Die Thomas-Fermi-Approximation [30] ist also für die hier untersuchten Wellenleitergeometrien ungültig.

Die Lokalisierungslängen $\lambda_{N,x}^{(\Gamma)}$ und $\lambda_{N,y}^{(\Gamma)}$, also die Abklinglängen des exponentiellen Abfalls in den Armen entlang der Achsen \mathbf{e}_x und \mathbf{e}_y im Wellenleiter $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$, sind definiert durch:

$$1/\lambda_{N,a}^{(\Gamma)} = - \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{1}{|\mathbf{r}_M + s\mathbf{e}_a|} \ln \left| \frac{\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}_M + s\mathbf{e}_a)}{\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r}_M)} \right|, \quad (4.13)$$

$$a \in \{x, y\}$$

Dabei bezeichnet \mathbf{r}_M eine passende Referenz-Position, z.B. dort, wo der Betrag $|\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|$ sein Maximum erreicht, siehe Abb. (4.1, 4.2, 4.3, 4.4). Die Lokalisierungslänge in den Wellenleitern $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ ist in den schmaleren Armen kleiner.

In Abb. 4.8 werden die inversen Lokalisierungslängen $1/\lambda_{N,x}^{(\Gamma)}$ und $1/\lambda_{N,y}^{(\Gamma)}$ gegen die Teilchenzahl für verschiedene Verhältnisse der Breitenparameter $\kappa^{(\Gamma)} = \frac{w_y^{(\Gamma)}}{w_x^{(\Gamma)}}$ gezeigt.

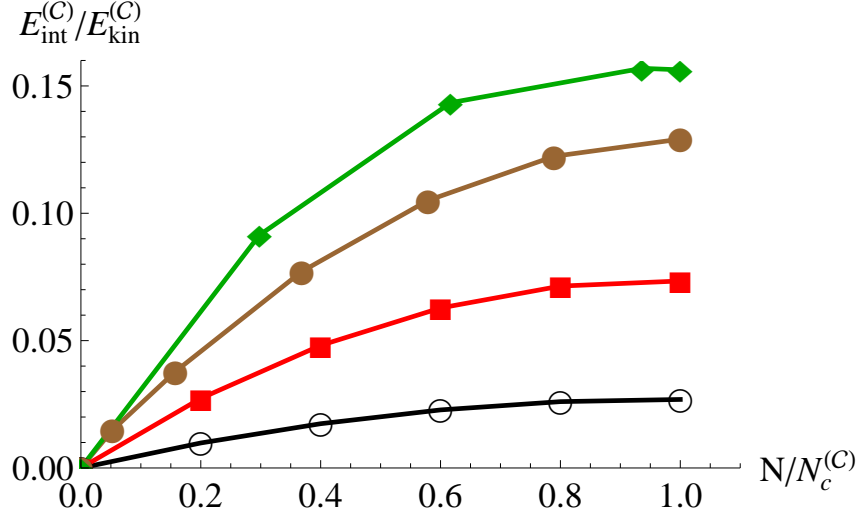


Abbildung 4.6: Das Verhältnis $E_{int}^{(C)}/E_{kin}^{(C)}$ als Funktion der Teilchenzahl $N/N_c^{(C)}$ für den lokalisierten Hartree-Grundzustand im Wellenleiter \mathcal{C} . Die Kurven beziehen sich auf feste Breitenparameter $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = 2L$, aber verschiedene Höhenparameter: $w_z^{(C)} = L$ (schwarze Kurve), $w_z^{(C)} = 2L$ (rote Kurve), $w_z^{(C)} = 4L$ (braune Kurve), $w_z^{(C)} = 8L$ (grüne Kurve).

Die grüne Kurve zeigt den Fall gleicher Breiten $\kappa^{(\Gamma)} = 1$ mit $w_x^{(C)} = 2L$, $w_x^{(\mathcal{L})} = L$, $w_x^{(\mathcal{T})} = L$ für den Höhenparameter $w_z^{(\Gamma)} = 2L$. Die roten Kurven beziehen sich auf die Breitenverhältnisse $\kappa^{(C)} = 0.8$, $\kappa^{(\mathcal{L})} = 0.95$, $\kappa^{(\mathcal{T})} = 0.8$. Die Lokalisierungslängen in dem jeweils breiteren Arm fallen linear mit wachsender Teilchenzahl N ab und divergieren bei der kritischen Teilchenzahl $N_c^{(\Gamma)}$. Die Lokalisierungslängen in den schmalen Armen variieren deutlich schwächer mit der Teilchenzahl.

In Abb. 4.9 werden die Funktionen $\sqrt{\varepsilon_{xt}^{(\Gamma)} - \mu_N^{(\Gamma)}}$ als Funktion der Teilchenzahl für die Wellenleiter $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ mit den gleichen Breitenverhältnissen wie im Falle der inversen Lokalisierungslängen gezeigt. Auch hier ergibt sich eine lineare Abnahme, wobei für $N \rightarrow N_c^{(\Gamma)}$ das chemische Potential gegen die Anregungsschwelle läuft, $\mu_N^{(\Gamma)} \rightarrow \varepsilon_{xt}^{(\Gamma)}$. Das chemische Potential folgt dabei dem Skalierungsgesetz

$$\frac{\mu_{N=N_c}^{(\Gamma)} - \mu_N^{(\Gamma)}}{\mu_{N=N_c}^{(\Gamma)} - \mu_{N=1}^{(\Gamma)}} = \left(1 - \frac{N-1}{N_c^{(\Gamma)}-1}\right)^2 \quad (4.14)$$

Diese lineare Abnahme von $\sqrt{\mu_{N=N_c}^{(\Gamma)} - \mu_N^{(\Gamma)}}$ steht dabei im Gegensatz zum Skalierungsverhalten $\mu_N \propto N^{\frac{2}{5}}$ des chemischen Potentials in einer harmonischen Falle [30], welches mit kleinen Abweichungen auch in flachen gaußförmigen Fallenpotentialen gilt [42], wobei die harmonische bzw. gaußförmige Falle eine endliche Falltiefe V_1 besitzen sollen. Sie können daher maximal bis zu einer kritischen Teilchenzahl N_c besetzt werden, welche von den konkreten Fallenparametern abhängt. Ein solches gaußförmiges Fallenpotential

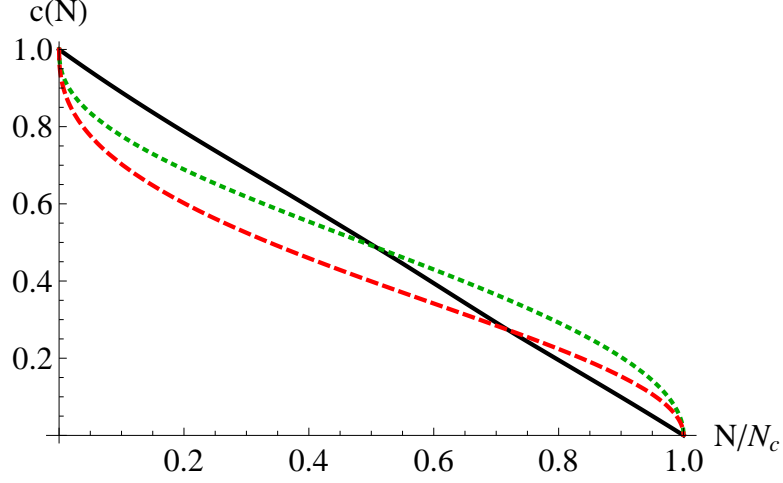


Abbildung 4.7: Die Funktion $c(N) = \sqrt{\frac{\mu_{N=N_c} - \mu_N}{\mu_{N=N_c} - \mu_{N=1}}}$ als Funktion der normierten Teilchenzahl N/N_c für: (i) ein gaußförmiges Fallenpotential [42] (rote Linie), (ii) ein harmonisches Fallenpotential endlicher Tiefe (grüne Linie), (iii) das unkonventionelle Fallenpotential in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} (schwarze Linie). Der Wert N_c bezeichnet die maximale Teilchenzahl in der jeweiligen Falle.

$$V(\mathbf{r}) = V_1 \left[1 - \exp \left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2} \right) \right] \quad (4.15)$$

führt für große Teilchenzahlen auf ein chemisches Potential der Form

$$\mu(N) = \mu_0(N) \left[1 - \frac{3}{14} \left(\frac{\mu_0(N)}{V_1} \right) \right], \quad (4.16)$$

wobei der Term $\mu_0(N)$ mit dem Fall eines parabolischen Potentials korrespondiert:

$$\mu_0(N) = V_1 \left(\frac{15Ng_s}{16\pi\sqrt{2}V_1\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \right)^{2/5} \quad (4.17)$$

Das Skalierungsverhalten in den unterschiedlichen Fällen ist in Abb. 4.7 dargestellt, wobei für das endliche parabolische und das gaußförmige Potential die in [42] angegebenen Parameter verwendet wurden: $a_s = 2.75 \text{ nm}$ (Streulänge von Natrium), $V_1 = 4\mu K$, $\sigma_x = \sigma_y = 3\mu m$, $\sigma_z = 38\sigma_x$.

In Abb. 4.10 werden die inversen Lokalisierungslängen $1/\lambda_{N,x}^{(\Gamma)}$ und $1/\lambda_{N,y}^{(\Gamma)}$ als Funktion der Breitenverhältnisse $\kappa^{(\Gamma)} = \frac{w_y^{(\Gamma)}}{w_x^{(\Gamma)}}$ für die Teilchenzahlen $N = 0.25N_c^{(\Gamma)}$ und $N = 0.5N_c^{(\Gamma)}$ gezeigt. Im Gegensatz zum Einteilchen-Fall existieren gebundene Zustände im Wellenleiter \mathcal{C} nur noch bis zu einer kritischen unteren Grenze, $\kappa_c^{(\mathcal{C})}(N) <$

$\kappa^{(\mathcal{L})}$, welche mit der Teilchenzahl N ansteigt. Auch im Wellenleiter \mathcal{L} steigt das kritische Breitenverhältnis mit der Teilchenzahl an, $\kappa_c^{(\mathcal{L})}(N) < \kappa^{(\mathcal{L})}$. Im Wellenleiter \mathcal{T} gibt es nun ebenfalls eine mit wachsender Teilchenzahl zunehmende kritische untere Grenze, während die obere Grenze mit wachsender Teilchenzahl kleiner wird, $\kappa_{c,1}^{(\mathcal{T})}(N) < \kappa^{(\mathcal{T})} < \kappa_{c,2}^{(\mathcal{T})}(N)$.

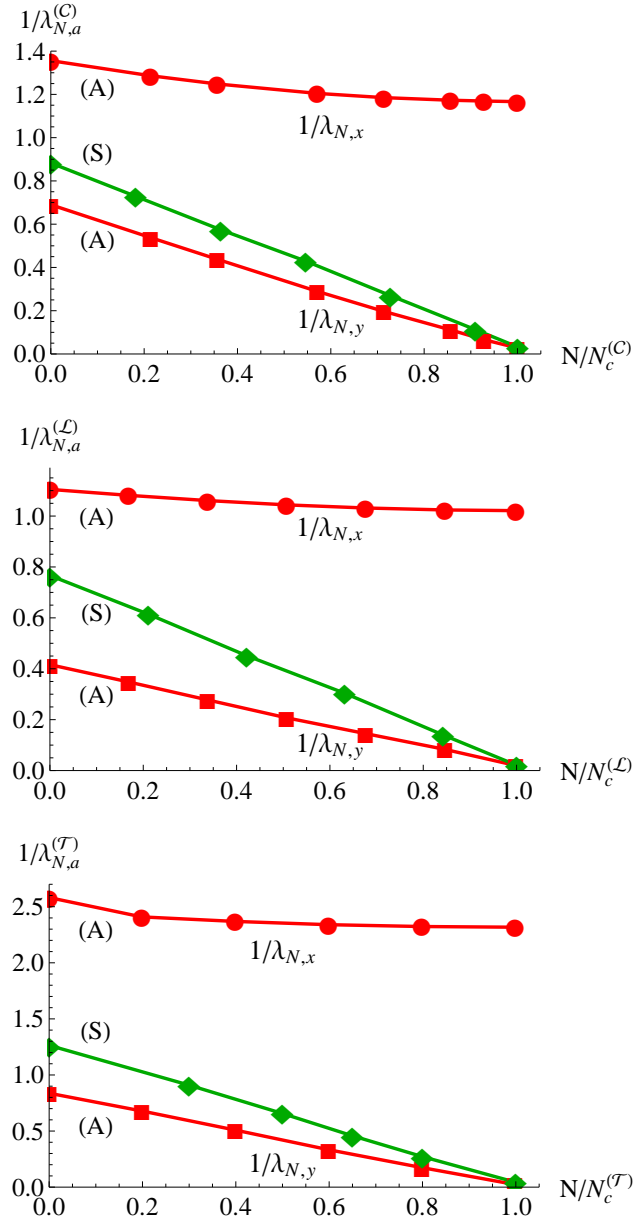


Abbildung 4.8: Die inversen Lokalisierungslängen $1/\lambda_{N,x}^{(\Gamma)}$ und $1/\lambda_{N,y}^{(\Gamma)}$ entlang der Achsen \mathbf{e}_x und \mathbf{e}_y als Funktion der Teilchenzahl $N/N_c^{(\Gamma)}$ des Hartree-Grundzustandes eines BEC, welches im Kreuzungs- bzw. Verzweigungsbereich der drei Grundtypen von Wellenleitern $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ lokalisiert ist. Alle Abb. beziehen sich auf den Höhenparameter $w_z^{(\Gamma)} = 2L$. Die grünen Kurven (S) beziehen sich auf den Fall symmetrischer Breitenparameter $w_y^{(\Gamma)} = w_x^{(\Gamma)}$, alle roten Kurven (A) beziehen sich auf einen asymmetrischen Fall $w_y^{(\Gamma)} < w_x^{(\Gamma)}$. 1.) Wellenleiter \mathcal{C} : $w_x^{(\mathcal{C})} = 2L$, $w_y^{(\mathcal{C})} = 0.8w_x^{(\mathcal{C})}$. 2.) Wellenleiter \mathcal{L} : $w_x^{(\mathcal{L})} = L$, $w_y^{(\mathcal{L})} = 0.95w_x^{(\mathcal{L})}$. 3.) Wellenleiter \mathcal{T} : $w_x^{(\mathcal{T})} = L$, $w_y^{(\mathcal{T})} = 0.8w_x^{(\mathcal{T})}$. In allen Abb. werden die Längen in Einheiten von L gemessen.

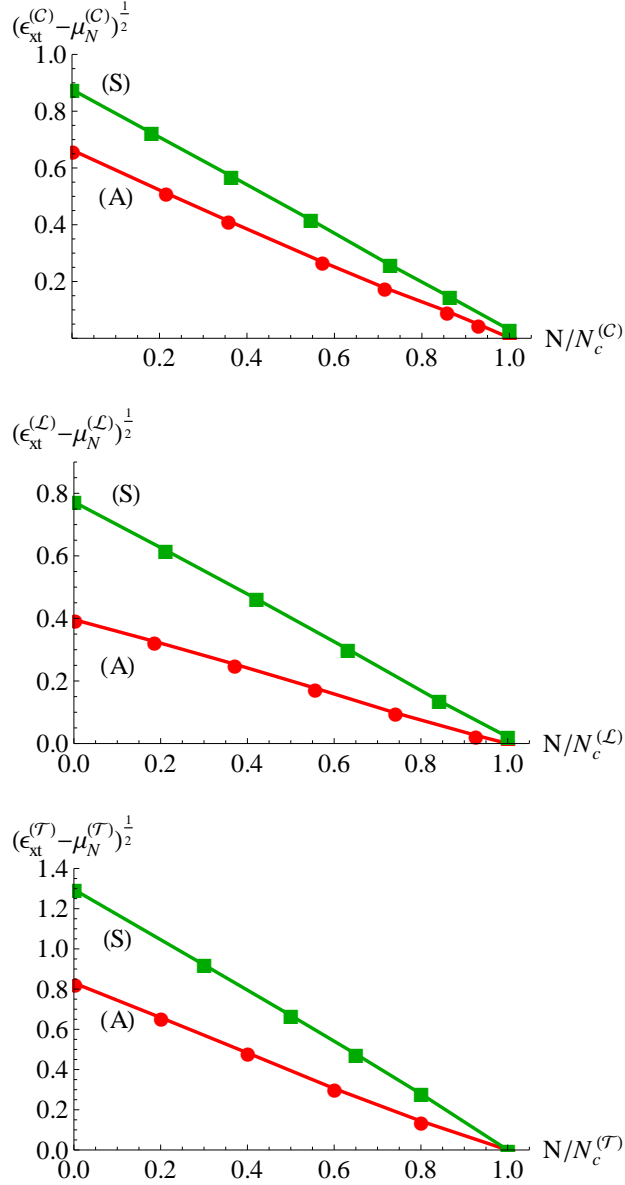


Abbildung 4.9: Das chemische Potential $\mu_N^{(\Gamma)}$ als Funktion der Teilchenzahl N des Hartree-Grundzustands eines BEC, welches im Kreuzungs- bzw. Verzweigungsbe- reich der drei Grundtypen von Wellenleitern $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ lokalisiert ist. Alle Abb. beziehen sich auf den Höhenparameter $w_z^{(\Gamma)} = 2L$. Die grünen Kurven (S) beziehen sich auf den Fall symmetrischer Breitenparameter $w_y^{(\Gamma)} = w_x^{(\Gamma)}$, alle roten Kurven (A) beziehen sich auf einen asymmetrischen Fall $w_y^{(\Gamma)} < w_x^{(\Gamma)}$. 1). Wellenleiter \mathcal{C} : $w_x^{(\mathcal{C})} = 2L$, $w_y^{(\mathcal{C})} = 0.8w_x^{(\mathcal{C})}$. 2) Wellenleiter \mathcal{L} : $w_x^{(\mathcal{L})} = L$, $w_y^{(\mathcal{L})} = 0.95w_x^{(\mathcal{L})}$. 3) Wellen- leiter \mathcal{T} : $w_x^{(\mathcal{T})} = L$, $w_y^{(\mathcal{T})} = 0.8w_x^{(\mathcal{T})}$. In allen Abb. wird die Energie in Einheiten von ε_L gemessen.

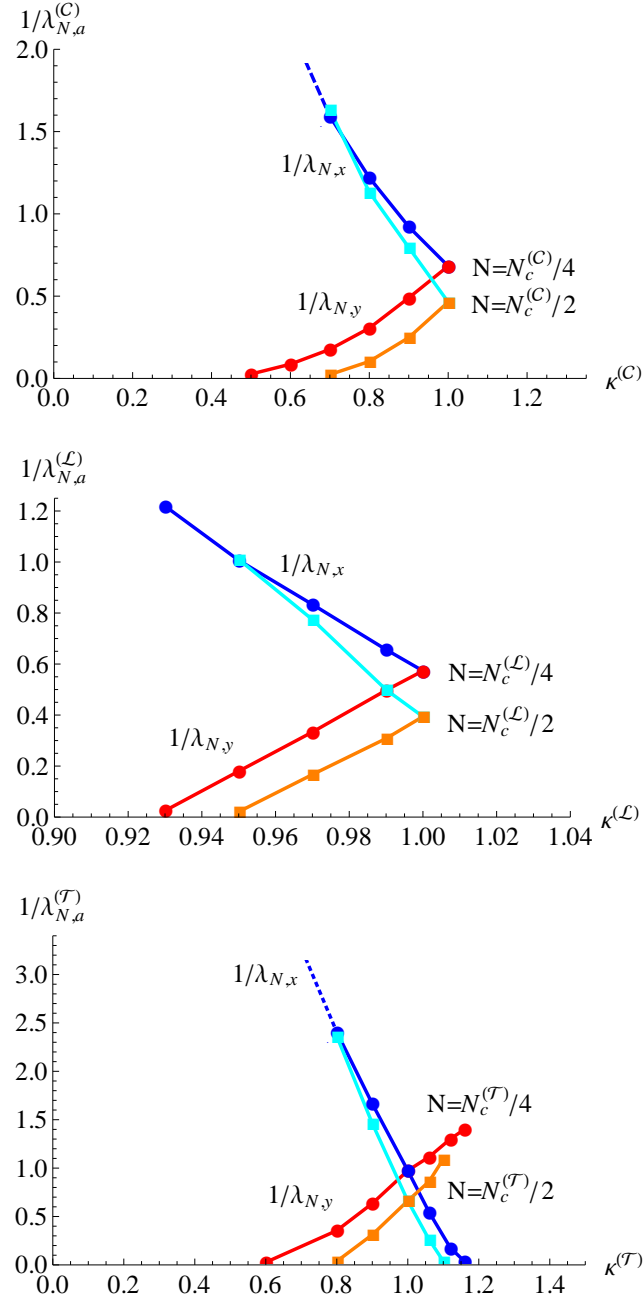


Abbildung 4.10: Inverse Lokalisierungslängen $1/\lambda_{N,y}^{(\Gamma)}$ (rote und orangefarbene Kurve) und $1/\lambda_{N,x}^{(\Gamma)}$ (blaue und hellblaue Kurve) des Hartree-Grundzustandes in den Quantenwellenleitern $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ für verschiedene Verhältnisse der Breitenparameter $\kappa^{(\Gamma)} = w_y^{(\Gamma)}/w_x^{(\Gamma)}$. Die gezeigten Kurven beziehen sich auf die Teilchenzahlen $N = 0.25N_c^{(\Gamma)}$ und $N = 0.5N_c^{(\Gamma)}$. Hier bezeichnet $N_c^{(\Gamma)}$ die kritische Teilchenzahl des jeweiligen Wellenleiters mit $\kappa^{(\Gamma)} = 1$. Die Höhenparameter sind in allen Fällen $w_z^{(\Gamma)} = 2L$, die Breitenparameter lauten $w_x^{(\mathcal{C})} = 2L$, $w_x^{(\mathcal{L})} = L$, $w_x^{(\mathcal{T})} = L$. Die Länge wird in Einheiten von L gemessen.

Kapitel 5

Erklärung der Skalierungsgesetze im Rahmen eines eindimensionalen Modells

In diesem Kapitel soll ein eindimensionales analytisches Modell für das Vielteilchen-Problem diskutiert werden [34]. Wie bereits in Abschnitt (3.1) erläutert, läßt sich der Abfall der kinetischen Energie beim Übergang von einem der Arme in den zentralen Bereich \mathcal{A}_0 in einem eindimensionalen Modell durch ein δ -Potential $-\frac{2}{\lambda}\delta(x)$ beschreiben, welches zu folgender Sprungbedingung bei $x = 0$ führt:

$$[\partial_x \phi(x)]_{x=0^-}^{x=0^+} = -\frac{2}{\lambda} \phi(0) \quad (5.1)$$

Analog läßt sich nun auch der Vielteilchen-Fall behandeln, d.h. das eindimensionale Schrödinger-Eigenwert-Problem, Gl. (3.4), wird um einen nichtlinearen Term erweitert:

$$\left[-\partial_x^2 + \varepsilon_{xt} - \frac{2}{\lambda_N} \delta(x) \right] \phi(x) + (N-1) \cdot g_s |\phi(x)|^2 \phi(x) = \mu_N \phi(x) \quad (5.2)$$

Die Konstante g_s beschreibt die Stärke des repulsiven Wechselwirkungspotentials zwischen zwei Teilchen, und μ_N ist das chemische Potential, welches die Erhaltung der Norm sicherstellt,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx |\phi(x)|^2 = 1 \quad (5.3)$$

Die Differentialgleichung läßt sich als Erhaltungssatz umformulieren:

$$x \neq 0 \quad (5.4)$$
$$-[\partial_x \phi(x)]^2 + \frac{(N-1) \cdot g_s}{2} [\phi(x)]^4 - (\mu_N - \varepsilon_{xt}) [\phi(x)]^2 = 0$$

Um diese Gleichung zu lösen, läßt sich folgender Ansatz aufstellen, der von der Amplitude A_N , der Lokalisierungslänge λ_N und dem Shift-Parameter s_N (so daß die

Amplitude der Wellenfunktion bei $x = 0$ endlich bleibt) abhängt:

$$\begin{aligned}\phi(x) &= \frac{A_N}{\sinh\left(\frac{|x|+s_N}{\lambda_N}\right)} \\ s_N &> 0 \\ \lambda_N &> 0\end{aligned}\tag{5.5}$$

Eingesetzt in Gl. (5.4) führt dieser Ansatz, auf

$$-(\mu_N - \varepsilon_{xt}) = \frac{(N-1) \cdot g_s}{2} A_N^2 = \frac{1}{\lambda_N^2}\tag{5.6}$$

Die Parameter s_N und A_N sind auch durch die Sprungbedingung, Gl. (5.1), und die Normierungsbedingung miteinander verknüpft:

$$\begin{aligned}\coth\left(\frac{s_N}{\lambda_N}\right) &= \frac{\lambda_N}{\lambda} \\ A_N &= \frac{1}{\sqrt{2\lambda_N\left(\frac{\lambda_N}{\lambda} - 1\right)}}\end{aligned}\tag{5.7}$$

Unter Verwendung von Gl. (5.6) läßt sich λ_N durch die Parameter λ und g_s ausdrücken:

$$\begin{aligned}\lambda_N &= \frac{\lambda}{1 - \frac{(N-1)g_s\lambda}{4}} > 0 \\ \exp\left(-\frac{s_N}{\lambda_N}\right) &= \sqrt{\frac{\frac{\lambda_N}{\lambda} - 1}{\frac{\lambda_N}{\lambda} + 1}}\end{aligned}\tag{5.8}$$

Für $N \rightarrow 1$ gilt $\lambda_N \rightarrow \lambda + 0$. In diesem Grenzfall weisen die Amplitude A_N und das Parameterverhältnis $\frac{s_N}{\lambda_N}$ beide eine Singularität auf. Für $\frac{s_N}{\lambda_N} \gg 1$ und $|x| \neq 0$ läßt sich zeigen:

$$\begin{aligned}\lim_{N \rightarrow 1} \frac{A_N}{\sinh\left(\frac{|x|+s_N}{\lambda_N}\right)} &= \lim_{N \rightarrow 1} \left[A_N \frac{2 \exp\left(-\frac{s_N}{\lambda_N}\right) \exp\left(-\frac{|x|}{\lambda_N}\right)}{1 - \exp\left(-2\frac{s_N}{\lambda_N}\right) \exp\left(-\frac{2|x|}{\lambda_N}\right)} \right] \\ &= \lim_{N \rightarrow 1} \sqrt{\frac{2}{\lambda_N\left(\frac{\lambda_N}{\lambda} - 1\right)}} \cdot \sqrt{\frac{\frac{\lambda_N}{\lambda} - 1}{\frac{\lambda_N}{\lambda} + 1}} \exp\left(-\frac{|x|}{\lambda}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \exp\left(-\frac{|x|}{\lambda}\right),\end{aligned}\tag{5.9}$$

so daß sich wieder das Ergebnis des Einteilchen-Falles ergibt.

Für eine wachsende Teilchenzahl N (pro Querschnitt $w_y \times w_z$) wächst die Lokalisierungslänge λ_N , bis sie bei einer kritischen Teilchenzahl N_c divergiert:

$$N_c = 1 + \frac{4}{\lambda g_s} \quad (5.10)$$

Diese kritische Teilchenzahl N_c hängt von der Lokalisierungslänge λ für ein Teilchen und der effektiven Wechselwirkungsstärke g_s für zwei Teilchen ab und legt die maximale Kapazität des lokalisierten BEC-Grundzustandes fest. Da der Übergang von dem lokalisierten Zustand zu einer delokalisierten Mode plötzlich ist, sollte sich diese maximale Teilchenzahl N_c präzise feststellen lassen.

Wird die Wechselwirkungskonstante g_s durch die kritische Teilchenzahl N_c ersetzt, so findet man folgendes Skalierungsgesetz für die Lokalisierungslänge λ_N :

$$\lambda_N = \frac{\lambda}{1 - \frac{N-1}{N_c-1}} \quad (5.11)$$

Im Bereich $1 \leq N < N_c$ erhält man dann für das chemische Potential μ_N :

$$\mu_N = \varepsilon_{xt} - \frac{1}{\lambda_N^2} \quad (5.12)$$

Bei der kritischen Teilchenzahl N_c erreicht das chemische Potential die Anregungsschwelle, $\lim_{N \rightarrow N_c} \mu_N = \varepsilon_{xt}$.

Die beiden Skalierungsgesetze Gl. (5.11) und Gl. (5.12) geben sehr gut das Verhalten der Lokalisierungslänge und des chemischen Potentials wieder, wie es in der numerischen Auswertung gefunden wurde, siehe Abb. 4.8 und 4.9.

Das chemische Potential μ_N läßt sich durch die Energie des Grundzustandes $E(N)$ ausdrücken als:

$$\mu_N = E(N) - E(N-1) \quad (5.13)$$

Damit erhält man :

$$N \geq 2 \quad (5.14)$$

$$E(N) = E(1) + \sum_{N'=2}^N \mu_{N'},$$

mit

$$E(1) = \mu_{N=1} = \varepsilon_{xt} - \frac{1}{\lambda^2} \quad (5.15)$$

Aus Gleichung (5.12) ergibt sich dann:

$$E(N) = N E(1) + (N_c - 1) \frac{1}{\lambda^2} \frac{N(N-1)}{(N_c-1)^2} \left(1 - \frac{\frac{N}{3} - \frac{1}{6}}{N_c-1} \right) \quad (5.16)$$

Die Werte aus diesem analytischen Ausdruck stimmen (unter Verwendung der numerisch berechneten Lokalisierungslänge im Einteilchen-Fall) gut mit den numerischen Werten der Gesamtenergie überein, siehe Abb. 5.1.

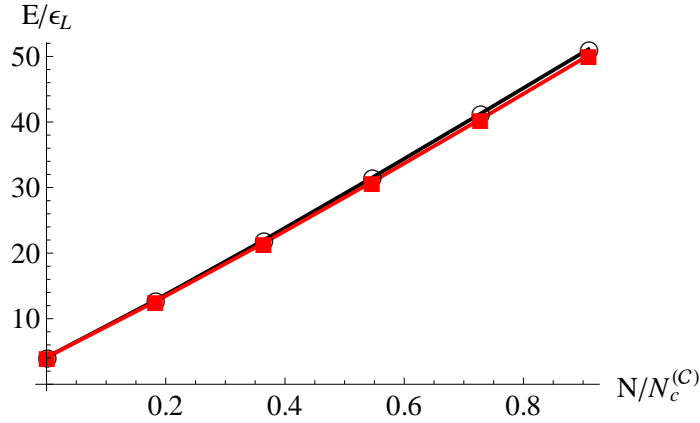


Abbildung 5.1: Numerisch berechnete Gesamtenergie (schwarz) und Gesamtenergie aus der analytischen Gleichung (rot) für eine kreuzförmige Domäne \mathcal{C} mit den Parameterwerten $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = w_z^{(C)} = 2L$

Diese Gesamtenergie sollte sich im Experiment als release energy, die Energie der Teilchen nach Abschalten des Fallenpotentials, beobachten lassen. Im Falle eines idealen wechselwirkungsfreien Bosegas gilt $N_c \rightarrow \infty$, so daß erwartungsgemäß gilt $E^{(0)}(N) = N E(1)$.

Im Rahmen des eindimensionalen Modells kann auch das Verhältnis von kinetischer und Wechselwirkungsenergie betrachtet werden. Allgemein gilt:

$$E_{kin}(N) + E_{int}(N) = E(N) \quad (5.17)$$

$$E_{kin}(N) + 2E_{int}(N) = N\mu_N \quad (5.18)$$

Daraus ergibt sich für große $N \gg 1$:

$$\lim_{N \rightarrow N_c} \frac{E_{int}(N)}{E_{kin}(N)} = \frac{1}{1 + 3E(1)\lambda^2} \quad (5.19)$$

Setzt man die numerischen Werte für $E(1)$ und λ aus der symmetrischen Kreuzgeometrie \mathcal{C} für $w_z^{(C)} \gg L$ ein, so ergibt sich $\lim_{N \rightarrow N_c} \frac{E_{int}(N)}{E_{kin}(N)} = \frac{1}{1 + 3E(1)\lambda^2} \approx 0.15$, in guter Übereinstimmung mit den numerisch erhaltenen Werten, Abb. 4.6. Es zeigt sich also auch in dem eindimensionalen analytischen Modell, daß die kinetische Energie über die Wechselwirkungsenergie dominiert und die Thomas-Fermi-Näherung nicht angewendet werden kann, im Gegensatz zu einem harmonischen Fallenpotential [30].

Kapitel 6

Binäre Mischung

In diesem Abschnitt soll ein binäres Kondensat, bestehend aus zwei Arten bosonischer Atome, betrachtet werden, wobei für die Massen $m_A > m_B$ gelten soll [34]. Die Streuparameter lauten [30]:

$$\begin{aligned} g_{AA} &= \frac{4\pi\hbar^2 a_A}{m_A} \\ g_{BB} &= \frac{4\pi\hbar^2 a_B}{m_B} \\ g_{AB} &= 2\pi\hbar^2 a_{AB} \left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B} \right), \end{aligned} \tag{6.1}$$

Es sei N_A die Zahl der bosonischen Atome der Sorte A und $N_B = N - N_A$ die Zahl der bosonischen Atome der Sorte B . Der Grundzustand eines binären BECs kann dann als Verallgemeinerung des Hartree-Grundzustandes, welcher das BEC einer einzelnen Atomsorte charakterisiert, dargestellt werden:

$$\begin{aligned} N &= N_A + N_B \\ \Psi_G(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) &= \psi_A(\mathbf{r}_1)\psi_A(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_A(\mathbf{r}_{N_A})\psi_B(\mathbf{r}_{N_A+1})\psi_B(\mathbf{r}_{N_A+2}) \cdots \psi_B(\mathbf{r}_{N_A+N_B}) \end{aligned} \tag{6.2}$$

Es müssen nun die optimalen Hartree-Orbitale $\psi_A(\mathbf{r})$ and $\psi_B(\mathbf{r})$ gefunden werden, welche den Erwartungswert des Hamilton-Operators des wechselwirkenden Bosegas minimieren, unter Berücksichtigung der Erhaltung der Teilchenzahlen N_A und N_B . Das heißt, es muß die Normerhaltung erfüllt sein:

$$\int_{\mathcal{C}} d^3r |\psi_A(\mathbf{r})|^2 = 1 = \int_{\mathcal{C}} d^3r |\psi_B(\mathbf{r})|^2 \tag{6.3}$$

Die Orbitale $\psi_A(\mathbf{r})$ and $\psi_B(\mathbf{r})$ müssen allerdings nicht orthogonal sein. Der Hamilton-Operator $H = H_{kin} + H_{int}$ des Systems lautet:

$$\begin{aligned}
H_{kin} &= \sum_{n=1}^{N_A} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_A}\right) \nabla_{\mathbf{r}}^2 + \sum_{n=N_A+1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_B}\right) \nabla_{\mathbf{r}}^2 \\
H_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,n'=1 \\ n \neq n'}}^{N_A} U^{(AA)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,n'=N_A+1 \\ n \neq n'}}^N U^{(BB)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) \\
&\quad + \sum_{n=1}^{N_A} \sum_{n'=N_A+1}^N U^{(AB)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})
\end{aligned} \tag{6.4}$$

mit den Kontaktwechselwirkungen:

$$\begin{aligned}
U^{(AA)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) &= g_{AA} \delta^{(3)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) \\
U^{(BB)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) &= g_{BB} \delta^{(3)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) \\
U^{(AB)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'}) &= g_{AB} \delta^{(3)}(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n'})
\end{aligned} \tag{6.5}$$

In Abhängigkeit von den noch unbekanntenen Orbitalen $\psi_A(\mathbf{r})$ und $\psi_B(\mathbf{r})$ und den zwei Lagrange-Parametern μ_A, μ_B zur Normerhaltung der Orbitale und dem Erwartungswert des Hamiltonoperators bezogen auf den Vielteilchen-Zustand, Gl. 6.2, lautet das Energie-Funktional:

$$\begin{aligned}
F[\psi_A^\dagger(\cdot), \psi_A(\cdot), \psi_B^\dagger(\cdot), \psi_B(\cdot); \mu_A, \mu_B] &= \langle H - \mu_A N_A - \mu_B N_B \rangle \\
&= \left\{ \begin{aligned} &N_A \int d^D r \psi_A^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_A} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \mu_A\right] \psi_A(\mathbf{r}) + N_B \int d^D r \psi_B^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m_B} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \mu_B\right] \psi_B(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{g_{AA}}{2} \int d^D r N_A(N_A - 1) |\psi_A(\mathbf{r})|^4 + \frac{g_{BB}}{2} \int d^D r N_B(N_B - 1) |\psi_B(\mathbf{r})|^4 \\ &+ g_{AB} \int d^D r N_A N_B |\psi_A(\mathbf{r})|^2 |\psi_B(\mathbf{r})|^2 \end{aligned} \right\}
\end{aligned} \tag{6.6}$$

Die beiden Bedingungen

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F}{\delta \psi_A^\dagger(\mathbf{r})} &= 0 \\
\frac{\delta F}{\delta \psi_B^\dagger(\mathbf{r})} &= 0
\end{aligned} \tag{6.7}$$

führen auf ein 2×2 -System gekoppelter Hartree-Gleichungen zur Bestimmung der optimalen Orbitale $\psi_A(\mathbf{r}), \psi_B(\mathbf{r})$

$$[H_{A,kin} + (N_A - 1) g_{AA} |\psi_A(\mathbf{r})|^2 + N_B g_{AB} |\psi_B(\mathbf{r})|^2] \psi_A(\mathbf{r}) = \mu_A \psi_A(\mathbf{r}) \tag{6.8}$$

$$[H_{B,kin} + N_A g_{AB} |\psi_A(\mathbf{r})|^2 + (N_B - 1) g_{BB} |\psi_B(\mathbf{r})|^2] \psi_B(\mathbf{r}) = \mu_B \psi_B(\mathbf{r})$$

Hierbei bezeichnen $H_{A,kin}$ und $H_{B,kin}$ die Hamilton-Operatoren für ein einzelnes A - bzw. B -Atom:

$$\begin{aligned}
H_{A,kin} &= -\frac{\hbar^2}{2m_A} \nabla_{\mathbf{r}}^2 \\
H_{B,kin} &= -\frac{\hbar^2}{2m_B} \nabla_{\mathbf{r}}^2 = \frac{m_A}{m_B} H_{A,kin}
\end{aligned} \tag{6.9}$$

Daraus ergibt sich, daß die leichtere Atomsorte die größere Anregungsschwelle in den Armen $\mathcal{A}_j \subset \mathcal{C}$, Abb. 1.1, hat:

$$\frac{\varepsilon_{xt,B}}{\varepsilon_{xt,A}} = \frac{m_A}{m_B} \quad (6.10)$$

Um die gekoppelten Gleichungen (6.8) zu lösen, wird analog zum Ein-Moden-Fall eine passende Diffusionsgleichung betrachtet:

$$-\frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\mathbf{r}, \tau) = [H_{kin} + U_\psi(\mathbf{r}, \tau)] \psi(\mathbf{r}, \tau), \quad (6.11)$$

mit

$$\psi(\mathbf{r}, \tau) = \begin{bmatrix} \psi_A(\mathbf{r}, \tau) \\ \psi_B(\mathbf{r}, \tau) \end{bmatrix} \quad (6.12)$$

und

$$H_{kin} = \begin{bmatrix} H_{A,kin} & 0 \\ 0 & \frac{m_A}{m_B} H_{A,kin} \end{bmatrix} \quad (6.13)$$

Wegen des exponentiellen Abfalls der Funktionen $\psi_A(\mathbf{r}, \tau)$ und $\psi_B(\mathbf{r}, \tau)$ für wachsende Diffusionszeiten τ muß im Wechselwirkungsterm wieder explizit die richtige Normierung beachtet werden:

$$U_\psi(\mathbf{r}, \tau) = \begin{bmatrix} \frac{(N_A-1)g_{AA}|\psi_A(\mathbf{r},\tau)|^2}{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi_A(\mathbf{r}',\tau)|^2}, & \frac{N_B g_{AB} \psi_A(\mathbf{r},\tau) \psi_B^\dagger(\mathbf{r},\tau)}{\sqrt{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi_A(\mathbf{r}',\tau)|^2} \sqrt{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi_B(\mathbf{r}',\tau)|^2}} \\ \frac{N_A g_{AB} \psi_B(\mathbf{r},\tau) \psi_A^\dagger(\mathbf{r},\tau)}{\sqrt{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi_A(\mathbf{r}',\tau)|^2} \sqrt{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi_B(\mathbf{r}',\tau)|^2}}, & \frac{(N_B-1)g_{BB}|\psi_B(\mathbf{r},\tau)|^2}{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi_B(\mathbf{r}',\tau)|^2} \end{bmatrix} \quad (6.14)$$

Für große Diffusionszeiten wird $U_\psi(\mathbf{r}, \tau)$ unabhängig von τ . Die gesuchten Hartree-Orbitale sind für große Diffusionszeiten gegeben durch:

$$\begin{aligned} \psi_A(\mathbf{r}) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\psi_A(\mathbf{r}, \tau)}{\sqrt{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi_A(\mathbf{r}', \tau)|^2}} \\ \psi_B(\mathbf{r}) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\psi_B(\mathbf{r}, \tau)}{\sqrt{\int_{\mathcal{C}} d^3r' |\psi_B(\mathbf{r}', \tau)|^2}} \end{aligned} \quad (6.15)$$

Bei der Berechnung der Orbitale kann wieder das Splitting-Schema, Gl. (4.7), verwendet werden. Aus den gekoppelten Gleichungen (6.8) ergeben sich wie im Einteilchen-Fall die Lagrange-Parameter μ_A und μ_B :

$$\begin{aligned} \mu_A &= \int_{\mathcal{C}} d^3r \left[\psi_A^\dagger(\mathbf{r}) H_{A,kin} \psi_A(\mathbf{r}) + (N_A - 1) g_{AA} |\psi_A(\mathbf{r})|^4 + N_B g_{AB} |\psi_A(\mathbf{r})|^2 |\psi_B(\mathbf{r})|^2 \right] \\ \mu_B &= \int_{\mathcal{C}} d^3r \left[\psi_B^\dagger(\mathbf{r}) H_{B,kin} \psi_B(\mathbf{r}) + (N_B - 1) g_{BB} |\psi_B(\mathbf{r})|^4 + N_A g_{AB} |\psi_A(\mathbf{r})|^2 |\psi_B(\mathbf{r})|^2 \right] \end{aligned} \quad (6.16)$$

Dann gilt:

$$N_A\mu_A + N_B\mu_B = E_{kin}(N_A, N_B) + 2E_{int}(N_A, N_B), \quad (6.17)$$

wobei die Wechselwirkungsenergie gegeben ist durch:

$$E_{int}(N_A, N_B) = \int_{\mathcal{C}} d^3r \left[\frac{N_A(N_A-1)}{2} g_{AA} |\psi_A(\mathbf{r})|^4 + \frac{N_B(N_B-1)}{2} g_{BB} |\psi_B(\mathbf{r})|^4 + N_A N_B g_{AB} |\psi_A(\mathbf{r})|^2 |\psi_B(\mathbf{r})|^2 \right] \quad (6.18)$$

und die kinetische Energie durch:

$$E_{kin}(N_A, N_B) = \int_{\mathcal{C}} d^3r \left[N_A \psi_A^\dagger(\mathbf{r}) H_{A,kin} \psi_A(\mathbf{r}) + N_B \psi_B^\dagger(\mathbf{r}) H_{B,kin} \psi_B(\mathbf{r}) \right] \quad (6.19)$$

Die Gesamtenergie ist die Summe dieser beiden Energien:

$$E(N_A, N_B) = E_{kin}(N_A, N_B) + E_{int}(N_A, N_B)$$

Ferner gilt die Identität:

$$\begin{aligned} E(N_A, N_B) - E(N_A - 1, N_B) &= \mu_A \\ E(N_A, N_B) - E(N_A, N_B - 1) &= \mu_B \end{aligned} \quad (6.20)$$

Da die Atome der Sorte A und B unterscheidbar sind, gibt es zwei verschiedene chemische Potentiale in der binären Mischung.

Der Operator der kinetischen Energie ist diagonal in dem Unterraum, welcher durch die Indizes der Atomsorten $\nu, \nu' \in \{A, B\}$ aufgespannt wird. Daraus ergibt sich:

$$\langle \mathbf{r} | e^{-\Delta\tau H_{kin}} | \mathbf{r}' \rangle_{\nu, \nu'} = \begin{bmatrix} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \Delta\tau) & 0 \\ 0 & K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \frac{m_A}{m_B} \Delta\tau) \end{bmatrix}_{\nu, \nu'} \quad (6.21)$$

Die Wärmeleitungskerne $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \Delta\tau)$ bzw. $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \frac{m_A}{m_B} \Delta\tau)$ für kurze Zeiten $\Delta\tau$ sollen dabei wie in Abschnitt (A) beschrieben auf die Funktionen $\psi_A(\mathbf{r}, \tau)$ und $\psi_B(\mathbf{r}, \tau)$ wirken. Die Lokalisierungslängen λ_A und λ_B sind dabei wie im Einteilchen-Fall als Abklinglängen des exponentiellen Abfalls der Orbitale $\psi_A(\mathbf{r})$ und $\psi_B(\mathbf{r})$ gegeben. Sie hängen sowohl von den Breiten- und Höhenparametern des Wellenleiters als auch von den Teilchenzahlen und der Stärke der Wechselwirkungsterme ab.

Untersucht wurde beispielhaft ein binäre Mischung bestehend aus ^{87}Rb - und ^{23}Na -Atomen (das heißt $\frac{m_A}{m_B} = \frac{87}{23} \simeq 3.78$), wobei das Verhältnis der Wechselwirkungsparameter gegeben ist durch $g_{AA} : g_{AB} : g_{BB} = 1 : 1.7 : 2$ [43]. Die Rechnungen wurden im symmetrischen Wellenleiter \mathcal{C} mit den Parametern $w_x^{(c)} = w_y^{(c)} = w_z^{(c)} = 2L$ durchgeführt. Als Einheit der Masse wurde m_B , als Einheit der Länge L und als Einheit der Energie $\varepsilon_L = \frac{\hbar^2}{2m_B L^2}$ gewählt, so daß sich die Anregungsschwellen der Atome der Sorten A und B ergeben als $\varepsilon_{xt,B} = \varepsilon_L \times \frac{\pi^2}{2}$ und $\varepsilon_{xt,A} = \frac{m_B}{m_A} \varepsilon_{xt,B}$. Die gesamte Teilchenzahl $N = N_A + N_B = (1 + \frac{N_A}{N_B}) \times N_B$ wurde für feste Verhältnisse der Teilchenzahlen $\frac{N_A}{N_B}$ erhöht. Sobald ein Paar von kritischen Teilchenzahlen

$(N_{c,A}^*, N_{c,B}^*)$ erreicht wird, delokalisieren die schwereren A -Atome, welche hier für jedes Verhältnis der Teilchenzahlen immer die größere Lokalisierungslänge aufweisen, siehe Abb. 6.1. Das chemische Potential μ_A erreicht im kritischen Bereich die Anregungsschwelle $\varepsilon_{xt,A}$ der A -Atome von oben, siehe Abb. 6.2. Es findet also ein plötzlicher entmischender Quantenübergang statt. Jenseits dieses Übergangs wird die Wechselwirkung zwischen den Atomen A und B vernachlässigbar. Die Lokalisierungslänge λ_B und das chemische Potential μ_B erfahren einen Sprung bei $N_B = N_{c,B}^*$, welcher vom Mischungsverhältnis $\frac{N_A}{N_B}$ abhängt. Beide Größen nehmen jenseits des Übergangs im Intervall $N_{c,B}^* < N_B < N_{c,B}$ Werte wie im Falle einer Atomsorte an, siehe Abb. 4.8 und 4.9. Hierbei bezeichnet $N_{c,B}$ die kritische Teilchenzahl für den Fall einer lokalisierten Grundzustands-Mode, die nur mit Atomen der Sorte B gefüllt ist. Wird die binäre Mischung (für harmonische Potentiale) im Rahmen der Thomas-Fermi-Approximation betrachtet, so wird der kritische Punkt des Entmischungsübergangs nicht durch das Verhältnis der Anregungsschwellen, sondern durch die Relationen der Wechselwirkungsparameter (und der Teilchenzahlen) bestimmt [30]. Wenn in diesem Falle eine kleine Zahl von A -Atomen zu einer Wolke aus B -Atomen hinzugefügt wird, wobei für die Anzahl der Atome $N_A \ll N_B$ gelten soll, so gehen je nach Stärke der Wechselwirkungsparameter die A -Atome entweder an die Oberfläche der Wolke aus B -Atomen oder tief in das Innere der Wolke [30]. Im Falle der kreuzförmigen Fallengeometrie \mathcal{C} liegt für alle untersuchten Teilchenzahlverhältnisse das Maximum beider Atomwolken im Zentrum, wobei die Profile nach außen hin exponentiell abfallen, siehe z.B. Abb. 6.3. Es liegt eine starke räumliche Überlappung der Wolken vor.

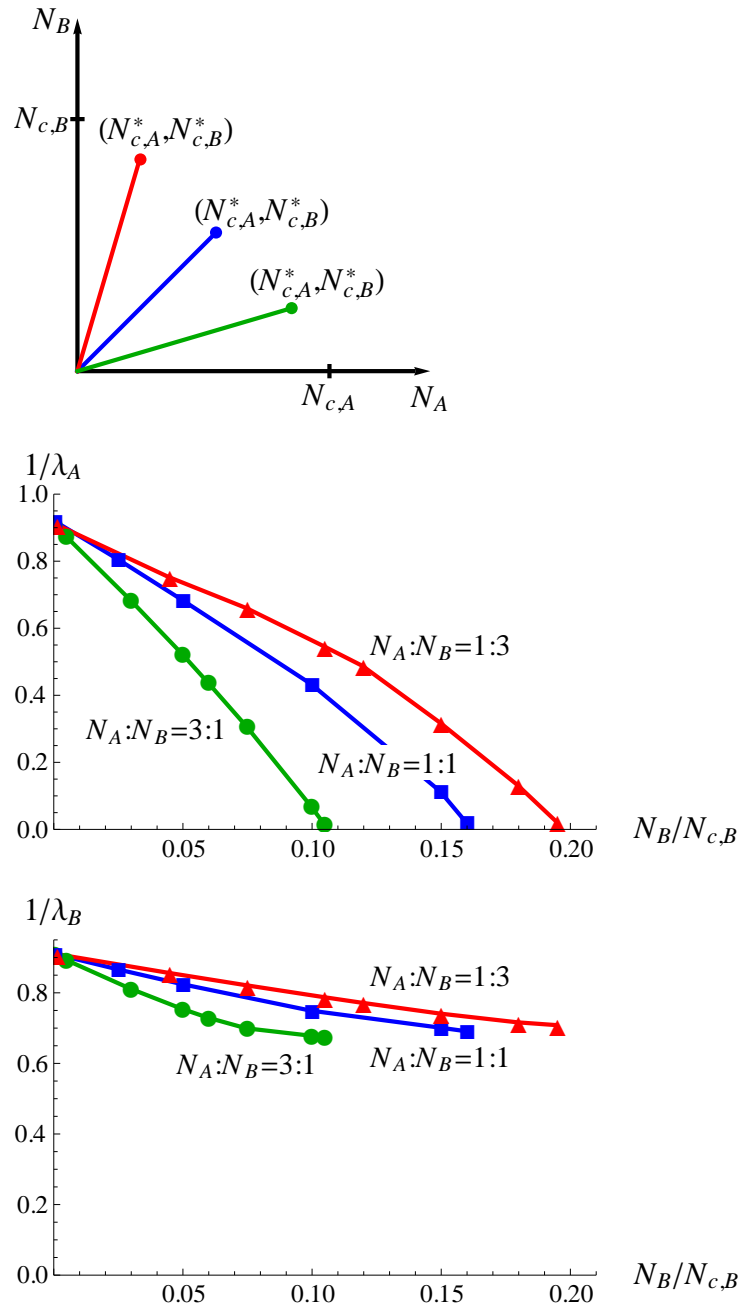


Abbildung 6.1: Quantenübergang der Entmischung des binären BEC bestehend aus ^{23}Na - und ^{87}Rb -Atomen in einem kreuzförmigen Wellenleiter \mathcal{C} mit gleichen Breitenparametern $w_x^{(\mathcal{C})} = w_y^{(\mathcal{C})} = w_z^{(\mathcal{C})} = 2L$. Das Verhältnis der Wechselwirkungsparameter lautet $g_{AA} : g_{AB} : g_{BB} = 1 : 1.7 : 2$, das Massenverhältnis ist $\frac{m_A}{m_B} = \frac{87}{23}$. Die Abb. zeigen die jeweiligen Lokalisierungslängen $1/\lambda_A$ und $1/\lambda_B$, wenn die Teilchenzahl $N = N_A + N_B = (\frac{N_A}{N_B} + 1)N_B$ bei festen Verhältnissen der Teilchenzahlen $N_A : N_B$ erhöht wird. Die Mischungsverhältnisse $N_A : N_B$ der Teilchenzahlen N_A und N_B lauten: $N_A : N_B = 1 : 3$ (rote Kurve), $N_A : N_B = 1 : 1$ (blaue Kurve), $N_A : N_B = 3 : 1$ (grüne Kurve). Die Längen werden in Einheiten von L gemessen.

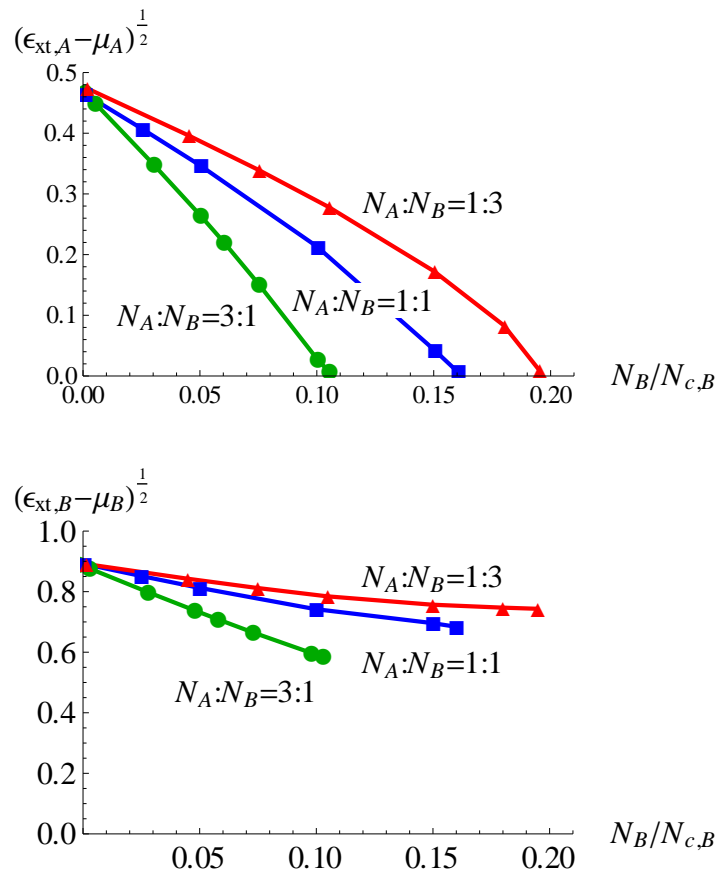


Abbildung 6.2: Die chemischen Potentiale μ_A und μ_B des binären BEC, wenn die Teilchenzahl $N = N_A + N_B = (\frac{N_A}{N_B} + 1)N_B$ bei festen Verhältnissen der Teilchenzahlen $N_A : N_B$ erhöht wird. Die Massen und Wechselwirkungsparameter sind die gleichen wie in Abb. 6.1 Es bezeichnen $\epsilon_{xt,B} = \varepsilon_L \times \frac{\pi^2}{2}$ und $\epsilon_{xt,A} = \frac{m_B}{m_A} \varepsilon_{xt,B}$ die jeweiligen Anregungsschwellen für Atome mit Massen m_A und m_B . Die Längen werden in Einheiten von L gemessen, die Energie in Einheiten von $\varepsilon_L = \frac{\hbar^2}{2m_B L^2}$.

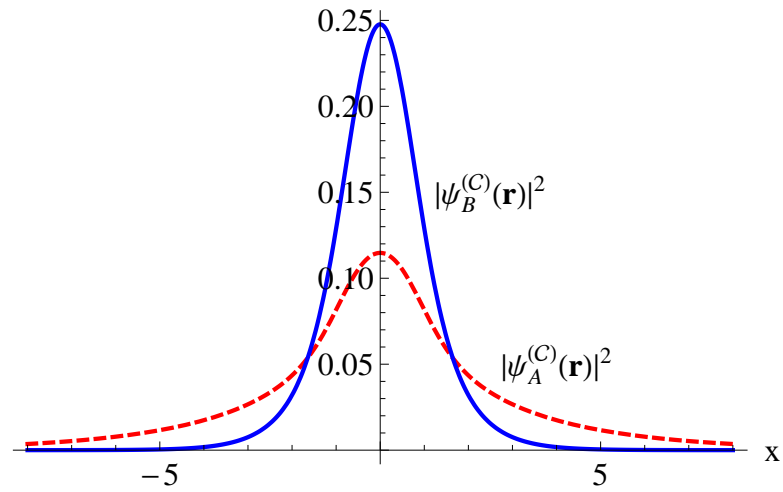


Abbildung 6.3: Die Profile $|\psi_A^{(c)}(\mathbf{r})|^2$ und $|\psi_B^{(c)}(\mathbf{r})|^2$ entlang der Achse \mathbf{e}_x des Grundzustandes der Gross-Pitaevskii-Orbitale in einer binären Mischung aus A - und B -Atomen bei einem Mischungsverhältnis $N_A : N_B = 1 : 10$ und einem Füllverhältnis $N_B/N_{c,B}^* = 0.9$. Die Massen und Wechselwirkungsparameter sind die gleichen wie in Abb. 6.1.

Kapitel 7

Zusammenfassung

In dieser Arbeit geht es um die Untersuchung lokalisierter Vielteilchenzustände kalter Bosegase in verschiedenen Prototypen von Quantenwellenleitern: Erstens einem Wellenleiter \mathcal{C} mit einer kreuzförmigen Geometrie, zweitens einem Wellenleiter \mathcal{L} mit zwei Armen in der Form eines L und drittens einem Wellenleiter \mathcal{T} mit drei Armen in der Form eines T, Abb. 1.1. In diesen Wellenleitern wurde die dreidimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung numerisch gelöst. In dem Lösungsverfahren wurden eine analytisch bestimmte Approximation des Wärmeleitungskerns für kleine Zeitschritte $\Delta\tau$ sowie ein Splitting-Verfahren zur Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Teilchen verwendet.

In den verschiedenen Wellenleitern treten dann in Abhängigkeit von den Verhältnissen $\kappa^{(\Gamma)}$ der Armbreiten lokalisierte Hartree-Zustände auf. Die Energie-Eigenwerte der lokalisierten Grundzustände liegen unterhalb der geometrieabhängigen Anregungsschwelle $\epsilon_{xt}^{(\Gamma)}$, $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$, oberhalb derer die Teilchen im Wellenleiter propagieren können. Die lokalisierten Moden können mit einer endlichen Teilchenzahl N besetzt werden. Die Atome eines kalten Bosegases können also im zentralen Bereich der Wellenleiter-Geometrien $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ gefangen werden. Dieser Mechanismus beruht auf Effekten der Interferenz und nicht auf Kräften, die durch ein äußeres Potential hervorgerufen werden. Bei repulsiver Wechselwirkung zwischen den Bosonen ist diese Teilchenzahl allerdings auf eine kritische Teilchenzahl N_c beschränkt, bei der die Moden delokalisieren.

Für den Einteilchen-Fall existieren in der kreuzförmigen Geometrie \mathcal{C} lokalisierte Zustände für alle Verhältnisse $\kappa^{(\mathcal{C})}$ der Armbreiten, Abb. 2.9. Im L-förmigen Wellenleiter \mathcal{L} hingegen treten die lokalisierten Zustände nur für kleine Abweichungen vom symmetrischen Fall $w_x^{(\mathcal{L})} = w_y^{(\mathcal{L})}$ auf, wobei das untere kritische Breitenverhältnis der Arme durch $\kappa_c^{(\mathcal{L})} \approx 0.89$ gegeben ist. In der T-förmigen Domäne \mathcal{T} gibt es keine untere Schranke, aber eine obere Schranke $\kappa_c^{(\mathcal{T})} \approx 1.26$, ab der keine lokalisierten Zustände mehr auftreten. Im Vielteilchen-Fall existieren auch in den Wellenleitern \mathcal{C} und \mathcal{T} untere Schranken, unterhalb derer sich keine lokalisierten Zustände bilden. Die Werte der unteren Schranken nehmen mit wachsender Teilchenzahl N zu,

während der Wert der oberen Schranke im Wellenleiter \mathcal{T} abnimmt, Abb. 4.10. Für kleine Werte des Höhenparameters $w_z^{(\Gamma)}$ liegt die Einteilchen-Energie $E_0^{(\Gamma)}$ im Bereich der Anregungsschwelle, $\lim_{w_z^{(\Gamma)} \rightarrow 0} E_0^{(\Gamma)} \rightarrow \varepsilon_{xt}^{(\Gamma)}$, Abb. 2.4. Für große Werte des Höhenparameters $w_z^{(\Gamma)}$, das heißt, wenn näherungsweise Translationsinvarianz in z -Richtung vorliegt (planarer Grenzfall), konnten für die Einteilchen-Energie die Ergebnisse früherer Arbeiten bestätigt werden.

In den Wellenleitern fällt die transversale kinetische Energie eines Teilchens entlang einer der Armachsen beim Übergang von den Armen in den zentralen Bereich durch die Veränderung der Randbedingungen stark ab. Daraus ergibt sich ein effektives Pseudopotential entlang der betrachteten Achse, approximativ in der Form eines Topfes, welches das Auftreten der lokalisierten Zustände erklären kann, Abb. 3.1. Im Falle des L-förmigen Wellenleiters \mathcal{L} ist durch die Dirichlet-Randbedingungen eine Wand des Potentialtopfes unendlich hoch, Abb. 3.2. Dies führt zu einer endlichen minimalen Bindungsstärke, ab der lokalisierte Zustände existieren können. Im Gegensatz dazu existiert im Falle der kreuzförmigen Geometrie \mathcal{C} für jede Bindungsstärke ein lokalisierter Zustand. Im T-förmigen Wellenleiter \mathcal{T} ergibt sich je nach Armachse ein effektives Pseudopotential wie im Wellenleiter \mathcal{C} oder wie im Wellenleiter \mathcal{L} . Durch die unterschiedlichen Bedingungen für die Bindungsstärke läßt sich besser verstehen, daß es im L-förmigen Wellenleiter \mathcal{L} eine untere Schranke für das Verhältnis der Armbreiten $\kappa^{(\mathcal{L})}$ gibt, während dies in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} und der T-förmigen Domäne \mathcal{T} nicht der Fall ist.

Das topfförmige effektive Pseudopotential kann im Rahmen eines eindimensionalen analytischen Modells durch ein δ -Potential approximiert werden, welches das asymptotische Abklingverhalten der Orbitale in den Armen des jeweiligen Wellenleiters korrekt wiedergibt. Aus diesem analytischen Modell lassen sich für die inverse Lokalisierungslänge $\frac{1}{\lambda_N}$ und die Funktion $\sqrt{\varepsilon_{xt} - \mu_N}$, wobei μ_N das chemische Potential bezeichnet, Skalierungsgesetze in Form einer linearen Abhängigkeit von der Teilchenzahl N finden, welche in guter Übereinstimmung mit den numerischen Resultaten stehen, Abb. (4.8, 4.9). Im Rahmen der analytischen Rechnung kann ferner explizit gezeigt werden, daß bei der kritischen Teilchenzahl N_c die Lokalisierungslänge λ_N divergiert und das chemische Potential μ_N den Wert der Anregungsschwelle ε_{xt} annimmt. Das Modell bestätigt auch das numerisch gefundene Ergebnis, daß die kinetische Energie im Vergleich zur Wechselwirkungsenergie für alle Teilchenzahlen N der dominierende Energiebeitrag ist, Abb. 4.6. Dies bedeutet, daß die Thomas-Fermi-Approximation zur Beschreibung der lokalisierten Zustände nicht verwendet werden kann.

Im Falle einer binären Mischung aus ^{87}Rb - und ^{23}Na -Atomen läßt sich beobachten, daß die Lokalisierungslänge λ_A der schwereren A -Atome (also der ^{87}Rb -Atome) rascher anwächst als die der leichteren B -Atome (also der ^{23}Na -Atome), wenn die Teilchenzahl bei festem Verhältnis der Teilchenzahlen $N_A : N_B$ erhöht wird, bis ein entmischender Übergang stattfindet, Abb. 6.1. Die schwereren Atome delokalisieren, während die leichteren Atome lokalisiert bleiben. Dieser Effekt kann möglicherweise

zur Trennung von Isotopen verwendet werden.

Die Randbedingung der harten Wände dient hier zur Vereinfachung der Rechnung. Werden die Dirichlet-Randbedingungen durch allgemeinere Robin-Randbedingungen oder das transversale Potential in den Armen durch ein steiles harmonisches Potential (optische Dipolkräfte) ersetzt, sollten qualitativ die gleichen Effekte auftreten, da diese auf den oben erwähnten Eigenschaften der transversalen kinetischen Energie entlang den Armachsen beruhen. Die Methoden und Hauptergebnisse dieser Arbeit finden sich auch in [44].

In einem nächsten Schritt könnte die Bedeutung von Interferenzeffekten bei dynamischen Prozessen in den Wellenleitern $\Gamma \in \{\mathcal{C}, \mathcal{L}, \mathcal{T}\}$ untersucht werden. So wäre die Analyse von Streuprozessen interessant, beispielsweise die Frage, was passiert, wenn ein von außen einlaufendes Atom auf eine Atomwolke im zentralen Bereich des Wellenleiters trifft und mit dieser wechselwirkt.

Anhang A

Der Wärmeleitungskern im Wellenleiter \mathcal{C}

Die lokalisierten Grundzustände in den Wellenleitern \mathcal{L} und \mathcal{T} lassen sich auf angeregte Zustände mit reduzierter Symmetrie im Wellenleiter \mathcal{C} zurückführen [34]. Für diesen Wellenleiter soll nun der Wärmeleitungskern bestimmt werden. Das Spektrum des Hamiltonoperators H_{kin} , welcher auf einem Träger identisch mit der kreuzförmigen Geometrie \mathcal{C} wirkt, setzt sich aus zwei Anteilen zusammen. Zunächst aus dem kontinuierlichen Spektrum, welches mit den propagierenden Moden mit nicht beschränkter L_2 -Norm korrespondiert, die die Dirichlet-Randbedingungen (1.10) am Rand $\partial\mathcal{C}$ erfüllen, sich aber über den gesamten Wellenleiter erstrecken. Außerdem aus dem diskreten Spektrum mit mindestens einer lokalisierten Eigenfunktion $\psi_{0,\gamma}^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r})$ mit endlicher Norm, Gl. (1.2). Ein Teilchen mit einer Energie $E_{0,\gamma}^{(\mathcal{C})}$ gleich dem Eigenwert einer lokalisierten Eigenmode $\psi_{0,\gamma}^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r})$ wird im zentralen Bereich der Kreuzgeometrie um \mathcal{A}_0 gefangen und kann in den Armen $\mathcal{A}_j, j \in \{1, \dots, 4\}$ der Domäne \mathcal{C} nicht propagieren. Der Grundzustand $\psi_0^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r})$ des Hamiltonoperators H_{kin} löst die Gleichung (1.11) und erfüllt die Dirichlet-Randbedingungen an den Wänden, Gl. (1.10), sowie die Normierungsbedingung, Gl. (1.2). Der zugehörige Eigenwert $E_0^{(\mathcal{C})}$ der Grundzustandsmode liegt unterhalb der Anregungsschwelle $\varepsilon_{xt}^{(\mathcal{C})}$ des Wellenleiters:

$$0 < E_0^{(\mathcal{C})} < \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{C})} \quad (\text{A.1})$$

Bemerkenswerterweise enthält das kontinuierliche Spektrum von H_{kin} diskrete Eigenwerte $E_{0,\gamma}^{(\mathcal{C})} > \varepsilon_{xt}^{(\mathcal{C})}$, welche mit lokalisierten Zuständen korrespondieren, die Knotenlinien entlang verschiedener Symmetrieebenen der Domäne \mathcal{C} aufweisen.

Zunächst soll das Lösungsverfahren vorgestellt werden, um die lokalisierten Zustände im Einteilchen-Fall zu bestimmen.

Um den Grundzustand $\psi_0^{(\mathcal{C})}(\mathbf{r})$ des Eigenwertproblems (1.11) auf der Domäne \mathcal{C} zu finden, kann folgende Diffusionsgleichung mit der Diffusionszeit τ für die Wellen-

funktion $\psi(\mathbf{r}; \tau)$ gelöst werden [19]:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\mathbf{r}; \tau) &= H_{kin} \psi(\mathbf{r}; \tau) \\ \lim_{\tau \rightarrow 0^+} \psi(\mathbf{r}; \tau) &= \psi(\mathbf{r}; 0) \equiv \psi^{(in)}(\mathbf{r}) \\ \psi(\mathbf{r}; \tau)|_{\mathbf{r} \in \partial \mathcal{C}} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Eine formale Lösung für das Anfangswertproblem (A.2) ist gegeben durch:

$$\psi(\mathbf{r}; \tau) = \int_{\mathcal{C}} d^3 r' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) \psi^{(in)}(\mathbf{r}'), \quad (\text{A.3})$$

wobei der Quantenpropagator $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)$ zur imaginären Zeit $t = -i\tau$, der *Wärmeleitungskern*

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) \equiv \langle \mathbf{r} | \exp(-\tau H_{kin}) | \mathbf{r}' \rangle, \quad (\text{A.4})$$

im Wellenleiter \mathcal{C} folgende Bewegungsgleichung erfüllt:

$$(\partial_\tau + H_{kin}) K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = 0 \quad (\text{A.5})$$

Zur Zeit $\tau = 0$ genügt der Wärmeleitungskern $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$ am Quellpunkt $\mathbf{r}' \in \mathcal{C}$ auch der Anfangswertbedingung:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (\text{A.6})$$

Der Wärmeleitungskern erfüllt an den harten Wänden $\partial \mathcal{C}$ die Dirichlet-Randbedingungen:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)|_{\mathbf{r} \in \partial \mathcal{C}} = 0 \quad (\text{A.7})$$

Bei der Konstruktion des Wärmeleitungskerns besteht ein Problem darin, daß die Geometrie \mathcal{C} nicht konvex ist und der Operator H_{kin} in ihr nicht separabel ist. In der Praxis haben alle Arme $\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_4$ des Wellenleiters eine endliche Ausdehnung \tilde{L} entlang der Armachsen. Diese Länge muß genügend groß sein, damit die Auswirkung der endlichen Ausdehnung auf die physikalischen Eigenschaften des Wellenleiters eine untergeordnete Rolle spielt [45]. Der Operator H_{kin} operiert auf dieser trun-kierten Domäne mit $\tilde{L} < \infty$ und hat (beim Auftreten lokalisierter Zustände) ein diskretes Energiespektrum $E_0^{(C)} < E_1^{(C)} < E_2^{(C)} \dots$. Der Wärmeleitungskern kann in der Basis der zugehörigen Eigenmoden $\psi_n^{(C)}(\mathbf{r})$ des Operators H_{kin} dargestellt werden:

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) = \langle \mathbf{r} | e^{-\tau H_{kin}} | \mathbf{r}' \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\tau E_n^{(C)}} \psi_n^{(C)}(\mathbf{r}) [\psi_n^{(C)}(\mathbf{r}')]^\dagger \quad (\text{A.8})$$

Für große Diffusionszeiten τ mit $\tau \cdot (E_1^{(C)} - E_0^{(C)}) \gg 1$ gilt dann die asymptotische Entwicklung:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}; \tau) &= \int_{\mathcal{C}} d^3 r' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) \psi^{(in)}(\mathbf{r}') \\ &= e^{-\tau E_0^{(C)}} \psi_0^{(C)}(\mathbf{r}) \int_{\mathcal{C}} d^3 r' [\psi_0^{(C)}(\mathbf{r}')]^\dagger \psi^{(in)}(\mathbf{r}') + O\left(e^{-\tau(E_1^{(C)} - E_0^{(C)})}\right) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Der Grundzustand $\psi_0^{(C)}(\mathbf{r})$ zum niedrigsten Energieeigenwert $E_0^{(C)}$ ergibt sich dann im Limes großer Diffusionszeiten als:

$$\psi_0^{(C)}(\mathbf{r}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\psi(\mathbf{r}; \tau)}{\sqrt{\int_{\mathcal{C}} d^3 r' |\psi(\mathbf{r}'; \tau)|^2}} \quad (\text{A.10})$$

Der zugehörige Energieeigenwert $E_0^{(C)}$ kann dann mit Hilfe des Propagators bestimmt werden durch:

$$\begin{aligned} E_0^{(C)} &= \int_{\mathcal{C}} d^3 r [\psi_0^{(C)}(\mathbf{r})]^\dagger H_{kin} \psi_0^{(C)}(\mathbf{r}) \\ &= \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \left[1 - \int_{\mathcal{C}} d^3 r [\psi_0^{(C)}(\mathbf{r})]^\dagger \int_{\mathcal{C}} d^3 r' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \Delta\tau) \psi_0^{(C)}(\mathbf{r}') \right] \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Eine wichtige Konsistenzeneigenschaft eines Propagators ist die Chapman-Kolmogorov-Identität (Halbgruppeneigenschaft):

$$\int_{\mathcal{C}} d^3 \mathbf{r}'' K(\mathbf{r}, \mathbf{r}''; \tau') K(\mathbf{r}'', \mathbf{r}'; \tau) = K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau + \tau') \quad (\text{A.12})$$

Ein Wärmeleitungskern $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau)$ zur Zeit τ kann dann aus früheren Parameterwerten $\Delta\tau = \tau/n$ rekonstruiert werden:

$$\begin{aligned} K(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) &= \langle \mathbf{r} | \exp[-\Delta\tau H_{kin}] \exp[-\Delta\tau H_{kin}] \cdots \exp[-\Delta\tau H_{kin}] | \mathbf{r}' \rangle \\ &= \int_{\mathcal{C}} d^3 \mathbf{r}_1 \cdots d^3 \mathbf{r}_{n-1} \langle \mathbf{r} | \exp[-\Delta\tau H_{kin}] | \mathbf{r}_1 \rangle \cdots \langle \mathbf{r}_{n-1} | \exp[-\Delta\tau H_{kin}] | \mathbf{r}' \rangle \\ &= \int_{\mathcal{C}} d^3 \mathbf{r}_1 \cdots d^3 \mathbf{r}_{n-1} \underbrace{K(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; \Delta\tau) \cdots K(\mathbf{r}_{n-1}, \mathbf{r}'; \Delta\tau)}_n \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Da die Domänen rechteckige Querschnitte aufweisen, können die Wärmeleitungskerne in den Unterdomänen \mathcal{A}_j , $j \in \{0, 1, \dots, 4\}$ als Produkte der eindimensionalen Wärmeleitungskerne, welche den Dirichlet- und Neumann-Randbedingungen genügen, geschrieben werden. Für verschiedene Bereiche ergibt sich dann mit $\mathbf{r} = (x, y, z)$ und $\mathbf{r}' = (x', y', z')$:

$$\begin{aligned} K_{\mathcal{A}_0}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \\ K_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= k_{[L_x, \infty]}^{(N)}(x, x'; \tau) k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \\ K_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(y, y'; \tau) k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \\ K_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= k_{[-\infty, -L_x]}^{(N)}(x, x'; \tau) k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \\ K_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) &= k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(y, y'; \tau) k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Die eindimensionalen Wärmeleitungskerne können aus der fundamentalen Lösung der Wärmeleitungsgleichung konstruiert werden. Mit $u, u' \in \mathbb{R}$ lautet diese:

$$\begin{aligned} k(u - u', \tau) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi\tau}} \exp\left[-\frac{(u-u')^2}{4\tau}\right] \\ (\partial_\tau - \partial_u^2) k(u - u'; \tau) &= 0 \\ \lim_{\tau \rightarrow 0^+} k(u - u'; \tau) &= \delta(u - u') \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Die Wärmeleitungskerne für die Dirichlet-Randbedingungen lauten:

$$\begin{aligned} k_{[L_a, \infty]}^{(D)}(u, u'; \tau) &= k(u - u'; \tau) - k(u + u' - 2L_a; \tau) \\ k_{[-\infty, -L_a]}^{(D)}(u, u'; \tau) &= k(u - u'; \tau) - k(u + u' + 2L_a; \tau) \\ k_{[-L_a, L_a]}^{(D)}(u, u'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} [k(u - u' + 4nL_a; \tau) - k(u + u' + (4n - 2)L_a; \tau)] \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Für die Neumann-Randbedingungen ergibt sich:

$$\begin{aligned} k_{[L_a, \infty]}^{(N)}(u, u'; \tau) &= k(u - u'; \tau) + k(u + u' - 2L_a; \tau) \\ k_{[-\infty, -L_a]}^{(N)}(u, u'; \tau) &= k(u - u'; \tau) + k(u + u' + 2L_a; \tau) \\ k_{[-L_a, L_a]}^{(N)}(u, u'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} [k(u - u' + 4nL_a, \tau) + k(u + u' + (4n - 2)L_a, \tau)] \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Für den Dirichlet-Wärmeleitungskern gilt die Periodizität:

$$k_{[-L_a, L_a]}^{(D)}(u + 4L_a, u'; \tau) = k_{[-L_a, L_a]}^{(D)}(u, u'; \tau) \quad (\text{A.18})$$

Prinzipiell läßt er sich daher auch in eine trigonometrische Reihe entwickeln:

$$k_{[-L_a, L_a]}^{(D)}(u, u'; \tau) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-n^2 \frac{\pi^2}{4L_a^2} \tau\right) \begin{bmatrix} \cos\left(n\pi \frac{u-u'}{2L_a}\right) \\ -\cos\left(n\pi \frac{u+u'-2L_a}{2L_a}\right) \end{bmatrix} \quad (\text{A.19})$$

Diese Reihe konvergiert schnell für große Werte von τ , die Darstellung (A.16) hingegen konvergiert schnell für kleine τ . Im Folgenden wird eine Entwicklung für kleine Zeitschritte betrachtet, so daß die Darstellung des Wärmeleitungskerns in der Form (A.16) verwendet wird.

Die Lösungsfunktion $\psi(\mathbf{r}; \tau)$ wird in folgendem Ansatz in Funktionen $\psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau)$ unterteilt, welche auf den jeweiligen Unterdomänen $\mathcal{A}_j, j \in \{0, 1, \dots, 4\}$ definiert sind:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau) &= [\psi(\mathbf{r}; \tau)]_{\mathbf{r} \in \mathcal{A}_j} \\ \psi_{\mathcal{A}_0}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_0}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \\ \psi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_1}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) \\ \psi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_2}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \\ \psi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_3}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) \\ \psi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_4}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Hierbei sollen die Funktionen $\psi_{\mathcal{A}_j}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau)$ die homogene Wärmeleitungsgleichung unter inhomogenen Anfangsbedingungen erfüllen:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} \psi_{\mathcal{A}_j}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) = \left[\psi^{(in)}(\mathbf{r}) \right]_{\mathbf{r} \in \mathcal{A}_j} \quad (\text{A.21})$$

An den Wänden der Unterdomänen \mathcal{A}_j erfüllen sie die homogenen Dirichlet-Randbedingungen:

$$\psi_{\mathcal{A}_j}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau)|_{\mathbf{r} \in \partial \mathcal{A}_j} = 0 \quad (\text{A.22})$$

Die Funktionen $\phi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau)$ sollen auf den Unterdomänen $\mathcal{A}_j, j \in \{0, 1, \dots, 4\}$ die Wärmeleitungsgleichung unter homogenen Anfangsbedingungen erfüllen:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} \phi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau) = 0 \quad (\text{A.23})$$

Sie genügen ebenfalls den Dirichlet-Randbedingungen an den Wänden $\mathcal{A}_j \subset \mathcal{C}$ der jeweiligen Unterdomänen. Zusätzlich sollen die Funktionen an den gemeinsamen Grenzlinien $\mathcal{A}_0 \cap \mathcal{A}_j$ der zentralen Domäne \mathcal{A}_0 mit den benachbarten Armen \mathcal{A}_j beim Übergang aus der Unterdomäne \mathcal{A}_j in die Unterdomäne \mathcal{A}_0 inhomogene Neumann-Randbedingungen erfüllen:

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow L_x + 0^+} \partial_x \phi_{\mathcal{A}_1}(x, y, z; \tau) &= f_{\mathcal{A}_1}(y, z; \tau) = -\lim_{x \rightarrow L_x - 0^+} \partial_x \phi_{\mathcal{A}_1}(x, y, z; \tau) \\ \lim_{y \rightarrow L_y + 0^+} \partial_y \phi_{\mathcal{A}_2}(x, y, z; \tau) &= f_{\mathcal{A}_2}(x, z; \tau) = -\lim_{y \rightarrow L_y - 0^+} \partial_y \phi_{\mathcal{A}_2}(x, y, z; \tau) \\ \lim_{x \rightarrow L_x - 0^+} \partial_x \phi_{\mathcal{A}_3}(x, y, z; \tau) &= f_{\mathcal{A}_3}(y, z; \tau) = -\lim_{x \rightarrow -L_x + 0^+} \partial_x \phi_{\mathcal{A}_3}(x, y, z; \tau) \\ \lim_{y \rightarrow -L_y - 0^+} \partial_y \phi_{\mathcal{A}_4}(x, y, z; \tau) &= f_{\mathcal{A}_4}(x, z; \tau) = -\lim_{y \rightarrow -L_y + 0^+} \partial_y \phi_{\mathcal{A}_4}(x, y, z; \tau) \end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

Die Randwertfunktionen $f_{\mathcal{A}_1}(u, z; \tau), \dots, f_{\mathcal{A}_4}(u, z; \tau)$ können selbstkonsistent durch die Bedingung bestimmt werden, daß die erste Ableitung der Funktion $\psi(\mathbf{r}, \tau)$ beim Übergang zwischen \mathcal{A}_0 und \mathcal{A}_j stetig sein muß.

Als Beispiel kann zunächst die folgende eindimensionale Wärmeleitungsgleichung betrachtet werden:

$$\left(\partial_\tau - \partial_u^2 \right) \phi(u; \tau) = -2f(\tau)\delta(u - L) \quad (\text{A.25})$$

mit der homogenen Anfangsbedingung:

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \phi(u; \tau) = 0 \quad (\text{A.26})$$

Integration um $u = L$ ergibt:

$$\int_{L-\epsilon}^{L+\epsilon} du \left(\partial_\tau - \partial_u^2 \right) \phi(u; \tau) = -2f(\tau) \quad (\text{A.27})$$

Für $\epsilon \rightarrow 0$ erhält man die folgende Sprungbedingung:

$$-\partial_u \phi(u; \tau)|_{u \rightarrow L-0^+}^{u \rightarrow L+0^+} = -2f(\tau) \quad (\text{A.28})$$

Für gerade Parität unter Spiegelung an $u = L$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \lim_{u \rightarrow L+0^+} \partial_u \phi(u; \tau) &= f(\tau) \\ \lim_{u \rightarrow L-0^+} \partial_u \phi(u; \tau) &= -f(\tau) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Die Lösung kann geschrieben werden als:

$$\phi(u, \tau) = - \int_0^\tau d\tau' k_{[L, \infty]}^{(N)}(u, L; \tau - \tau') f(\tau') \quad (\text{A.30})$$

mit $k_{[L, \infty]}^{(N)}(L + \epsilon, L; \tau - \tau') = k_{[L, \infty]}^{(N)}(L - \epsilon, L; \tau - \tau')$. Diese Funktion erfüllt die Wärmeleitungsgleichung und die notwendigen Anfangs- und Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow 0} \phi(u; \tau) &= 0 \\ \lim_{u \rightarrow L+0^+} \partial_u \phi(u; \tau) &= f(\tau) \\ (\partial_\tau - \partial_u^2) \phi(u; \tau) &= -2f(\tau) \delta(u - L) \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

In entsprechender Weise lassen sich die Funktionen $\phi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau)$ durch die noch unbekannten Randfunktionen $f_{\mathcal{A}_j}(u, z; \tau)$ durch Konvolution mit den jew. Neumann-Wärmeleitungskernen darstellen.

Für \mathcal{A}_1 mit $(x, y, z) \in \mathcal{A}_1$:

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_1}(x, y, z; \tau) &= - \int_0^\tau d\tau' k_{[L_x, \infty]}^{(N)}(x, L_x; \tau - \tau') \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') f_{\mathcal{A}_1}(y', z'; \tau') \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Für \mathcal{A}_2 mit $(x, y, z) \in \mathcal{A}_2$:

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_2}(x, y, z; \tau) &= - \int_0^\tau d\tau' k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(y, L_y; \tau - \tau') \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') f_{\mathcal{A}_2}(x', z'; \tau') \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Für \mathcal{A}_3 mit $(x, y, z) \in \mathcal{A}_3$:

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_3}(x, y, z; \tau) &= \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_x]}^{(N)}(x, -L_x; \tau - \tau') \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') f_{\mathcal{A}_3}(y', z'; \tau') \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

Für \mathcal{A}_4 mit $(x, y, z) \in \mathcal{A}_4$:

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_4}(x, y, z; \tau) &= \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(y, L_y; \tau - \tau') \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') f_{\mathcal{A}_4}(x', z'; \tau') \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Indem die Funktionen $\phi_{\mathcal{A}_j}(x, y, z; \tau)$ aus den Armen in die zentrale Unterdomäne \mathcal{A}_0 fortgesetzt werden, erhält man die gesuchte Lösung $\psi_{\mathcal{A}_0}(x, y, z; \tau)$ in \mathcal{A}_0 in Abhängigkeit von den Randwertfunktionen $f_{\mathcal{A}_1}(u, z; \tau), \dots, f_{\mathcal{A}_4}(u, z; \tau)$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_0}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) &= \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \times \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(\mathbf{r}') \\ \psi_{\mathcal{A}_0}(\mathbf{r}; \tau) &= \left\{ \begin{array}{c} \psi_{\mathcal{A}_0}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) \\ + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Für \mathcal{A}_1 ergibt sich mit $(x, y, z) \in \mathcal{A}_1$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_1}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) &= \int_{L_x}^{\infty} dx' k_{[L_x, \infty]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \times \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(\mathbf{r}') \\ \psi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) &= \left\{ \begin{array}{c} \psi_{\mathcal{A}_1}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) \\ + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

Für \mathcal{A}_2 ergibt sich mit $(x, y, z) \in \mathcal{A}_2$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_2}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) &= \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{L_y}^{\infty} dy' k_{[L_y, \infty]}^{(D)}(y, y'; \tau) \times \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(\mathbf{r}') \\ \psi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) &= \left\{ \begin{array}{c} \psi_{\mathcal{A}_2}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) \\ + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Für \mathcal{A}_3 ergibt sich mit $(x, y, z) \in \mathcal{A}_3$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_3}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) &= \int_{-\infty}^{-L_x} dx' k_{[-\infty, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \times \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(\mathbf{r}') \\ \psi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) &= \left\{ \begin{array}{c} \psi_{\mathcal{A}_3}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) \\ + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

Für \mathcal{A}_4 ergibt sich mit $(x, y, z) \in \mathcal{A}_4$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_4}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) &= \int_{-L_y}^{L_y} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-\infty}^{-L_y} dy' k_{[-\infty, -L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \times \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(\mathbf{r}') \\ \psi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) &= \left\{ \begin{array}{c} \psi_{\mathcal{A}_4}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) \\ + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Diese Funktionen erfüllen die Anfangsbedingung $\lim_{\tau \rightarrow 0^+} \psi_{\mathcal{A}_j}(x, y, z; \tau) = \psi_{in}(x, y, z)$. Sie müssen an den Grenzlinien zwischen den verschiedenen Unterdomänen stetig sein:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \psi_{\mathcal{A}_0}(\mathbf{r} - \eta \mathbf{n}_{\partial \mathcal{A}_{0,j}}; \tau)|_{\mathbf{r} \in \partial \mathcal{A}_{0,j}} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r} + \eta \mathbf{n}_{\partial \mathcal{A}_{0,j}}; \tau)|_{\mathbf{r} \in \partial \mathcal{A}_{0,j}} \quad (\text{A.41})$$

Die Bedingung der Stetigkeit der Ableitung führt auf ein System von vier gekoppelten Integralgleichungen, welche die Funktionen $f_{\mathcal{A}_j}(u, z; \tau)$ festlegen. So ergibt sich z.B. an der Grenzlinie $\mathcal{A}_0 \cap \mathcal{A}_1$:

$$\lim_{x \rightarrow L_x - 0^+} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\mathcal{A}_0}(\mathbf{r}; \tau) = \left\{ \begin{array}{l} \int_{-L_x}^{L_x} dx' \frac{\partial}{\partial x} k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\ \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(\mathbf{r}') \\ + \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial x} \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) \right]_{x=L_x-0^+}}_{=-f_{\mathcal{A}_1}(y, z; \tau)} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) \right]_{x=L_x-0^+} \\ + \left[\frac{\partial}{\partial x} \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) \right]_{x=L_x-0^+} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \right]_{x=L_x-0^+} \end{array} \right\} \quad (\text{A.42})$$

$$\lim_{x \rightarrow L_x + 0^+} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) = \left\{ \begin{array}{l} \int_{L_x}^{\infty} dx' \frac{\partial}{\partial x} k_{[L_x, \infty]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\ \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(\mathbf{r}') \\ + \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial x} \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) \right]_{x=L_x+0^+}}_{=f_{\mathcal{A}_1}(y, z; \tau)} + \left[\frac{\partial}{\partial x} \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) \right]_{x=L_x+0^+} \end{array} \right\} \quad (\text{A.43})$$

Allgemein läßt sich die Bedingung der Stetigkeit der Normalenableitungen $\mathbf{n}_{\partial \mathcal{A}_{0,j}} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}; \tau)$ an den inneren Grenzflächen $\partial \mathcal{A}_{0,j}$ angeben als:

$$\lim_{\eta \rightarrow 0^+} \mathbf{n}_{\partial \mathcal{A}_{0,j}} \cdot \nabla \psi_{\mathcal{A}_0}(\mathbf{r} - \eta \mathbf{n}_{\partial \mathcal{A}_{0,j}}; \tau)|_{\mathbf{r} \in \partial \mathcal{A}_{0,j}} = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \mathbf{n}_{\partial \mathcal{A}_{0,j}} \cdot \nabla \psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r} + \eta \mathbf{n}_{\partial \mathcal{A}_{0,j}}; \tau)|_{\mathbf{r} \in \partial \mathcal{A}_{0,j}} \quad (\text{A.44})$$

Daraus findet man:

$$f_{\mathcal{A}_j}(u, z, \tau) = \left\{ \begin{array}{l} F_{\mathcal{A}_j}(u, z, \tau) \\ + \sum_{l=1}^4 \int_{-U_l}^{U_l} du' \int_{-L_z}^{L_z} dz' \int_0^\tau d\tau' \mathcal{T}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(u, u', z, z'; \tau - \tau') f_{\mathcal{A}_l}(u', z'; \tau) \end{array} \right\} \quad (\text{A.45})$$

mit $U_1 = U_3 = L_y$ und $U_2 = U_4 = L_x$ und

$$F_{\mathcal{A}_1}(u, z; \tau) = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} \int_{-L_x}^{L_x} dv' \int_{-L_y}^{L_y} du' \left[\begin{array}{l} \partial_v k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau) \\ \times k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(u, u'; \tau) \end{array} \right]_{v=L_x-0^+} \\ \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(v', u', z') \\ - \int_{L_x}^{\infty} dv' \int_{-L_y}^{L_y} du' \left[\begin{array}{l} \partial_v k_{[L_x, \infty]}^{(D)}(v, v'; \tau) \\ \times k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(u, u'; \tau) \end{array} \right]_{v=L_x+0^+} \\ \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(v', u', z') \end{array} \right] \quad (\text{A.46})$$

$$F_{\mathcal{A}_2}(u, z; \tau) = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} \int_{-L_x}^{L_x} du' \int_{-L_y}^{L_y} dv' \left[\begin{array}{l} k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(u, u'; \tau) \\ \times \partial_v k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau) \end{array} \right]_{v=L_y-0^+} \\ \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(u', v', z') \\ - \int_{-L_x}^{L_x} du' \int_{L_y}^{\infty} dv' \left[\begin{array}{l} k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(u, u'; \tau) \\ \times \partial_v k_{[L_y, \infty]}^{(D)}(v, v'; \tau) \end{array} \right]_{v=L_y+0^+} \\ \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(u', v', z') \end{array} \right] \quad (\text{A.47})$$

$$F_{\mathcal{A}_3}(u, z; \tau) = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} \int_{-L_x}^{L_x} dv' \int_{-L_y}^{L_y} du' \left[\begin{array}{l} \partial_v k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau) \\ \times k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(u, u'; \tau) \end{array} \right]_{v=-L_x+0^+} \\ \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(v', u', z') \\ - \int_{-\infty}^{-L_x} dv' \int_{-L_y}^{L_y} du' \left[\begin{array}{l} \partial_v k_{[-\infty, -L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau) \\ \times k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(u, u'; \tau) \end{array} \right]_{v=-L_x-0^+} \\ \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(v', u', z') \end{array} \right] \quad (\text{A.48})$$

$$F_{\mathcal{A}_4}(u, z; \tau) = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} \int_{-L_x}^{L_x} du' \int_{-L_y}^{L_y} dv' \left[\begin{array}{l} k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(u, u'; \tau) \\ \times \partial_v k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau) \end{array} \right]_{v=-L_y+0^+} \\ \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(u', v', z') \\ - \int_{-L_x}^{L_x} du' \int_{-\infty}^{-L_y} dv' \left[\begin{array}{l} k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(u, u'; \tau) \\ \times \partial_v k_{[-\infty, -L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau) \end{array} \right]_{v=-L_y-0^+} \\ \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(u', v', z') \end{array} \right] \quad (\text{A.49})$$

und

$$\mathcal{T}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l} = \begin{bmatrix} 0 & \mathcal{T}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2} & 0 & \mathcal{T}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_4} \\ \mathcal{T}_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_1} & 0 & \mathcal{T}_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_3} & 0 \\ 0 & \mathcal{T}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_2} & 0 & \mathcal{T}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_4} \\ \mathcal{T}_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_1} & 0 & \mathcal{T}_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_3} & 0 \end{bmatrix}_{j,l} \quad (\text{A.50})$$

wobei

$$\begin{aligned}
 &= -\frac{1}{2}k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(u, L_y; \tau) \left[\partial_x k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau) \right]_{x=L_x} k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \\
 &= \mathcal{T}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2}(u, u', z, z'; \tau) \\
 &= \frac{1}{2}k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(u, -L_y; \tau) \left[\partial_x k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau) \right]_{x=L_x} k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \\
 &= \mathcal{T}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_4}(u, u', z, z'; \tau) \\
 &= -\frac{1}{2}k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(u, L_y; \tau) \left[\partial_x k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau) \right]_{x=-L_x} k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \\
 &= \mathcal{T}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_2}(u, u', z, z'; \tau) \\
 &= \frac{1}{2}k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(u, -L_y; \tau) \left[\partial_x k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau) \right]_{x=-L_x} k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \\
 &= \mathcal{T}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_4}(u, u', z, z'; \tau) \\
 &= \mathcal{T}_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_3}(u, u', z, z'; \tau)
 \end{aligned} \tag{A.51}$$

Dieses Gleichungssystem kann geschrieben werden als:

$$\begin{aligned}
 f &= F + \mathcal{T} \circ f \\
 [\mathcal{T} \circ f](\tau) &= \int_0^\tau d\tau' \mathcal{T}(\tau - \tau') f(\tau')
 \end{aligned} \tag{A.52}$$

Es gilt :

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} [\mathcal{T} \circ f](\tau) = 0 \tag{A.53}$$

für genügend kleine Parameter τ , so daß die Lösung der Integralgleichung als Neumann-Reihe geschrieben werden kann :

$$f = (1 - \mathcal{T})^{-1} \circ F = F + \mathcal{T} \circ F + \mathcal{T} \circ \mathcal{T} \circ F + \dots \tag{A.54}$$

Der Term nullter Ordnung beschreibt die Transmission von links nach rechts und von oben nach unten. Reflexionsprozesse, welche gemischte Beiträge aus benachbarten Armen \mathcal{A}_j enthalten, werden durch den Term erster Ordnung $K \circ F$ beschrieben. Die anderen Terme beschreiben Streueignisse höherer Ordnung. Die Funktionen $\phi_{\mathcal{A}_j}(x, y, z, \tau)$ verschwinden für $\tau \rightarrow 0$. Für kleine τ gilt also bis auf einen kleinen Fehler, welcher mit „small“ bezeichnet wird, die folgende Approximation:

$$f_{\mathcal{A}_j}(u, z; \tau) = F_{\mathcal{A}_j}(u, z; \tau) + O(\text{small}) \tag{A.55}$$

Dann ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) &= -\int_0^\tau d\tau' k_{[L_x, \infty]}^{(N)}(x, L_x; \tau - \tau') \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau - \tau') \\
 &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') F_{\mathcal{A}_1}(y', z'; \tau') + O(\text{small}^2)
 \end{aligned} \tag{A.56}$$

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) &= - \int_0^\tau d\tau' k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(y, L_y; \tau - \tau') \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') F_{\mathcal{A}_2}(x', z'; \tau') + O(\text{small}^2) \end{aligned} \quad (\text{A.57})$$

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) &= \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_x]}^{(N)}(x, -L_x; \tau - \tau') \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') F_{\mathcal{A}_3}(y', z', \tau') + O(\text{small}^2) \end{aligned} \quad (\text{A.58})$$

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) &= \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(y, -L_y; \tau - \tau') \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') F_{\mathcal{A}_4}(x', z', \tau') + O(\text{small}^2) \end{aligned} \quad (\text{A.59})$$

Aus den Ausdrücken für die $F_{\mathcal{A}_j}(y, z; \tau)$ findet man:

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) &= - \int_0^\tau d\tau' k_{[L_x, \infty]}^{(N)}(x, L_x; \tau - \tau') \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} &\int_{-L_x}^{L_x} dv' \int_{-L_y}^{L_y} du' \left[\frac{\partial}{\partial v} k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau) \right]_{v=L_x-0+} k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y', u'; \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(v', u', z'') \\ &- \int_{L_x}^\infty dv' \int_{-L_y}^{L_y} du' \left[\frac{\partial}{\partial v} k_{[L_x, \infty]}^{(D)}(v, v'; \tau) \right]_{v=L_x+0+} k_{[-L_y, L-y]}^{(D)}(y', u'; \tau) \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(v', u', z'') \\ &\quad + O(\text{small}^2) \end{aligned} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.60})$$

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}, \tau) &= - \int_0^\tau d\tau' k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(y, L_y; \tau - \tau') \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} &\int_{-L_x}^{L_x} du' \int_{-L_y}^{L_y} dv' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x', u'; \tau') \left[\frac{\partial}{\partial v} k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau) \right]_{v=L_y-0+} \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(u', v', z'') \\ &- \int_{-L_x}^{L_x} du' \int_{L_y}^\infty dv' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x', u'; \tau) \left[\frac{\partial}{\partial v} k_{[L_y, \infty]}^{(D)}(v, v'; \tau) \right]_{v=L_y+0+} \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(u', v', z'') \\ &\quad + O(\text{small}^2) \end{aligned} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.61})$$

$$\begin{aligned} \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}, \tau) &= \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_x]}^{(N)}(x, -L_x; \tau - \tau') \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') \\ &\quad \times \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} &\int_{-L_x}^{L_x} dv' \int_{-L_y}^{L_y} du' \left[\frac{\partial}{\partial v} k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau) \right]_{v=-L_x+0+} k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y', u'; \tau') \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(v', u', z'') \\ &- \int_{-\infty}^{-L_x} dv' \int_{-L_y}^{L_y} du' \left[\frac{\partial}{\partial v} k_{[-\infty, -L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau) \right]_{v=-L_x-0+} k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y', u'; \tau) \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(v', u', z'') \\ &\quad + O(\text{small}^2) \end{aligned} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.62})$$

$$\begin{aligned}
 \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}, \tau) = & \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(y, -L_y; \tau - \tau') \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau - \tau') \\
 & \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') \\
 & \times \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} & \int_{-L_x}^{L_x} du' \int_{-L_y}^{L_y} dv' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x', u'; \tau') \left[\frac{\partial}{\partial v} k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=-L_y+0^+} \\ & \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(u', v', z'') \\ & - \int_{-L_x}^{L_x} du' \int_{-\infty}^{-L_y} dv' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x', u'; \tau) \left[\frac{\partial}{\partial v} k_{[-\infty, -L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=-L_y-0^+} \\ & \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(u', v', z'') \\ & + O(\text{small}^2) \end{aligned} \right]
 \end{aligned} \tag{A.63}$$

Nun kann die Chapman-Kolmogorov-Identität verwendet werden, siehe Gl. A.12 :

$$\int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau - \tau') k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z', z''; \tau') = k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau) \tag{A.64}$$

$$\int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau - \tau') k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y', u'; \tau') = k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau)$$

Es ergibt sich dann:

$$\begin{aligned}
 \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) = & -\frac{1}{2} \left[\begin{aligned} & \int_{-L_x}^{L_x} dv' \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^\tau d\tau' k_{[L_x, \infty]}^{(N)}(x, L_x; \tau - \tau') \right. \\ & \quad \times k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau') \left. \right]_{v=L_x-0^+} \\ & \times \int_{-L_y}^{L_y} du' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau') \\ & \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(v', u', z'') \\ & - \int_{L_x}^{\infty} dv' \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^\tau d\tau' k_{[L_x, \infty]}^{(N)}(x, L_x; \tau - \tau') \right. \\ & \quad \times k_{[L_x, \infty]}^{(D)}(v, v'; \tau') \left. \right]_{v=L_x+0^+} \\ & \times \int_{-L_y}^{L_y} du' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau) \\ & \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(v', u', z'') \\ & + O(\text{small}^2) \end{aligned} \right]
 \end{aligned} \tag{A.65}$$

$$\begin{aligned}
 \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) = & -\frac{1}{2} \left[\begin{aligned} & \int_{-L_y}^{L_y} dv' \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^\tau d\tau' k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(y, L_y; \tau - \tau') \right. \\ & \quad \times k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau') \left. \right]_{v=L_y-0^+} \\ & \times \int_{-L_x}^{L_x} du' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau') \\ & \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(u', v', z'') \\ & - \int_{L_y}^{\infty} dv' \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^\tau d\tau' k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(y, L_y; \tau - \tau') \right. \\ & \quad \times k_{[L_y, \infty]}^{(D)}(v, v'; \tau') \left. \right]_{v=L_y+0^+} \\ & \times \int_{-L_x}^{L_x} du' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau) \\ & \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(v', u', z'') \\ & + O(\text{small}^2) \end{aligned} \right]
 \end{aligned} \tag{A.66}$$

$$\phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} \int_{-L_x}^{L_x} dv' \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_x]}^{(N)}(x, -L_x; \tau - \tau') \right. \\ \quad \times k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau') \\ \quad \times \int_{-L_y}^{L_y} du' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau') \\ \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(v', u', z'') \\ - \int_{-\infty}^{-L_x} dv' \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_x]}^{(N)}(x, -L_x; \tau - \tau') \right. \\ \quad \times k_{[-\infty, -L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau') \\ \quad \times \int_{-L_y}^{L_y} du' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau') \\ \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(v', u', z'') \\ \quad \left. + O(\text{small}^2) \right]_{v=-L_x-0^+} \left. \right]_{v=-L_x+0^+} \quad (\text{A.67})
 \end{array} \right.$$

$$\phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} \int_{-L_y}^{L_y} dv' \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(y, -L_y; \tau - \tau') \times \right. \\ \quad \times k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau') \\ \quad \times \int_{-L_x}^{L_x} du' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau') \\ \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(u', v', z'') \\ - \int_{-\infty}^{-L_y} dv' \frac{\partial}{\partial v} \left[\int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(y, -L_y; \tau - \tau') \right. \\ \quad \times k_{[-\infty, -L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau') \\ \quad \times \int_{-L_x}^{L_x} du' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau') \\ \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz'' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z''; \tau') \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(u', v', z'') \\ \quad \left. + O(\text{small}^2) \right]_{v=-L_y-0^+} \left. \right]_{v=-L_y+0^+} \quad (\text{A.68})
 \end{array} \right.$$

Um explizite Ausdrücke für die Funktionen $\phi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau)$ zu finden, müssen die folgenden

Integrale berechnet werden:

$$\begin{aligned}
 C_{A_1 A_0}(x, v'; \tau) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \int_0^\tau d\tau' k_{[L_x, \infty]}^{(N)}(x, L_x; \tau - \tau') k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=L_x-0^+} \\
 C_{A_1 A_1}(x, v'; \tau) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \int_0^\tau d\tau' k_{[L_x, \infty]}^{(N)}(x, L_x; \tau - \tau') k_{[L_x, \infty]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=L_x+0^+} \\
 C_{A_2 A_0}(y, v'; \tau) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \int_0^\tau d\tau' k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(y, L_y; \tau - \tau') k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=L_y-0^+} \\
 C_{A_2 A_2}(y, v'; \tau) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \int_0^\tau d\tau' k_{[L_y, \infty]}^{(N)}(y, L_y; \tau - \tau') k_{[L_y, \infty]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=L_y+0^+} \\
 C_{A_3 A_0}(x, v'; \tau) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_x]}^{(N)}(x, -L_x; \tau - \tau') k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=-L_x+0^+} \\
 C_{A_3 A_3}(x, v'; \tau) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_x]}^{(N)}(x, -L_x; \tau - \tau') k_{[-\infty, -L_x]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=-L_x-0^+} \\
 C_{A_4 A_0}(x, v'; \tau) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(y, -L_y; \tau - \tau') k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=-L_y+0^+} \\
 C_{A_4 A_4}(y, v'; \tau) &= \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial v} \int_0^\tau d\tau' k_{[-\infty, -L_y]}^{(N)}(y, -L_y; \tau - \tau') k_{[-\infty, -L_y]}^{(D)}(v, v'; \tau') \right]_{v=-L_y-0^+}
 \end{aligned} \tag{A.69}$$

Ferner gilt:

$$\begin{aligned}
 k_{[L_a, \infty]}^{(N)}(u, L_a; \tau) &= 2k(u - L_a; \tau) \\
 k_{[-\infty, -L_a]}^{(N)}(u, -L_a; \tau) &= 2k(u + L_a; \tau) \\
 k_{[L_a, \infty]}^{(D)}(u, u'; \tau) &= k(u - u'; \tau) - k(u + u' - 2L_a; \tau) \\
 k_{[-\infty, -L_a]}^{(D)}(u, u'; \tau) &= k(u - u'; \tau) - k(u + u' + 2L_a; \tau) \\
 k_{[-L_a, L_a]}^{(D)}(u, u'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} [k(u - u' + 4nL_a; \tau) - k(u + u' + (4n + 2)L_a; \tau)]
 \end{aligned} \tag{A.70}$$

Daraus ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 C_{A_1 A_0}(x, v'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^\tau d\tau' k(x - L_x; \tau - \tau') \\
 &\quad \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v' + 4nL_x; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + (4n - 2)L_x; \tau') \end{array} \right)_{v=L_x-0^+} \\
 C_{A_1 A_1}(x, v'; \tau) &= \int_0^\tau d\tau' k(x - L_x; \tau - \tau') \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v'; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' - 2L_x; \tau') \end{array} \right)_{v=L_x+0^+}
 \end{aligned} \tag{A.71}$$

$$\begin{aligned}
 C_{\mathcal{A}_2\mathcal{A}_0}(y, v'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\tau} d\tau' k(y - L_y; \tau - \tau') \\
 &\quad \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v' + 4nL_y; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + (4n - 2)L_y; \tau') \end{array} \right)_{v=L_y-0^+} \\
 C_{\mathcal{A}_2\mathcal{A}_2}(y, v'; \tau) &= \int_0^{\tau} d\tau' k(y - L_y; \tau - \tau') \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v'; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' - 2L_y; \tau') \end{array} \right)_{v=L_y+0^+}
 \end{aligned} \tag{A.72}$$

$$\begin{aligned}
 C_{\mathcal{A}_3\mathcal{A}_0}(x, v'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\tau} d\tau' k(x + L_x; \tau - \tau') \\
 &\quad \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v' + 4nL_x; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + (4n + 2)L_x; \tau') \end{array} \right)_{v=-L_x-0^+} \\
 C_{\mathcal{A}_3\mathcal{A}_3}(x, v'; \tau) &= \int_0^{\tau} d\tau' k(x + L_x; \tau - \tau') \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v'; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + 2L_x; \tau') \end{array} \right)_{v=-L_x-0^+}
 \end{aligned} \tag{A.73}$$

$$\begin{aligned}
 C_{\mathcal{A}_4\mathcal{A}_0}(y, v'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\tau} d\tau' k(y + L_y; \tau - \tau') \\
 &\quad \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v' + 4nL_y; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + (4n + 2)L_y; \tau') \end{array} \right)_{v=-L_y+0^+} \\
 C_{\mathcal{A}_4\mathcal{A}_4}(y, v'; \tau) &= \int_0^{\tau} d\tau' k(y + L_y; \tau - \tau') \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v'; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + 2L_y; \tau') \end{array} \right)_{v=-L_y-0^+}
 \end{aligned} \tag{A.74}$$

Nun wird folgende Funktion eingeführt:

$$\begin{aligned}
 \Lambda(a, b; \tau) &= \int_0^{\tau} d\tau' k(a; \tau - \tau') k(b; \tau') \\
 C(a, b; \tau) &= \frac{\partial}{\partial b} \Lambda(a, b; \tau)
 \end{aligned} \tag{A.75}$$

Um $\Lambda(a, b; \tau)$ explizit zu berechnen, wird das Konvolutions-Theorem für Laplace-Transformationen verwendet. Die Laplace-Transformierte $\hat{k}(u; s)$ des Wärmeleitungskerns im freien Raum ist gegeben durch:

$$\hat{k}(u; s) = \int_0^{\infty} d\tau \exp[-s\tau] k(u; \tau) = \frac{\exp[-\sqrt{s}|u|]}{2\sqrt{s}} \tag{A.76}$$

Es ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \hat{\Lambda}(a, b; s) &= \hat{k}(a; s) \hat{k}(b; s) \\
 &= \frac{1}{4s} \exp[-\sqrt{s}(|a| + |b|)]
 \end{aligned} \tag{A.77}$$

Die inverse Laplace-Transformierte $\Lambda(a, b; \tau)$ der Funktion $\hat{\Lambda}(a, b; s)$ kann durch die komplementäre Error-Funktion ausgedrückt werden:

$$\begin{aligned}\Lambda(a, b; \tau) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} ds \exp[s\tau] \hat{\Lambda}(a, b; s) \\ &= \frac{1}{4} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\frac{|a|+|b|}{2\sqrt{\tau}}} ds \exp[-s^2] \right)\end{aligned}\quad (\text{A.78})$$

Es folgt:

$$\begin{aligned}C(a, b; \tau) &= \operatorname{sgn}(b) \frac{\partial}{\partial |b|} \Lambda(a, b; \tau) \\ &= -\frac{\operatorname{sgn}(b)}{2} k(|a| + |b|; \tau)\end{aligned}\quad (\text{A.79})$$

Und:

$$\begin{aligned}C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_0}(x, v'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\tau} d\tau' k(x - L_x; \tau - \tau') \\ &\quad \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v' + 4nL_x; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + (4n - 2)L_x; \tau') \end{array} \right)_{v=L_x-0^+} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sgn}(v' - (4n + 1)L_x) k(|x - L_x| + |v' - (4n + 1)L_x|; \tau) \\ C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_1}(x, v'; \tau) &= \operatorname{sgn}(v' - L_x) k(|x - L_x| + |v' - L_x|; \tau)\end{aligned}\quad (\text{A.80})$$

$$\begin{aligned}C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_0}(y, v'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\tau} d\tau' k(y - L_y; \tau - \tau') \\ &\quad \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v' + 4nL_y; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + (4n - 2)L_y; \tau') \end{array} \right)_{v=L_y-0^+} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sgn}(v' + (4n - 1)L_y) k(|y - L_y| + |v' + (4n - 1)L_y|; \tau) \\ C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_2}(y, v'; \tau) &= \operatorname{sgn}(v' - L_y) k(|y - L_y| + |v' - L_y|; \tau)\end{aligned}\quad (\text{A.81})$$

$$\begin{aligned}C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_0}(x, v', \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\tau} d\tau' k(x + L_x; \tau - \tau') \\ &\quad \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v' + 4nL_x; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + (4n + 2)L_x; \tau') \end{array} \right)_{v=-L_x+0^+} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sgn}(v' + (4n + 1)L_x) k(|x + L_x| + |v' + (4n + 1)L_x|; \tau) \\ C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_3}(x, v'; \tau) &= \operatorname{sgn}(v' + L_x) k(|x + L_x| + |v' + L_x|; \tau)\end{aligned}\quad (\text{A.82})$$

$$\begin{aligned}
 C_{\mathcal{A}_4\mathcal{A}_0}(y, v'; \tau) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_0^{\tau} d\tau' k(y + L_y; \tau - \tau') \\
 &\quad \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial}{\partial v} k(v - v' + 4nL_y; \tau') \\ -\frac{\partial}{\partial v} k(v + v' + (4n + 2)L_y; \tau') \end{array} \right)_{v=-L_y+0^+} \\
 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{sgn}(v' + (4n + 1)L_y) k(|y + L_y| + |v' + (4n + 1)L_y|; \tau) \\
 C_{\mathcal{A}_4\mathcal{A}_4}(y, v'; \tau) &= \operatorname{sgn}(v' + L_y) k(|y + L_y| + |v' + L_y|; \tau)
 \end{aligned} \tag{A.83}$$

Ferner:

$$\phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) = - \left[\begin{array}{c} \int_{-L_x}^{L_x} dv' C_{\mathcal{A}_1\mathcal{A}_0}(x, v'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} du' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau) \\ \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(v', u', z') \\ - \int_{L_x}^{\infty} dv' C_{\mathcal{A}_1\mathcal{A}_1}(x, v'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} du' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau) \\ \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(v', u', z') \\ + O(\text{small}^2) \end{array} \right] \tag{A.84}$$

$$\phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) = - \left[\begin{array}{c} \int_{-L_y}^{L_y} dv' C_{\mathcal{A}_2\mathcal{A}_0}(y, v'; \tau) \int_{-L_x}^{L_x} du' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau) \\ \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(u', v', z') \\ - \int_{L_y}^{\infty} dv' C_{\mathcal{A}_2\mathcal{A}_2}(y, v'; \tau) \int_{-L_x}^{L_x} du' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, u'; \tau) \\ \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(u', v', z') \\ + O(\text{small}^2) \end{array} \right] \tag{A.85}$$

$$\phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) = - \left[\begin{array}{c} \int_{-L_x}^{L_x} dv' C_{\mathcal{A}_3\mathcal{A}_0}(x, v'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} du' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau) \\ \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(v', u', z') \\ - \int_{-\infty}^{-L_x} dv' C_{\mathcal{A}_3\mathcal{A}_3}(x, v'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} du' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, u'; \tau) \\ \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(v', u', z') \\ + O(\text{small}^2) \end{array} \right] \tag{A.86}$$

$$\phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) = - \left[\begin{array}{c} \int_{-L_y}^{L_y} dv' C_{\mathcal{A}_4\mathcal{A}_0}(y, v'; \tau) \int_{-L_x}^{L_x} du' k_{[-1, 1]}^{(D)}(x, u'; \tau) \\ \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(u', v', z') \\ - \int_{-\infty}^{-L_y} dv' C_{\mathcal{A}_4\mathcal{A}_4}(y, v'; \tau) \int_{-L_x}^{L_x} du' k_{[-1, 1]}^{(D)}(x, u'; \tau) \\ \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(u', v', z') \\ + O(\text{small}^2) \end{array} \right] \tag{A.87}$$

Dies ergibt für die Funktion $\psi_{\mathcal{A}_0}(\mathbf{r}, \tau)$:

$$\psi_{\mathcal{A}_0}(\mathbf{r}; \tau) = \psi_{\mathcal{A}_0}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau)$$

$$\begin{aligned}
 &= \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\
 &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\
 &- \left[\int_{-L_x}^{L_x} dx' C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_0}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \right. \\
 &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\
 &\quad \left. - \int_{-L_x}^{\infty} dx' C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_1}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \right. \\
 &\quad \times \left. \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(x', y', z') \right] \\
 &- \left[\int_{-L_y}^{L_y} dy' C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_0}(y, y'; \tau) \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \right. \\
 &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\
 &\quad \left. - \int_{-L_y}^{\infty} dy' C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_2}(y, y'; \tau) \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \right. \\
 &\quad \times \left. \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(x', y', z') \right] \\
 &+ \left[\int_{-L_x}^{L_x} dx' C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_0}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \right. \\
 &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\
 &\quad \left. - \int_{-\infty}^{-L_x} dx' C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_3}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \right. \\
 &\quad \times \left. \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(x', y', z') \right] \\
 &+ \left[\int_{-L_y}^{L_y} dy' C_{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_0}(y, y'; \tau) \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \right. \\
 &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\
 &\quad \left. - \int_{-\infty}^{-L_y} dy' C_{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_4}(y, y'; \tau) \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \right. \\
 &\quad \times \left. \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(x', y', z') \right]
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & \left[\begin{aligned}
 & \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\
 & + \int_{-L_x}^{L_x} dx' [C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_0}(x, x'; \tau) - C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_0}(x, x'; \tau)] \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\
 & + \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' [C_{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_0}(y, y'; \tau) - C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_0}(y, y'; \tau)] \\
 & \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\
 & + \int_{L_x}^{\infty} dx' C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_1}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\
 & \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(x', y', z') \\
 & + \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{L_y}^{\infty} dy' C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_2}(y, y'; \tau) \\
 & \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(x', y', z') \\
 & - \int_{-\infty}^{-L_x} dx' C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_3}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\
 & \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(x', y', z') \\
 & - \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-\infty}^{-L_y} dy' C_{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_4}(y, y'; \tau) \\
 & \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(x', y', z')
 \end{aligned} \right]
 \end{aligned}
 \tag{A.88}$$

Für die Funktion $\psi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau)$:

$$\begin{aligned}
 \psi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_1}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) \\
 &= \left\{ \begin{aligned}
 & \int_{-L_x}^{L_x} dx' \left[\begin{array}{l} C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_0}(x, x'; \tau) \\ -C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_0}(x, x'; \tau) \end{array} \right] \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\
 & \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\
 & + \int_{L_x}^{\infty} dx' \left[\begin{array}{l} k_{[L_x, \infty]}^{(D)}(x, x'; \tau) \\ +C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_1}(x, x'; \tau) \end{array} \right] \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\
 & \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(x', y', z') \\
 & - \int_{-\infty}^{-L_x} dx' C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_3}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\
 & \quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(x', y', z')
 \end{aligned} \right\}
 \end{aligned}
 \tag{A.89}$$

Für die Funktion $\psi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau)$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_2}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \\ &= \left\{ \begin{aligned} &\int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' \begin{bmatrix} C_{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_0}(y, y'; \tau) \\ -C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_0}(y, y'; \tau) \end{bmatrix} \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\ &+ \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{L_y}^{\infty} dy' \begin{bmatrix} k_{[L_y, \infty]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\ +C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_2}(y, y'; \tau) \end{bmatrix} \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(x', y', z') \\ &- \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-\infty}^{-L_y} dy' C_{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_4}(y, y'; \tau) \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(x', y', z') \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.90}) \end{aligned}$$

Für die Funktion $\psi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau)$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_3}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_1}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_3}(\mathbf{r}; \tau) \\ &= \left\{ \begin{aligned} &\int_{-L_x}^{L_x} dx' \begin{bmatrix} C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_0}(x, x'; \tau) \\ -C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_0}(x, x'; \tau) \end{bmatrix} \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\ &+ \int_{-\infty}^{-L_x} dx' \begin{bmatrix} k_{[-\infty, -L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \\ -C_{\mathcal{A}_3 \mathcal{A}_3}(x, x'; \tau) \end{bmatrix} \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_3}^{(in)}(x', y', z') \\ &+ \int_{L_x}^{\infty} dx' C_{\mathcal{A}_1 \mathcal{A}_1}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_1}^{(in)}(x', y', z') \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.91}) \end{aligned}$$

Für die Funktion $\psi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau)$:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) &= \psi_{\mathcal{A}_4}^{(D)}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_2}(\mathbf{r}; \tau) + \phi_{\mathcal{A}_4}(\mathbf{r}; \tau) \\ &= \left\{ \begin{aligned} &\int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-L_y}^{L_y} dy' \begin{bmatrix} C_{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_0}(y, y'; \tau) \\ -C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_0}(y, y'; \tau) \end{bmatrix} \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_0}^{(in)}(x', y', z') \\ &+ \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{-\infty}^{-L_y} dy' \begin{bmatrix} k_{[-\infty, -L_y]}^{(D)}(y, y'; \tau) \\ -C_{\mathcal{A}_4 \mathcal{A}_4}(y, y'; \tau) \end{bmatrix} \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_4}^{(in)}(x', y', z') \\ &+ \int_{-L_x}^{L_x} dx' k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \tau) \int_{L_y}^{\infty} dy' C_{\mathcal{A}_2 \mathcal{A}_2}(y, y'; \tau) \\ &\quad \times \int_{-L_z}^{L_z} dz' k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_2}^{(in)}(x', y', z') \end{aligned} \right\} \quad (\text{A.92}) \end{aligned}$$

Insgesamt können die Funktionen $\psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}, t)$ berechnet werden durch:

$$\psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau) = \sum_{l=0}^4 \int_{\mathcal{A}_l} d^3 \mathbf{r}' \mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau) \psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}'; 0) \quad (\text{A.93})$$

Die Elemente der Blockmatrix $\mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau)$ sind gegeben durch:

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \Delta\tau) = \mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) k_{[-L_z, L_z]}^{(D)}(z, z'; \Delta\tau) \quad (\text{A.94})$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_0, \mathcal{A}_0}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = \begin{bmatrix} k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau) \\ + [C_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_0}(x, x'; \Delta\tau) - C_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_0}(x, x'; \Delta\tau)] k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau) \\ + k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) [C_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_0}(y, y'; \Delta\tau) - C_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_0}(y, y'; \Delta\tau)] \end{bmatrix}$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_0, \mathcal{A}_1}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = C_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_1}(x, x'; \Delta\tau) k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_0, \mathcal{A}_2}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) C_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_2}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_0, \mathcal{A}_3}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = -C_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_3}(x, x'; \Delta\tau) k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_0, \mathcal{A}_4}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = -k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) C_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_4}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_0}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = [C_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_0}(x, x'; \Delta\tau) - C_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_0}(x, x'; \Delta\tau)] k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_1}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = [k_{[L_x, \infty]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) + C_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_1}(x, x'; \Delta\tau)] k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = 0 = \mathcal{K}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_4}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_3}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = -C_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_3}(x, x'; \Delta\tau) k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_0}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) [C_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_0}(y, y'; \Delta\tau) - C_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_0}(y, y'; \Delta\tau)]$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_1}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = 0 = \mathcal{K}_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_3}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_2}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) [k_{[L_y, \infty]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau) + C_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_2}(y, y'; \Delta\tau)]$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_4}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = -k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) C_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_4}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_0}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = [C_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_0}(x, x'; \Delta\tau) - C_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_0}(x, x'; \Delta\tau)] k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_1}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = C_{\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_1}(x, x'; \Delta\tau) k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_2}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = 0 = \mathcal{K}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_4}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_3}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = [k_{[-\infty, -L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) - C_{\mathcal{A}_3, \mathcal{A}_3}(x, x'; \Delta\tau)] k_{[-L_y, L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_0}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) [C_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_0}(y, y'; \Delta\tau) - C_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_0}(y, y'; \Delta\tau)]$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_1}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = 0 = \mathcal{K}_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_3}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_2}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) C_{\mathcal{A}_2, \mathcal{A}_2}(y, y'; \Delta\tau)$$

$$\mathcal{K}_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_4}^{(\perp)}(\mathbf{r}_\perp, \mathbf{r}'_\perp; \Delta\tau) = k_{[-L_x, L_x]}^{(D)}(x, x'; \Delta\tau) [k_{[-\infty, -L_y]}^{(D)}(y, y'; \Delta\tau) - C_{\mathcal{A}_4, \mathcal{A}_4}(y, y'; \Delta\tau)]$$

Physikalisch beschreibt die Asymptotik kurzer Zeiten des Propagators $K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \Delta\tau) = K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; i\Delta t)$ eine isotrope Quelle, von welcher Teilchen am Ort \mathbf{r}' zur Anfangszeit $t = 0$ der Quelle ausströmen und sich auf klassischen Trajektorien zum Punkt \mathbf{r} bewegen, wobei sie Reflexionen an den Wänden $\partial\mathcal{C}$ erfahren können. Die volle quantenmechanische Rechnung ergibt sich dann wieder aus dem Superpositionsprinzip, welches durch die Chapman-Kolmogorov-Identität (A.12) repräsentiert wird, siehe auch [46]. Zu den numerischen Aspekten bei der Berechnung des Wärmeleitungskerns siehe Anhang C.

Anhang B

Operator-Splitting

In diesem Anhang soll das in Abschnitt (4.1) verwendete Splitting-Verfahren näher erläutert werden [34]. Das Magnus-Theorem besagt, daß für zwei lineare Operatoren \hat{A} und \hat{B} folgende Identität gilt ([47], [48]):

$$\exp(-\tau\hat{A}) \circ \exp(-\tau\hat{B}) = \exp \left\{ \begin{array}{l} -\tau(\hat{A} + \hat{B}) + \frac{\tau^2}{2} [\hat{A}, \hat{B}]_- \\ -\frac{\tau^3}{12} [(\hat{A} - \hat{B}), [\hat{A}, \hat{B}]_-]_- + \dots \end{array} \right\} \quad (\text{B.1})$$

Dann kann gezeigt werden, daß für $\hat{U}(\tau) = \exp(-\frac{\tau}{2}\hat{A}) \circ \exp(-\tau\hat{B}) \circ \exp(-\frac{\tau}{2}\hat{A})$ gilt:

$$\hat{U}(\tau) = \exp \left\{ -\tau(\hat{B} + \hat{A}) + \frac{\tau^3}{24} [(\hat{A} + 2\hat{B}), [\hat{A}, \hat{B}]_-]_- + o(\tau^5) \right\} \quad (\text{B.2})$$

Alle geraden Potenzen im Exponenten heben sich auf, wie man aus der Identität $\hat{U}(\tau)\hat{U}(-\tau) = \hat{1}$ sehen kann. Es gilt weiter:

$$\exp(-\lambda_1\tau\hat{B}) \circ \exp\left(-\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) \circ \exp(-\lambda_2\tau\hat{B}) \circ \exp\left(-\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) \circ \exp(-\lambda_1\tau\hat{B}) \quad (\text{B.3})$$

$$= \exp \left\{ \begin{array}{l} -(2\lambda_1 + \lambda_2)\tau\hat{B} - \tau\hat{A} \\ -\frac{\tau^3}{24}(4\lambda_1 - \lambda_2) [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]_-]_- \\ -\frac{\tau^3}{24}((\lambda_1 + \lambda_2)4\lambda_1 - 2\lambda_2^2) [\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]_-]_- \\ + o(\tau^5) \end{array} \right\}$$

Es sei $\|\hat{B}\| \ll \|\hat{A}\|$. Damit die Gleichung (B.3) eine gute Näherung für den ursprünglichen Zeitentwicklungsoperator $\exp[-\tau(\hat{A} + \hat{B})]$ darstellt, muß gelten:

$$\begin{aligned} 2\lambda_1 + \lambda_2 &= 1 \\ 4\lambda_1 - \lambda_2 &= 0, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

mit der Lösung

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= \frac{1}{6} \\ \lambda_2 &= \frac{2}{3}\end{aligned}\tag{B.5}$$

Schließlich ergibt sich, vgl. [39]:

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{\tau}{6}\hat{B}\right) \circ \exp\left(-\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) \circ \exp\left(-\frac{2\tau}{3}\hat{B}\right) \circ \exp\left(-\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) \circ \exp\left(-\frac{\tau}{6}\hat{B}\right) \\ = \exp\left[-\tau(\hat{A} + \hat{B}) - \frac{\tau^3}{72}[\hat{B}, [\hat{B}, \hat{A}]_-]_- + o(\tau^5)\right]\end{aligned}\tag{B.6}$$

Die Genauigkeit der Näherung

$$\exp\left[-\tau(\hat{A} + \hat{B})\right] \simeq \left\{ \begin{array}{l} \exp\left(-\frac{\tau}{6}\hat{B}\right) \circ \exp\left(-\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) \circ \\ \circ \exp\left(-\frac{2\tau}{3}\hat{B}\right) \circ \exp\left(-\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) \circ \exp\left(-\frac{\tau}{6}\hat{B}\right) \end{array} \right\}\tag{B.7}$$

ist von der Ordnung $O(\tau^2\|\hat{B}\|^2 + \tau^4\|\hat{A}\|^4)$. Sie stellt die Basis für das zur Lösung der Gross-Pitaevskii-Gleichung verwendete Splitting-Verfahren, Gl. 4.7, dar.

Anhang C

Baryzentrische Interpolation

In diesem Anhang sollen die verwendeten numerischen Methoden näher erläutert werden [34]. In der Update-Regel für die Funktion $\psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}, \tau_{n+1})$ im Iterationsprozess müssen Integrale des Typs:

$$\begin{aligned}\psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}'; \tau_0) &= \psi_{\mathcal{A}_l}^{(in)}(\mathbf{r}') \\ \psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}; \tau_{n+1}) &= \sum_{l=0}^4 \int_{\mathcal{A}_l} d^3r' \mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \Delta\tau) \psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}'; \tau_n)\end{aligned}\quad (\text{C.1})$$

ausgewertet werden, wobei die Kernel-Funktion $\mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \Delta\tau)$ vom Iterationsindex n abhängt. Um diese Integrale auszuwerten, werden numerische Integrationen durchgeführt, das heißt Integrale über die Bereiche \mathcal{A}_l werden durch gewichtete Summen über die diskreten Gitterpunkte $\mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)} = (x_{j_x}, y_{j_y}, z_{j_z}) \in \mathcal{A}_l$ approximiert.

Zur Erläuterung wird zunächst die Interpolation einer Lipschitz-stetigen Funktion $f(x; \tau_n)$ in einer Dimension auf dem Intervall $x \in [-L, L]$ betrachtet. Auf einem äquidistanten Gitter $x_j = \frac{2j-m}{m}L$ mit $j \in \{0, 1, \dots, m\}$ ist ein Interpolationspolynom dieser Funktion mit einer Ordnung $p_m(x)$ vom Grade $m \gg 1$ in der Nähe der Randpunkte des Intervalls $[-L, L]$ schlecht konditioniert (Runge-Phänomen) [49]. Hier hilft ein nichtäquidistantes Gitter, welches in der Nähe der Randpunkte $\pm L$ eine hohe Dichte aufweist. Verwendet werden kann ein Tschebyschew-Gitter $x_j \in [-L, L]$:

$$\begin{aligned}j &\in \{0, 1, 2, \dots, m\} \\ x_j &= L \cos \left[\frac{\pi}{m} j \right]\end{aligned}\quad (\text{C.2})$$

Statt die Funktion $f(x; \tau_n)$ durch lineare Kombinationen von Tschebyschew-Polynomen zu approximieren, kann die baryzentrische Interpolation [50] von $f(x; \tau_n)$ auf einem Tschebyschew-Gitter verwendet werden. Das baryzentrische Tschebyschew-Interpolationspolynom $p_m(x; \tau_n)$ vom Grad m für eine Funktion $f(x)$ ist gegeben

durch:

$$\begin{aligned}
 x &\in [-L, L] \\
 p_m(x; \tau_n) &= \sum_{j=0}^m f(x_j; \tau_n) w_m(x; x_j) \\
 w_m(x; x_j) &= \frac{\frac{c_j}{x-x_j}}{\sum_{l=0}^m \frac{c_l}{x-x_l}} \\
 c_0 &= \frac{1}{2} \\
 c_j &= (-1)^j, \quad 1 \leq j \leq m-1 \\
 c_m &= \frac{(-1)^m}{2}
 \end{aligned} \tag{C.3}$$

Es gilt:

$$\begin{aligned}
 j, k &\in \{0, 1, 2, \dots, m\} \\
 \lim_{x \rightarrow x_k} w_m(x, x_j) &= \delta_{j,k} \\
 p_m(x_j; \tau_n) &= f(x_j; \tau_n)
 \end{aligned} \tag{C.4}$$

Die dreidimensionalen Integrale über die Domänen \mathcal{A}_l können berechnet werden, indem kartesische Produkte von Tschebyschew-Gittern verwendet werden. Beispielsweise sind hier für die kastenförmige Domäne $\mathcal{A}_0 = [-L, L] \times [-L, L] \times [-L_z, L_z]$ die Gitterpunkte gegeben durch:

$$\begin{aligned}
 j_a &\in \{0, \dots, m_a\} \\
 \mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)} &= (x_{j_x}, y_{j_y}, z_{j_z}) \in \mathcal{A}_0 \\
 x_{j_x} &= L \cos\left(\frac{\pi}{m_x} j_x\right) \\
 y_{j_y} &= L \cos\left(\frac{\pi}{m_y} j_y\right) \\
 z_{j_z} &= L_z \cos\left(\frac{\pi}{m_z} j_z\right)
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

In unseren Berechnungen der Orbitale $\psi_{0,\gamma}(\mathbf{r})$ ersetzen wir die vier unendlich ausgedehnten Arme \mathcal{A}_l durch Arme $\tilde{\mathcal{A}}_l$ endlicher Länge \tilde{L} . Dies ist möglich, falls \tilde{L} deutlich größer ist als die Lokalisierungslänge $\lambda_{N,\gamma}$. Zum Beispiel wird $\mathcal{A}_1 = [L, \infty] \times [-L, L] \times [-L_z, L_z]$ ersetzt durch $\tilde{\mathcal{A}}_1 = [L, \tilde{L}] \times [-L, L] \times [-L_z, L_z]$. In

diesem Falle ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)} &= (x_{j_x}, y_{j_y}, z_{j_z}) \in \tilde{\mathcal{A}}_1 \\
 j_a &\in \{0, \dots, m_a\} \\
 x_{j_x} &= \frac{L + \tilde{L}}{2} + \frac{\tilde{L} - L}{2} \cos\left(\frac{\pi}{m_x} j_x\right) \\
 y_{j_y} &= L \cos\left(\frac{\pi}{m_y} j_y\right) \\
 z_{j_z} &= L_z \cos\left(\frac{\pi}{m_z} j_z\right)
 \end{aligned} \tag{C.6}$$

Das dreidimensionale Interpolationspolynom für die Funktion $\psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}, \tau_n)$ lautet dann:

$$p_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}, \tau_n) = \sum_{\substack{0 \leq j_a \leq m_a \\ a \in \{x, y, z\}}} w_{m_x, m_y, m_z}(\mathbf{r}; \mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)}) \psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)}, \tau_n) \tag{C.7}$$

mit

$$w_{m_x, m_y, m_z}(\mathbf{r}; \mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)}) \equiv w_{m_x}(x; x_{j_x}) w_{m_y}(y; y_{j_y}) w_{m_z}(z; z_{j_z})$$

Indem die Funktion $\psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}', \tau_{n-1})$ durch das Interpolationspolynom ersetzt wird, ergibt sich an den Tschebyschew-Punkten $\mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)} \in \mathcal{A}_l$ für $l \in \{0, 1, 2, 3, 4\}$ die Update-Regel:

$$\begin{aligned}
 \psi_{\mathcal{A}_j}(\mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)}, \tau_{n+1}) &= \sum_{l=0}^4 \int_{\mathcal{A}_l} d^3 \mathbf{r}' \mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)}, \mathbf{r}', \Delta\tau) p_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}', \tau_n) \\
 &= \sum_{0 \leq l \leq 4} \sum_{\substack{0 \leq j'_a \leq n_a \\ a \in \{x, y, z\}}} \kappa_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)}, \mathbf{r}^{(j'_x, j'_y, j'_z)}, \Delta\tau) \psi_{\mathcal{A}_l}(\mathbf{r}^{(j'_x, j'_y, j'_z)}, \tau_n)
 \end{aligned} \tag{C.8}$$

Ein Vorteil dieses Algorithmus ist, daß die Matrixelemente

$$\kappa_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)}, \mathbf{r}^{(j'_x, j'_y, j'_z)}, \Delta\tau) = \int_{\mathcal{A}_l} d^3 \mathbf{r}' \mathcal{K}_{\mathcal{A}_j, \mathcal{A}_l}(\mathbf{r}^{(j_x, j_y, j_z)}, \mathbf{r}', \Delta\tau) w_{m_x, m_y, m_z}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}^{(j'_x, j'_y, j'_z)}) \tag{C.9}$$

nur einmal berechnet werden müssen.

In den Rechnungen wurden im zentralen Bereich \mathcal{A}_0 die Punktzahl $n_{\mathcal{A}_0} = 20 \times 20 \times 20$ und in den Armen \mathcal{A}_j , $j \in \{1, \dots, 4\}$ die Punktzahl $n_{\mathcal{A}_j} = 20 \times 20 \times 20$ verwendet mit

der Ausdehnung $\tilde{L} = 30$. Im Bereich der kritischen Teilchenzahl wurden im zentralen Bereich \mathcal{A}_0 die Punktzahl $n_{\mathcal{A}_0} = 20 \times 20 \times 20$ und in den Armen \mathcal{A}_j , $j \in \{1, \dots, 4\}$ die Punktzahl $n_{\mathcal{A}_j} = 40 \times 20 \times 20$ verwendet mit der Ausdehnung $\tilde{L} = 50$. Die Funktion $w_{m_a}(x, x_{j_a})$ hat Wurzeln an allen Punkten x_{l_a} mit $j_a \neq l_a$, siehe Gleichung C.4. Als Beispiel werden in Abb. C.1 die Funktionen $w_m(x, x_1)$ und $w_m(x, x_{16})$ für $m = 21$ und das zugehörige Tschebyschew-Gitter gezeigt. Um die Integrale zu berechnen, kann die Trapez-Regel in jedem Intervall $[\xi_{l_a}, \xi_{l_a+1}]$ verwendet werden, wobei mit ξ_{l_a} die Nullstellen des Tschebyschew-Polynoms bezeichnet werden. Der Iterationsprozeß wurde durchgeführt, bis die Änderungen der Amplitude, des chemischen Potentials und der inversen Lokalisierungslänge in der Größenordnung von 10^{-5} oder darunter lagen.

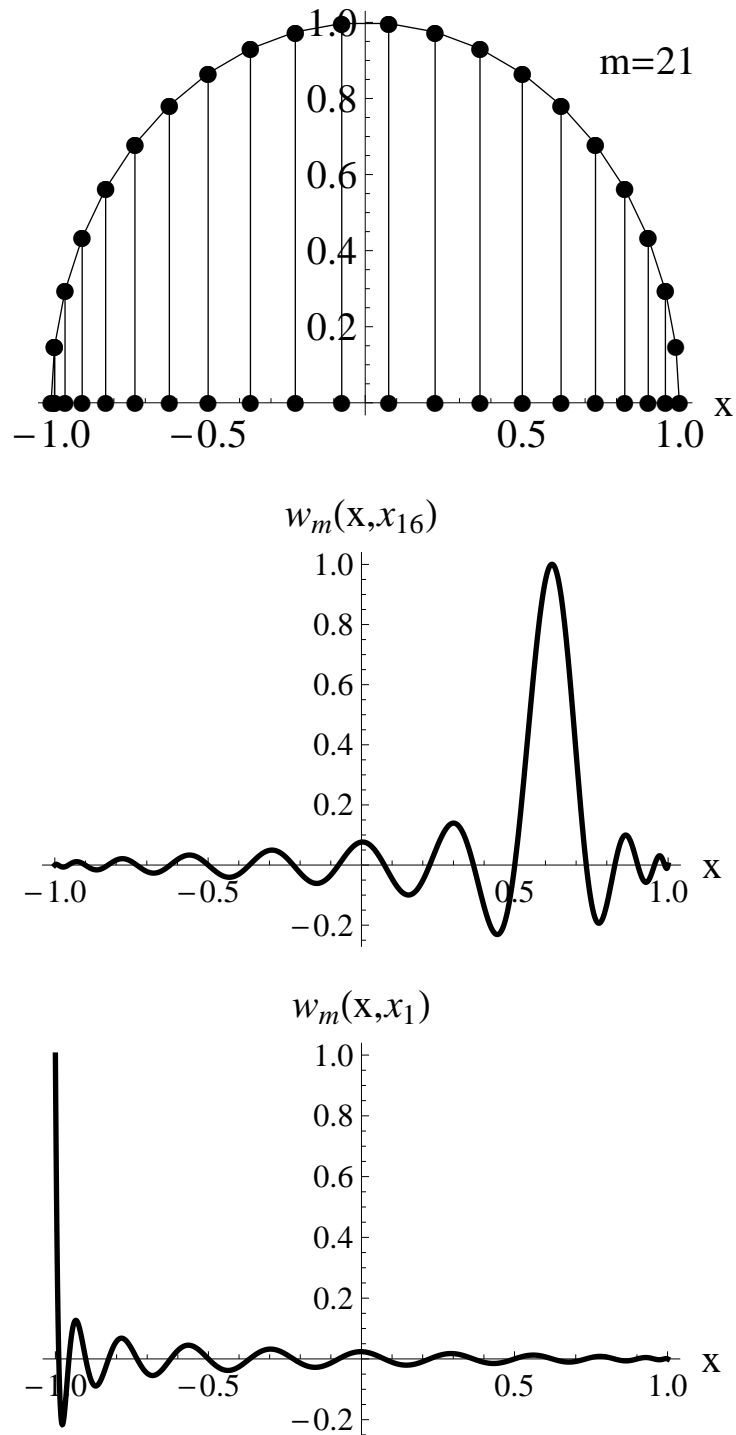


Abbildung C.1: Die Funktionen $w_m(x, x_1)$ und $w_m(x, x_{16})$ für $m = 21$ und das zugehörige Tschebyschew-Gitter im Intervall $[-1, 1]$, siehe Gl. C.3

Anhang D

Variationslösung für den Grundzustand im planaren Einteilchenproblem

Um die Genauigkeit der numerischen Rechnungen zu prüfen, läßt sich das Einteilchen-Problem in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} (quasi-)analytisch für große $w_z^{(\mathcal{C})}$ lösen [34]. In diesem Falle läßt sich die Variation der Wellenfunktion in z -Richtung vernachlässigen, so daß effektiv eine zweidimensionale Betrachtung durchgeführt werden kann (planarer Fall). Die planare Kreuzgeometrie wird in vier L -förmige Domänen $B = B_1 \cup B_2 \cup B_3 \cup B_4$ unterteilt, welche in die Arme $\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_4$ um eine Strecke L hineinreichen (siehe Abb. D.1). Es wird wieder der Fall harter Wände betrachtet, das heißt, an den Rändern der Geometrie sollen Dirichlet-Randbedingungen gelten. In dieser Geometrie soll die Energie eines Teilchens der Masse m^* berechnet werden, das heißt, es soll die Helmholtz-Gleichung

$$-\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi(x, y) = k^2\psi(x, y) \quad (\text{D.1})$$

gelöst werden. Es bezeichnet k die Wellenzahl des Teilchens, die hier mit dessen Energie über $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ verknüpft ist.

Um die Energie und die Wellenfunktion des Grundzustandes zu finden, läßt sich ein Variationsansatz mit einer Testfunktion $\psi_T(x, y)$ verwenden:

$$\psi_T(x, y; k) = \begin{cases} b(x, y, k) & (x, y) \in B \\ a_j(x, y, k) & \in \mathcal{A}_j \\ j & \in \{1, 2, 3, 4\} \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

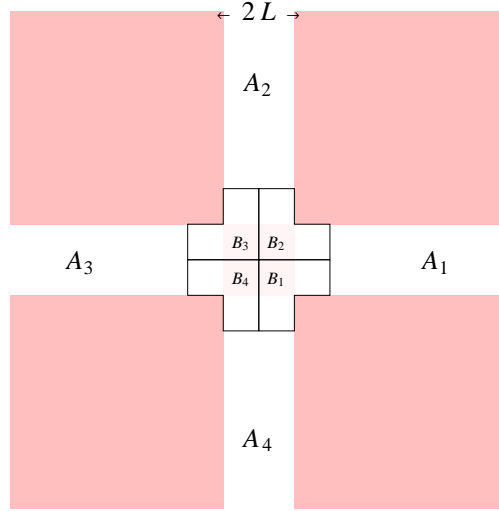


Abbildung D.1: Für die analytische Lösung im planaren Falle $w_z/L \rightarrow \infty$ wird der zentrale Bereich B in vier Bereiche B_1, \dots, B_4 unterteilt, welche um eine Strecke L in die Arme $\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_4$ hineinreichen.

Hier werden folgende Funktionen eingeführt:

$$\begin{aligned}
 a_1(x, y, k) &= a(x, y, k) \text{ für } (x, y) \in \mathcal{A}_1 \\
 a_2(x, y, k) &= a(y, -x, k) \text{ für } (x, y) \in \mathcal{A}_2 \\
 a_3(x, y, k) &= a(-x, -y, k) \text{ für } (x, y) \in \mathcal{A}_3 \\
 a_4(x, y, k) &= a(-y, x, k) \text{ für } (x, y) \in \mathcal{A}_4
 \end{aligned} \tag{D.3}$$

$$\begin{aligned}
 a(x, y, k) &= \sum_{m \in \{1, 3, 5, \dots\}} a_m \exp[-q_m x] \cos\left(m \frac{\pi}{2L} y\right) \\
 b(x, y, k) &= \sum_{j \in \{1, 3, 5, \dots\}} b_j J_{\frac{2j}{3}}[k \cdot R(x, y)] \sin\left[\frac{2j}{3} \phi(x, y)\right]
 \end{aligned}$$

Die modifizierten Bessel-Funktionen $J_{\frac{2j}{3}}[k \cdot R(x, y)]$ haben die Eigenschaft, daß sie die Dirichlet-Randbedingungen in den vier Eckpunkten $\{(L, -L), (L, L), (-L, L), (-L, -L)\}$ genau erfüllen. Die Phasenfunktion $\phi(x, y)$ und die Abstandsfunktion $R(x, y)$ können geschrieben werden als:

$$\begin{aligned}
 R(x, y) &= \sqrt{(|x| - L)^2 + (|y| - L)^2} \\
 \phi(x, y) &= \begin{cases} \frac{\pi}{2} + \arctan\left(\frac{|x| - L}{|y| - L}\right), & |y| < L \\ \frac{3\pi}{2} + \arctan\left(\frac{|x| - L}{|y| - L}\right), & |y| > L \end{cases}
 \end{aligned} \tag{D.4}$$

Die Funktionen $R(x, y)$ und $\phi(x, y)$ und damit die Testfunktion $\psi_T(x, y)$ sind in der kreuzförmigen Domäne stetig.

Aus der Helmholtz-Gleichung ergibt sich $q_m(k) = \sqrt{\left(m \frac{\pi}{2L}\right)^2 - k^2}$. Im Falle des Grundzustandes hat die Funktion keine Knotenlinien und weist eine gerade Parität unter Drehungen um $\frac{\pi}{2}$ auf. Daher läuft der Index m nur über ungerade Zahlen.

Da $q_1(k)$ im Falle eines lokalisierten Zustandes reelle Werte annimmt, ist die Wellenzahl auf das Intervall $0 < (Lk)^2 < \frac{\pi^2}{4}$ beschränkt. Mit $H_{kin} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right)$ ist auf dem betrachteten Integrationsgebiet G die Energie des Grundzustandes gegeben durch:

$$E_G \leq E_T = \frac{\langle \psi_T, H_{kin} \psi_T \rangle}{\langle \psi_T, \psi_T \rangle} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\int_G dx dy \psi_T^\dagger(x, y) \left(-\partial_x^2 - \partial_y^2 \right) \psi_T(x, y)}{\int_G dx dy \psi_T^\dagger(x, y) \psi_T(x, y)} \quad (D.5)$$

Durch die Symmetrie ist es ausreichend, die gesuchten Koeffizienten a_m und b_j an der Grenzlinie $x = 2L$ zu berechnen. Für $(x, y) \in B_1 \cup B_2 \cup \mathcal{A}_1$ kann die Testfunktion geschrieben werden als:

$$\psi_T(x, y) = b(x, y, k) [1 - \Theta(x - 2L)] + a(x, y, k) \Theta(x - 2L) \quad (D.6)$$

Die Testfunktion muß bei $x = 2L$ stetig sein:

$$a(2L, y, k) = b(2L, y, k) \quad (D.7)$$

Für die Ableitung bei $x = 2L$ folgt:

$$\lim_{x \rightarrow 2L} \left[\frac{2\partial_x a(x, y, k) - 2\partial_x b(x, y, k)}{-\frac{a(x, y, k) - b(x, y, k)}{x - 2L}} \right] = [\partial_x a(x, y, k) - \partial_x b(x, y, k)]_{x=2L} \quad (D.8)$$

Mit den Orthogonalitätsrelationen $\frac{1}{L} \int_{-L}^L dy \cos\left(m \frac{\pi}{2L} y\right) \cos\left(m' \frac{\pi}{2L} y\right) = \delta_{mm'}$, $m, m' \in \{1, 3, 5, \dots\}$ können die Koeffizienten a_m im Zentrum durch die Koeffizienten b_j in den Armen ausgedrückt werden:

$$a_m \exp[-q_m 2L] = \sum_{j \in I} b_j c_{j,m}(k) \quad (D.9)$$

$$m \in \{1, 3, 5, \dots\}$$

$$c_{j,m}(k) = \frac{1}{L} \int_{-L}^L dy \cos\left[m \frac{\pi}{2L} y\right] J_{\frac{2j}{3}}[kR(2L, y)] \sin\left[\frac{2j}{3}\phi(2L, y)\right] \quad (D.10)$$

Indem die Testenergie E_T hinsichtlich der Wellenzahl k und der Koeffizienten b_j , $j \in \{1, 3, 5, \dots\}$ minimiert wird, erhält man nach algebraischen Umformungen eine obere Schranke für die Grundzustandsenergie. Aus der Wellenzahl k_0 , welche mit dieser oberen Schranke korrespondiert, lassen sich die Koeffizienten $b_j(k_0)$ bestimmen. Die Wellenfunktion in den Gebieten \mathcal{A}_1, B_1 und B_2 ist dann gegeben durch:

$$\psi_T(x, y, k_0) = \begin{cases} \sum_{j \in \{1, 3, 5, \dots\}} b_j J_{\frac{2j}{3}}[kR(x, y)] \sin\left[\frac{2j}{3}\phi(x, y)\right], & (x, y) \in B_1 \cup B_2 \\ \sum_{j, m \in \{1, 3, 5, \dots\}} b_j c_{j,m}(k_0) \exp[-q_m(k_0)(x - 2L)] \cos\left[m \frac{\pi}{2L} y\right], & (x, y) \in \mathcal{A}_1 \end{cases} \quad (D.11)$$

Für $j \in \{1, 3, 5, 7, 9, 11\}$ und $m \in \{1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15, 17, 19\}$ findet man für die Grundzustandsenergie $\epsilon_T(k_0) = \frac{E_T(k_0)}{\epsilon_L}$ mit $\epsilon_L = \frac{\hbar^2}{2mL^2}$:

$$Lk_0 = 1.27572 \quad (\text{D.12})$$

$$\epsilon_T(k_0) = 0.65964 \frac{\pi^2}{4}$$

Für das Vielteilchen-Problem ist ein Variationsansatz schlechter geeignet, da der nichtlineare Wechselwirkungsterm $(N - 1) \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m} |\psi^{(\Gamma)}(\mathbf{r})|^2$ in der Gross-Pitaevskii-Gleichung 1.8 die Basisfunktionen mischt, wodurch sich ein nichtlineares Gleichungssystem für die gesuchten Koeffizienten ergibt.

Anhang E

Moden mit B_{1u} - und A_u -Symmetrie

Als Beispiele für Moden ungerader Parität unter Spiegelung an der xy -Ebene bei $z = 0$ sollen die Moden $\psi_{0,B_{1u}}^{(c)}(\mathbf{r})$ und $\psi_{0,A_u}^{(c)}(\mathbf{r})$ in der symmetrischen kreuzförmigen Domäne mit den Parameterwerten $w_x^{(c)} = w_y^{(c)} = w_z^{(c)} = 2L$ diskutiert werden.

Im Falle der B_{1u} -Symmetrie weist die Mode $\psi_{0,B_{1u}}^{(c)}(\mathbf{r})$ eine gerade Parität unter Spiegelung an den xz - und yz -Ebenen, aber eine ungerade Parität bei Spiegelung an der xy -Ebene auf:

$$\psi_{0,B_{1u}}^{(c)}(x, y, -z) = -\psi_{0,B_{1u}}^{(c)}(x, y, z) \quad (\text{E.1})$$

Diese Mode besitzt eine Knotenfläche, die mit der Symmetrieebene $z = 0$ zusammenfällt.

Die Mode $\psi_{0,A_u}^{(c)}(\mathbf{r})$ zeigt unter den Spiegelungen an den xy -, xz - und yz -Ebenen jeweils eine ungerade Parität:

$$\begin{aligned} \psi_{0,A_u}^{(c)}(-x, y, z) &= -\psi_{0,A_u}^{(c)}(x, y, z) \\ \psi_{0,A_u}^{(c)}(x, -y, z) &= -\psi_{0,A_u}^{(c)}(x, y, z) \\ \psi_{0,A_u}^{(c)}(x, y, -z) &= -\psi_{0,A_u}^{(c)}(x, y, z) \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

Diese Mode besitzt drei Knotenflächen, die mit den Symmetrieebenen $x = 0$, $y = 0$, $z = 0$ zusammenfallen.

Wie sich zeigt, siehe Abb. E.1 und E.2, fallen die Werte der Lokalisierungslänge und des chemischen Potentials der Moden $\psi_{0,A_g}^{(c)}(\mathbf{r})$ und $\psi_{0,B_{1u}}^{(c)}(\mathbf{r})$ (vgl. Abb. E.3 und E.5) sowie der Moden $\psi_{0,B_{1g}}^{(c)}(\mathbf{r})$ und $\psi_{0,A_u}^{(c)}(\mathbf{r})$ (vgl. Abb. E.4 und E.6) jeweils paarweise zusammen, so daß diese Moden nicht gesondert betrachtet werden müssen.

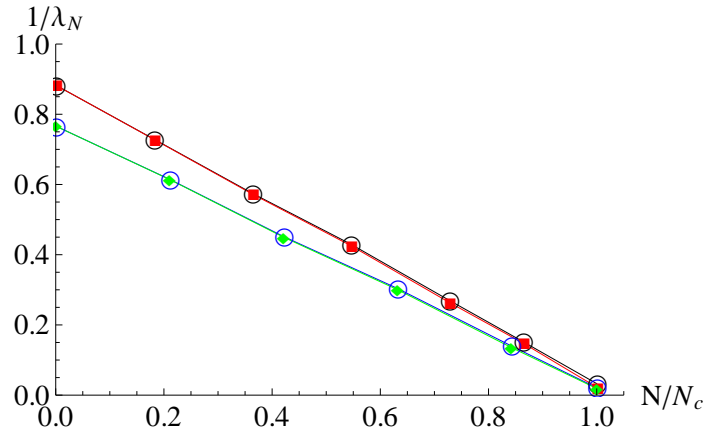


Abbildung E.1: Lineare Abnahme der inversen Lokalisierungslänge als Funktion der Teilchenzahl in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} für die Parameter $w_x^{(c)} = w_y^{(c)} = w_z^{(c)} = 2L$. Gezeigt werden die Werte für die Moden $\psi_{0,A_g}^{(c)}(\mathbf{r})$ (schwarze Kurve) und $\psi_{0,B_{1u}}^{(c)}(\mathbf{r})$ (rote Kurve) sowie die Moden $\psi_{0,B_{1g}}^{(c)}(\mathbf{r})$ (blaue Kurve) und $\psi_{0,A_u}^{(c)}(\mathbf{r})$ (grüne Kurve).

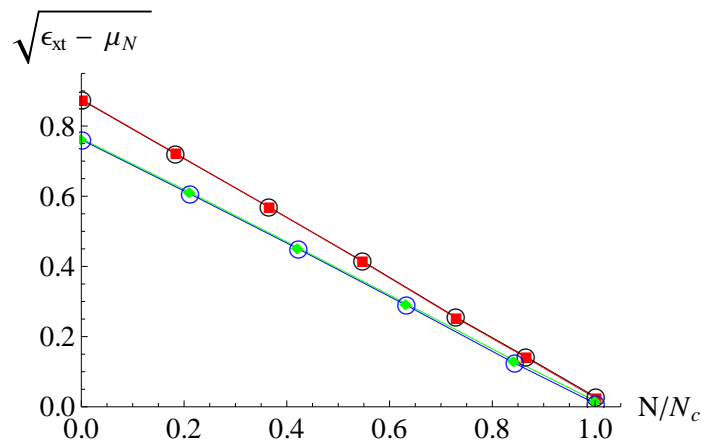


Abbildung E.2: Lineare Abnahme von $\sqrt{\epsilon_{xt}^{(c)} - \mu_N}$ als Funktion der Teilchenzahl in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} für die Parameter $w_x^{(c)} = w_y^{(c)} = w_z^{(c)} = 2L$. Gezeigt werden die Werte für die Moden $\psi_{0,A_g}^{(c)}(\mathbf{r})$ (schwarze Kurve) und $\psi_{0,B_{1u}}^{(c)}(\mathbf{r})$ (rote Kurve) sowie die Moden $\psi_{0,B_{1g}}^{(c)}(\mathbf{r})$ (blaue Kurve) und $\psi_{0,A_u}^{(c)}(\mathbf{r})$ (grüne Kurve).

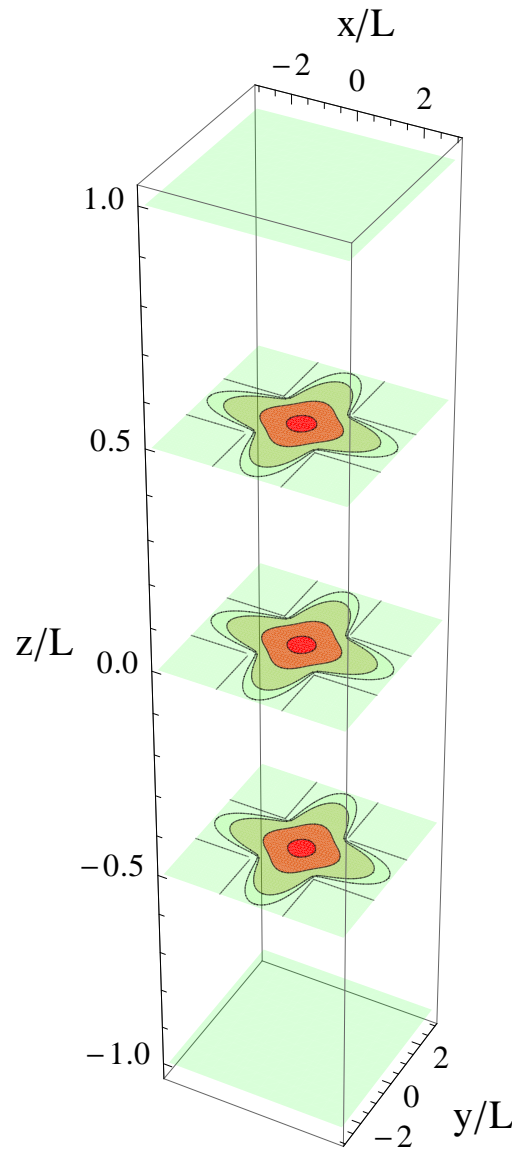


Abbildung E.3: Die Mode $\psi_{0,A_g}^{(C)}(\mathbf{r})$ in verschiedenen Schnittebenen $z = \{L, 0.5, 0, -0.5L, -L\}$ in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} für die Parameter $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = w_z^{(C)} = 2L$. Funktionswerte in der Nähe des Maximums sind rot gekennzeichnet (vgl. Abb. 2.1).

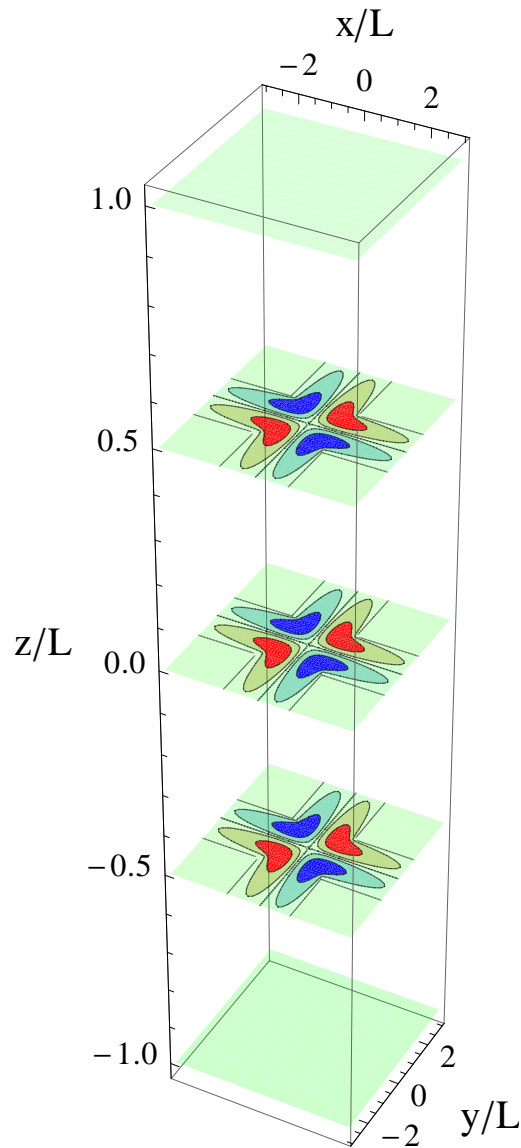


Abbildung E.4: Die Mode $\psi_{0,B_{1g}}^{(C)}(\mathbf{r})$ in verschiedenen Schnittebenen $z = \{L, 0.5, 0, -0.5L, -L\}$ in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} für die Parameter $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = w_z^{(C)} = 2L$. Funktionswerte in der Nähe des Maximums sind rot gekennzeichnet (vgl. Abb. 2.2), negative Funktionswerte blau.

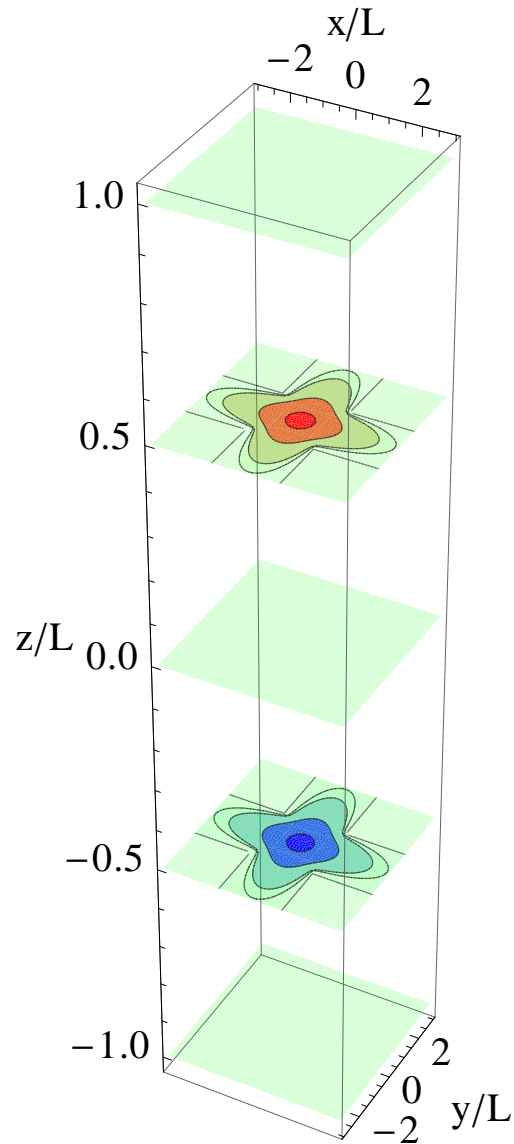


Abbildung E.5: Die Mode $\psi_{0,B_{1u}}^{(C)}(\mathbf{r})$ in verschiedenen Schnittebenen $z = \{L, 0.5, 0, -0.5L, -L\}$ in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} für die Parameter $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = w_z^{(C)} = 2L$. Funktionswerte in der Nähe des Maximums sind rot gekennzeichnet (vgl. Abb. 2.1), negative Funktionswerte blau.

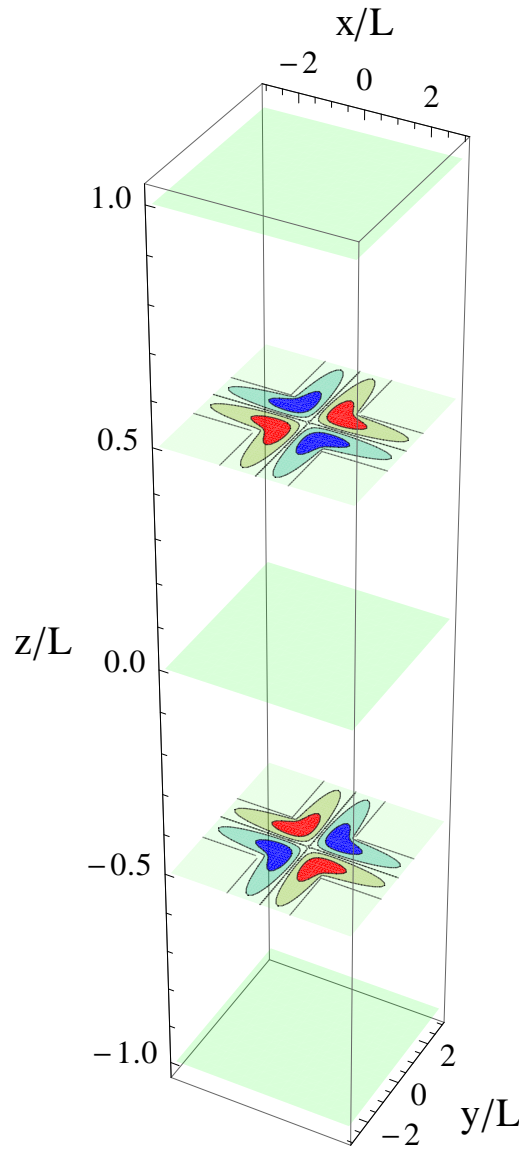


Abbildung E.6: Die Mode $\psi_{0,A_u}^{(C)}(\mathbf{r})$ in verschiedenen Schnittebenen $z = \{L, 0.5, 0, -0.5L, -L\}$ in der kreuzförmigen Domäne \mathcal{C} für die Parameter $w_x^{(C)} = w_y^{(C)} = w_z^{(C)} = 2L$. Funktionswerte in der Nähe des Maximums sind rot gekennzeichnet (vgl. Abb. 2.2), negative Funktionswerte blau.

Anhang F

Optische Erzeugung kreuzförmiger Fallengeometrien

In diesem Anhang soll ein Vorschlag zur Erzeugung einer kreuzförmigen Fallengeometrie mit offenen Enden durch Laserstrahlen gemacht werden, bei denen die Feldstärke auf der Strahlachse ein Minimum annimmt („dark hollow laser beams“). Solche Laserstrahlen mit variabler Höhe und Breite können z.B. durch die Verwendung transversaler Hermite-Gauss-Moden (HG-Moden) erzeugt werden $\hat{E}_{mn}(\mathbf{r}; \omega)$, welche sich aus der paraxialen Approximation ergeben[51]. Diese kann verwendet werden, solange das transversale Profil des Strahls entlang der Propagationsachse auf der Skala der Wellenlänge nur schwach variiert. Nimmt man die Propagationsachse als $\mathbf{n} = \mathbf{e}_z$ an, betrachtet man im folgenden eine Mode, welche gegeben ist durch:

$$E_{10}(\mathbf{r}; \omega) = \mathcal{E}_{10} \frac{x \cdot \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{[w(z)]^2}\right)}{[w(z)]^2} \exp\left[i\frac{\omega}{c} \left(\frac{x^2+y^2}{2R(z)} + z\right) - 2i\eta(z)\right] \quad (\text{F.1})$$

Hier ist \mathcal{E}_{10} ein Vorfaktor, welcher das Maximum der Amplitude bestimmt, $\eta(z)$ bezeichnet die Guoy-Phase und $w(z)$ die Strahlbreite. Das Minimum von $w(z)$ definiert den Strahldurchmesser w_0 . Solange der Laserstrahl gut kollimiert ist, läßt sich die paraxiale Approximation anwenden, siehe z.B. [51]. In dieser Approximation können die longitudinalen Feldkomponenten im Bereich $z = 0$ vernachlässigt werden. Es werden nun zwei solcher Feldamplituden mit reellen Polarisationsvektoren $\hat{\varepsilon}^{(10)}$ und $\hat{\varepsilon}^{(01)}$ betrachtet, welche beide orthogonal auf \mathbf{n} stehen, $\hat{\varepsilon}^{(10)} \cdot \mathbf{n} = 0 = \hat{\varepsilon}^{(01)} \cdot \mathbf{n}$, aber um $\frac{\omega}{c}z_0 = \frac{\pi}{2}$ phasenverschoben sind:

$$\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega) = \hat{E}_{10}(\mathbf{r}; \omega) \hat{\varepsilon}^{(10)} + e^{i\frac{\pi}{2}} \hat{E}_{01}(\mathbf{r}; \omega) \hat{\varepsilon}^{(01)} \quad (\text{F.2})$$

Hier wird für die gleiche Propagationsrichtung und Guoy-Phase $\eta(z)$ die Modenamplitude $\hat{E}_{01}(\mathbf{r}; \omega)$ aus $\hat{E}_{10}(\mathbf{r}; \omega)$ bestimmt, indem die Koordinaten x and y ausgetauscht werden. Das elektrische Feld, welches mit einem solchen Strahl korrespondiert, lautet dann:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}; t) = \text{Re} \left[\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}; \omega) e^{-i\omega t} \right] \quad (\text{F.3})$$

Die Falle, welche man betrachtet, besteht aus drei solchen überlagerten Strahlen $\mathbf{E}^{(b)} = \mathbf{E}^{(b)}(\mathbf{r}; t)$ mit dem Strahlindex $b \in \{I, II, III\}$, welche entlang dreier senkrechter Richtungen propagieren. Drei solche Laserstrahlen $\mathbf{E}^{(b)}$ mit Strahlachsen $\mathbf{n}^{(I)} = \mathbf{e}_x$, $\mathbf{n}^{(II)} = \mathbf{e}_y$ und $\mathbf{n}^{(III)} = \mathbf{e}_z$, Abb. F.1, kreuzen sich im Ursprung $\mathbf{r} = \mathbf{0}$. Zur Vereinfachung wird angenommen an, daß die Polarisationsvektoren der drei Strahlen senkrecht aufeinander stehen.

$$\hat{\varepsilon}^{(I,10)} = \mathbf{e}_z = \hat{\varepsilon}^{(I,01)} \quad (\text{F.4})$$

$$\hat{\varepsilon}^{(II,10)} = \mathbf{e}_x = \hat{\varepsilon}^{(II,01)} \quad (\text{F.5})$$

$$\hat{\varepsilon}^{(III,10)} = \mathbf{e}_y = \hat{\varepsilon}^{(III,01)} \quad (\text{F.6})$$

Die zeitgemittelte Wechselwirkungsenergie des induzierten elektrischen Dipol-Moments $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t)$ eines Atoms am Ort \mathbf{r} in Gegenwart eines elektrischen Hochfrequenzfeldes $\mathbf{E}(\mathbf{r}; t) = \sum_b \mathbf{E}^{(b)}(\mathbf{r}; t)$, wie es durch die Überlagerung dreier solcher Laserstrahlen erzeugt wird, sorgt im zeitlichen Mittel für das optische Dipolpotential der Laserfalle:

$$V_{dip}(\mathbf{r}) = - \sum_{b \in \{I, II, III\}} \frac{\alpha^{(b)}}{2} \left(|\hat{E}_{10}^{(b)}(\mathbf{r}; \omega^{(b)})|^2 + |\hat{E}_{01}^{(b)}(\mathbf{r}; \omega^{(b)})|^2 \right) \quad (\text{F.7})$$

Hier folgt $\hat{E}_{10}^{(III)}$ direkt aus (F.1), während $\hat{E}_{10}^{(II)}$ und $\hat{E}_{10}^{(I)}$ aus (F.1) aus Permutationen $(x, y, z) \rightarrow (z, x, y)$ und $(x, y, z) \rightarrow (y, z, x)$ hervorgehen.

Um die Atome im Innern der Falle zu fangen, welche durch $\mathbf{E}^{(I)}$ and $\mathbf{E}^{(II)}$ gebildet wird, nimmt man an, daß die Frequenz dieser Strahlen blauverstimmt ist relativ zur Resonanzfrequenz ω_0 der Atome:

$$\omega^{(I)} = \omega^{(II)} > \omega_0 \quad (\text{F.8})$$

$$\alpha^{(I)} = \alpha^{(II)} = -\alpha < 0 \quad (\text{F.9})$$

Dann werden die Atome effektiv im Bereich minimaler Intensität um das Zentrum der Strahlachsen $\mathbf{n}^{(I)}$ und $\mathbf{n}^{(II)}$ gefangen. Allerdings bildet sich eine Potentialbarriere um den Kreuzungspunkt der Strahlen $\mathbf{E}^{(I)}$ und $\mathbf{E}^{(II)}$ in der Nähe des Ursprungs $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, so daß die freie Propagation der Atome entlang der Achsen $\mathbf{n}^{(I)}$ oder $\mathbf{n}^{(II)}$ verhindert wird. Diese Barriere kann beseitigt werden, indem ein dritter Strahl überlagert wird, welcher entlang $\mathbf{n}^{(III)} = \mathbf{n}^{(I)} \wedge \mathbf{n}^{(II)}$ propagiert, s. Abb. F.1, falls dieser in passender Art rotverstimmt ist:

$$\omega^{(III)} < \omega_0 \quad (\text{F.10})$$

$$\alpha^{(III)} = \alpha > 0 \quad (\text{F.11})$$

In Abb. F.2 wird das optische Potential $V_{dip}(\mathbf{r})$ der Laserfalle auf der Oberfläche eines Würfels um den zentralen Bereich \mathcal{A}_0 der Falle abgebildet. In Abb. F.3 wird als Beispiel das Potential in der Ebene $z = 0$ abgebildet für einen Strahldurchmesser

$w_0 = 200\mu m$ und der Polarisierbarkeit $\alpha = 297.3 a_0^3$ von Rubidium [30], wobei a_0 den Bohrschen Radius bezeichnet, und einer Falltiefe von $800\mu K$. Bereiche, in denen das optische Potential hohe Werte annimmt, werden rot dargestellt, Bereiche kleiner Werte sind grün.

Das Potential nimmt in den Armen in guter Näherung eine parabolische Form $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ an, siehe Abb. F.3. Die Energie des Grundzustandes dieses parabolischen Potentials ist durch $\epsilon_0 = \frac{\hbar}{2}\omega = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{K}{m}}$ gegeben, mit $K = V''(x) = m\omega^2$. Für die genannten Beispielparameter ergibt sich für die Grundzustandsenergie in der $z = 0$ -Ebene $\epsilon_0 = 0.03\mu K$, so daß im Rahmen dieser Abschätzung der Grundzustand um vier Größenordnungen unterhalb der Falltiefe liegt und die Atome sich nur in einem engen Bereich entlang der Armachsen bewegen.

Arme mit kreisförmigem Querschnitt können auf dieselbe Art erzeugt werden, indem drei Laguerre-Gauss-Strahlen [52] (zwei blauverstimmte und ein rotverstimmte) statt Hermite-Gauss-Strahlen überlagert werden. Bisher sind Experimente mit Materiewellen in einer Anordnung aus zwei gekreuzten Laserstrahlen durchgeführt worden, wobei solche Systeme als switch oder beam splitter eingesetzt werden konnten [53]. Wie oben diskutiert, ist allerdings in dem hier betrachteten Falle auch noch die Verwendung eines geeigneten dritten Laserstrahls notwendig, um die intrinsischen Potentialwände zu entfernen.

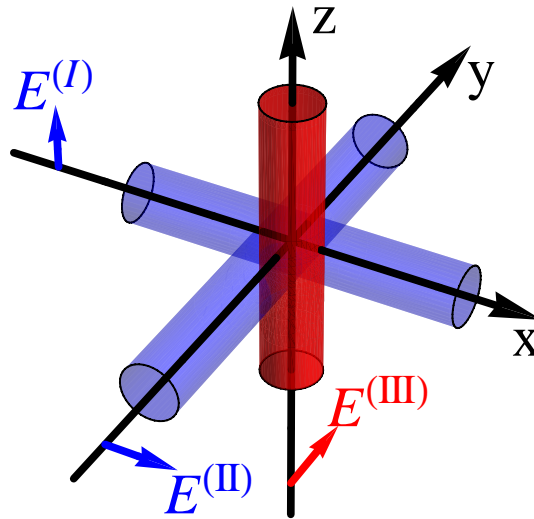


Abbildung F.1: Erzeugung von Quantenwellenleitern für Atome durch zwei blau verstimnte HG-Laserstrahlen $\mathbf{E}^{(I)}$ und $\mathbf{E}^{(II)}$, deren Strahlachsen entlang der x - and y -Achse orientiert sind, und einen rotverstimnten orthogonal verlaufenden HG-Laserstrahls $\mathbf{E}^{(III)}$ mit einer Strahlachse entlang der z -Achse. Der Laserstrahl $\mathbf{E}^{(III)}$ ist notwendig, um die intrinsischen Potentialbarrieren zu entfernen, welche erzeugt werden, wenn sich die Laserstrahlen $\mathbf{E}^{(I)}$ und $\mathbf{E}^{(II)}$ in den Übergangsbereichen zwischen den Armen $\mathcal{A}_1, \dots, \mathcal{A}_4$ und dem zentralen Bereich \mathcal{A}_0 schneiden.

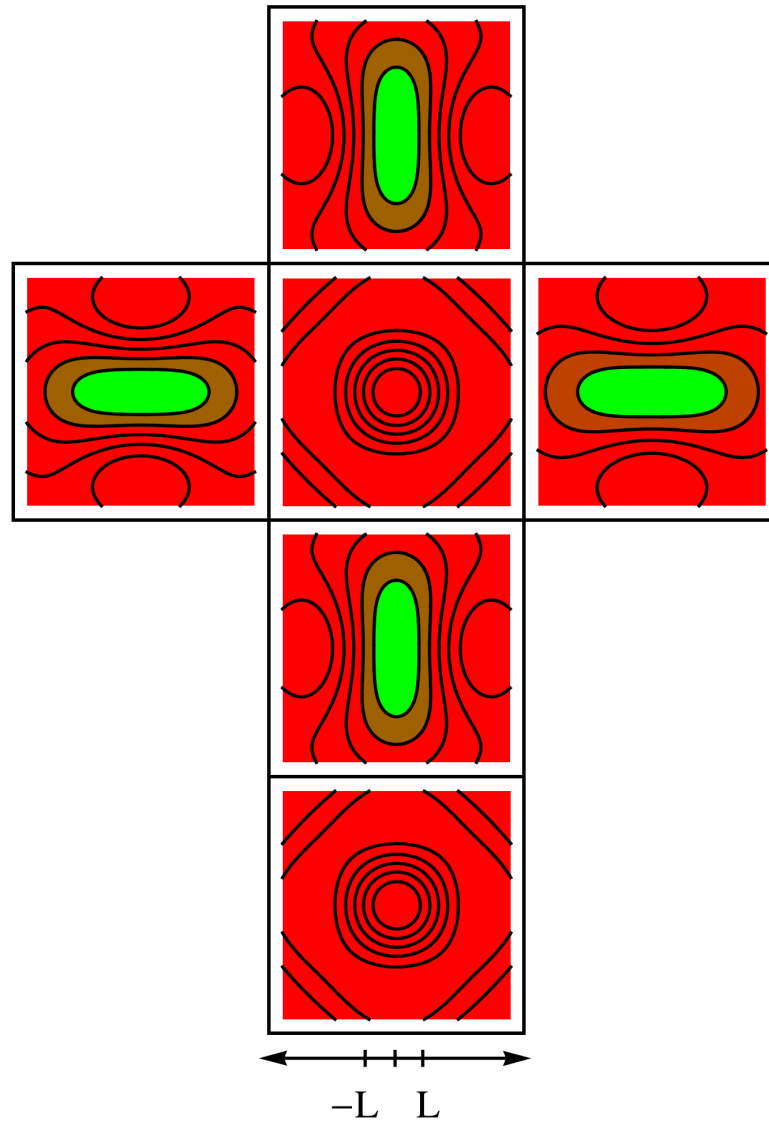


Abbildung F.2: Effektives Fallenpotential des Quantenwellenleiters an der Oberfläche eines Würfels, welcher um den zentralen Bereich des Kreuzungsbereichs auseinandergeklappt wird. Das zentrale und das unterste Quadrat entsprechen der Boden- und Deckfläche, die übrigen vier Quadrate den Seitenflächen des Würfels, in denen ein Querschnitt durch das Potential der Arme dargestellt ist. Bereiche niedriger Intensität werden in grüner Farbe gezeigt, Bereiche hoher Intensität in roter Farbe.

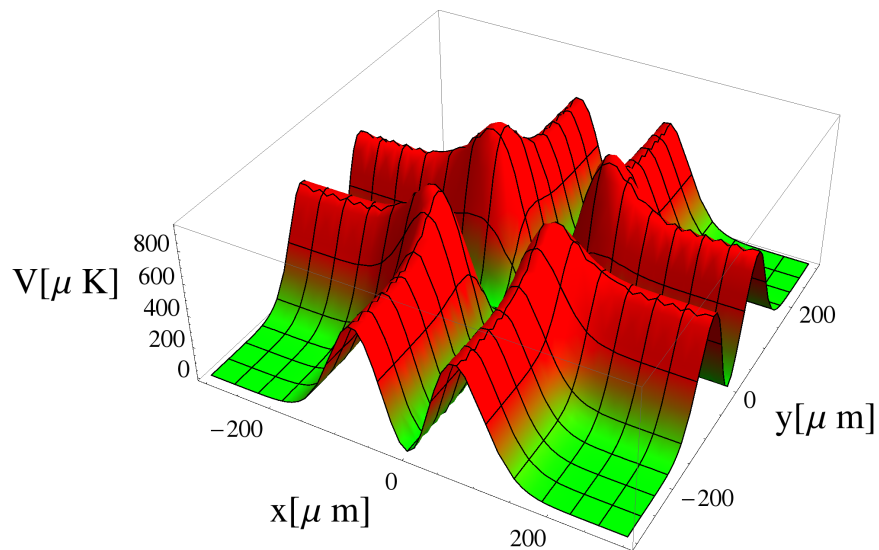


Abbildung F.3: Effektives Fallenpotential des Quantenwellenleiters in der $z = 0$ -Ebene für einen Strahldurchmesser $w_0 = 200\mu\text{m}$ und der Polarisierbarkeit $\alpha = 297.3 a_0^3$ von Rubidium [30], wobei a_0 den Bohrschen Radius bezeichnet und einer Fallentiefe von $800\mu\text{K}$. Bereiche niedriger Intensität werden in grüner Farbe gezeigt, Bereiche hoher Intensität in roter Farbe.

Literaturverzeichnis

- [1] A. Einstein. *Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften*, 1:3, 1925.
- [2] M. Anderson, J. Ensher, M. Matthews, C. Wieman, and E. Cornell. *Science*, 269:198, 1995.
- [3] K.B. Davis, M.-O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D.S. Durfee, D.M. Kurn, and W. Ketterle. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3969, 1995.
- [4] Y.P. Feng, C.F. Majkrzak, S.K. Sinha, D.G. Wieserl, H. Zhang, and H.W. Deckman. *Phys. Rev. B*, 49:10814, 1994.
- [5] S.P. Pogossian, A. Menelle, H. LeGall, J. Ben-Youssef, and J.M. Desvignes. *J. Appl. Phys.*, 83:1159, 1997.
- [6] M.J. Renn, D. Montgomery, O. Vdovin, D.Z. Anderson, C.E. Wieman, and E.A. Cornell. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3253, 1995.
- [7] H. Ito, T. Nakata, K. Sakaki, M. Ohtsu, K.I. Lee, and W. Jhe. *Phys. Rev. Lett.*, 76:4500, 1996.
- [8] D. Mueller, E.A. Cornell, D.Z. Anderson, and E.R.I. Abraham. *Phys. Rev. A*, 61:033411, 2000.
- [9] C.A. Christensen, S. Will, M. Saba, G. Jo, Y. Shin, W. Ketterle, and D. Pritchard. *Phys. Rev. A*, 78:033429, 2008.
- [10] S. Vorrath, S.A. Möller, P. Windpassinger, K. Bongs, and K. Sengstock. *New Journal of Physics*, 12:123015, 2010.
- [11] J.K. Pechkis and F.K. Fatemi. *Optics Express*, 20:13409, 2012.
- [12] A.H. Barnett, S.P. Smith, M. Olshanii, K.S. Johnson, A.W. Adams, and P. Prentiss. *Phys. Rev. A*, 61:023608, 2000.
- [13] F.L. Kien, V.I. Balykin, and K. Hakuta. *Phys. Rev. A*, 70:063403, 2004.

- [14] K.P. Nayak, P.N. Melentiev, M. Morinaga, F.L. Kien, V.I. Balykin, and K. Hakuta. *Optics Express*, 15:5431, 2007.
- [15] E. Vetsch, D. Reitz, G. Saguë, R. Schmidt, S.T. Dawkins, and A. Rauschenbeutel. *Phys. Rev. Lett.*, 104:203603, 2010.
- [16] L. Stern, B. Desiatov, I. Goykhman, and U. Levy. *Nature Com.*, 4:1548, 2010.
- [17] M. Schiffer, M. Rauner, S. Kuppens, M. Zinner, K. Sengstock, and W. Ertmer. *Appl. Phys. B*, 67:705, 1998.
- [18] A. Jaouadi, N.Gaaloul, B.Viaris de Lesegno, M.Telmini, L. Pruvost, and E. Charron. *Phys. Rev. A*, 82:023613, Aug 2010.
- [19] R.L. Schult, D.G. Ravenhall, and H.W. Wyld. *Phys. Rev. B*, 39:5476, 1989.
- [20] P. Exner and V.A. Zagrebnov. *J. Phys. A*, 38:463–470, 2005.
- [21] P. Exner and P. Seba. *J. Math. Phys.*, 30:2574, 1989.
- [22] P. Duclos and P. Exner. *Rev. Math. Phys.*, 7:73, 1995.
- [23] M.W.J. Bromley and B.D. Esry. *Phys. Rev. A*, 68:043609, 2003.
- [24] S.A. Nazarov. *Acoustical Physics*, 56:1004, 2010.
- [25] Y. Avishai, D. Bessis, B.G. Giraud, and G. Mantica. *Phys. Rev. B*, 44:8028–8034, 1991.
- [26] E. Sadurni and W.P. Schleich. *AIP Conf.Proc.*, 1323:283, 2010.
- [27] M. Dauge, Y. Lafranche, and N. Raymond. *ESAIM: Proc.*, 35:14, 2012.
- [28] J. Goldstone and R.L. Jaffe. *Phys. Rev. B*, 45:14100–14107, 1992.
- [29] P. Leboeuf and N. Pavloff. *Phys. Rev. A*, 64:033602, 2001.
- [30] C.J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. 2nd ed., Cambridge University Press, New York, 2008.
- [31] Die in diesem Abschnitt dargestellte Überlegung wurde von N. Schopohl durchgeführt.
- [32] D. Borisov, P. Exner, and A. Golovina. *arXiv*, page 1210.0449, 2012.
- [33] N. Schopohl. *persönliche Mitteilung*.
- [34] Die in diesem Kapitel bzw. Anhang dargestellten Methoden bzw. Modelle wurden von N. Schopohl entwickelt.

- [35] S.A. Nazarov and A.V. Shanin. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 51:96, 2011.
- [36] P. Amore, M. Rodriguez, and C.A. Terreo-Escalante. *J. Phys. A*, 45:105303, 2012.
- [37] P. Exner, P. Seba, and P. Stovicek. *Czech. J. Phys. B*, 39:181, 1989.
- [38] L.N. Trefethen and T. Betcke. *Contemporary Mathematics*, 2005.
- [39] S.A. Chin and E. Krotscheck. *Phys. Rev. E*, 72:036705, 2005.
- [40] F. Dalfovo, S. Giorgini, L.P. Pitaevskii, and S. Stringari. *Rev. Mod. Phys.*, 71:463, 1999.
- [41] I. Sapina, T. Dahm, and N. Schopohl. *Phys. Rev. A*, 82:053620, 2010.
- [42] J.P. Martikainen. *Phys. Rev. A*, 63:043602, 2001.
- [43] D. Xiong, F. Wang X. Li, and D. Wang. *arXiv*, page 1305.7091, 2013.
- [44] A. Markowsky and N. Schopohl. *Phys. Rev. A*, 89:013622, 2014.
- [45] A.L. Delitsyn, B.T. Nguyen, and D.S. Grebenkov. *Eur. Phys. J. B*, 85:176, 2012.
- [46] M. de Gosson and B.Hiley. *Phys. Lett. A*, 377:3005, 2013.
- [47] R.M. Wilcox. *J. Math. Phys.*, 8:962, 1967.
- [48] W. Magnus. *Communications on pure and applied mathematics*, 7:649, 1954.
- [49] C. Runge. *Zeitschrift für Mathematik und Physik*, 79:224, 1901.
- [50] L.N. Trefethen. *Approximation theory and approximation praxis*. SIAM, 2013.
- [51] A. Siegman. *Lasers*. University Science Books, Sausalito, California, 1986.
- [52] Paul Fulda, Keiko Kokeyama, Simon Chelkowski, and Andreas Freise. *Phys. Rev. D*, 82:012002, 2010.
- [53] G.L. Gattobigio, A. Couvert, G. Reinaudi, B. Georgeot, and D. Guery-Odelin. *Phys. Rev. Lett.*, 109:030403, 2012.

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei Herrn Prof. Dr. N. Schopohl bedanken, dessen Unterstützung von zentraler Bedeutung für das Gelingen dieser Arbeit war.

Herrn Prof. Dr. Thomas Dahm möchte ich für die Begutachtung der Arbeit meinen Dank aussprechen.

Herrn Michael Benner danke ich herzlich für seine stete Gesprächsbereitschaft und viele aufschlußreiche Diskussionen.

Bedanken möchte ich mich bei Frau Dr. Aida Zare, Herrn Dr. Lothar Schlafer, Herrn Michael Benner, Herrn Marius Dommermuth und Herrn Ali Sanayei für das Korrekturlesen meiner Arbeit und ihre Hilfsbereitschaft.

Schließlich möchte ich mich bei allen Kollegen und ehemaligen Mitarbeitern an unserem Institut für die gute Arbeitsatmosphäre bedanken.