Superfluidität fermionischer Atome im optischen Gitter

–Diplomarbeit–

Frank Freimuth

Johannes-Gutenberg-Universität Mainz

28. Dezember 2005

Inhaltsverzeichnis

1 EINFÜHRUNG

1.1 Ultrakalte Fermionen im optischen Gitter

Albert Einstein sagte 1925 voraus, dass ein nicht wechselwirkendes Bose-Gas bei Absenkung seiner Temperatur unterhalb eine kritische Temperatur beginnt, den Quantenzustand mit der kleinsten Energie makroskopisch zu besetzen. Die Bosonen in diesem Zustand werden dann als Bose-Einstein-Kondensat bezeichnet. Aus der Bose-Verteilung der Quantenstatistik lässt sich dieses Kondensationsphänomen theoretisch ableiten. Es tritt auch in wechselwirkenden Bose-Gasen auf. Das Maß der Besetzung des Quantenzustandes mit der niedrigsten Energie ist hier jedoch kleiner, da die Wechselwirkung Bosonen aus dem Kondensat in Zustände höherer Energie streut (Depletion) [PS02], [PS03]. Folglich erreicht der Kondensatanteil in dem stark wechselwirkenden flüssigen ^{4}He, das seit 1938 auf einen Vorschlag Fritz Londons hin unter dem Gesichtspunkt der Bose-Einstein Kondensation untersucht wurde, nicht mehr als 10%. Die Suche nach weiteren superfluiden Quantenflüssigkeiten - möglichst mit höherem Kondensatanteil als beim flüssigen ^{4}He - führte schließlich zu den Alkaliatomen. Durch sehr hohe Verdünnung wird die Wechselwirkung der Alkaliatome so stark reduziert, dass nur noch ein vernachlässigbarer Anteil aus dem Kondensat in angeregte Zustände gestreut wird. Die hohe Verdünnung der Gase hat jedoch eine sehr niedrige Bose-Einstein-Kondensationstemperatur ($\leq 10\,\mu$K) zur Konsequenz. Dem Übergang fast aller flüssigen Systeme zum Festkörper bei niedrigen Temperaturen (^{4}He und ^{3}He sind die einzigen bekannten Ausnahmen) wirkt wiederum die sehr hohe Verdünnung entgegen, die den Kondensationsprozess zum Festkörper hemmt. Gase von Alkaliatomen bei ultraniedrigen Temperaturen sind also metastabil. Aufgrund der Struktur ihrer Anregungsspektren lassen sich Alkaliatome mit Lasern leicht manipulieren und insbesondere laserkühlen. Zur Erreichung der kritischen Temperatur für Bose-Kondensation muss der Vorkühlung durch den Laser noch eine weitere Abkühlung durch Verdampfung folgen. Ermöglicht wurde der experimentelle Durchbruch bei der Realisierung von Bose-Einstein-Kondensation in Alkaligasen im Jahre 1995 [AEM$^+$95], [DMA$^+$95] somit durch die vorangehenden Fortschritte bei der Speicherung und vor allem der Kühlung von Alkaliatomen. Die experimentelle Untersuchung der Bose-Einstein-Kondensation in verdünnten Gasen von bosonischen Alkaliatomen bei ultraniedrigen Temperaturen geht weit über eine Bestätigung der theoretischen Arbeiten von Albert Einstein und Satyendra Nath Bose aus der Zeit um 1925 hinaus [PS02], [PS03]. Wesentlich ist hierbei der hohe Kondensatanteil von bis zu 99%, der unter anderem neuartige Experimente zu Materiewellen ermöglichte. Die Liste der Elemente, bei denen im verdünnten Gas bei ultraniedrigen Temperaturen Bose-Einstein-Kondensation erzielt werden kann, ist seit den wegweisenden Experimenten des Jahres 1995 gewachsen und wird wohl weiterhin wachsen. Dabei bleiben die Erfolge nicht auf die Gruppe der Alkalimetalle beschränkt. Beispielsweise wurden 2001 Kondensate von metastabilem ^{4}He erzeugt - im Gegensatz zum gewöhnlichen stark wechselwirkenden flüssigen ^{4}He ein hochverdünntes schwach wechselwirkendes System.

Während die Wechselwirkungen im verwandten flüssigen ^{4}He kaum bekannt sind, erleichtert die genaue Kenntnis der Wechselwirkung in verdünnten ultrakalten Atomgasen den Vergleich zwischen Experiment und Theorie. Ein weiterer Vorteil ultrakalter verdünnter Gase gegenüber anderen im Bereich der kondensierten Materie untersuchten Vielteilchensystemen liegt bei deren hoher Manipulierbarkeit. Beispielsweise besteht die Möglichkeit, die Wechselwirkung der Atome über ein angelegtes Magnetfeld mit Hilfe einer Feshbach-Resonanz zu kontrollieren [PS02].

Wurden die ersten Bose-Einstein-Kondensate ausschließlich in harmonischen Fallen untersucht, so sind später optische Gitter als zusätzliche Möglichkeit hinzugekommen [Gre03]. Durch Retroreflexion der Laserstrahlen werden stehende Lichtwellen erzeugt, in deren Intensitätsminima (oder -maxima) die Atome hineingezogen werden. Die räumliche Potentialanordnung, in denen sich die Atome bewegen, ist derjenigen, die Elektronen im Metall spüren, sehr ähnlich (von Grössenverhältnissen abgesehen). Somit überrascht es nicht, dass Atome im optischen Gitter durch das Hubbard-Modell beschrieben werden können [JBC$^+$98], welches als Modell zur Beschreibung von Hochtemperatur-Supraleitung in der Festkörpertheorie untersucht wird. Die Möglichkeit der Manipulierbarkeit der Atome ist im diskreten optischen Gitter sogar in noch stärkerem Maße gegeben, als im kontinuierlichen System: Durch Variation der Laserintensitäten lässt sich das Verhältnis der Wechselwirkung zur Hüpfrate von einem Gitterplatz zum nächsten kontinuierlich durchstimmen.

Die Superfluidität in schwach wechselwirkenden fermionischen Systemen lässt sich ganz grob so verstehen, dass die Fermionen bei der kritischen Temperatur Cooper-Paare bilden, die sofort Bose-kondensieren, weil die Temperatur der Bildung von Cooper-Paaren unterhalb der Bose-Einstein-Kondensationstemperatur für ein vergleichbares Bose-System liegt (ein genaueres Bild liefert die BCS-Theorie [Mah]). Die Bildung der Cooper-Paare erfolgt aufgrund einer attraktiven Wechselwirkung zwischen den Fermionen. Wird diese stärker, so erhöht sich die Temperatur, bei der Cooper-Paare gebildet werden. Schließlich wird ein Punkt erreicht, ab dem die Temperatur für die Bildung der Paare oberhalb der Temperatur für die Bose-Einstein-Kondensation in einem vergleichbaren Bose-System liegt. Ab hier bestimmt die Bose-Einstein-Kondensationstemperatur die kritische Temperatur für den Phasenübergang zum superfluiden System. Oberhalb dieser kritischen Temperatur bezeichnet man die Paare deshalb als vorgeformte Cooper-Paare (preformed Cooper pairs). Der superfluide Phasenübergang im stark wechselwirkenden Fermi-Gas gleicht also in zahlreichen Aspekten seinem Analogon im Bose-Gas. Daher bezeichnet man den Übergang vom schwach wechselwirkenden zum stark wechselwirkenden System auch als BCS-BEC-Crossover [Hau99], [PPS04], [Ped96]. Dieser Übergang lässt sich offenbar mit attraktiven Fermionen im optischen Gitter sehr leicht untersuchen, weil sich das Verhältnis von Hüpfrate zu Wechselwirkungsstärke durch Variieren der Laserintensität sehr leicht einstellen lässt. Diese Variante des Crossovers im optischen Gitter wurde experimentell jedoch noch nicht durchgeführt. Es gibt noch ein zweites Crossover-Szenario, das ohne optisches Gitter auskommt, jedoch eine Feshbach-Resonanz erfordert: Auf der Seite der Feshbach-Resonanz, auf der der Anteil der Feshbach-Moleküle dominiert, findet bei Absenkung der Temperatur eine Bose-Einstein-Kondensation der Feshbach-Moleküle (ein Feshbach-Molekül aus zwei fermionischen Atomen ist ein Boson) statt. Auf der gegenüberliegenden Seite der Resonanz ist der superfluide Phasenübergang dagegen vom BCS-Typ. In großer Nähe zur Resonanz liegen Cooper-Paare und Feshbach-Moleküle hybridisiert vor und tragen gemeinsam zur Superfluidität bei [OG05b], [OG03]. Diese Variante des BCS-BEC-Crossovers ist bereits experimentell untersucht worden [RGJ04], [BAR$^+$04].

Die Superfluidität von flüssigem ^{3}He und die Supraleitung elektronischer Systeme sind der Superfluidität von fermionischen Atomgasen ähnlich. Jedoch weisen sie nicht die Vorteile exakt bekannter Wechselwirkungen und hoher Manipulierbarkeit der Systeme auf. Daher sollten - wie schon bei den Experimenten mit Bosonen - Untersuchungen fermionischer Atomgase wesentlich zum Verständnis der Kondensationsphänomene in Fermi-Quantenflüssigkeiten beitragen - und darüber hinaus.

1.2 Inhalt und Aufbau dieser Arbeit

Wir wenden die BCS-Theorie der Supraleitung auf fermionische Atome im optischen Gitter an. Neben zweikomponentigen Fermion-Fermion-Mischungen diskutieren wir auch Fermion-Boson-Mischungen und Fermionen, die über eine Feshbach-Resonanz wechselwirken („Fermion-Feshbach-Molekül-Mischungen“).

Im Gegensatz zur Situation im supraleitenden Festkörper, wo die Beschränkung auf lokale Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Rahmen des Hubbard-Modells eine unrealistische und sehr drastische Näherung darstellt, liegt als Konsequenz der Kurzreichweitigkeit der Atom-Atom-Wechselwirkung auf der Skala der optischen Gitterlänge bei nicht allzu seichtem Gitterpotential in sehr guter Näherung eine lokale Wechselwirkung der Atome im optischen Gitter vor. Folglich werden die hier untersuchten Systeme durch Hamilton-Operatoren beschrieben, die demjenigen des Hubbard-Modells ähneln.

Einen besonderen Stellenwert räumen wir dem parabolischen Fallenpotential ein, das die ultrakalten Atome in allen bisherigen Experimenten zusätzlich zum optischen Gitter verspürt haben. Das Fallenpotential verwandelt das Anregungskontinuum translationsinvarianter Systeme in ein diskretes Anregungsspektrum, bewirkt eine Ortsabhängigkeit zahlreicher Größen, führt eine Koexistenz unterschiedlicher Phasen (Isolator und Superfluid; s-Wellen-Superfluid und d-Wellen-Superfluid) herbei, verändert den Charakter der elementaren Anregungen und beeinflusst kollektive Moden. Die korrekte theoretische Vorhersage des Anregungsspektrums (Ein-Teilchen-Anregungen und kollektive Moden) ist insbesondere im Hinblick auf deren mögliche Relevanz als experimentelle Signatur des Übergangs zum superfluiden Zustand wichtig. Dies erfordert eine adäquate Berücksichtigung des parabolischen Fallenpotentials. Während die theoretische Untersuchung der Superfluidität von translationsinvarianten Quantenflüssigkeiten (z.B flüssiges ^{3}He und flüssiges ^{4}He) und der Supraleitung von Festkörperelektronen vom Gesichtspunkt der angewandten Methoden her betrachtet, schon sehr weit fortgeschritten ist, liegen für Fallensysteme ultrakalter Atome - und insbesondere für Fallensysteme mit zusätzlichem optischen Gitter - erst verhältnismäßig wenige Untersuchungen vor. Aus diesem Grunde beschränken wir uns im Großteil der Arbeit methodisch auf Mean-Field-Untersuchungen. Bei hinreichend schwacher Wechselwirkung liefert die Mean-Field-Theorie eine adäquate Beschreibung der Systeme.

Kapitel 2 erläutert die wesentlichen Grundtatsachen des optischen Gitters und führt einen Teil der Notation ein. Des weiteren werden die mikroskopischen Parameter des zu beschreibenden Vielteilchensystems (Hüpfkonstanten und Wechselwirkungsstärken) mit den Kenngrößen des optischen Gitters in Verbindung gebracht. Dies ist die Grundlage einiger konkreter Betrachtungen zum Verhältnis zwischen Experiment und Theorie.

Nach der Darstellung eines Großteils der in dieser Arbeit verwendeten Methoden widmet sich Kapitel 3 der zweikomponentigen Fermion-Fermion-Mischung im optischen Gitter. Hierbei wird angenommen, dass sich die Fermionen an sich - ohne Unterstützung durch eine Feshbach-Resonanz oder eine Bosonen-induzierte Wechselwirkung - gegenseitig anziehen. Es wird gezeigt, dass das Anregungsspektrum sich möglicherweise als experimentelle Signatur für den Übergang zur Superfluidität eignet. Die zuverlässige theoretische Vorhersage des Anregungsspektrums erfordert die korrekte Berücksichtigung des parabolischen Potentials. Die Local Density Approximation reicht hierzu nicht aus.

In Kapitel 4 studieren wir Boson-Fermion-Mischungen im optischen Gitter. Die Bosonen induzieren eine zusätzliche Wechselwirkung zwischen den Fermionen. Neben einem lokalen Anteil beinhaltet die induzierte Wechselwirkung auch nicht-lokale Anteile. Unter bestimmten Bedingungen ist der nicht-lokale Anteil auf nächste Nachbarn beschränkt. Es ist bekannt, dass eine zusätzliche Nächst-Nachbar-Wechselwirkung im Hubbard-Modell mit der Möglichkeit zu unkonventionellen Typen von Superfluidität einhergeht: p- und d-Wellen. Wir betrachten in Kapitel 4 zwei Gittertypen, die im Kontext der unkonventionellen Superfluidität in der Literatur bisher kaum untersucht worden sind: Das dreidimensionale kubische Gitter und das zweidimensionale hexagonale Gitter. Ferner zeigen wir in Kapitel 4, dass die Anwesenheit eines zusätzlichen harmonischen Fallenpotentials im optischen Gitter zur Koexistenz unterschiedlicher Typen von Superfluidität führen kann.

Kapitel 5 beschäftigt sich mit Feshbach-Resonanzen im optischen Gitter und dem damit verbundenen Crossover. Feshbach-Resonanzen erlauben es, die Wechselwirkung kontinuierlich zwischen attraktiv und repulsiv zu variieren. Auf der attraktiven Seite der Resonanz ist BCS-Superfluidität möglich. Auf der repulsiven Seite liegen zusätzliche bosonische Feshbach-Moleküle vor, die Bose-Einstein-Kondensation aufweisen können. Wieder führt das zusätzliche Fallenpotential zu großen Unterschieden im Vergleich mit dem translationsinvarianten Fall. Ebenso verändert jedoch auch das optische Gitter die Situation bei Vergleich mit einem kontinuierlichen Fallensystem.

2 Atome im optischen Gitter

Die Interferenz eines Laserstrahls mit seiner Retroreflexion führt zur Ausbildung eines stationären Intensitätsprofils (siehe Abb. 2.1). Durch Überlagerung von zwei bis drei paarweise senkrechten Superpositionen kontrapropagierender Laserstrahlen sind die höherdimensionalen Verallgemeinerungen gegeben. Eine solche periodische Intensitätsverteilung, bei der die Intensitätsmaxima auf einem Gitter liegen, wird als optisches Gitter bezeichnet.

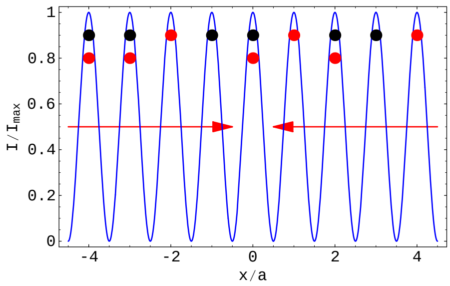


Abbildung 2.1: Die Überlagerung gegenläufiger Laserstrahlen führt zu einer stationären Intensitätsverteilung. In den Intensitätsmaxima ist die potentielle Energie der Atome minimal.

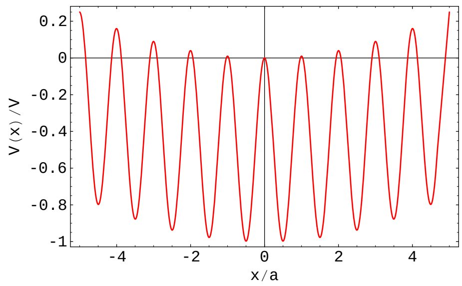


Abbildung 2.2: Potential in 1D. Dem optischen Gitter ist ein parabolisches Potential überlagert, um die Atome gefangen zu halten.

Das induzierte elektrische Dipolmoment eines in einem solchen Lichtfeld befindlichen Atoms schwingt mit der Frequenz des Lichtfeldes. Liegt die Lichtfrequenz unterhalb der Anregungsfrequenz des Atoms (rotverstimmter Laser), so schwingen elektrisches Feld und induziertes Dipolmoment im Wesentlichen parallel und folglich weist die potentielle Energie des Atoms in den Intensitätsmaxima des Lichtfeldes Minima auf (ac-Stark shift). Bei blauverstimmtem Laserfeld stellen die Intensitätsminima des Lichtfeldes Minima der potentiellen Energie des Atoms dar.

Die Kraft (Dipolkraft), die sich aus der Wechselwirkung des induzierten elektrischen Dipolmomentes mit dem elektrischen Feld ergibt, ist konservativ. Neben dieser konservativen Kraft wirkt auf das Atom eine weitere Kraft, die von der spontanen Emission herrührt und dissipativ ist. Wird die Verstimmung des Lichtfeldes gegenüber der Anregungsfrequenz des Atoms erhöht, so nimmt der dissipative Anteil schneller ab, als der konservative Anteil. Durch proportionale Vergrößerung von Verstimmung und Intensität lässt sich der dissipative Anteil beliebig verkleinern, wobei der konservative nahezu nicht verändert wird. Somit werden wir im Folgenden stets ein rein konservatives Kraftfeld annehmen [PS02], [PS03], [Gre03], [vO04].

Atome in einem optischen Gitter können durch die Potentialberge tunneln (sie hüpfen von Gitterplatz zu Gitterplatz). Da die im Experiment untersuchten Systeme eine endliche Größe aufweisen müssen, bedarf es eines zusätzlichen Fallenpotentials, um das Davonhüpfen der Atome aus dem System zu verhindern. In aller Regel ist dieses zusätzliche Potential parabolisch [Gre03]. Die im Experiment verwendeten Potentiale haben also die in Abb. 2.2 für den eindimensionalen Fall veranschaulichte Gestalt.

2.1 Translationsinvariantes optisches Gitter in 1D

Zunächst berücksichtigen wir das parabolische Fallenpotential nicht. Außerdem nehmen wir wie oben erläutert an, dass das Kraftfeld konservativ ist. Dann bewegen sich die Atome im eindimensionalen optischen Gitter im Potential ([Gre03], [vO04])

$$V(x) = -V \cos^2(\frac{\pi x}{a}). \tag{2.1}$$

Dabei ist a die Gitterlänge, die durch die Hälfte der Wellenlänge des Lasers bestimmt ist. Die Amplitude V des periodischen Potentials hängt folgendermaßen mit der Verstimmung δ und der Rabifrequenz Ω_R zusammen:

$$V = -\frac{\hbar\Omega_R^2}{4\delta}. \tag{2.2}$$

Für ein rotverstimmtes optisches Gitter ist die Verstimmung δ negativ und die Potentialtiefe V somit positiv. Die Verknüpfung mit der Intensität I des Laserfeldes folgt aus $I \propto \Omega_R^2$. Die stationären Zustände eines Atoms in diesem periodischen Potential ergeben sich aus der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - V\cos^2(\frac{\pi x}{a})]\psi(x) = E\psi(x). \tag{2.3}$$

Natürlich ist m hierbei die Masse des Atoms und E die Energie des Zustandes.

Transformation auf die Mathieusche Differentialgleichung. Wird ein ruhendes Atom durch Licht der Wellenzahl k angeregt, so beträgt seine kinetische Energie nach der Wechselwirkung

$$E_R = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}. \tag{2.4}$$

E_R wird als Rückstoßenergie bezeichnet und gerne als Energieskala des optischen Gitters verwendet. Um Klarheit über die Größenordnungen zu gewinnen, betrachten wir als Beispiel ^{40}K im Laserfeld mit $\lambda =$ 800nm. Hierfür ergibt sich:

$$E_R \approx 5.17\cdot 10^{-30}\text{J} \approx 3.23\cdot 10^{-11}\text{eV} \approx 3.75\cdot 10^{-7}\text{K}. \tag{2.5}$$

Die kritische Temperatur des Phasenübergangs zur Superfluidität liegt für unsere Beispiele in der Größenordnung von einem Hundertstel der Rückstoßenergie, d.h. von 1nK (siehe Kapitel 3).

Führen wir die Ersetzungen

$$\frac{x}{a} \to y, \quad \frac{E}{E_R} \to \epsilon, \quad \frac{V}{E_R} \to \eta \tag{2.6}$$

durch, so erhalten wir aus (2.3) die dimensionslose Differentialgleichung

$$[-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} - \eta\cos^2(\pi y)]\phi(y) = \epsilon\phi(y). \tag{2.7}$$

Diese lässt sich mittels der Substitutionen

$$\pi y \to \zeta, \quad \frac{1}{2}\eta + \epsilon \to a_m, \quad \frac{1}{2}\eta \to -2q \tag{2.8}$$

und unter Berücksichtigung der Identität

$$\cos^2(\zeta) = \frac{1}{2}[1 + \cos(2\zeta)] \tag{2.9}$$

in die Mathieusche Differentialgleichung umformen:

$$[\frac{\partial^2}{\partial\zeta^2} + (a_m - 2q\cos(2\zeta))]F(\zeta) = 0. \tag{2.10}$$

Mathieufunktionen. Gemäß dem Floquetschen Theorem besitzt (2.10) eine Lösung der Form

$$F_r(\zeta) = e^{ir\zeta}P_r(\zeta), \tag{2.11}$$

wobei der charakteristische Exponent r durch a_m und q festgelegt und $P_r(\zeta)$ eine in π periodische Funktion ist ([AS84]). Weiterhin lässt sich der Realteil Re(r) auf das Intervall $-1 \le r \le 1$ beschränken wegen der

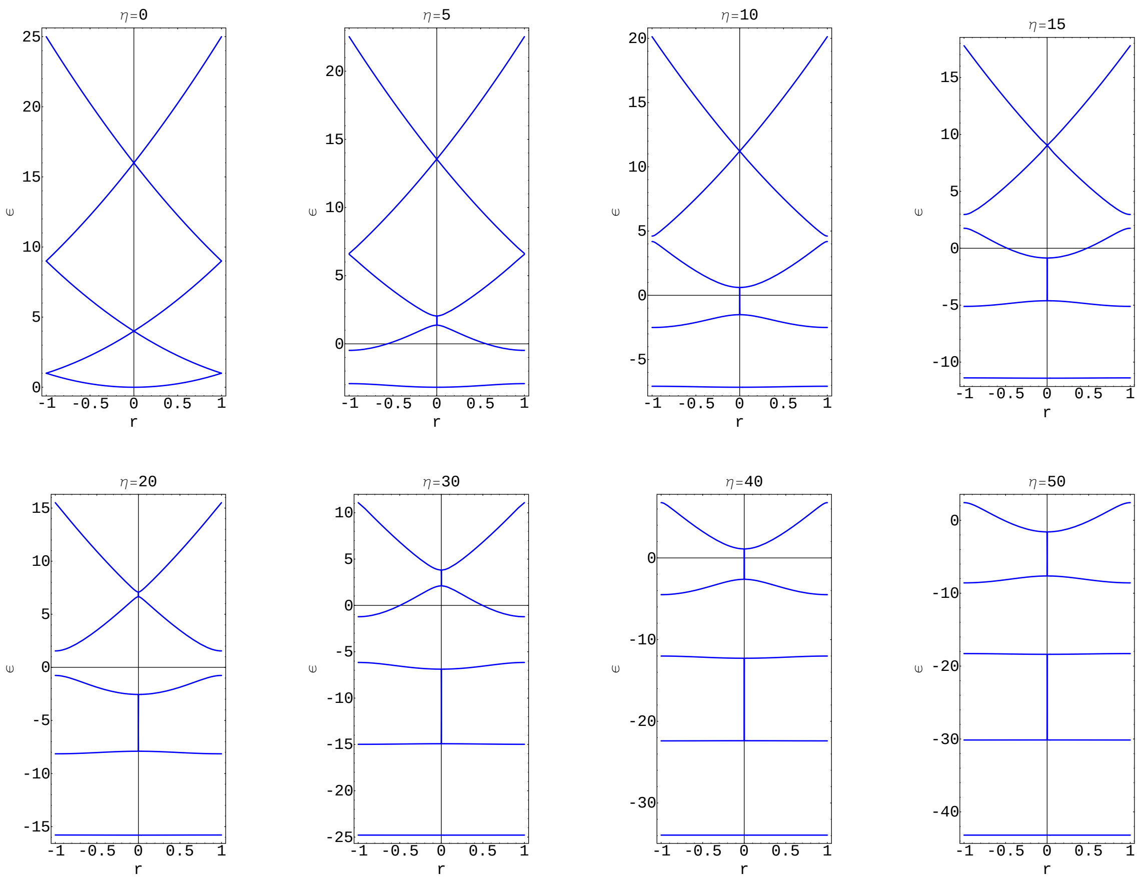


Abbildung 2.3: Energiebänder für die Potentialtiefen $\eta = 0, 5, 10, 15, 20, 30, 40$ und 50.

Periodizität von $P_r(\zeta)$. Offensichtlich ist das Floquetsche Theorem der eindimensionale Spezialfall des Blochschen Theorems. Die Darstellbarkeit von $F_r(\zeta)$ als diskrete Fouriersumme motiviert den Ansatz

$$F_r(\zeta) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{i(r+2k)\zeta} \tag{2.12}$$

zur Lösung von (2.10). Einsetzen von (2.12) in (2.10) liefert die Rekursionsgleichungen

$$-(2k+r)^2 c_k + a_m c_k - q c_{k-1} - q c_{k+1} = 0. \tag{2.13}$$

Bei vorgegebenen r und q ist (2.13) eine Eigenwertgleichung für $a_m = a_m(q, n, r)$. Hierbei nummeriert n die Eigenwerte. Abbildung 2.3 zeigt die r-Abhängigkeit der Energie $\epsilon(\eta, n, r) = a_m(q = -\frac{1}{4}\eta, n, r) - \frac{1}{2}\eta$ für eine Auswahl an Potentialamplituden η. Die für periodische Potentiale typische Bandstruktur ist offensichtlich.

Aus den Eigenvektoren in (2.13) folgt schließlich $F_r(\zeta)$. Sind $F_r(\zeta)$ und $F_{-r}(\zeta)$ linear unabhängig, so lässt sich auf diesem Wege das gesamte Fundamentalsystem ermitteln, denn $a_m(-\frac{1}{4}\eta, n, r)$ ist gerade in r [AS84]. Die lineare Unabhängigkeit von $F_r(\zeta)$ und $F_{-r}(\zeta)$ ist offensichtlich, wenn r keine ganze Zahl ist.

Wir bemerken ferner, dass es zu komplexem r durchaus reelle Eigenwerte a_m geben kann. Diese entsprechen den Energiebereichen, die beim Übergang von einer Brillouinzone in die dazu benachbarte und in den Zonenzentren übersprungen werden, wie in Abbildung 2.4 veranschaulicht. Die zugehörigen Lösungen $F_r(\zeta)$ zeigen jedoch exponentielles Wachstum und sind somit zur Beschreibung unendlich ausgedehnter Systeme ungeeignet.

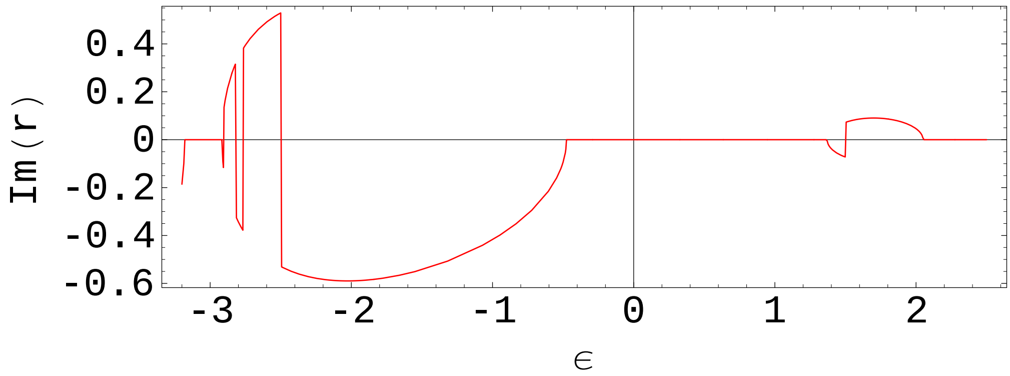


Abbildung 2.4: Der Imaginärteil von r als Funktion der Energie ϵ für $\eta = 5$.

Die Lösungen der Mathieuschen Differentialgleichung werden häufig in Form der geraden Mathieufunktion $\text{evenmathieu}(a_m, q, \zeta)$ und der ungeraden Mathieufunktion $\text{oddmathieu}(a_m, q, \zeta)$ angegeben [Wol]. Wählt man die Koeffizienten c_k in (2.12) reell, so gilt der Zusammenhang

$$\begin{aligned} \text{evenmathieu}(a_m, q, \zeta) &= \text{Re}(F_r(\zeta)) \\ \text{oddmathieu}(a_m, q, \zeta) &= \text{Im}(F_{|r|}(\zeta)). \end{aligned} \tag{2.14}$$

Abbildung 2.5 illustriert evenmathieu und oddmathieu für η=5 und einige Werte für r.

Die allgemeine Lösung von (2.7) lässt sich schreiben als

$$\phi(y) = A\,\text{evenmathieu}(\frac{1}{2}\eta + \epsilon, -\frac{1}{4}\eta, \pi y) + B\,\text{oddmathieu}(\frac{1}{2}\eta + \epsilon, -\frac{1}{4}\eta, \pi y) \tag{2.15}$$

mit beliebigen komplexen Konstanten A und B.

Blochfunktionen. Zu gegebener Energie ϵ lassen sich zwei Blochfunktionen angeben (wenn das zugehörige r keine ganze Zahl ist):

$$\begin{aligned} \phi_+(y) = F_{|r|}(\pi y) &= \text{evenmathieu}(\frac{1}{2}\eta + \epsilon, -\frac{1}{4}\eta, \pi y) \\ &\quad + i\,\text{oddmathieu}(\frac{1}{2}\eta + \epsilon, -\frac{1}{4}\eta, \pi y), \\ \phi_-(y) = F_{-|r|}(\pi y) &= \text{evenmathieu}(\frac{1}{2}\eta + \epsilon, -\frac{1}{4}\eta, \pi y) \\ &\quad - i\,\text{oddmathieu}(\frac{1}{2}\eta + \epsilon, -\frac{1}{4}\eta, \pi y). \end{aligned} \tag{2.16}$$

Wir parametrisieren die Energiebänder von nun an durch den Parameter $k = \pi r$ mit $-\pi \leq k \leq \pi$, und schreiben zusammenfassend:

$$\begin{aligned} \text{bloch}(\eta, n, k, y) := &\,\text{evenmathieu}(a_m(-\frac{1}{4}\eta, n, \frac{k}{\pi}), -\frac{1}{4}\eta, \pi y) \\ &+ \text{sign}(k) i\,\text{oddmathieu}(a_m(-\frac{1}{4}\eta, n, \frac{k}{\pi}), -\frac{1}{4}\eta, \pi y). \end{aligned} \tag{2.17}$$

(2.17) besitzt die Energie

$$\epsilon(\eta, n, k) := a_m(-\frac{1}{4}\eta, n, r) - \frac{1}{2}\eta. \tag{2.18}$$

Weiter unten werden wir vom bisher betrachteten Einteilchen- zum Vielteilchenproblem übergehen. Wir stellen bereits jetzt fest, dass bei ausreichend kleinen Temperaturen und einem Füllfaktor (Zahl der Atome pro Gitterplatz) kleiner als 2 nur das niedrigste Energieband mit $n = 1$ besetzt wird. Im nächsten Kapitel

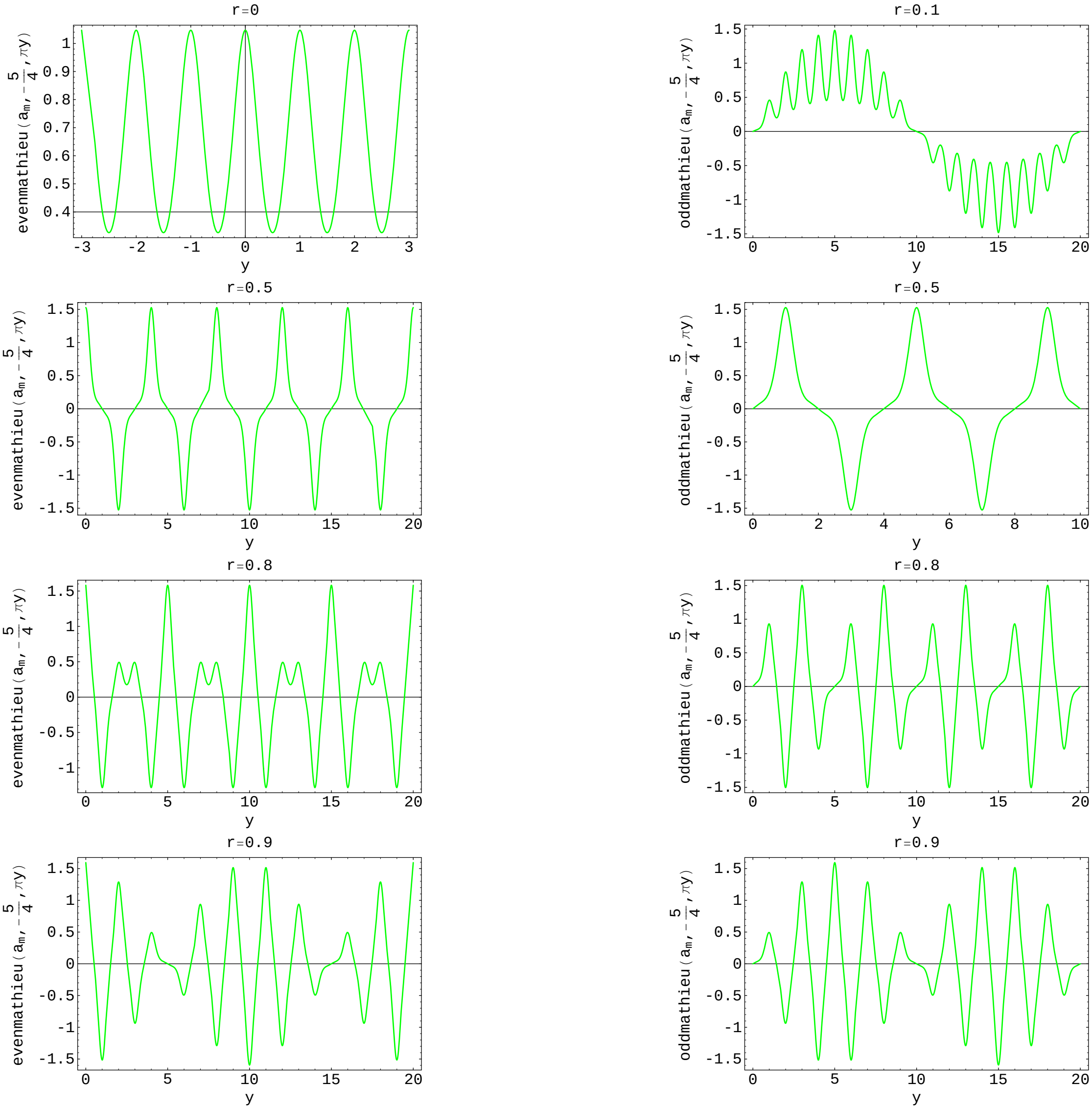


Abbildung 2.5: Mathieusche Funktionen für $\eta = 5$

wird sich zeigen, dass sich die kritische Temperatur des Übergangs zur Superfluidität in den hier untersuchten Beispielen in der Größenordnung von einem Zehntel der Bandbreite des niedrigsten Blochbandes bewegt. Aus Abb. 2.3 ist dann unmittelbar klar, dass das Temperaturkriterium für $\eta \geq 5$ sehr gut erfüllt ist, sofern die kritische Temperatur nicht um Größenordnungen überschritten wird. Folglich beschränken wir uns fortan auf das Energieband mit der kleinsten Energie:

$$\begin{aligned} &\mathrm{bloch}(\eta, k, y) := \mathrm{bloch}(\eta, 1, k, y) \\ &\epsilon(\eta, k) := \epsilon(\eta, 1, k). \end{aligned} \tag{2.19}$$

Damit diese Näherung anwendbar ist, darf außerdem die attraktive Wechselwirkung der Atome nicht zu stark sein. Andernfalls könnten die Atome durch Clusterbildung die Energie minimieren, wobei ein Teil des Clusters in höheren Energiebändern angesiedelt wäre.

Wannierfunktionen. Betrachtet werde ein Gitter mit $\mathcal{N}$ Gitterplätzen und periodischen Randbedingungen. Dann sind die Wellenzahlen k diskret:

$$k_n = \frac{2\pi n}{\mathcal{N}} \tag{2.20}$$

mit

$$-\frac{\mathcal{N}-2}{2} \leq n \leq \frac{\mathcal{N}}{2} \tag{2.21}$$

für $\mathcal{N}$ gerade, bzw.

$$-\frac{\mathcal{N}-1}{2} \leq n \leq \frac{\mathcal{N}-1}{2} \tag{2.22}$$

für $\mathcal{N}$ ungerade. Die Blochfunktionen seien normiert, d.h. z.B. für $\mathcal{N}$ ungerade soll gelten:

$$\int_{-\frac{\mathcal{N}-1}{2}}^{\frac{\mathcal{N}-1}{2}} |\,\mathrm{bloch}(\eta, k, y)|^2 \, dy = 1. \tag{2.23}$$

Die Wannierfunktion am j-ten Gitterplatz ist durch

$$\mathrm{w}(\eta, y - j) := \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}} \sum_k \mathrm{bloch}(\eta, k, y - j) \tag{2.24}$$

definiert. Im Gegensatz zu den über das gesamte Gitter delokalisierten Blochfunktionen ist die Wannierfunktion $\mathrm{w}(y - j)$ am j-ten Gitterplatz lokalisiert. Abbildung 2.6 zeigt die Wannierfunktionen für $\eta = 1$, $\eta = 5$, $\eta = 12$ und $\eta = 30$ bei jeweils 10000 Gitterplätzen. Die Lokalisierung wächst mit der Potentialtiefe. Bei $\eta = 1$ und $\eta = 5$ sind noch deutlich die Seitenflügel erkennbar.

Die Beschreibung eines Gittersystems mit Blochfunktionen entspricht der Diskussion im Impulsraum. Dieses Vorgehen bietet sich bei translationsinvarianten Problemen an. Die Einführung von Wannierfunktionen, d.h. der Übergang zur Ortsraumdarstellung, wird in unserem Fall wegen des parabolischen Fallenpotentials, das die Translationsinvarianz aufhebt, erforderlich.

2.2 Das optische Gitter in höheren Dimensionen

Effektiv ein- und zweidimensionale optische Gitter können durch dreidimensionale realisiert werden, deren Potentialtiefen in zwei bzw. einer Richtung die Potentialtiefen der verbleibenden Richtungen stark übertreffen, so dass zwei bzw. ein Bewegungsfreiheitsgrad effektiv eingefroren wird. In Abschnitt 2.3 wird sich jedoch zeigen, dass bei der Bestimmung der Modellparameter niedrigdimensionaler Systeme die Wannierfunktionen der eingefrorenen Richtungen eingehen.

In den folgenden Kapiteln werden wir zwei- und dreidimensionale Systeme untersuchen. Ausgehend von den Resultaten des vorangehenden Abschnitts für das eindimensionale optische Gitter wird in diesem Abschnitt das dreidimensionale orthorhombische optische Gitter untersucht.

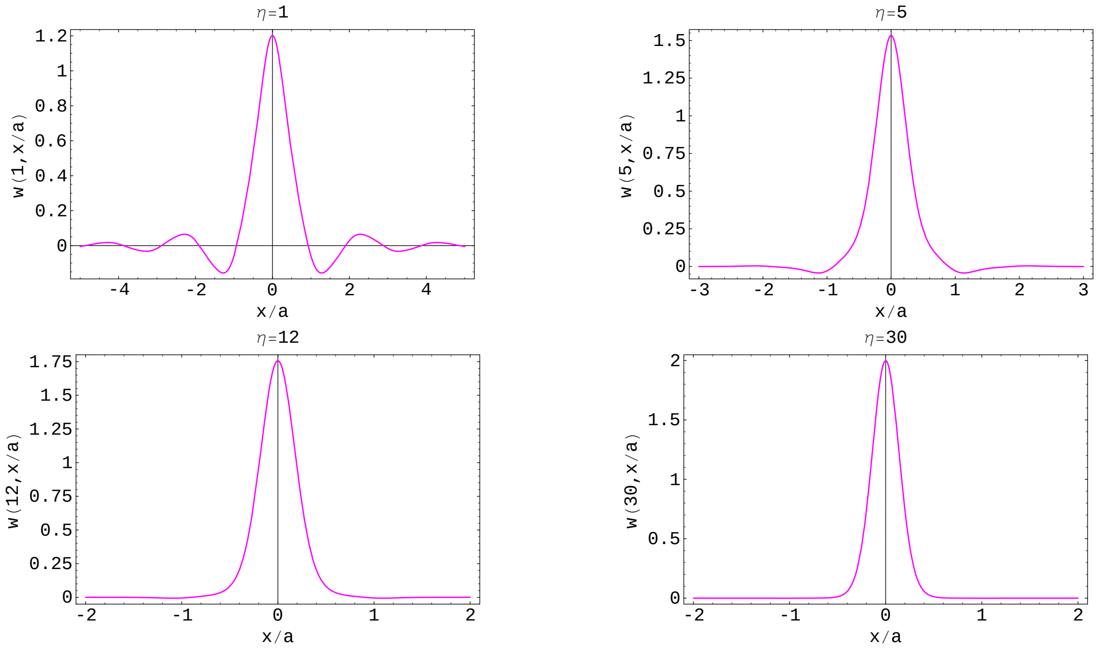


Abbildung 2.6: Wannierfunktionen für $\eta = 1$, $\eta = 5$, $\eta = 12$ und $\eta = 30$.

Im translationsinvarianten orthorhombischen optischen Gitter ergeben sich die stationären Zustände eines Atoms aus der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{x})\right]\Psi(\vec{x}) = E\Psi(\vec{x}). \tag{2.25}$$

Das Potential

$$V(\vec{x}) = -V_1\cos^2(k_1x_1) - V_2\cos^2(k_2x_2) - V_3\cos^2(k_3x_3) \tag{2.26}$$

ist durch die Wellenzahlen $k_i = \frac{2\pi}{\lambda_i} = \frac{\pi}{a_i}$ (mit den Gitterkonstanten $a_i = \frac{\lambda_i}{2}$) und die Potentialtiefen V_i in den drei Raumrichtungen bestimmt. Wir formen (2.25) gemäß (2.4) und (2.6) um:

$$\sum_{i=1}^{3} E_{R,i}\left[-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_i^2} - \eta_i\cos^2(\pi y_i)\right]\psi(\vec{y}) = E\psi(\vec{y}). \tag{2.27}$$

Hierbei sind $E_{R,i}$ die Rückstoßenergien für die drei Raumrichtungen:

$$E_{R,i} := \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma_i^2}. \tag{2.28}$$

Die Lösungen von (2.27) lauten

$$\Psi(\vec{y}) = \mathrm{bloch}(\eta_1, k_1, y_1)\,\mathrm{bloch}(\eta_2, k_2, y_2)\,\mathrm{bloch}(\eta_3, k_3, y_3) \tag{2.29}$$

mit den zugehörigen Eigenenergien

$$E(\vec{k}) = E_{R,1}\,\epsilon(\eta_1, k_1) + E_{R,2}\,\epsilon(\eta_2, k_2) + E_{R,3}\,\epsilon(\eta_3, k_3). \tag{2.30}$$

Die Wannierfunktionen sind durch

$$\begin{aligned}
\mathrm{w}(\vec{\eta}, \vec{y} - \vec{m}) &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\sum_{k_1}\sum_{k_2}\sum_{k_3}\mathrm{bloch}(\eta_1, k_1, y_1 - m_1)\,\mathrm{bloch}(\eta_2, k_2, y_2 - m_2)\,\mathrm{bloch}(\eta_3, k_2, y_3 - m_3)\\
&= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_1}}\sum_{k_1}\mathrm{bloch}(\eta_1, k_1, y_1 - m_1)\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_2}}\sum_{k_2}\mathrm{bloch}(\eta_2, k_2, y_2 - m_2)\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}_3}}\sum_{k_3}\mathrm{bloch}(\eta_3, k_2, y_3 - m_3)\\
&= \mathrm{w}(\eta_1, y_1 - m_1)\,\mathrm{w}(\eta_2, y_2 - m_2)\,\mathrm{w}(\eta_3, y_3 - m_3)
\end{aligned} \tag{2.31}$$

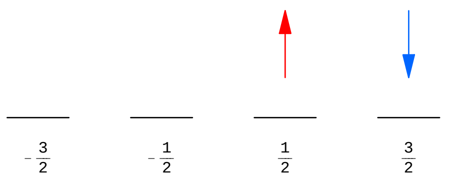


Abbildung 2.7: Magnetische Unterzustände zum Gesamtdrehimpuls $\frac{3}{2}$. Häufig werden Mischungen von zwei Unterzuständen betrachtet.

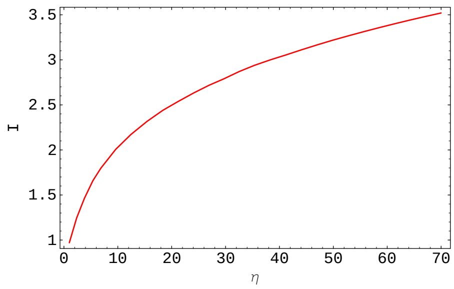


Abbildung 2.8: Lokales Wechselwirkungsintegral I in Abhängigkeit der Fallentiefe η.

gegeben. Dabei bezeichnet $\mathcal{N}_i$ die Zahl der Gitterplätze in $i-$Richtung. Es gilt $\mathcal{N} = \mathcal{N}_1\mathcal{N}_2\mathcal{N}_3$.

Bei komplizierteren Gittertypen (nicht orthorhombisch) faktorisiert die Einteilchen-Wellenfunktion nicht in die Blochfunktionen der drei Raumrichtungen. In solchen Fällen muss die mehrdimensionale Verallgemeinerung von (2.13) betrachtet werden.

2.3 Tight-Binding-Approximation und Hubbard-Modell

Bei tiefen Temperaturen wird die Wechselwirkung zwischen Atomen durch s-Wellen-Streuung dominiert. Für identische fermionische Spezies wird die s-Wellen-Streuung jedoch durch das Pauli-Prinzip verboten. Einkomponentige fermionische Atomgase bei ultraniedrigen Temperaturen können somit in sehr guter Näherung als nicht wechselwirkend angesehen werden. Aus diesem Grunde betrachten wir Mischungen von zwei Hyperfeinspezies eines fermionischen Elementes. Aufgrund der Ähnlichkeit mit elektronischen Systemen - hier gibt es zwei mögliche Spineinstellungen des Elektrons - bezeichnen wir einen Hyperfeinzustand unserer Mischung mit $\uparrow$ und den anderen mit $\downarrow$ (siehe Abb. 2.7). $\uparrow$ und $\downarrow$ werden als Pseudospins bezeichnet.

Wechselwirkende Atome im optischen Gitter mit überlagertem harmonischen Fallenpotential werden durch den Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H = \sum_\sigma \int d^3y \hat{\Psi}^\dagger_\sigma(\vec{y}) [& E_{R,1}(-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \eta_1 \cos^2(\pi y_1)) + \\ & E_{R,2}(-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2} - \eta_2 \cos^2(\pi y_2)) + \\ & E_{R,3}(-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_3^2} - \eta_3 \cos^2(\pi y_3)) - \mu] \hat{\Psi}_\sigma(\vec{y}) + \\ \frac{1}{2}\sum_\sigma \int & d^3y d^3z \hat{\Psi}^\dagger_\sigma(\vec{y}) \hat{\Psi}^\dagger_{-\sigma}(\vec{z}) U(\vec{y}-\vec{z}) \hat{\Psi}_{-\sigma}(\vec{z}) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{y}) + \\ \sum_\sigma \int & d^3y \hat{\Psi}^\dagger_\sigma(\vec{y}) (\Omega_1 y_1^2 + \Omega_2 y_2^2 + \Omega_3 y_3^2) \hat{\Psi}_\sigma(\vec{y}) \end{aligned} \tag{2.32}$$

beschrieben. Hierbei sind $\hat{\Psi}_\sigma(\vec{y})$ der Feldoperator (Vernichter eines fermionischen Atoms mit Pseudospin σ am Ort $\vec{y}$), $U(\vec{y})$ das Wechselwirkungspotential der Atome und $\Omega_i y_i^2$ die potentiellen Energien auf Grund des parabolischen Potentials für die drei Raumrichtungen. μ ist das chemische Potential (wir rechnen großkanonisch).

Die Atom-Atom-Wechselwirkung lässt sich durch das Pseudopotential [PS02]

$$U(\vec{y}-\vec{z}) = \frac{4\pi a_s \hbar}{m}\delta(\vec{y}-\vec{z}) \tag{2.33}$$

	$\eta_i = 1$	$\eta_i = 5$	$\eta_i = 30$
$s = 0$	-0.229	-3.05	-24.8
$s = 1$	-0.356	-0.132	$-9.26 \cdot 10^{-4}$
$s = 2$	0.0706	0.00679	$1.74 \cdot 10^{-7}$
$s = 3$	-0.0239	$-5.64 \cdot 10^{-4}$	$-5.08 \cdot 10^{-11}$
$s = 4$	0.00991	$5.67 \cdot 10^{-5}$	$1.84 \cdot 10^{-14}$
$s = 5$	-0.00458	$-6.29 \cdot 10^{-6}$	$2.64 \cdot 10^{-16}$

Tabelle 2.1: Die Hüpfkonstanten $J_s(\eta_i)$ für die Potentialtiefen $\eta = 1$, 5 und 30.

beschreiben, wobei a_s die s-Wellen-Streulänge ist. Ursprung der Atom-Atom-Wechselwirkung ist die van-der-Waals-Kraft. Diese ist natürlich zunächst keine Kontaktwechselwirkung der Form (2.33). Bei tiefen Temperaturen lässt sich die Streuung jedoch bereits durch die Angabe von nur einem Parameter - der s-Wellen-Streulänge a_s - vollständig beschreiben. Die Ersetzung des komplexen van-der-Waals-Potentials durch (2.33) in Berechnungen liefert dann dieselben Resultate.

Der Feldoperator $\hat{\Psi}_\sigma(\vec{y})$ lässt sich in der Basis der Wannierfunktionen entwickeln, wobei wir nur das 1. Energieband berücksichtigen:

$$\hat{\Psi}_\sigma(\vec{y}) = \sum_{\vec{l}} \mathrm{w}(\vec{\eta}, \vec{y} - \vec{l})\hat{c}_\sigma(\vec{l}). \tag{2.34}$$

Hierbei ist $\hat{c}_\sigma(\vec{l})$ der Vernichtungsoperator für ein Atom mit Pseudospin σ am Gitterplatz $\vec{l}$.

Als erstes vereinfachen wir den Ausdruck für die kinetische Energie in (2.32). Dazu wird zunächst (2.34) in (2.32) eingesetzt. Es gilt

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{w}^*(\eta_i, y_i - l_i)\big[-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_i^2} - \eta_i \cos^2(\pi y_i)\big]\, \mathrm{w}(\eta_i, y_i)\, d\, y_i = \\ &\frac{1}{\mathcal{N}_i}\sum_{k_i'}\sum_{k_i}\int \mathrm{bloch}^*(\eta_i, k_i', y_i - l_i)\epsilon(\eta_i, k_i)\,\mathrm{bloch}(\eta_i, k_i, y_i)\, d\, y_i = \\ &\frac{1}{\mathcal{N}_i}\sum_{k_i} e^{ik_i l_i}\epsilon(\eta_i, k_i) = \\ &\frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos(k_i l_i)\epsilon(\eta_i, k_i)\, d\, k_i. \end{aligned} \tag{2.35}$$

Da $\epsilon(\eta_i, k_i)$ an den Stellen $k_i = 0$ (ϵ ist gerade in k_i und differenzierbar bei $k_i = 0$) und $k_i = \pi$ (van Hove Singularität der Zustandsdichte) die Steigung null besitzt, lässt sich $\epsilon(\eta_i, k_i)$ durch eine endliche cos-Fourierreihe annähern:

$$\epsilon(\eta_i, k_i) = J_0(\eta_i) + J_1(\eta_i)\cos(k_i) + J_2(\eta_i)\cos(2k_i) + ... \tag{2.36}$$

Einsetzen von (2.36) in (2.35) führt auf

$$\begin{aligned} &\int \mathrm{w}^*(\eta_i, y_i - l_i)\big[-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_i^2} - \eta_i \cos^2(\pi y_i)\big]\, \mathrm{w}(\eta_i, y_i)\, d\, y_i = \\ &J_0(\eta_i)\delta_{0,l_i} + \frac{J_1(\eta_i)}{2}\delta_{1,|l_i|} + \frac{J_2(\eta_i)}{2}\delta_{2,|l_i|} + \frac{J_3(\eta_i)}{2}\delta_{3,|l_i|} + \frac{J_4(\eta_i)}{2}\delta_{4,|l_i|} + \dots \end{aligned} \tag{2.37}$$

Also ist der Koeffizient $J_l(\eta_i)$ in (2.36) ein Maß für die Tunnelwahrscheinlichkeit eines Atoms zu einem Gitterplatz in der Entfernung l. Tabelle 2.1 zeigt die numerischen Werte der Koeffizienten der Entwicklung (2.36) für eine Auswahl an Potentialtiefen η_i. Offensichtlich ist bei mittleren und großen Amplituden des Potentials lediglich das Tunneln zum nächsten Nachbarn von Belang. Für kleine η_i wird jedoch erwartungsgemäß das Hüpfen zu übernächsten und weiter entfernten Nachbarn möglich. Bei $\eta_i = 1$ etwa beträgt die Hüpfamplitude $J_2(1)$ 20% der Hüpfamplitude $J_1(1)$. Ist η_i jedoch ausreichend groß, so gilt in sehr guter Näherung

$$\epsilon(\eta, k) = \frac{1}{2}(\epsilon(\eta, \pi) + \epsilon(\eta, 0)) - \frac{1}{2}(\epsilon(\eta, \pi) - \epsilon(\eta, 0))\cos(k). \tag{2.38}$$

	$\eta = 1$	$\eta = 5$	$\eta = 30$
$(j,k,l) = (0,0,0)$	0.97	1.62	2.8
$(j,k,l) = (0,0,1)$	$-3.4 \cdot 10^{-3}$	$-1.96 \cdot 10^{-2}$	$-2.56 \cdot 10^{-4}$
$(j,k,l) = (0,1,1)$	$5.1 \cdot 10^{-2}$	$3.58 \cdot 10^{-3}$	$8.65 \cdot 10^{-8}$
$(j,k,l) = (0,0,2)$	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$2.45 \cdot 10^{-3}$	$-8.2 \cdot 10^{-5}$
$(j,k,l) = (0,2,2)$	$6.6 \cdot 10^{-3}$	$2.81 \cdot 10^{-5}$	$4.8 \cdot 10^{-9}$
$(j,k,l) = (0,1,2)$	$-9.4 \cdot 10^{-3}$	$-1.76 \cdot 10^{-4}$	$7.47 \cdot 10^{-9}$
$(j,k,l) = (1,1,2)$	$-2.1 \cdot 10^{-2}$	$-5.29 \cdot 10^{-4}$	$1.59 \cdot 10^{-8}$

Tabelle 2.2: Das Integral $\int \mathrm{w}^*(\eta,y)\,\mathrm{w}^*(\eta,y-j)\,\mathrm{w}(\eta,y-k)\,\mathrm{w}(\eta,y-l)dy$ für die Potentialtiefen $\eta = 1, 5$ und 30 .

Damit wird das Hüpfintegral (2.35) für $l_i = \pm 1$

$$\begin{aligned}\frac{t_i}{E_{R,i}} &:= -\int dy_i\,\mathrm{w}^*(\eta_i, y_i \pm 1)\big[-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_i^2} - \eta_i \cos^2(\pi y_i)\big]\,\mathrm{w}(\eta_i, y_i) \\ &= -\frac{1}{\pi}\int_0^\pi \cos(k_i)\epsilon(\eta_i,k_i)dk_i \\ &= \frac{1}{4}(\epsilon(\eta_i,\pi) - \epsilon(\eta_i,0))\end{aligned} \tag{2.39}$$

mit $i \in \{1,2,3\}$. Mit (2.39) gilt

$$\begin{aligned}\int d^3y w^*(\vec{y}-\vec{l})\big[&(-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \eta_1\cos^2(\pi y_1))E_{R,1} + \\ &(-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_2^2} - \eta_2\cos^2(\pi y_2))E_{R,2} + \\ &(-\frac{1}{\pi^2}\frac{\partial^2}{\partial y_3^2} - \eta_3\cos^2(\pi y_3))E_{R,3}\big]w(\vec{y}) \\ &= \begin{cases} -t_1 \text{ für } l_1 = \pm 1 \text{ und } |\vec{l}| = 1 \\ -t_2 \text{ für } l_2 = \pm 1 \text{ und } |\vec{l}| = 1 \\ -t_3 \text{ für } l_3 = \pm 1 \text{ und } |\vec{l}| = 1 \\ 0 \text{ für } |\vec{l}| > 1 \end{cases}\end{aligned} \tag{2.40}$$

Der Beitrag $|\vec{l}| = 0$ verschiebt lediglich das chemische Potential und wird im Folgenden nicht weiter berücksichtigt.

Als nächstes vereinfachen wir den Wechselwirkungsterm

$$\frac{1}{2}\sum_\sigma \int d^3y d^3z \hat{\Psi}^\dagger_\sigma(\vec{y})\hat{\Psi}^\dagger_{-\sigma}(\vec{z})U(\vec{y}-\vec{z})\hat{\Psi}_{-\sigma}(\vec{z})\hat{\Psi}_\sigma(\vec{y}) \tag{2.41}$$

in (2.32). Mit (2.33) lässt er sich umschreiben zu

$$\frac{4\pi a_s \hbar}{m}\int d^3y \hat{\Psi}^\dagger_\uparrow(\vec{y})\hat{\Psi}^\dagger_\downarrow(\vec{y})\hat{\Psi}_\downarrow(\vec{y})\hat{\Psi}_\uparrow(\vec{y}). \tag{2.42}$$

Tabelle 2.2 zeigt die numerischen Werte von

$$\int \mathrm{w}^*(\eta,y)\,\mathrm{w}^*(\eta,y-j)\,\mathrm{w}(\eta,y-k)\,\mathrm{w}(\eta,y-l)dy. \tag{2.43}$$

In sehr guter Näherung (Tight-Binding-Approximation) lässt sich demnach die Wechselwirkung zweier Atome an verschiedenen Gitterplätzen vernachlässigen:

$$\int \mathrm{w}^*(\eta,y)\,\mathrm{w}^*(\eta,y-j)\,\mathrm{w}(\eta,y-k)\,\mathrm{w}(\eta,y-l)dy \cong \delta_{0,|j|+|k|+|l|}\int |\,\mathrm{w}(\eta,y)|^4 d\,y. \tag{2.44}$$

Damit ergibt sich aus (2.42)

$$\frac{4\pi a_s \hbar}{m} I_1 I_2 I_3 \sum_{\vec{l}} \hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{l})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{l})\hat{c}_\downarrow(\vec{l})\hat{c}_\uparrow(\vec{l}) = \frac{4\pi a_s \hbar}{m} I_1 I_2 I_3 \sum_{\vec{l}} \hat{n}_\uparrow(\vec{l})\hat{n}_\downarrow(\vec{l}) \tag{2.45}$$

mit den Wechselwirkungsintegralen

$$I_i := \int |\,\mathrm{w}(\eta_i, y)|^4 d\,y \tag{2.46}$$

und dem Anzahloperator $\hat{n}_\sigma(\vec{l}) := \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{l})\hat{c}_\sigma(\vec{l})$.

Entsprechend wird der verbleibende Term

$$\sum_\sigma \int d^3y \hat{\Psi}^\dagger_\sigma(\vec{y})(\Omega_1 y_1^2 + \Omega_2 y_2^2 + \Omega_3 y_3^2 - \mu)\hat{\Psi}_\sigma(\vec{y}) \tag{2.47}$$

behandelt. Insgesamt erhalten wir den Hamiltonoperator des (um ein Fallenpotential erweiterten) Hubbard-Modells:

$$H = -\sum_{\substack{\vec{\imath},\sigma \\ |\vec{m}|=1}} t(\vec{m})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) + U\sum_{\vec{\imath}} n_\uparrow(\vec{\imath})n_\downarrow(\vec{\imath}) + \sum_{\vec{\imath},\sigma}(\Omega_1 i_1^2 + \Omega_2 i_2^2 + \Omega_3 i_3^2 - \mu)\hat{n}_\sigma(\vec{\imath}). \tag{2.48}$$

Dabei ist die lokale Wechselwirkung U gegeben durch:

$$U = \frac{4\pi a_s \hbar}{m} I_1 I_2 I_3. \tag{2.49}$$

Abbildung 2.8 zeigt den Wert des Integrals

$$I_i = \int |\,\mathrm{w}(\eta_i, y)|^4 dy \tag{2.50}$$

in Abhängigkeit der Fallentiefe η_i. Wie zu erwarten, nimmt die Wechselwirkung bei Erhöhung von η_i zu, da die Wannierfunktionen stärker lokalisiert sind und die Atome somit im Mittel dichter beieinander liegen.

3 Fermion-Fermion Mischungen

In Systemen ultrakalter Atomgase dominiert bei der Zweiteilchenstreuung in aller Regel der s-Wellen-Anteil so stark, dass höhere Partialwellen bei der quantitativen Beschreibung vollkommen vernachlässigt werden können [PS02]. Eine Ausnahme sind z.B. p-Wellen-Feshbach-Resonanzen: Befindet sich das Atomgas in einem Magnetfeld, das gerade so stark ist, dass es den Atomen energetisch möglich ist, Moleküle zu bilden (im Falle der p-Wellen-Feshbach-Resonanzen besitzt die Relativwellenfunktion der Konstituenten des Moleküls den Bahndrehimpuls $\ell = 1$), so beherrscht der p-Wellen-Anteil das Streuverhalten [ZvKB$^+$04], [ZvKB$^+$05], [Oha05]. Auf Feshbach-Resonanzen werden wir in Kapitel 5 zurückkommen. In einer einkomponentigen Mischung fermionischer Atome verbietet das Pauliprinzip die s-Wellen-Streuung, da nur eine symmetrische Pseudospinwellenfunktion möglich ist, die mit einer antisymmetrischen Ortswellenfunktion verknüpft ist. Hier wird also ebenso der p-Wellen-Anteil dominieren. Wird die Streuung in diesem p-Kanal jedoch nicht gerade durch eine Feshbach-Resonanz verstärkt, so ist sie so schwach, dass einkomponentige fermionische Atomgase bei ultraniedrigen Temperaturen als nicht-wechselwirkend aufgefasst werden können.

In zweikomponentigen Fermion-Fermion-Mischungen steht die s-Wellen-Streuung zwischen den beiden Komponenten nicht im Widerspruch mit dem Pauli-Prinzip: Die Relativwellenfunktion ist eine symmetrische s-Welle und die Pseudospinwellenfunktion das antisymmetrische Singulett. Eine zweikomponentige Mischung besitzt eine starke Analogie zum Elektronengas in der Festkörperphysik. Die beiden Spinzustände des Elektrons entsprechen dabei den beiden Hyperfeinzuständen des Atomgases. Aus diesem Grund werden die Hyperfeinzustände auch als Pseudospins bezeichnet. Mischungen mit mehr als zwei verschiedenen Pseudospins sind jedoch nicht weniger interessant [Hof05]. Experimentell wurden bereits ^{40}K-^{40}K- [RGJ04] (kontinuierliches System), [KMS$^+$05] (optisches Gitter) und ^{6}Li-^{6}Li-Mischungen [BAR$^+$04] (kontinuierliches System) jeweils zweier verschiedener Hyperfeinspezies untersucht.

Mischungen zweier verschiedener Hyperfeinzustände eines fermionischen Elementes im optischen Gitter mit überlagertem parabolischen Fallenpotential werden durch den (großkanonischen) Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -t \sum_{\substack{\vec{\imath},\sigma \\ |\vec{m}|=1}} \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) + \sum_{\vec{\imath},\sigma} \left(\Omega\, i^2 - \mu\right) \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) + U \sum_{\vec{\imath}} n_\uparrow(\vec{\imath}) n_\downarrow(\vec{\imath}) \tag{3.1}$$

beschrieben. Der erste Summand beschreibt hierbei die kinetische Energie mit der Hüpfkonstante t, der zweite unter anderem das überlagerte harmonische Fallenpotential mit der „Federkonstante“ Ω und der dritte die Fermion-Fermion-Wechselwirkung. Wie oben erörtert, wechselwirken nur unterschiedliche Hyperfeinspezies miteinander. Für unterschiedliche Hyperfeinzustände eines Elementes sind die Hüpfkonstanten und harmonischen Potentiale gleich, so dass wir mit einem t und einem Ω auskommen. Weiterhin haben wir angenommen, dass die beiden Hyperfeinzustände gleich stark bevölkert sind. Somit lassen sich beide Komponenten durch ein gemeinsames chemisches Potential μ beschreiben.

Im Spezialfall $\Omega = 0$ bezeichnet man (3.1) als Hubbard-Modell. Dieses kann sowohl für $U < 0$ als auch für $U > 0$ superfluide Phasen besitzen. Für $U < 0$ lässt sich die Superfluidität des Hubbard-Modells auf Grundlage der BCS-Theorie verstehen und für $0 > U > -4t$ („weak coupling regime“) auch quantitativ akzeptabel beschreiben. Sollen die „intermediate coupling“ und „strong coupling“ regimes quantitativ korrekt vorhergesagt werden, so sind aufwendigere Techniken erforderlich; z.B. diagrammatische Verfahren [PPS04], [Hau99], $\frac{1}{N}$−Entwicklung [Ped96], DMFT [GKR05] und QMC [SSP98]. Für $U > 0$ lässt sich das Auftreten von Superfluidität im Limes $U >> t$ auch noch im Rahmen der Mean-Field-Theorie plausibel machen [MRRT88]. In Folge der starken lokalen Abstoßung kommt es hier zu einer effektiven Anziehung zwischen Fermionen mit antiparallelen Spins auf benachbarten Gitterplätzen [Hir85]. Quantitativ verlässliche Untersuchungen erfordern auch hier aufwendige Techniken; z.B. Diagrammatik [BSW89], QMC und Renormierungsgruppe [Bul02].

Wir betrachten in diesem Kapitel den einfacheren der beiden Fälle: Superfluidität im (um ein harmonisches Fallenpotential erweiterten) Hubbard-Modell mit $U < 0$. Die s-Wellen-Streulängen für Kollisionen zwischen unterschiedlichen Hyperfeinzuständen fermionischer Atome sind in Abwesenheit eines zusätzlichen Magnetfeldes in allen bisher experimentell untersuchten Systemen positiv, siehe z.B.

[BBG$^+$00], [HSMH98]. Im Allgemeinen wird die Streulänge jedoch von einem zusätzlichen Magnetfeld beeinflusst. Eine möglicherweise auftretende Feshbach-Resonanz ist dabei eine Besonderheit, die einer modifizierten Behandlung bedarf (siehe Kapitel 5). Jedoch ist es auch bei Streukanälen, die keine Feshbach-Resonanz aufweisen, möglich, dass die Streulänge sich drastisch verändert und ihr Vorzeichen wechselt. ^{6}Li besitzt Streukanäle mit und ohne Feshbach-Resonanz [HSMH98]. Einige Kanäle von ^{6}Li ohne Feshbach-Resonanz sind gute theoretische Kandidaten zur Realisierung des attraktiven Hubbard-Modells [HCZ$^+$02].

In Spezialfällen lässt sich das attraktive Hubbard-Modell auch mit Hilfe einer Feshbach-Resonanz realisieren: Im translationsinvarianten System ist bei großem Abstand zur Feshbach-Resonanz die Vereinfachung in der theoretischen Beschreibung gerechtfertigt, einfach die Hintergrundstreulänge durch die magnetfeldabhängige Streulänge zu ersetzen und so zu rechnen, als wäre keine Feshbach-Resonanz vorhanden (siehe Kapitel 5). Ein Hubbard-Modell mit attraktiver Wechselwirkung lässt sich also in der Praxis umsetzen, falls mit Hilfe der Feshbach-Resonanz eine negative Streulänge bereits bei noch ausreichend großem Abstand zur Resonanz erzielt werden kann. Wirkliche Translationsinvarianz ist natürlich eine Idealisierung, die sich im Experiment nicht umsetzen lässt. Denkbar ist jedoch, die Fermionen in einem kastenförmigen Potential - an Stelle von einem harmonischen Potential - gefangen zu halten und diesem Kastenpotential das optische Gitter zu überlagern. Bisher sind alle Experimente mit harmonischen Fallenpotentialen durchgeführt worden. Ein Fallenpotential, das näherungsweise eine rechteckige Gestalt hat, sollte sich jedoch prinzipiell konstruieren lassen [BHS00]. Die genannte Näherung für die Feshbach-Resonanz verliert allerdings selbst auf Hartree-Fock-Niveau ihre Gültigkeit, wenn ein harmonisches Potential hinzugenommen wird - in diesem Fall wäre in dem um ein harmonisches Fallenpotential erweiterten Hubbard-Modell noch zusätzlich die konstante lokale Wechselwirkung U durch eine ortsabhängige lokale Wechselwirkung $U(\vec{\imath})$ zu ersetzen (siehe Kapitel 5).

In Kapitel 4 wird gezeigt, dass sich die bosonischen Freiheitsgrade in einer Fermion-Boson-Mischung ausintegrieren lassen. Es resultiert hieraus ein effektives Modell für Fermionen, in dem die ursprüngliche lokale Wechselwirkung der Fermionen durch eine (im Allgemeinen nicht lokale) induzierte Wechselwirkung erweitert ist. Der lokale Anteil der induzierten Wechselwirkung ist dabei negativ. Durch geeignete Wahl der Wellenlänge der Laser, die das optische Gitter erzeugen, kann man erreichen, dass die Bosonen ein sehr viel stärkeres Potential spüren, als die Fermionen. Sind die Bosonen sehr stark an den Gitterplätzen lokalisiert, so besteht ihre Wirkung alleine darin, die Abstoßung zweier Fermionen am selben Gitterplatz zu verkleinern oder sogar in eine Anziehung zu verwandeln, denn in diesem Grenzfall ist die induzierte Wechselwirkung näherungsweise lokal. Ein translationsinvariantes attraktives Hubbard-Modell lässt sich also auch auf diesem Wege selbst mit Fermionen verwirklichen, die eine positive Streulänge besitzen. Bei einem harmonischen Fallenpotential wäre die induzierte Wechselwirkung ortsabhängig.

3.1 Hartree-Fock Näherung

Im Folgenden soll der Wechselwirkungsterm in (3.1) vereinfacht werden. Es wird in Kapitel 4 gezeigt, dass in Fermion-Boson-Mischungen die Bosonen eine Nächstnachbarwechselwirkung zwischen den Fermionen induzieren. Somit behandeln wir in diesem Abschnitt als Vorgriff die Erweiterung von (3.1) um eine pseudospinunabhängige Nächstnachbarwechselwirkung:

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = -t \sum_{\substack{\vec{\imath},\sigma \\ |\vec{m}|=1}} \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) + \sum_{\vec{\imath},\sigma} \left(\Omega\, i^2 - \mu\right) \hat{n}_\sigma(\vec{\imath}) + \\
U \sum_{\vec{\imath}} \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{n}_\downarrow(\vec{\imath}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{\imath},\sigma,\sigma' \\ |\vec{m}|=1}} W(\vec{m}) n_\sigma(\vec{\imath}) \hat{n}_{\sigma'}(\vec{\imath}+\vec{m}).
\end{aligned}
\tag{3.2}
$$

Die Nächstnachbarwechselwirkung ist dabei durch den letzten Summanden gegeben. Den translationsinvarianten Spezialfall dieses Hamilton-Operators (also für $\Omega = 0$) bezeichnet man als erweitertes Hubbard-

Modell [MRRT88]. Zur approximativen Behandlung der Wechselwirkungsterme identifizieren wir in

$$
\begin{aligned}
H_I :=& U \sum_{\vec{\imath}} n_\uparrow(\vec{\imath}) n_\downarrow(\vec{\imath}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{\imath},\sigma,\sigma' \\ |\vec{m}|=1}} W(\vec{m}) n_\sigma(\vec{\imath}) n_{\sigma'}(\vec{\imath}+\vec{m}) \\
=& \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\substack{\sigma,\sigma' \\ \vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\vec{\kappa}_3}} V^{\sigma\sigma'}(\vec{\kappa}_3) \hat{c}^\dagger_{\sigma'}(\vec{\kappa}_2 - \vec{\kappa}_3) \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa}_1 + \vec{\kappa}_3) \hat{c}_\sigma(\vec{\kappa}_1) \hat{c}_{\sigma'}(\vec{\kappa}_2)
\end{aligned}
\tag{3.3}
$$

mit der Fouriertransformierten der Wechselwirkung

$$
\begin{aligned}
V^{\sigma\sigma'}(\vec{\kappa}) &:= U\delta_{\sigma,-\sigma'} + W(\vec{\kappa}) \\
W(\vec{\kappa}) &:= \sum_{|\vec{m}|=1} W(\vec{m}) e^{i\vec{m}\cdot\vec{\kappa}}
\end{aligned}
\tag{3.4}
$$

Bilinearkombinationen von Operatoren, die um von null verschiedene Erwartungswerte fluktuieren, und berücksichtigen nur diejenigen Summanden, die sich als Produkt zweier solcher Bilinearkombinationen schreiben lassen. Schließlich vernachlässigen wir noch die in den Fluktuationen quadratischen Beiträge (Hartree-Fock-Näherung) [PS02], [FW]. Neben den Anzahloperatoren $\hat{n}_\sigma(\vec{\imath})$ bzw. $\hat{n}_\sigma(\vec{\kappa})$ (bei Formulierung im Ortsraum bzw. Impulsraum) gehören zu diesen Bilinearformen Operatoren für die Erzeugung bzw. Vernichtung von korrelierten Atompaaren (Superfluidität) sowie von Elementaranregungen der Ladungs- und Spindichtewellen. Stellvertretend für diese Operatorpaare führen wir deren Erwartungswerte auf: Pseudospin-Singulett-Superfluidität wird durch nichtverschwindende anomale Erwartungswerte

$$F(\vec{\imath},\vec{m}) := \langle \hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) \hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}+\vec{m}) \rangle \tag{3.5}$$

bzw.

$$F(\vec{\kappa}) := \langle \hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}) \hat{c}_\downarrow(-\vec{\kappa}) \rangle \tag{3.6}$$

charakterisiert. (3.5) ist wieder die Formulierung für den Ortsraum und (3.6) diejenige für den Impulsraum. $\vec{m} = 0$ beschreibt dabei eine lokalisierte Form von Paarbildung („On Site s“), während $|\vec{m}| \neq 0$ Paarbildung zwischen unterschiedlichen Gitterpunkten beschreibt. Ist die Wechselwirkung lokal, so kann nur die lokalisierte Form auftreten. Bei zusätzlicher Nächst-Nachbar-Wechselwirkung wird Paarbildung zwischen unterschiedlichen Gitterpunkten möglich.

Liegt Pseudospin-Triplett-Superfluidität vor, so sind

$$G_\sigma(\vec{\imath},\vec{m}) := \langle \hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) \hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) \rangle \tag{3.7}$$

bzw.

$$G_\sigma(\vec{\kappa}) := \langle \hat{c}_\sigma(\vec{\kappa}) \hat{c}_\sigma(-\vec{\kappa}) \rangle \tag{3.8}$$

von null verschieden. Offensichtlich ist $G_\sigma(\vec{\imath}, 0) = 0$. Triplett-Paarung ist nur zwischen unterschiedlichen Gitterplätzen möglich. Dies erfordert eine nicht lokale Wechselwirkung.

Die für Ladungs- und Spindichtewellen (werden in diesem Kapitel nicht untersucht) charakteristischen Korrelationen lassen sich mit

$$D_\sigma(\vec{\kappa}) := \langle \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa}) \hat{c}_\sigma(\vec{\kappa} + \vec{Q}) \rangle \tag{3.9}$$

beschreiben.

A priori sind alle diese Erwartungswerte natürlich unbekannt. Dies macht eine selbstkonsistente Behandlung erforderlich.

Ändert sich das dem optischen Gitter überlagerte harmonische Potential so langsam, dass es über Parzellen hinweg als konstant angesehen werden kann, die so groß sind, dass sie durch die Resultate des thermodynamischen Limes gut beschrieben werden, so können einige Eigenschaften relativ brauchbar berechnet werden, wenn die beinahe vorliegende Translationsinvarianz der einzelnen Parzellen ausgenutzt wird (Local Density Approximation) [PS02]. In diesem Fall ist es zweckmäßig, das erweiterte Hubbard-Modell in Impulsdarstellung zu untersuchen. Offensichtlich ist diese Vorgehensweise auch bei Abwesenheit des überlagerten harmonischen Potentials sinnvoll. Falls das Potential sich räumlich zu stark verändert oder ein präziseres Bild des Einflusses des harmonischen Fallenpotentials gewünscht wird, ist die Diskussion in der Ortsdarstellung zielführender .

Hartree-Fock-Näherung in Impulsdarstellung. Die Beiträge in (3.3) mit $\sigma' = -\sigma$ und $\vec{\kappa}_2 = -\vec{\kappa}_1$ enthalten Bilinearformen der Art (3.5). In Hartree-Fock-Näherung gilt:

$$\begin{aligned} H_I^{\text{Sing}} &:= \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\sigma} V^{\sigma,-\sigma}(\vec{\kappa}_2)\hat{c}^\dagger_{-\sigma}(-\vec{\kappa}_1-\vec{\kappa}_2)\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa}_1+\vec{\kappa}_2)\hat{c}_\sigma(\vec{\kappa}_1)\hat{c}_{-\sigma}(-\vec{\kappa}_1) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2} V^{\uparrow\downarrow}(\vec{\kappa}_2-\vec{\kappa}_1)\hat{c}^\dagger_\downarrow(-\vec{\kappa}_2)\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\kappa}_2)\hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}_1)\hat{c}_\downarrow(-\vec{\kappa}_1) \\ &= \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2} V^{\uparrow\downarrow}(\vec{\kappa}_2-\vec{\kappa}_1)\big[-F^*(\vec{\kappa}_2)F(\vec{\kappa}_1)+F(\vec{\kappa}_1)\hat{c}^\dagger_\downarrow(-\vec{\kappa}_2)\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\kappa}_2)+F^*(\vec{\kappa}_2)\hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}_1)\hat{c}_\downarrow(-\vec{\kappa}_1)\big] \\ &= \sum_{\vec{\kappa}} \big[-\Delta^*_{\text{Sing}}(\vec{\kappa})F(\vec{\kappa})+\Delta^*_{\text{Sing}}(\vec{\kappa})\hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa})\hat{c}_\downarrow(-\vec{\kappa})+\Delta_{\text{Sing}}(\vec{\kappa})\hat{c}^\dagger_\downarrow(-\vec{\kappa})\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\kappa})\big] \end{aligned} \tag{3.10}$$

mit dem Ordnungsparameter

$$\Delta_{\text{Sing}}(\vec{\kappa}_1) := \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_2} V^{\uparrow\downarrow}(\vec{\kappa}_1-\vec{\kappa}_2)F(\vec{\kappa}_2). \tag{3.11}$$

Die Operatorkombinationen in (3.3) mit $\sigma' = \sigma$ und $\vec{\kappa}_2 = -\vec{\kappa}_1$ lassen sich durch die Bilinearformen (3.7) ausdrücken:

$$\begin{aligned} H_I^{\text{Trip}} &:= \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\sigma} V^{\sigma\sigma}(\vec{\kappa}_2)\hat{c}^\dagger_\sigma(-\vec{\kappa}_1-\vec{\kappa}_2)\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa}_1+\vec{\kappa}_2)\hat{c}_\sigma(\vec{\kappa}_1)\hat{c}_\sigma(-\vec{\kappa}_1) \\ &= \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\sigma} V^{\sigma\sigma}(\vec{\kappa}_2-\vec{\kappa}_1)\big[-G^*_\sigma(\vec{\kappa}_2)G_\sigma(\vec{\kappa}_1)+\hat{c}_\sigma(\vec{\kappa}_1)\hat{c}_\sigma(-\vec{\kappa}_1)G^*_\sigma(\vec{\kappa}_2)+\hat{c}^\dagger_\sigma(-\vec{\kappa}_2)\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa}_2)G_\sigma(\vec{\kappa}_1)\big] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\vec{\kappa},\sigma} \big[-\Delta^{\text{Trip}}_\sigma(\vec{\kappa})G^*_\sigma(\vec{\kappa})+\big(\Delta^{\text{Trip}}_\sigma\big)^*(\vec{\kappa})\hat{c}_\sigma(\vec{\kappa})\hat{c}_\sigma(-\vec{\kappa})+\Delta^{\text{Trip}}_\sigma(\vec{\kappa})\hat{c}^\dagger_\sigma(-\vec{\kappa})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa})\big] \end{aligned} \tag{3.12}$$

mit dem Ordnungsparameter

$$\Delta^{\text{Trip}}_\sigma(\vec{\kappa}_1) = -\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_2} V^{\text{Trip}}(\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2)G_\sigma(\vec{\kappa}_2) \tag{3.13}$$

und der Triplettwechselwirkung

$$V^{\text{Trip}}(\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2) = \frac{1}{2}\big[V^{\sigma\sigma}(\vec{\kappa}_2-\vec{\kappa}_1)-V^{\sigma\sigma}(\vec{\kappa}_2+\vec{\kappa}_1)\big]. \tag{3.14}$$

Die Anzahloperatoren liefern den folgenden Beitrag:

$$\begin{aligned} H_I^{\text{Num}} &:= \frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\substack{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\vec{\kappa}_3 \\ \sigma,\sigma'}} V^{\sigma\sigma'}(\vec{\kappa}_3)\big[\delta_{\vec{\kappa}_3,0}\big(\hat{n}_\sigma(\vec{\kappa}_1)n_{\sigma'}(\vec{\kappa}_2)+n_\sigma(\vec{\kappa}_1)\hat{n}_{\sigma'}(\vec{\kappa}_2)-n_\sigma(\vec{\kappa}_1)n_{\sigma'}(\vec{\kappa}_2)\big) \\ &- \delta_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2-\vec{\kappa}_3}\delta_{\sigma\sigma'}\big(\hat{n}_\sigma(\vec{\kappa}_1)n_{\sigma'}(\vec{\kappa}_2)+n_\sigma(\vec{\kappa}_1)\hat{n}_{\sigma'}(\vec{\kappa}_2)-n_\sigma(\vec{\kappa}_1)n_{\sigma'}(\vec{\kappa}_2)\big)\big] \\ &= \sum_{\vec{\kappa},\sigma} \epsilon^I(\vec{\kappa})n_\sigma(\vec{\kappa})+C^I \end{aligned} \tag{3.15}$$

mit

$$\epsilon^I(\vec{\kappa}) = \frac{1}{2}Un+W(0)n-\frac{1}{2\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}} W(\vec{\kappa}-\vec{\alpha})n(\vec{\alpha}) \tag{3.16}$$

und

$$C^I = -\frac{1}{4}\frac{U}{\mathcal{N}}N^2-\frac{W(0)}{2\mathcal{N}}N^2+\frac{1}{4\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2} W(\vec{\kappa}_1-\vec{\kappa}_2)n(\vec{\kappa}_1)n(\vec{\kappa}_2). \tag{3.17}$$

Hierbei sind N die Gesamtzahl der Atome und $n = \frac{N}{N}$ der Füllfaktor. In H_I^{Sing} und H_I^{Trip} (siehe jeweils die erste Zeile in (3.10) bzw. (3.12)) ließen sich für $\vec{\kappa}_2 = 0$ bzw. $\vec{\kappa}_2 = 0$ und $\vec{\kappa}_2 = -2\vec{\kappa}_1$ Anzahloperatoren identifizieren. Wegen der Einschränkung von $\vec{\kappa}_2$ ist der resultierende Gesamtbeitrag jedoch um einen Faktor $\frac{1}{N}$ kleiner, als die bisher diskutierten Beiträge. Daher werden wir diese Terme nicht weiter berücksichtigen.

Hartree-Fock-Näherung in Ortsdarstellung. Der On-Site-Anteil der Wechselwirkung (3.3) lautet in Hartree-Fock-Näherung:

$$\begin{aligned}\sum_{\vec{\imath}} \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{n}_\downarrow(\vec{\imath}) = \sum_{\vec{\imath}} \big[&-\frac{1}{4}n^2(\vec{\imath}) + \frac{1}{2}n(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}) + \frac{1}{2}n(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) \\ &-F^*(\vec{\imath})F(\vec{\imath}) + F^*\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}) + F(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath})\big].\end{aligned} \tag{3.18}$$

Wir haben hierbei folgende Kurzform eingeführt:

$$F(\vec{\imath}) := F(\vec{\imath}, \vec{0}) \equiv \langle \hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\rangle. \tag{3.19}$$

Die Beiträge der Anzahloperatoren stehen dabei in der zweiten Zeile, diejenigen der Pseudospin-Singulett-Superfluidität in der dritten. Beiträge der Form (3.7) sind hier nicht vorhanden, da $G_\sigma(\vec{\imath}, \vec{0}) = 0$. Triplett-Superfluidät ist in einem System mit reiner On-Site-Wechselwirkung also nicht möglich.

Wir nehmen vereinfachend an, dass entweder Pseudospin-Singulett- oder Pseudospin-Triplett-Superfluidität vorliegt. Die Möglichkeit einer Mischung wird hier nicht berücksichtigt. In ersterem Falle lautet die Nächstnachbarwechselwirkung in Hartree-Fock-Näherung:

$$\begin{aligned}&\sum_{\substack{\vec{\imath},\vec{m}\\ \sigma,\sigma'}} W(\vec{m})\hat{n}_\sigma(\vec{\imath})\hat{n}_{\sigma'}(\vec{\imath}+\vec{m}) \\ &= \sum_{\vec{\imath},\vec{m},\sigma} W(\vec{m})\big[n(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) + \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath})n(\vec{\imath}+\vec{m}) - \frac{1}{2}n(\vec{\imath})n(\vec{\imath}+\vec{m})\big] \\ &+ \sum_{\vec{\imath},\vec{m},\sigma} W(\vec{m})\big[-K^*(\vec{\imath},\vec{m})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) - K(\vec{\imath},\vec{m})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) + K(\vec{\imath},\vec{m})K^*(\vec{\imath},\vec{m})\big] \\ &+ 2\sum_{\vec{\imath},\vec{m}} W(\vec{m})\big[F^*(\vec{\imath},\vec{m})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}+\vec{m}) + F(\vec{\imath},\vec{m})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath}) - F(\vec{\imath},\vec{m})F^*(\vec{\imath},\vec{m})\big].\end{aligned} \tag{3.20}$$

Hierbei haben wir den Erwartungswert des Hüpfens vom Gitterplatz $\vec{\imath}+\vec{m}$ zum Gitterplatz $\vec{\imath}$ eingeführt:

$$K(\vec{\imath},\vec{m}) := \langle \hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}+\vec{m})\rangle. \tag{3.21}$$

Die dritte Zeile in (3.20) beschreibt eine Renormierung des Hüpfterms aufgrund der Wechselwirkung. Liegt dagegen reine Triplett-Superfluidität vor, so erhalten wir im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung:

$$\begin{aligned}&\sum_{\substack{\vec{\imath},\vec{m}\\ \sigma,\sigma'}} W(\vec{m})\hat{n}_\sigma(\vec{\imath})\hat{n}_{\sigma'}(\vec{\imath}+\vec{m}) \\ &= \sum_{\vec{\imath},\vec{m},\sigma} W(\vec{m})\big[n(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) + \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath})n(\vec{\imath}+\vec{m}) - \frac{1}{2}n(\vec{\imath})n(\vec{\imath}+\vec{m})\big] \\ &+ \sum_{\vec{\imath},\vec{m},\sigma} W(\vec{m})\big[-K^*(\vec{\imath},\vec{m})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) - K(\vec{\imath},\vec{m})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) + K(\vec{\imath},\vec{m})K^*(\vec{\imath},\vec{m})\big] \\ &+ \sum_{\substack{\vec{\imath},\vec{m}\\ \sigma}} \big[G^*_\sigma(\vec{\imath},\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) + G_\sigma(\vec{\imath},\vec{m})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}) - G^*_\sigma(\vec{\imath},\vec{m})G_\sigma(\vec{\imath},\vec{m})\big].\end{aligned} \tag{3.22}$$

3.1.1 Selbstkonsistenzgleichungen im Impulsraum

Wir betrachten den Fall $\Omega = 0$. Reine Pseudospin-Singulett-Superfluidität lässt sich in Hartree-Fock-Näherung mit dem Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H^{\text{Sing}} &= \sum_{\vec{\kappa}} \xi(\vec{\kappa}) \hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\kappa}) \hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}) - \sum_{\vec{\kappa}} \xi(\vec{\kappa}) \hat{c}_\downarrow(-\vec{\kappa}) \hat{c}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa}) + \sum_{\vec{\kappa}} \xi(\vec{\kappa}) \\ &- \sum_{\vec{\kappa}} |\Delta(\vec{\kappa})| e^{i\delta(\vec{\kappa})} \hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\kappa}) \hat{c}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa}) - \sum_{\vec{\kappa}} |\Delta(\vec{\kappa})| e^{-i\delta(\vec{\kappa})} \hat{c}_\downarrow(-\vec{\kappa}) \hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}) + C^I \\ &= \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\kappa}) & \hat{c}_\downarrow(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi(\vec{\kappa}) & -|\Delta(\vec{\kappa})| e^{i\delta(\vec{\kappa})} \\ -|\Delta(\vec{\kappa})| e^{-i\delta(\vec{\kappa})} & -\xi(\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}) \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \\ &+ \sum_{\vec{\kappa}} \xi(\vec{\kappa}) + C^I \end{aligned} \tag{3.23}$$

beschreiben (siehe 3.2,3.3, 3.10 und 3.15). Den Index (Sing) am Ordnungsparameter haben wir weggelassen und die Phase δ eingeführt:

$$\Delta(\vec{\kappa}) := \Delta_{\text{Sing}}(\vec{\kappa}) =: |\Delta(\vec{\kappa})| e^{i\delta(\vec{\kappa})}. \tag{3.24}$$

Weiterhin ist

$$\xi(\vec{\kappa}) := \epsilon(\vec{\kappa}) + \epsilon^I(\vec{\kappa}) - \mu \tag{3.25}$$

mit

$$\epsilon(\vec{\kappa}) = -t \sum_{|\vec{m}|=1} e^{i\vec{\kappa}\vec{m}}. \tag{3.26}$$

Den Hamilton-Operator (3.23) diagonalisieren wir mit Hilfe einer unitären Transformation auf die neuen Fermi-Operatoren $\hat{C}_\sigma(\vec{\kappa})$, der Bogoliubov-Transformation [PS02], [FW]:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}) \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u(\vec{\kappa}) & v(\vec{\kappa}) \\ -v^*(\vec{\kappa}) & u(\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{C}_\uparrow(\vec{\kappa}) \\ \hat{C}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \hat{C}_\uparrow(\vec{\kappa}) \\ \hat{C}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} u(\vec{\kappa}) & -v(\vec{\kappa}) \\ v^*(\vec{\kappa}) & u(\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}) \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Die Koeffizienten der Transformationsmatrix sind durch

$$u(\vec{\kappa}) = \sqrt{\frac{E(\vec{\kappa}) + \xi(\vec{\kappa})}{2E(\vec{\kappa})}} \tag{3.28}$$

und

$$v(\vec{\kappa}) = e^{i\delta(\vec{\kappa})} \sqrt{\frac{E(\vec{\kappa}) - \xi(\vec{\kappa})}{2E(\vec{\kappa})}} \tag{3.29}$$

bestimmt. Hierbei sind $E(\vec{\kappa})$ die Energien der elementaren Anregungen :

$$E(\vec{\kappa}) = \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}. \tag{3.30}$$

In den neuen Operatoren $\hat{C}_\uparrow(\vec{\kappa})$ und $\hat{C}_\downarrow(\vec{\kappa})$ lautet (3.23)

$$H^{\text{Sing}} = \sum_{\vec{\kappa},\sigma} E(\vec{\kappa}) \hat{C}_\sigma^\dagger(\vec{\kappa}) \hat{C}_\sigma(\vec{\kappa}) - \sum_{\vec{\kappa}} E(\vec{\kappa}) + \sum_{\vec{\kappa}} \xi(\vec{\kappa}) + C^I. \tag{3.31}$$

Der Grundzustand wird durch die Bedingungen

$$\hat{C}_\uparrow^\dagger(\vec{\kappa})|0>= 0 \tag{3.32}$$

charakterisiert. Im Folgenden bezeichnet β wie üblich die inverse Temperatur. Mit

$$\begin{aligned} F(\vec{\kappa}) &= \langle \hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa})\hat{c}_\downarrow(-\vec{\kappa})\rangle \\ &= \langle \left[u(\vec{\kappa})\hat{C}_\uparrow(\vec{\kappa}) + v(\vec{\kappa})\hat{C}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa})\right]\left[-v(\vec{\kappa})\hat{C}_\uparrow^\dagger(\vec{\kappa}) + u(\vec{\kappa})\hat{C}_\downarrow(-\vec{\kappa})\right]\rangle \\ &= -\frac{\Delta(\vec{\kappa})}{2E(\vec{\kappa})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\kappa})}{2}\right) \end{aligned} \tag{3.33}$$

wird der Ordnungsparameter (3.11):

$$\begin{aligned} \Delta(\vec{\kappa}) &= \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}} V^{\uparrow\downarrow}(\vec{\kappa}-\vec{\alpha})F(\vec{\alpha}) \\ &= -\frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}} V^{\uparrow\downarrow}(\vec{\kappa}-\vec{\alpha})\frac{\Delta(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right). \end{aligned} \tag{3.34}$$

Die mittlere (spinunabhängige) Besetzungszahl des Zustandes mit Impuls $\vec{\kappa}$ und Spin σ ist durch

$$\begin{aligned} n_\sigma(\vec{\kappa}) =& \langle \hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\kappa})\hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa})\rangle = \langle \left[u(\vec{\kappa})\hat{C}_\uparrow^\dagger(\vec{\kappa}) + v^*(\vec{\kappa})\hat{C}_\downarrow(-\vec{\kappa})\right]\left[u(\vec{\kappa})\hat{C}_\uparrow(\vec{\kappa}) + v(\vec{\kappa})\hat{C}_\downarrow^\dagger(-\vec{\kappa})\right]\rangle \\ &= u^2(\vec{\kappa})\frac{1}{e^{\beta E(\vec{\kappa})}+1} + |v(\vec{\kappa})|^2\left[1 - \frac{1}{e^{\beta E(\vec{\kappa})}+1}\right] \\ &= \frac{1}{2} - \frac{\xi}{2E(\vec{\kappa})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\kappa})}{2}\right) \end{aligned} \tag{3.35}$$

gegeben. Hieraus folgt neben dem Füllfaktor

$$n = 1 - \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa}} \frac{\xi}{E(\vec{\kappa})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\kappa})}{2}\right) \tag{3.36}$$

auch die Renormierung der kinetischen Energie durch die Wechselwirkung (3.15):

$$\epsilon^I(\vec{\kappa}) = \frac{1}{2}Un + W(0)n + \frac{1}{2\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}} W(\vec{\kappa}-\vec{\alpha})\frac{\xi}{2E(\vec{\alpha})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\kappa})}{2}\right). \tag{3.37}$$

(3.34), (3.36) und (3.37) stellen ein System gekoppelter (Integral-)Gleichungen dar, das selbstkonsistent gelöst werden muss.

3.1.2 Selbstkonsistenzgleichungen im Ortsraum

Im Falle reiner On-Site-Wechselwirkung lautet der Hamilton-Operator zur Beschreibung einer zweikomponentigen Fermion-Fermion-Mischung in einem optischen Gitter mit überlagertem harmonischem Fallenpotential (3.1 und 3.18):

$$\begin{aligned}
\hat{H} = &-\sum_{\vec{\imath},\vec{m}} t(\vec{m})\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}+\vec{m}) + \sum_{\vec{\imath},\vec{m}} t(\vec{m})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath}+\vec{m}) \\
&+ \sum_{\vec{\imath}} (\frac{U}{2} + \Omega i^2 - \mu)\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) \\
&- \sum_{\vec{\imath}} (\frac{U}{2} + \Omega i^2 - \mu)\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath}) \\
&- U\sum_{\vec{\imath}} F^*(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) - U\sum_{\vec{\imath}} F(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath}) \\
&- \mu\mathcal{N} - \frac{U}{4}\sum_{\vec{\imath}} n^2(\vec{\imath}) - U\sum_{\vec{\imath}} F^*(\vec{\imath})F(\vec{\imath}) + \sum_{\vec{\imath}} \Omega i^2 \\
= &\begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow^\dagger(0,0), & \hat{c}_\uparrow^\dagger(0,1), & \cdots & \hat{c}_\downarrow(0,0), & \hat{c}_\downarrow(0,1), & \cdots \end{pmatrix} \boldsymbol{\mathcal{H}} \begin{pmatrix} \hat{c}_\uparrow(0,0) \\ \hat{c}_\uparrow(0,1) \\ \cdots \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger(0,0) \\ \\ \hat{c}_\downarrow^\dagger(0,1) \\ \cdots \end{pmatrix} + Const.
\end{aligned} \tag{3.38}$$

In der letzten Zeile haben wir ein zweidimensionales Gitter angenommen (Doppelindizes als Argumente der Vernichter und Erzeuger). Ferner definiert die letzte Zeile die hermitesche Matrix $\boldsymbol{\mathcal{H}}$. Analog zum Vorgehen in Abschnitt 3.1.1 diagonalisieren wir diese hermitesche Matrix in (3.38) mittels einer unitären Bogoliubov-Transformation. Als Matrix der Gestalt

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A} & \mathcal{B} \\ \mathcal{B}^* & -\mathcal{A} \end{pmatrix} \tag{3.39}$$

mit

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}^* = \mathcal{A}^\dagger, \qquad \mathcal{B} = \mathcal{B}^\mathrm{T} \tag{3.40}$$

besitzt auch sie ein Eigenwertspektrum der Bauart

$$\{-|E(1)|, +|E(1)|, -|E(2)|, +|E(2)|, -|E(3)|, +|E(3)|, \cdots\}. \tag{3.41}$$

Die Matrix der Eigenvektoren bezeichen wir mit $\boldsymbol{\mathcal{W}}$, d.h es gilt:

$$\boldsymbol{\mathcal{W}}^\dagger\boldsymbol{\mathcal{H}}\boldsymbol{\mathcal{W}} = \begin{pmatrix} E(\mathcal{N}) & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E(\mathcal{N}-1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -E(\mathcal{N}) \end{pmatrix}. \tag{3.42}$$

Hierbei ist $2\mathcal{N}$ die Zahl der Eigenwerte bei $\mathcal{N}$ Gitterplätzen. Ferner haben wir vorausgesetzt, dass die Reihenfolge der Spalten von $\boldsymbol{\mathcal{W}}$ einer absteigenden Ordnung der Eigenwerte entspricht:

$$E(\mathcal{N}) \geq E(\mathcal{N}-1) \geq E(\mathcal{N}-2) \geq \cdots \geq E(1) \geq 0. \tag{3.43}$$

In den folgenden Gleichungen verwenden wir eine alternative Nomenklatur zur Parametrisierung der Operatoren: Statt dem Ortsvektor des Gitterplatzes erhalten die Erzeuger und Vernichter einen skalaren Zähler als Argument. In den neuen Operatoren

$$\begin{pmatrix} \hat{C}_{\uparrow}(\mathcal{N}) \\ \hat{C}_{\uparrow}(\mathcal{N}-1) \\ \cdots \\ \hat{C}^{\dagger}_{\downarrow}(\mathcal{N}-1) \\ \hat{C}^{\dagger}_{\downarrow}(\mathcal{N}) \end{pmatrix} = \boldsymbol{\mathcal{W}}^{\dagger} \begin{pmatrix} \hat{c}_{\uparrow}(1) \\ \hat{c}_{\uparrow}(2) \\ \cdots \\ \hat{c}^{\dagger}_{\downarrow}(1) \\ \\ \hat{c}^{\dagger}_{\downarrow}(2) \\ \cdots \end{pmatrix} \tag{3.44}$$

lautet (3.38)

$$\begin{aligned} \hat{H} = \Big(\hat{C}^{\dagger}_{\uparrow}(\mathcal{N}), \quad \cdots \quad \hat{C}^{\dagger}_{\uparrow}(1), \quad \hat{C}_{\downarrow}(1), \quad \cdots, \quad \hat{C}_{\downarrow}(\mathcal{N})\Big) \times \\ \mathbf{Diag}(E(\mathcal{N}), E(\mathcal{N}-1), \cdots - E(\mathcal{N}-1), -E(\mathcal{N})) \begin{pmatrix} \hat{C}_{\uparrow}(\mathcal{N}) \\ \hat{C}_{\uparrow}(\mathcal{N}-1) \\ \cdots \\ \hat{C}^{\dagger}_{\downarrow}(\mathcal{N}-1) \\ \hat{C}^{\dagger}_{\downarrow}(\mathcal{N}) \end{pmatrix} \\ = \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} E(s)\big(\hat{C}^{\dagger}_{\uparrow}(s)\hat{C}_{\uparrow}(s) + \hat{C}^{\dagger}_{\downarrow}(s)\hat{C}_{\downarrow}(s)\big) - \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} E(s). \end{aligned} \tag{3.45}$$

Als Eigenwerte der Matrix $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ hängen die Energien in (3.45) jedoch vom Ordnungsparameter

$$\begin{aligned} \Delta(i) &:= UF(i) = U\langle \hat{c}_{\uparrow}(i)\hat{c}_{\downarrow}(i)\rangle = \\ &= U\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\langle \hat{C}_{\uparrow}(s)\hat{C}^{\dagger}_{\uparrow}(s)\rangle \\ &+ U\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+N,s+\mathcal{N})\langle \hat{C}^{\dagger}_{\downarrow}(s)\hat{C}_{\downarrow}(s)\rangle \\ &= U\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\big[1 - \frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\big] \\ &+ U\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},s+\mathcal{N})\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1} \end{aligned} \tag{3.46}$$

und der (spinunabhängigen) Besetzung des Wannierzustandes am Ort i zum Spin σ

$$\begin{aligned} n_{\sigma}(i) = \langle \hat{c}^{\dagger}_{\uparrow}(i)\hat{c}_{\uparrow}(i)\rangle &= \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\langle \hat{C}^{\dagger}_{\uparrow}(s)\hat{C}_{\uparrow}(s)\rangle \\ &+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\langle \hat{C}_{\downarrow}(s)\hat{C}^{\dagger}_{\downarrow}(s)\rangle \\ &= \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1} \\ &+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\big[1 - \frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\big] \end{aligned} \tag{3.47}$$

ab, so dass (3.45) erst nach der Lösung der gekoppelten Gleichungen (3.42), (3.46) und (3.47) explizit bekannt ist.

Symmetrien von $\boldsymbol{\mathcal{H}}$. Wir betrachten ein zweidimensionales kubisches Gitter. Gehen die Verteilungen $n(\vec{\imath})$ und $F(\vec{\imath})$ in (3.38) unter Spiegelung an den Ebenen $(0,1,0)$ und $(1,0,0)$ in sich selbst über, so gilt dies auch für $\boldsymbol{\mathcal{H}}$. Somit können die Eigenvektoren (die Spalten von $\boldsymbol{\mathcal{W}}$) in (3.42) mit den Ansätzen

$$\mathcal{P}\begin{pmatrix} Y_{++} \\ Y_{++} \\ Y_{++} \\ Y_{++} \end{pmatrix} \qquad \mathcal{P}\begin{pmatrix} Y_{+-} \\ Y_{+-} \\ -Y_{+-} \\ -Y_{+-} \end{pmatrix} \qquad \mathcal{P}\begin{pmatrix} Y_{--} \\ -Y_{--} \\ -Y_{--} \\ Y_{--} \end{pmatrix} \qquad \mathcal{P}\begin{pmatrix} Y_{-+} \\ -Y_{-+} \\ Y_{-+} \\ -Y_{-+} \end{pmatrix} \tag{3.48}$$

bestimmt werden, wenn wir die Zahl der Gitterplätze $\mathcal{N}$ als gerade und das Gitter als quadratisch voraussetzen. Hierbei sind $Y_{\pm\pm}$ Vektoren der Länge $\mathcal{N}/2$ und $\mathcal{P}$ diejenige Zeilenpermutation, die die bei kanonischer Viertelung des quadratischen Gitters innerhalb der einzelnen Viertel zeilenweise angeordneten Vektorkomponenten zeilenweise (bei Abwesenheit der Viertelung) anordnet. Der Ansatz (3.48) lässt sich auch an Hand des Gitters illustrieren:

$$\begin{array}{c|c} + & + \\ \hline + & + \end{array} \qquad \begin{array}{c|c} + & + \\ \hline - & - \end{array} \qquad \begin{array}{c|c} + & - \\ \hline - & + \end{array} \qquad \begin{array}{c|c} + & - \\ \hline + & - \end{array} \tag{3.49}$$

Auf diese Weise lässt sich das Eigenwertproblem für die $2\mathcal{N} \times 2\mathcal{N}$-Matrix $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ auf 4 Eigenwertprobleme für $\frac{1}{2}\mathcal{N} \times \frac{1}{2}\mathcal{N}$-Matritzen $\boldsymbol{\mathcal{G}}_{\pm\pm}$ reduzieren:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mathcal{G}}_{++}Y^r_{++} &= E^r_{++}Y^r_{++}, & \boldsymbol{\mathcal{G}}_{+-}Y^r_{+-} &= E^r_{+-}Y^r_{+-} \\ \boldsymbol{\mathcal{G}}_{-+}Y^r_{-+} &= E^r_{-+}Y^r_{-+} & \boldsymbol{\mathcal{G}}_{--}Y^r_{--} &= E^r_{--}Y^r_{--}. \end{aligned} \tag{3.50}$$

Hierbei dient der Index r der Nummerierung der Eigenwerte und zugeordneten Eigenvektoren. Im Folgenden setzen wir voraus, dass die vier Mengen von Vektoren $\{Y^r_{\pm\pm} | 1 \le r \le \frac{\mathcal{N}}{2}\}$ Orthonormalsysteme bilden. Wir führen $\mathcal{Q}$ als diejenige Permutation ein, die die Eigenvektoren in (3.50) absteigend anordnet:

$$\begin{aligned} &\mathcal{Q}\left(E^1_{++}, \cdots E^{\frac{\mathcal{N}}{2}}_{++},\, E^1_{+-}, \cdots E^{\frac{\mathcal{N}}{2}}_{+-},\, E^1_{-+}, \cdots E^{\frac{\mathcal{N}}{2}}_{-+},\, E^1_{--}, \cdots E^{\frac{\mathcal{N}}{2}}_{--}\right) \\ &= \big(E(\mathcal{N}),\, E(\mathcal{N}-1), \cdots - E(\mathcal{N}-1),\, -E(\mathcal{N})\big) \end{aligned} \tag{3.51}$$

mit

$$E(\mathcal{N}) \ge E(\mathcal{N}-1) \ge \cdots \ge E(1) \ge 0. \tag{3.52}$$

Definieren wir nun die $\frac{1}{2}\mathcal{N} \times 2\mathcal{N}$-Matrix $\boldsymbol{\mathcal{V}}$ durch

$$\boldsymbol{\mathcal{V}} = \mathcal{Q}\left(Y^1_{++}, \cdots Y^{\frac{\mathcal{N}}{2}}_{++},\, Y^1_{+-}, \cdots Y^{\frac{\mathcal{N}}{2}}_{+-},\, Y^1_{-+}, \cdots Y^{\frac{\mathcal{N}}{2}}_{-+},\, Y^1_{--}, \cdots Y^{\frac{\mathcal{N}}{2}}_{--}\right), \tag{3.53}$$

so lauten die den Gleichungen (3.46) und (3.47) entsprechenden Gleichungen:

$$\begin{aligned} \Delta(i) &= UF(i) = U\langle \hat{c}_\uparrow(i)\hat{c}_\downarrow(i)\rangle = \\ &= \frac{1}{4}U\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{V}}(i, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{V}}(i+\frac{\mathcal{N}}{4}, \mathcal{N}+1-s)\big[1-\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\big] \\ &+ \frac{1}{4}U\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{V}}(i, s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{V}}(i+\frac{\mathcal{N}}{4}, s+\mathcal{N})\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1} \end{aligned} \tag{3.54}$$

und

$$\begin{aligned} n_\sigma(i) = \langle \hat{c}^\dagger_\uparrow(i)\hat{c}_\uparrow(i)\rangle &= \frac{1}{4}\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{V}}(i, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{V}}(i, \mathcal{N}+1-s)\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1} \\ &+ \frac{1}{4}\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{V}}(i, s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{V}}(i, s+\mathcal{N})\big[1-\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\big]. \end{aligned} \tag{3.55}$$

Die Vorfaktoren von $\frac{1}{4}$ haben dabei die Aufgabe, die Normierung von $\boldsymbol{\mathcal{V}}$ in die Normierung von $\boldsymbol{\mathcal{W}}$ umzuwandeln. Da die zur Bestimmung des Eigensystems einer $m \times m$-Matrix erforderliche Rechenzeit stärker als linear in der Zeilenzahl m anwächst (die Zahl der Rechenschritte wächst mit der dritten Potenz von m [Thi99]), sind bei numerischen Untersuchungen die gekoppelten Gleichungen (3.50) (3.54) und (3.55) dem Gleichungssystem (3.42), (3.46) und (3.47) vorzuziehen.

3.2 Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen im Impulsraum

Der folgende Abschnitt diskutiert Fermion-Fermion-Mischungen mit attraktiver On-Site-Wechselwirkung im optischen Gitter. Dazu werden die Lösungen der gekoppelten Gleichungen (3.25), (3.30), (3.34), (3.36) und (3.37) untersucht. Der erste Unterabschnitt ist dem translationsinvarianten Fall gewidmet, d.h. das parabolische Fallenpotential wird zunächst nicht berücksichtigt. Im zweiten Unterabschnitt wird das harmonische Fallenpotential hinzugenommen - im Rahmen der Local Density Approximation.

Das Hubbard-Modell - dessen Eigenschaften wir im Folgenden im Rahmen der Mean-Field-Theorie untersuchen - ohne überlagertes Fallenpotential wird in der Festkörpertheorie intensiv untersucht [MRR90], [Bul02], da es zur Beschreibung der Hochtemperatur-Supraleitung in Betracht kommt. Unser zusätzliches harmonisches Fallenpotential führt zu zahlreichen Veränderungen gegenüber dem translationsinvarianten Fall: Ordnungsparameter und Besetzungszahl werden ortsabhängig; das Anregungsspektrum weist diskrete Energieniveaus auf.

Untersuchungen von kontinuierlichen Systemen (kein optisches Gitter) von Fermionen in einem harmonischen Fallenpotential wurden in [BCD+99] und [BH02] vorgestellt. Unser diskretes System zeichnet sich durch die zusätzliche Möglichkeit eines isolierenden Bereiches im Zentrum aus, den es in kontinuierlichen Systemen nicht gibt. Die Präsenz dieses Bandisolators führt zu weiteren qualitativen Unterschieden zwischen dem diskreten und dem kontinuierlichen System.

Die QMC-Arbeit [RMBS03] widmet sich dem eindimensionalen repulsiven Hubbard-Modell mit überlagertem Fallenpotential. Hier ist neben einem zentralen Bandisolator auch ein zentraler Mott-Isolator möglich. Die Isolatorphase im Zentrum koexistiert mit einer sie umgebenden normalfluiden Phase.

Das Bose-Hubbard-Modell mit überlagertem harmonischem Fallenpotential wurde im Rahmen der Mean-Field-Theorie [JBC+98] und mit QMC-Methoden [WATB04] untersucht. Dabei besteht eine gewisse Ähnlichkeit zu unseren Ergebnissen für das Fermi-Hubbard-Modell mit überlagertem harmonischem Fallenpotential: In beiden Systemen lässt sich ein zentraler Isolator realisieren, der von einem superfluiden Ring umgeben ist. Im bosonischen Fall ist der zentrale Isolator jedoch ein Mott-Isolator während er im fermionischen Fall ein Bandisolator ist.

3.2.1 Translationsinvariantes System

Zweidimensionales kubisches optisches Gitter. Die Dispersion der Fermionen ist im zweidimensionalen optischen Gitter durch

$$\epsilon(\vec{\kappa}) = -2t[\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2)] \tag{3.56}$$

gegeben. Die Breite dieses Energiebandes beträgt $8t$. Als Energiemaßstab wählen wir die halbe Bandbreite

$$D := 4t. \tag{3.57}$$

Da die Wechselwirkung lokal ist, hängt sie vom Impuls κ nicht ab. Sie hat die Form (vgl. (3.4))

$$V^{\sigma\sigma'}(\kappa) = U\delta_{\sigma,-\sigma'}. \tag{3.58}$$

Damit vereinfacht sich (3.34) zu

$$1 = -\frac{U}{2\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \frac{\tanh(\frac{\sqrt{\xi^2(\vec{\alpha})+\Delta^2}}{2T})}{\sqrt{\xi^2(\vec{\alpha})+\Delta^2}}. \tag{3.59}$$

Der Ordnungsparameter Δ ist hierbei unabhängig vom Impuls. Weiterhin ist die um das chemische Potential verschobene renormierte Dispersion durch

$$\xi(\vec{\alpha}) = \epsilon(\vec{\alpha}) + \epsilon^I(\vec{\alpha}) - \mu = \epsilon(\vec{\alpha}) + \frac{1}{2}Un - \mu \tag{3.60}$$

gegeben. Bei $T = 0$ reduziert sich (3.59) auf

$$1 = -\frac{U}{2\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \frac{1}{\sqrt{\Delta^2+\xi^2(\vec{\alpha})}}. \tag{3.61}$$

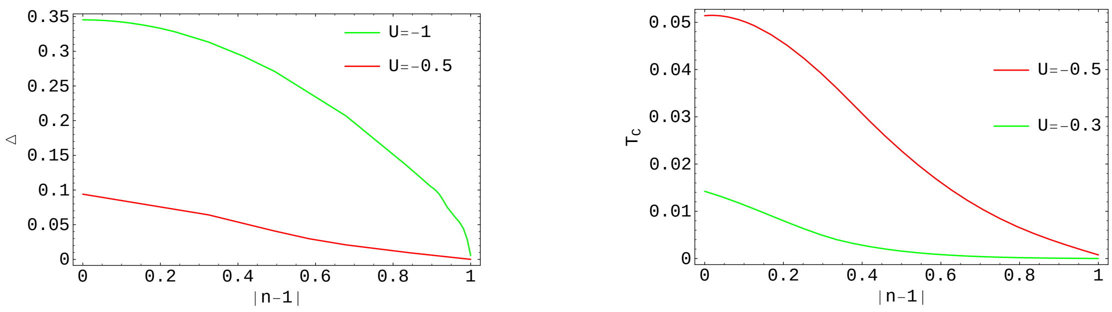


Abbildung 3.1: Ordnungsparameter Δ und kritische Temperatur T_C des kubischen 2D-Hubbard-Modells jeweils als Funktion des Abstandes von der halben Bandfüllung $|n-1|$. Sowohl Ordnungsparameter als auch kritische Temperatur sind bei halber Bandfüllung maximal.

Die Temperatur T_c des Phasenübergangs ist durch das Verschwinden des Ordnungsparameters Δ gegeben. Bei T_c lautet (3.59) also

$$1 = -\frac{U}{2\pi^2}\int_0^\pi \alpha_1 \int_0^\pi \alpha_2 \frac{\tanh(\frac{\xi(\vec{\alpha})}{2T_c})}{\xi(\vec{\alpha})}. \tag{3.62}$$

Der Füllfaktor n berechnet sich gemäß

$$n = 1 - \frac{1}{\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \frac{\xi(\alpha)}{\sqrt{\Delta^2+\xi^2(\vec{\alpha})}} \tanh(\frac{\sqrt{\Delta^2+\xi^2(\vec{\alpha})}}{2T}) \tag{3.63}$$

bei allgemeiner Temperatur, gemäß

$$n = 1 - \frac{1}{\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \tanh(\frac{\xi(\vec{\alpha})}{2T_c}) \tag{3.64}$$

bei der Temperatur T_c des Phasenübergangs und gemäß

$$n = 1 - \frac{1}{\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \frac{\xi(\vec{\alpha})}{\sqrt{\Delta^2+\xi^2(\vec{\alpha})}} \tag{3.65}$$

bei $T = 0$.

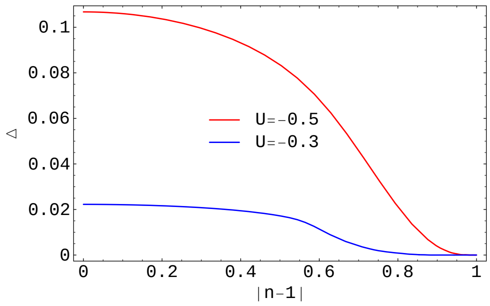
Abbildung 3.1 zeigt links den Ordnungsparameter in Abhängigkeit des Füllfaktors für den Grundzustand. Bei halber Bandfüllung liegt ein Maximum vor. Dieses Maximum lässt sich anhand des BCS-Grundzustandes leicht analytisch verstehen. Siehe dazu (3.70) und (3.71). Die kritische Temperatur in Abhängigkeit des Füllfaktors ist in Abbildung 3.1 rechts dargestellt. Ihr Maximum liegt ebenfalls bei der halben Bandfüllung. Häufig wird die kritische Temperatur in Einheiten der Fermienergie des freien Systems angegeben. Zu Vergleichszwecken wird deshalb in Abbildung 3.6 die Fermienergie des freien Systems als Funktion des Füllfaktors gezeigt. Bei halber Bandfüllung ist die Fermienergie des freien Systems gerade durch die halbe Bandbreite gegeben. Die Fermienergie des freien Systems E_F ist implizit durch

$$n = \frac{1}{\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \theta(E_F - 4t - \epsilon(\vec{\alpha})) \tag{3.66}$$

bestimmt.

Dreidimensionales kubisches optisches Gitter. Im dreidimensionalen kubischen optischen Gitter ist die Dispersion durch

$$\epsilon(\vec{\kappa}) = -2t[\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2) + \cos(\kappa_3)] \tag{3.67}$$



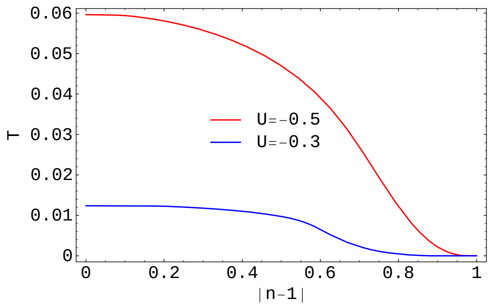


Abbildung 3.2: Ordnungsparameter Δ und kritische Temperatur T des kubischen 3D-Hubbard-Modells jeweils als Funktion des Abstandes von der halben Bandfüllung $|n-1|$. Sowohl Ordnungsparameter als auch kritische Temperatur sind bei halber Bandfüllung maximal.

bestimmt. Das hierdurch beschriebene Energieband besitzt die Breite $12t$. Die halbe Bandbreite - welche wir als Energiemaßstab benutzen - ist durch $D := 6t$ gegeben. Offensichtlich lauten die Gleichungen (3.59), (3.63) und (3.66) für den dreidimensionalen Fall:

$$\begin{aligned} 1 &= -\frac{U}{2\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \int_0^\pi d\alpha_3 \frac{\tanh(\frac{\sqrt{\xi^2(\vec{\alpha})+\Delta^2}}{2T})}{\sqrt{\xi^2(\vec{\alpha})+\Delta^2}} \\ n &= 1-\frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \int_0^\pi d\alpha_3 \frac{\xi(\alpha)}{\sqrt{\Delta^2+\xi^2(\vec{\alpha})}} \tanh(\frac{\sqrt{\Delta^2+\xi^2(\vec{\alpha})}}{2T}) \\ n &= \frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \int_0^\pi d\alpha_3 \theta(E_F-4t-\epsilon(\vec{\alpha})). \end{aligned} \tag{3.68}$$

Abbildung 3.2 zeigt links den Ordnungsparameter und rechts die kritische Temperatur für das kubische 3D-Hubbard-Modell. Wie bereits beim 2D-Fall festgestellt, weisen Ordnungsparameter und kritische Temperatur bei halber Bandfüllung Maxima auf.

3.2.2 System mit parabolischem Fallenpotential

Local Density Approximation. Das einfachste Verfahren zur Diskussion von Systemen, die einem externen Potential unterworfen sind, ist die Local Density Approximation. Sie wird durch die Einführung eines ortsabhängigen chemischen Potentials implementiert, das an die Stelle des chemischen Potentials in den Gleichungen für das korrespondierende translationsinvariante System tritt [PS02]. Folglich werden Größen wie Besetzungszahl, Ordnungsparameter und kritische Temperatur ortsabhängig. Ist das externe Potential durch $V_{\text{ext}}(\vec{\imath})$ gegeben, so lautet die Vorschrift zur Ersetzung des chemischen Potentials

$$\mu \rightarrow \mu(\vec{\imath}) := \mu_0 - V_{\text{ext}}(\vec{\imath}). \tag{3.69}$$

Hierbei kontrolliert μ_0 die Gesamtteilchenzahl des Systems. Gilt $V_{\text{ext}}(0) = 0$, so lässt sich μ_0 als chemisches Potential im Ursprung ansehen. In unserem Fall ist $V_{\text{ext}}(\vec{\imath}) = \Omega|\vec{\imath}|^2$.

Profile für Besetzungszahl und Ordnungsparameter (Grundzustand). Im Folgenden werden Besetzungszahl und Ordnungsparameter für zwei- und dreidimensionale Systeme als Funktion des Abstandes vom Fallenzentrum studiert. Abb. 3.3 zeigt die Ergebnisse für drei zweidimensionale Systeme mit unterschiedlichen Gesamtteilchenzahlen und sonst identischen Parametern. Drei qualitativ unterschiedliche Bereiche lassen sich demnach unterscheiden. Liegt die Besetzungszahl im Zentrum unterhalb von 1 (weniger als halbe Bandfüllung), so nehmen Besetzungszahl und Ordnungsparameter zum Zentrum hin monoton zu. Bei einer mittleren zentralen Besetzung mit mehr als einem fermionischen Atom nimmt nur noch die Besetzungszahl zum Zentrum hin monoton zu. Das Maximum des Ordnungsparameters liegt außerhalb

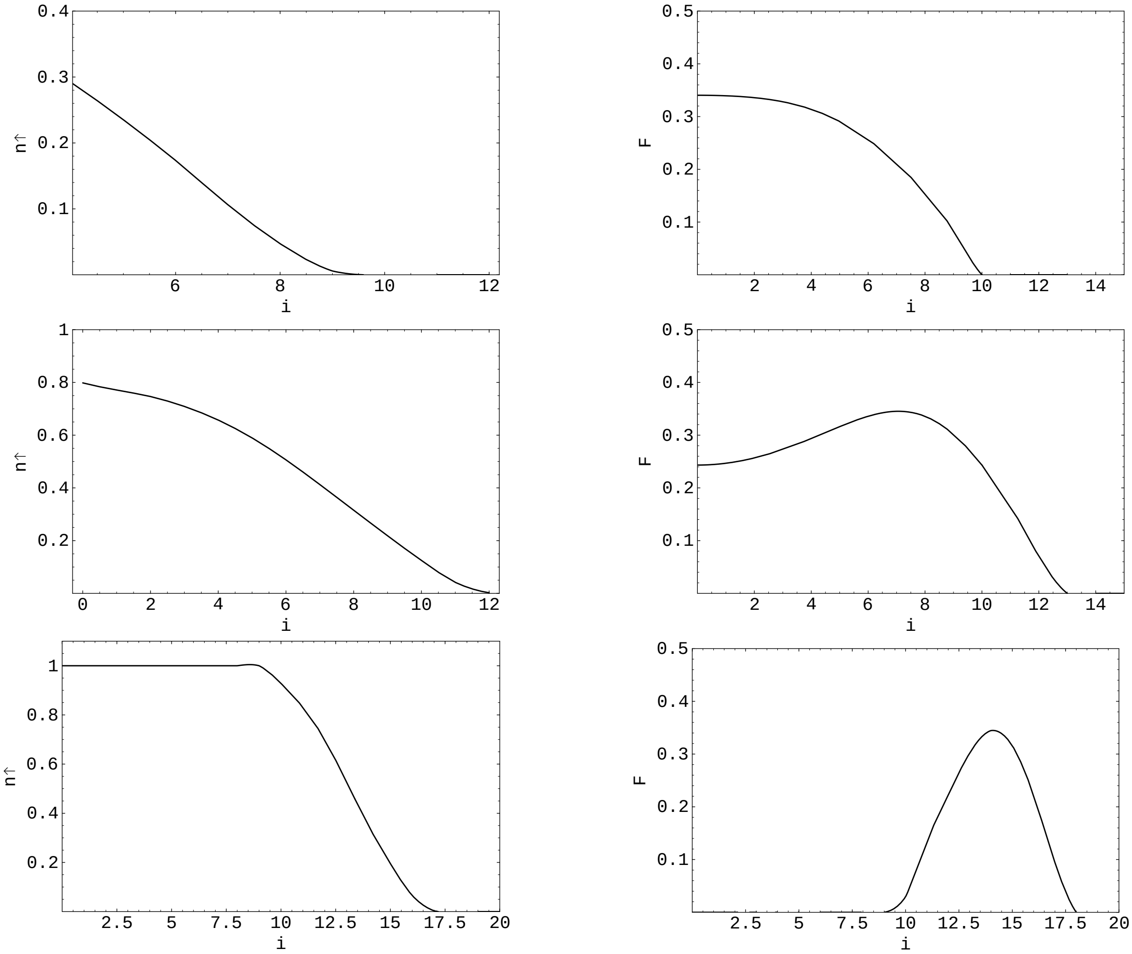


Abbildung 3.3: Besetzungszahl $n_\uparrow$ und Ordnungsparameter F als Funktion des Abstandes $i = |\vec{i}|$ vom Fallenzentrum für drei 2D-Systeme mit unterschiedlicher Teilchenzahl. Es lassen sich drei Bereiche qualitativ unterschiedliche Bereiche unterscheiden: (i) Die Besetzungszahl im Zentrum ist kleiner als 1 (obere Reihe; 174 Teilchen). (iii) Die Besetzungszahl im Zentrum ist 2 und folglich befindet sich dort eine bandisolierende Zone (untere Reihe; 1256 Teilchen). (ii) Der Zwischenbereich mit zentraler Besetzungszahl zwischen 1 und 2 (mittlere Reihe; 346 Teilchen).

des Zentrums und zwar dort, wo das Gitter im Mittel mit einem fermionischen Atom besetzt ist. Ist die Gesamtteilchenzahl genügend groß, so gibt es einen zentralen Bandisolator, charakterisiert durch die Besetzungszahl zwei und den Ordnungsparameter null. Dieser ist von einem superfluiden Ring umgeben. Das Zustandekommen des Maximums im Ordnungsparameterprofil erläutern wir in (3.71) und (3.70). Abb. 3.4 und 3.5 zeigen die analogen Ergebnisse für ein dreidimensionales System.

Einfluss der Superfluidität auf die Profile von Besetzungszahl und Ordnungsparameter. Abbildung 3.7 zeigt die Besetzungszahlprofile im Grundzustand und geringfügig oberhalb der kritischen Temperatur für ein 2D-System mit $U = -0.5$ und einer Gesamtbesetzung von 86 Teilchen. Die beiden Kurven unterscheiden sich nur geringfügig voneinander. Bei der höheren Temperatur ist der Radius des Besetzungszahlprofils geringfügig größer, als im Grundzustand, während die Besetzungszahl im inneren Bereich bei der höheren Temperatur ein wenig reduziert ist. Insbesondere zeigt 3.7, dass sich Veränderungen im Dichteprofil nicht als experimentelle Signatur für den Übergang zur Superfluidität eignen.

Kritische Temperatur. Die Local Density Approximation sagt eine ortsabhängige kritische Temperatur voraus. Dies ist jedoch ein Artefakt der LDA (siehe nächster Abschnitt). Um LDA-Resultate zur Vorhersage

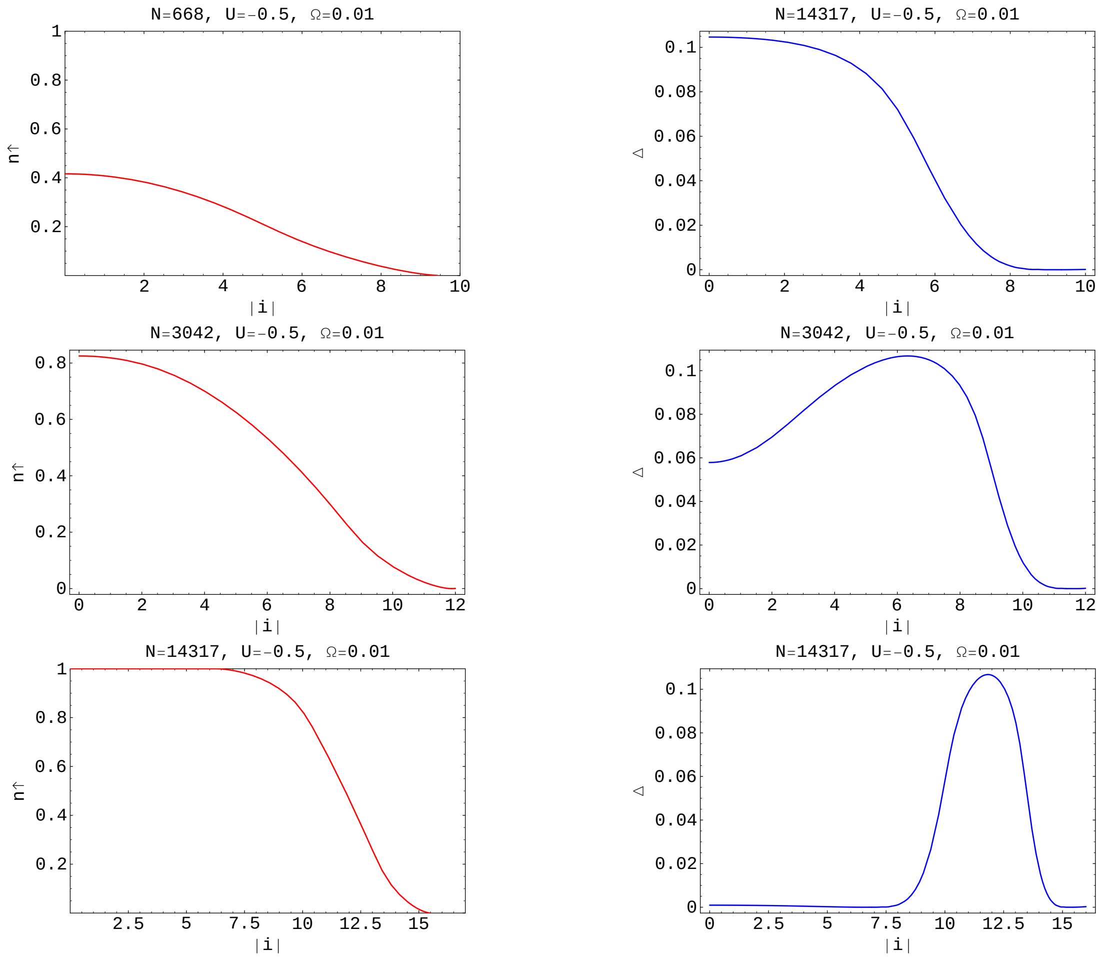


Abbildung 3.4: Besetzungszahl $n_\uparrow$ und Ordnungsparameter Δ als Funktion des Abstandes $i = |\vec{i}|$ vom Fallenzentrum für drei 3D-Systeme mit unterschiedlicher Teilchenzahl. Es lassen sich drei Bereiche unterscheiden: (i) Die Besetzungszahl im Zentrum ist kleiner als 1. (iii) Die Besetzungszahl im Zentrum ist 2 und folglich befindet sich dort eine bandisolierende Zone. (ii) Der Zwischenbereich mit zentraler Besetzungszahl zwischen 1 und 2.

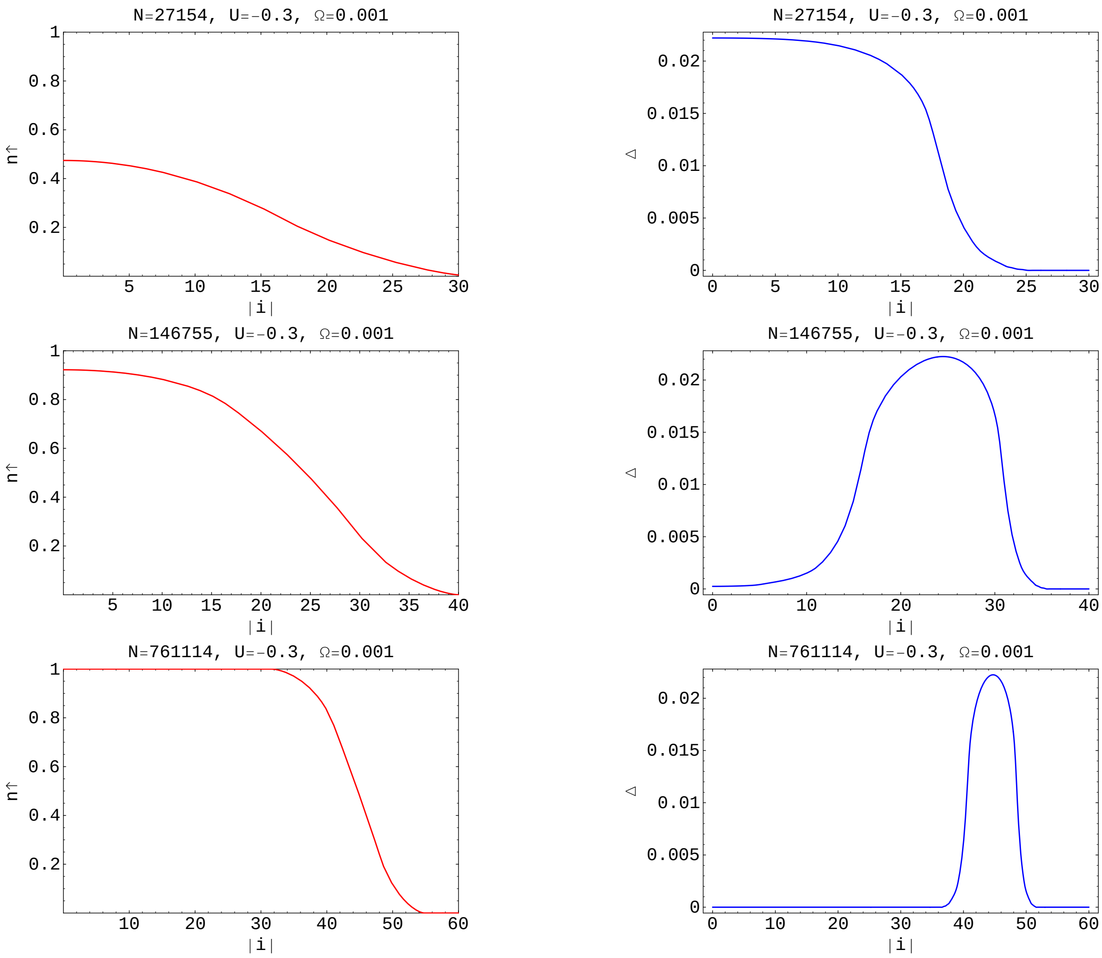


Abbildung 3.5: Besetzungszahl und Ordnungsparameter als Funktion des Abstandes vom Fallenzentrum für drei 3D-Systeme mit unterschiedlicher Teilchenzahl. Es lassen sich drei Bereiche unterscheiden: (i) Die Besetzungszahl im Zentrum ist kleiner als 1. (iii) Die Besetzungszahl im Zentrum ist 2 und folglich befindet sich dort eine bandisolierende Zone. (ii) Der Zwischenbereich mit zentraler Besetzungszahl zwischen 1 und 2.

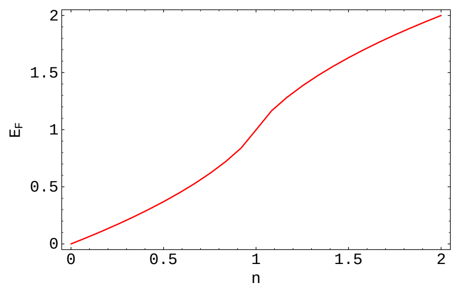


Abbildung 3.6: Fermienergie E_F des freien Systems als Funktion der Besetzungszahl n für 2D.

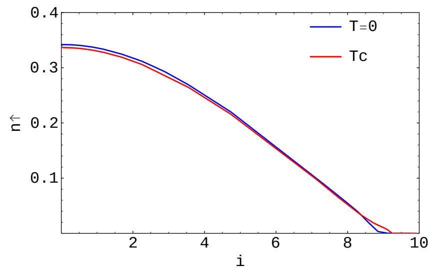


Abbildung 3.7: Besetzungszahlprofile im Grundzustand und geringfügig oberhalb der kritischen Temperatur für ein 2D-System mit $U = -0.5$.

der kritischen Temperatur zu nutzen, wird in der Regel die maximale LDA-Temperatur als kritische Temperatur des gesamten Systems angegeben. D.h. die Temperatur, bei der zum ersten Mal ein Punkt des Systems im Rahmen der LDA superfluid wird, bestimmt die Temperatur des Phasenübergangs. Wir haben bereits gesehen, dass die kritische Temperatur bei der lokalen halben Bandfüllung ein Maximum aufweist. Somit sagt die LDA voraus, dass sich die kritische Temperatur nicht durch Erhöhung der Gesamtteilchenzahl oder Vergrößerung des parabolischen Fallenpotentials verändern lässt, falls die zentrale Besetzungszahl bereits größer oder gleich eins ist. Liegt die Besetzung im Zentrum des Systems unterhalb von eins, so steigt die kritische Temperatur laut LDA bei Vergrößerung von Gesamtteilchenzahl oder parabolischem Fallenpotential zunächst an, da diese beiden Maßnahmen zur Erhöhung der zentralen Besetzungszahl führen. Sobald jedoch die Besetzungszahl von eins im Zentrum der Falle erreicht ist, bleibt die kritische Temperatur laut LDA konstant.

3.3 Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen im Ortsraum

Wie bereits im vergangenen Abschnitt werden auch in diesem Fermion-Fermion-Mischungen mit attraktiver On-Site-Wechselwirkung im optischen Gitter mit überlagertem Fallenpotential untersucht. Nachdem im zurückliegenden Abschnitt gezeigt wurde, dass die Profile kaum zum experimentellen Nachweis für Superfluidität geeignet sind, bleibt die Frage nach möglichen experimentellen Signaturen interessant. Da sich Veränderungen im Anregungsspektrum als experimentelle Signatur des superfluiden Phasenübergangs besser eignen, werden wir insbesondere diese untersuchen. Wir lösen dazu die gekoppelten Gleichungen (3.50), (3.54) und (3.55) unter Verwendung der in der GNU-GSL-Bibliothek [GSL] und dem LA-Packet Lapack [LAPa] (mit C++ -Interface Lapack++ [LAPb]) verfügbaren C++ -Routinen zur Wurzelsuche und zur Eigensystembestimmung. Verglichen mit dem vorangehenden Abschnitt erlaubt dieses Vorgehen die adäquate Berücksichtigung des parabolischen Fallenpotentials.

3.3.1 Profile der Besetzungszahl und des Ordnungsparameters für den Grundzustand

Als Energiemaßstab wählen wir wieder die halbe Bandbreite $D = 4t$ des optischen Gitters. Alternativ ließe sich auch die mit dem harmonischen Fallenpotential assoziierte Nullpunktsenergie wählen.

In Abbildung 3.8 vergleichen wir anhand eines 2D-Systems mit $\Omega = 0.01$ und $U = -1$ die LDA-Ergebnisse für Besetzungszahl und Ordnungsparameter mit den Ergebnissen der exakten Berücksichtigung des parabolischen Fallenpotentials. Da die LDA das attraktive Mean-Field vernachlässigt, ist zu erwarten, dass die LDA ein vergrößertes Dichteprofil voraussagt. Dies wird durch 3.8 bestätigt.

Abbildung 3.9 zeigt die Besetzungszahl- und Ordnungsparameterprofile zweier 3D-Systeme mit den unterschiedlichen Fallenpotentialen $\Omega = 0.01$ und $\Omega = 0.1$. Die Anisotropien bei $\Omega = 0.1$ sind offensichtlich stärker ausgeprägt. Da die LDA-Beschreibung - welche isotrope Profile vorhersagt - beim schwächeren Fallenpotential bekanntermaßen bessere Resultate liefert, entspricht dies der Erwartung.

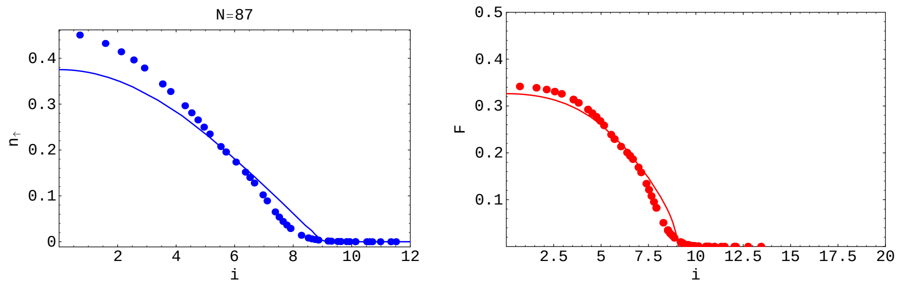


Abbildung 3.8: Vergleich zwischen LDA-Ergebnissen (durchgezogene Linien) und den Resultaten bei exakter Berücksichtigung des parabolischen Fallenpotentials (Punkte). Verglichen werden die Profile für Besetzungszahl und Ordnungsparameter anhand eines 2D-Systems mit $\Omega = 0.01$ und $U = -1$.

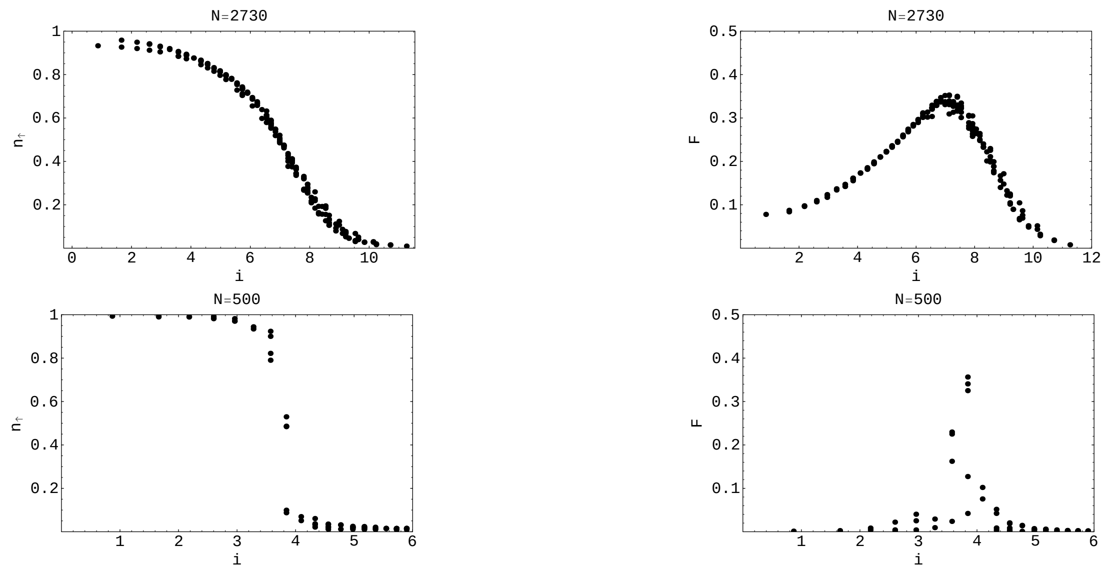


Abbildung 3.9: Besetzungszahl- und Ordnungsparameterprofile für zwei 3D-Systeme mit unterschiedlichen Fallenpotentialen $\Omega = 0.01$ (oben) und $\Omega = 0.1$ (unten)

Bereits früher haben wir festgestellt, dass sich bei Erhöhung der Teilchenzahl schließlich ein superfluider Ring bildet, dessen Zentrum ungefähr dort lokalisiert ist, wo die Besetzungszahl pro Gitterplatz ($n(\vec{\imath}) = n_\uparrow(\vec{\imath}) + n_\downarrow(\vec{\imath})$) eins beträgt („Halbe Bandfüllung “). Dies lässt sich leicht verstehen, wenn man annimmt, dass der superfluide Grundzustand durch

$$|G\rangle = \prod_{\vec{\imath}} (u(\vec{\imath}) + v(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath}))|0\rangle \tag{3.70}$$

mit $|u(\vec{\imath})|^2 + |v(\vec{\imath})|^2 = 1$ gegeben ist. Für die Besetzungszahl $n(\vec{\imath})$ und die superfluide Fermion-Fermion-Korrelation $F(\vec{\imath})$ erhält man dann:

$$\begin{aligned} n(\vec{\imath}) &= 2|v(\vec{\imath})|^2, \\ |F(\vec{\imath})| &= |u^*(\vec{\imath})v(\vec{\imath})| = \sqrt{1-|v(\vec{\imath})|^2}|v(\vec{\imath})|. \end{aligned} \tag{3.71}$$

Das Maximum von $F(\vec{\imath})$ befindet sich bei $|v(\vec{\imath})| = 1/\sqrt{2}$, d.h. $n(\vec{\imath}) = 1$, was obigen Befund erklärt. Bei Erhöhung des chemischen Potentials wandert der superfluide Ring nach außen. Dabei wird er dünner, da sich der Bereich mit $0 < n(\vec{\imath}) < 2$ verschmälert. Dieses Spiel lässt sich jedoch nicht ad infinitum fortsetzen: Bei hinreichend großem μ muss unsere Näherung, dass nur das niedrigste Bloch-Band besetzt wird, zusammenbrechen. Dieser Punkt des Übergangs zum Mehrband-Sysem lässt sich für konkrete Systeme abschätzen:

Übergang zum Mehrbandsystem. Der Rand des isolierenden Bereiches habe vom Fallenzentrum den Abstand a (in Einheiten der Gitterkonstante). Die potentielle Energie eines am Rand des sich anschließenden superfluiden Rings (Radius ungefähr auch a) lokalisierten Atoms ist also ungefähr durch $E_1 := \Omega\, a^2$ gegeben. Wird dieses Atom ins Zentrum der Falle gebracht, so beträgt die neue potentielle Energie $E_2 := 2U_{12} + \Delta E$, mit der Wechselwirkungsenergie U_{12} zwischen zwei Atomen am selben Gitterplatz, von denen eines im ersten und das andere im zweiten Bloch-Band ist, und der Energiedifferenz ΔE zwischen den Bloch-Bändern (bestimmt am Rand der Brillouin-Zone). Nehmen wir vereinfachend $U_{12} = U$ an, so ist zur Verlagerung eines Atoms vom Rand ins Zentrum die Energie

$$2U + \Delta E - \Omega\, a^2 \tag{3.72}$$

erforderlich. Ist diese negativ, so kann unsere Einbandnäherung nicht mehr sinnvoll sein. Ein Beispiel: Bei $\eta_1 = \eta_2 = 5$ (Potentialtiefe in der Ebene) und $\eta_3 = 30$ (stärkere Potentialtiefe, die die parallelen Ebenen entkoppelt) beträgt $\Delta E = 9.2D$. Das resultierende Kriterium für $U = -1D$ ($\Omega\, a^2 < 7.2D$) wird bei $\Omega = 0.01D$ für $a > 26$ verletzt.

3.3.2 Einteilchenanregungsspektrum

Um die graphische Darstellbarkeit der Einteilchenzustandsdichte

$$\rho(E) = 2 * \sum_{s=1}^{N} \delta(E - E(s)) \tag{3.73}$$

zu verbessern, ersetzen wir die Delta-Peaks durch normierte Normalverteilungen mit der Breite $\sigma = 0.001D$.

Das Anregungsspektrum im Grundzustand. Abbildung 3.10 vergleicht für zwei 3D-Systeme mit unterschiedlichem Fallenpotential die niederenergetischen Ausschnitte aus dem Anregungsspektrum. Für die diskrete Natur der Spektren ist das parabolische Fallenpotential verantwortlich. Erwartungsgemäß liegen die Anregungen bei höherem parabolischen Potential weiter auseinander. Während bei $\Omega = 0.067$ (rechtes Bild) die einzelnen Peaks bei der von uns gewählten Verbreiterung von $\sigma = 0.001D$ noch einzeln aufgelöst werden, gibt es bei $\Omega = 0.0067$ (linkes Bild) bereits Akkumulation.

Die Energien der jeweiligen niedrigsten Anregungen in 3.10 übersteigen bei weitem die typische Energiedifferenz zwischen benachbarten Anregungen. Der Grund hierfür ist zum Teil die zum Aufbruch eines Cooper-Paars benötigte Energie.

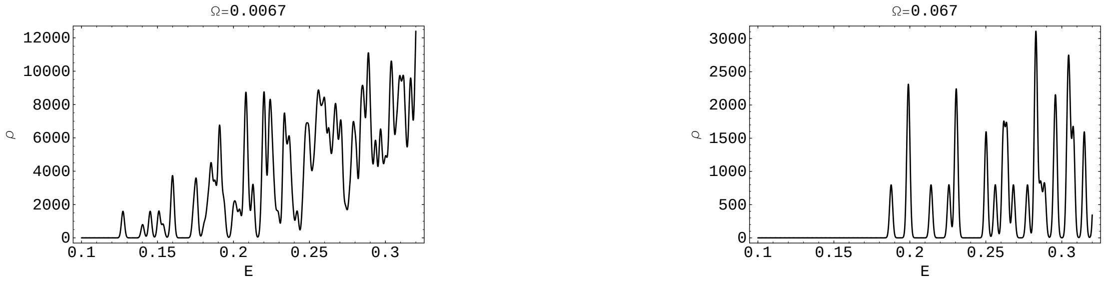


Abbildung 3.10: Niederenergieausschnitte aus den Einteilchen-Anregungsspektren zweier 3D-Systeme. Parameter links: $U = -0.67$, $\Omega = 0.0067$ und $N = 2730$. Parameter rechts: $U = -0.67$, $\Omega = 0.067$ und $N = 500$

Temperaturabhängigkeit des Anregungsspektrums. Im Folgenden studieren wir ein kleines System mit $N = 12$ Teilchen, $\Omega = 0.1$ und $U = -1$ auf einem 10×10-Gitter. Aufgrund der Kleinheit des Systems lässt sich hier das gesamte Anregungsspektum darstellen. Es wird in Abbildung 3.11 gezeigt. Die Geamtzahl an BCS-Zuständen auf dem 10×10-Gitter beträgt 200.

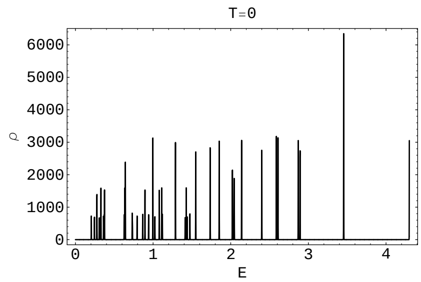


Abbildung 3.11: Gesamtes Anregungsspektrum eines 2D-Systems mit $N = 12$ Teilchen, $\Omega = 0.1$ und $U = -1$ auf einem 10×10-Gitter im Grundzustand

In Abbildung 3.12 vergleichen wir die niederenergetischen Ausschnitte aus den Anregungsspektren für den Grundzustand (links) und die Situation geringfügig oberhalb der kritischen Temperatur (rechts). Die Energie der niedrigsten Anregung oberhalb der kritischen Temperatur beträgt in etwa die Hälfte der Energie der kleinsten Anregung im Grundzustand. Diese große relative Änderung lässt vermuten, dass sich Veränderungen im Einteilchen-Anregungsspektrum als experimentelle Signatur für den Phasenübergang zur Superfluidität eignen könnten.

Oberhalb der kritischen Temperatur sind die ersten beiden Anregungen durch eine größere Energieskala charakterisiert, als die Folgenden. Der Grund für unterschiedliche Energieskalen trotz parabolischem Fallenpotential liegt wohl beim Mean-Field, welches das parabolische Potential zu einem effektiven Gesamtpotential ergänzt.

In Abbildung 3.13 stellen wir links die Temperaturabhängigkeit der niedrigsten Anregung dar. In Anlehnung an den Begriff der Bandlücke bezeichnen wir diese in Abbildung 3.13 als ΔE. Eine wirkliche Bandlücke - wie im translationsinvarianten System - liegt hier aufgrund des parabolischen Potentials allerdings nicht vor. Knapp unterhalb der kritischen Temperatur ist die Temperaturabhängigkeit der niedrigsten Anregung am größten. Dies könnte den Nachweis der Superfluidität im Experiment erleichtern, da das System nicht wesentlich unter die kritische Temperatur gekühlt werden muss, um eine aussagekräftige Veränderung im Anregungsspektrum zu bewirken.

Im rechten Teil von Abbildung 3.13 wird die Temperaturabhängigkeit des Maximums des Ordnungsparameters F_{max} gezeigt. Im Rahmen der LDA-Beschreibung wird die „Bandlücke“ (welche man mittels der LDA nicht berechnen kann) mit dem Maximum des Ordnungsparameters gleichgesetzt. Die „Bandlücke“ die man im Rahmen der exakten Berücksichtigung des harmonischen Fallenpotentials erhält, ist, wie Abbildung 3.13 zeigt, jedoch etwas kleiner.

Aus dem rechten Teil von Abbildung 3.13 lässt sich auch die kritische Temperatur ablesen. Hätten wir nicht das Maximum des Ordnungsparameters F_{max}, sondern den Ordnungsparameter an einem beliebigen superfluiden Punkt des Systems als Funktion der Temperatur dargestellt, so könnte die kritische Temperatur auch aus jenem Graphen abgelesen werden. Dies ist ein weiterer Unterschied zwischen der hier praktizierten adäquaten Berücksichtigung des parabolischen Fallenpotentials und der LDA. Letztere sagt zunächst eine ortsabhängige kritische Temperatur voraus. Als tatsächliche kritische Temperatur (im Rahmen der LDA) wird dann deren Maximum angegeben.

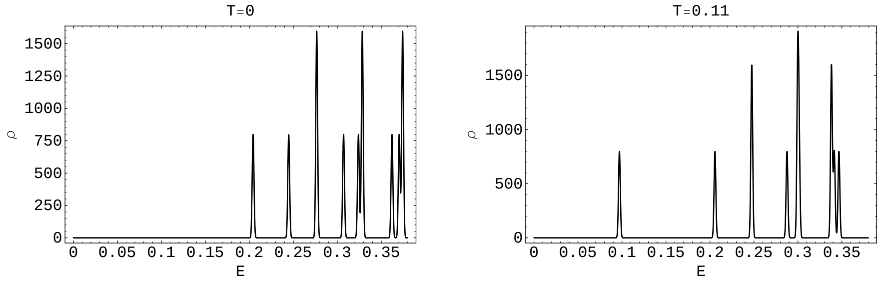


Abbildung 3.12: Anregungsspektren im Grundzustand (links) und oberhalb der kritischen Temperatur (rechts). Dargestellt ist nur der niederenergetische Anteil.

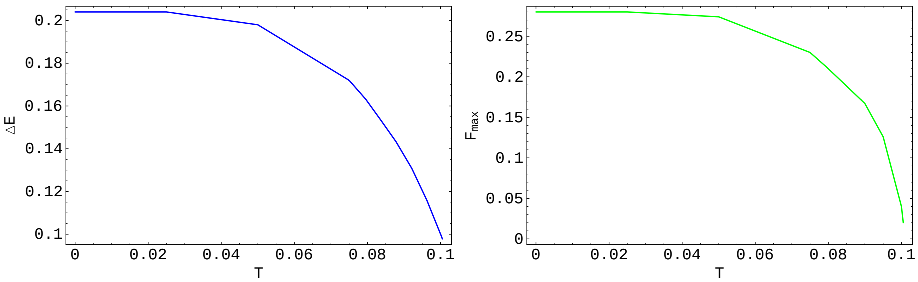


Abbildung 3.13: Temperaturabhängigkeit der „Bandlücke“ (linker Teil) und des Maximums des Ordnungsparameters $F_{\max}$ (rechter Teil)

Lokalisierung der Anregungen. In analogen translationsinvarianten Systemen schließt sich ein Anregungskontinuum an eine Bandlücke von der Größe des dort ortsunabhängigen Ordnungsparameters Δ an ([PS02], [Mah]). Bei zusätzlichem Fallenpotential bestimmen jedoch $\Delta(\vec{\imath})$, $\Omega|\vec{\imath}|^2$ und $U\,n(\vec{\imath})$ gemeinsam die Energie der niedrigsten Anregung. Das resultierende Wechselspiel soll im Folgenden an drei Beispielen erläutert werden.

Abbildung 3.14 zeigt die Entwicklungskoeffizienten $|\alpha_{\sigma,s}(\vec{\imath})|$ und $|\beta_{\sigma,s}(\vec{\imath})|$ des Anregungsoperators $\hat{C}^\dagger_\sigma(s) = \sum_{\vec{\imath}}\left[\alpha_{\sigma,s}(\vec{\imath})\hat{c}_{-\sigma}(\vec{\imath}) + \sum \beta_{\sigma,s}(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\right]$ als Funktion des Abstandes vom Fallenzentrum für ein 2D-System mit $N = 135$ Teilchen, der Wechselwirkung $U = -1$ und dem Fallenpotential $\Omega = 0.01$. Dieses System besitzt keinen Bandisolator im Zentrum und der Ordnungsparameter ist im Zentrum maximal. Die Lokalisierung wird durch zwei Prozesse bestimmt. Einerseits muss die Energie zum Aufbrechen von Cooper-Paaren klein sein (d.h. möglichst weit außen), andererseits muss eine mit der Besetzungszahlprofilveränderung einhergehende eventuelle Erhöhung der potentiellen Energie möglichst klein sein (d.h. möglichst weit innen). Im vorliegenden Fall führt die niedrigste Anregung vor allem dort zu Umstrukturierungen, wo das Besetzungszahlprofil gerade auf null abfällt. Die Anregung 200 liegt weiter innen. Sie hat eine höhere Energie, weil weiter innen Cooper-Paare aufgebrochen werden, die fester gebunden sind.

In Abbildung 3.15 untersuchen wir analog ein System mit $N = 500$ Teilchen (übrige Parameter wie oben). Dieses System besitzt zwar auch keinen Bandisolator im Zentrum, jedoch weist der Ordnungsparameter ein Maximum im Abstand 8 vom Fallenzentrum auf. Die niedrigste Anregung sitzt hier auf der Außenseite des superfluiden Rings, und zwar wieder dort, wo das Besetzungszahlprofil auf null abfällt und der Ordnungsparameter somit verschwindet. Die Energie zum Aufbrechen von Paaren wird auf diese Weise minimiert. Im Gegensatz zu Abbildung 3.14 wandern die höheren Anregungen hier jedoch nicht als Ganzes zum Zentrum. Ferner wird der Gipfel des Ordnungsparameterprofils gemieden, so dass die Anregung 300 auf der Innen- und Außenseite des superfluiden Rings sitzt.

Ein System, das sich durch einen zentralen Bandisolator auszeichnet, untersuchen wir schließlich in Abbildung 3.16. Die Teilchenzahl beträgt hier $N = 1100$ (übrige Parameter wie oben). Der isolierende Bereich endet ungefähr beim Abstand 7 vom Fallenzentrum und das Maximum des Ordnungsparameters befindet sich in etwa bei dem Abstand 13. Die niedrigste Anregung sitzt hier auf der Innenseite des superfluiden Rings, dort wo einerseits der Ordnungsparameter sehr klein ist und andererseits kein Bandisolator besteht.

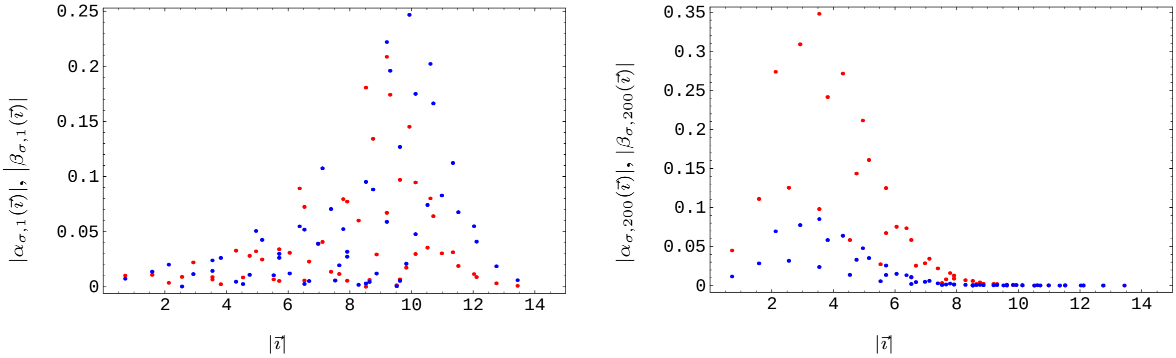


Abbildung 3.14: Entwicklungskoeffizienten $|\alpha_{\sigma,s}(\vec{\imath})|$ (rot) und $|\beta_{\sigma,s}(\vec{\imath})|$ (blau) für die niedrigste Anregung (links) und die Anregung 300 für ein System mit $N = 135$ Teilchen

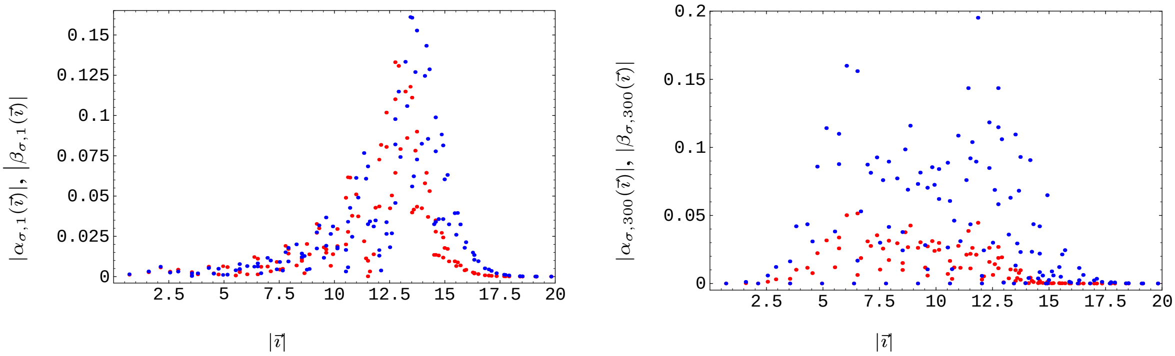


Abbildung 3.15: Entwicklungskoeffizienten $|\alpha_{\sigma,s}(\vec{\imath})|$ (rot) und $|\beta_{\sigma,s}(\vec{\imath})|$ (blau) für die niedrigste Anregung (links) und die Anregung 300 für ein System mit $N = 500$ Teilchen

Die Anregungen zu höherer Energie sitzen nun weiter außen. Dabei wird wieder der Peak des Ordnungsparameters umgangen. Anregung 18 verteilt sich in etwa zu gleichen Teilen auf die Innen- und Außenseite des superfluiden Rings. Anregung 30 sitzt vor allem auf der Außenseite. Bei der Anregung 2500 werden nur noch Teilchen erzeugt. In den höchsten Anregungen spielt das Aufbrechen von Paaren fast keine Rolle mehr. Hier dominiert die zur Umstrukturierung erforderliche potentielle Energie im parabolischen Potential die Energie der Anregung.

3.4 Kollektive Anregungen

labelkollan Das Spektrum der kollektiven Anregungen eines Fermi-Systems wird durch das Auftreten von Superfluidität modifiziert. Der Grund hierfür ist, dass der Ordnungsparameter in der symmetriegebrochenen Phase oszillieren kann (Goldstone-Mode). Die Goldstone-Moden stellen somit eine wichtige (experimentelle) Signatur für das Aufteten von Superfluidität dar [BP00] [Bru02], [OG03]. Während im translationsinvarianten superfluiden Fermi-System die kollektiven Anregungen, die mit der Superfluidität in Verbindung stehen, der gewöhnliche Dispersion des hydrodynamischen Schalls folgen [Par], [OG03], zeichnet sich ein Fallensystem durch zusätzliche Goldstone-Moden aus, deren Frequenzen von den Parametern des Fallenpotentials abhängig sind [BP00], [BM01], [Bru02].

3.4.1 Random-Phase-Approximation für kollektive Anregungen

Im Folgenden übertragen wir den RPA-Formalismus für kollektive Anregungen in kontinuierlichen Systemen (kein optisches Gitter) [BM01] auf unser diskretes System. Die kollektiven Anregungen sind durch die

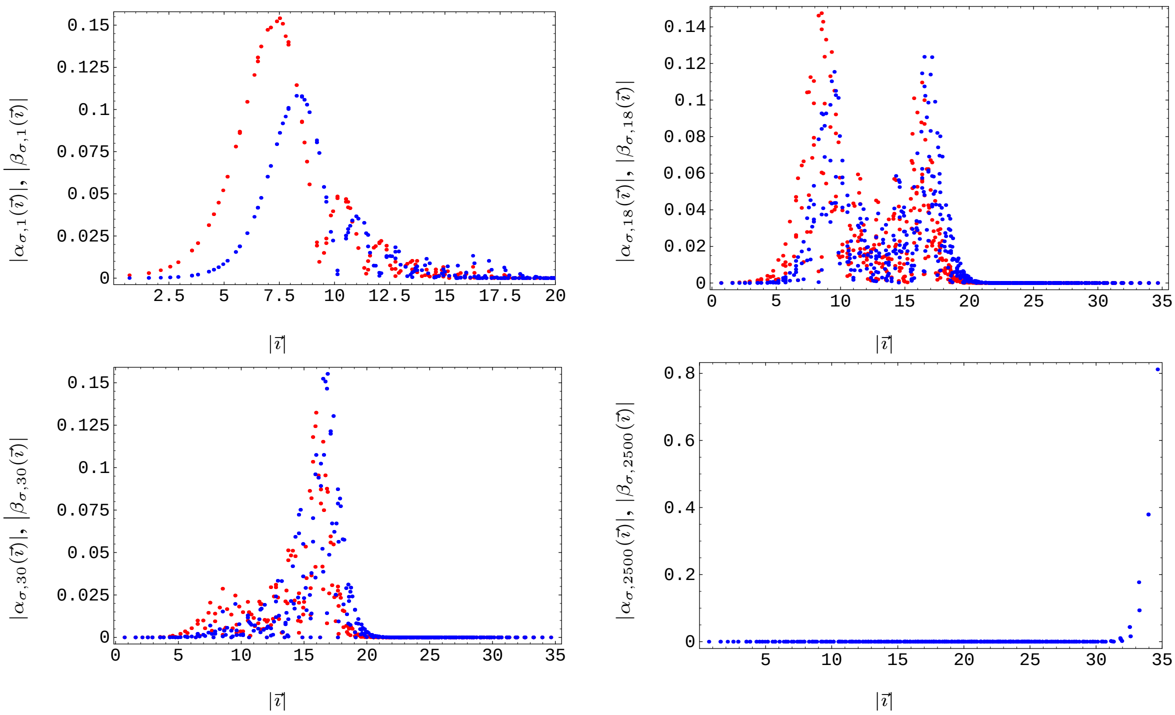


Abbildung 3.16: Entwicklungskoeffizienten $|\alpha_{\sigma,s}(\vec{\imath})|$ (rot) und $|\beta_{\sigma,s}(\vec{\imath})|$ (blau) für die Anregungen 1 (links oben), 18 (rechts oben), 30 (links unten) und 2500 für ein System mit $N = 1100$ Teilchen auf einem 50×50-Gitter

Pole der Matrix

$$\mathbf{\Pi}(\omega) := \begin{pmatrix} \langle\langle \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}), \hat{n}_\uparrow(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}), \hat{n}_\downarrow(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}), \hat{F}(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}), \hat{F}^\dagger(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) \\ \langle\langle \hat{n}_\downarrow(\vec{\imath}), \hat{n}_\uparrow(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{n}_\downarrow(\vec{\imath}), \hat{n}_\downarrow(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{n}_\downarrow(\vec{\imath}), \hat{F}(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{n}_\downarrow(\vec{\imath}), \hat{F}^\dagger(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) \\ \langle\langle \hat{F}(\vec{\imath}), \hat{n}_\uparrow(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{F}(\vec{\imath}), \hat{n}_\downarrow(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{F}(\vec{\imath}), \hat{F}(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{F}(\vec{\imath}), \hat{F}^\dagger(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) \\ \langle\langle \hat{F}^\dagger(\vec{\imath}), \hat{n}_\uparrow(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{F}^\dagger(\vec{\imath}), \hat{n}_\downarrow(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{F}^\dagger(\vec{\imath}), \hat{F}(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) & \langle\langle \hat{F}^\dagger(\vec{\imath}), \hat{F}^\dagger(\vec{k}) \rangle\rangle(\omega) \end{pmatrix} \tag{3.74}$$

gegeben [BM01]. Hierbei bezeichnet $\hat{F}(\vec{\imath})$ den Cooper-Paar-Operator

$$\hat{F}(\vec{\imath}) := \hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}). \tag{3.75}$$

Ferner ist $\langle\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle\rangle(\omega)$ für zwei gegebene Operatoren $\hat{A}$ und $\hat{B}$ die Fourier-Transformierte der retardierten Greenschen Funktion

$$\langle\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle\rangle(\omega) := -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} \langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)]_- \rangle, \tag{3.76}$$

welche

$$\omega \langle\langle \hat{A}, \hat{B} \rangle\rangle(\omega) = \langle [\hat{A}, \hat{B}]_- \rangle + \langle\langle [\hat{A}, \hat{H}]_-, \hat{B} \rangle\rangle(\omega) \tag{3.77}$$

erfüllt ([Nol],[Mah]). Dabei bezeichnet $\langle \hat{O} \rangle$ den thermischen Mittelwert des Operators $\hat{O}$ im durch $\hat{H}$ beschriebenen System und $\hat{A}(t)$ den Heisenberg-Operator zu $\hat{A}$ bezüglich dem Hamilton-Operator $\hat{H}$. Wir zerlegen $\hat{H}$ in den Mean-Field-Anteil $\hat{H}_{HF}$ und den Fluktuationsanteil $\hat{H}_{FL}$, wobei der Mean-Field-Anteil bereits aus (3.38) bekannt ist:

$$\hat{H} = \hat{H}_{HF} + \hat{H}_{FL} \tag{3.78}$$

mit

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_{HF} &= -\sum_{\vec{\imath},\vec{m}} t(\vec{m})\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}+\vec{m}) + \sum_{\vec{\imath},\vec{m}} t(\vec{m})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath}+\vec{m}) \\
&+ \sum_{\vec{\imath}}(\frac{U}{2} + \Omega a^2 i^2 - \mu)\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) - \sum_{\vec{\imath}}(\frac{U}{2} + \Omega a^2 i^2 - \mu)\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath}) \\
&- U\sum_{\vec{\imath}} F^*(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) - U\sum_{\vec{\imath}} F(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath}) \\
&- \mu\mathcal{N} - \frac{U}{4}\sum_{\vec{\imath}} n^2(\vec{\imath}) - U\sum_{\vec{\imath}} F^*(\vec{\imath})F(\vec{\imath}) + \sum_{\vec{\imath}} \Omega a^2 i^2 \\
&= \sum_{s,\sigma} E(s)\hat{C}_\sigma^\dagger\hat{C}_\sigma + C
\end{aligned} \tag{3.79}
$$

$$
\hat{H}_{FL} := U\sum_{\vec{\imath}}\left[\hat{n}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{n}_\downarrow(\vec{\imath}) - F(\vec{\imath})\hat{F}(\vec{\imath}) - F(\vec{\imath})\hat{F}^\dagger(\vec{\imath}) - n_\uparrow(\vec{\imath})\hat{n}_\downarrow(\vec{\imath}) - n_\downarrow(\vec{\imath})\hat{n}_\uparrow(\vec{\imath})\right] \tag{3.80}
$$

$\mathbf{\Pi^0}(\omega)$ sei die $\mathbf{\Pi}(\omega)$ entsprechende Matrix, die sich ergibt, wenn $\hat{H}$ durch $\hat{H}_{HF}$ ersetzt wird. Analog werden $\langle\langle\hat{A},\hat{B}\rangle\rangle^0(\omega)$ und der termische Mittelwert $\langle\hat{O}\rangle^0$ des Operators $\hat{O}$ im durch $\hat{H}_{HF}$ beschriebenen System eingeführt. Ab sofort verwenden wir wieder die Nomenklatur, die Gitterplätze mit einem skalaren Zähler zu nummerieren. Die Transformation von $\hat{c}_\sigma(i)$ auf $\hat{C}_\sigma(s)$ ist durch

$$
\begin{aligned}
\hat{c}_\uparrow(i) &= \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s)\hat{C}_\uparrow(\mathcal{N}-s+1) + \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\hat{C}_\downarrow^\dagger(s), \\
\hat{c}_\downarrow^\dagger(i) &= \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},s)\hat{C}_\uparrow(\mathcal{N}-s+1) + \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},s+\mathcal{N})\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)
\end{aligned} \tag{3.81}
$$

gegeben (3.44). Die Matrix $\boldsymbol{\mathcal{W}}$ wird reell angenommen. Die Operatoren $\hat{n}_\uparrow(\vec{\imath})$, $\hat{n}_\downarrow(\vec{\imath})$, $\hat{F}(\vec{\imath})$ und $\hat{F}^\dagger(\vec{\imath})$ werden auf die Operatoren $\hat{C}_\sigma(s)$ transformiert. Für $\hat{n}$ ergibt sich zum Beispiel

$$
\begin{aligned}
\hat{n}_\uparrow(i) &= \sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s')\hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s'+\mathcal{N})\hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s')\hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\uparrow(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s'+\mathcal{N})\hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s').
\end{aligned} \tag{3.82}
$$

Die analogen Ausdrücke haben wir im Anhang aufgelistet. In der rechten Seite von (3.82) sind Bilinearkombinationen der Operatoren $\hat{C}_\sigma(s)$ enthalten. Wir benötigen die Kommutatoren dieser Operatorkombinationen mit dem Mean-Field-Hamilton-Operator $\hat{H}_{HF}$:

$$
\begin{aligned}
[\hat{H}_{HF}, \hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow(s')]_- &= (E(s) - E(s'))\,\hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow(s'), \\
[\hat{H}_{HF}, \hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s')]_- &= (E(s) + E(s'))\,\hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s'), \\
[\hat{H}_{HF}, \hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\uparrow(s')]_- &= -\,(E(s) + E(s'))\,\hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\uparrow(s'), \\
[\hat{H}_{HF}, \hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s')]_- &= -\,(E(s) - E(s'))\,\hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s').
\end{aligned} \tag{3.83}
$$

$f(E)$ bezeichne die Fermi-Verteilungsfunktion:

$$
f(E) = \frac{1}{e^{\beta E} + 1}. \tag{3.84}
$$

Unter Benutzung der Kommutatorerwartungswerte

$$\begin{aligned}
\langle[\hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow(s'),\hat{n}_\uparrow(i)]_-\rangle^0 &= \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s')\,[f(E(s'))-f(E(s))]\,,\\
\langle[\hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s'),\hat{n}_\uparrow(i)]_-\rangle^0 &= \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s')\,[f(E(s))+f(E(s')-1)]\,,\\
\langle[\hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\uparrow(s'),\hat{n}_\uparrow(i)]_-\rangle^0 &= \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s)\,[1-f(E(s))-f(E(s'))]\,,\\
\langle[\hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s'),\hat{n}_\uparrow(i)]_-\rangle^0 &= \boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s')\,[f(E(s))-f(E(s'))]
\end{aligned} \tag{3.85}$$

und (3.77) erhalten wir dann folgenden Ausdruck für $\langle\langle\hat{n}_\uparrow(i),\hat{n}_\uparrow(k)\rangle\rangle^0(\omega)$:

$$\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{n}_\uparrow(i),\hat{n}_\uparrow(k)\rangle\rangle^0(\omega)\\
&=\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+1-s')\,\frac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega+E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+s')\,\frac{f(E(s))+f(E(s'))-1}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+s)\,\frac{1-f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s')\,\frac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s)+E(s')+i\delta}\,.
\end{aligned} \tag{3.86}$$

Die verbleibenden Einträge der Matrix $\mathbf{\Pi^0}(\omega)$ behandeln wir im Anhang. Wir bestimmen $\mathbf{\Pi}(\omega)$ im Rahmen der Random-Phase-Approximation. Dazu führen wir zunächst die folgenden Kurzformen ein:

$$\begin{aligned}
\hat{O}_1(s,s') &:= \hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow(s'),\\
\hat{O}_2(s,s') &:= \hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s'),\\
\hat{O}_3(s,s') &:= \hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\uparrow(s'),\\
\hat{O}_4(s,s') &:= \hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s')
\end{aligned} \tag{3.87}$$

sind die Bausteine der Besetzungszahl- und Superfluiditätsoperatoren

$$\begin{aligned}
\hat{\Xi}_1(k) &:= \hat{n}_\uparrow(k), & \check{\Xi}_1(k) &:= \hat{n}_\downarrow(k),\\
\hat{\Xi}_2(k) &:= \hat{n}_\downarrow(k), & \check{\Xi}_2(k) &:= \hat{n}_\uparrow(k),\\
\hat{\Xi}_3(k) &:= \hat{F}(k), & \check{\Xi}_3(k) &:= \hat{F}^\dagger(k),\\
\hat{\Xi}_4(k) &:= \hat{F}^\dagger(k), & \check{\Xi}_4(k) &:= \hat{F}(k).
\end{aligned} \tag{3.88}$$

Die Greensche Funktion $\langle\langle\hat{\Xi}_a(i),\check{\Xi}_b(k)\rangle\rangle(\omega)$ lässt sich durch ihre Bausteine (3.87) ausdrücken (von diesem Umstand hatten wir bereits oben Gebrauch gemacht):

$$\langle\langle\hat{\Xi}_a(i),\check{\Xi}_b(k)\rangle\rangle(\omega) = \boldsymbol{\mathcal{M}}_a(i;\ell;s,s')\langle\langle\hat{O}_\ell(s,s'),\check{\Xi}_b(k)\rangle\rangle. \tag{3.89}$$

Die 4-dimensionalen Matrizen $\boldsymbol{\mathcal{M}}_a$ werden durch die vorangehende Gleichung eingeführt. Gemäß (3.77) gilt:

$$\begin{aligned}
&\omega\langle\langle\hat{O}_\ell(s,s'),\check{\Xi}_b(k)\rangle\rangle =\\
&\langle[\hat{O}_\ell(s,s'),\check{\Xi}_b(k)]_-\rangle^0 + \langle\langle[\hat{O}_\ell(s,s'),\hat{H}_{HF}]_-,\check{\Xi}_b(k)\rangle\rangle + \langle\langle[\hat{O}_\ell(s,s'),\hat{H}_{Fl}]_-,\check{\Xi}_b(k)\rangle\rangle.
\end{aligned} \tag{3.90}$$

Dabei ist zu beachten, dass im Sinne der Random-Phase-Approximation explizit auszuwertende Erwartungswerte durch diejenigen des durch $\hat{H}_{HF}$ beschriebenen Systems zu ersetzen sind. Betrachten wir hiervon zunächst den mittleren Term auf der rechten Seite. Aus (3.83) leitet sich

$$\langle\langle[\hat{O}_\ell(s,s'),\hat{H}_{HF}]_-,\check{\Xi}_b(k)\rangle\rangle = E_\ell(s,s')\langle\langle\hat{O}_\ell(s,s'),\check{\Xi}_b(k)\rangle\rangle \tag{3.91}$$

mit

$$\begin{aligned}
E_1(s,s') &:= -[E(s)-E(s')]\\
E_2(s,s') &:= -[E(s)+E(s')]\\
E_3(s,s') &:= -[-E(s)-E(s')]\\
E_4(s,s') &:= -[-E(s)+E(s')]
\end{aligned} \tag{3.92}$$

ab. Wenden wir uns nun dem letzten Term in (3.77) zu. In $\hat{H}_{Fl}$ wird von der ursprünglichen Wechselwirkung $U\sum \hat{c}_{\uparrow}^{\dagger}(i)\hat{c}_{\downarrow}^{\dagger}(i)\hat{c}_{\downarrow}(i)\hat{c}_{\uparrow}(i)$ die Hartree-Fock-genäherte Wechselwirkung - welche in $\hat{H}_{HF}$ enthalten ist - abgezogen (3.78):

$$U\sum_{\vec{\imath}}\left[-F(\vec{\imath})\hat{F}(\vec{\imath})-F(\vec{\imath})\hat{F}^{\dagger}(\vec{\imath})-n_{\uparrow}(\vec{\imath})\hat{n}_{\downarrow}(\vec{\imath})-n_{\downarrow}(\vec{\imath})\hat{n}_{\uparrow}(\vec{\imath})\right]. \tag{3.93}$$

Die höheren Greenschen Funktionen $\langle\langle[\hat{O}_{\ell}(s,s'),U\hat{c}_{\uparrow}^{\dagger}(i)\hat{c}_{\downarrow}^{\dagger}(i)\hat{c}_{\downarrow}(i)\hat{c}_{\uparrow}(i)]_{-},\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle$, die in dem Ausdruck $\langle\langle[\hat{O}_{\ell}(s,s'),\hat{H}_{Fl}]_{-},\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle$ vorkommen, werden mittels der Hartree-Fock-Methode auf elementarere Greensche Funktionen zurückgeführt. Dabei entstehen acht Terme, von denen sich vier mit den entsprechenden vier Termen in (3.93) aufheben. Es verbleibt:

$$\langle\langle[\hat{O}_{\ell}(s,s'),\hat{H}_{Fl}]_{-},\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle=\sum_{m=1}^{4}\sum_{j=1}^{\mathcal{N}}U\langle[\hat{O}_{\ell}(s,s'),\hat{\Xi}_{m}(j)]_{-}\rangle^{0}\langle\langle\check{\Xi}_{m}(j),\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle(\omega). \tag{3.94}$$

Somit erhalten wir:

$$\begin{aligned}&\langle\langle\hat{O}_{\ell}(s,s'),\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle(\omega)=\\&\langle\langle\hat{O}_{\ell}(s,s'),\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega)+U\sum_{m=1}^{4}\sum_{j=1}^{\mathcal{N}}\langle\langle\hat{O}_{\ell}(s,s'),\hat{\Xi}_{m}(j)\rangle\rangle^{0}(\omega)\langle\langle\check{\Xi}_{m}(j),\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle(\omega),\end{aligned} \tag{3.95}$$

bzw. nach Multiplikation mit der Matrix $\boldsymbol{\mathcal{M}}$:

$$\begin{aligned}&\langle\langle\hat{\Xi}_{a}(i),\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle(\omega)=\\&\langle\langle\hat{\Xi}_{a}(i),\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega)+U\sum_{m=1}^{4}\sum_{j=1}^{\mathcal{N}}\langle\langle\hat{\Xi}_{a}(i),\hat{\Xi}_{m}(j)\rangle\rangle^{0}(\omega)\langle\langle\check{\Xi}_{m}(j),\hat{\Xi}_{b}(k)\rangle\rangle(\omega).\end{aligned} \tag{3.96}$$

Führen wir die Matrix

$$\boldsymbol{\mathcal{D}}=\begin{pmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{pmatrix} \tag{3.97}$$

ein, so lautet die formale Lösung von (3.96)

$$\mathbf{\Pi}(\omega)=\frac{1}{\mathbf{1}-\mathbf{U}\mathbf{\Pi}^{\mathbf{0}}(\omega)\boldsymbol{\mathcal{D}}}\mathbf{\Pi}^{\mathbf{0}}(\omega). \tag{3.98}$$

Die Pole von $\mathbf{\Pi}(\omega)$ erhält man aus

$$\det[\mathbf{1}-\mathbf{U}\mathbf{\Pi}^{\mathbf{0}}(\omega)\boldsymbol{\mathcal{D}}]\stackrel{!}{=}\mathbf{0}. \tag{3.99}$$

3.4.2 Numerische Ergebnisse

Zur Bestimmung der Nullstellen von $\det[\mathbf{1}-\mathbf{U}\mathbf{\Pi}^{\mathbf{0}}(\omega)\boldsymbol{\mathcal{D}}]$ benötigen wir zunächst $\mathbf{\Pi}^{\mathbf{0}}(\omega)$. Für ein gegebenes Koordinatenpaar (i,k) sind dazu einige $\mathcal{N}^2$ Rechenschritte erforderlich (siehe z.B. (7.16)). Für die gesamte Matrix $\mathbf{\Pi}^{\mathbf{0}}(\omega)$ betrgt die Größenordung der erforderlichen Rechenschritte also $\mathcal{N}^4$. Bei einem 10×10-Gitter sind dies bereits 10^8. Das Anwachsen des numerischen Aufwandes mit der Zahl der Gitterplätze ist hier also noch ungünstiger als beim Problem der Matrixdiagonalisierung. Mögliche Abhilfe könnte durch den Übergang von der Ortsdarstellung (Erzeuger und Vernichter für Wannier-Zustände) in die Energiedarstellung (Erzeuger und Vernichter für die Ein-Teilchen-Eigenzustände im optischen Gitter mit überlagertem Potential) erreicht werden: Bei kontinuierlichen Systemen treten bei dieser Vorgehensweise Clebsch-Gordan-Koeffizienten auf, die die Summation einschränken [BM01]. Die Möglichkeit einer Übertragung haben wir jedoch nicht weiter untersucht.

Abbildung 3.17 zeigt die Nullstellen von $\det[\mathbf{1} - \mathbf{U}\mathbf{\Pi^0}(\omega)\boldsymbol{\mathcal{D}}]$ in Abhängigkeit der Frequenz für ein zweidimensionales System mit $\Omega = 0.1$ und $U = -1$ bei $T = 0$. Die Teilchenzahl beträgt 32 Fermionen. Verglichen mit der experimentellen Situation ist dies natürlich ein etwas sehr kleines System. Die Wahl dieser kleinen Systemgröße erleichtert jedoch die folgenden Untersuchungen zum Charakter der Moden, die eine Auswertung von $\mathbf{\Pi}(\omega)$ für sehr viele Frequenzen erfordert. Die Resonanzfrequenz der ersten kollektiven Mode beträgt $\omega \approx 0.42076$ und liegt somit geringfügig unterhalb des doppelten Gaps von ungefähr 0.42082.

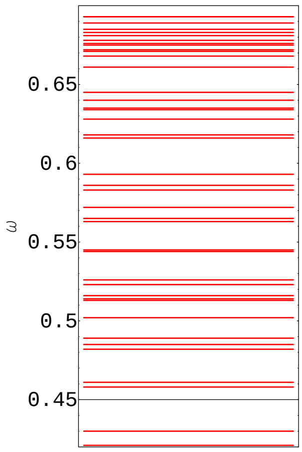


Abbildung 3.17: Kollektive Moden eines 2D-Systems mit 32 Teilchen bei $U = -1$ und $\Omega = 0.1$

Die Möglichkeit der Entwicklung nach Kugelfunktionen erlaubt im kontinuierlichen System eine einfache Klassifizierung der kollektiven Anregungen nach deren Symmetrie. Im Gitter ist die Möglichkeit der Entwicklung nach Kugelfunktionen jedoch nicht gegeben. Die relativ isotropen Profile in Abschnitt 3.3 legen jedoch nahe, dass man die kollektiven Anregungen im Gitter denen im kontinuierlichen System zuordnen können müsste. In kontinuierlichen Systemen befindet die Quadrupolmode sich stets unterhalb des doppelten Gaps [OG05a]. Ferner gibt es dort eine Dipolmode (Kohn-Mode), die immer bei $\omega = \omega_{\text{Trap}}$ lokalisiert ist. Hierbei ist ω_{Trap} die Fallenfrequenz, d.h. das parabolische Fallenpotential ist durch $\frac{1}{2}m\omega_{\text{Trap}}^2$ gegeben. Diese Dipolmode entspricht der Schwerpunktsbewegung des gefangenen Gases; durch Wechselwirkungseffekte wird ihre Frequenz nicht verändert [OG05a]. Da beim optischen Gitter mit überlagertem Fallenpotential jedes Atom quasi doppelt gefangen ist, zum einen durch das optische Gitter und zum anderen durch das zusätzliche harmonische Potential, ist der Zusammenhang $\omega = \omega_{\text{Trap}}$ des harmonischen Fallenpotentials mit der Resonanzfrequenz der Dipolmode hier nicht mehr gültig. Es gilt die Umrechnung $\omega_{\text{Trap}} = \sqrt{\frac{8t}{ma^2}}\sqrt{\Omega}$ mit der von uns verwendeten „Federkonstante“des harmonischen Potentials. Hieraus ist klar, dass ω_{Trap} bei gegebenem Ω noch von der Hüpfamplitude t und der Gitterlänge a abhängt und $\omega = \omega_{\text{Trap}}$ nicht mehr allgemein gilt. Im Folgenden zeigen wir, dass die ersten drei kollektiven Moden positive Parität besitzen (wie auch die Quadrupol- und Monopolmoden der kontinuierlichen Systeme). Genauer sind die ersten beiden Moden von der Gestalt $\begin{array}{c|c} + & + \\ \hline + & + \end{array}$ während die dritte Mode von der Gestalt $\begin{array}{c|c} + & - \\ \hline - & + \end{array}$ ist. Die Bestimmung der Parität der höheren Moden lässt sich mit unserem einfachen Verfahren nicht mehr leicht durchführen, da das charakteristische Verhalten erst sehr dicht bei den Resonanzen einsetzt.

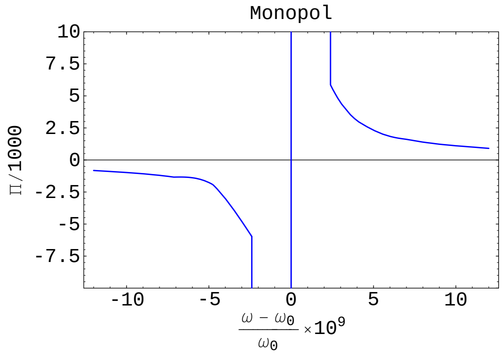
Zur Bestimmung der Parität der Moden wird das Verhalten von $\Pi_{11}(\omega) := \langle\langle \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}_1), \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}_1)\rangle\rangle(\omega)$, $\Pi_{12}(\omega) := \langle\langle \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}_2), \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}_1)\rangle\rangle(\omega)$, $\Pi_{13}(\omega) := \langle\langle \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}_3), \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}_1)\rangle\rangle(\omega)$ und $\Pi_{14}(\omega) := \langle\langle \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}_4), \hat{n}_\uparrow(\vec{\imath}_1)\rangle\rangle(\omega)$ bei Durchgang durch die Resonanz untersucht. Die Vektoren $\vec{\imath}_1$, $\vec{\imath}_2$, $\vec{\imath}_3$ und $\vec{\imath}_4$ sind dabei äquivalente Punkte, die folgendermaßen den vier Vierteln des 2D-Gitters zugeordnet sind: $\begin{array}{c|c} \vec{\imath}_1 & \vec{\imath}_2 \\ \hline \vec{\imath}_3 & \vec{\imath}_4 \end{array}$ $\Pi_{11}(\omega)$, $\Pi_{12}(\omega)$, $\Pi_{13}(\omega)$ und $\Pi_{14}(\omega)$ beschreiben die Reaktion der Besetzungszahl $n_\uparrow$ an den Orten $\vec{\imath}_1$, $\vec{\imath}_2$, $\vec{\imath}_3$ und $\vec{\imath}_4$ auf eine äußere Störung mit der Frequenz ω, die an die Besetzungszahl $n_\uparrow$ am Ort $\vec{\imath}_1$ koppelt. Abbildung 3.18 zeigt deren Verhalten für die erste und die dritte Mode.

Die ersten beiden Moden bezeichen wir der Einfachheit halber als „Monopolmoden“ und die dritte als „Quadrupolmode“. Eine Mode der Gestalt $\begin{array}{c|c} + & + \\ \hline - & - \end{array}$ würden wir als „Dipolmode“ bezeichnen.

Im Experiment lassen sich die „Monopolmoden“ durch periodische Variation der Stärke des parabolischen Fallenpotentials anregen. Die auf das System einwirkende Störung ist dann von der Gestalt

$$\hat{H}_{\text{Störung}}(t) = \Omega_s \cos(\omega t) \sum_{\vec{\imath}} |\vec{\imath}|^2 \hat{n}(\vec{\imath}). \tag{3.100}$$

Zur Anregung einer „Quadrupolmode“ muss das Fallenpotential die gefangene Atomwolke in einer Richtung stauchen und in der anderen Richtung auseinanderziehen. In diesem Fall hätte das Störpotential



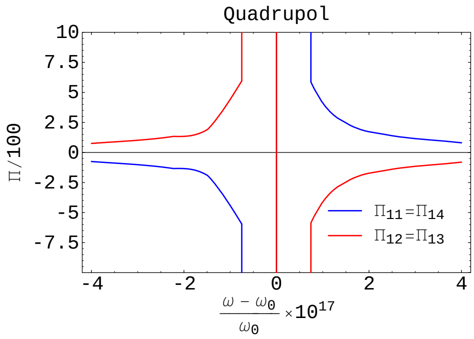


Abbildung 3.18: Frequenzabhängigkeit der Greenschen Funktionen. Die Monopolmode (links) ist an der gleichphasigen Schwingung äquivalenter Gitterpunkte zu erkennen. Bei der Quadrupolmode (rechts) schwingen benachbarte Viertel des Systems entgegengesetzt.

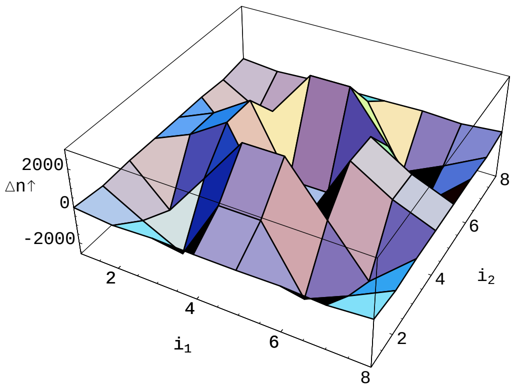


Abbildung 3.19: Struktur der „Monopolschwingung“. $\Delta n_\uparrow(\vec{\imath})$ ist die Reaktion des Systems auf eine Störung der Form (3.100).

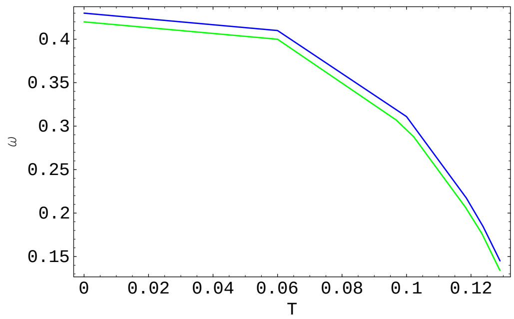


Abbildung 3.20: Temperaturabhängigkeit der beiden niedrigsten „Monopolmoden“.

die Form

$$\hat{H}_{\text{Störung}}(t) = \Omega_s \cos(\omega t) \sum_{\vec{\imath}} (i_1^2 - i_2^2)\hat{n}(\vec{\imath}). \tag{3.101}$$

Eine „Dipolmode“ kann durch periodische Variation der Position des parabolischen Fallenpotentials angeregt werden. Das resultierende Potential am Ort $\vec{\imath}$ ist dann

$$\Omega(\vec{\imath} - \vec{F}\cos(\omega t))^2 = \Omega|\vec{\imath}|^2 - 2\Omega\vec{F}\cdot\vec{\imath}\cos(\omega t) + \Omega|\vec{F}|^2\cos^2(\omega t). \tag{3.102}$$

Die Amplitude der resultierenden zeitlich veränderlichen Profiländerung $\Delta n_\uparrow(\vec{\imath})$ für die erste Mode bei einer Störamplitude $\Omega_s = 1$ ist in Abb. 3.19 dargestellt.

Abbildung 3.20 zeigt die Temperaturabhängigkeit der beiden niedrigsten Moden, die wir als „Monopolmoden“ identifiziert haben. Wie auch bei der Temperaturabhängigkeit der „Bandlücke“ ist die Veränderlichkeit mit der Temperatur unmittelbar unterhalb der kritischen Temperatur am größten.

4 BOSON-FERMION-MISCHUNGEN

Nachdem wir uns in Kapitel 3 mit dem attraktiven On-Site-Hubbard-Modell beschäftigt haben, widmen wir uns nun dem Einfluss der Nächst- Nachbar-Wechselwirkung. Diese lässt sich durch Beimengung von bosonischen Atomen zu den fermionischen Atomen im optischen Gitter realisieren [BHS00] [Mat03] [DLW04], welche eine zusätzliche Wechselwirkung zwischen den Fermionen vermitteln.

War die Beimischung von Bosonen zu kalten fermionischen Gasen anfangs nur aus dem Grunde interessant, dass sich Fermionen mit Hilfe von Bosonen sympathetisch kühlen lassen [PS02], so sind sie mittlerweile als dankbarer Forschungsgegenstand entdeckt worden. Neben dem Aspekt der Auswirkung der Boson-induzierten Fermion-Fermion-Wechselwirkung auf die Superfluidität der fermionischen Atome - auf diesen Aspekt werden wir uns in diesem Kapitel konzentrieren - werden in der Literatur auch Fragen der Phasenseparation, Stabilität gegen Kollabieren, Einfluss der Fermionen auf die Bosonen (z.B. Beeinflussung des Übergangs zum Mott-Isolator), Bildung komplexer Fermionen (Paarbildung aus fermionischem Atom und bosonischem Atom) u.v.a.m. untersucht [RB03] [LSBF04] [FBD$^+$04] [VG02] [AIE03].

Der nicht-lokale Anteil der Boson-induzierten Wechselwirkung zwischen Fermionen ermöglicht unkonventionelle Typen von Superfluidität, bei denen die Cooper-Paare sich aus Fermionen an unterschiedlichen (in unserem Falle benachbarten) Gitterplätzen zusammensetzen (Extended s- p- und d-Wellen). Theoretische Untersuchungen hinsichtlich des möglichen Auftretens solcher unkonventionellen Typen von Superfluidität im Festkörper [MRRT88] lassen sich nur schwer mit dem Experiment vergleichen, da die Wechselwirkungen im Festkörper sehr kompliziert und nicht ausreichend bekannt sind. Es wird allgemein angenommen, dass sich Hochtemperatur-Supraleitung im Festkörper im Rahmen des Hubbard-Modells und seiner Erweiterungen qualitativ verstehen lässt. Bereits die einfachste Variante des Hubbard-Modells ohne Erweiterungen durch Nächst-Nachbar-Wechselwirkung oder Übernächst-Nachbar-Hüpfen wird als vielversprechendes Modell untersucht, um das Wesen des Hochtemperatur-Supraleiters zu erfassen. Isotopieeffekte deuten jedoch auf eine Beteiligung der Elektron-Phonon-Wechselwirkung hin. Aus diesem Grund sind auch Szenarien interessant, in denen angenommen wird, dass die Supraleitung aufgrund einer Phononen-induzierten Wechselwirkung zustande kommt. Es besteht eine formale Ähnlichkeit zwischen dieser von Gitterschwingungen hervorgerufenen Wechselwirkung zwischen Elektronen im supraleitenden Festkörper und der Bosonen-induzierten zwischen den Fermionen eines ultrakalten Gases, deren Auswirkung in diesem Kapitel untersucht wird. Systeme ultrakalter Fermionen bieten dabei den Vorteil relativ genau bekannter Wechselwirkungen. Darüber hinaus lassen sich Atome im optischen Gitter aufgrund der Kurzreichweitigkeit der atomaren Potentiale auf der Skala der optischen Gitterlänge sehr gut durch Hubbard-Modelle beschreiben. Somit kann die experimentelle Realisierung des Hubbard-Modells Licht auf noch ungelöste Fragen dieses Modells werfen (beispielsweise ist der Grundzustand des schwach dotierten zweidimensionalen Hubbard-Modells noch nicht sicher bekannt [TSTZ05]) und theoretische Vorhersagen können quantitativ getestet werden. Die kontinuierliche Variierbarkeit der Parameter von Systemen ultrakalter Atome im Experiment eröffnet die Möglichkeit, Theorien (beispielsweise die BCS-Theorie) innerhalb weiter Grenzen mit dem Experiment zu vergleichen. Die Relevanz für das Verständnis des Hochtemperatur-Supraleiters muss bei solchen experimentellen Studien des Hubbard-Modells natürlich nicht unbedingt im Vordergrund stehen. Vielmehr sind Fermion-Boson-Mischungen ultrakalter Atome im optischen Gitter auch an sich sehr interessant.

4.1 Induzierte Wechselwirkung (translationsinvariante Systeme)

In diesem Abschnitt wird die Boson-induzierte effektive Fermion-Fermion-Wechselwirkung mittels der Linear-Response-Theorie bestimmt. Dazu wird zunächst das Bogoliubov-Anregungsspektrum der Bosonen hergeleitet.

4.1.1 Bogoliubov-Näherung für das Bose-Gas (translationsinvariante Systeme)

Wir erläutern die Bogoliubov-Näherung für das wechselwirkende Bose-Gas in der superfluiden Phase [FW], [Hua], [PS02]. Der Hamilton-Operator des Bose-Hubbard-Modells lautet in Impulsdarstellung

$$\begin{aligned} H_{BH} =& \sum_{\vec{\kappa}} \big[\epsilon_B(\vec{\kappa}) - \mu_B\big] \hat{a}^\dagger(\vec{\kappa})\hat{a}(\vec{\kappa}) + \\ & \frac{1}{2}\frac{U}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\vec{\kappa}_3} \hat{a}^\dagger(\vec{\kappa}_1 - \vec{\kappa}_3)\hat{a}^\dagger(\vec{\kappa}_2 + \vec{\kappa}_3)\hat{a}(\vec{\kappa}_2)\hat{a}(\vec{\kappa}_1). \end{aligned} \tag{4.1}$$

Hierbei ist $\hat{a}(\vec{\kappa})$ der Vernichter für ein bosonisches Atom mit Impuls $\vec{\kappa}$. $\epsilon(\vec{\kappa})$ steht für die Dispersion. Für das chemische Potential der Bosonen steht μ_B. $\mathcal{N}$ bezeichnet die Zahl der möglichen Impulszustände und U charakterisiert die Stärke der lokalen Wechselwirkung. Dabei nehmen wir an, dass die Wechselwirkung repulsiv ist, also $U > 0$.

Da der Zustand mit Impuls null makroskopisch mit N_c bosonischen Atomen besetzt ist, spalten wir von $\hat{a}(0)$ den Mean-Field-Anteil $\sqrt{N_c}$ ab und führen Operatoren $\hat{b}(\vec{\kappa})$ ein, die die Fluktuationen des Bose-Systems um den reinen Kondensatzustand beschreiben:

$$\hat{b}(\vec{\kappa}) := \hat{a}(\vec{\kappa}) - \sqrt{N_c}\,\delta_{\vec{\kappa},0}. \tag{4.2}$$

Die Operatoren in (4.2) haben die Eigenschaft

$$\langle \hat{b}(\vec{\kappa}) \rangle = 0, \tag{4.3}$$

denn nur der Zustand mit Impuls null soll makroskopisch besetzt sein. Ferner fordern wir die Stationarität dieser Erwartungswerte, weil darin zum Ausdruck kommt, dass das Kondensat nicht beschleunigt wird - weder als Ganzes, noch in Teilen:

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{b}(\vec{\kappa}) \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}_{BH}, \hat{b}(\vec{\kappa})]_- \rangle = 0. \tag{4.4}$$

Vernachlässigen wir alle Terme, deren Ordnung in den Fluktuationsoperatoren $\hat{b}(\vec{\kappa})$ größer als zwei ist, so erhalten wir nach Einführung der Kondensatdichte

$$n_c := \frac{N_c}{\mathcal{N}} \tag{4.5}$$

und Einsetzen von (4.2) in (4.1)

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BH} =& -\mu_B N_c + N_c \epsilon_B(0) + \frac{1}{2} U \mathcal{N} n_c^2 + \\ & \sqrt{N_c}\left[-\mu_B + \epsilon_B(0) + n_c U\right] \left[\hat{b}(0) + \hat{b}^\dagger(0)\right] + \\ & \sum_{\vec{\kappa}} \left[\epsilon_B(\vec{\kappa}) - \mu_B + 2U n_c\right] \hat{b}^\dagger(\vec{\kappa})\hat{b}(\vec{\kappa}) + \\ & \frac{1}{2} U n_c \sum_{\vec{\kappa}} \left[\hat{b}(\vec{\kappa})\hat{b}(-\vec{\kappa}) + \hat{b}^\dagger(\vec{\kappa})\hat{b}^\dagger(-\vec{\kappa})\right]. \end{aligned} \tag{4.6}$$

Wegen der Stationaritätsforderung (4.4) muss die lineare Ordnung in den Fluktuationen verschwinden. Mit dem resultierenden Zusammenhang

$$\mu_B = \epsilon(0) + U n_c \tag{4.7}$$

eliminieren wir das chemische Potential in (4.6). Führen wir weiterhin die verschobene Dispersion

$$\bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) := \epsilon(\vec{\kappa}) - \epsilon(0) \tag{4.8}$$

ein, so können wir (4.6) umschreiben:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BH} =& -\frac{1}{2}\sum_{\vec{\kappa}} \big[\bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) + U n_c\big] - \frac{1}{2} U N n_c^2 + \\ & \frac{1}{2}\sum_{\vec{\kappa}} \begin{pmatrix} \hat{b}^\dagger(\vec{\kappa}), & \hat{b}(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) + U n_c & U n_c \\ U n_c & \bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) + U n_c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{b}(\vec{\kappa}) \\ \hat{b}^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{4.9}$$

Die Diagonalisierung dieses Hamilton-Operators gelingt mit der Bogoliubov-Transformation

$$\begin{pmatrix} \hat{b}(\vec{\kappa}) \\ \hat{b}^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(\vec{\kappa}) & -v(\vec{\kappa}) \\ -v(\vec{\kappa}) & u(\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{B}(\vec{\kappa}) \\ \hat{B}^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \tag{4.10}$$

auf die neuen Operatoren $\hat{B}(\vec{\kappa})$. Hierbei ist die Transformationsmatrix durch

$$\begin{aligned} v(\vec{\kappa}) &= \sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{\bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) + Un_c}{E(\vec{\kappa})} - 1\right)}, \\ u(\vec{\kappa})^2 - v(\vec{\kappa})^2 &= 1 \end{aligned} \tag{4.11}$$

gegeben mit den Anregungsenergien

$$E(\vec{\kappa}) = \sqrt{\bar{\epsilon}^2(\vec{\kappa}) + 2Un_c\bar{\epsilon}(\vec{\kappa})}. \tag{4.12}$$

Bei kleinen Energien gilt

$$\bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) \propto (\kappa_1^2 + \kappa_2^2 + \kappa_3^3), \tag{4.13}$$

so dass das Anregungsspektrum also phononisch ist. Die inverse Transformation lautet

$$\begin{pmatrix} \hat{B}(\vec{\kappa}) \\ \hat{B}^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u(\vec{\kappa}) & v(\vec{\kappa}) \\ v(\vec{\kappa}) & u(\vec{\kappa}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \hat{b}(\vec{\kappa}) \\ \hat{b}^\dagger(-\vec{\kappa}) \end{pmatrix}. \tag{4.14}$$

In den neuen Operatoren $\hat{B}(\vec{\kappa})$ ausgedrückt, hat (4.9) die diagonale Darstellung

$$\begin{aligned} \hat{H}_{BH} = &-\frac{1}{2}\sum_{\vec{\kappa}}\left[\bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) + Un_c\right] - \frac{1}{2}U\mathcal{N}n_c^2 + \frac{1}{2}\sum_{\vec{\kappa}} E(\vec{\kappa}) \\ &+ \sum_{\kappa} E(\kappa)\hat{B}^\dagger(\vec{\kappa})\hat{B}(\vec{\kappa}). \end{aligned} \tag{4.15}$$

Die Bedingungen $\hat{B}(\vec{\kappa})|G\rangle = 0$ definieren den Grundzustand $|G\rangle$. $\hat{B}^\dagger(\vec{\kappa})$ erzeugt eine Anregung mit Impuls $\vec{\kappa}$ und Energie $E(\vec{\kappa})$. Für den Füllfaktor folgt

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa}}\langle \hat{a}^\dagger(\vec{\kappa})\hat{a}(\vec{\kappa})\rangle \\ &= \frac{N_c}{\mathcal{N}} + \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa}}\langle \hat{b}^\dagger(\vec{\kappa})\hat{b}(\vec{\kappa})\rangle \\ &= n_c + \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa}}\left[\left(u^2(\vec{\kappa}) + v^2(\vec{\kappa})\right)\langle \hat{B}^\dagger(\vec{\kappa})\hat{B}(\vec{\kappa})\rangle + v^2(\vec{\kappa})\right] \\ &= n_c + \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa}}\left(\frac{\bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) + Un_c}{E(\vec{\kappa})}\frac{1}{e^{\beta E(\vec{\kappa})} - 1} + \frac{\bar{\epsilon}(\vec{\kappa}) + Un_c - E(\vec{\kappa})}{2E(\vec{\kappa})}\right). \end{aligned} \tag{4.16}$$

4.1.2 Effektive Berücksichtigung der Boson-Fermion Wechselwirkung

Mischungen von Bosonen und Fermionen im optischen Gitter werden in Ortsdarstellung durch den Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \hat{H} = &-\sum_{\substack{\vec{\imath}\in Lat \\ \vec{m}\in NN}} t_B(\vec{m})\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}+\vec{m}) - \sum_{\substack{\sigma \\ \vec{\imath}\in Lat \\ \vec{m}\in NN}} t_F(\vec{m})\hat{c}_\sigma^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) - \\ &\mu_B\sum_{\vec{\imath}}\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}) - \mu_F\sum_{\substack{\sigma \\ \vec{\imath}\in Lat}}\hat{c}_\sigma^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) + \\ &\frac{U_{BB}}{2}\sum_{\vec{\imath}\in Lat}\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}) + U_{FF}\sum_{\vec{\imath}\in Lat}\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) + U_{BF}\sum_{\substack{\sigma \\ \vec{\imath}\in Lat}}\hat{c}_\sigma^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath})\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}) \end{aligned} \tag{4.17}$$

beschrieben. Die erste Zeile beschreibt dabei die kinetische Energie mit den Hüpfamplituden t_B für Bosonen und t_F für Fermionen. μ_B und μ_F in der zweiten Zeile sind die chemischen Potentiale für Bosonen bzw. Fermionen. Die letzte Zeile enthält die Boson-Boson-, Fermion-Fermion- und Fermion-Boson-Wechselwirkungen, in ihren Stärken charakterisiert durch U_{BB}, U_{FF} und U_{BF}. Die zugehörige Impulsdarstellung lautet

$$\begin{aligned}\hat{H} =& \sum_{\vec{\kappa}}[\epsilon_B(\vec{\kappa}) - \mu_B]\hat{a}^\dagger(\vec{\kappa})\hat{a}(\vec{\kappa}) + \sum_{\vec{\kappa},\sigma}[\epsilon_F(\vec{\kappa}) - \mu_F]\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa})\hat{c}_\sigma(\vec{\kappa}) + \\ & \frac{U_{BB}}{2\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\vec{\kappa}_3} \hat{a}^\dagger(\vec{\kappa}_1 - \vec{\kappa}_3)\hat{a}^\dagger(\vec{\kappa}_2 + \vec{\kappa}_3)\hat{a}(\vec{\kappa}_2)\hat{a}(\vec{\kappa}_1) + \\ & \frac{U_{BF}}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\vec{\kappa}_3,\sigma} \hat{a}^\dagger(\vec{\kappa}_1 - \vec{\kappa}_3)\hat{a}(\vec{\kappa}_1)\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa}_2 + \vec{\kappa}_3)\hat{c}_\sigma(\vec{\kappa}_2) + \\ & \frac{U_{FF}}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa}_1,\vec{\kappa}_2,\vec{\kappa}_3} \hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\kappa}_1 - \vec{\kappa}_3)\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\kappa}_2 + \vec{\kappa}_3)\hat{c}_\downarrow(\vec{\kappa}_2)\hat{c}_\uparrow(\vec{\kappa}_1),\end{aligned} \tag{4.18}$$

wobei die Dispersionen von Bosonen bzw. Fermionen durch $\epsilon_B(\vec{\kappa})$ bzw. $\epsilon_F(\vec{\kappa})$ gegeben sind. Führen wir die Dichteoperatoren

$$\hat{\rho}_B(\vec{\kappa}) = \sum_{\vec{\alpha}} \hat{a}^\dagger(\vec{\kappa} + \vec{\alpha})\hat{a}(\vec{\alpha}) \tag{4.19}$$

für Bosonen und

$$\hat{\rho}_{F,\sigma}(\vec{\kappa}) = \sum_{\vec{\alpha}} \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\kappa} + \vec{\alpha})\hat{c}_\sigma(\vec{\alpha}) \tag{4.20}$$

für Fermionen ein, so lassen sich alle Wechselwirkungen auf die Gestalt einer Dichte-Dichte-Wechselwirkung bringen.

Genauso wie bei der Boson-Boson- und der Fermion-Fermion-Wechselwirkung, wirkt sich auch die direkte Fermion-Boson-Wechselwirkung

$$U_{BF} \sum_{\vec{\imath},\sigma} \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath})\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}) = U_{BF} \sum_{\vec{\imath},\sigma} \hat{n}_B(\vec{\imath})\hat{n}_\sigma(\vec{\imath}) = \frac{U_{BF}}{\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa},\sigma} \hat{\rho}_B(\vec{\kappa})\hat{\rho}_{F,\sigma}(-\vec{\kappa}) \tag{4.21}$$

nur auf Teilchen am selben Gitterplatz aus. Die Verteilung der Fermionen beeinflusst jedoch die Verteilung der Bosonen. Insbesondere führt eine zeitlich veränderliche Verteilung der Fermionen zu Anregungen im Bose-System, die wiederum die Verteilung der Fermionen beeinflussen. Auf diesem Wege kann ein am Gitterplatz $\vec{\imath}$ befindliches Fermion die Wechselwirkungsenergie eines am Gitterplatz $\vec{\jmath} \neq \vec{\imath}$ befindlichen Fermions mit den dortigen Bosonen beeinflussen.

Linear Response Theorie. Unterliegt ein physikalisches System einer zeitabhängigen Störung $\hat{V}(t') = \hat{A}F(t')$ (hierbei bezeichnet $\hat{A}$ die Observable, die an das System koppelt und $F(t')$ stellt die Verbindung zwischen $\hat{A}$ und der erregenden Störgröße her), so wird im Allgemeinen der Erwartungswert der Observablen $\hat{B}$ aufgrunddessen von seinem Gleichgewichtswert in Abwesenheit der Störung abweichen. Die Abweichung zur Zeit t ist durch die Kubo-Formel gegeben (siehe z.B. [Nol] , [Mah]):

$$\begin{aligned}\Delta B(t) &= \langle\hat{B}\rangle_{\text{gestört}}(t) - \langle\hat{B}\rangle_{\text{ungestört}} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' F(t')\langle[\hat{B}_H(t), \hat{A}_H(t')]_-\rangle_{\text{ungestört}} \\ &= -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' F(t')\langle[\hat{B}_H(t-t'), \hat{A}]_-\rangle_{\text{ungestört}} \\ &= \frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt' F(t') G^{ret}_{BA}(t-t').\end{aligned} \tag{4.22}$$

Hierbei bezeichnet G_{BA}^{ret} die retardierte Greensfunktion

$$G_{BA}^{ret}(t) := -i\Theta(t)\langle[\hat{B}_H(t), \hat{A}]_-\rangle_{\text{ungestört}} \tag{4.23}$$

und für einen gegebenen Operator $\hat{O}$ ist $\hat{O}_H(t)$ die zugehörige Heisenberg-Darstellung bezüglich des ungestörten Hamilton-Operators.

In unserem Fall steht ungestört für die Abwesenheit der Fermionen. Als Störung $\hat{V}(t')$ dient die Fermion-Boson-Wechselwirkung (4.21). Wegen deren Zeitunabhängigkeit ist offenbar $F(t') = 1$. Die Observable $\hat{B}$ in der Kubo-Formel (4.22) identifizieren wir ebenso mit der Fermion-Boson-Wechselwirkung (4.21). Die Schallgeschwindigkeit der Bosonen ist für das kubische optische Gitter durch

$$v_B := \lim_{\vec{\kappa}\to 0} \frac{E(\vec{\kappa})a}{\hbar|\vec{\kappa}|} = \frac{\sqrt{2U_{BB}n_c t_B}a}{\hbar} \tag{4.24}$$

gegeben. Bei vollständig gefülltem Band beträgt die Fermi-Geschwindigkeit

$$v_F := \frac{2zt_F a}{\hbar} \tag{4.25}$$

mit der Zahl z der nächsten Nachbarn. Wir nehmen an, dass die Schallgeschwindigkeit der Bosonen die Fermi-Geschwindigkeit stark übertrifft, das heißt

$$\frac{v_B}{v_F} = \frac{\sqrt{2U_{BB}n_c t_B}}{2zt_F} \gg 1. \tag{4.26}$$

Unter dieser Bedingung vollzieht sich die Zeitentwicklung der Matrixelemente des Fermi-Dichteoperators $\hat{\rho}_{F,\sigma}(\vec{\kappa})$ wesentlich langsamer, als diejenige des Bose-Dichteoperators $\hat{\rho}_B(\vec{\kappa})$. Die Heisenberg-Darstellung von $\hat{\rho}_{F,\sigma}(\vec{\kappa})$ darf somit durch die Schrödinger-Darstellung ersetzt werden. Dann erhalten wir

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2\mathcal{N}} \sum_{\vec{\kappa},\sigma,\sigma'} V_{ind}^{\sigma,\sigma'}(\vec{\kappa})\hat{\rho}_{F,\sigma}(\vec{\kappa})\hat{\rho}_{F,\sigma'}(-\vec{\kappa}) = \\
&\frac{U_{BF}^2}{2\mathcal{N}^2}\frac{-i}{\hbar} \sum_{\vec{\kappa},\sigma,\sigma'} \int_0^\infty dt\, e^{-\delta t}\, \hat{\rho}_{F,\sigma}(\vec{\kappa})\langle[(\hat{\rho}_B^\dagger(\vec{\kappa}))_H(t), \hat{\rho}_B(\vec{\kappa})]_-\rangle_{\text{ungestört}}\hat{\rho}_{F,\sigma'}(-\vec{\kappa}) = \\
&\frac{U_{BF}^2}{2\mathcal{N}^2}\frac{1}{\hbar} \sum_{\vec{\kappa},\sigma,\sigma'} \int_0^\infty dt\, e^{-\delta t}\, \chi_B(\vec{\kappa},t)\hat{\rho}_{F,\sigma}(\vec{\kappa})\hat{\rho}_{F,\sigma'}(-\vec{\kappa})
\end{aligned} \tag{4.27}$$

für die induzierte Fermion-Fermion-Wechselwirkung, die die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion der Bosonen

$$\chi_B(\vec{\kappa},t) = -i\Theta(t)\langle[(\hat{\rho}_B^\dagger(\vec{\kappa}))_H(t), \hat{\rho}_B(\vec{\kappa})]_-\rangle_{\text{ungestört}} \tag{4.28}$$

beinhaltet. Der Dämpfungsfaktor $e^{-\delta\, t}$ in (4.27) mit $\delta > 0$ berücksichtigt, dass nicht beliebig weit zurückliegende Störungen den Jetzt-Zustand des Systems beeinflussen können.

Bosonische Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion in Bogoliubov-Näherung. Nach Anwendung der Bogoliubov-Näherung auf den Dichteoperator der Bosonen und Transformation auf die Operatoren $\hat{B}(\vec{\kappa})$ gemäß (4.10) erhalten wir

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_B(\vec{\kappa}) &= \sum_{\vec{\alpha}} \hat{a}^\dagger(\vec{\kappa}+\vec{\alpha})\hat{a}(\vec{\alpha}) \\
&= N_c\delta_{\vec{\kappa},0} + \sqrt{N_c}\hat{b}(-\vec{\kappa}) + \sqrt{N_c}\hat{b}^\dagger(\vec{\kappa}) \\
&= N_c\delta_{\vec{\kappa},0} + \sqrt{N_c}\big[u(\vec{\kappa}) - v(\vec{\kappa})\big]\big[\hat{B}^\dagger(\vec{\kappa}) + \hat{B}(-\vec{\kappa})\big].
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Damit folgt für die Dichte-Dichte-Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned}
\chi_B(\vec{\kappa},t) &= -i\Theta(t)\langle[(\hat{\rho}_B^\dagger(\vec{\kappa}))_H(t), \hat{\rho}_B(\vec{\kappa})]_-\rangle_{\text{ungestört}} \\
&= -i\Theta(t)N_c\big[u(\vec{\kappa}) - v(\vec{\kappa})\big]^2\big[e^{-\frac{i}{\hbar}E(\vec{\kappa})t} - e^{\frac{i}{\hbar}E(\vec{\kappa})t}\big] \\
&= -2N_c\Theta(t)\frac{\bar{\epsilon}(\vec{\kappa})}{E(\vec{\kappa})}\sin\left(\frac{E(\vec{\kappa})t}{\hbar}\right).
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Schließlich ergibt sich:

$$V_{\sigma,\sigma'}^{ind} = -U_{BF}^2 \frac{2\bar{\epsilon}(\vec{\kappa})n_c}{(\bar{\epsilon}(\vec{\kappa}))^2 + 2U_{BB}n_c\bar{\epsilon}(\vec{\kappa})} = \frac{-2U_{BF}^2 n_c}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)}\Big[1 - \frac{\epsilon_B(\vec{\kappa})}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)} + \Big(\frac{\epsilon_B(\vec{\kappa})}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)}\Big)^2 - \cdots\Big]. \tag{4.31}$$

Der Abbruch der Reihenentwicklung in (4.31) nach der ersten Ordnung führt unter der Bedingung

$$\frac{2U_{BB}n_c}{|\epsilon_B(0)|} \geq 4 \tag{4.32}$$

zu einem maximalen Fehler von unter 4% . In diesem Fall beschreibt die genäherte induzierte Wechselwirkung

$$V_{\sigma,\sigma'}^{ind} \simeq \frac{-2U_{BF}^2 n_c}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)}\Big[1 - \frac{\epsilon_B(\vec{\kappa})}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)}\Big] \tag{4.33}$$

genau die Summe aus einer lokalen Wechselwirkung (konstanter Anteil) und einer Nächst-Nachbar-Wechselwirkung ($\vec{\kappa}$-abhängiger Anteil). Die Berücksichtigung höherer Glieder als erster Ordnung in (4.31) entspräche der Einbeziehung von Übernächst-Nachbar-Wechselwirkung, Überübernächst-Nachbar-Wechselwirkung, ... Im Falle

$$\frac{2U_{BB}n_c}{|\epsilon(0)|} \gg 1 \tag{4.34}$$

kann noch weiter vereinfacht werden:

$$V_{\sigma,\sigma'}^{ind} \simeq \frac{-U_{BF}^2}{U_{BB}}\Big[1 - \frac{\epsilon_B(\vec{\kappa})}{2U_{BB}n_c}\Big]. \tag{4.35}$$

Größenverhältnisse in K-Rb, K-Na und K-K-Mischungen. In Abschnitt 4.2 wird sich zeigen, dass der $\vec{\kappa}$-abhängige Anteil der induzierten Wechselwirkung die unkonventionellen Paarungstypen der Extended s-, p- und d-Wellen fördert. Dabei interessieren wir uns im Besonderen für die letzteren beiden. Bei negativer lokaler Wechselwirkung lässt sich unkonventionelle Supraleitung vom p- oder d-Wellen-Typ nur erhalten, wenn die Nächst-Nachbar-Wechselwirkung verglichen mit der On-Site-Wechselwirkung nicht zu klein ist (diese Aussage gilt nicht bei $U \gg t_F$ [MRRT88]). Eine dominante Nächst-Nachbar-Wechselwirkung lässt sich allerdings durch Vergrößern von

$$\frac{\epsilon_B(\vec{\kappa})}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)} \tag{4.36}$$

nur in den durch (4.32) gegebenen Grenzen begünstigen. In vielen Fällen ist bei Abwesenheit eines äußeren Magnetfeldes U_{FF} jedoch positiv. Gilt zusätzlich

$$\frac{2U_{BF}^2 n_c}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)} < U_{FF}, \tag{4.37}$$

so ist die vollständige On-Site-Wechselwirkung (Summe von U_{FF} und induzierter lokaler Wechselwirkung) positiv. In diesem Fall ist die Extended-s-Welle gegenüber den unkonventionellen Paarungtypen p und d stark unterdrückt.

Als erstes Beispiel betrachten wir eine ^{40}K-^{87}Rb-Mischung. Die s-Wellen-Streulänge für $|\frac{9}{2};\frac{9}{2}\rangle$-$|\frac{9}{2};\frac{7}{2}\rangle$-Kollisionen von K beträgt $a_{KK} = (169 \pm 9)a_0$ [BBG$^+$00] (a_0 ist der Bohrsche Radius) und diejenige für Rb-Kollisionen zwischen $|2;2\rangle$-Zuständen $a_{RbRb} = (106 \pm 4)a_0$ [PS02]. Für die Streuung von K (Zustand $|\frac{9}{2};\frac{9}{2}\rangle$) an Rb (Zustand $|2;2\rangle$) werden in [RRMI98] die Ergebnisse zweier unabhängiger Experimente angegeben: $a_{KRb} = -330^{+160}_{-100}a_0$ und $a_{KRb} = -261^{+170}_{-159}a_0$. Wir gehen von $a_{KK} = 169a_0$, $a_{RbRb} = 106a_0$ und $a_{KRb} = -330a_0$ aus. Eigentlich müssten bei einer Mischung von zwei fermionischen und einer bosonischen Spezies zwei Streulängen für Fermion-Boson-Kollisionen berücksichtigt werden (da diese im Allgemeinen voneinander abweichen). Vereinfachend soll in diesem Kapitel von identischen Streulängen für die Kollision der bosonischen mit den beiden fermionischen Konstituenten ausgegangen werden. Bei einer Gitterkonstante des optischen Gitters von 530 nm sowie Potentialtiefen (für die Fermionen) $\eta_1 = \eta_2 = 5$ und $\eta_3 = 30$ (effektiv zweidimensionales optisches Gitter) ergeben sich folgende

Potentialtiefen für die Bosonen: $\eta_1 = \eta_2 = 12$ und $\eta_3 = 70$. Hierbei haben wir die Übergangsraten und -wellenlängen $\Gamma_K = 0.379 \cdot 10^8\mathrm{s}^{-1}$ und $\lambda_K = 766.5$ nm für den 4p-4s-Übergang des Kaliums sowie $\Gamma_{Rb} = 0.36 \cdot 10^8 s^{-1}$ und $\lambda = 785$nm für den 5p-5s-Übergang des Rubidiums zugrundegelegt [Bas]. Es ergeben sich die Wechselwirkungsstärken $U_{FF} = 1.23\,D$, $U_{BB} = 0.72\,D$ und $U_{BF} = -2.4\,D$. Die resultierende vollständige On-Site-Wechselwirkung ist in diesem Fall negativ. Es könnte versucht werden, eine positive On-Site-Wechselwirkung zu realisieren, indem eine Laserwellenlänge gewählt wird, die wesentlich dichter am 5s-5p-Übergang des Rubidiums liegt, als am 4s-4p-Übergang des Kaliums. So ließe sich erreichen, dass das optische Gitter für die Bosonen noch wesentlich tiefer wird, als für die Fermionen, woraus sich schließlich eine positive On-Site-Wechselwirkung ergeben könnte. In der Tat ist dies im vorliegenden Fall möglich: Bei $\eta = 5$ für die Fermionen (kubisches optisches Gitter in 3D) und $\lambda = 840$nm ergibt sich für die Bosonen $\eta = 15$. Die vollständige lokale Wechselwirkung beträgt dann $3.45D$. Kriterium (4.32) lautet hier konkret $n_c \geq 0.2$. Als weitere Möglichkeit könnte in Betracht kommen, die Null-Feld-Streulänge des Rubidiums durch eine Feshbach-Resonanz zu vergrößern. Befindet man sich noch relativ weit im BCS-Regime der Feshbachresonanz, so dass der gebundene Zustand des geschlossenen Kanals praktisch nicht besetzt wird (ausschließlich virtuelle Besetzung), dann besteht der Einfluss der Feshbach-Resonanz lediglich in einer Modifikation der Streulänge (siehe Kapitel 5).

Als zweites Beispiel betrachten wir ^{40}K-^{23}Na-Mischungen. Die Null-Feld-Streulängen nehmen wir zu $a_{NaNa} = 63a_0$ ($|2;2\rangle - |2;2\rangle$-Kollisionen) und $a_{NaK} = -129a_0$ ($|2;2\rangle - |\frac{9}{2};\frac{9}{2}\rangle$-Kollisionen) an (in [VJC01] werden $a_{NaNa} = 62.5 \pm 0.5a_0$ und $a_{NaK} = -129^{28}_{-40}$ angegeben). Die Zerfallsrate des 3p-Zustandes von Na gegenüber dem Grundzustand beträgt $\Gamma_{Na} = 0.616 \cdot 10^8\mathrm{s}^{-1}$ und die zugehörige Wellenlänge $\lambda_{Na} = 589$nm. Bei den Potentialtiefen $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = 50$ für die Fermionen und der Laserwellenlänge $\lambda = 833$nm betragen die Potentialtiefen für die Bosonen $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = 5$. Daraus ergibt sich eine vollständige lokale Wechselwirkung von $740D$. Diese verkleinert sich bei Vergrößerung der Wellenlänge und durchläuft dabei einen Vorzeichenwechsel. Somit lassen sich die Parameter so wählen, dass die vollständige lokale Wechselwirkung positiv ist und das System durch eine schwache Kopplung (hier gilt die Mean-Field-Theorie recht gut) beschrieben wird. Kriterium (4.32) lautet hier konkret $n_c \geq 3.2$.

Für die in [DLW04] angegebenen Parameter verletzt die ^{23}Na-^{40}K-Mischung das Kriterium (4.32) und erst recht das Kriterium (4.34). Dennoch wenden [DLW04] Gleichung (4.34) für ihre Untersuchungen an.

^{40}K-^{41}K-Mischungen sind unser drittes und letztes Beispiel. Die s-Wellen-Streulänge für $|2;2\rangle - |2;2\rangle$-Kollisionen von ^{41}K nehmen wir zu $a_{41-41} = 60a_0$ an und diejenige von ^{40}K-^{41}K-Kollisionen zu $a_{40-41} = 97a_0$ [BBG$^+$00]. Die bosonische und fermionische Potentialtiefe stimmen bei diesem System überein. Das Vorzeichen der vollständigen lokalen Wechselwirkung lässt sich also sehr leicht bestimmen und ist von der Gitterkonstante unabhängig: $(169 - 97^2/60)a_0 = 12.18a_0 > 0$.

Eine k-abhängige induzierte Wechselwirkung erlaubt auch unkonventionelle Supraleitung vom p-Wellen-Typ. Dominiert diese in einer Mischung aus zwei fermionischen und einer bosonischen Spezies nicht unbedingt, so ist sie doch in einer Mischung aus einer fermionischen und einer bosonischen Spezies konkurrenzlos. Dies rührt daher, dass s- und d-Wellen-Paarung nur für unterschiedliche Pseudospins möglich ist, während p-Wellen-Paarung zwischen gleichen Pseudospins stattfindet.

4.2 Translationsinvariante Boson-Fermion-Mischung

Gemäß (4.33) vermitteln die bosonischen Atome - sofern Bedingung (4.32) erfüllt ist - die Wechselwirkung

$$V^{ind}_{\sigma,\sigma'}(\vec{\kappa}) = U_{ind} + W_{ind}(\vec{\kappa}) \tag{4.38}$$

mit dem lokalen Anteil

$$U_{ind} = \frac{-2U_{BF}^2 n_c}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)} \tag{4.39}$$

und dem nächst-Nachbar-Anteil

$$W_{ind}(\vec{\kappa}) = \frac{2U_{BF}^2 n_c}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)} \frac{\epsilon_B(\vec{\kappa})}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)} \tag{4.40}$$

zwischen den fermionischen Atomen. Mittels Boson-Fermion-Mischungen gelingt also die Realisierung des extended Hubbard-Modells, welches im Rahmen der Hartree-Fock-Näherung von [MRRT88] im zweidimensionalen kubischen Fall untersucht wurde.

Auf die Möglichkeit, dass das Studium von Bose-Fermion-Mischungen beim Verständnis der Hochtemperatursupraleitung hilfreich sein könnte, wurde von [DLW04] hingewiesen, welche für konkrete experimentelle Parameter das Phasendiagramm der Boson-Fermion-Mischung im zweidimensionalen optischen Gitter bestimmen. Systeme ultrakalter Fermionen sind jedoch auch als eigenständige Systeme - nicht nur im Hinblick auf die experimentelle Simulation von Hochtemperatursupraleitung - interessant. Aus diesem Grunde untersuchen wir im Folgenden auch dreidimensionale und weitere zweidimensionale Systeme.

4.2.1 Das dreidimensionale kubische optische Gitter

Die Dispersion der Bosonen ist durch

$$\epsilon_B(\vec{\kappa}) = -2t_B\big(\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2) + \cos(\kappa_3)\big) \tag{4.41}$$

und diejenige der Fermionen durch

$$\epsilon_F(\vec{\kappa}) = -2t_F\big(\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2) + \cos(\kappa_3)\big) \tag{4.42}$$

gegeben. Als Energiemaßstab wählen wir die halbe Breite des Energiebandes der Fermionen:

$$D := 6t_F \tag{4.43}$$

Pseudospin-Singulett-Paarung. $\epsilon(\vec{\kappa} - \vec{\alpha})$ lässt sich separieren:

$$\epsilon(\vec{\kappa} - \vec{\alpha}) = -\frac{t_B}{6}\big[\gamma(\vec{\kappa})\gamma(\vec{\alpha}) + \eta_1(\vec{\kappa})\eta_1(\vec{\alpha}) + \eta_2(\vec{\kappa})\eta_2(\vec{\alpha}) + \text{Rest}(\vec{\kappa}, \vec{\alpha})\big]. \tag{4.44}$$

Hierbei haben wir

$$\begin{aligned} \gamma(\vec{\kappa}) &:= 2\big(\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2) + \cos(\kappa_3)\big) \\ \eta_1(\vec{\kappa}) &:= \sqrt{2}\big(\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2) - 2\cos(\kappa_3)\big) \\ \eta_2(\vec{\kappa}) &:= \sqrt{6}\big(\cos(\kappa_1) - \cos(\kappa_2)\big) \end{aligned} \tag{4.45}$$

eingeführt. $\text{Rest}(\vec{\kappa}, \vec{\alpha})$ besitzt sowohl bezüglich $\vec{\kappa}$ als auch bezüglich $\vec{\alpha}$ negative Parität und wird deshalb bei den folgenden Integrationen immer wegfallen. Mit der Abkürzung

$$\zeta = \sqrt{\frac{t_B}{2U_{BB}n_c - \epsilon_B(0)}} \tag{4.46}$$

wird (4.40)

$$\begin{aligned} W_{ind}(\vec{\kappa} - \vec{\alpha}) &= 2U_{ind}\zeta^2\big(\cos(\kappa_1 - \alpha_1) + \cos(\kappa_2 - \alpha_2) + \cos(\kappa_3 - \alpha_3)\big) \\ &= \frac{U_{ind}\zeta^2}{6}\big[\gamma(\vec{\kappa})\gamma(\vec{\alpha}) + \eta_1(\vec{\kappa})\eta_1(\vec{\alpha}) + \eta_2(\vec{\kappa})\eta_2(\vec{\alpha}) + \text{Rest}(\vec{\kappa}, \vec{\alpha})\big]. \end{aligned} \tag{4.47}$$

Die vollständige Wechselwirkung beträgt

$$V_{\sigma,\sigma'}(\vec{\kappa}) = U_{FF}\delta_{\sigma,-\sigma'} + U_{ind} + W_{ind}(\vec{\kappa}). \tag{4.48}$$

Nach (3.15) ergibt sich die renormierte Dispersion $\xi_F(\vec{\kappa})$ zu

$$\xi_F(\vec{\kappa}) := \epsilon_F(\vec{\kappa}) + \epsilon_F^I(\vec{\kappa}) - \mu = \epsilon_F(\vec{\kappa}) - \frac{W}{6}\Sigma\,\gamma(\vec{\kappa}) - \tilde{\mu}, \tag{4.49}$$

wobei

$$\Sigma := \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}}\gamma(\vec{\alpha})n_\uparrow(\vec{\alpha}) = -\frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1\int_0^\pi d\alpha_2\int_0^\pi d\alpha_3\gamma(\vec{\alpha})\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right) \tag{4.50}$$

den $\vec{\kappa}$-abhängigen Anteil der Selbstenergie beschreibt, während in dem verschobenen chemischen Potential

$$\tilde{\mu} := \mu - \frac{1}{2}U_{FF}\,n - \frac{1}{2}U_{ind}\,n - 6W_{ind}\,n \tag{4.51}$$

die konstanten Beiträge zur Selbstenergie Berücksichtigung finden. Als Bestimmungsgleichung (3.34) des Ordnungsparameters erhalten wir

$$\begin{aligned}\Delta(\vec{\kappa}) &= -\frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}} V^{\uparrow\downarrow}(\vec{\kappa}-\vec{\alpha})\frac{\Delta(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right)\\ &= -\big(U+U_{ind}\big)I_1 - \frac{U_{ind}\zeta^2}{6}\big[+I_\gamma\gamma(\vec{\kappa}) + I_{\eta_1}\eta_1(\vec{\kappa}) + I_{\eta_2}\eta_2(\vec{\kappa}),\big]\end{aligned} \tag{4.52}$$

wenn wir die folgenden Integrale einführen:

$$\begin{aligned}I_1 &= \frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1\int_0^\pi d\alpha_2\int_0^\pi d\alpha_3\frac{\Delta(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right)\\ I_\gamma &= \frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1\int_0^\pi d\alpha_2\int_0^\pi d\alpha_3\gamma(\vec{\alpha})\frac{\Delta(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right)\\ I_{\eta_1} &= \frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1\int_0^\pi d\alpha_2\int_0^\pi d\alpha_3\eta_1(\vec{\alpha})\frac{\Delta(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right)\\ I_{\eta_2} &= \frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1\int_0^\pi d\alpha_2\int_0^\pi d\alpha_3\eta_2(\vec{\alpha})\frac{\Delta(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})}\tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right).\end{aligned} \tag{4.53}$$

Wie in (3.30) eingeführt, sind hierbei die Hartree-Fock-Energien durch

$$E(\vec{\kappa}) = \sqrt{\xi_F^2 + |\Delta(\vec{\kappa})|^2} \tag{4.54}$$

gegeben. Offensichtlich lautet der allgemeine Ansatz (bei Beschränkung auf positive Parität) zur Lösung von (4.52):

$$\Delta(\vec{\kappa}) = \Delta_1 + \Delta_\gamma\gamma(\vec{\kappa}) + \Delta_{\eta_1}\eta_1(\vec{\kappa}) + \Delta_{\eta_2}\eta_2(\vec{\kappa}). \tag{4.55}$$

Δ_1 beschreibt dabei den Beitrag der On-Site-s-Welle, Δ_γ denjenigen der sogenannten Extended-s-Welle und Δ_{η_1} sowie Δ_{η_2} schließlich den Anteil der d-Welle. Letzteres lässt sich unter anderem anhand der für kleine κ-Werte gültigen Beziehungen

$$\begin{aligned}\eta_1(\vec{\kappa}) &\propto \kappa_1^2+\kappa_2^2-2\kappa_3^2 = \kappa^2\big(3\cos^2(\theta)-1\big) \propto \kappa^2 Y_{20}(\theta,\phi)\\ \eta_2(\vec{\kappa}) &\propto \kappa_1^2-\kappa_2^2 = \kappa^2\sin^2(\theta)\cos(2\phi) \propto \kappa^2\big(Y_{2,-2}+Y_{2,2}\big)\end{aligned} \tag{4.56}$$

verstehen. Der Füllfaktor n folgt aus (3.36):

$$\begin{aligned}n &= \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa},\sigma} n_\sigma(\vec{\kappa}) = \frac{2}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa}}\left[\frac{1}{2} - \frac{\xi_F(\vec{\kappa})}{2E(\vec{\kappa})}\tanh\frac{E(\vec{\kappa})}{2T}\right]\\ &= 1 - \frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\kappa_1\int_0^\pi d\kappa_2\int_0^\pi d\kappa_3\frac{\xi_F(\vec{\kappa})}{E(\vec{\kappa})}\tanh\frac{E(\vec{\kappa})}{2T}.\end{aligned} \tag{4.57}$$

Die Gleichungen für den Ordnungsparameter (4.52), die Dispersionsrenormierung Σ (4.49) und den Füllfaktor (4.57) müssen im Allgemeinen gemeinsam gelöst werden. Ist nicht der Füllfaktor n, sondern das chemische Potential $\tilde{\mu}$ vorgegeben, so sind lediglich (4.52) und (4.49) gemeinsam zu lösen.

Unmittelbar unterhalb der kritischen Temperatur T_c lassen sich (4.52), (4.49) und (4.57) vereinfachen, denn der Ordnungsparameter verschwindet bei T_c. Dicht unterhalb der kritischen Temperatur, d.h für $(T_c - T)/T_c \ll 1$ und $|\Delta(\vec{\kappa})| \ll \max\{|\xi_F|\}$ nimmt (4.52) nach Einsetzen von (4.55) die Gestalt

$$\begin{aligned}
&\Delta_1 + \Delta_\gamma \gamma(\vec{\kappa}) + \Delta_{\eta_1}\eta_1(\vec{\kappa}) + \Delta_{\eta_2}\eta_2(\vec{\kappa}) = \\
&-\big(U + U_{ind}\big)\phi_1\Delta_1 - \big(U + U_{ind}\big)\phi_\gamma\Delta_\gamma - \\
&-\frac{U_{ind}\zeta^2}{6}\Delta_1\phi_\gamma\gamma(\vec{\kappa}) - \frac{U_{ind}\zeta^2}{6}\Delta_\gamma\phi_{\gamma\gamma}\gamma(\vec{\kappa}) - \\
&\frac{U_{ind}\zeta^2}{6}\Delta_{\eta_1}\phi_{\eta_1\eta_1}\eta_1(\vec{\kappa}) - \frac{U_{ind}\zeta^2}{6}\Delta_{\eta_2}\phi_{\eta_1\eta_1}\eta_2(\vec{\kappa})
\end{aligned} \tag{4.58}$$

oder (in Matrixform)

$$\begin{pmatrix} \big(U+U_{ind}\big)\phi_1+1 & \big(U+U_{ind}\big)\phi_\gamma & 0 & 0 \\ \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_\gamma & \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\gamma\gamma}+1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\eta_1\eta_1}+1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\eta_1\eta_1}+1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_\gamma \\ \Delta_{\eta_1} \\ \Delta_{\eta_2} \end{pmatrix} = 0 \tag{4.59}$$

an, wobei wir die Integrale

$$\begin{aligned}
\phi_1 &= \int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \int_0^\pi d\alpha_3 \frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_c}}{2\pi^3\xi_F(\vec{\alpha})} \qquad & \phi_{\gamma\gamma} &= \int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \int_0^\pi d\alpha_3 \gamma^2(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_c}}{2\pi^3\xi_F(\vec{\alpha})} \\
\phi_\gamma &= \int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \int_0^\pi d\alpha_3 \gamma(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_c}}{2\pi^3\xi_F(\vec{\alpha})} \qquad & \phi_{\eta_1\eta_1} &= \int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \int_0^\pi d\alpha_3 \eta_1^2(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_c}}{2\pi^3\xi_F(\vec{\alpha})}
\end{aligned} \tag{4.60}$$

eingeführt haben. Ferner haben wir ausgenutzt, dass $\xi_F(\vec{\alpha}) = \epsilon_F(\vec{\alpha}) - W\Sigma\,\gamma(\vec{\alpha})/6 - \tilde{\mu}$ und $\gamma(\vec{\alpha})$ unter Permutation der Koordinaten $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$ invariant sind, während η_2 bei Vertauschung von α_1 und α_2 sein Vorzeichen ändert und η_1 aus zwei Summanden besteht, deren erster bei Vertauschen von α_1 mit α_3 und deren zweiter bei Vertauschen von α_2 mit α_3 ihre Vorzeichen ändern. Das homogene Gleichungssystem (4.59) besitzt Lösungen, wenn seine Determinante verschwindet:

$$\begin{vmatrix} \big(U+U_{ind}\big)\phi_1+1 & \big(U+U_{ind}\big)\phi_\gamma & 0 & 0 \\ \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_\gamma & \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\gamma\gamma}+1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\eta_1\eta_1}+1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\eta_1\eta_1}+1 \end{vmatrix} = 0 \tag{4.61}$$

Die Ausdrücke für die Dispersionsrenormierung (4.49) und den Füllfaktor (4.57) vereinfachen sich bei T_c zu

$$\Sigma = -\frac{1}{2\pi^3}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_0^\pi d\alpha_2 \int_0^\pi d\alpha_3 \gamma(\vec{\alpha}) \tanh\left(\frac{\xi(\vec{\alpha})}{2T_c}\right) \tag{4.62}$$

im Falle der Selbstenergie und zu

$$n = 1 - \frac{1}{\pi^3}\int_0^\pi d\kappa_1 \int_0^\pi d\kappa_2 \int_0^\pi d\kappa_3 \tanh\frac{\xi_F(\vec{\kappa})}{2T}. \tag{4.63}$$

im Falle des Füllfaktors. Zur Bestimmung der Eigenschaften des Systems bei T_c müssen (4.61) und (4.62) gemeinsam gelöst werden. Im Allgemeinen wird es mehrere Lösungen geben, von denen nur diejenige mit dem höchsten T_c relevant ist. Entspricht die Lösung von

$$\frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\eta_1\eta_1} + 1 = 0 \tag{4.64}$$

der größten Temperatur, so liegt d-Wellen-Superfluidität vor. Eine Mischung aus On-Site- und Extended-s-Welle liegt dagegen dann vor, wenn

$$\begin{vmatrix} \left(U_{FF}+U_{ind}\right)\phi_1+1 & \left(U_{FF}+U_{ind}\right)\phi_\gamma \\ \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_\gamma & \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\gamma\gamma}+1 \end{vmatrix} = 0 \tag{4.65}$$

durch eine höhere Temperatur gelöst werden kann.

Die Situation bei halber Bandfüllung. Aus dem Studium zweidimensionaler Systeme ([MRRT88]) ist bekannt, dass die Dominanz der d-Welle - sollte es sie denn geben - über die s-Welle bei halber Bandfüllung maximal ist. Da wir zunächst klären möchten, ob d-Wellen auch im 3D-Extended-Hubbard-Modell möglich sind, beginnen wir unsere Untersuchungen bei halber Bandfüllung. Hier gilt $\phi_\gamma = 0$ wegen $\tilde{\mu} = 0$, so dass sich (4.65) auf die beiden Gleichungen

$$-1 = \left(U_{FF}+U_{ind}\right)\phi_1, \tag{4.66}$$

$$-1 = \frac{1}{6}U_{ind}\zeta^2\phi_{\gamma\gamma} \tag{4.67}$$

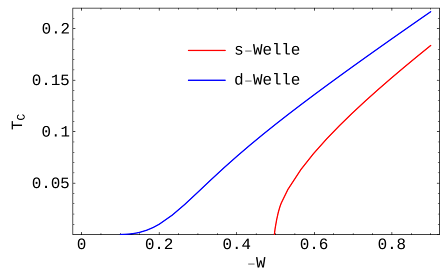


Abbildung 4.1: Kritische Temperatur T_c für d-Wellen-Superfluidität (blau) und s-Wellen-Superfluidität (rot) in Abhängigkeit von $-W$

reduziert, von denen bei T_c (im Falle von s-Wellen-Superfluidität) mindestens eine erfüllt ist. T_c bestimmen wir also als die größte Temperatur, die eine der drei Gleichungen (4.64), (4.66) oder (4.67) löst.

Die Nullstelle von (4.67) hängt nur von $W := U_{ind}\zeta^2$ ab. Für hinreichend kleines $-W$ besitzt (4.67) keine Lösung. Um dies zu sehen, macht man sich zuerst die Konvergenz der Dispersionsrenormierung Σ gegen einen Grenzwert bei Verkleinerung der Temperatur klar:

$$\Sigma \to \Sigma_{max} = \frac{1}{2\pi^3}\int_0^\pi d\kappa_1 \int_0^\pi d\kappa_2 \int_0^\pi d\kappa_3 |\gamma(\vec{\kappa})| \approx 1.0024. \tag{4.68}$$

Nun ist die Konvergenz von $\phi_{\gamma\gamma}$ gegen eine obere Schranke offensichtlich:

$$\phi_{\gamma\gamma} \to \frac{\Sigma_{max}}{|-t_F - \frac{\Sigma_{max}}{6}W|} \tag{4.69}$$

Hieraus ergibt sich das kleinste denkbare W, bei dem (4.67) noch eine Lösung besitzt, zu (in Einheiten der halben Bandbreite)

$$W_{min} = -\frac{1}{2}\Sigma_{max} \approx 0.5012. \tag{4.70}$$

Auch die Nullstelle von (4.64) hängt nur von $W := U_{ind}\zeta^2$ ab. Diesmal ist die Gleichung jedoch für alle $W < 0$ lösbar. In Abbildung 4.1 sind die Nullstellen von (4.64) und (4.67) als Funktionen von $-W$ dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass reine Extended-s-Superfluidität nur für ausreichend große $-W$ möglich ist. Jedoch dominiert ohnehin die d-Welle. Bei halber Bandfüllung spielt Extended-s also keine Rolle.

Über die Lösung von (4.66) lässt sich sagen, dass sie nur von $U := U_{FF} + U_{ind}$ abhängig ist und für alle $U < 0$ existiert.

In Abbildung 4.2 werden bei festem W und variablem $-U > 0$ die s-Wellen-T_c und die d-Wellen-T_c verglichen. Wie zu erwarten, dominiert die d-Welle bei hinreichend kleinem $-U > 0$; bei ausreichend großem $-U > 0$ liegt On-Site-s-Superfluidität vor.

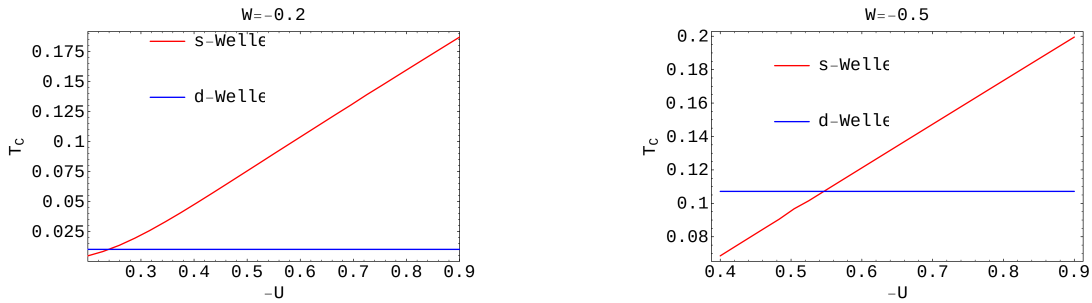


Abbildung 4.2: Kritische Temperatur für d-Wellen-Superfluidität (blau) und s-Wellen-Superfluidität (rot) bei $W = -0.2$ (links) und $W = -0.5$ (rechts) in Abhängigkeit von $-U$

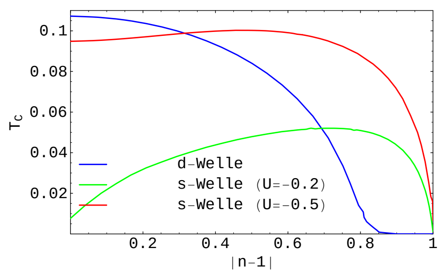


Abbildung 4.3: Kritische Temperatur T_c für s-Wellen-Superfluidität (grün für $U = -0.2$ und rot für $U = -0.5$) und d-Wellen-Superfluidität (blau) in Abhängigkeit des Abstandes zur halben Bandfüllung $|n-1|$ bei $W = -0.5$

Allgemeiner Füllfaktor. Abbildung 4.3 zeigt die kritische Temperatur T_c für s-Wellen- und d-Wellen-Superfluidität in Abhängigkeit vom Abstand zur halben Bandfüllung $|n-1|$. Bei $|n-1| = 0$ (halbe Bandfüllung) weisen die gewählten Beispiele d-Wellen-Superfluidität auf. Vergrößern wir $|n-1|$, so geht diese in s-Wellen-Superfluidität über. Darüber, welche Phase unmittelbar unterhalb T_C vorliegt, entscheidet bei $U = -0.2D$ und $W = -0.5D$, ob der grüne oder der blaue Graph oben liegt. Bei $U = -0.5D$ müssen der blaue und der rote Graph miteinander verglichen werden.

Der Vergleich der beiden Graphen zur s-Welle zeigt, dass die s-Wellen-Superfluidität in der Nähe der halben Bandfüllung im Wesentlichen durch U bestimmt ist. Die Höhen der Maxima in den Temperaturkurven fern der halben Bandfüllung werden durch U weniger stark beeinflusst. Bei diesen Maxima dominiert der Anteil der Extended-s-Wave an der Mischung aus On-Site-s und Extended-s, während die Superfluidität in der Nähe der halben Bandfüllung durch den On-Site-s-Typ dominiert wird. An Hand der Überlegungen (3.70) und (3.71) hatten wir gezeigt, dass im Falle einer rein lokalen Wechselwirkung bei der halben Bandfüllung der Ordnungsparameter ein Maximum aufweist. Als Konsequenz hat auch die kritische Temperatur bei halber Bandfüllung ein Maximum, vorausgesetzt, die Wechselwirkung ist ausschließlich lokal. Bei nicht-lokaler Wechselwirkung ist Gleichung (3.70) nicht mehr gültig, da die superfluiden Korrelationen dann nicht mehr nur wie in (3.70) durch $\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})$, sondern auch durch $\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}+\vec{m})$ erzeugt werden.

4.2.2 Das hexagonale optische Gitter in 2D

Die Dispersion der Fermionen ist durch

$$\epsilon_F(\vec{\kappa}) = \sum_{|\vec{m}|=1} t_F e^{i\vec{\kappa}\vec{m}} = 2t_F\left[\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2) + \cos(\kappa_1 - \kappa_2)\right] \tag{4.71}$$

und diejenige der Bosonen durch

$$\epsilon_B(\vec{\kappa}) = \sum_{|\vec{m}|=1} t_B e^{i\vec{\kappa}\vec{m}} = 2t_B\left[\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2) + \cos(\kappa_1 - \kappa_2)\right] \tag{4.72}$$

gegeben. Als Energiemaßstab wählen wir in diesem Abschnitt wieder die halbe Bandbreite $D = 4.5t$. Gemäß (4.33) und (4.46) beträgt die induzierte Wechselwirkung zwischen den fermionischen Atomen dann

$$V^{ind}_{\sigma,\sigma'}(\vec{\kappa}) = U_{ind} + W_{ind}(\vec{\kappa}), \tag{4.73}$$

wobei der nächste-Nachbar-Anteil durch

$$W_{ind}(\vec{\kappa}) = 2W\left[\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2) + \cos(\kappa_1 - \kappa_2)\right] \tag{4.74}$$

gegeben ist mit der Abkürzung $W = U_{ind}\zeta^2$. $W_{ind}(\vec{\kappa} - \vec{\alpha})$ faktorisiert folgendermaßen:

$$\begin{aligned} W_{ind}(\vec{\kappa} - \vec{\alpha}) = 2W\Big[&\frac{1}{2}\left(\cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2)\right)\left(\cos(\alpha_1) + \cos(\alpha_2)\right) + \cos(\kappa_1 - \kappa_2)\cos(\alpha_1 - \alpha_2) + \\ &\frac{1}{2}\left(\cos(\kappa_1) - \cos(\kappa_2)\right)\left(\cos(\alpha_1) - \cos(\alpha_2)\right)\Big] + \text{Rest}(\vec{\kappa}, \vec{\alpha}) \\ = W\Big[&\gamma_1(\vec{\kappa})\gamma_1(\vec{\alpha}) + \gamma_2(\vec{\kappa})\gamma_2(\vec{\alpha}) + \eta(\vec{\kappa})\eta(\vec{\alpha})\Big] + \text{Rest}(\vec{\kappa}, \vec{\alpha}). \end{aligned} \tag{4.75}$$

Hierbei haben wir die Abkürzungen

$$\begin{aligned} \gamma_1(\vec{\kappa}) &:= \cos(\kappa_1) + \cos(\kappa_2), \\ \gamma_2(\vec{\kappa}) &:= \sqrt{2}\ \cos(\kappa_1 - \kappa_2), \\ \eta(\vec{\kappa}) &:= \cos(\kappa_1) - \cos(\kappa_2) \end{aligned} \tag{4.76}$$

eingeführt. $\text{Rest}(\vec{\kappa}, \vec{\alpha})$ besitzt negative Parität bezüglich $\vec{\kappa}$ und $\vec{\alpha}$ und wird somit bei den folgenden Integrationen immer wegfallen. Laut (3.15) erhalten wir für die renormierte Dispersion $\xi_F(\vec{\kappa})$:

$$\xi_F(\vec{\kappa}) := \epsilon_F(\vec{\kappa}) + \epsilon_F^I(\vec{\kappa}) - \mu = \epsilon_F(\vec{\kappa}) - W\Sigma_1\gamma_1(\vec{\kappa}) - W\Sigma_2\gamma_2(\vec{\kappa}) - \tilde{\mu}. \tag{4.77}$$

Hierbei wird der $\vec{\kappa}$-abhängige Teil der Selbstenergie durch die zwei Parameter

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &:= \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}} \gamma_1(\vec{\alpha}) n_\uparrow(\vec{\alpha}) = -\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha_2 \gamma_1(\vec{\alpha}) \frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})} \tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right), \\ \Sigma_2 &:= \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}} \gamma_2(\vec{\alpha}) n_\uparrow(\vec{\alpha}) = -\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha_2 \gamma_2(\vec{\alpha}) \frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2E(\vec{\alpha})} \tanh\left(\frac{\beta E(\vec{\alpha})}{2}\right) \end{aligned} \tag{4.78}$$

charakterisiert, während wir die konstanten Beiträge zur Selbstenergie durch Einführung des verschobenen chemischen Potentials

$$\tilde{\mu} := \mu - \frac{1}{2}U_{FF}\, n - \frac{1}{2}U_{ind}\, n - 6W_{ind}\, n. \tag{4.79}$$

berücksichtigen. Bei T_c vereinfachen sich die Ausdrücke für die Dispersionsrenormierungen Σ_1 und Σ_2:

$$\begin{aligned} \Sigma_1 &= -\frac{1}{4\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha_2 \gamma_1(\vec{\alpha}) \tanh\left(\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_c}\right), \\ \Sigma_2 &= -\frac{1}{4\pi^2}\int_0^\pi d\alpha_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha_2 \gamma_2(\vec{\alpha}) \tanh\left(\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_c}\right). \end{aligned} \tag{4.80}$$

Es besteht ferner der Zusammenhang

$$\Sigma_1 = \sqrt{2}\,\Sigma_2. \tag{4.81}$$

Der Füllfaktor ist durch

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa},\sigma} n_\sigma(\vec{\kappa}) = \frac{2}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\kappa}}\left[\frac{1}{2} - \frac{\xi_F(\vec{\kappa})}{2E(\vec{\kappa})}\tanh\frac{E(\vec{\kappa})}{2T}\right] \\ &= 1 - \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\pi d\kappa_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_2 \frac{\xi_F(\vec{\kappa})}{E(\vec{\kappa})}\tanh\frac{E(\vec{\kappa})}{2T}, \end{aligned} \tag{4.82}$$

bzw. bei T_c durch

$$n = 1 - \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi} d\kappa_1 \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_2 \tanh\frac{\xi_F(\vec{\kappa})}{2T_C} \tag{4.83}$$

gegeben (siehe (3.36)). Bei reiner s-Wellen-Superfluidität

$$\Delta(\vec{\kappa}) = \Delta_0 + \Delta_1\gamma_1(\vec{\kappa}) + \Delta_2\gamma_2(\vec{\kappa}) \tag{4.84}$$

nimmt die Selbstkonsistenzgleichung (3.34) des Ordnungsparameters in der unmittelbaren Nähe von T_c die Gestalt

$$\begin{pmatrix} (U_{FF}+U_{ind})\phi_0 + 1 & (U_{FF}+U_{ind})\phi_1 & (U_{FF}+U_{ind})\phi_2 \\ U_{ind}\zeta^2\phi_1 & U_{ind}\zeta^2\phi_{11}+1 & U_{ind}\zeta^2\phi_{12} \\ U_{ind}\zeta^2\phi_2 & U_{ind}\zeta^2\phi_{12} & U_{ind}\zeta^2\phi_{22}+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix}\Delta_0\\ \Delta_1\\ \Delta_2\end{pmatrix} = 0 \tag{4.85}$$

an, wobei wir

$$\begin{aligned}
\phi_0 &:= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_C}}{2\xi_F(\vec{\alpha})}, &\quad \phi_{11} &:= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \gamma_1^2(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_C}}{2\xi_F(\vec{\alpha})}, \\
\phi_1 &:= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \gamma_1(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_C}}{2\xi_F(\vec{\alpha})}, &\quad \phi_{12} &:= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \gamma_1(\vec{\alpha})\gamma_2(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_C}}{2\xi_F(\vec{\alpha})}, \\
\phi_2 &:= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \gamma_2(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_C}}{2\xi_F(\vec{\alpha})}, &\quad \phi_{22} &:= \frac{1}{2\pi^2}\int_0^{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \gamma_2^2(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_C}}{2\xi_F(\vec{\alpha})}
\end{aligned} \tag{4.86}$$

definiert haben. Dabei gelten die folgenden vereinfachenden Beziehungen:

$$\begin{aligned}
\phi_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\phi_1, \\
\phi_{22} - \phi_{11} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}\phi_{12}.
\end{aligned} \tag{4.87}$$

Die kritische Temperatur für s-Wellen-Superfluidität ist durch die höchste Temperatur gegeben, bei der die Determinante

$$\begin{aligned}
&1 + (U_{FF}+U_{ind})\Big[\phi_0 + U_{ind}\zeta^2(-\phi_1^2 + \phi_0\phi_{11} - \phi_2^2 + \phi_0\phi_{22}) + \\
&U_{ind}^2\zeta^4(-\phi_0\phi_{12}^2 + 2\phi_1\phi_{12}\phi_2 - \phi_{11}\phi_2^2 - \phi_1^2\phi_{22} + \phi_0\phi_{11}\phi_{22})\Big] + \\
&U_{ind}\zeta^2(\phi_{11}+\phi_{22}) + U_{ind}^2\zeta^4(-\phi_{12}^2 + \phi_{22}\phi_{11})
\end{aligned} \tag{4.88}$$

der Matrix in (4.85) verschwindet. Reine d-Wellen-Superfluidität

$$\Delta(\vec{\kappa}) = \Delta_3\eta(\vec{\kappa}) \tag{4.89}$$

liegt dagegen dann vor, wenn

$$\phi_{\eta\eta} := \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\vec{\alpha}} \eta^2(\vec{\alpha})\frac{\tanh\frac{\xi_F(\vec{\alpha})}{2T_C}}{2\xi_F(\vec{\alpha})} = \frac{-1}{W} \tag{4.90}$$

eine größere Temperatur als Lösung besitzt. Mit Hilfe der Beziehungen

$$\begin{aligned}
&1 + W(\phi_{11}+\phi_{22}) + W^2(-\phi_{12}^2 + \phi_{22}\phi_{11}) \\
&= (1 + W\phi_{\eta\eta})\Big[1 + (\frac{2}{3}\phi_{11} + \frac{1}{3}\phi_{22} + \frac{2}{3}\sqrt{2}\,\phi_{12})W\Big] \\
&\text{und} \\
&\phi_1^2 + \phi_2^2 - 2W\,\phi_1\phi_{12}\phi_2 + W\,\phi_{11}\phi_2^2 + W\phi_1^2\phi_{22} = \frac{3}{2}\phi_1^2\Big[1 + W\,\phi_{\eta\eta}\Big]
\end{aligned} \tag{4.91}$$

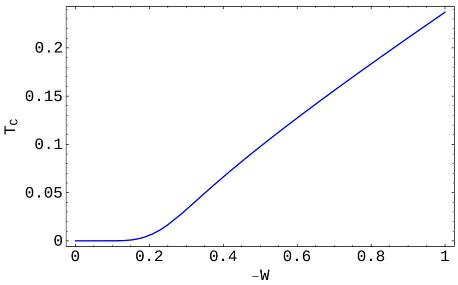


Abbildung 4.4: Kritische Temperatur für die d-Welle bei der halben Bandfüllung in Abhängigkeit von der Nächst-Nachbar-Wechselwirkung $-W$.

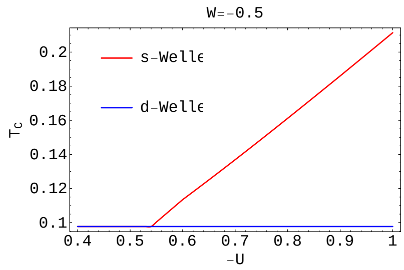


Abbildung 4.5: Kritische Temperatur für d-Welle (blau) und s-Welle (rot) bei der halben Bandfüllung in Abhängigkeit der vollständigen lokalen Wechselwirkung $-U$ bei $W = -0.5$

zeigt man jedoch, dass die Lösungen von (4.90) auch immer gleichzeitig Nullstellen von (4.88) sind. Der Ausdruck (4.88) besitzt in der Regel zwei Temperaturen als Lösung. Wegen (4.91) muss entweder die höhere oder die tiefere dieser beiden Temperaturen mit der Lösung von (4.90) übereinstimmen. Wenn die höhere Temperatur unter diesen beiden Lösungen aufgrund von (4.91) mit der Lösung von (4.90) übereinstimmt, dann erwartet man eine s-d-Mischung.

Die Situation bei halber Bandfüllung. Unserem Vorgehen im letzten Unterabschnitt treu bleibend, diskutieren wir wieder zuerst die Lage bei der halben Bandfüllung. Die kritische Temperatur des Übergangs zur d-Wellen-Superfluidität ist von der lokalen Wechselwirkung $U = U_{ind} + U_{FF}$ unabhängig und wird in Abbildung 4.4 als Funktion der Nächst-Nachbar-Wechselwirkung $-W$ dargestellt. Ist die lokale Wechselwirkung $-U$ ausreichend groß, so dominiert die s-Welle über die d-Welle. Dies kommt in Abbildung 4.5 zum Ausdruck. Reicht die lokale Wechselwirkung hierzu nicht aus, sind d-Welle und s-Welle entartet. Dies ist eine Konsequenz des Resultats (4.91). Die physikalische Ursache hierfür ist darin zu suchen, dass die im hexagonalen Gitter größere Zahl der nächsten Nachbarn in der Ebene die s-Welle unterstützt. Man vergleiche Abbildung 4.5 mit der korrespondierenden Abbildung 4.2 für das dreidimensionale kubische Gitter, wo bei ausreichend kleiner lokaler Wechselwirkung $-U$ die d-Welle über die s-Welle dominiert.

Allgemeiner Füllfaktor. Abbildung 4.6 zeigt die Abhängigkeit der kritischen Temperatur vom Abstand zur halben Bandfüllung $|n-1|$ bei $W = -0.5$. Welcher der jeweiligen beiden Graphen obenliegt, entscheidet über die unterhalb von T_C vorliegende Phase. Der blaue Graph steht für die Mischung aus d- und s-Welle. Die Vermischung von d- und s-Welle rührt wie schon bei halber Bandfüllung wieder von den Relationen (4.91) her. Der rote Graph beschreibt die kritische Temperatur der s-Welle bei $U = -0.5$ und der grüne bei $U = -0.3$. Während bei halber Bandfüllung für nicht zu großes $-U$ die d-s-Mischung dominiert, wird bei ausreichendem Abstand zur halben Bandfüllung schließlich die s-Welle vorherrschend.

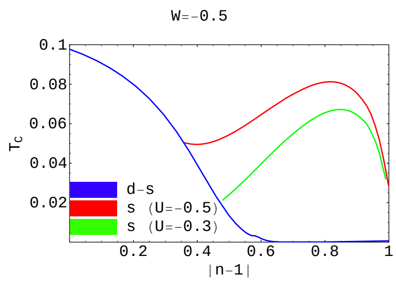


Abbildung 4.6: Kritische Temperatur für die d-s-Mischung (blau), die reine s-Welle bei $U = -0.5$ (rot) und die reine s-Welle bei $U = -0.3$ (grün) in Abhängigkeit vom Abstand zur halben Bandfüllung $|n-1|$ bei $W = -0.5$.

4.3 Inhomogene Fermion-Boson-Mischung

In Abschnitt 5.3 zeigen wir, wie man in einer Mischung aus Fermionen und Feshbach-Molekülen (ebenso eine Fermion-Boson-Mischung) die Molekül-Molekül- und die Atom-Molekül-Wechselwirkung durch Ausintegrieren der bosonischen Freiheitsgrade in Ortsdarstellung berücksichtigen kann. Wir können die Resultate aus Abschnitt 5.3 leicht für Boson-Fermion-Mischungen - wie wir sie in diesem Kapitel untersuchen - modifizieren, indem wir wir die Molekül-Molekül-Wechselwirkung U_{MM} durch die Boson-Boson-Wechselwirkung und die Atom-Molekül-Wechselwirkung U_{AM} durch die Boson-Fermion-Wechselwirkung ersetzen. Des weiteren müssen natürlich die Fermion-Feshbach-Molekül-Kopplung $g = 0$ und die Feshbach-Verstimmung $\nu = \mu - \mu_B/2$ gesetzt werden, wobei μ_B das chemische Potential der Bosonen und μ das chemische Potential der Fermionen sind.

Man kann sich im Rahmen der Lokal-Density-Approximation klarmachen, wozu ein zusätzliches Fallenpotential führt. Betrachtet wir die induzierte Wechselwirkung zunächst als fest. Gemäß der Lokal-Density-Approximation muss das chemische Potential μ der Fermionen durch

$$\mu(\vec{\imath}) = \mu(0) - \Omega|\vec{\imath}|^2 \tag{4.92}$$

ersetzt werden. Einer lokalen Reduktion des chemischen Potentials entspricht eine lokale Verkleinerung des Füllfaktors. Während bei halber Bandfüllung häufig d-Wellen-Paarung anzutreffen ist, liegt bei ausreichendem Abstand zur halben Bandfüllung s-Wellen-Paarung vor. Besteht im Zentrum des Gitters also halbe Bandfüllung, so nimmt die Füllung zum Rand hin ab. Eine zentrale d-Wellen-Phase wird also in eine s-Wellen-Phase am Rand des Gitters übergehen. Beachten wir nun, dass die Dichte der Bosonen zum Rand hin ebenfalls abnimmt, und die induzierte Wechselwirkung somit zunimmt. Optimale Bedingungen für d-Wellen-Paarung liegen bei lokaler Abstoßung der Fermionen vor, da dann die s-Wellen-Paarung unterdrückt ist. Diesen Fall wollen wir annehmen. Die Zunahme der induzierten Wechselwirkung (die attraktiv ist) bewirkt dann, dass die s-Wellen-Paarung außerhalb des Zentrums zusätzlich unterstützt wird. In einer inhomogenen Fermion-Boson-Mischung im optischen Gitter kann also eine zentrale reine d-Wellen-Phase mit einer am Rand gelegenen reinen s-Wellen-Phase koexistieren.

5 Feshbach-Resonanzen

5.1 Erweiterung der Theorie um die Feshbach-Resonanz

5.1.1 Grundlagen der Theorie der Feshbach-Resonanz

Die Streuung zweier Atome ist von deren Elektronenkonfigurationen abhängig: In der Regel ist das Singulett-Potential (Streuung von Atomen mit antiparallelen Spins der Valenzelektronen) tiefer als das Triplett-Potential (Streuung von Atomen mit parallelen Spins der Valenzelektronen). Dies ist der Grund dafür, dass die Bindungselektronen bei der kovalenten Bindung ein Singulett bilden. Abb. 5.1 stellt das Singulett- und das Triplett-Potential schematisch dar, mit der für Alkaliatome typischen Energieskala.

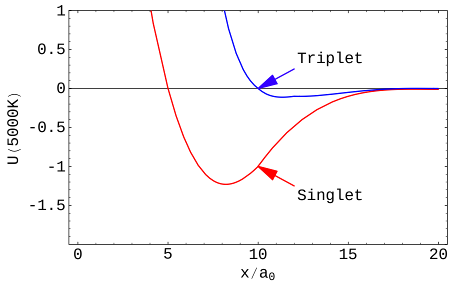


Abbildung 5.1: Typische Wechselwirkungspotentiale U für Alkaliatome (schematisch). a_0 bezeichnet den Bohrschen Radius

Aufgrund der Spin-Bahn- und Hyperfeinwechselwirkungen ist die Relativwellenfunktion zweier Alkaliatome im Allgemeinen eine Überlagerung von Spin-Triplett- und Spin-Singulett-Anteilen. Die beiden Anteile erfahren in erster Ordnung also Streuung durch unterschiedliche Potentiale und interferieren nach der Streuung. Die gestreute Welle wird demnach eine Überlagerung von unterschiedlichen Hyperfeinkonstellationen sein, selbst dann, wenn dies vor der Streuung nicht der Fall war. In magnetischen Fallen führt dies zum Verlust von Atomen (Feld-Minimum-Sucher werden in Feld-Maximum-Sucher umgewandelt) [PS02].

In der Regel sind einige Hyperfeinkonstellationen als Endkanäle bei gegebenem Anfangskanal aus energetischen Gründen ausgeschlossen. Aufgrund des Zeeman-Effektes lässt sich jedoch der Energieabstand zwischen Anfangskanal und potentiellem Endkanal verändern. Die relative Lage eines gebundenen Zustandes in einem solchen geschlossenen Kanal zum Anfangskanal lässt sich also durch Variation der Stärke eines äußeren Magnetfeldes bestimmen. Der gebundene Zustand des geschlossenen Kanals wird dabei vom Triplettpotential ermöglicht.

Wird die energetische Differenz zwischen dem gebundenen Zustand des geschlossenen Kanals und dem Anfangskanal verkleinert bei oberhalb des Anfangskanals gelegenem gebundenen Zustand, so wächst der Anteil der Streuung über den gebundenen Zustand als Zwischenzustand an dem atomaren Stoßprozess und die Streulänge verkleinert sich. Unmittelbar bevor der gebundene Zustand den Anfangskanal erreicht (hier befindet sich die Feshbach-Resonanz), ist die Streulänge negativ unendlich. Nähert man sich dem Anfangskanal mit einem anfänglich energetisch tiefer gelegenen gebundenen Zustand des geschlossenen Kanals, so vergrößert sich die Streulänge, bis sie schließlich positiv unendlich ist unmittelbar vor dem Punkt der Übereinstimmung der beiden Energien [PS02] [DS04]. In der Nähe der Feshbach-Resonanz lässt sich das Verhalten der Streulänge durch

$$a(B) = a_{bg} + \frac{\Delta B}{B - B_0} \tag{5.1}$$

beschreiben [PS02]. Hierbei ist B das Magnetfeld. Die Feshbach-Resonanz befindet sich bei einem Magnetfeld von B_0. B_0 ist also dasjenige Magnetfeld, bei dem die inneren Energien der Hyperfeinspezies in Anfangs- und Endkanal aufgrund des Zeeman-Effektes eine solche Differenz aufweisen, dass der gebundene Zustand im geschlossenen Kanal den Atomen im offenen Kanal gerade zugänglich wird.

Ein verdünntes Gas aus Alkaliatomen besteht fast ausschließlich aus Feshbach-Molekülen, wenn der gebundene Zustand ausreichend weit unterhalb des Anfangskanals liegt. Bei ausreichend niedrigen Temperaturen liegen diese Feshbach-Moleküle als BEC vor. Aus diesem Grunde wird diese Seite der Feshbach-Resonanz im Zusammenhang mit Kondensationsphänomenen bei ultraniedrigen Temperaturen auch als BEC-Regime bezeichnet.

Mittels einer Feshbach-Resonanz lässt sich also der BCS-BEC-Crossover in einem Gas von fermionischen Atomen realisieren: Bei betragsmässig kleiner aber negativer Streulänge (BCS-Regime) findet bei niedrigen Temperaturen ein Phasenübergang zu einem BCS-Superfluid statt. Bei stark negativer Streulänge werden pre-formed Cooper-Paare möglich. Diese kondensieren bei Absenkung der Temperatur in eine superfluide Phase. Die Kondensation ist nahezu vom BEC-Typ. Auf der BEC-Seite der Feshbach-Resonanz liegen Moleküle vor, welche bei Verringerung der Temperatur einen Phasenübergang zu einem BEC-Kondensat unterlaufen [OG05a], [RGJ04], [BAR+04]. Der Vergleich mit der Situation in der Festkörperphysik [Ped96] [Hau99] ergibt demnach einige Unterschiede: Dem BEC-Limes Bose-kondensierter pre-formed Cooper-Paare in der Physik des Hubbard-Modells ($U/t \to -\infty$) entspricht auf dem Gebiet der Feshbach-Resonanzen am ehesten der Bereich stark negativer Streulänge (also nicht das BEC-Regime). Im Gegensatz zum Festkörper liegen hier jedoch pre-formed Cooper-Paare vor, die mit Feshbach-Molekülen hybridisiert sind [OG05a]. Der Bereich der Kondensation von Feshbach-Molekülen hat in der Physik des Hubbard-Modells auch keine vollkommene Entsprechung, da es beim konkurrierenden Streukanäle gibt. Zwar sind sowohl die Kondensation von vorgeformten Cooper-Paaren beim Hubbard-Modell als auch die Kondensation der Feshbach-Moleküle vom BEC-Typ.

In [DKvOS05] wird der Hamilton-Operator zur Beschreibung von bosonischen Feshbach-Resonanzen im optischen Gitter hergeleitet. Berücksichtigen wir darin nur den energetisch niedrigsten molekularen Zustand und ergänzen ein harmonisches Fallenpotential, so erhalten wir nach Übertragung auf fermionische Systeme

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{Feshbach}} = &- t_A \sum_{\substack{\vec{\imath},\,\sigma,\\ |\vec{m}|=1}} \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) - t_M \sum_{\vec{\imath},\,|\vec{m}|=1} \hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}+\vec{m}) \\ &+ \sum_{\vec{\imath}} \big[\Omega_M i^2 + 2\nu - 2\mu\big]\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}) + \sum_{\sigma,\,\vec{\imath}} \big[\Omega_A i^2 - \mu\big]\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) \\ &+ U_{bg} \sum_{\vec{\imath}} \hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) + g\sum_{\vec{\imath}} \big[\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}) + \hat{a}(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath})\big].\end{aligned} \tag{5.2}$$

Hierbei bezeichnen t_A und t_M die Hüpfraten der fermionischen Atome bzw. der bosonischen Feschbach-Moleküle. $\hat{c}_\sigma(\vec{\imath})$ vernichtet ein Fermion mit Pseudospin σ am Ort $\vec{\imath}$. Ebenso vernichtet $\hat{a}(\vec{\imath})$ ein Feshbach-Molekül am Ort $\vec{\imath}$. Folglich beschreiben die ersten beiden Terme die kinetische Energie. Ω_A und Ω_M bestimmen das harmonische Fallenpotential für dissoziierte Atome bzw. Feshbach-Moleküle. Teilchenzahlerhaltung verlangt, dass das chemische Potential der Feshbach-Moleküle sich aus demjenigen der dissoziierten Atome durch Multiplikation mit dem Faktor zwei ergibt. Die Tatsachen, dass bei der Spaltung eines Feshbachmoleküls dessen innere Energie auf die Spaltprodukte übergeht, und dass zwischen geschlossenem und offenem Kanal eine Energiedifferenz besteht, berücksichtigt die Feshbach-Verstimmung ν im dritten Summanden. Denjenigen Teil der Atom-Atom-Wechselwirkung, der vom geschlossenen Kanal nicht beeinflusst wird (Hintergrundstreuung), charakterisiert U_{bg} im fünften Beitrag. Der letzte Summand beschreibt die Bildung von Feshbach-Molekülen bei gleichzeitigem Verschwinden der doppelten Anzahl an Fermionen (bzw. umgekehrt); wir gehen dabei von einer s-Wellen-Feshbach-Resonanz aus, d.h. zwei Fermionen, die ein Feshbach-Molekül bilden, befinden sich in unterschiedlichen Pseudospinzuständen.

Offensichtlich vernachlässigen wir die Molekül-Molekül-Wechselwirkung; dies ist eine in der Literatur der Feshbach-Resonanz bei kalten Atomen und allgemeiner in Veröffentlichungen zum BEC-BCS-Crossover häufig anzutreffende Vereinfachung (vgl. z.B. [DKvOS05], [OG05b] und [PPS04]). Verglichen mit der Situation in anderen Systemen ist diese Approximation in der Physik der kalten Atome relativ brauchbar: Während bei ^{4}He aufgrund der starken Atom-Atom-Wechselwirkung der kondensierte Anteil selbst in der Nähe des Grundzustandes weniger als 10% beträgt [Hua] [Par], liegen kondensierte Gase bosonischer Atome in der Regel zu 99% kondensiert vor [PS02]. Eine Ausnahme stellen bosonische Atomgase in der Nähe einer Feshbach-Resonanz dar: Hier kann der Kondensatanteil auf 90% absinken [CCR+00]. Wir vernachlässigen die Molekül-Molekül-Wechselwirkung zunächst und werden in Abschnitt 5.3 darauf zurückkommen.

Der Hamilton-Operator (5.2) ist in unmittelbarer Umgebung der Feshbach-Resonanz nicht gültig: Hier werden Wannier-Zustände aus höheren Bloch-Bändern bevölkert und eine Mehrbandbeschreibung unabdingbar [DH05], [KMS+05]. Dies lässt sich bereits auf Grundlage unseres vereinfachten Kriteriums (3.72) verstehen. Dazu müssen wir nur für U die effektive Fermion-Fermion-Wechselwirkung einsetzen. Auf der BCS-Seite sehr dicht bei der Feshbach-Resonanz ist die effektive Fermion-Fermion-Wechselwirkung stark negativ. Dann reduziert sich die Gesamtenergie, wenn ein Fermion vom Rand des Systems ins Fallenzentrum (in ein höheres Bloch-Band) umsiedelt. Auf einen zusätzlichen Aspekt weisen [DH05], [DKvOS05] und [KMS+05] hin: Die Energiedifferenz zwischen energetisch aufeinanderfolgenden „angekleideten“ molekularen Zuständen hat bei der Feshbach-Resonanz ein Minimum (avoided level crossing).

Die theoretische Vorhersage, dass die Einband-Beschreibung in der Nähe der Feshbach-Resonanz zusammenbricht, wird auch experimentell bestätigt: [KMS+05] untersuchen ein Gittersystem mit überlagertem harmonischen Fallenpotential experimentell. Auf der BCS-Seite der Feshbach-Resonanz wird hier ein zentraler Bandisolator von einer normalen Flüssigkeit umgeben und höhere Bloch-Bänder sind zunächst unbesetzt. Wird das System auf die BEC-Seite gestimmt, wobei die Feshbach-Resonanz durchlaufen wird, so werden höhere Bloch-Bänder bevölkert.

5.1.2 Hartree-Fock-Bogoliubov-Näherung für Feshbach-Moleküle

Der fünfte Term in (5.2) wurden bereits in Abschnitt 3.1 mittels der Hartree-Fock-Näherung vereinfacht. Die verbleibenden Terme zwei, drei und sechs werden mit analogen Approximationen behandelt, indem die Ersetzungen

$$\begin{aligned} &\hat{a}(\vec{\imath}) \to \phi(\vec{\imath}) + \hat{b}(\vec{\imath}), \\ &\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}) \to F(\vec{\imath}) + \Big(\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}) - \langle \hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\rangle\Big) \end{aligned} \tag{5.3}$$

mit

$$F(\vec{\imath}) = \langle \hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\rangle \tag{5.4}$$

durchgeführt und die in den Fluktuationen $\hat{b}(\vec{\imath})$ und $\Big[\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}) - \langle \hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\rangle\Big]$ quadratischen Terme vernachlässigt werden. Die erste Ersetzung in (5.3) entspricht der Annahme, dass nahezu alle vorhandenen Feshbach-Moleküle Bose-kondensiert vorliegen. Wir erhalten:

$$\begin{aligned} &g\sum_{\vec{\imath}}\Big[\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath}) + \hat{a}(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\Big] \to \\ &g\sum_{\vec{\imath}}\Big[F(\vec{\imath})\hat{b}^\dagger(\vec{\imath}) + F^*(\vec{\imath})\hat{b}(\vec{\imath}) - \phi^*(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) - \phi(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath})\Big] \end{aligned} \tag{5.5}$$

für den Term, der die Umwandlung von Feshbach-Molekülen in Atome und umgekehrt ausdrückt,

$$-t_M \sum_{\substack{\vec{\imath} \\ |\vec{m}|=1}} \hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}+\vec{m}) \to -t_M \sum_{\substack{\vec{\imath} \\ |\vec{m}|=1}} \Big[\hat{b}^\dagger(\vec{\imath})\phi(\vec{\imath}+\vec{m}) + \phi^*(\vec{\imath})\hat{b}(\vec{\imath}+\vec{m}) + \phi^*(\vec{\imath})\phi(\vec{\imath}+\vec{m})\Big] \tag{5.6}$$

für die kinetische Energie der Bosonen und schließlich

$$\sum_{\vec{\imath}}\left[\Omega_M i^2 + 2\nu - 2\mu\right]\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}) \to \sum_{\vec{\imath}}\left[\Omega_M i^2 + 2\nu - 2\mu\right]\Big[\hat{b}^\dagger(\vec{\imath})\phi(\vec{\imath}) + \phi^*(\vec{\imath})\hat{b}(\vec{\imath}) + \phi^*(\vec{\imath})\phi(\vec{\imath})\Big] \tag{5.7}$$

für den Ausdruck, der die innere Energie der Bosonen, deren potentielle Energie im parabolischen Potential und das chemische Potential beinhaltet. Da die Stationarität des Bose-Kondensates

$$\frac{d}{dt}\Big[\langle\hat{b}(\vec{\imath})\rangle(t)\Big] = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{b}]_-\rangle(t) \stackrel{!}{=} 0 \tag{5.8}$$

erfordert, folgt, dass die Koeffizienten der $\hat{b}(\vec{\imath})$ und der $\hat{b}^\dagger(\vec{\imath})$ verschwinden müssen. Somit erhalten wir einen Zusammenhang zwischen dem Cooper-Paar-Ordnungsparameter

$$\Delta(\vec{\imath}) := U_{bg}F(\vec{\imath}) \tag{5.9}$$

und dem Ordnungsparameter $\phi(\vec{\imath})$ des Bose-Kondensates:

$$\Delta(\vec{\imath}) = \frac{U_{bg}}{g}\left[-\left(\Omega_M i^2 + 2\nu - 2\mu\right)\phi(\vec{\imath}) + t_M \sum_{|\vec{m}|=1}\phi(\vec{\imath}+\vec{m})\right]. \tag{5.10}$$

Schließlich ergibt sich

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{Feshbach}} = &-t_A \sum_{\substack{\vec{\imath},\sigma\\|\vec{m}|=1}} \hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) + \sum_{\vec{\imath},\sigma}\left[\Omega_A i^2-\mu\right]\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}) - \\ &\sum_{\vec{\imath}}\left[g\phi^*(\vec{\imath}) + U_{bg}\frac{-\left(\Omega_M i^2+2\nu-2\mu\right)\phi^*(\vec{\imath}) + t_M\sum_{|\vec{m}|=1}\phi^*(\vec{\imath}+\vec{m})}{g}\right]\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}) - \\ &\sum_{\vec{\imath}}\left[g\phi(\vec{\imath}) + U_{bg}\frac{-\left(\Omega_M i^2+2\nu-2\mu\right)\phi(\vec{\imath}) + t_M\sum_{|\vec{m}|=1}\phi(\vec{\imath}+\vec{m})}{g}\right]\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath}) + C\end{aligned} \tag{5.11}$$

mit einer hier unwesentlichen Konstanten C. Die einzigen noch enthaltenen Terme mit Operatoren sind quadratisch in $\hat{c}_\sigma(\vec{\imath})$. Dies ermöglicht den Übergang zur Matrixdarstellung:

$$\hat{H}_{\text{Feshbach}} = \begin{pmatrix}\hat{c}^\dagger_\uparrow(0,0), & \hat{c}^\dagger_\uparrow(0,1), & \cdots & \hat{c}_\downarrow(0,0), & \hat{c}_\downarrow(0,1), & \cdots\end{pmatrix} \boldsymbol{\mathcal{H}}_{\text{Feshbach}} \begin{pmatrix}\hat{c}_\uparrow(0,0)\\ \hat{c}_\uparrow(0,1)\\ \cdots\\ \hat{c}^\dagger_\downarrow(0,0)\\ \\ \hat{c}^\dagger_\downarrow(0,1)\\ \cdots\end{pmatrix} + C \tag{5.12}$$

Die Matrix $\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\text{Feshbach}}$ haben wir an dieser Stelle neu eingeführt, sie wird durch (5.11) definiert.

Das weitere Vorgehen ist dem in Abschnitt 3.1.2 analog. Wieder benutzen wir im Folgenden einen skalaren Zähler i, der die Plätze des Gitters durchzählt. Offensichtlich ist es am einfachsten, von den beiden abhängigen Ordnungsparametern $\phi(i)$ und $\Delta(i)$, letzteren zu eliminieren, da die Eliminierung des ersteren die Inversion einer Matrix erforderte (siehe (5.10)). Die zu (3.46) analoge Selbstkonsistenzgleichung des Molekülkondensatordnungsparameters $\phi(i)$ ergibt sich dann zu

$$\begin{aligned}&\frac{1}{g}\left[-\left(\Omega_M|\vec{\imath}(i)|^2+2\nu-2\mu\right)\phi(i) + t_M\sum_{|\vec{m}|=1}\phi(\vec{\imath}(i)+\vec{m})\right] = \\ &\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\left[1-\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\right]+ \\ &\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}(i+\mathcal{N},s+\mathcal{N})\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}.\end{aligned} \tag{5.13}$$

Hierbei ist $\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}$ diejenige Matrix, die $\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\text{Feshbach}}$ diagonalisiert:

$$\boldsymbol{\mathcal{W}}^\dagger_{\text{Feshbach}}\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\text{Feshbach}}\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}} = \begin{pmatrix} E(\mathcal{N}) & 0 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & E(\mathcal{N}-1) & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -E(\mathcal{N})\end{pmatrix}. \tag{5.14}$$

Die Zahl der ungepaarten Fermionen mit Spin σ (spinunabhängig) am Ort i ist durch

$$\begin{aligned}n_\sigma(i) =& \langle\hat{c}^\dagger_\uparrow(i)\hat{c}_\uparrow(i)\rangle = \\ &\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}(i,\mathcal{N}+1-s)\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}+ \\ &\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}_{\text{Feshbach}}(i,s+\mathcal{N})\left[1-\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\right]\end{aligned} \tag{5.15}$$

gegeben (vgl (3.47)). Wie in Abschnitt 3.1.2 beschrieben, ist die Diagonalisierung der $2\mathcal{N} \times 2\mathcal{N}$-Matrix $\boldsymbol{\mathcal{H}}_{\text{Feshbach}}$ der Diagonalisierung von vier $\frac{1}{2}\mathcal{N} \times \frac{1}{2}\mathcal{N}$- Matrizen $\boldsymbol{\mathcal{G}}_{\pm\pm}^{\text{Feshbach}}$ äquivalent. Dabei bezeichnet wie bisher $\mathcal{N}$ die Zahl der Gitterplätze und wir nehmen an, dass $\mathcal{N}$ gerade ist. Mit $\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}$ bezeichnen wir die (3.53) entsprechende reduzierte Matrix der Eigenvektoren. Wie in 3.1.2 eingeführt, transformieren wir den skalaren Zähler i nun auf einen skalaren Zähler i, der die Plätze des ersten Viertels des Gitters durchzählt. (5.13) lässt sich demnach vereinfachen zu

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{g}\left[-\left(\Omega_M|\vec{\imath}(i)|^2+2\nu-2\mu\right)\phi(i)+t_M\sum_{|\vec{m}|=1}\phi(\vec{\imath}(i)+\vec{m})\right]= \\
&\frac{1}{4}\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i+\frac{\mathcal{N}}{4},\mathcal{N}+1-s)\big[1-\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\big]+ \\
&\frac{1}{4}\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i+\mathcal{N},s+\mathcal{N})\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}
\end{aligned} \tag{5.16}$$

(vgl. (3.54)). Die Zahl der ungepaarten Fermionen mit Spin σ (spinunabhängig) am Ort i ist durch

$$\begin{aligned}
n_\sigma(i)=\langle\hat{c}_\uparrow^\dagger(i)\hat{c}_\uparrow(i)\rangle=&\frac{1}{4}\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,\mathcal{N}+1-s)\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}+ \\
&\frac{1}{4}\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,s+\mathcal{N})\left[1-\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\right]
\end{aligned} \tag{5.17}$$

gegeben (vgl (3.55)). Insgesamt befinden sich im Mittel

$$n(i)=2n_\uparrow(i)+2|\phi(i)|^2 \tag{5.18}$$

Atome (Feshbach-Moleküle eingeschlossen) auf dem Gitterplatz i. Das gesamte Gitter ist also mit

$$\begin{aligned}
N=&2\sum_{i=1}^{\frac{\mathcal{N}}{4}}\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,s)\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,s)\big[1-\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}\big]+ \\
&2\sum_{i=1}^{\frac{\mathcal{N}}{4}}\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{V}}_{\text{Feshbach}}(i,s+\mathcal{N})\frac{1}{e^{\beta E(s)}+1}+ \\
&8\sum_{i=1}^{\frac{\mathcal{N}}{4}}|\phi(i)|^2
\end{aligned} \tag{5.19}$$

Atomen besetzt.

Hybridordnungsparameter. Zur Beschreibung der superfluiden Phase (formal bestehend aus Cooper-Paaren und Bose-kondensierten Feshbach-Molekülen) wird in [OG05b] der Hybridordnungsparameter

$$\tilde{\Delta}(\vec{\imath})=\Delta(\vec{\imath})+g\phi(\vec{\imath}) \tag{5.20}$$

eingeführt. Mittels dieser Definition kann man den Paarungsterm

$$\begin{aligned}
&-\left[g\phi^*(\vec{\imath})+U_{bg}\frac{-\left(\Omega_M i^2+2\nu-2\mu\right)\phi^*(\vec{\imath})+t_M\sum_{|\vec{m}|=1}\phi^*(\vec{\imath}+\vec{m})}{g}\right]\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})- \\
&\left[g\phi(\vec{\imath})+U_{bg}\frac{-\left(\Omega_M i^2+2\nu-2\mu\right)\phi(\vec{\imath})+t_M\sum_{|\vec{m}|=1}\phi(\vec{\imath}+\vec{m})}{g}\right]\hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{\imath})
\end{aligned}$$

in (5.11) auf die aus der BCS-Theorie bekannte Gestalt

$$-\sum_{\vec{\imath}}\Big[\tilde{\Delta}(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})+\text{H.c.}\Big]$$

bringen (vgl. (3.38) und [OG05b]). Diese Tatsache unterstreicht zwar, dass $\tilde{\Delta}(\vec{\imath})$ in gewissem Sinne an die Stelle von $\Delta(\vec{\imath})$ tritt, hat jedoch keine weiteren Vereinfachungen der Gleichungen zur Folge, denn was für den Paarungsterm gilt, sucht man bei den Selbstkonsistenzgleichungen vergeblich. Wir werden auf $\tilde{\Delta}(\vec{\imath})$ bei Diskussion der numerischen Ergebnisse zurückkommen und zeigen, dass er in diskreten Systemen nicht sinnvoll eingesetzt werden kann.

Effektive Berücksichtigung der Feshbach-Resonanz. Gelegentlich werden in der Literatur Feshbach-Resonanzen vereinfacht behandelt: Die Feshbach-Moleküle werden im Hamilton-Operator nicht explizit berücksichtigt und die Nullfeld-Fermion-Fermion-Streulänge wird durch $a(B)$ (aus (5.1)) ersetzt. Diese Vereinfachung vermag jedoch die nähere Umgebung der Feshbach-Resonanz nicht korrekt zu beschreiben, wie (5.10) und (5.11) zeigen. In translationsinvarianten Systemen bestünde ein besseres Vorgehen in der effektiven Berücksichtigung der Feshbach-Resonanz durch die Ersetzung der Nullfeldstreulänge durch die effektive Streulänge (vgl. [OG05b])

$$a_{Eff}(B) := a_{bg}\left[1+\frac{g^2}{U_{bg}(2\mu-2\nu(B)+4t_M)}\right] = a_{bg}\left[1+\frac{g^2}{U_{bg}(2\mu-\frac{m\,g^2}{4\pi(a_{bg}-a(B))}+4t_M)}\right]. \quad (5.21)$$

An die Stelle von (5.2) (mit $\Omega_M=\Omega_A=0$) tritt dann

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\text{Feshbach}} =& -t_A\sum_{\substack{\vec{\imath},\,\sigma,\\|\vec{m}|=1}}\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}+\vec{m}) - t_M\sum_{\vec{\imath},\,|\vec{m}|=1}\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}+\vec{m})+\\ &\sum_{\vec{\imath}}\big[2\nu-2\mu\big]\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}) - \sum_{\sigma,\vec{\imath}}\mu\hat{c}^\dagger_\sigma(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath})+\\ &\frac{4\pi a_{Eff}(B)}{m}\sum_{\vec{\imath}}\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath}).\end{aligned} \quad (5.22)$$

Für $|\nu|\gg 0$ oder gleichbedeutend $|a_{bg}-a(B)|\ll m\,g^2$ gilt in der Tat $a_{Eff}(B)\approx a(B)$. In größerer Distanz zur Feshbach-Resonanz lässt sich der Term $g\sum_{\vec{\imath}}\big[\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\uparrow(\vec{\imath})\hat{c}_\downarrow(\vec{\imath})+\hat{a}(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\downarrow(\vec{\imath})\hat{c}^\dagger_\uparrow(\vec{\imath})\big]$ in (5.2) also in der Tat effektiv berücksichtigen, indem a_{bg} durch $a(B)$ ersetzt wird. Abgesehen davon, dass mit dieser Beschreibung Effekte und Korrekturen, die nicht von der Hartree-Fock-Näherung erfasst werden (z.B. Atom-Molekül-Kohärenz, siehe [DS04]), nicht untersucht werden können, ergibt sich bei zusätzlichem harmonischem Fallenpotential eine konzeptionelle Schwierigkeit: An (5.10) und (5.11) liest man ab, dass die effektive Streulänge in diesem Falle ortsabhängig und dabei nicht-lokal ist.

5.2 Profile im Grundzustand

Im Folgenden diskutieren wir die numerischen Lösungen der gekoppelten Gleichungen (5.14), (5.16) und (5.17) (und in einigen Fällen noch (5.19)) für T=0 K. Eine ähnliche Untersuchung für kontinuierliche Systeme (Fallenpotential, aber kein Gittersystem) findet sich in [OG05b].

Wir nehmen $\Omega_M=2\Omega_A$ und $t_M=0.1\,t_A$ an. Die erste Annahme gilt allgemein: Beide Konstituenten des Moleküls spüren dieselbe Lichtkraft wie ein einzelnes Atom. Darum muss die „Federkonstante“ der Moleküle doppelt so groß sein, wie die der Atome. Die zweite Annahme ist willkürlich und beruht auf folgenden Überlegungen: Zunächst ist ein Feshbach-Molekül doppelt so schwer, wie ein dissoziiertes Atom. Beim Molekül ist die Rückstoßenergie E_R somit nur halb so groß wie beim einzelnen Atom. Weiterhin ist die Potentialtiefe η (siehe Kapitel 2) für das Molekül viermal so groß wie für ein dissoziiertes Atom. Somit ist die Hüpfamplitude $t=J_1\,E_R$ für das Molekül um mindestens eine Größenordnung kleiner, als für das dissoziierte Atom, wenn η nicht zu klein ist (vgl. Tabelle 2.1).

Die Abbildungen 5.3 und 5.4 zeigen die räumlichen Verteilungen der dissoziierten Fermionen $2n_\uparrow(\vec{\imath})$ und der Feshbach-gebundenen Atome $2|\phi(\vec{\imath})|^2$ sowie der Fermion-Fermion-Korrelation $F(\vec{\imath})$ und des Kondensatordnungsparameters $\phi(\vec{\imath})$ bei $\nu = 0$ und $\nu = -1$ für ein System von 500 Atomen. Als Energiemaßstab haben wir dabei wieder $D = 4t_A$ zugrundegelegt. Die Situation für $\nu = \infty$ (keine Feshbach-Moleküle) wird in Abbildung 5.2 illustriert.

Es wird deutlich, dass mit zunehmendem Anteil der Feshbachmoleküle an der Gesamtteilchenzahl das Gesamtteilchenzahlprofil (Summe der $2n_\uparrow(\vec{\imath})-$ und $2|\phi(\vec{\imath})|^2-$Verteilungen) an Ausdehnung verliert: Bei $\nu = \infty$ (Abb. 5.2) erstreckt sich das Profil der fermionischen Besetzungszahl bis zum Radius 14, in Abb. 5.3 bis zum Radius 13 und in Abb. 5.4 bis zum Radius 10. Somit schrumpft der Radius der Wolke der dissoziierten Fermionen wegen Verkleinerung der Zahl der dissoziierten Fermionen. Gleichzeitig nimmt zwar die Zahl der Feshbach-Moleküle zu, diese besetzen jedoch bevorzugt zentral gelegene Plätze.

Einige wenige Plätze werden in Abb. 5.3 und 5.4 durch Moleküle in hoher Zahl mehrfach belegt, während die molekulare Bevölkerung der verbleibenden Positionen vergleichsweise niedrig ausfällt. Dies ist natürlich in der von Abb. 5.3 und Abb. 5.4 offenbarten Intensität nur bedingt realistisch: Hätten wir die Wechselwirkung der Bosonen (repulsiv) berücksichtigt, so würden die Ergebnisse keine Konzentrierung der Feshbach-Moleküle auf einzelne Gitterplätze an den Tag legen. In vergleichbaren Rechnungen für kontinuierliche Systeme [OG05b] wird die Molekül-Molekül-Wechselwirkung zwar ebenso vernachlässigt, jedoch ist der Zusammenhang zwischen Lokalisierungsradius und resultierendem Quantendruck in kontinuierlichen Systemen ein ganz anderer als in diskreten Systemen. Im kontinuierlichen System ist die Lokalisierung des Besetzungszahlprofils auf den Radius a mit einer Energieskala

$$\frac{\hbar^2}{2ma^2} \tag{5.23}$$

verknüpft. Im diskreten System beträgt der relevante Anteil am Quantendruck eines Teilchens, das auf einen einzelnen Gitterplatz lokalisiert ist, jedoch $z\,t$, wobei z die Zahl der nächsten Nachbarn der betrachteten kubischen Gittersymmetrie ist. Dies ergibt sich daraus, dass der Bloch-Zustand mit der geringsten Energie bei $-z\,t$ liegt, während der lokalisierte Zustand $\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})|0\rangle$ die Energie

$$-t\langle 0|\hat{a}(\vec{\imath}) \sum_{\vec{m},\,|\vec{m}|=1} \hat{a}^\dagger(\vec{\imath}+\vec{m})\hat{a}(\vec{\imath})\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})|0\rangle = 0 \tag{5.24}$$

besitzt. Natürlich gibt es darüber hinaus noch einen weiteren Beitrag zum Quantendruck, der in J_0 enthalten ist (siehe (2.36)). Dieser ist jedoch von der Verteilung des Teilchens über das Gitter unabhängig und somit nicht relevant. Die für die Lokalisierung im Gittersystem relevante Energieskala ergibt sich also aus der Energieskala (5.23) durch Multiplikation mit $J\pi^2$:

$$t := E_R\,J = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\pi^2 J. \tag{5.25}$$

Wie zu Beginn dieses Unterabschnittes erläutert, haben wir $t_M = 0.1t_A$ gesetzt. Dies setzt der Lokalisierung der Bosonen an einen einzelnen Gitterplatz offensichtlich keinen besonders hohen Widerstand entgegen.

Bei steigendem molekularen Anteil gewinnt die Wolke der Fermionen an Anisotropie: Bei $\nu = \infty$ (Abbildung 5.2) sind Besetzungszahl- und Ordnungsparameterprofile noch vollkommen isotrop. Dagegen wird in Abb. 5.3 und 5.4 deutlich, dass die Profile in der Nähe der Feshbach-Resonanz keine Funktionen ausschließlich des Abstandes vom Fallenzentrum mehr sind, sondern zusätzlich von der Richtung im Gitter abhängen.

Hatte die Fermion-Fermion-Korrelation $F(\vec{\imath})$ im Limes $\nu \to \infty$ nur ein Maximum und überall das gleiche Vorzeichen, so weist sie bei hinreichender molekularer Präsenz ein zusätzliches Minimum und einen Vorzeichenwechsel auf. Das weiter außen gelegene Maximum von $|F(\vec{\imath})|$ in Abb. 5.3 hatten wir bereits in Abschnitt 3.3 diskutiert: Bei „halber Bandfüllung“ $(n(\vec{\imath}) = 1)$ ist $F(\vec{\imath})$ extremal. Da sich die Wolke der Fermionen im Vergleich mit Abbildung 5.2 verkleinert hat, befindet sich die Extremalstelle nun dichter beim Zentrum. Das innere Maximum wird durch die Möglichkeit für die Feshbach-Moleküle bewirkt, ihre potentielle Energie zu minimieren, indem sie fast alle den zentralen Gitterplatz besetzen. Die Verkopplung der Ordnungsparameter $F(\vec{\imath})$ und $\phi(\vec{\imath})$ (vgl. (5.10)) führt dazu, dass $\phi(\vec{\imath})$ und $F(\vec{\imath})$ diese Zwei-Extrema-Struktur gemeinsam haben. Für Abb. 5.4 ist die Zwei-Peak-Gestalt nicht mehr so einfach zu erklären, da

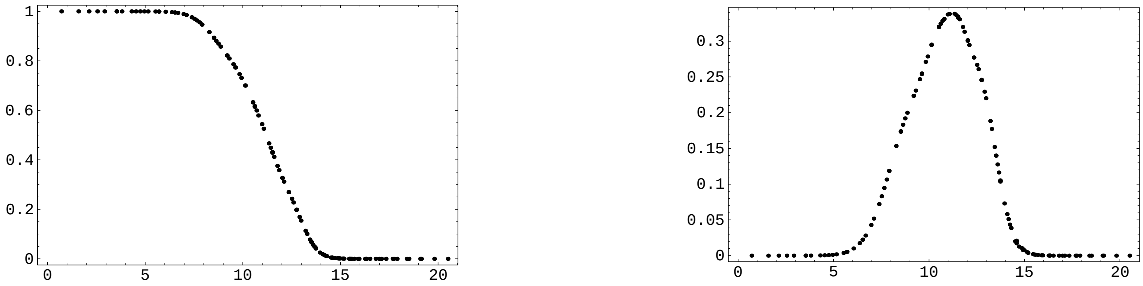


Abbildung 5.2: Besetzungszahl- und Ordnungsparameterprofile bei $\Omega = 0.01$, $U = -1$ und $N = 500$.

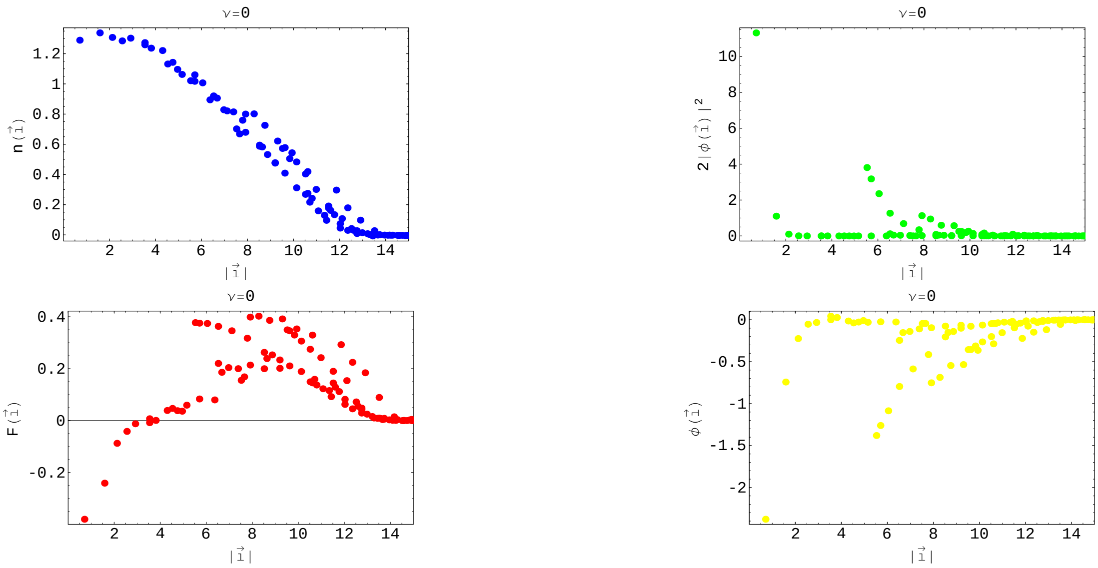


Abbildung 5.3: Besetzungszahl- und Ordnungsparameterprofile bei $\Omega = 0.01$, $\nu = 0$, $U = -1$, $g = 1$ und $N = 500$; $2n(\vec{\imath})$ ist die Anzahl dissoziierter Atome und $2|\phi(\vec{\imath})|^2$ diejenige Feshbach-gebundener Atome; $F(\vec{\imath})$ beschreibt Fermion-Fermion-Korrelationen vom Cooper-Paar-Typ, während $\phi(\vec{\imath})$ das Bose-Kondensat der Feshbach-Moleküle charakterisiert; mittlere Zahl der dissoziierten Atome: 311.32; mittlere Zahl der Feshbach-gebundenen Atome: 188.68.

$n(\vec{\imath}) = 1$ von den Fermionen nicht mehr erreicht wird. Die äußere Region großer Werte von $|F(\vec{\imath})|$ läßt sich hier als überlebender Anteil der entsprechenden Struktur in Abb. 5.3 deuten.

Bei Vergleich dieser Resultate mit den Ergebnissen für kontinuierliche Systeme [OG05b] zeigen sich folgende weitere Unterschiede: Im kontinuierlichen System gibt es keine Unterdrückung der Korrelationen $F(\vec{\imath})$ im Fallenzentrum und folglich keine Doppel-Extrema-Struktur von $F(\vec{\imath})$ und $\phi(\vec{\imath})$. Somit wechseln weder $F(\vec{\imath})$ noch $\phi(\vec{\imath})$ ihre Vorzeichen. Im kontinuierlichen System ist $\tilde{\Delta}$ eine geeignete Größe zur Beschreibung der Gesamtsuperfluidität, da sich die Beiträge von $\phi(\vec{\imath})$ und $F(\vec{\imath})$ konstruktiv addieren [OG05b]. Abb. 5.3 und 5.4 zeigen jedoch, dass sich im Gittersystem Konstellationen destruktiver Addition von $\phi(\vec{\imath})$ und $F(\vec{\imath})$ ergeben können. Als Größe zur Beschreibung der Gesamtsuperfluidität in Gittersystemen mit Feshbachresonanz erscheint $\tilde{\Delta}$ also ungeeignet.

Abbildung 5.5 zeigt (im linken Teil) für ein starkes Fallenpotential $\Omega = 0.1$, wie sich die Beiträge der dissoziierten Fermionen $N_F := \sum 2n_\uparrow(\vec{\imath})$ und der Feshbach-gebundenen Atome $N_M := \sum 2|\phi(\vec{\imath})|^2$ als Funktion der Feshbach-Verstimmung ν verhalten. Die Bildung von Feshbach-Molekülen setzt offenbar ungefähr bei der Verstimmung $\nu = -1.5$ ein und nimmt bei Verkleinerung von ν immer stärker zu, bis schließlich ungefähr bei $\nu = -4$ alle Fermionen Feshbach-gebunden sind.

Der zugehörige Verlauf des chemischen Potentials ist im rechten Teil von Abbildung 5.5 gezeigt. Für große ν hat es einen konstanten Wert und beginnt abzufallen, sobald das Crossovergebiet erreicht ist. Im Bereich des Crossovers und des BEC-Limes lässt sich das chemische Potential gut durch eine Gerade mit

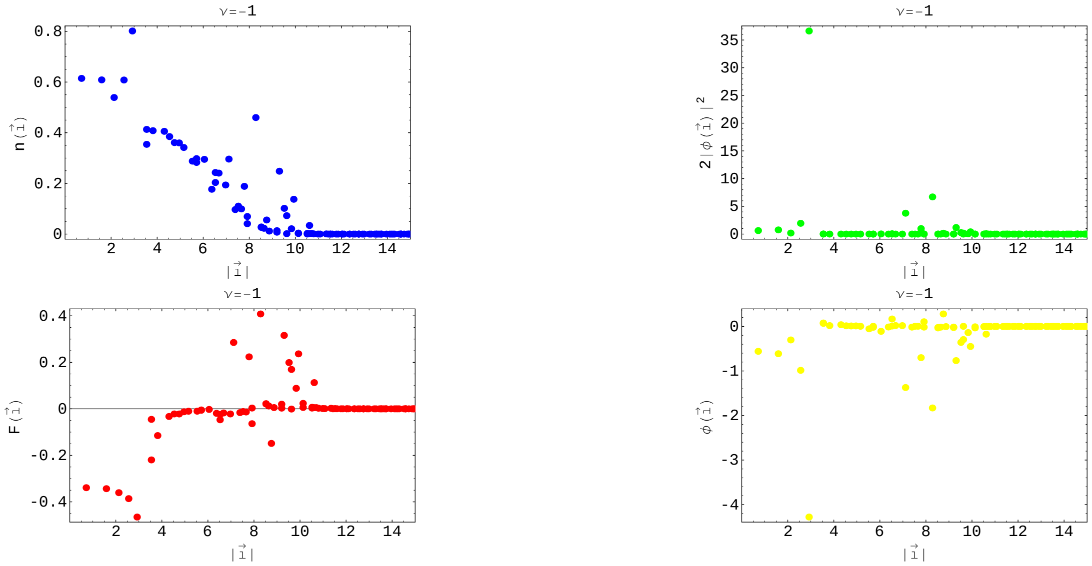


Abbildung 5.4: Wie Abb. 5.3 jedoch bei $\nu = -1$; mittlere Zahl der dissoziierten Atome: 75.51; mittlere Zahl der Feshbach-gebundenen Atome: 424.49.

Steigung eins beschreiben.

Die zugehörigen Verläufe der Besetzungszahlen gebundener und dissoziierter Atome sowie des Ordnungsparameters zeigt Abbildung 5.6 für einige ausgewählte Feshbach-Verstimmungen ν.

Die Position des Beginns des Crossovers bei $\nu = -1.5$ ist zunächst überraschend, denn für das in Abbildung 5.3 studierte System stellten wir eine größere Besetzung mit Bosonen bereits bei einer Verstimmung von $\nu = 0$ fest. Aus dem Studium kontinuierlicher Systeme ist jedoch bekannt, dass die Bildung von Bosonen ungefähr dort einsetzt, wo die Feshbach-Verstimmung das chemische Potential des BCS-Limes $\mu(\nu = \infty)$ erreicht [OG05b]. Da das System der Abbildung 5.3 im BCS-Limes das kleinere chemische Potential $\mu = 1$ besitzt, während sich aus dem rechten Bild von Abb. 5.5 das größere chemische Potential von $\mu = 1.82$ für den BCS-Limes ablesen lässt, bedarf dieser Punkt einer Klärung. Die Verschiebung des Crossovers zu kleineren Werten von ν ist eine Konsequenz der für große ν im Zentrum des in Abbildung 5.5 und 5.6 studierten Systems bestehenden isolierenden Zone. Dies lässt sich an Hand von (5.10) verstehen: Vernachlässigt man darin den Term $t_M \sum_{\vec{m}} \phi(\vec{\imath} + \vec{m})$, so kann man leicht nach $\phi(\vec{\imath})$ auflösen:

$$\phi(\vec{\imath}) = -\frac{g}{U_{bg}} \frac{\Delta(\vec{\imath})}{\Omega_M i^2 + 2\nu - 2\mu}. \tag{5.26}$$

Gemäß Abbildung 5.6 (ganz oben, rechts) ist der Ordnungsparameter $\Delta(\vec{\imath})$ bei großem ν nur innerhalb des superfluiden Rings mit $2 \leq |\vec{\imath}| \leq 6$ signifikant von null verschieden. Bei Reduktion von ν von großem ν startend wird sich das Profil von $\phi(\vec{\imath})$ stetig verändern. Befinden wir uns bei einer Einstellung von ν, bei der die Entwicklung von $\phi(\vec{\imath})$ weg von der Situation $\phi(\vec{\imath}) \approx 0$ gerade einsetzt, und bei der die Profile von $n(\vec{\imath})$ und $\Delta(\vec{\imath})$ sich kaum von der im Limes großen νs angetroffenen Lage unterscheiden, so können wir auf Grundlage von (5.26) aussagen, dass sich $\phi(\vec{\imath})$ zuerst im Bereich $2 \leq |\vec{\imath}| \leq 6$ von null weg entwickeln wird, und dass die dazu nötige Einstellung von ν in etwa durch

$$\nu \approx \mu - \frac{1}{2}\Omega_M i^2 \tag{5.27}$$

gegeben ist mit $2 \leq |\vec{\imath}| \leq 6$. Aus der großen Verschiebung des Crossovers zu negativen ν schließen wir, dass von dem Bereich $2 \leq |\vec{\imath}| \leq 6$ die Position des Extremums von $F(\vec{\imath})$ entscheidet. Der superfluide Ordnungsparameter nimmt sein Extremum bei $|\vec{\imath}| \approx 4.5$ an (siehe oberstes Bild rechts in Abbildung 5.6). Daraus folgt eine Verschiebung von ungefähr $2D$ hin zu negativen ν, wodurch obiger Befund erklärt wird.

In kontinuierlichen Systemen gilt im BEC-Limes $\mu = \nu$ [OG05b]. Gemäß Abb. 5.5 folgt das chemische Potential auch in unserem Falle der Verstimmung ν, jedoch ist die Gerade verschoben. Vereinfacht ausgedrückt, folgt aus Gleichung (5.26) eine obere Schranke für μ: $|\phi(\vec{\imath})|$ darf nicht beliebig groß werden, da wir

Abbildung 5.5: BCS-BEC-Crossover bei $\Omega = 0.1$ und 100 Atomen insgesamt: Gesamtzahl dissoziierter Fermionen N_F (links, blau), Gesamtzahl Feshbach-gebundener Atome N_M (links, rot) und chemisches Potential μ (rechts) als Funktionen der Feshbach-Verstimmung ν.

die Gesamtteilchenzahl als Randbedingung an die Lösung stellen. Daher darf innerhalb des superfluiden Rings der Betrag des Nenners von (5.26) nicht zu klein werden. Diese obere Schranke drückt μ nach unten, wenn ν verkleinert wird. Einerseits ergibt sich zwar aus (5.26) keine untere Schranke an das chemische Potential, andererseits besteht aber auch kein Grund, warum das chemische Potential stärker abfallen sollte, als die obere Schranke vorgiebt. Somit folgt das chemische Potential dieser oberen Schranke. Die Verschiebung der Gerade weg von $\mu = \nu$ ist also ebenso eine Konsequenz der Ringbildung aufgrund des zentralen Isolators.

Der Vergleich der Abbildungen 5.3 und 5.4 mit 5.6 liefert einen weiteren qualitativen Unterschied, der sich als Konsequenz der Präsenz des Isolators bei großen ν ergibt. Wir vermissen die Doppelpeakstruktur der Abbildungen 5.3 und 5.4 in Abbildung 5.6: Selbst im tiefen BEC-Regime zeigt das Profil von $F(\vec{\imath})$ noch die ursprüngliche Ringstruktur; lediglich eine kleine Verschiebung zum Fallenzentrum hin ist zu verzeichnen. Aufgrund der Verkopplung von $F(\vec{\imath})$ und $\phi(\vec{\imath})$ befindet sich an der Position dieses Rings die gesamte Besetzung mit Feshbach-Molekülen.

5.3 Berücksichtigung der Molekül-Wechselwirkung

Wir erweitern (5.2) um die Molekül-Molekül-Wechselwirkung

$$U_{MM} \sum_{\vec{\imath}} \hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath}) \tag{5.28}$$

und die Atom-Molekül-Wechselwirkung

$$U_{AM} \sum_{\vec{\imath},\sigma} \hat{a}^\dagger(\vec{\imath})\hat{a}(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma^\dagger(\vec{\imath})\hat{c}_\sigma(\vec{\imath}). \tag{5.29}$$

Zur Vereinfachung wenden wir die Technik des Ausintegrierens der bosonischen Freiheitsgrade an. Beispiele für solche Berechnungen aus dem Gebiet der kalten Atome finden sich in [BHS00] und [Mat03]. Mit dem rein bosonischen (Feshbach-Moleküle) Beitrag zur Wirkung

$$S_M[\Phi^*,\Phi] := \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\vec{\imath}} \Big\{ \Phi^*(\vec{\imath},\tau) \left[\left(\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + \Omega_M|\vec{\imath}|^2 + 2\nu - 2\mu \right) \Phi(\vec{\imath},\tau) - t_M \sum_{|\vec{m}|=1} \Phi(\vec{\imath}+\vec{m},\tau) \right] + \frac{1}{2} U_{MM} |\Phi(\vec{\imath},\tau)|^4 \Big\}, \tag{5.30}$$

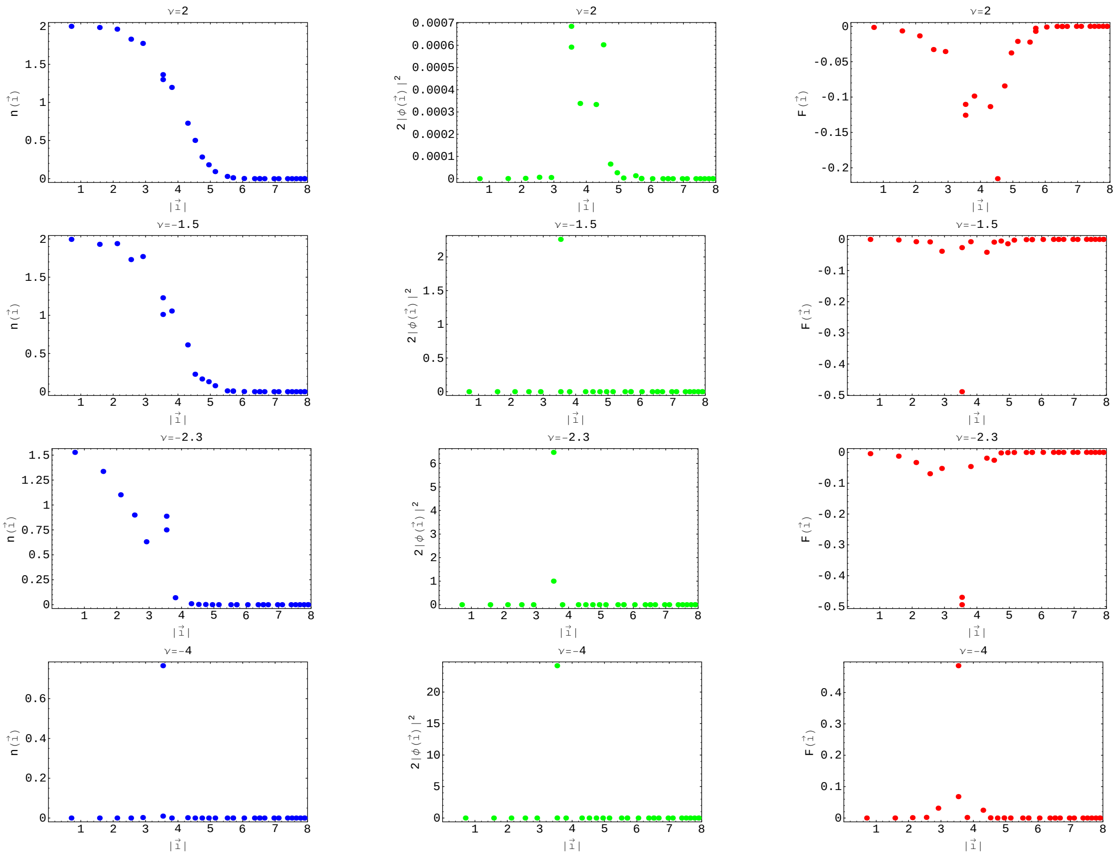


Abbildung 5.6: Besetzung mit dissoziierten Atomen $n(\vec{\imath})$, Besetzung mit Feshbach-gebundenen Atomen $2|\phi(\vec{\imath})|^2$ und Fermion-Fermion-Korrelation $F(\vec{\imath})$ jeweils als Funktion des Abstandes $|\vec{\imath}|$ vom Fallenzentrum für vier Feshbach-Verstimmungen ν bei $\Omega = 0.1$. Die Gesamtzahl der Atome beträgt 100.

dem rein fermionischen Anteil (dissoziierte Atome)

$$S_A[\Psi^*, \Psi] := \sum_\sigma \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\vec{\imath}} \Big\{ \Psi_\sigma^*(\vec{\imath}, \tau) \left[\left(\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \Omega_A |\vec{\imath}|^2 - \mu \right) \Psi_\sigma(\vec{\imath}, \tau) - t_A \sum_{|\vec{m}|=1} \Psi_\sigma(\vec{\imath} + \vec{m}, \tau) \right] + \frac{1}{2} U_{bg} |\Psi_\sigma(\vec{\imath}, \tau)|^2 |\Psi_{-\sigma}(\vec{\imath}, \tau)|^2 \Big\} \tag{5.31}$$

und dem Wechselwirkungsanteil

$$S_{AM}[\Phi^*, \Phi, \Psi^*, \Psi] := \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\vec{\imath}} \Big\{ U_{AM} \sum_\sigma |\Psi_\sigma(\vec{\imath}, \tau)|^2 |\Phi(\vec{\imath}, \tau)|^2 + g\Psi_\uparrow(\vec{\imath}, \tau)\Psi_\downarrow(\vec{\imath}, \tau)\Phi^*(\vec{\imath}, \tau) + g\Psi_\downarrow^*(\vec{\imath}, \tau)\Psi_\uparrow^*(\vec{\imath}, \tau)\Phi(\vec{\imath}, \tau) \Big\} \tag{5.32}$$

ergibt sich die großkanonische Zustandssumme zu

$$Z = \int \mathcal{D}\Phi^* \mathcal{D}\Phi \mathcal{D}\Psi^* \mathcal{D}\Psi \exp\{-\frac{1}{\hbar}(S_M[\Phi^*, \Phi] + S_A[\Psi^*, \Psi] + S_{AM}[\Phi^*, \Phi, \Psi^*, \Psi])\}. \tag{5.33}$$

Hierbei bezeichnet $\Phi(\vec{\imath}, \tau)$ das bosonische Feld (mit periodischen Randbedingungen) und $\Psi(\vec{\imath}, \tau)$ das fermionische (mit antiperiodischen Randbedingungen). Die bosonischen Anteile behandeln wir im Rahmen der Bogoliubov-Transformation: Nach Durchführung der Ersetzung

$$\Phi(\vec{\imath}, \tau) \to \Phi(\vec{\imath}) + \phi(\vec{\imath}, \tau) \tag{5.34}$$

mit $\Phi(\vec{\imath}) \in \mathbb{R}$ vernachlässigen wir alle Terme, die drei oder mehr bosonische Fluktuationsoperatoren $\phi(\vec{\imath}, \tau)$ und $\phi^*(\vec{\imath}, \tau)$ enthalten. Entsprechend gilt

$$S_M + S_{AM} = S_0 + S_1 + S_2 \tag{5.35}$$

bis zur zweiten Ordnung in den bosonischen Fluktuationsoperatoren mit

$$S_0 = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\vec{\imath}} \Big\{ \Phi(\vec{\imath}) \left[-t_M \sum_{|\vec{m}|=1} \Phi(\vec{\imath} + \vec{m}) + (\Omega_M |\vec{\imath}|^2 + 2\nu - 2\mu)\Phi(\vec{\imath}) \right] + \frac{1}{2} U_{MM} |\Phi(\vec{\imath})|^4 + U_{AM} \sum_\sigma |\Psi_\sigma(\vec{\imath}, \tau)|^2 (\Phi(\vec{\imath}))^2 + g\Psi_\uparrow(\vec{\imath}, \tau)\Psi_\downarrow(\vec{\imath}, \tau)\Phi(\vec{\imath}) + g\Psi_\downarrow^*(\vec{\imath}, \tau)\Psi_\uparrow^*(\vec{\imath}, \tau)\Phi(\vec{\imath}) \Big\}, \tag{5.36}$$

$$\begin{aligned} S_1 = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\vec{\imath}} \Big\{ & \Phi(\vec{\imath}) \Big(-t_M \sum_{|\vec{m}|=1} \phi(\vec{\imath} + \vec{m}, \tau) + (2\nu - 2\mu + \Omega_M |\vec{\imath}|^2)\phi(\vec{\imath}, \tau) - \\ & t_M \sum_{|\vec{m}|=1} \phi^*(\vec{\imath} + \vec{m}, \tau) + (2\nu - 2\mu + \Omega_M |\vec{\imath}|^2)\phi^*(\vec{\imath}, \tau) \Big) + \\ & U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^3 \phi(\vec{\imath}, \tau) + U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^3 \phi^*(\vec{\imath}, \tau) + \\ & U_{AM} \sum_\sigma |\Psi_\sigma(\vec{\imath}, \tau)|^2 \Phi(\vec{\imath})\phi(\vec{\imath}, \tau) + U_{AM} \sum_\sigma |\Psi_\sigma(\vec{\imath}, \tau)|^2 \Phi(\vec{\imath})\phi^*(\vec{\imath}, \tau) + \\ & g\Psi_\uparrow(\vec{\imath}, \tau)\Psi_\downarrow(\vec{\imath}, \tau)\phi^*(\vec{\imath}, \tau) + g\Psi_\downarrow^*(\vec{\imath}, \tau)\Psi_\uparrow^*(\vec{\imath}, \tau)\phi(\vec{\imath}, \tau) \Big\} \end{aligned} \tag{5.37}$$

und

$$
\begin{aligned}
S_2 = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\vec{\imath}} \Big\{ & \frac{1}{2}\phi^*(\vec{\imath},\tau) \left[\hbar \frac{\partial}{\partial\tau}\phi(\vec{\imath},\tau) - t_M \sum_{|\vec{m}|=1} \phi(\vec{\imath}+\vec{m},\tau) + (\Omega_M|\vec{\imath}|^2 + 2\nu - 2\mu)\phi(\vec{\imath},\tau) \right] + \\
& \frac{1}{2}\phi(\vec{\imath},\tau) \left[-\hbar \frac{\partial}{\partial\tau}\phi^*(\vec{\imath},\tau) - t_M \sum_{|\vec{m}|=1} \phi^*(\vec{\imath}+\vec{m},\tau) + (\Omega_M|\vec{\imath}|^2 + 2\nu - 2\mu)\phi^*(\vec{\imath},\tau) \right] + \\
& 2U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^2\phi^*(\vec{\imath},\tau)\phi(\vec{\imath},\tau) + \frac{1}{2}U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^2(\phi(\vec{\imath},\tau))^2 + \frac{1}{2}U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^2(\phi^*(\vec{\imath},\tau))^2 + \\
& U_{AM}\sum_\sigma |\Psi_\sigma(\vec{\imath},\tau)|^2\phi^*(\vec{\imath},\tau)\phi(\vec{\imath},\tau) \Big\}.
\end{aligned}
\tag{5.38}
$$

Da sich die Zustandssumme Z nicht ändern kann, wenn die Transformation $\phi(\vec{\imath},\tau) \to \phi(\vec{\imath},\tau) + \delta\phi(\vec{\imath},\tau)$ durchgeführt wird, gilt die Identität

$$
\begin{aligned}
& -t_M \sum_{\vec{m}} \Phi(\vec{\imath}+\vec{m}) + (2\nu - 2\mu + \Omega_M|\vec{\imath}|^2)\Phi(\vec{\imath}) + U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^3 + \\
& U_{AM}\sum_\sigma \langle|\Psi_\sigma(\vec{\imath},\tau)|^2\rangle\Phi(\vec{\imath}) + g\langle\Psi^*_\downarrow(\vec{\imath},\tau)\Psi^*_\uparrow(\vec{\imath},\tau)\rangle = 0.
\end{aligned}
\tag{5.39}
$$

Die beiden Ordnungsparameter für das Bosekondensat und die Cooper-Paare sind also auch hier gekoppelt (vgl. (5.10)). Führen wir die Symbole

$$
\vec{\phi}(\vec{\imath},\tau) := \begin{pmatrix} \phi(\vec{\imath},\tau) \\ \phi^*(\vec{\imath},\tau) \end{pmatrix}, \tag{5.40}
$$

$$
\begin{aligned}
\vec{J}(\vec{\imath},\tau) :=& \frac{1}{2}\left[-t_M \sum_{|\vec{m}|=1} \Phi(\vec{\imath}+\vec{m}) - \mu\Phi(\vec{\imath}) + U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^3 + U_{AM}\sum_\sigma |\Psi_\sigma(\vec{\imath},\tau)|^2\Phi(\vec{\imath}) \right] \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \\
& \frac{g}{2}\begin{pmatrix} \Psi_\uparrow(\vec{\imath},\tau)\Psi_\downarrow(\vec{\imath},\tau) \\ \Psi^*_\downarrow(\vec{\imath},\tau)\Psi^*_\uparrow(\vec{\imath},\tau) \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{5.41}
$$

und

$$
\begin{aligned}
& G^{-1}(\vec{\imath},\tau;\vec{k},\tau') := \\
& \begin{pmatrix}
\begin{matrix} \frac{1}{2}(2U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^2 + \hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + 2\nu - 2\mu + \Omega_M|\vec{\imath}|^2)\delta(\vec{\imath},\vec{k}) - \\ \frac{t_M}{2}\delta(1,|\vec{\imath}-\vec{k}|) + \frac{U_{AM}}{2}\sum_\sigma\langle|\Psi_\sigma(\vec{\imath},\tau)|^2\rangle \end{matrix} & \frac{U_{MM}}{2}(\Phi(\vec{\imath}))^2\delta(\vec{\imath},\vec{k}) \\
\frac{U_{MM}}{2}(\Phi(\vec{\imath}))^2\delta(\vec{\imath},\vec{k}) & \begin{matrix} \frac{1}{2}(2U_{MM}(\Phi(\vec{\imath}))^2 - \hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + 2\nu - 2\mu + \Omega_M|\vec{\imath}|^2)\delta(\vec{\imath},\vec{k}) \\ - \frac{t_M}{2}\delta(1,|\vec{\imath}-\vec{k}|) + \frac{U_{AM}}{2}\sum_\sigma\langle|\Psi_\sigma(\vec{\imath},\tau)|^2\rangle \end{matrix}
\end{pmatrix} \delta(\tau-\tau')
\end{aligned}
\tag{5.42}
$$

ein, so können wir schreiben:

$$
S_1 := \int_0^{\hbar\beta} d\tau \sum_{\vec{\imath}} \Big((\vec{J}(\vec{\imath},\tau))^\dagger \vec{\phi}(\vec{\imath},\tau) + (\vec{\phi}(\vec{\imath},\tau))^\dagger \vec{J}(\vec{\imath},\tau) \Big) \tag{5.43}
$$

und

$$
S_2 := \int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \sum_{\vec{\imath},\vec{k}} (\vec{\phi}(\vec{\imath},\tau))^\dagger G^{-1}(\vec{\imath},\tau;\vec{k},\tau')\vec{\phi}(\vec{k},\tau'). \tag{5.44}
$$

Es gilt

$$
\begin{aligned}
&\int \mathcal{D}\phi^*\mathcal{D}\phi \exp\{S_1[\phi^*,\phi,\Psi^*,\Psi] + S_2[\phi^*,\phi,\Psi^*,\Psi]\} = \\
&[\det(-G^{-1})]^{-1} \exp\{-\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \sum_{\vec{\imath},\vec{k}} (\vec{J}(\vec{\imath},\tau))^\dagger G(\vec{\imath},\tau;\vec{k},\tau')\vec{J}(\vec{k},\tau')\}
\end{aligned}
\tag{5.45}
$$

(siehe z.B. [NO]). Diese Beziehung ermöglicht das Ausintegrieren der bosonischen Freiheitsgrade, woraus sich eine induzierte effektive Fermion-Fermion-Wechselwirkung mit der zugehörigen Wirkung S_{Eff} ergibt:

$$
\begin{aligned}
&\int \mathcal{D}\Psi^*\mathcal{D}\Psi \exp\{S_A[\Psi^*,\Psi] + S_0[\Psi^*,\Psi]\} \int \mathcal{D}\phi^*\mathcal{D}\phi \exp\{S_1[\phi^*,\phi,\Psi^*,\Psi] + S_2[\phi^*,\phi,\Psi^*,\Psi]\} = \\
&\int \mathcal{D}\Psi^*\mathcal{D}\Psi \exp\{S_A[\Psi^*,\Psi] + S_0[\Psi^*,\Psi] + S_{Eff}[\Psi^*,\Psi]\},
\end{aligned}
\tag{5.46}
$$

wobei

$$
S_{Eff}[\Psi^*,\Psi] = -\int_0^{\hbar\beta} d\tau \int_0^{\hbar\beta} d\tau' \sum_{\vec{\imath},\vec{k}} (\vec{J}(\vec{\imath},\tau))^\dagger G(\vec{\imath},\tau;\vec{k},\tau')\vec{J}(\vec{k},\tau') - \ln(\det(-G^{-1})). \tag{5.47}
$$

Der erste Term in S_{Eff} beschreibt den Beitrag von Zwischenzuständen mit einem virtuellen Phonon. Der zweite Term

$$
\begin{aligned}
&-\ln(\det(-G^{-1})) = -\mathrm{Tr}\ln(-G^{-1}) = -\mathrm{Tr}\ln(-\tilde{G}^{-1}) - \mathrm{Tr}\ln(1+\tilde{G}Y) = \\
&-\mathrm{Tr}\ln(-\tilde{G}^{-1}) - \mathrm{Tr}\sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^{p+1}}{p}(\tilde{G}Y)^p
\end{aligned}
\tag{5.48}
$$

mit

$$
\begin{aligned}
&Y(\vec{\imath},\tau;\vec{k},\tau') := \frac{U_{AM}}{2}\sum_\sigma |\Psi_\sigma(\vec{\imath},\tau)|^2 \delta(\vec{\imath},\vec{k})\delta(\tau-\tau'), \\
&\tilde{G}^{-1} = G^{-1} - Y
\end{aligned}
\tag{5.49}
$$

liefert eine Verschiebung des chemischen Potentials (Summand zu $p = 1$) und die Beiträge aufgrund des Austausches von 2 (sowie mehr) virtuellen Phononen (Summand zu $p = 2$ (bzw. $p > 2$)).

Die Matrix G, die man durch Inversion von (5.42) erhält, beschreibt bei Beschränkung auf Einphononenaustausch bereits die gesamte Wechselwirkung. G verbindet verschiedene Gitterplätze wegen des Terms $-\frac{t_M}{2}\delta(1,|\vec{\imath}-\vec{k}|)$ in (5.42). Ist t_M genügend klein, so ist es wieder wie in Kapitel 4 möglich, die induzierte Wechselwirkung auf den Nächst-Nachbar-Anteil zu beschränken. Vernachlässigt man zusätzlich die Frequenzabhängigkeit der Fouriertransformierten von G, so ist die induzierte Wechselwirkung instantan. Unter diesen beiden Vereinfachungen lässt sich die zusätzliche induzierte Fermion-Fermion-Wechselwirkung G leicht in den allgemeinen Ortsraumformalismus in Kapitel 3 einbetten. Wir erhalten lediglich zwei weitere Selbstkonsistenzgleichungen: Eine für die Renormierung der induzierten Nächst-Nachbar-Wechselwirkung durch die kinetische Energie (siehe 3.21) und eine zweite für den Nächst-Nachbar-Anteil zur Cooper-Paar-Amplitude (siehe 3.5) . Statt $\phi(\vec{\imath})$ und $n(\vec{\imath})$ müssen dann also $\phi(\vec{\imath})$, $n(\vec{\imath})$, $F(\vec{\imath},\vec{m})$ und $K(\vec{\imath},\vec{m})$ selbstkonsistent bestimmt werden. Man beachte, dass (5.39) von $F(\vec{\imath},\vec{m})$ nicht abhängt und somit wie bisher $F(\vec{\imath})$ sehr einfach durch $\phi(\vec{\imath})$ ausgedrückt werden kann. Vor jeder Iteration des Gleichungslösers wird G neu bestimmt aus den Resultaten des vorangehenden Iterationsschritts.

6 ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Arbeit wurden drei verschiedene Szenarien im Rahmen der Mean-Field-Theorie untersucht, bei denen Superfluidität von fermionischen Atomen auf dem optischen Gitter möglich ist. Beim ersten Szenarium wird die Superfluidität durch eine attraktive Wechselwirkung der Fermionen ermöglicht, welche zu Paarbildung führt. Zusätzliche bosonische Atome beim zweiten Szenarium induzieren eine effektive Fermion-Fermion-Wechselwirkung. Diese kann zu unkonventioneller Superfluidität führen (s-, p- und d-Wellen-Paarung) und bei repulsiver Fermion-Fermion-Wechselwirkung die Superfluidität erst ermöglichen. Ein zusätzliches externes magnetisches Feld wird im dritten Szenarium benutzt, um die Fermion-Fermion-Wechselwirkung über eine Feshbach-Resonanz zu beeinflussen.

Beim ersten Szenarium sind im Grundzustand zwei Phasen möglich: Bandisolator und Superfluid. Ein parabolisches Fallenpotential, das dem optischen Gitter überlagert ist, ermöglicht die Koexistenz beider Phasen. Die adäquate Berücksichtigung des parabolischen Potentials erlaubte uns die Bestimmung der Spektren der Einteilchenanregungen und der kollektiven Moden. Diese könnten im Zusammenhang mit dem experimentellen Nachweis der Superfluidität in diesem System von Interesse sein. Denn während der Phasenübergang zur Superfluidität das Besetzungszahlprofil nahezu nicht verändert, beeinflusst er die Anregungsspektren sehr viel stärker. Die Local-Density-Approximation eignet sich nicht zur Vorhersage dieser Anregungsspektren. Dagegen weichen die LDA-Vorhersagen für Besetzungszahl- und Ordnungsparameterprofile kaum von den Resultaten bei adäquater Berücksichtigung des Fallenpotentials ab. Erst bei relativ starkem Fallenpotential werden diese Profile anisotrop - bei isotropen LDA-Vorhersagen. Die LDA eignet sich nur bedingt zur Vorhersage der kritischen Temperatur des Phasenübergangs zur Superfluidität. Bei adäquater Berücksichtigung des Fallenpotentials ist eine genauere Angabe möglich.

Die Boson-induzierte Wechselwirkung im zweiten Szenarium ist nicht-lokal. Somit können zusätzlich zur s-Wellen-Paarbildung, die bei lokaler attraktiver Wechselwirkung die einzige Möglichkeit darstellt, p- und d-Wellen-Paarung auftreten. Die hohe Manipulierbarkeit ultrakalter Atome im optischen Gitter sollte ein systematisches experimentelles Studium dieser Paarungstypen ermöglichen. Wir haben für das kubische dreidimensionale Gitter und das hexagonale zweidimensionale Gitter untersucht, welche Phasen in Abhängigkeit der Parameter vorliegen können. Beim hexagonalen Gitter ergab sich unter anderem ein interessanter s-d-Mischzustand. Weiterhin haben wir im Rahmen der LDA gezeigt, dass ein dem optischen Gitter überlagertes harmonisches Fallenpotential zur Koexistenz von s- und d-Wellen-Superfluidität führen kann. Wie sich in diesem Fall das parabolische Fallenpotential über die LDA hinausgehend berücksichtigen lässt, haben wir skizziert.

Mit Hilfe einer Feshbach-Resonanz lässt sich die Fermion-Fermion-Wechselwirkung im dritten Szenarium von außen über ein Magnetfeld steuern. Die Beeinflussung der Fermion-Fermion-Wechselwirkung ist jedoch nicht der einzige Effekt des Magnetfeldes. Vielmehr können auf der BEC-Seite der Resonanz stabile Feshbach-Moleküle gebildet werden. Deren Präsenz hat bei einem zusätzlichen harmonischen Fallenpotential einen starken Einfluss auf die Profile der Besetzungszahl und des Ordnungsparameters der Fermionen: Deren Anisotropie wird erhöht und der qualitative Verlauf des Ordnungsparameterprofils kann sich stark verändern. Unsere Vorhersage für das bosonische Besetzungszahlprofil leidet jedoch unter der Vernachlässigung der repulsiven Molekül-Molekül-Wechselwirkung. Wie sich diese in den Formalismus zur adäquaten Berücksichtigung des parabolischen Fallenpotentials einfügen lässt, haben wir detailliert beschrieben.

6.1 Ausblick

Methodisch hat sich unsere Untersuchung auf die Mean-Field-Theorie beschränkt. Diese liefert zwar im Weak-Coupling-Regime verlässliche Ergebnisse, jedoch besteht ein berechtigtes Interesse an zuverlässigen Berechnungen im Bereich stärkerer Wechselwirkung. Beispielsweise wird der mit Szenarium 1 realisierbare BEC-BCS-Crossover seit längerem im Zusammenhang mit der Supraleitung im Festkörper untersucht. Unsere Mean-Field-Beschreibung eignet sich hier nur für den BCS-Bereich, insbesondere, wenn es um endliche Temperaturen geht. Dafür bietet sie den Vorteil, dass das parabolische Fallenpotential adäquat berücksichtigt wird. Die avancierteren Verfahren TMA, $\frac{1}{N}$-Entwicklung, DMFT und QMC, die auch bei stärkerer Wechselwirkung geeignet sind, lassen sich natürlich im Rahmen der LDA auch auf inhomogene Systeme anwenden. Ob und wie bei diesen Techniken die adäquate Berücksichtigung des harmonischen Fallenpotentials möglich ist, bleibt zu untersuchen.

Bei der Diskussion der Fermion-Boson-Mischung haben wir uns auf das Fast-Phonon-Limit beschränkt, welches die Vernachlässigung der Retardierung erlaubt. In vielen Fällen wird dieser Limes jedoch nicht erreicht und Retardierung von Bedeutung. Einerseits macht die Berücksichtigung der Retardierung die Rechnungen sehr viel komplizierter, andererseits sind gerade Systeme kalter Atome aufgrund ihrer exakt bekannten Wechselwirkungen und der großen Manipulierbarkeit eine gute Möglichkeit, um die Zuverlässigkeit von theoretischen Verfahren zur Berücksichtigung der Retardierung durch Vergleich mit dem Experiment zu testen.

Wie man die Wechselwirkung der Feshbach-Bosonen im BEC-Limes in unseren Formalismus der exakten Berücksichtigung des parabolischen Fallenpotentials einbauen kann, haben wir im Detail dargestellt. Damit sollte sich das Artefakt unserer wechselwirkungsfreien Beschreibung, dass nämlich im BEC-Limes alle Feshbach-Bosonen auf vier (bzw. in 3D auf sechs) Gitterplätze verteilt sind, beseitigen lassen. Daneben gibt es bei der Diskussion von Feshbach-Resonanzen im optischen Gitter noch weitaus schwierigere Probleme: In der Nähe der Feshbach-Resonanz bricht die Einband-Beschreibung zusammen. Andererseits kann man diese Schwierigkeit wieder als Anreiz für einschlägige Untersuchungen nehmen. Denn wiederum sind Mehrband-Hubbard-Modelle auch in der Festkörperphysik von Interesse und der Vergleich theoretischer Ergebnisse mit dem Experiment bei den kalten Gasen einfacher.

Danksagung

Ich danke Herrn Prof. P.G.J. van Dongen für die Betreuung meiner Diplomarbeit und zahlreiche Unterhaltungen über Gott, die Welt, die Physik und die Physiker.

Sehr profitiert habe ich davon, an der Universität einen Arbeitsplatz zu haben.

Für Unterstützung in Computerfragen bedanke ich mich bei Nils Blümer, Erik Jeckelmann und Carsten Knecht.

Prof. I. Bloch, D. van Oosten und C. Greiner danke ich für einige Gespräche. D. van Oosten danke ich insbesondere für die vielen Anregungen bei meinem Probevortrag.

Einige interessante Fragen und Kommentare verdanke ich Prof. W. Zwerger, Prof. G. Blatter, Prof. M. Troyer und Prof. M. Sigrist.

Bei Frau Helf bedanke ich mich dafür, dass die Organisation immer perfekt geklappt hat.

7 ANHANG

Ergänzung zu Unterabschnitt 3.4.1

Zunächst geben wir die zu (3.82) analogen Transformationen des Anzahloperators und der Cooper-Paar-Operatoren auf die Operatoren $\hat{C}_\sigma$ an.

$$\begin{aligned}
\hat{n}_\downarrow(i) = &\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s')\hat{C}_\uparrow(s)\hat{C}_\uparrow^\dagger(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, s'+\mathcal{N})\hat{C}_\uparrow(s)\hat{C}_\downarrow(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s')\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow^\dagger(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, s'+\mathcal{N})\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow(s'),
\end{aligned} \tag{7.1}$$

$$\begin{aligned}
\hat{F}(i) = &\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s')\hat{C}_\uparrow(s)\hat{C}_\uparrow^\dagger(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, s'+\mathcal{N})\hat{C}_\uparrow(s)\hat{C}_\downarrow(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i, s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s')\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow^\dagger(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i, s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, s'+\mathcal{N})\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow(s'),
\end{aligned} \tag{7.2}$$

bzw.

$$\begin{aligned}
\hat{F}^\dagger(i) = &\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+1-s')\hat{C}_\uparrow(s)\hat{C}_\uparrow^\dagger(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, s'+\mathcal{N})\hat{C}_\uparrow(s)\hat{C}_\downarrow(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+1-s')\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow^\dagger(s') \\
&+ \sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N}, s+\mathcal{N})\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, s'+\mathcal{N})\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow(s').
\end{aligned} \tag{7.3}$$

Im Folgenden vervollständigen wir die Diskussion der Greenschen Funktionen:

$$\begin{aligned}
&\langle\langle \hat{n}_\uparrow(i), \hat{n}_\downarrow(k) \rangle\rangle^0(\omega) \\
&= \textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+1-s') \frac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega+E(s)-E(s')+i\delta} \\
&+ \textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N}, \mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+s') \frac{1-f(E(s))-f(E(s'))}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta} \\
&+ \textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N}, \mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N}, \mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+s') \frac{f(E(s))+f(E(s'))-1}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta} \\
&+ \textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}} \sum_{s'=1}^{\mathcal{N}} \boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N}, \mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N}, \mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i, \mathcal{N}+s') \frac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s)+E(s')+i\delta}
\end{aligned} \tag{7.4}$$

folgt aus den Kommutatorerwartungswerten

$$\begin{aligned}
&\langle[\hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow(s'),\hat{n}_\downarrow(i)]_-\rangle^0=\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\big[f(E(s'))-f(E(s))\big]\\
&\langle[\hat{C}_\uparrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s'),\hat{n}_\downarrow(i)]_-\rangle^0=\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\big[1-f(E(s))-f(E(s'))\big],\\
&\langle[\hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\uparrow(s'),\hat{n}_\downarrow(i)]_-\rangle^0=\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\big[f(E(s))+f(E(s'))-1\big],\\
&\langle[\hat{C}_\downarrow(s)\hat{C}_\downarrow^\dagger(s'),\hat{n}_\downarrow(i)]_-\rangle^0=\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\big[f(E(s))-f(E(s'))\big].
\end{aligned} \tag{7.5}$$

Ebenso findet man

$$\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{n}_\downarrow(i),\hat{n}_\downarrow(k)\rangle\rangle^0(\omega)\\
&=\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\frac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega+E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\frac{1-f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\frac{f(E(s))+f(E(s'))-1}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\frac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s)+E(s')+i\delta}.
\end{aligned} \tag{7.6}$$

Dieser Ausdruck stimmt - wie man aufgrund der Spinsymmetrie erwartet - mit $\langle\langle\hat{n}_\uparrow(i),\hat{n}_\uparrow(k)\rangle\rangle^0(\omega)$ überein. Dies wird offensichtlich, wenn man folgende mögliche Symmetrie von $\boldsymbol{\mathcal{W}}$ beachtet (durch orthogonale Transformation innerhalb der Eigenräume zu gegebenem Energieeigenwert lässt sich $\boldsymbol{\mathcal{W}}$ immer mit der beschriebenen Symmetrie konstruieren):

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,s+\mathcal{N})&=\pm\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\\
\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)&=\mp\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s).
\end{aligned} \tag{7.7}$$

Schließlich fehlt unter den Dichte-Dichte-Green-Funktionen noch

$$\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{n}_\downarrow(i),\hat{n}_\uparrow(k)\rangle\rangle^0(\omega)\\
&=\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s')\frac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega+E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s')\frac{1-f(E(s))-f(E(s'))}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s')\frac{f(E(s))+f(E(s'))-1}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s')\frac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s)+E(s')+i\delta}.
\end{aligned} \tag{7.8}$$

Dies stimmt mit $\langle\langle\hat{n}_\uparrow(i),\hat{n}_\downarrow(k)\rangle\rangle^0(\omega)$ aus (7.4) überein. Der Grund hierfür ist die Symmetriebeziehung

$$[\langle\langle\hat{n}_\downarrow(i),\hat{n}_\uparrow(k)\rangle\rangle^0(\omega)]^*=-\langle\langle\hat{n}_\uparrow(k),\hat{n}_\downarrow(i)\rangle\rangle^0(-\omega) \tag{7.9}$$

der Greenschen Funktion in Verbindung mit der Symmetrie (7.7) der Matrix $\boldsymbol{\mathcal{W}}$.

Zur Bestimmung der superfluiden Korrelationsfunktion benötigen wir die Kommutatorerwartungswerte

$$\begin{aligned}
\langle[\hat{C}_\uparrow(s)\hat{C}_\uparrow^\dagger(s'),\hat{F}(k)]_-\rangle^0&=\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\left[f(E(s'))-f(E(s))\right],\\
\langle[\hat{C}_\uparrow(s)\hat{C}_\downarrow(s'),\hat{F}(k)]_-\rangle^0&=\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+s')\left[1-f(E(s))-f(E(s'))\right],\\
\langle[\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)\hat{C}_\uparrow^\dagger(s'),\hat{F}(k)]_-\rangle^0&=\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\left[f(E(s))+f(E(s'))-1\right],\\
\langle[\hat{C}_\downarrow^\dagger(s)\hat{C}_\downarrow(s'),\hat{F}(k)]_-\rangle^0&=\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\left[f(E(s))-f(E(s'))\right].
\end{aligned} \tag{7.10}$$

Es ergibt sich

$$\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{F}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^0(\omega)\\
&=\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\frac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega+E(s')-E(s)+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+s')\frac{1-f(E(s'))-f(E(s))}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+1-s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\frac{f(E(s))+f(E(s'))-1}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta}\\
&+\textstyle\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i+\mathcal{N},\mathcal{N}+s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k+\mathcal{N},\mathcal{N}+s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}+s')\frac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s')+E(s)+i\delta},
\end{aligned} \tag{7.11}$$

$$
\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{F}^{\dagger}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega)\\
&=\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s)\,\tfrac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega+E(s')-E(s)+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}s')\,\tfrac{1-f(E(s'))-f(E(s))}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s)\,\tfrac{f(E(s))+f(E(s'))-1}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}s')\,\tfrac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s')+E(s)+i\delta},
\end{aligned}
\tag{7.12}
$$

$$
\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{F}(i),\hat{F}^{\dagger}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega)\\
&=\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s')\,\tfrac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega+E(s')-E(s)+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s')\,\tfrac{1-f(E(s'))-f(E(s))}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s')\,\tfrac{f(E(s))+f(E(s'))-1}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}s)\,\tfrac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s')+E(s)+i\delta}
\end{aligned}
\tag{7.13}
$$

und

$$
\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{F}^{\dagger}(i),\hat{F}^{\dagger}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega)\\
&=\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s')\,\tfrac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega+E(s')-E(s)+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s')\,\tfrac{1-f(E(s'))-f(E(s))}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}s)\,\tfrac{f(E(s))+f(E(s'))-1}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}s)\,\tfrac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega-E(s')+E(s)+i\delta}.
\end{aligned}
\tag{7.14}
$$

Mit Hilfe von (7.7) lässt sich verifizieren, dass die Symmetrierelationen

$$
\begin{aligned}
[\langle\langle\hat{F}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle(\omega)]^{*} &= \langle\langle\hat{F}^{\dagger}(i),\hat{F}^{\dagger}(k)\rangle\rangle(-\omega),\\
[\langle\langle\hat{F}^{\dagger}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle(\omega)]^{*} &= \langle\langle\hat{F}(i),\hat{F}^{\dagger}(k)\rangle\rangle(-\omega)
\end{aligned}
\tag{7.15}
$$

erfüllt werden.

Schließlich fehlen noch die Korrelationsfunktionen, die die Kopplung von Dichtefluktuationen mit Fluktuationen des superfluiden Ordnungsparameters beschreiben:

$$
\begin{aligned}
&\langle\langle\hat{n}_{\uparrow}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega)\\
&=\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s)\,\tfrac{f(E(s))-f(E(s'))}{\omega+E(s')-E(s)+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}1{-}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}s')\,\tfrac{f(E(s'))+f(E(s))-1}{\omega-E(s)-E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}1{-}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s)\,\tfrac{1-f(E(s))-f(E(s'))}{\omega+E(s)+E(s')+i\delta}\\
&+\sum_{s=1}^{\mathcal{N}}\sum_{s'=1}^{\mathcal{N}}\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(i,\mathcal{N}{+}s')\boldsymbol{\mathcal{W}}(k{+}\mathcal{N},\mathcal{N}{+}s)\boldsymbol{\mathcal{W}}(k,\mathcal{N}{+}s')\,\tfrac{f(E(s'))-f(E(s))}{\omega-E(s')+E(s)+i\delta}.
\end{aligned}
\tag{7.16}
$$

Die verbleibenden sieben verwandten Korrelationsfunktionen lassen sich mit dieser über Symmetrierelationen in Beziehung setzen:

$$
\begin{aligned}
\langle\langle\hat{n}_{\downarrow}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega) &= -\langle\langle\hat{n}_{\uparrow}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega)\\
\langle\langle\hat{n}_{\uparrow}(i),\hat{F}^{\dagger}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega) &= [\langle\langle\hat{n}_{\uparrow}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^{0}(-\omega)]^{*}\\
\langle\langle\hat{n}_{\downarrow}(i),\hat{F}^{\dagger}(k)\rangle\rangle^{0}(\omega) &= [\langle\langle\hat{n}_{\downarrow}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^{0}(-\omega)]^{*}\\
\langle\langle\hat{F}(k),\hat{n}_{\uparrow}(i)\rangle\rangle^{0}(\omega) &= -[\langle\langle\hat{n}_{\uparrow}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^{0}(-\omega)]^{*}\\
\langle\langle\hat{F}(k),\hat{n}_{\downarrow}(i)\rangle\rangle^{0}(\omega) &= -[\langle\langle\hat{n}_{\downarrow}(i),\hat{F}(k)\rangle\rangle^{0}(-\omega)]^{*}\\
\langle\langle\hat{F}^{\dagger}(k),\hat{n}_{\uparrow}(i)\rangle\rangle^{0}(\omega) &= -[\langle\langle\hat{n}_{\uparrow}(i),\hat{F}^{\dagger}(k)\rangle\rangle^{0}(-\omega)]^{*}\\
\langle\langle\hat{F}^{\dagger}(k),\hat{n}_{\downarrow}(i)\rangle\rangle^{0}(\omega) &= -[\langle\langle\hat{n}_{\downarrow}(i),\hat{F}^{\dagger}(k)\rangle\rangle^{0}(-\omega)]^{*}.
\end{aligned}
\tag{7.17}
$$

Hierin spiegelt die erste Gleichung die Spinsymmetrie wider.

LITERATURVERZEICHNIS

[AEM+95] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman, and E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science*, 269:198, 1995.

[AIE03] Alexander Albus, Fabrizio Illuminati, and Jens Eisert. Mixtures of Bosonic and Fermionic Atoms in Optical Lattices. *e-print cond-mat*, 0304223, 2003.

[AS84] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Pocketbook of Mathematical Functions*. Harri Deutsch, 1984.

[BAR+04] M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. Hecker Denschlag, and R. Grimm. Crossover from a Molecular Bose Einstein Condensate to a Degenerate Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 92:120401, 2004.

[Bas] Basic Atomic Spectroscopic Data. http://physics.nist.gov/PhysRefData/Handbook/.

[BBG+00] J. L. Bohn, J. P. Burke, C. H. Greene, H. Wang, P. L. Gould, W. C. Stwalley, A. N. Nikolov, J. R. Ensher, E. E. Eyler, E. Tiesinga, C. J. Williams, and P. S. Julienne. Ground-state scattering lengths for potassium isotopes determined by double-resonance photoassociative spectroscopy of ultracold ^{39}K. *Phys. Rev. A*, 62:052704, 2000.

[BCD+99] G. Bruun, Y. Castin, R. Dum, , and K. Burnett. BCS theory for trapped ultracold fermions. *Eur. Phys. J. D*, 7:433, 1999.

[BH02] G. M. Bruun and H. Heiselberg. Cooper pairing and single-particle properties of trapped Fermi gases. *Phys. Rev. A*, 65:053407, 2002.

[BHS00] M. J. Bijlsma, B. A. Heringa, and H. T. C. Stoof. Phonon exchange in dilute Fermi-Bose mixtures: Tailoring the Fermi-Fermi interaction. *Phys. Rev. A*, 61:053601, 2000.

[BM01] G. M. Bruun and B. R. Mottelson. Low Energy Collective Modes of a Superfluid Trapped Atomic Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 87:270403, 2001.

[BP00] M. A. Baranov and D. S. Petrov. Low-energy collective excitations in a superfluid trapped Fermi gas. *Phys. Rev. A*, 62:041601, 2000.

[Bru02] G. M. Bruun. Low-Energy Monopole Modes of a Trapped Atomic Fermi Gas. *Phys. Rev. Lett.*, 89:263002, 2002.

[BSW89] N. E. Bickers, D. J. Scalapino, and S. R. White. Conserving Approximations for Strongly Correlated Electron Systems: Bethe-Salpeter Equation and Dynamics for the Two-Dimensional Hubbard Model. *Phys. Rev. Let.*, 62:961, 1989.

[Bul02] N. Bulut. $d_{x^2-y^2}$ superconductivity and the Hubbard model. *Advances in Physics*, 51:1587, 2002.

[CCR+00] S. L. Cornish, N. R. Claussen, J. L. Roberts, E. A. Cornell, and C . A. Wieman. Stable ^{85}Rb Bose-Einstein Condensates with Widely Tunable Interactions. *Phys. Rev. Let.*, 85:1795, 2000.

[DH05] R. B. Diener and T.-L. Ho. Fermions in Optical Lattices across Feshbach Resonance. *e-print cond-mat*, 0507253, 2005.

[DKvOS05] D.B.M.Dickerscheid, U. Al Khawaja, D. van Oosten, and H.T.C. Stoof. Feshbach resonances in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, 71:043604, 2005.

[DLW04] E. Demler, M. D. Lukin, and D.-W. Wang. Engineering Superfluidity in Bose-Fermi Mixtures of Ultracold Atoms. *e-print cond-mat*, 0410494, 2004.

[DMA+95] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3969, 1995.

[DS04] R. A. Duine and H. T. C. Stoof. Atom-Molecule-Coherence in Bose gases. *Phys. Rep.*, 396:115, 2004.

[FBD+04] H. Fehrmann, M. A. Baranov, B. Damski, M. Lewenstein, and L. Santos. Mean-field theory of Bose-Fermi mixtures in optical lattices. *e-print cond-mat*, 0307635, 2004.

[FW] Fetter and Walecka. Quantum Theory of Many-Particle Systems. Springer-Verlag.

[GKR05] A. Garg, H. R. Krishnamurthy, and M. Randeria. BCS-BEC crossover at $T = 0$: A dynamical mean-field theory approach. *Phys. Rev. B*, 72:024517, 2005.

[Gre03] M. Greiner. *Ultracold quantum gases in three-dimensional optical lattice potentials*. PhD thesis, LMU München, 2003.

[GSL] GSL - GNU Scientific Library. http://www.gnu.org/software/gsl/.

[Hau99] R. Haussmann. *Self-consistent Quantum-Field Theory and Bosonization for Strongly Correlated Electron Systems*. Lecture Notes in Physics. Springer, 1999.

[HCZ+02] W. Hofstetter, J. I. Cirac, P. Zoller, E. Demler, and M. D. Lukin. High-Temperature Superfluidity of Fermionic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Let.*, 89:220407, 2002.

[Hir85] J. E. Hirsch. Attractive Interaction and Pairing in Fermion Systems with Strong On-Site Repulsion. *Phys. Rev. Let.*, 54:1317, 1985.

[Hof05] W. Hofstetter. Flavor Degeneracy and Effects of Disorder in Ultracold Atom Systems. *e-print cond-mat*, 0504113, 2005.

[HSMH98] M. Houbiers, H. T. C. Stoof, W. I. McAlexander, and R. G. Hulet. Elastic and inelastic collisions of ^{6}Li atoms in magnetic and optical traps. *Phys. Rev. A*, 57, 1998.

[Hua] K. Huang. Statistical Mechanics.

[JBC+98] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller. Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices. *Phys. Rev. Let.*, 81:3108, 1998.

[KMS+05] Michael Köhl, Henning Moritz, Thilo Stöferle, Kenneth Günter, and Tilman Esslinger. Fermionic atoms in a 3D optical lattice: Observing Fermi-surfaces, dynamics and interactions. *Phys. Rev. Lett.*, 94:080403, 2005.

[LAPa] http://www.netlib.org/lapack/.

[LAPb] http://math.nist.gov/lapack++/.

[LSBF04] M. Lewenstein, L. Santos, M. A. Baranov, and H. Fehrmann. Atomic Bose-Fermi mixtures in an optical lattice. *e-print cond-mat*, 0306180, 2004.

[Mah] G. D. Mahan. Many-particle physics.

[Mat03] F. Matera. Fermion pairing in Bose-Fermi mixtures. *Phys. Rev. A*, 68:043624, 2003.

[MRR90] R. Micnas, J. Ranninger, and S. Robaszkiewicz. Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions. *Rev. Mod. Phys.*, 62:113, 1990.

[MRRT88] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, and S. Tabor. Superconductivity in a narrow-band system with intersite electron pairing in two dimensions: A mean-field study. *Phys. Rev. B*, 37:9410, 1988.

[NO] J. W. Negele and H. Orland. Quantum Many-Particle Systems.

[Nol] W. Nolting. Grundkurs theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie. Springer-Verlag.

[OG03] Y. Ohashi and A. Griffin. Superfluidity and collective modes in a uniform gas of Fermi atoms with a Feshbach resonance. *Phys. Rev. A*, 67:063612, 2003.

[OG05a] Y. Ohashi and A. Griffin. Collective modes and the effect of single-particle excitations in the BCS-BEC crossover region of a trapped Fermi superfluid. *e-print cond-mat*, 0503641, 2005.

[OG05b] Y. Ohashi and A. Griffin. Single-particle excitations in a trapped gas of Fermi atoms in the BCS-BEC crossover region. *Phys. Rev. A*, 72:013601, 2005.

[Oha05] Y. Ohashi. BCS-BEC Crossover in a Gas of Fermi Atoms with a p-Wave Feshbach Resonance. *Phys. Rev. Let.*, 94:050403, 2005.

[Par] R. D. Parks. Superconductivity.

[Ped96] M. H. Pedersen. *Crossover Problem in the Attractive Hubbard Model*. PhD thesis, Universität Zürich, 1996.

[PPS04] P. Pieri, L. Pisani, and G. C. Strinati. BCS-BEC crossover at finite temperature in the broken-symmetry phase. *Phys. Rev. B*, 70:094508, 2004.

[PS02] C J. Pethick and H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2002.

[PS03] L. Pitaevskii and S. Stringari. *Bose-Einstein Condensation*. Oxford Science Publications, 2003.

[RB03] Robert Roth and Keith Burnett. Quantum phases of atomic boson-fermion mixtures in optical lattices. *e-print cond-mat*, 0310114, 2003.

[RGJ04] C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin. Observation of Resonance Condensation of Fermionic Atom Pairs. *Phys. Rev. Let.*, 92:040403, 2004.

[RMBS03] M. Rigol, A. Muramatsu, G. G. Batrouni, and R. T. Scalettar. Local quantum criticality in confined fermions on optical lattices. *Phys. Rev. Let.*, 91:130403, 2003.

[RRMI98] G. Roati, F. Riboli, G. Modugno, and M. Inguscio, 1998.

[SSP98] J. M. Singer, T. Schneider, and M. H. Pedersen. On the phase diagram of the attractive Hubbard model: Crossover and quantum critical phenomena. *Eur. Phys. J. B.*, 2:17, 1998.

[Thi99] J. M. Thijssen. *Computational Physics*. Cambridge University Press, 1999.

[TSTZ05] Simon Trebst, Ulrich Schollwöck, Matthias Troyer, and Peter Zoller. d-wave resonating valence bond states of fermionic atoms in optical lattices. *e-print cond-mat*, 0506809, 2005.

[VG02] L. Viverit and S. Giorgini. Ground-state properties of a dilute Bose-Fermi mixture. *e-print cond-mat*, 0207260, 2002.

[VJC01] V. Venturi, M. J. Jamieson, and R. Cote. Scattering lengths for collisions between sodium and potassium atoms. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 34:4339, 2001.

[vO04] D. van Oosten. *Quantum gases in optical lattices: the atomic Mott insulator*. PhD thesis, Universiteit Utrecht, 2004.

[WATB04] S. Wessel, F. Alet, M. Troyer, and G. G. Batrouni. Quantum Monte Carlo simulations of confined bosonic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. A*, 70:053615, 2004.

[Wol] Mathematica 5.2 Documentation. http://documents.wolfram.com/mathematica/book/.

[ZvKB$^+$04] J. Zhang, E. G. M. van Kempen, T. Bourdel, L. Khaykovich, J. Cubizolles, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans, and C. Salomon. P-wave Feshbach resonances of ultra-cold ^{6}Li. *Phys. Rev. A*, 70:030702, 2004.

[ZvKB+05] J. Zhang, E. G. M. van Kempen, T. Bourdel, L. Khaykovich, F. Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans, and C. Salomon. Resonant scattering properties close to a p-wave Feshbach resonance. *Phys. Rev. A*, 71:062710, 2005.