

Untersuchung der Lebensdauer des Grundzustands in getriebenen Wannier–Stark–Systemen

Diplomarbeit von

Michael Hankel

Durchgeführt am
Fachbereich Physik
der Universität Kaiserslautern

Unter Anleitung von Herrn
Prof. Dr. H. J. Korsch

Kaiserslautern, April 2000

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	5
1 Zeitunabhängige Stark-Systeme	9
1.1 Blochteilchen in einem homogenen elektrischen Feld	11
1.1.1 Blochzustände und Wannierzustände	11
1.1.2 Einfluß eines Gleichfelds	13
1.1.3 Der Floquet-Bloch-Operator	16
1.2 Streutheorie für zeitunabhängige Stark-Systeme	19
1.2.1 Definition der S-Matrix	19
1.2.2 Definition der S-Matrix mit Floquet-Bloch-Zuständen	21
1.2.3 Asymptotik der Floquet-Bloch-Zustände	22
1.2.4 Berechnung der Resonanzenergien	24
1.2.5 Numerisches Beispiel	25
2 Zeitabhängige Stark-Systeme	29
2.1 Eichung des Hamiltonoperators	29
2.1.1 Transformation der klassischen Hamiltonfunktion	29
2.1.2 Transformation des quantenmechanischen Hamiltonoperators	31
2.1.3 Äquivalenz der Spektren der Floquet-Operatoren	35
2.2 Blochteilchen in einem elektrischen Wechselfeld	36
2.2.1 Der Floquet-Bloch-Operator	36
2.2.2 Bewegungsgleichung für den Quasiimpuls	39
2.3 Streutheorie für zeitabhängige Stark-Systeme	40
2.3.1 Definition der S-Matrix	41
2.3.2 Definition der S-Matrix mit Floquet-Bloch-Zuständen	43
2.3.3 Asymptotik der Floquet-Bloch-Zustände	44
2.3.4 Berechnung der Resonanzenergien	45

3	Numerische Anwendungen	47
3.1	Struktur des Quasienergiespektrums	47
3.1.1	Theoretische Betrachtung	47
3.1.2	Numerische Untersuchung	49
3.2	Frequenzabhängigkeit der Quasienergie	56
3.2.1	Verhalten der Bandbreiten $\Delta E_0(\omega)$ und $\Delta \Gamma_0(\omega)$	58
3.2.2	Die mittlere Resonanzbreite des Grundzustands $\bar{\Gamma}_0(\omega)$	61
3.3	Vergleich mit experimentellen Daten	68
4	Zusammenfassung	73
A	Numerik	77
A.1	MATLAB-Programme	77
A.1.1	Zeitunabhängige Stark-Systeme	77
A.1.2	Berechnung der Dispersionsrelation $\mathcal{E}_0(\kappa)$	78
A.1.3	Frequenzabhängigkeit der Quasienergie	79

Einleitung

Elektronen in einem kristallinen Festkörper oder, allgemeiner formuliert, Teilchen in einem räumlich periodischen Potential bilden ein System, das schon seit den Anfängen der Quantenmechanik von fundamentalem Interesse ist. Ein wichtiges physikalisches Problem ist dabei die Berechnung der quantenmechanischen Zustände solcher Teilchen, die zusätzlich einem homogenen elektrischen Feld ausgesetzt sind [1]. Die exakte Lösung dieses Problems ist jedoch selbst für eindimensionale Systeme nicht möglich, da der Versuch einer analytischen Berechnung auf unüberwindliche mathematische Probleme stößt. Diese versuchte Wannier 1960 zu umgehen, indem er die nach ihm benannten Wannierzustände einführte [2]. Mit seiner Veröffentlichung stieß er eine jahrzehntelange Diskussion an, über die man sich in [3] und [4] einen Überblick verschaffen kann. Vor allem die Begriffe *Blochoszillationen*, *Zener-Tunneln* [5] und *Wannier-Stark-Quantisierung* standen im Mittelpunkt einiger Kontroversen [6]–[9]. Ein physikalisch wichtiges Ergebnis der Diskussion ist die Erkenntnis, daß es sich bei den Eigenzuständen des betrachteten Systems um Resonanzen, d.h. metastabile Zustände, handelt, die sich auf eine ganz bestimmte Art und Weise anordnen lassen. Jede Resonanzenergie ist nämlich Teil einer Folge von äquidistanten Energieeigenwerten, den sogenannten *Wannier-Stark-Leitern* [4, 10]. Die Wannier-Stark-Quantisierung wurde zuvor lange Zeit in Frage gestellt, denn Zak zeigte [6], daß der Hamiltonoperator des Systems ein kontinuierliches Spektrum besitzt und widersprach damit der Aussage, das System habe diskrete Energieeigenwerte. Tatsächlich ist das Spektrum, wenn man nur die reelle Achse betrachtet, kontinuierlich. Die Diskretisierung ergibt sich erst, wenn man zur Betrachtung der komplexen Ebene übergeht.

Den ersten *experimentellen* Hinweis auf die Existenz von Wannier-Stark-Leitern fand man in Versuchen zur optischen Absorption in einem Festkörperkristall [11]. In jüngster Zeit wurde das Interesse an diesem Gebiet der Physik durch Experimente mit Halbleiter-Übergittern [12]–[19] und optischen Gittern [20]–[23] erneut geweckt, denn man findet hier weitere Realisierungen des untersuchten Hamiltonoperators. Insbesondere erweisen sich neutrale Atome in stehenden Laserwellen als geeignete Studienobjekte. Die Untersuchungen mit Hilfe dieser Experimente haben den Vorteil, daß sie nicht wie Versuche mit Elektronen in Festkörpern durch spezifische Probleme wie Gitterfehler, Verunreinigungen, Phonon-Elektron-Wechselwirkung, Elektron-Elektron-Wechselwirkung, etc. gestört werden. Genauer gesagt, viele theoretische Aussagen über das System lassen sich erst durch das Fehlen der festkörpereigenen Störeinflüsse experimentell überprüfen. Andererseits lösen die neuen Ergebnisse der Experimentalphysik eine Weiterentwicklung der zugehörigen Theorie aus.

Den Ausgangspunkt der Untersuchungen zu dieser Thematik in unserer Arbeitsgruppe bildete die Entwicklung einer effizienten Methode zur Berechnung von Wannierzuständen [24, 25]. Anschließend wurden verschiedene Aspekte des Wannier–Stark–Systems betrachtet [26]–[37]¹, u.a. die Auswirkungen eines zusätzlichen zeitperiodischen äußeren Feldes, wie es beispielsweise im Experiment [21] auftaucht². Die vorliegende Arbeit soll in diesem Zusammenhang klären, wie die Lebensdauer der Wannier–Stark–Resonanzen durch den periodischen Antrieb beeinflusst wird. Dabei dienen die in [41] entwickelten theoretischen Grundlagen als Ausgangspunkt.

Zu dieser Arbeit

In dieser Arbeit wird untersucht, wie ein zeitlich periodisches elektrisches Feld das System eines Teilchens in einem Potential, das aus einem räumlich periodischen Anteil und einem homogenen elektrischen Feld besteht, beeinflusst. Im speziellen werden dazu die Auswirkungen des elektrischen Wechselfeldes auf die Lebensdauer der stabilsten Wannier–Stark–Leiter betrachtet. Dabei wird folgende Vorgehensweise gewählt:

- Im ersten Kapitel werden zeitunabhängige Stark–Systeme behandelt. Zunächst werden einige grundlegende Eigenschaften eines Blochteilchens in einem elektrischen Gleichfeld erörtert. Dabei spielt die Erläuterung der Begriffe *Blochzustand*, *Wannierzustand*, *Blochzeit* und *Floquet–Bloch–Operator* eine zentrale Rolle. Der zweite Teil des Kapitels ist der Streutheorie gewidmet. Ausgangspunkt ist die allgemeine Definition der S–Matrix für zeitunabhängige Stark–Systeme. Mit Hilfe der im ersten Teil des Kapitels eingeführten Floquet–Bloch–Zustände wird anschließend eine alternative Definition formuliert. Darauf aufbauend ergibt sich ein effizienter Algorithmus zur numerischen Berechnung der Pole der S–Matrix und damit der Energieeigenwerte des Systems. Schließlich wird die Güte des Algorithmus an einem numerischen Beispiel demonstriert.
- Im zweiten Kapitel werden die Ergebnisse des ersten Kapitels auf zeitabhängige Stark–Systeme ausgedehnt. Dazu wird zunächst der Hamiltonoperator in eine Form gebracht, die es ermöglicht, daß bei den nachfolgenden Untersuchungen nur Systeme mit zeitunabhängigem äußerem Feld betrachtet werden müssen. Die zeitlich periodische Komponente des äußeren Feldes wird durch eine geeignete Transformation der potentiellen Energie zugeordnet. Anschließend wird untersucht, wie sich die Eigenschaften des Floquet–Bloch–Operators im Vergleich zum zeitunabhängigen Fall ändern. Im letzten Teil des Kapitels wird die Streutheorie für zeitabhängige Systeme betrachtet. Dabei wird analog zum ersten Kapitel vorgegangen.

¹Im Zusammenhang mit dem Phänomen des resonanten Tunnelns von Wannier–Stark–Zuständen, das in [37] behandelt wird, sei auf [38] hingewiesen. Dort findet man eine Übersicht zum Thema Tunnelprozesse in getriebenen Quantensystemen.

²Solche Systeme sind klassisch chaotisch und dienen als Studienobjekte zur Klärung grundlegender Fragen des Quantenchaos [39, 40].

- Die Ergebnisse der beiden vorhergehenden Kapitel werden im dritten Kapitel für numerische Anwendungen verwendet. Der erste Teil widmet sich der Analyse der Struktur des Quasienergiespektrums, d.h. die Abhängigkeit der Quasienergien vom Quasiimpuls wird untersucht. Dabei beschränkt sich das Interesse weitgehend auf die beiden stabilsten Zustände. Anschließend wird die Quasienergie als Funktion der Frequenz des zeitlich periodischen elektrischen Feldes betrachtet. Vor allem der Imaginärteil zeigt ein interessantes Verhalten. Betrachtet man die Resonanzbreite des Grundzustands in Abhängigkeit von der Antriebsfrequenz, so besitzt der zugehörige Graph eine charakteristische Struktur mit äquidistanten Peaks gleicher Breite. Diese kommen durch induzierte Übergänge in angeregte Zustände zustande und können mit Hilfe Fermis Goldener Regel erklärt werden. Zum Abschluß wird die Anwendbarkeit des hier verwendeten Formalismus überprüft, indem numerische Berechnungen mit experimentellen Daten verglichen werden. Es stellt sich heraus, daß die experimentellen Ergebnisse sehr gut wiedergegeben werden.

Kapitel 1

Zeitunabhängige Stark–Systeme

In diesem Kapitel werden die Zustände eines quantenmechanischen Teilchens in einem räumlich periodischen Potential, dem zusätzlich ein äußeres Stark–Feld überlagert ist, untersucht. Verwendet man skalierte Einheiten, so wird ein solches System durch den Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x) + Fx \quad (1.1)$$

mit

$$V(x + a) = V(x) \quad (1.2)$$

beschrieben.

Die angesprochene Skalierung betrifft folgende Größen: Die Masse wird gleich eins gesetzt und die Längenskala wird meist so gewählt, daß die Periode des Potentials $a = 2\pi$ beträgt. Außerdem wird die Energieeinheit so festgelegt, daß die Amplitude des Potentials gleich eins ist. Die zugehörigen Umrechnungsformeln und ein Beispiel zur Umrechnung eines Hamiltonoperators von SI–Einheiten in skalierte Einheiten findet man in Kapitel 3.3.

Bei den Eigenzuständen des Systems (1.1) handelt es sich um die sogenannten Wannier–Stark–Resonanzen. Jeder zugehörigen Eigenenergie läßt sich eine Wannier–Stark–Leiter zuordnen [10, 4], d.h. wenn E eine Eigenenergie des Systems $H\Psi = E\Psi$ ist, so sind auch die äquidistanten Energien $E_n = E + \Delta E n$, mit $n \in \mathbb{Z}$ und $\Delta E = aF$, Eigenenergien des Systems. Abbildung 1.1 zeigt eine schematische Darstellung der Wannier–Stark–Leiter für den speziellen Hamiltonoperator $H = p^2/2 + \cos x + Fx$ mit $F > 0$.

In der weiteren Diskussion kann das Potential (1.2) entweder zeitunabhängig oder zeitlich periodisch, das äußere Feld F stets ein reines Gleichfeld¹ sein. In diesem Kapitel soll zunächst der Fall eines zeitunabhängigen Potentials mit zusätzlichem Gleichfeld behandelt werden. Der Fall eines kombinierten Gleich– und Wechselfeldes läßt sich äquivalent

¹Der Begriff *Gleichfeld* wird in dieser Arbeit als Bezeichnung für ein homogenes Feld $F = \text{const.}$ verwendet.

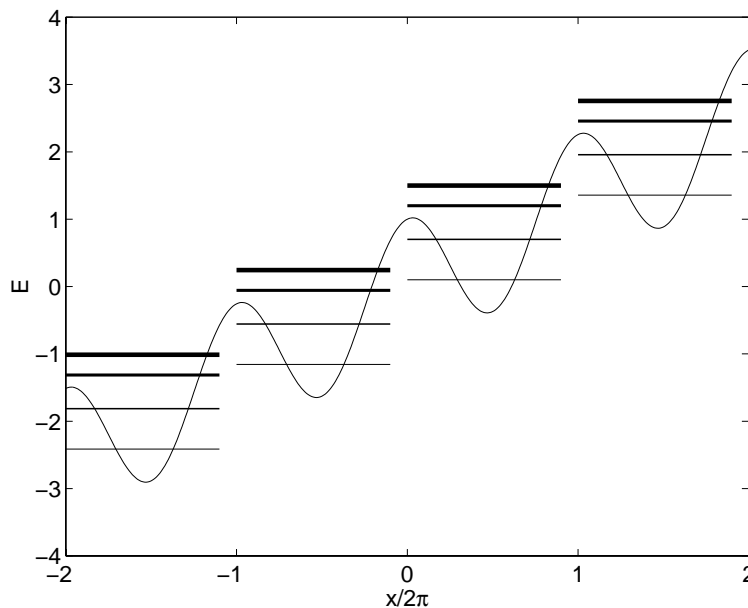


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung einer Wannier-Stark-Leiter für vier Energieniveaus des Systems $H = p^2/2 + \cos x + Fx$ mit $F > 0$.

durch einen Hamiltonoperator mit zeitperiodischem Potential und reinem Gleichfeld darstellen. Dies ist eine wichtige Tatsache, auf die in Kapitel 2.1 näher eingegangen wird. Dort werden die notwendigen Umeichungen ausführlich beschrieben.

Will man die Eigenfunktionen und die Resonanzenergien des Systems berechnen, so spaltet man meist die potentielle Energie in zwei Teile auf, nämlich das Potential $V(x)$ und das äußere Feld Fx . Einer der beiden Teile der potentiellen Energie bildet dann zusammen mit der kinetischen Energie $p^2/2$ den „ungestörten“ Hamiltonoperator, während der andere Teil als „Störung“ aufgefaßt wird². Es ergeben sich also zwei Möglichkeiten, das System zu betrachten:

- Das äußere Feld Fx wird als Störung des Hamiltonoperators $H_0 = p^2/2 + V(x)$ mit $V(x+a) = V(x)$ angesehen.
- Das Potential $V(x)$ mit $V(x+a) = V(x)$ stört den freien Hamiltonoperator $H_1 = p^2/2 + Fx$.

Zunächst soll folgender Standpunkt eingenommen werden, den man auch als die klassische Untersuchungsmethode bezeichnen kann [1, 2, 42]: Man nimmt das System

$$H_0 = \frac{p^2}{2} + V(x) \quad \text{mit} \quad V(x+a) = V(x), \quad (1.3)$$

²Der Begriff *Störung* ist hier **nicht** im Sinne von *Störungstheorie* zu verstehen. Mit ihm soll vielmehr zum Ausdruck gebracht werden, daß man zunächst ein Ausgangssystem betrachtet, das anschließend durch Hinzunahme eines zusätzlichen Potentialterms „gestört“ wird.

das ein sogenanntes Blochteilchen – also ein Teilchen in einem periodischen Potential – beschreibt, als Ausgangspunkt und untersucht, was sich durch die Hinzunahme eines äußeren Feldes ändert. Genauer gesagt wird als Ausgangszustand ein Blochzustand gewählt und dessen Zeitentwicklung im System (1.1) betrachtet. Diesem Ansatz ist der erste Teil dieses Kapitels gewidmet. Dort wird außerdem gezeigt, daß das System eine intrinsische Zeitskala besitzt, die durch die sogenannte Blochzeit gegeben ist. Weiterhin wird das Verhalten des Quasiimpulses sowie der sogenannte Floquet–Bloch–Operator untersucht.

Die eben beschriebene Betrachtungsweise des Systems macht von Näherungen keinen Gebrauch und liefert somit allgemein gültige Aussagen über das Verhalten eines Blochteilchens in einem äußeren Feld liefert. Will man jedoch die spektralen Eigenschaften des Systems (1.1) untersuchen, so ist der bisherige Ansatz ungeeignet. Der Hauptgrund hierfür liegt darin, daß die Störung singular ist und das Spektrum von (1.1) für jedes $F \neq 0$ kontinuierlich ist [43]. Für $F \rightarrow 0$ gehen das Spektrum und die Eigenfunktionen von (1.1) nicht stetig in das Spektrum und die Eigenfunktionen von (1.3) über. Verläßt man dagegen den bisherigen Standpunkt und betrachtet den Hamiltonoperator

$$H_1 = \frac{p^2}{2} + Fx \quad (1.4)$$

als ungestörtes Ausgangssystem, das durch das Potential $V(x)$ gestört wird, so lassen sich die spektralen Eigenschaften des Systems analysieren. Hierzu benötigt man die Streutheorie, die in Kapitel 1.2 zunächst für zeitunabhängige Stark-Systeme untersucht wird.

1.1 Blochteilchen in einem homogenen elektrischen Feld

In diesem Abschnitt soll zunächst das Verhalten quantenmechanischer Teilchen in einem räumlich periodischen Potential betrachtet werden. Zur Beschreibung dieses Systems dienen Bloch- und Wannierzustände, also die Eigenzustände des Hamiltonoperators (1.1) im feldfreien Fall. Daher ist diesen Funktionen der erste Teil der Untersuchung gewidmet. Anschließend werden die Auswirkungen des homogenen elektrischen Felds diskutiert. Dazu wird die Zeitentwicklung der Blochfunktionen untersucht. Dabei wird sich herausstellen, daß die Blochzustände zu ganz bestimmten Zeitpunkten ihren ursprünglichen Quasiimpuls wiedererlangen. Das System besitzt also eine intrinsische Zeitskala, die man als Blochzeit bezeichnet. Abschließend wird gezeigt, wie sich das System mit Hilfe von Floquet–Bloch–Zuständen beschreiben läßt. Diese Art der Darstellung wird im Anschluß an diesen Abschnitt für die Streutheorie zeitunabhängiger Stark-Systeme benötigt.

1.1.1 Blochzustände und Wannierzustände

Zunächst sollen die Eigenzustände des feldfreien Hamiltonoperators

$$H_0 = \frac{p^2}{2} + V(x) \quad \text{mit} \quad V(x+a) = V(x) \quad (1.5)$$

betrachtet werden. Diese sogenannten Blochzustände lösen die Eigenwertgleichung

$$H_0 \phi_{l,k}(x) = \epsilon_l(k) \phi_{l,k}(x) \quad (1.6)$$

und lassen sich außerdem wie folgt darstellen:

$$\phi_{l,k}(x) = \exp(ikx) \chi_{l,k}(x) \quad (1.7)$$

mit einem periodischen Ortsanteil

$$\chi_{l,k}(x+a) = \chi_{l,k}(x), \quad (1.8)$$

der die Gleichung

$$H_0^{(k)} \chi_{l,k}(x) = \epsilon_l(k) \chi_{l,k}(x), \quad H_0^{(k)} = \frac{(p + \hbar k)^2}{2} + V(x) \quad (1.9)$$

erfüllt. Entwickelt man den Ortsanteil $\chi_{l,k}(x)$ in einer Basis ebener Wellen $\langle x|n\rangle$

$$\chi_{l,k}(x) = \sum_n c_n^{(l,k)} |n\rangle, \quad \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(inx) \quad (1.10)$$

mit $n \in \mathbb{Z}$, so bilden die Gln. (1.9) und (1.10) den Ausgangspunkt für die numerische Lösung des Eigenwertproblems (1.6) [44, 45]. Die Blochzustände $\phi_{l,k}(x)$ sind periodische Funktionen des Quasiimpulses k und können daher auf die Brillouinzone $-\pi/a < k < \pi/a$ beschränkt werden. Die Eigenschaft der Periodizität ermöglicht es außerdem, sie als Fourierreihe in k zu schreiben:

$$\phi_{l,k}(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \exp(ikn) \psi_{l,n}(x). \quad (1.11)$$

Die Entwicklungskoeffizienten $\psi_{l,n}(x)$ sind die sogenannten Wannierfunktionen oder Wannierzustände, die man aus der inversen Transformation

$$\psi_{l,n}(x) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \exp(-ikn) \phi_{l,k}(x) \quad (1.12)$$

erhält. Im folgenden sei noch auf einige wichtige Eigenschaften der Bloch- und Wannierzustände hingewiesen. Bei beiden handelt es sich um eine Menge orthonormaler Funktionen in beiden Indizes. Während es sich bei den Blochfunktionen $\phi_{l,k}(x)$ um im Ortsraum ausgedehnte Zustände handelt, sind die Wannierfunktionen $\psi_{l,n}(x)$ exponentiell lokalisiert [44, 46], wobei der Hauptanteil innerhalb der n -ten Zelle des Gitters liegt, das durch das periodische Potential $V(x)$ beschrieben wird. Aufgrund der Periodizität des Potentials $V(x+a) = V(x)$ vertauscht der Translationsoperator $T_a = \exp(iap/\hbar)$, der einer Verschiebung um eine Gitterperiode entspricht, mit dem Hamiltonoperator H_0 :

$$[T_a, H_0] = 0. \quad (1.13)$$

Die Blochfunktionen können daher zusätzlich als Eigenfunktionen von T_a gewählt werden. Da der Translationsoperator ein unitärer Operator ist, stellt sich die Eigenwertgleichung folgendermaßen dar:

$$\phi_{l,k}(x+a) = T_a \phi_{l,k}(x) = \exp(iak) \phi_{l,k}(x). \quad (1.14)$$

Ein Vergleich von Gl. (1.14) mit Gl. (1.12) liefert unmittelbar die Relation

$$\psi_{l,n+1}(x) = T_a^{-1} \psi_{l,n}(x) = \psi_{l,n}(x-a) \quad (1.15)$$

zwischen den Wannierfunktionen. Schließlich sei noch darauf hingewiesen, daß die Wannierfunktionen im Gegensatz zu den Blochfunktionen keine Eigenzustände des Hamiltonoperators H_0 sind.

1.1.2 Einfluß eines Gleichfelds

In diesem Abschnitt soll der Fall eines Blochteilchens in einem reinen Gleichfeld betrachtet werden. Für das Potential gilt also wie im vorhergehenden Abschnitt $V(x+a) = V(x)$. Während der freie Hamiltonoperator H_0 (1.5) und der Translationsoperator T_a vertauschen, ist dies für den Hamiltonoperator (1.1), der das äußere Feld berücksichtigt, nicht der Fall. Mit $T_a(Fx) = F(x+a)$ folgt für den Kommutator zwischen T_a und H

$$[T_a, H] = aFT_a. \quad (1.16)$$

Ist Ψ Eigenfunktion von H zum Eigenwert E , so gilt $H(T_a^n \Psi) = [E - aFn](T_a^n \Psi)$. Der Operator T_a ist also ein Leiteroperator für die Eigenzustände des Hamiltonoperators H . Daher entspricht die Vertauschungsrelation (1.16) auch genau der analogen Relation für den Hamiltonoperator des harmonischen Oszillators und die Operatoren a und a^\dagger . Betrachtet man nun die Wirkung von T_a auf den Zeitentwicklungsoperator $U(t,0) = \exp(-iHt/\hbar)$, so ergibt sich aus Gl. (1.16)

$$T_a U(t,0) = e^{-iaFt/\hbar} U(t,0) T_a. \quad (1.17)$$

Für $m \in \mathbb{Z}$ gilt $\exp(-2\pi im) = 1$. Wählt man folglich die Propagationszeit t so, daß

$$\frac{aFt}{\hbar} = 2\pi m, \quad m \in \mathbb{Z} \quad (1.18)$$

gilt, so geht Gl. (1.17) in

$$T_a U(t,0) = U(t,0) T_a \quad (1.19)$$

über, d.h. der Translationsoperator über die Periode des Potentials vertauscht mit dem Zeitentwicklungsoperator. Den ersten Zeitpunkt, zu dem dies geschieht, bezeichnet man als Blochzeit τ_B . Im nächsten Abschnitt wird eine weitere Herleitung der Blochzeit gegeben.

Zunächst soll aber eine alternative Ableitung von (1.17) erfolgen. Ausgehend von der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = H(t)\phi(x, t) \quad (1.20)$$

mit

$$H(t) = \frac{p^2}{2} + V(x) + Fx \quad (1.21)$$

führt man unter Verwendung des Impulsverschiebungsoperators

$$S(t) = \exp\left(-i \frac{Ftx}{\hbar}\right) \quad (1.22)$$

die Transformation in die sogenannte Impulseichung durch (vgl. (2.23)). Die Umeichung der Wellenfunktion $\phi(x, t)$ geschieht mittels

$$\phi(x, t) = S(t)\tilde{\phi}(x, t), \quad (1.23)$$

und man erhält als neue Schrödingergleichung für die Wellenfunktionen $\tilde{\phi}(x, t)$

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\phi}(x, t)}{\partial t} = \tilde{H}(t)\tilde{\phi}(x, t) \quad (1.24)$$

mit

$$\tilde{H}(t) = \frac{(p - Ft)^2}{2} + V(x). \quad (1.25)$$

Der Beitrag des äußeren Feldes zum Potential ist verschwunden, dafür taucht die Feldstärke F nun in der kinetischen Energie des Hamiltonoperators als Impulsverschiebung auf. Der zugehörige Zeitentwicklungsoperator lautet

$$\tilde{U}(t, 0) = \widehat{\exp}\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \tilde{H}(t') dt'\right), \quad (1.26)$$

wobei die Zeitordnung durch das Dachzeichen über der Exponentialfunktion symbolisiert wird. Das verbleibende Potential $V(x)$, und damit auch der gesamte Hamiltonoperator $\tilde{H}(t)$, vertauscht mit T_a . Gleiches gilt folglich für den Zeitentwicklungsoperator $\tilde{U}(t, 0)$. Der Zeitentwicklungsoperator für die ursprünglichen Wellenfunktionen $\phi(x, t)$ ergibt sich aus

$$U(t, 0) = S(t)\tilde{U}(t, 0). \quad (1.27)$$

Er enthält also eine zusätzliche Eichtransformation. $U(t, 0)$ läßt sich demnach als Produkt zweier Operatoren schreiben, wobei der zweite mit dem Translationsoperator T_a vertauscht und keinen Einfluß auf den Quasiimpuls hat, während die gesamte Information über die Translationseigenschaften im ersten Operator $S(t)$ steckt.

Blochzeit

In diesem Abschnitt soll kurz auf eine alternative Überlegung zur Herleitung der Blochzeit eingegangen werden. Wendet man den Operator $S(t) = \exp(-iFtx/\hbar)$ auf die ebene Welle $\langle x|n\rangle = (2\pi)^{-1/2} \exp(inx)$ an, so erhält man

$$S(t)|n\rangle = |n - Ft/\hbar\rangle. \quad (1.28)$$

Damit ist klar, warum $S(t)$ als Impulsverschiebungsoperator bezeichnet wird. Im allgemeinen vertauschen der Impulsverschiebungsoperator $S(t)$ und der Translationsoperator T_a nicht, denn es gilt die Beziehung

$$T_a S(t) = e^{-iaFt/\hbar} S(t) T_a. \quad (1.29)$$

Vertauscht man die Reihenfolge der beiden Operatoren, muß man also einen zusätzlichen zeitabhängigen Phasenfaktor mitberücksichtigen. Ist dieser Phasenfaktor jedoch gleich eins, so vertauschen $S(t)$ und T_a :

$$\exp(-iaFt/\hbar) = 1 \quad \Longrightarrow \quad \frac{aFt}{2\pi\hbar} \in \mathbb{Z} \quad (1.30)$$

Diese Bedingung ist genau dann erfüllt, wenn die Zeit t ein Vielfaches der sogenannten Blochzeit τ_B ,

$$\tau_B = \frac{2\pi\hbar}{aF}, \quad (1.31)$$

ist.

Wendet man den Operator $S(t)$ auf einen Blochzustand mit Quasiimpuls κ an, so besitzt der resultierende Zustand einen verschobenen Quasiimpuls κ' . Für den Ausgangszustand gilt nämlich nach Gl. (1.14) $T_a \phi_\kappa = \exp(ia\kappa) \phi_\kappa$, und mit Hilfe von Gl. (1.29) erhält man $\kappa' = \kappa - Ft/\hbar$. Ist t ein Vielfaches der Blochzeit τ_B , so ist die Verschiebung ein ganzzahliges Vielfaches von $2\pi/a$. Da die Brillouinzone aber auf $-\pi/a \leq \kappa \leq \pi/a$ eingeschränkt ist und der Quasiimpuls folglich *modulo* $2\pi/a$ definiert ist, nimmt er genau zu diesen Zeitpunkten wieder seinen Ausgangswert an.

Zusammenfassend läßt sich folgendes sagen: Der Impulsverschiebungsoperator $S(t)$ beinhaltet alle Translationseigenschaften des Zeitentwicklungsoperators (1.27). Die Translationsinvarianz des feldfreien Hamiltonoperators bewirkt, daß die Dynamik des Gesamtsystems eine intrinsische Zeitskala besitzt, nämlich die sogenannte Blochzeit $\tau_B = 2\pi\hbar/aF$. Der Zeitentwicklungsoperator $U(t,0)$ vertauscht nämlich mit dem Translationsoperator T_a nur zu ganz bestimmten Zeitpunkten t , die ein Vielfaches der Blochzeit τ_B sind, d.h. die Zeitpropagation stellt die Translationsinvarianz des feldfreien Hamiltonoperators, die durch Hinzunahme des Gleichfeldes verloren geht, wieder her.

Bewegungsgleichung für den Quasiimpuls

Das betrachtete System sei weiterhin ein Teilchen in einem periodischen Potential, also $V(x+a) = V(x)$, das einem zusätzlichen homogenen äußeren Feld ausgesetzt ist, d.h.

es gilt die zeitabhängige Schrödingergleichung (1.20). Diese kann, wie oben gezeigt, mit Hilfe des Impulsverschiebungsoperators $S(t)$ so umgekehrt werden, daß die modifizierte Schrödingergleichung (1.24) gilt. Ist die Lösung $\tilde{\phi}(x, t)$ von Gl. (1.24) eine Funktion, die Gl. (1.14) erfüllt, und zum Zeitpunkt $t = 0$ den Blochindex κ_0 besitzt, so besitzt sie zu jedem beliebigen Zeitpunkt t den gleichen Blochindex, denn \tilde{H} und der Translationsoperator T_a vertauschen miteinander. Die Veränderung des Blochindex der Ausgangswellenfunktion $\phi(x, t)$ wird lediglich durch den Impulsverschiebungsoperator $S(t)$ bedingt. Die Bewegungsgleichung für den Blochindex läßt sich direkt aus den Gln. (1.14) und (1.27) ableiten. Sie lautet

$$\hbar\dot{\kappa}(t) = -F \quad (1.32)$$

und wurde bereits von Bloch hergeleitet [1]. Für das hier betrachtete reine Gleichfeld ergibt sich das bekannte Ergebnis $\kappa(t) = \kappa_0 - Ft/\hbar$. Der Blochindex durchläuft alle Werte innerhalb der Brillouinzone mit konstanter Geschwindigkeit und nimmt nach der sogenannten Blochzeit $\tau_B = 2\pi\hbar/aF$ wieder seinen ursprünglichen Wert an.

1.1.3 Der Floquet–Bloch–Operator

Im vorhergehenden Abschnitt wurde gezeigt, daß ein Blochzustand, auf den der Zeitentwicklungsoperator $U(t, 0)$ angewendet wird, zu den Zeitpunkten t , die Vielfache der Blochzeit sind, seinen ursprünglichen Quasiimpuls wiedererlangt. Damit erhält man die Möglichkeit, den Floquet–Bloch–Operator $U(\tau_B) \equiv U(\tau_B, 0)$, also den Zeitentwicklungsoperator über eine Blochperiode, zu definieren. Mit Hilfe dieser Operatoren kann nun die Dynamik des hier betrachteten Hamiltonoperators

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x) + Fx \quad (1.33)$$

mit $V(x+a) = V(x)$ und $F > 0$ beschrieben werden. Der Floquet–Bloch–Operator, seine Eigenzustände und die Beziehung zu den Eigenfunktionen des ursprünglichen Hamiltonoperators sollen nun untersucht werden.

Floquet–Bloch–Operator für zeitunabhängige Potentiale

Nach Gl. (1.27) gilt für den Floquet–Bloch–Operator

$$U(\tau_B, 0) = \exp\left(-i\frac{2\pi x}{a}\right) \tilde{U}(\tau_B, 0). \quad (1.34)$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen sind die Quasienergiezustände eines Blochelektrons in einem konstanten Feld [47]. Diese können so konstruiert werden, daß sie außerdem Gl. (1.14) erfüllen. Der Operator $U^{(\kappa)}(\tau_B)$ sei die einem bestimmten Blochindex κ zugeordnete Projektion des Floquet–Operators. Man erhält diesen Operator, indem man einen zu (1.9)

analogen Hamiltonoperator $\tilde{H}^{(\kappa)}(t)$ in (1.26) einsetzt. Folglich hängt $U^{(\kappa)}(\tau_B)$ vom Blochindex ab und damit auch die Quasienergie. Für einen Floquet-Zustand ϕ_κ mit Quasiimpuls κ gilt jedoch

$$U(\tau_B, 0)\phi_\kappa(x) = \exp\left(-i\frac{E\tau_B}{\hbar}\right)\phi_\kappa(x), \quad \phi_\kappa(x+a) = \exp(ia\kappa)\phi_\kappa(x). \quad (1.35)$$

Außerdem läßt sich für den Zustand $\phi_\kappa(x, t)$, d.h. die kontinuierliche Zeitentwicklung von ϕ_κ , die Beziehung

$$U(t, 0)\phi_\kappa(x, 0) = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)\phi_\kappa(x, t), \quad \phi_\kappa(x, \tau_B) = \phi_\kappa(x, 0) \equiv \phi_\kappa(x) \quad (1.36)$$

aufstellen. Unter Verwendung von $U(\tau+t, t)U(t, 0) = U(t+\tau, \tau)U(\tau, 0)$ und $U(t+\tau, t) = U(\tau, 0)$ ergibt sich

$$U(\tau_B, 0)\phi_\kappa(x, t) = \exp\left(-i\frac{E\tau_B}{\hbar}\right)\phi_\kappa(x, t). \quad (1.37)$$

Der Floquet-Zustand $\phi_\kappa(x, t)$ gehört also zur gleichen Quasienergie, besitzt jedoch den verschobenen Quasiimpuls $\kappa' = \kappa - Ft/\hbar$. Das bedeutet aber, daß man durch die kontinuierliche Zeitentwicklung eines bestimmten Floquet-Bloch-Zustandes die Zustände mit allen anderen Quasiimpulsen erhält. Im Umkehrschluß folgt für die Numerik, daß die berechneten Eigenwerte im betrachteten Fall nicht von dem zur Konstruktion der Propagationsmatrix verwendeten Quasiimpuls abhängen dürfen. Dies ist ein idealer Test für die Konvergenz der berechneten Quasienergien.

Die Äquivalenz der Operatoren $U^{(\kappa)}(\tau_B)$ kann man mit Hilfe von (1.27) und den obigen Beziehungen wie folgt beschreiben:

$$U^{(\kappa)}(t, 0)U^{(\kappa)}(\tau_B, 0)U^{(\kappa)}(t, 0)^{-1} = U^{(\kappa-Ft/\hbar)}(\tau_B, 0). \quad (1.38)$$

Folglich sind alle Operatoren $U^{(\kappa)}(\tau_B)$ unitär äquivalent und besitzen das gleiche Spektrum.

Ausgehend von einem Zustand $\phi_\kappa(x)$ aus Gl. (1.36) wird die Funktion

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\tau_B} \int_0^{\tau_B} dt' \exp\left(i\frac{Et'}{\hbar}\right) U(t'+t)\phi_\kappa(x, 0) \quad (1.39)$$

so definiert, daß sie eine Lösung der Schrödingergleichung ist. Aus $i\hbar\partial_t U(t) = HU(t)$ folgt nämlich $i\hbar\partial_t \psi(x, t) = H\psi(x, t)$. Durch Einsetzen von (1.36) läßt sich (1.39) in die Beziehung

$$\psi(x, t) = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \frac{1}{\tau_B} \int_0^{\tau_B} dt' \phi_\kappa(x, t') = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right) \psi(x, 0) \quad (1.40)$$

umformen. Der Zustand $\psi(x) \equiv \psi(x, 0)$ ist also eine Eigenfunktion von H zum Eigenwert E . Andererseits läßt sich der Blochzustand $\phi_\kappa(x)$ mit Hilfe einer Lösung von $H\psi(x) = E\psi(x)$ schreiben als

$$\phi_\kappa(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \exp(ia\kappa n)\psi(x - an). \quad (1.41)$$

Die Energien der Zustände $\psi(x - an)$ unterscheiden sich um Vielfache von aF , denn es gilt

$$H(T_a^n \psi) = [E - aFn](T_a^n \psi). \quad (1.42)$$

Nach einer Zeitentwicklung bis zur Blochzeit $\tau_B = 2\pi\hbar/aF$ besitzen dann alle Zustände $\psi(x - an, t)$ den gleichen Phasenfaktor $\exp(-iE\tau_B/\hbar)$, denn die zusätzliche Phase, die wegen der Energiedifferenz zustande kommt, ist ein Vielfaches von 2π . Die Funktion $\phi_\kappa(x)$ erfüllt somit automatisch die Bedingung (1.35) und ist daher ein Floquet–Bloch–Zustand. Vergleicht man Gl. (1.41) mit Gl. (1.11), so erkennt man die völlige Übereinstimmung der obigen Beziehung mit der Verknüpfung zwischen den Bloch– und Wannierzuständen des feldfreien Hamiltonoperators. Auch Gl. (1.39) kann man in eine zu Gl. (1.12) analoge Form bringen. Wie bereits erwähnt, besitzt die Funktion $\phi_\kappa(x, t)$ den Quasiimpuls $\kappa' = \kappa - Ft/\hbar$, d.h. $\phi_\kappa(x, t) = \phi_{\kappa - Ft/\hbar}(x, 0)$. Ersetzt man nun die Integration über die Zeit durch eine Integration über die Brillouinzone, also $dk = -dt 2\pi/a\tau_B$, und paßt die Integrationsgrenzen entsprechend an, so ergibt sich

$$\psi(x) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} d\kappa \phi_\kappa(x). \quad (1.43)$$

Dies entspricht Gl. (1.12) für den Fall $n = 0$. Definiert man entsprechend (1.15) die verschobenen Funktionen $\psi_n(x) = T_a^{-n}\psi(x) = \psi(x - an)$ so erhält man schließlich die zu (1.12) äquivalente Gleichung

$$\psi_n(x) = \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} d\kappa \exp(-ia\kappa n) \phi_\kappa(x). \quad (1.44)$$

Die Quasienergie wird in Gl. (1.35) nur bis auf Vielfache von aF definiert. Abhängig davon welche der Quasienergien $E_n = E + aFn$ ausgewählt wird, ändert sich dann auch der Phasenfaktor $\exp(-iEt/\hbar)$ in Gl. (1.36). Der zusätzliche Faktor ist $\exp(-iaFnt/\hbar)$, bzw. $\exp(-ia\kappa n)$ mit Hilfe des Quasiimpulses ausgedrückt, was genau dem Phasenfaktor in Gl. (1.44) entspricht. Tatsächlich ist jeder Quasienergie der Floquet–Leiter eine Quasienergie der aus (1.16) resultierenden Wannier–Stark–Leiter zugeordnet und die spektralen Eigenschaften von H und dem Floquet–Bloch–Operator $U(\tau_B)$ sind identisch.

Damit hat man für den Fall eines zeitunabhängigen Potentials mit den zeitunabhängigen Eigenfunktionen des Hamiltonoperators H und den zeitabhängigen Eigenfunktionen des Floquet–Bloch–Operators $U(\tau_B)$, den Floquet–Bloch–Zuständen, zwei gleichwertige Sätze von Basisfunktionen zur Verfügung. Die Beziehung zwischen diesen beiden Sätzen entspricht der Beziehung zwischen den Bloch– und den Wannierzuständen, wenn kein Feld vorhanden ist, und ein Wechsel von der einen Art der Beschreibung zur anderen kann leicht vollzogen werden. Im Rahmen der im nächsten Abschnitt behandelten Streutheorie für zeitunabhängige Stark–Systeme wird diese Tatsache noch benötigt werden.

1.2 Streutheorie für zeitunabhängige Stark-Systeme

In diesem Kapitel soll der Hamiltonoperator (1.1)

$$H = \frac{p^2}{2} + Fx + V(x) \quad (1.45)$$

von einem anderen Standpunkt aus betrachtet werden. Der kinetische Term bildet nun zusammen mit dem Feldanteil das ungestörte System, dem $V(x)$ als Störung überlagert wird. Hier sollen sowohl der Feldterm Fx als auch das Potential $V(x)$ zeitunabhängig sein. Die Ausweitung des hier dargestellten Formalismus auf zeitabhängige Systeme wird in Kapitel 2.3 durchgeführt.

Als Ausgangspunkt dient Gl. (1.45), wobei das Potential $V(x)$ beschränkt sein soll³, d.h. $|V(x)| < \text{const.}$, und für das Feld gelte $F > 0$. Asymptotisch ist der Feldterm Fx dominant, man kann daher das Potential $V(x)$ als Störung des ungestörten Systems $H_1 = p^2/2 + Fx$ ansehen. Im kombinierten Potential $Fx + V(x)$ sind keine gebundenen Zustände möglich, denn alle Zustände können in negativer x -Richtung zerfallen, nachdem sie eine endliche Anzahl von Potentialwällen durchtunnelt haben. Es handelt sich also um Resonanzen bzw. metastabile Zustände. Man verwendet daher die Streutheorie, um dieses System zu beschreiben. Mit ihrer Hilfe kann man die S-Matrix $S(E)$ definieren, durch deren Pole die komplexen Resonanzenergien $\mathcal{E} = E - i\Gamma/2$ gegeben sind. Die genaue Vorgehensweise zur Bestimmung dieser Pole wird in den folgenden Abschnitten gezeigt. Zuerst sollen aber die Eigenschaften der S-Matrix untersucht werden.

1.2.1 Definition der S-Matrix

In diesem Abschnitt gilt das Interesse der Streutheorie für zeitunabhängige Stark-Systeme. Zunächst wird die S-Matrix $S(E)$ für Stark-Systeme allgemein definiert. Im nächsten Abschnitt werden dann die oben eingeführten Floquet-Bloch-Zustände benutzt, um zu einer alternativen Darstellung der S-Matrix zu gelangen. Mit ihrer Hilfe läßt sich ein Verfahren zur Bestimmung der Pole der S-Matrix gewinnen.

Die S-Matrix für Stark-Systeme

Die Matrixelemente der S-Matrix $S(E)$ berechnet man, indem man die Asymptoten der Streuzustände $\Psi_S(E)$ mit den Asymptoten der Eigenzustände $\Psi_0(E)$ des „freien“ Hamiltonoperators

$$H_0 = \frac{p^2}{2} + Fx, \quad F > 0, \quad (1.46)$$

³Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden ausschließlich periodische Potentiale $V(x + 2\pi) = V(x)$ betrachtet. Diese spezielle Eigenschaft wird aber für die Definition der S-Matrix nicht benötigt.

also den „ungestreuten“ Zuständen, vergleicht. Die freien Wellenfunktionen $\Psi_0(E)$ lassen sich leicht berechnen, wenn man die Schrödingergleichung

$$H_0\Psi_0(E, x) = E\Psi_0(E, x) \quad (1.47)$$

nicht im Ortsraum sondern im Impulsraum betrachtet. Durch Fourier-Transformation ergibt sich nämlich

$$\mathcal{F}[H_0] = \frac{\hbar^2 k^2}{2} + iF \frac{d}{dk}. \quad (1.48)$$

Die Wellenfunktionen im Impulsraum $\Psi_0(E, x)$ müssen also die Differentialgleichung

$$\frac{d}{dk}\Psi_0(E, x) = i \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2F} - \frac{E}{F} \right] \Psi_0(E, x) \quad (1.49)$$

lösen. Die Eigenzustände lassen sich folglich schreiben als

$$\Psi_0(E, k) = \exp \left[i \left(\frac{\hbar^2 k^3}{6F} - \frac{Ek}{F} \right) \right]. \quad (1.50)$$

Durch Rücktransformation in den Ortsraum erhält man die Zustände $\Psi_0(E, x)$. Dabei handelt es sich um Airy-Funktionen, d.h.

$$\Psi_0(E, x) \sim \text{Ai} \left(bx - \frac{bE}{F} \right) \quad (1.51)$$

mit $b = (2F/\hbar^2)^{1/3}$. Für $x \rightarrow -\infty$ gehen die Airy-Funktionen gegen [48]

$$\text{Ai}(bx) \sim (bx)^{-1/4} \sin \left(\frac{2}{3} (bx)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right). \quad (1.52)$$

Betrachtet man die Streuwellenfunktionen $\Psi_S(E)$, so besitzen sie bis auf eine zusätzliche Phasenverschiebung $\varphi(E)$ zwischen einfallender und auslaufender Welle die gleiche Asymptotik. Für $x \rightarrow -\infty$ kann man also die Beziehung

$$\Psi_S(E, x) \sim (bx)^{-1/4} \sin \left(\frac{2}{3} (bx)^{3/2} + \frac{\pi}{4} + \varphi(E) \right) \quad (1.53)$$

aufstellen. Im hier betrachteten Fall eines Stark-Felds ist es geschickter, den Vergleich des asymptotischen Verhaltens im Impulsraum statt im Ortsraum durchzuführen, also die Wellenfunktionen (1.50) zu betrachten. Das ist problemlos möglich, denn beide Vorgehensweisen sind äquivalent. Für $F > 0$ erfolgt der Zerfall in negativer x -Richtung. Das bedeutet, im Grenzfall $k \rightarrow -\infty$ ist $\Psi_0(E, k)$ der auslaufende Teil und im Grenzfall $k \rightarrow +\infty$ der einlaufende Teil der „freien“ Lösung.

Die Streuzustände $\Psi_S(E)$ lösen die Schrödingergleichung

$$H\Psi_S(E) = E\Psi_S(E) \quad (1.54)$$

mit $H = H_0 + V(x)$. Asymptotisch kann man das Potential $V(x)$ vernachlässigen und die Streuzustände werden Eigenzustände des freien Hamiltonoperators (1.46). Man kann also folgenden Ansatz wählen:

$$\lim_{k \rightarrow \pm\infty} \Psi_S(E, k) = \exp \left[i \left(\frac{\hbar^2 k^3}{6F} - \frac{Ek}{F} + \varphi_{\pm}(E) \right) \right]. \quad (1.55)$$

Für die S-Matrix $S(E)$ und die Phasenverschiebungen φ_{\pm} gilt die Beziehung

$$S(E) = \frac{\exp(i\varphi_-)}{\exp(i\varphi_+)}. \quad (1.56)$$

Unter Berücksichtigung von Gl. (1.55) erhält man damit die Definition

$$S(E) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\Psi_S(E, -k) \Psi_0(E, k)}{\Psi_0(E, -k) \Psi_S(E, k)}, \quad (1.57)$$

die im folgenden benutzt wird.

1.2.2 Definition der S-Matrix mit Floquet-Bloch-Zuständen

Nun soll der Fall eines periodischen Potentials der Periodenlänge 2π betrachtet werden, d.h. $V(x+a) = V(x)$ mit $a = 2\pi$. Der betrachtete Hamiltonoperator liegt also in skalierten Einheiten vor. Aus Kapitel 1.1.3 ist bekannt, daß die Floquet-Bloch-Zustände $\Phi_S(E, \kappa)$ die zeitabhängige Gleichung

$$U(\tau_B)\Phi_S(E, \kappa) = \exp\left(-i\frac{E\tau_B}{\hbar}\right)\Phi_S(E, \kappa) \quad (1.58)$$

lösen. Für die in Kapitel 1.1.2 eingeführte Blochzeit τ_B gilt für ein 2π -periodisches Potential $\tau_B = \hbar/F$. Bei diesem System vertauscht der Zeitentwicklungsoperator $U(\tau_B) = \exp(-iH\tau_B/\hbar)$ mit der Translation $x \rightarrow x + 2\pi$ [47]. Daher besitzen die Floquet-Bloch-Zustände einen wohldefinierten Quasiimpuls κ . Wie aus Kapitel 1.1.3 bekannt, sind die Lösungen von Gl. (1.54) und Gl. (1.58) äquivalent. Aus den Lösungen der zweiten Gleichung lassen sich nämlich die Lösungen der ersten unter Verwendung von

$$\Psi_S(E) = \int_{-1/2}^{1/2} d\kappa \Phi_S(E, \kappa) \quad (1.59)$$

berechnen. Daher kann man in der Definition der S-Matrix (1.57) statt der Asymptoten der Funktion $\Psi_S(E)$ die Asymptoten des Floquet-Bloch-Zustands $\Phi_S(E, \kappa)$ verwenden. Die Funktion $\Phi_S(E, \kappa)$ läßt sich nämlich in der Basis der ebenen Wellen

$$\langle x | n + \kappa \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(n+\kappa)x} \quad (1.60)$$

mit $n \in \mathbb{Z}$ darstellen. Aus (1.59) folgt sofort

$$\langle n + \kappa | \Phi_S(E, \kappa) \rangle = \langle n + \kappa | \Psi_S(E) \rangle. \quad (1.61)$$

Die Funktionen $\Psi_S(E)$ und $\Phi_S(E, \kappa)$ stimmen also an den Stellen $k = n + \kappa$ überein, und man kann die Asymptoten von $\Phi_S(E, \kappa)$ in der Formel (1.57) für die S-Matrix verwenden. Benutzt man die Reihenentwicklung

$$|\Phi_S(E, \kappa)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} C_S(E, n) |n + \kappa\rangle \quad (1.62)$$

und definiert die Koeffizienten $C_0(E, n)$ analog, so ergibt sich

$$S(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{C_S(E, -n) C_0(E, n)}{C_0(E, -n) C_S(E, n)}. \quad (1.63)$$

Nach Konstruktion ist die S-Matrix $S(E)$ aus Gl. (1.63) unabhängig vom Quasiimpuls κ . Damit erhält man die Möglichkeit, die entsprechenden numerischen Rechnungen auf Genauigkeit und Stabilität zu prüfen. D.h. man besitzt für den verwendeten Algorithmus ein Kriterium zur Festlegung der rein numerischen Parameter.

1.2.3 Asymptotik der Floquet-Bloch-Zustände

Sei nun der Quasiimpuls $\kappa = 0$ und damit die ebenen Wellen $\langle x|n\rangle$ mit $n \in \mathbb{Z}$ die Basisfunktionen. Für den Floquet-Bloch-Operator gilt laut Gl. (1.34)

$$U(\tau_B) = \exp(-ix) \tilde{U}(\tau_B) \quad (1.64)$$

mit

$$\tilde{U}(\tau_B) = \widehat{\exp} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^{\tau_B} \tilde{H}(t) dt \right), \quad (1.65)$$

wobei

$$\tilde{H}(t) = \frac{(p - Ft)^2}{2} + V(x) \quad (1.66)$$

ist. Berechnet man nun die Matrixelemente $U(\tau_B)_{m,n} = \langle m|U(\tau_B)|n\rangle$ und $\tilde{U}(\tau_B)_{m,n} = \langle m|\tilde{U}(\tau_B)|n\rangle$, so findet man, daß sie durch die Beziehung

$$U(\tau_B)_{m,n} = \tilde{U}(\tau_B)_{m+1,n} \quad (1.67)$$

miteinander verknüpft sind. Der Impulsverschiebungsoperator $S(\tau_B) = \exp(-ix)$ bewirkt hier also lediglich eine Verschiebung der Indizes, denn für seine Matrixelemente gilt $\langle m|S(\tau_B)|n\rangle = \delta_{m+1,n}$. Somit läßt sich Gl. (1.58) jetzt als Matrix-Eigenwertgleichung schreiben

$$\sum_n \tilde{U}_{m+1,n} C_S(E, n) = \lambda C_S(E, m) \quad (1.68)$$

mit $\lambda = \exp(-iE\tau_B/\hbar) = \exp(-iE/F)$. Für $n \rightarrow \pm\infty$ wird der kinetische Term des Hamiltonoperators dominant und die Matrix \tilde{U} wird näherungsweise diagonal. Unter der Annahme, daß dies für $|n| > N$ ausreichend gut erfüllt ist⁴, kann man also ansetzen

$$\tilde{U}_{m,n} \approx u_m \delta_{m,n} \quad \text{für} \quad |m|, |n| > N \quad (1.69)$$

mit

$$u_m = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar} \int_0^{\tau_B} (\hbar m - Ft')^2 dt'\right) = \exp\left(\frac{i\hbar^2}{6F} [(m-1)^3 - m^3]\right). \quad (1.70)$$

Betrachtet man die ungestreuten Zustände $\Phi_0(E)$, so gelten die Beziehungen (1.69) und (1.70) exakt für jedes beliebige m . Die Lösung der Eigenwertgleichung ergibt erwartungsgemäß

$$C_0(E, m) = \exp\left[i\left(\frac{\hbar^2 m^3}{6F} - \frac{Em}{F}\right)\right], \quad (1.71)$$

d.h. die Fourier-transformierten Airy-Funktionen (1.50) in einer diskretisierten Form. Zur weiteren Untersuchung der Streuzustände $\Phi_S(E)$ sollen die Komponenten des Vektors C_S so angeordnet werden, daß die Indizes von unten nach oben größer werden. Dann läßt sich C_S in drei Teile aufspalten

$$C_S = \begin{pmatrix} C_S^{(+)} \\ C_S^{(0)} \\ C_S^{(-)} \end{pmatrix}, \quad (1.72)$$

also in die beiden Asymptoten $C_S^{(+)}$ und $C_S^{(-)}$ sowie den Wechselwirkungsanteil $C_S^{(0)}$. $C_S^{(+)}$ enthält die Koeffizienten mit $n > N$, $C_S^{(-)}$ diejenigen mit $n < -N - 1$ und $C_S^{(0)}$ alle übrigen mit $-N - 1 \leq n \leq N$. Aus (1.68) und (1.69) ergibt sich sofort eine Rekursionsformel zur Berechnung der Komponenten von $C_S^{(+)}$. Diese lassen sich nämlich unter Verwendung von

$$C_S(m+1) = \frac{\lambda}{u_{m+1}} C_S(m) \quad \text{für} \quad m \geq N \quad (1.73)$$

aus dem Koeffizienten $C_S(N)$ berechnen. Eine analoge Beziehung kann man für die Komponenten von $C_S^{(-)}$ formulieren,

$$C_S(m) = \frac{u_{m+1}}{\lambda} C_S(m+1) \quad \text{für} \quad m < -N - 1, \quad (1.74)$$

⁴Der Einfluß der Nebendiagonalen auf die Eigenwerte und Eigenvektoren muß also vernachlässigbar klein sein. Eine störungstheoretische Schätzung für das Potential $V(x) = \cos(x)$ liefert, daß die Nebendiagonalelemente gemäß $|\tilde{U}_{m+1,m}| \sim |\sin(\hbar^2 m/2F)/\hbar^2 m|$ abnehmen. Mit Hilfe dieser Beziehung kann man abschätzen, wie groß N gewählt werden muß, damit die Näherung (1.69) erlaubt ist.

denn diese hängen rekursiv von $C_S(-N-1)$ ab. Sei W die Matrix, die dadurch entsteht, daß die Matrix \tilde{U} auf die Größe $(2N+1) \times (2N+1)$ gestutzt wird und sei die Matrix B_N definiert als

$$B_N = \begin{pmatrix} \vec{0}^t & 0 \\ W & \vec{0} \end{pmatrix}. \quad (1.75)$$

Damit erhält man für $C_S^{(0)}$ die Gleichung

$$(B_N - \lambda \mathbf{1})C_S^{(0)} = - \begin{pmatrix} u_{N+1}C_S(N+1) \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (1.76)$$

wobei der Vektor $C_S^{(0)}$ und der Vektor auf der rechten Seite die gleiche Länge $2N+2$ haben. Für ein gegebenes λ verknüpft Gl. (1.76) die Asymptoten $C_S^{(+)}$ und $C_S^{(-)}$ miteinander und man kann mit ihrer Hilfe die S-Matrixelemente berechnen [28].

1.2.4 Berechnung der Resonanzenergien

Aus der Definition der S-Matrix für Stark-Systeme (1.57) erhält man mit Hilfe der Floquet-Bloch-Zustände die äquivalente Darstellung

$$S(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{C_S(E, -n) C_0(E, n)}{C_0(E, -n) C_S(E, n)}. \quad (1.77)$$

Die S-Matrix ist eine analytische Funktion der (komplexen) Energie. Die Resonanzenergien des hier betrachteten Systems sind durch diejenigen Pole dieser Funktion gegeben, deren Imaginärteile negativ sind. Betrachtet man die Asymptoten der Streuwellenfunktionen, so müssen diese im Falle einer Resonanz die sogenannten Siegert-Randbedingungen erfüllen. Das bedeutet, daß die Asymptoten der entsprechenden Streuzustände nur auslaufende Wellen sind, es gibt also keinen einlaufenden Beitrag. Der Anteil der freien Lösungen liefert keine Pole für komplexe Energien $\mathcal{E} = E - i\Gamma/2$. Die Pole können also nur vom Anteil der Streuzustände C_S herrühren. Um die Siegert-Bedingung zu erfüllen, muß der Anteil der einlaufenden Welle verschwinden, d.h. $C_S^{(+)} = 0$. Damit ist wegen (1.73) auch $C_S(N+1) = 0$ und Gl. (1.76) nimmt die Form

$$(B_N - \lambda \mathbf{1})C_S^{(0)} = 0 \quad (1.78)$$

an. Die Pole der S-Matrix kann man also aus den Eigenwerten der Matrix B_N gewinnen [37]. Je größer man N wählt, umso besser ist die Bedingung (1.69) erfüllt und die berechneten Eigenwerte konvergieren gegen die Pole von $S(E)$. Um die Güte der Konvergenz zu überprüfen, wird im nächsten Abschnitt eine numerische Simulation durchgeführt.

1.2.5 Numerisches Beispiel

Für den Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2} + \cos(x) + Fx \quad (1.79)$$

wird eine Beispielrechnung mit $F = 0.08$ und $\hbar = 1.0$ durchgeführt. Dazu berechnet man die Matrix $\tilde{U}(\tau_B)$ (1.65) in einer Basis von $M = 2N + 1$ Basiszuständen, hier den ebenen Wellen $\langle x|n\rangle$, mit Hilfe der Formel

$$\tilde{U}(\tau_B) \approx \prod_{j=1}^{j_{\max}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t_j) \Delta t\right), \quad (1.80)$$

wobei $t_j = (j - 1/2)\Delta t$, $j \in \{1, 2, \dots, j_{\max}\}$ und $\Delta t = \tau_B/j_{\max}$ gilt. Dann wird gemäß Gl. (1.75) die Matrix B_N konstruiert und die Eigenwerte λ von B_N berechnet. Die Resonanzenergien \mathcal{E} erhält man schließlich unter Verwendung der Beziehung $\tau_B = \hbar/F$ aus

$$\mathcal{E} = iF \ln \lambda. \quad (1.81)$$

Die zur Berechnung verwendeten MATLAB-Programme findet man in Anhang A.1.1 und A.1.2. In den Tabellen 1.1 und 1.2 sind die drei langlebigsten Resonanzen, d.h. diejenigen mit den kleinsten Imaginärteilen, für verschiedene N und $j_{\max} = 100$ aufgelistet. Man erkennt, daß die numerischen Daten mit zunehmender Matrixgröße $M = 2N + 1$ sehr rasch konvergieren. Es ist daher möglich, die Berechnung der Resonanzen mit sehr kleinen Matrizen durchzuführen. Betrachtet man die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Anzahl der Iterationsschritte j_{\max} , so fällt auch hier die gute Konvergenz auf. Durch Vervierfachung der Anzahl der Iterationsschritte erzielt man lediglich eine relative Änderung der Ergebnisse in der Größenordnung 10^{-4} . Die benutzte Methode zur Berechnung von Stark-Resonanzen muß also als sehr effektiv angesehen werden.

Abbildung 1.2 soll der Illustration der numerischen Daten dienen. Sie ist [37] entnommen und zeigt die Ergebnisse einer analogen Beispielrechnung für dem Hamiltonoperator (1.79). Bei dieser Rechnung wurden genau wie im obigen Beispiel die Parameter $\hbar = 1.0$ und $F = 0.08$ verwendet. Man erkennt die charakteristische Form des Potentials $\cos(x) + Fx$ mit $F > 0$. Alle Eigenzustände des Systems können in negativer x -Richtung zerfallen, nachdem sie eine endliche Anzahl von Potentialbarrieren durchtunnelt haben. Der Grundzustand (dunkelgrau) ist die langlebigste Resonanz. Die zugehörige Resonanzenergie liegt dicht oberhalb des Potentialminimums und der Zustand ist im wesentlichen innerhalb einer Potentialmulde lokalisiert. In diesem Beispiel muß er drei Barrieren durchtunneln, um zu zerfallen. Der erste angeregte Zustand (hellgrau) ist kurzlebiger als der Grundzustand. Das erkennt man in Abbildung 1.2 daran, daß die zugehörige Resonanzenergie fast am oberen Rand der Potentialmulde liegt und der Zustand beim Zerfall nur eine einzige Barriere durchtunneln muß. Der Abbildung entnimmt man ebenfalls, daß der erste angeregte Zustand weniger stark lokalisiert ist. Wie man sieht, ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion auch in der linken benachbarten Potentialmulde deutlich von

N	$\text{Re}(\mathcal{E}_0)$	$\text{Re}(\mathcal{E}_1)$	$\text{Re}(\mathcal{E}_2)$
4	2.15819602e-01	4.87389279e-02	1.79010681e-01
6	2.15819246e-01	4.87147299e-02	1.78542446e-01
8	2.15819246e-01	4.87147121e-02	1.78539757e-01
10	2.15819246e-01	4.87147121e-02	1.78539757e-01
15	2.15819246e-01	4.87147121e-02	1.78539757e-01
15	2.15815339e-01	4.87108057e-02	1.78535851e-01

Tabelle 1.1: *Realteile der drei langlebigsten Resonanzen des Systems (1.79) für verschiedene N und $j_{\max} = 100$. In der letzten Zeile ist das Ergebnis für $j_{\max} = 400$ dargestellt.*

N	$\text{Im}(\mathcal{E}_0)$	$\text{Im}(\mathcal{E}_1)$	$\text{Im}(\mathcal{E}_2)$
4	-6.38753506e-09	-9.57459514e-04	-5.25006844e-02
6	-3.85914254e-09	-9.63642901e-04	-5.13947245e-02
8	-3.85242165e-09	-9.63625194e-04	-5.13997311e-02
10	-3.85241886e-09	-9.63625192e-04	-5.13997244e-02
15	-3.85241217e-09	-9.63625192e-04	-5.13997244e-02
15	-3.85241353e-09	-9.63625177e-04	-5.13997243e-02

Tabelle 1.2: *Imaginärteile der drei langlebigsten Resonanzen des Systems (1.79) für verschiedene N und $j_{\max} = 100$. In der letzten Zeile ist das Ergebnis für $j_{\max} = 400$ dargestellt.*

null verschieden. Für den ersten angeregten Zustand sind außerdem drei Stufen der zugehörigen Wannier–Stark–Leiter eingezeichnet. Man erkennt sehr gut die Äquidistanz der Energieniveaus. Ihr Abstand beträgt in diesem Beispiel $2\pi F \approx 0.50$.

Damit sollen die Betrachtungen für zeitunabhängige Systeme abgeschlossen werden. Im folgenden Kapitel werden die bisherigen Ergebnisse auf zeitabhängige Stark–Systeme ausgeweitet.

Fazit

Im ersten Teil des Kapitels wurde das Verhalten von Teilchen in einem räumlich periodischen Potential unter dem Einfluß eines homogenen elektrischen Felds untersucht. Zur Beschreibung dieses Systems wurden die Bloch– und die Wannierfunktionen eingeführt und ihre Zeitentwicklung im äußeren Gleichfeld betrachtet. Außerdem wurde dargelegt, daß das System eine intrinsische Zeitskala besitzt, die durch die Blochzeit τ_B gegeben ist. Die Zeitentwicklung der Blochzustände zeichnet sich nämlich dadurch aus, daß zu Zeitpunkten, die Vielfache der Blochzeit sind, der Quasiimpuls seinen ursprünglichen Wert

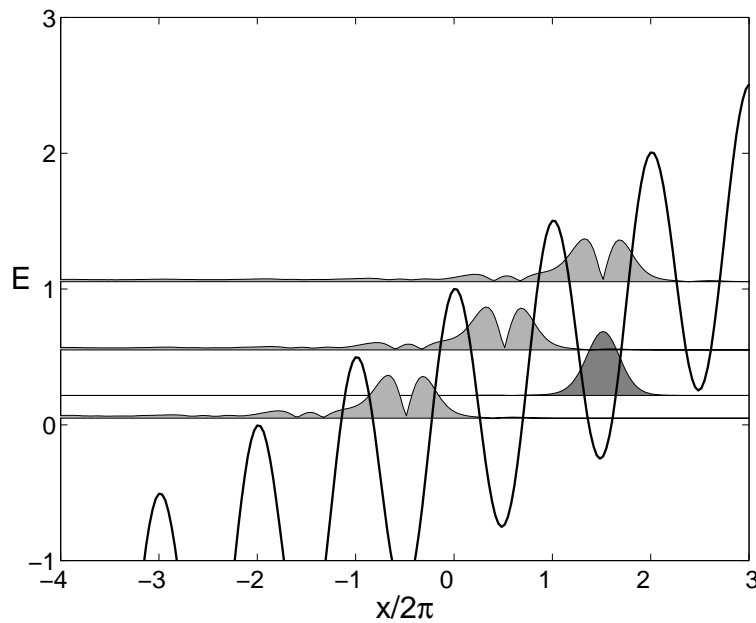


Abbildung 1.2: *Wannier-Stark-Resonanzen im Potential $\cos(x) + Fx$ (aus [37]): Der Realteil der Resonanzenergien und das Betragsquadrat der Wellenfunktionen sind für den stabilsten Zustand (dunkelgrau) und den ersten angeregten Zustand (hellgrau) dargestellt. Außerdem sind für den ersten angeregten Zustand drei Stufen der zugehörigen Wannier-Stark-Leiter eingezeichnet.*

wieder annimmt. Aufgrund dieser Tatsache konnte der Floquet-Bloch-Operator definiert werden und das System mit Hilfe der zugehörigen Eigenzustände beschrieben werden.

Im zweiten Teil des Kapitels wurde die Streutheorie für zeitunabhängige Stark-Systeme dargestellt. Es wurde gezeigt, daß man aus der allgemeinen Definition der S-Matrix mit Hilfe der Floquet-Bloch-Zustände zu einer alternativen Definition gelangen kann. Diese bildet die Grundlage für das anschließend erläuterte Verfahren zur Berechnung der Pole der S-Matrix. Abschließend wurde die numerische Anwendung dieses Verfahrens durch eine Beispielrechnung illustriert.

Kapitel 2

Zeitabhängige Stark–Systeme

Die Untersuchungen des vorangegangenen Kapitels sollen nun für zeitabhängige Stark–Systeme

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x) + F(t)x \quad (2.1)$$

mit $V(x + a) = V(x)$ und $F(t + T) = F(t)$ durchgeführt werden. Dabei wird völlig analog zum zeitunabhängigen Fall vorgegangen. Zunächst wird jedoch eine Umeichung des Hamiltonoperators (2.1) vorgenommen. Durch sie wird der zeitabhängige Anteil des äußeren Felds beseitigt und man kann sich auf die Betrachtung eines äußeren Gleichfelds beschränken. Die Zeitabhängigkeit ist durch die Transformation auf das Potential übergegangen. Mit Hilfe des umgekehrten Hamiltonoperators ist es dann problemlos möglich die im ersten Kapitel gewonnenen Erkenntnisse auf zeitabhängige Systeme auszuweiten.

2.1 Eichung des Hamiltonoperators

Im folgenden wird das Hauptaugenmerk den Eigenschaften eines Blochteilchens gelten, das sich zusätzlich in einem kombinierten Gleich– und Wechselfeld, also einem zeitperiodischen Feld F mit $F(t + T) = F(t)$, befindet. Der Fall des Blochteilchens im kombinierten Feld läßt sich äquivalent beschreiben durch ein Teilchen in einem reinen Gleichfeld, das sich in einem modifizierten zeitabhängigen Potential befindet. Diese Art der Darstellung erweist sich für die weitere Untersuchung des beschriebenen Systems als besonders nützlich und die Form des zugehörigen Hamiltonoperators soll als *Standardform* bezeichnet werden. Die notwendigen Transformationen werden in den folgenden beiden Abschnitten erläutert.

2.1.1 Transformation der klassischen Hamiltonfunktion

Mit Hilfe einer kanonischen Transformation kann man die klassische Hamiltonfunktion in die sogenannte Standardform bringen. Diese soll hier für einen häufig vorkommenden Spezialfall kurz beschrieben werden.

Ein Teilchen der Masse $M = 1$ befindet sich in einem zeitunabhängigen Potential und ist außerdem einem Gleichfeld sowie einem zeitlich periodischen Antrieb ausgesetzt. Die zugehörige Hamiltonfunktion lautet also

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x) + F_0 x + F_\omega x \cos(\omega t), \quad (2.2)$$

wenn man sich auf den Fall beschränkt, daß der periodische Antrieb nur eine Frequenz enthält. Betrachtet man die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen, so ergibt sich

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = p \quad (2.3)$$

und

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V(x)}{\partial x} - F_0 - F_\omega \cos(\omega t). \quad (2.4)$$

In Gl. (2.4) bringt man nun den explizit zeitabhängigen Term $F_\omega \cos(\omega t)$ auf die linke Seite und definiert

$$\dot{p}' = \dot{p} + F_\omega \cos(\omega t). \quad (2.5)$$

Das Wechselfeld soll also in den kinetischen Term der Hamiltonfunktion verlagert werden. Aus Gl. (2.5) folgt durch Integration über die Zeit, wenn man die Integrationskonstante vernachlässigt,

$$p' = p + \frac{F_\omega}{\omega} \sin(\omega t). \quad (2.6)$$

Damit kann man die Bewegungsgleichung (2.3) für die Ortskoordinate umschreiben

$$\dot{x} = p' - \frac{F_\omega}{\omega} \sin(\omega t) \quad (2.7)$$

und wiederum den explizit zeitabhängigen Sinus-Term auf die linke Seite bringen. Definiert man dann

$$\dot{x}' = \dot{x} + \frac{F_\omega}{\omega} \sin(\omega t), \quad (2.8)$$

so erhält man die Gleichung

$$\dot{x}' = p'. \quad (2.9)$$

Integriert man Gl. (2.8) über die Zeit und setzt die Integrationskonstante gleich null, so erhält man

$$x' = x - \frac{F_\omega}{\omega^2} \cos(\omega t). \quad (2.10)$$

Wenn die durch (2.6) und (2.10) beschriebene Transformation kanonisch ist, muß man eine Hamiltonfunktion H' konstruieren können, so daß auch für die transformierten Koordinaten die Hamiltonschen Gleichungen

$$\dot{x}' = \frac{\partial H'}{\partial p'} \quad (2.11)$$

und

$$\dot{p}' = -\frac{\partial H'}{\partial x'} \quad (2.12)$$

gelten. Setzt man Gl. (2.4) in Gl. (2.12) ein, so erhält man

$$-\frac{\partial H'}{\partial x'} = -\frac{\partial V(x' + \epsilon \cos(\omega t))}{\partial x'} - F_0 \quad (2.13)$$

mit $\epsilon = F_0/\omega^2$. Integration über x' liefert

$$H' = h'(p') + V(x' + \epsilon \cos(\omega t)) + F_0 x', \quad (2.14)$$

wobei $h'(p')$ den kinetischen Term der Hamiltonfunktion H' bezeichnet. Für diesen ergibt sich mit Hilfe der Gln. (2.11) und (2.9)

$$\frac{\partial H'}{\partial p'} = \frac{\partial h'}{\partial p'} = p'. \quad (2.15)$$

Nach Integration über p' erhält man schließlich die Standardform der klassischen Hamiltonfunktion

$$H' = \frac{p'^2}{2} + V(x' + \epsilon \cos(\omega t)) + F_0 x'. \quad (2.16)$$

Klassisch läßt sich also das hier betrachtete System mit mindestens zwei äquivalenten Hamiltonfunktionen beschreiben. Allerdings sollte man dabei beachten, daß die Dynamik der beiden Systeme (2.2) und (2.16) nicht übereinstimmt. Im folgenden Abschnitt wird gezeigt, wie die hier durchgeführten klassischen Transformationen für den quantenmechanischen Hamiltonoperator aussehen.

2.1.2 Transformation des quantenmechanischen Hamiltonoperators

Nun soll das Problem eines Teilchens in einem periodischen Potential $V(x) = V(x + 2\pi)$, das zusätzlich einer Kombination aus Gleich- und Wechselfeld ausgesetzt ist, vom Standpunkt der Quantenmechanik aus untersucht werden. Der Hamiltonoperator dieses Systems hat die Form

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x) + F(t)x. \quad (2.17)$$

Da sich das Feld $F(t)$ wie gefordert aus einem Gleichfeld- und einem Wechselfeldanteil zusammensetzen soll, kann es in zwei Beiträge aufgespalten werden:

- einen zeitunabhängigen Term F_0 und
- einen um Null oszillierenden Anteil $F_\omega(t)$ mit der Periode $T_\omega = 2\pi/\omega$:

$$F(t) = F_0 + F_\omega(t). \quad (2.18)$$

Für die weitere Diskussion soll analog zur klassischen Betrachtung in Kapitel 2.1.1 eine ausgezeichnete Form des Hamiltonoperators, die sogenannte Standardform, hergeleitet werden. Dies erfolgt durch eine Abfolge von Eichtransformationen. Im einzelnen handelt es sich dabei um folgende Schritte:

- Übergang zur Impulseichung
- Kramers–Henneberger–Transformation [49]–[52]
- Koordinatenverschiebung.

Die einzelnen Transformationsschritte werden in den folgenden Abschnitten näher erläutert.

Impulseichung

Die Transformation in die Impulseichung ist so gewählt, daß der zeitabhängige Anteil der potentiellen Energie in der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \phi_\omega(x, t)}{\partial t} = H_\omega(x, t) \phi_\omega(x, t) \quad (2.19)$$

mit

$$H_\omega = \frac{p^2}{2} + V(x) + F_0 x + F_\omega(t)x \quad (2.20)$$

verschwindet. Sie entspricht einer elektromagnetischen Eichtransformation der Potentiale des äußeren Feldes. Eichet man nämlich $\Phi = F_\omega x$ und $A_x = 0$ unter Verwendung von

$$\Phi \rightarrow \Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t} \quad (2.21)$$

$$A_x \rightarrow A_x + \frac{\partial \Lambda}{\partial x} \quad (2.22)$$

mit $\Lambda = c G_\omega(t)x$ und $G_\omega(t) = \int_0^t dt' F_\omega(t')$ um, so wird der oszillierende Teil des äußeren Feldes gleich null und für das Vektorpotential gilt nun $A_x = c G_\omega(t)$. Nach dieser Transformation ist das zeitabhängige Feld also nicht mehr Bestandteil des Potentials, sondern taucht nur noch als Impulsverschiebung im Ausdruck für die kinetische Energie auf. Deshalb wird hier die Bezeichnung Impulseichung verwendet. Bei der Umeichung des elektromagnetischen Potentials muß auch die Änderung der Wellenfunktionen berücksichtigt

werden. Aus der Quantenmechanik ist bekannt, daß sich die neue Wellenfunktion $\phi_\omega(x, t)$ folgendermaßen aus der ursprünglichen ergibt:

$$\phi_\omega(x, t) = P_{G_\omega}^\dagger \phi_1(x, t), \quad (2.23)$$

mit

$$P_{G_\omega} = \exp\left(+i \frac{G_\omega(t)x}{\hbar}\right), \quad G_\omega(t) = \int_0^t dt' F_\omega(t'). \quad (2.24)$$

Der Operator P_{G_ω} ist ein Impulsverschiebungsoperator, d.h. es gilt

$$P_{G_\omega} p P_{G_\omega}^\dagger = p - G_\omega. \quad (2.25)$$

Der zur Wellenfunktion $\phi_1(x, t)$ gehörende Hamiltonoperator H_1 ergibt sich auf analoge Weise durch die Transformation

$$H_1 = P_{G_\omega} H_\omega P_{G_\omega}^\dagger = \frac{(p - G_\omega(t))^2}{2} + V(x) + F_0 x. \quad (2.26)$$

Wie man sieht, entspricht die hier durchgeführte quantenmechanische Umzeichnung genau der analogen Transformation der klassischen Hamiltonfunktion, die durch die Gln. (2.5) und (2.6) beschrieben wird.

Kramers–Henneberger–Transformation

Die Kramers–Henneberger–Transformation [49]–[52] besteht aus zwei Teilschritten. Definiert man – analog zum Impulsverschiebungsoperator P_{G_ω} – den Translationsoperator

$$T_{K_\omega} = \exp\left(i \frac{K_\omega(t)p}{\hbar}\right), \quad K_\omega(t) = \int_0^t dt' G_\omega(t'), \quad (2.27)$$

so läßt sich mit Hilfe der Transformation

$$\phi_1(x, t) = T_{K_\omega} \phi_2(x, t) \quad (2.28)$$

der Term, der linear im Impuls ist, eliminieren. Die Benutzung der Identität

$$T_{K_\omega} x T_{K_\omega}^\dagger = x - K_\omega \quad (2.29)$$

führt über

$$H_2 = T_{K_\omega} H_1 T_{K_\omega}^\dagger = \frac{p^2}{2} + \frac{G_\omega^2(t)}{2} + V(x - K_\omega(t)) + F_0(x - K_\omega(t)) \quad (2.30)$$

zur zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \phi_2(x, t)}{\partial t} = H_2 \phi_2(x, t) \quad (2.31)$$

für die Wellenfunktion $\phi_2(x, t)$. Durch eine Reskalierung der Energie in der Form

$$\phi_2(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \left[\frac{G_\omega^2(t')}{2} - F_0 K_\omega(t')\right]\right) \phi_3(x, t) \quad (2.32)$$

erhält man abschließend die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \phi_3(x, t)}{\partial t} = H_{\text{KH}} \phi_3(x, t) \quad (2.33)$$

mit

$$H_{\text{KH}} = \frac{p^2}{2} + V(x - K_\omega(t)) + F_0 x, \quad (2.34)$$

was der Kramers–Henneberger–Eichung entspricht. Die hier durchgeführte Transformation entspricht klassisch der in Gl. (2.10) vorgenommenen Umformung. Im Unterschied zur Klassischen Mechanik muß bei der quantenmechanischen Umeichung jedoch die zusätzliche Energiereskalierung (2.32) durchgeführt werden.

Es zeigt sich also, daß es für ein Teilchen, das sich in einem Potential $V(x)$ befindet, welchem ein zusätzliches äußeres Feld mit Gleich- und Wechselanteil $F_0 x + F_\omega(t)x$ überlagert ist, mehrere äquivalente Beschreibungen gibt. Zum einen läßt sich ein solches System mit dem ursprünglichen Hamiltonoperator H_ω beschreiben, zum anderen mit dem standardisierten Hamiltonoperator H_{KH} .

Unifrequenter Fall

Unter der zusätzlichen Annahme, daß der Feldanteil $F_\omega(t)$ nur eine einzige Frequenz enthält, was z.B. für

$$H_\omega = \frac{p^2}{2} + V(x) + F_0 x + F_\omega x \cos(\omega t) \quad (2.35)$$

gilt, bekommt man für den Kramers–Henneberger–transformierten Hamiltonoperator das Ergebnis

$$H_{\text{KH}} = \frac{p^2}{2} + V(x + \epsilon[\cos(\omega t) - 1]) + F_0 x \quad (2.36)$$

mit $\epsilon = F_\omega/\omega^2$. Das transformierte Potential enthält einen oszillierenden Anteil, der zwischen 0 und -2ϵ oszilliert. Durch die Kombination einer Translation T_ϵ und einer Energieverschiebung $E_{\epsilon F_0} = \exp(i\epsilon F_0 t/\hbar)$

$$\phi_3(x, t) = T_\epsilon E_{\epsilon F_0} \phi_\epsilon(x, t) \quad (2.37)$$

kann diese asymmetrische Oszillation in eine symmetrische überführt werden, d.h. die x -Koordinate wird um einen konstanten Betrag verschoben und die Energie umgeeeicht. Klassisch entspricht dieser Transformation die Wahl der Integrationskonstanten bei der

Integration von Gl. (2.8). Sie wird nämlich in Gl. (2.10) gleich null gesetzt. Somit erhält man die Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial \phi_\epsilon(x, t)}{\partial t} = \left[\frac{p^2}{2} + V(x + \epsilon \cos(\omega t)) + F_0 x \right] \phi_\epsilon(x, t) \quad (2.38)$$

für die Wellenfunktion $\phi_\epsilon(x, t)$. Damit liegt der Hamiltonoperator in der gewünschten Standardform vor, die für die weiteren Untersuchungen benötigt wird. Der Hamiltonoperator in Gl. (2.38) stimmt außerdem, wie erwartet, mit der Standardform der klassischen Hamiltonfunktion (2.16) aus Kapitel 2.1.1 überein.

2.1.3 Äquivalenz der Spektren der Floquet-Operatoren

Im vorhergehenden Abschnitt wurde gezeigt, daß die beiden Systeme

$$H_\omega = \frac{p^2}{2} + V(x) + F_0 x + F_\omega x \cos(\omega t) \quad (2.39)$$

und

$$H_\epsilon = \frac{p^2}{2} + V(x + \epsilon \cos(\omega t)) + F_0 x \quad (2.40)$$

äquivalent sind. In die Transformation zwischen diesen beiden Hamiltonoperatoren gehen zeitabhängige Verschiebungen des Ortes, des Impulses und der Energie ein. Das bedeutet jedoch, daß die Dynamik der beiden Systeme nicht übereinstimmt. Betrachtet man aber zeitlich periodische Systeme, so kann man alle spektralen Eigenschaften dem Floquet-Operator, dem Zeitentwicklungsoperator über eine volle Periode, entnehmen. Dazu betrachtet man das System zunächst einmal zum Zeitpunkt $t = 0$. Dann gilt $G_\omega(0) = K_\omega(0) = 0$ und somit

$$\phi_\omega(x, 0) = T_\epsilon \phi_\epsilon(x, 0). \quad (2.41)$$

Zum Zeitpunkt $t = T$ gelten die Beziehungen $G_\omega(T) = K_\omega(T) = 0$ und $\int_0^T dt K_\omega(t) = \epsilon T$. Damit ergibt sich für die Transformation zwischen den beiden Systemen nach einer Periode die Formel

$$\phi_\omega(x, T) = E_{E_p} T_\epsilon \phi_\epsilon(x, T) \quad (2.42)$$

mit

$$E_p = \frac{1}{2T} \int_0^T dt G_\omega^2(t) \quad (2.43)$$

und der zugehörigen Energieverschiebung

$$E_{E_p} = \exp\left(i \frac{E_p T}{\hbar}\right). \quad (2.44)$$

Benutzt man nun die Definition der Floquet–Operatoren der beiden Systeme, also $\phi_\omega(x, T) = U_\omega(T)\phi_\omega(x, 0)$ und $\phi_\epsilon(x, T) = U_\epsilon(T)\phi_\epsilon(x, 0)$, so läßt sich die folgende Beziehung formulieren:

$$U_\omega(T) = E_{E_p} T_\epsilon U_\epsilon(T) T_\epsilon^\dagger. \quad (2.45)$$

Bis auf eine konstante Energiedifferenz E_p stimmen also die Spektren der beiden Operatoren überein und die zugehörigen Eigenfunktionen sind durch Gl. (2.41) miteinander verknüpft.

Die Äquivalenz der beiden Systeme (2.39) und (2.40) erlaubt es, je nach Problemstellung dasjenige auszuwählen, das zur Untersuchung eines bestimmten Aspektes am geeignetsten ist. Insbesondere kann ein zeitabhängiges äußeres Feld stets so transformiert werden, daß die Zeitabhängigkeit in das Potential verlagert wird. Bei der Betrachtung eines Teilchens in einem periodischen Potential mit zusätzlichem äußerem Stark–Feld kann man sich somit auf den Fall eines äußeren Gleichfelds beschränken, denn alle auftretenden Fälle können auf eine der beiden folgenden Situationen zurückgeführt werden:

- Ein Teilchen befindet sich in einem zeitunabhängigen Potential und zusätzlich in einem äußeren Gleichfeld, also $H = p^2/2 + V(x) + F_0x$. Dieser Fall wurde in Kapitel 1 behandelt.
- Ein Teilchen befindet sich in einem zeitlich periodischen Potential und zusätzlich in einem äußeren Gleichfeld, also $H = p^2/2 + V(x, t) + F_0x$, wobei $V(x, t+T) = V(x, t)$ gilt.

2.2 Blochteilchen in einem elektrischen Wechselfeld

2.2.1 Der Floquet–Bloch–Operator

Der Floquet–Bloch–Operator für Systeme mit zeitunabhängigem Potential wurde bereits in Kapitel 1.1.3 behandelt. Solche Systeme besitzen nur eine intrinsische Zeitskala, nämlich die Blochzeit τ_B . Betrachtet man ein periodisches Potential $V(x) = V(x + a)$ mit $a = 2\pi$, so ist $\tau_B = \hbar/F$. Im Fall von zeitlich periodischen Potentialen besitzt das System wegen der zeitlichen Periodizität des Potentials eine zweite intrinsische Zeitskala, nämlich die Periodendauer T_ω . Will man einen Floquet–Bloch–Operator mit den gleichen Eigenschaften wie beim zeitunabhängigen Potential definieren, so müssen die Blochzeit τ_B und die Periode des Potentials T_ω kommensurabel sein, d.h. es muß eine gemeinsame Periode T existieren, so daß für $p, q \in \mathbb{N}$ gilt $T = pT_\omega = q\tau_B$. Dann gilt nach Gl. (1.27) für den Floquet–Operator $U(T) \equiv U(T, 0)$

$$U(T) = \exp(-iqx)\tilde{U}(T). \quad (2.46)$$

Die Anwendung von Gl. (1.27) ist hier problemlos möglich, obwohl sie bei der Betrachtung zeitunabhängiger Stark–Systeme hergeleitet wurde. An dieser Herleitung (vgl. (1.20)–(1.27)) ändert sich jedoch nichts, wenn man Kramers–Henneberger–transformierte Hamiltonoperatoren, also zeitlich periodische Potentiale, betrachtet. Die Eigenzustände von

$U(T)$ können so gewählt werden, daß es sich dabei um Blochzustände handelt. Während im zeitunabhängigen Fall alle $U^{(\kappa)}(T)$ unitär äquivalent waren, gilt dies im zeitabhängigen Fall nur noch für eine begrenzte Anzahl von Quasiimpulsen. Sei ϕ_κ ein Floquet-Zustand mit Quasiimpuls κ

$$U(T)\phi_\kappa(x) = \exp\left(-i\frac{ET}{\hbar}\right)\phi_\kappa(x), \quad \phi_\kappa(x+2\pi) = \exp(i2\pi\kappa)\phi_\kappa(x) \quad (2.47)$$

und $\phi_\kappa(x, t)$ sei die kontinuierliche Zeitentwicklung von ϕ_κ , also

$$U(t, 0)\phi_\kappa(x, 0) = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)\phi_\kappa(x, t), \quad \phi_\kappa(x, T) = \phi_\kappa(x, 0) \equiv \phi_\kappa(x). \quad (2.48)$$

Berücksichtigt man die zeitliche Periodizität des Potentials, so gilt $U(t+T_\omega, T_\omega) = U(t, 0)$ und damit

$$U(T) = U(T_\omega)^p = \left[\exp(-ixq/p)\tilde{U}(T_\omega)\right]^p. \quad (2.49)$$

Die Zustände $\phi_\kappa(x, rT_\omega)$ mit $r = 0, 1, \dots, p-1$ sind also Floquet-Zustände mit der gleichen Quasienergie, sie besitzen aber unterschiedliche Quasiimpulse $\kappa - rq/p$. Damit kann man für die Operatoren $U^{(\kappa)}(T)$ eine zu Gl. (1.38) analoge Beziehung aufstellen:

$$U^{(\kappa)}(T_\omega)U^{(\kappa)}(T)U^{(\kappa)}(T_\omega)^{-1} = U^{(\kappa-q/p)}(T). \quad (2.50)$$

Bei der Betrachtung zeitabhängiger Potentiale ist somit die Brillouinzone des Floquet-Operators $U(T)$ p -fach entartet und nur die Zustände mit Quasiimpuls $\kappa + r/p$ sind unitär äquivalent. Es ist jedoch nicht ausgeschlossen, daß „zufällig“ weitere Äquivalenzen auftreten können, falls der Hamiltonoperator eine spezielle Symmetrie aufweist. Für das Verhältnis zwischen den Floquet-Bloch-Zuständen und den Floquet-Zuständen $\varphi_\kappa(x)$ des Operators $U(T_\omega)$ ergibt sich analog zu (1.39)

$$\varphi_\kappa(x, t) = \frac{1}{p} \sum_{r=0}^{p-1} \exp\left(i\frac{rET_\omega}{\hbar}\right) U(t+rT_\omega)\phi_\kappa(x, 0) \quad (2.51)$$

mit dem Unterschied, daß hier nur bestimmte diskrete Werte eingehen. Die Funktionen $\varphi_\kappa(x, t)$ sind wegen $i\hbar\partial_t U(t+rT_\omega) = H(t)U(t+rT_\omega)$ Lösungen der Schrödingergleichung und es gilt

$$U(T_\omega)\varphi_\kappa(x, 0) = \exp\left(-i\frac{ET_\omega}{\hbar}\right)\varphi_\kappa(x, 0). \quad (2.52)$$

Aus Gl. (2.49) folgt, daß der Floquet-Operator $U(T_\omega)$ und der Translationsoperator über p Perioden $T_{2\pi}^p$ vertauschen. Die Funktionen $\varphi_\kappa(x)$ können dann als Eigenfunktionen beider Operatoren gewählt werden. Damit erhält man die Beziehung

$$\varphi_\kappa(x+2\pi p) = T_{2\pi}^p\varphi_\kappa(x) = \exp(i2\pi p\kappa)\varphi_\kappa(x). \quad (2.53)$$

Sie ist analog zu Gl. (1.14) für die Blochzustände. Die Funktionen $\varphi_\kappa(x)$ sind also ausgedehnte Zustände. Die Brillouinzone ist jetzt um den Faktor p verkleinert, denn der Blochindex kann nur noch die Werte $-1/2p \leq \kappa \leq 1/2p$ annehmen. Für die Quasienergie der Floquet-Zustände $\varphi_\kappa(x)$ hingegen hat sich wegen $T_\omega = T/p$ die Brillouinzone um den Faktor p vergrößert. Die Quasienergie kann nun die Werte $0 \leq E \leq \hbar\omega = 2\pi Fp/q$ annehmen. Man kann nun p verschiedene Quasienergiezustände von $U(T_\omega)$ konstruieren, wenn man in der Beziehung (2.47) für die Floquet-Bloch-Zustände die verschiedenen Stufen der Quasienergieleiter $E_n = E + 2\pi Fn/q$ mit $n = 0, \dots, p-1$ verwendet. Geht man von einem Zustand $\varphi_\kappa(x)$ aus, so lassen sich die verschobenen Zustände

$$\varphi_{n,\kappa}(x) = T_{2\pi}^{-n} \varphi_\kappa(x) = \varphi_\kappa(x - 2\pi n) \quad (2.54)$$

definieren. Nach Gl. (2.53) sind die Zustände $\varphi_{n+p,\kappa}(x)$ und $\varphi_{n,\kappa}(x)$ bis auf einen Phasenfaktor identisch. Deshalb kann der Index n nur die Werte $n = 0, \dots, p-1$ annehmen. Aus der Leiteroperatoreigenschaft von $T_{2\pi}$ (vgl. Gl. (1.42)) folgt, daß der Zustand $\varphi_{n,\kappa}(x)$ die verschobene Quasienergie $E_n = E + 2\pi Fn$ besitzt. Da die obere Grenze der Quasienergieskala $\hbar\omega = 2\pi Fp/q$ ist, müssen die Quasienergiewerte noch gemäß $E_n \bmod \hbar\omega$ modifiziert werden und man erhält $E_m = E_0 + 2\pi Fm/q$, also die gleichen Werte wie bei der Quasienergieleiter von $U(T)$. Damit ergibt sich, wie schon für ein zeitunabhängiges Potential, auch hier, daß jeder Quasienergie der Quasienergieleiter von $U(T)$ eine entsprechende Quasienergie der Quasienergieleiter von $U(T_\omega)$ zugeordnet werden kann und umgekehrt. Die zugehörigen Eigenzustände $\phi_\kappa(x)$ und $\varphi_{n,\kappa}(x)$ sind durch die Transformationen

$$\phi_{\kappa+r/p}(x) = \sum_{n=0}^{p-1} \exp[i2\pi(\kappa + r/p)n] \varphi_{n,\kappa}(x) \quad (2.55)$$

$$\varphi_{n,\kappa}(x) = \frac{1}{p} \sum_{r=0}^{p-1} \exp[-i2\pi(\kappa + r/p)n] \phi_{\kappa+r/p}(x)$$

miteinander verknüpft. Die erste Beziehung ist analog zu Gl. (1.44). Die Rücktransformation folgt aus Gl. (2.51). Damit hat man sowohl für zeitunabhängige als auch für zeitabhängige Potentiale die Möglichkeit, die Floquet-Bloch-Operatoren (1.34) und (2.46) zu definieren. Ihre Eigenfunktionen bilden eine Basis, die eine äquivalente Beschreibung der Dynamik ermöglicht. Die Beziehung zwischen den beiden äquivalenten Sätzen von Basisfunktionen entspricht derjenigen zwischen Bloch- und Wannierzuständen im feldfreien Fall. Welche Basis zur Beschreibung der Dynamik gewählt wird, ist willkürlich. Ist der Ausgangszustand beispielsweise ein Blochzustand, so ist es geschickt, die Floquet-Bloch-Zustände zur Beschreibung zu verwenden, da so die Zeitentwicklung leicht durch die Floquet-Bloch-Zustände mit entsprechendem Quasiimpuls dargestellt werden kann.

Man sollte jedoch beachten, daß der ursprüngliche Hamiltonoperator $H = p^2/2 + V(x) + Fx$ und der Translationsoperator $T_{2\pi}$ nicht vertauschen und daher bei der Zeitentwicklung eines solchen Zustands der Quasiimpuls verändert wird. Nur zu den Zeitpunkten, die Vielfache der Blochzeit sind, nimmt der Quasiimpuls wieder seinen ursprünglichen

Wert an. Bei einem reinen Gleichfeld ergab sich für das zeitliche Verhalten des Quasiimpulses $\kappa(t) = \kappa_0 - Ft/\hbar$. Im nächsten Abschnitt soll nun untersucht werden, wie sich der Quasiimpuls verhält, wenn das äußere Feld eine allgemeinere Zeitabhängigkeit besitzt.

2.2.2 Bewegungsgleichung für den Quasiimpuls

Wie in Kapitel 1.1.2 gezeigt wurde, lautet die Bewegungsgleichung für den Quasiimpuls im Fall eines zeitunabhängigen äußeren Felds

$$\hbar\dot{\kappa}(t) = -F_0, \quad (2.56)$$

und die Lösung läßt sich sofort angeben:

$$\kappa(t) = \kappa_0 - \frac{F_0 t}{\hbar}. \quad (2.57)$$

Ausgehend vom Wert κ_0 durchläuft der Quasiimpuls die gesamte Brillouinzone und besitzt nach Ablauf der Blochzeit $\tau_B = \hbar/F$ wieder den Anfangswert.

Nun soll der Fall eines zeitabhängigen Feldes $F(t)$ betrachtet werden. Da die Zeitabhängigkeit des äußeren Feldes nicht näher spezifiziert ist, geht man von der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{\partial\phi(x,t)}{\partial t} = H(t)\phi(x,t) \quad (2.58)$$

mit

$$H(t) = \frac{p^2}{2} + V(x) + F(t)x, \quad V(x+2\pi) = V(x) \quad (2.59)$$

aus. Auf sie wendet man die aus Kapitel 2.1.2 bekannte Transformation in die Impulseichung an und erhält die transformierte Schrödingergleichung

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\phi}(x,t)}{\partial t} = \tilde{H}(t)\tilde{\phi}(x,t). \quad (2.60)$$

Die Transformation des Hamiltonoperators ist durch

$$\tilde{H}(t) = P_G H(t) P_G^\dagger = \frac{(p - G(t))^2}{2} + V(x) \quad (2.61)$$

mit

$$P_G = \exp\left(+i\frac{G(t)x}{\hbar}\right), \quad G(t) = \int_0^t dt' F(t') \quad (2.62)$$

gegeben. Für die Wellenfunktion gilt entsprechend

$$\phi(x,t) = P_G^\dagger \tilde{\phi}(x,t). \quad (2.63)$$

Ist $\tilde{\phi}(x, t)$ eine Funktion, die Gl. (1.14) erfüllt, und zum Zeitpunkt $t = 0$ den Blochindex κ_0 besitzt, so behält sie genau diesen Blochindex zu jedem beliebigen Zeitpunkt t bei, denn \tilde{H} und die Translation $T_{2\pi}$ vertauschen miteinander. Die Veränderung des Quasiimpulses der ursprünglichen Wellenfunktion $\phi(x, t)$ wird also durch die Umeichnung (2.63) bedingt. Mit Hilfe der Gln. (1.14) und (2.63) läßt sich direkt die Bewegungsgleichung für den Blochindex

$$\hbar\dot{\kappa}(t) = -F(t) \quad (2.64)$$

ableiten. Sie ist also völlig analog zu Gl. (2.56) für äußere Gleichfelder.

Nun soll der Fall eines gemischten Gleich- und Wechselfelds betrachtet werden, d.h. $F(t) = F_0 + F_\omega \cos(\omega t)$. Die Bewegungsgleichung lautet somit

$$\hbar\dot{\kappa}_\omega = -F_0 - F_\omega \cos(\omega t). \quad (2.65)$$

Nach Kapitel 2.1.2 ist jedoch der Hamiltonoperator

$$H_\omega = \frac{p^2}{2} + \cos(x) + F_0 x + F_\omega \cos(\omega t) \quad (2.66)$$

äquivalent zu seinem Kramers-Henneberger-transformierten Pendant

$$H_\epsilon = \frac{p^2}{2} + \cos(x + \epsilon \cos(\omega t)) + F_0 x, \quad \epsilon = \frac{F_\omega}{\omega^2}. \quad (2.67)$$

Für ihn lautet die entsprechende Bewegungsgleichung

$$\hbar\dot{\kappa}_\epsilon = -F_0, \quad (2.68)$$

ist also identisch mit der Bewegungsgleichung im zeitunabhängigen Fall. Betrachtet man die vollständige Transformation zwischen (2.66) und (2.67) (vgl. Kapitel 2.1.2), so erkennt man, daß wiederum nur die Transformation in die Impulseichung Auswirkungen auf den Quasiimpuls und damit auch auf Gl. (2.64) hat. Die Dynamik der beiden Systeme unterscheidet sich also. Im folgenden hat diese Tatsache jedoch keinen Einfluß, denn es werden nur die Spektren untersucht, die, wie in Kapitel 2.1.3 gezeigt, übereinstimmen.

2.3 Streutheorie für zeitabhängige Stark-Systeme

In diesem Abschnitt soll die Streutheorie für Stark-Systeme auf Systeme mit einem zeitlich periodischen Potential $V(x, t + T_\omega) = V(x, t)$ ausgedehnt werden. Dabei kann problemlos die gleiche Vorgehensweise wie im zeitunabhängigen Fall gewählt werden, denn zur Formulierung der Streutheorie für zeitunabhängige Potentiale werden bereits die zeitabhängigen Floquet-Bloch-Zustände benutzt. Um den entsprechenden Formalismus anwenden zu können, muß jedoch die Bedingung erfüllt sein, daß die Periodendauer T_ω des Potentials und die Blochzeit τ_B kommensurabel sind, d.h. daß es zwei natürliche Zahlen p und q

gibt, so daß $T = pT_\omega = q\tau_B$ gilt. Dann erhält man analog zu Kapitel 1.2.2 die S-Matrix, indem man die Asymptoten der Eigenzustände $\Phi_{S,\kappa}$ des Floquet-Operators $U(T_\omega)$

$$U(T_\omega)\Phi_{S,\kappa} = \exp\left(-i\frac{ET_\omega}{\hbar}\right)\Phi_{S,\kappa} \quad (2.69)$$

mit den Asymptoten der Eigenzustände $\Phi_{0,\kappa}$ des zugehörigen freien Zeitentwicklungsoperators $U_0(T_\omega)$

$$U_0(T_\omega)\Phi_{0,\kappa} = \exp\left(-i\frac{ET_\omega}{\hbar}\right)\Phi_{0,\kappa} \quad (2.70)$$

vergleicht. Dabei gilt $U_0(T_\omega) = \exp(-iH_0T_\omega/\hbar)$ mit $H_0 = p^2/2 + Fx$. Einige Eigenschaften dieser freien Lösungen werden für die Streutheorie noch von Bedeutung sein und sollen deshalb näher betrachtet werden.

2.3.1 Definition der S-Matrix

Sowohl der Floquet-Bloch-Operator $U(T_\omega)$ als auch der freie Zeitentwicklungsoperator $U_0(T_\omega)$ vertauschen mit der Translation $T_{2\pi}^p$. Darum kann man auch den freien Lösungen einen Quasiimpuls κ mit $-1/2p < \kappa < 1/2p$ zuweisen. Für den freien Zeitentwicklungsoperator läßt sich noch eine weitere Symmetrieeigenschaft finden. Dazu geht man von

$$U_0(T_\omega) = \exp(-ixq/p)\tilde{U}_0(T_\omega) \quad (2.71)$$

aus. Nimmt man ebene Wellen als Basisfunktionen, so ist $\tilde{U}_0(T_\omega)$ diagonal, d.h. $\langle k' | \tilde{U}_0(T_\omega) | k \rangle = \delta_{k,k'} u(k)$ mit

$$u(k) = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar} \int_0^{T_\omega} (\hbar k - Ft)^2 dt\right) = \exp\left(i\frac{\hbar^2}{6F}[k^3 - (k - q/p)^3]\right) \quad (2.72)$$

wenn man $T_\omega = \tau_B q/p$ und $\tau_B = \hbar/F$ berücksichtigt. Der Operator $\tilde{U}_0(T_\omega)$ vertauscht also mit jeder beliebigen Translation, und man kann sich sofort klarmachen, daß die Beziehung

$$[T_{2\pi p/q}, \exp(-ixq/p)] = [T_{2\pi p/q}, U_0(T_\omega)] = 0 \quad (2.73)$$

gilt. Der vollständige Zeitentwicklungsoperator besitzt diese Symmetrie jedoch nicht, denn er vertauscht im Gegensatz zum freien Zeitentwicklungsoperator nicht mit einer Translation um $2\pi p/q$. Im folgenden wird gezeigt, daß diese Symmetrie im Einklang mit den zuvor geforderten Eigenschaften der Zustände $\Phi_{0,\kappa}$ steht. Dazu betrachtet man eine Lösung $\Phi_{0,\lambda}$ der Gleichung (2.70), die zusätzlich die Eigenschaft

$$T_{2\pi p/q}\Phi_{0,\lambda} = \exp(i2\pi p\lambda/q)\Phi_{0,\lambda} \quad (2.74)$$

mit $-q/2p < \lambda < q/2p$ besitzt. Dann erkennt man sofort die Gültigkeit der Beziehung

$$T_{2\pi}^p\Phi_{0,\lambda} = T_{2\pi p/q}^q\Phi_{0,\lambda} = \exp(i2\pi\lambda p)\Phi_{0,\lambda}. \quad (2.75)$$

Betrachtet man die Werte, die λ annehmen darf, so kann man daraus folgern, daß es q unabhängige freie Zustände gibt, die beide an $\Phi_{0,\kappa}$ gestellte Bedingungen erfüllen. Für diese Zustände, die als $\Phi_{0,\kappa}^n$ bezeichnet werden sollen, gilt $\lambda_n = \kappa + n/p$ für $n = 0, \dots, q-1$. Für die Koeffizienten $D_{0,\kappa}^n(E, m)$ der Reihenentwicklung

$$\Phi_{0,\kappa}^n = \sum_{m \in \mathbb{Z}} D_{0,\kappa}^n(E, m) |\lambda_n + mq/p\rangle \quad (2.76)$$

erhält man unter Berücksichtigung der Eigenwertgleichung (2.70) sowie der Gln. (2.71) und (2.72) die Beziehung

$$D_{0,\kappa}^n(E, m) = \exp\left(i \frac{\hbar^2(\lambda_n + mq/p)^3}{6F} - i \frac{E(\lambda_n + mq/p)}{F}\right). \quad (2.77)$$

Die freien Lösungen sind also wieder diskretisierte Airy-Funktion im Phasenraum. Die zusätzliche Symmetrie der ungestreuten Zustände muß sich auch auf die Streuzustände auswirken. Bei der Berechnung der S-Matrix werden nämlich die Asymptoten der freien Lösungen mit den Asymptoten der zugehörigen Streulösungen verglichen. Da hier q unabhängige Asymptoten für die freien Lösungen vorliegen, sollten diesen q unabhängige Asymptoten für die Streuzustände zugeordnet sein. Das ist jedoch nur dann sinnvoll, wenn der Floquet-Operator $U(T_\omega)$ diese Zustände asymptotisch entkoppelt. Ausgehend von einem Streuzustand $\Phi_{S,\kappa}$

$$\Phi_{S,\kappa} = \sum_{m \in \mathbb{Z}} C_{S,\kappa}(m) |\kappa + m/p\rangle \quad (2.78)$$

sollen nun die Zustände $\Phi_{S,\kappa}^n$ mit $n = 0, \dots, q-1$ bestimmt werden, die sich asymptotisch genau wie die Zustände $\Phi_{0,\kappa}^n$ verhalten. Dazu setzt man für $\Phi_{S,\kappa}^n$ eine zu (2.76) analoge Reihenentwicklung an und erhält für die Koeffizienten $D_{S,\kappa}^n(E, m) = C_{S,\kappa}(E, n + mq)$. Betrachtet man sich außerdem noch den Zeitentwicklungsoperator $U(T_\omega) = \exp(-ixq/p)$ $\tilde{U}(T_\omega)$ mit

$$\tilde{U}(T_\omega) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^{T_\omega} \left[\frac{(p - Ft)^2}{2} + V(x, t)\right] dt\right), \quad (2.79)$$

so erkennt man, daß in Analogie zu Kapitel 1.2.3 auch hier der kinetische Term für große Impulse dominant ist und man das Potential vernachlässigen kann. Die Matrix $\tilde{U}(T_\omega)$ nähert sich folglich für große Impulse immer mehr einer Diagonalform an. Asymptotisch koppelt der Floquet-Operator $U(T_\omega)$ also nur diejenigen ebenen Wellen $|k + m/p\rangle$, deren Impulse sich um ganzzahlige Vielfache von $\hbar q/p$ unterscheiden. Daher werden die Streuzustände $\Phi_{S,\kappa}^n$ entkoppelt. Die q verschiedenen Asymptoten werden als Zerfallskanäle interpretiert. Die S-Matrix nimmt dann die Form einer $q \times q$ Matrix $S(E)_{m,n}$ an, die die Verbindung zwischen den q einlaufenden Kanälen und den q auslaufenden Kanälen herstellt. Für die Matrixelemente der Übergänge $n \rightarrow m$ gilt

$$S(E)_{m,n} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{D_{S,\kappa}^m(E, -r) D_{0,\kappa}^n(E, r)}{D_{0,\kappa}^m(E, -r) D_{S,\kappa}^n(E, r)}. \quad (2.80)$$

2.3.2 Definition der S-Matrix mit Floquet-Bloch-Zuständen

Unter der Bedingung, daß die Periodendauer T_ω und die Blochzeit τ_B durch die Beziehung $T = pT_\omega = q\tau_B$ mit $p, q \in \mathbb{N}$ miteinander verknüpft sind, kann man den Floquet-Bloch-Operator $U(T)$ definieren. Seine Eigenzustände sind die sogenannten Floquet-Bloch-Streuzustände und erfüllen die Beziehung

$$U(T)\phi_{S,\kappa+r/p} = \exp\left(-i\frac{ET}{\hbar}\right)\phi_{S,\kappa+r/p}. \quad (2.81)$$

Die Brillouinzone für den Quasiimpuls ist eigentlich $-1/2 < \kappa < 1/2$. Hier ist sie jedoch p -fach entartet. Deshalb kann man für den Quasiimpuls auch $\kappa + r/p$ mit $-1/2p < \kappa < 1/2p$ und $r = 0, \dots, p-1$ schreiben. Die Floquet-Bloch-Zustände $\phi_{S,\kappa+r/p}$ sind über Gl. (2.55) mit den Zuständen $\Phi_{S,\kappa}$ verknüpft. Beide Floquet-Operatoren besitzen das gleiche Spektrum. Greift man eine bestimmte Stufe der Quasienergieleiter heraus und betrachtet die beiden zugehörigen Zustände, dann findet man

$$\Phi_{S,\kappa} = \frac{1}{p} \sum_{r=0}^{p-1} \phi_{S,\kappa+r/p}. \quad (2.82)$$

Um eine Beziehung zwischen den Zuständen $\phi_{S,\kappa+r/p}$ und den Streuzuständen $\Phi_{S,\kappa}^n$ zu erhalten, werden die erstgenannten in eine Reihe entwickelt:

$$\phi_{S,\kappa+r/p} = \sum_{m \in \mathbb{Z}} G_{S,\kappa}^r(E, m) |\kappa + r/p + m\rangle. \quad (2.83)$$

Die Koeffizienten sind durch $G_{S,\kappa}^r(E, m) = pC_{S,\kappa}(E, mp + r)$ gegeben und damit ergibt sich für die gesuchte Beziehung

$$G_{S,\kappa}^r(E, m) = pD_{S,\kappa}^n(E, s) \quad (2.84)$$

mit $n = \text{mod}(mp + r, q)$ und $s = (mp + r - n)/q$ (der Modulus ist so definiert, daß $\text{mod}(q, q) = 0$ gilt). Für einen festen Wert r existieren q Koeffizienten $G_{S,\kappa}^r(E, m)$ mit $m = 0, \dots, q-1$. Der Index n der zugehörigen $D_{S,\kappa}^n(E, s)$ durchläuft dann ebenfalls alle Werte $n = 0, \dots, q-1$, wobei die Reihenfolge $n(m) = \text{mod}(mp + r, q)$ von der speziellen Wahl von p und q abhängt. Die Funktion $n(m)$ ist also eine Permutation. Der zweite Index s wächst monoton mit wachsendem m und es gilt

$$G_{S,\kappa}^r(E, m) = pD_{S,\kappa}^n(E, s) \implies G_{S,\kappa}^r(E, m + q) = pD_{S,\kappa}^n(E, s + p). \quad (2.85)$$

Damit kann man die S-Matrix umschreiben, indem man die Asymptoten der Floquet-Zustände in Gl. (2.80) durch die Asymptoten der Floquet-Bloch-Streuzustände ersetzt. Ebenso lassen sich die Anteile der freien Lösung ersetzen, denn auch für die freien Floquet-Lösungen $\Phi_{0,\kappa}^n$ und die freien Floquet-Bloch-Zustände $\phi_{0,\kappa}$ gelten die obigen Beziehungen. Damit kann man die S-Matrix $\tilde{S}(E)_{\mu,\nu}$ für die Übergänge $\nu \rightarrow \mu$ definieren als

$$\tilde{S}(E)_{\mu,\nu} = \lim_{r \rightarrow \infty} \frac{G_{S,\kappa}^r(E, \mu - rq) G_{0,\kappa}^r(E, \nu + rq)}{G_{0,\kappa}^r(E, \mu - rq) G_{S,\kappa}^r(E, \nu + rq)} \quad (2.86)$$

mit $\mu, \nu \in \{0, \dots, q-1\}$. Diese neue S-Matrix $\tilde{S}(E)$ erhält man durch Umordnen von $S(E)$. Die beiden Matrizen sind nämlich über die Permutationsmatrix $P_{\nu,n} = \delta(\text{mod}(p\nu + r, q), n)$ miteinander verknüpft und es ergibt sich die Beziehung

$$S(E)_{m,n} = P_{m,\mu}^\dagger \tilde{S}(E)_{\mu,\nu} P_{\nu,n}. \quad (2.87)$$

2.3.3 Asymptotik der Floquet-Bloch-Zustände

Der Floquet-Bloch-Operator für zeitabhängige Systeme ist nach Gl. (2.46) gegeben durch

$$U(T) = \exp(-iqx) \tilde{U}(T) \quad (2.88)$$

mit

$$\tilde{U}(T) = \widehat{\exp} \left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^T \left[\frac{(p - Ft)^2}{2} + V(x, t) \right] dt \right). \quad (2.89)$$

Genau wie im zeitunabhängigen Fall soll nun Gl. (2.81) durch Verwendung der Reihenentwicklung (2.83) in eine Matriceigenwertgleichung umgewandelt werden. Dazu wird zunächst ein fester Quasiimpuls $\kappa + r/p$ ausgewählt, der für die gesamte Herleitung beibehalten wird. Deshalb können die Indizes κ und r im folgenden weggelassen werden. Definiert man $\lambda = \exp(-iET/\hbar)$ und berücksichtigt, daß der Impulsverschiebungsoperator $\exp(-iqx)$ in (2.88) für die zugehörigen Matrizen $U_{m,n}$ und $\tilde{U}_{m,n}$ lediglich eine Indexverschiebung bedeutet, $\exp(-iqx)|\kappa + r/p + m\rangle = |\kappa + r/p + m - q\rangle$ so ergibt sich

$$\sum_n \tilde{U}_{m+q,n} G_S(E, n) = \lambda G_S(E, m). \quad (2.90)$$

In der Basis der ebenen Wellen gilt nämlich

$$\langle m | \exp(-iqx) | n \rangle = \delta_{m+q,n} \quad (2.91)$$

und damit

$$U(T)_{m,n} = \tilde{U}(T)_{m+q,n}. \quad (2.92)$$

Analog zum zeitunabhängigen Fall nähert sich mit wachsenden Indizes m und n die Matrix \tilde{U} immer mehr einer Diagonalmatrix an, d.h.

$$\tilde{U}(T)_{m,n} \approx \delta_{m,n} u_m \quad \text{für } |m|, |n| > N \quad (2.93)$$

mit

$$u_m = \exp \left(\frac{i\hbar^2}{6F} [(\kappa + r/q + m - q)^3 - (\kappa + r/q + m)^3] \right). \quad (2.94)$$

Der Vektor G_S wird analog zu (1.72) in drei Teile aufgespalten, die beiden Asymptoten $G_S^{(+)}$ und $G_S^{(-)}$ sowie den Wechselwirkungsanteil $G_S^{(0)}$. $G_S^{(+)}$ enthält alle Komponenten mit

$n > N$, $G_S^{(-)}$ alle Komponenten mit $n < -N - q$ und $G_S^{(0)}$ alle übrigen Komponenten mit $-N - q \leq n \leq N$. Dann gelten die Rekursionsformeln

$$G_S(m) = \frac{\lambda}{u_m} G_S(m - q) \quad \text{für } m > N \quad (2.95)$$

$$G_S(m - q) = \frac{u_m}{\lambda} G_S(m) \quad \text{für } m < -N \quad (2.96)$$

für die Teilvektoren $G_S^{(+)}$ und $G_S^{(-)}$. Auch hier soll W die Matrix sein, die man erhält, wenn man \tilde{U} auf die Größe $(2N + 1) \times (2N + 1)$ stützt. Mit $\mathbf{0}_{m,n}$ soll die $m \times n$ Matrix bezeichnet werden, deren Elemente alle gleich null sind. Damit wird die Matrix

$$B_N = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{q,2N+1} & \mathbf{0}_{q,q} \\ W & \mathbf{0}_{2N+1,q} \end{pmatrix} \quad (2.97)$$

definiert, mit deren Hilfe die Gleichung für $G_S^{(0)}$ wie folgt geschrieben werden kann:

$$(B_N - \lambda \mathbf{1})G_S^{(0)} = - \begin{pmatrix} u_{N+q} G_S(N + q) \\ \vdots \\ u_{N+1} G_S(N + 1) \\ \mathbf{0}_{2N+1,1} \end{pmatrix}. \quad (2.98)$$

Diese Gleichung ist völlig analog zu Gl. (1.76) mit dem Unterschied, daß im zeitunabhängigen Fall nur ein Streukanal vorliegt, während hier q Kanäle berücksichtigt werden müssen. Wie (1.76) verknüpft auch (2.98) für ein gegebenes λ die Asymptoten der Streulösungen $G_S^{(+)}$ und $G_S^{(-)}$ miteinander. Sie ist also wiederum der Ausgangspunkt zur Berechnung von S-Matrixelementen.

2.3.4 Berechnung der Resonanzenergien

Für ein System mit q Streukanälen ist die S-Matrix $S(E)$ eine $q \times q$ Matrix, deren Elemente $S(E)_{m,n}$ Funktionen von E sind. Ein Pol der S-Matrix liegt genau dann vor, wenn ein beliebiges Element $S(E)_{m,n}$ für eine bestimmte Energie E einen Pol besitzt. Damit können die Ergebnisse aus Kapitel 1.2.4 für das hier betrachtete System übernommen werden. Auch hier gilt, daß $S(E)$ genau dann einen Pol hat, wenn λ ein Eigenwert der Matrix B_N ist. Um die Siegert-Randbedingung zu erfüllen, muß der Beitrag der einlaufenden Streuwellen verschwinden, d.h. $G_S^{(+)}$ muß gleich null sein. Dann sind aber wegen Gl. (2.95) auch alle Koeffizienten $G_S(N + m)$ mit $m = 1, \dots, q$ gleich null und Gl. (2.98) geht in

$$(B_N - \lambda \mathbf{1})G_S^{(0)} = 0 \quad (2.99)$$

über. Die Pole der S-Matrix lassen sich damit auch für zeitabhängige Stark-Systeme durch Lösen einer Matrixeigenwertgleichung bestimmen.

Damit sollen die theoretischen Überlegungen zu zeitunabhängigen und zeitabhängigen Stark-Systemen abgeschlossen werden. Die in den ersten beiden Kapiteln gewonnenen Ergebnisse werden im nächsten Kapitel für numerische Simulationen benutzt. Mit ihrer Hilfe wird das Verhalten der Quasienergie in Abhängigkeit vom Quasiimpuls und der Frequenz des elektrischen Wechselfelds untersucht.

Fazit

In diesem Kapitel konnten die Ergebnisse für zeitunabhängige Stark-Systeme auf zeitabhängige Systeme ausgeweitet werden. Dazu wurde zunächst eine Umeichung des Hamiltonoperators vorgenommen, so daß man sich anschließend nur noch dem Fall eines äußeren Gleichfelds widmen muß. Der zeitperiodische Anteil des äußeren Felds verschwindet durch die Transformation, und die zeitliche Periodizität geht auf das Potential über. Es stellte sich heraus, daß die Floquet-Operatoren des Ausgangssystems und des umgekehrten Systems das gleiche Spektrum besitzen. Daher kann man je nach Problemstellung die Beschreibung wählen, die am geeignetsten erscheint. Anschließend wurden das Verhalten eines Blochteilchens im elektrischen Wechselfeld mit Hilfe der Floquet-Bloch-Funktionen diskutiert. Diese wurden im letzten Teil verwendet, um die Streutheorie analog zum ersten Kapitel zu formulieren. Dabei mußte beachtet werden, daß diese Art der Beschreibung nur dann möglich ist, wenn die Blochzeit und die zeitliche Periode des Potentials kommensurabel sind. Schließlich wurde gezeigt, daß auch im zeitabhängigen Fall die Pole der S-Matrix durch Lösen einer Matrix-Eigenwertgleichung bestimmt werden können.

Kapitel 3

Numerische Anwendungen

In diesem Kapitel geht es um die Anwendung des in den vorhergehenden Kapiteln hergeleiteten Formalismus. Zunächst werden einige numerische Berechnungen für das Standardsystem (vgl. Kapitel 2.1.2)

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x + \epsilon \cos(\omega t)) + F_0 x \quad \text{mit} \quad V(x) = \cos(x) \quad (3.1)$$

durchgeführt, um die Struktur des Quasienergiespektrums zu untersuchen. Dabei wird zuerst die Abhängigkeit der Quasienergie der beiden stabilsten Zustände, also des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands, vom Blochindex κ bei konstanter Frequenz ω betrachtet. Anschließend soll die Abhängigkeit der Quasienergie von der Frequenz ω im Mittelpunkt des Interesses stehen. Vor allem das Verhalten der mittleren Resonanzbreite des Grundzustands wird eingehend untersucht und mit Hilfe von Fermis Goldener Regel erklärt. Schließlich werden die gewonnenen Erkenntnisse mit den Ergebnissen von Experimenten mit ultrakalten Natriumatomen in stehenden Laserwellen verglichen. Es wird sich zeigen, daß die numerischen Simulationen die Resultate der Experimente sehr gut wiedergeben (s. dazu auch [33]).

3.1 Struktur des Quasienergiespektrums

Für den Hamiltonoperator (3.1) sollen numerisch die stabilsten Resonanzen berechnet werden, d.h. es werden die Resonanzenergien bestimmt, die den betragsmäßig kleinsten Imaginärteil besitzen. Der stabilste Zustand wird als Grundzustand bezeichnet. Im folgenden sind seine Eigenschaften der Hauptgegenstand des Interesses.

3.1.1 Theoretische Betrachtung

Zunächst wird die Abhängigkeit der Quasienergie $\mathcal{E} = E - i\Gamma/2$ vom Blochindex κ betrachtet. Für zeitunabhängige Systeme ($\epsilon = 0$) ist nach Kapitel 1.2.2 die S-Matrix $S(E)$

unabhängig vom Quasiimpuls κ , und somit hängen auch die Resonanzenergien, die man aus den Polen von $S(E)$ erhält, nicht vom Blochindex ab¹. Man erhält also ein Spektrum

$$\mathcal{E}_\alpha = E_\alpha - i \frac{\Gamma_\alpha}{2} \quad (3.2)$$

mit $\alpha \in \mathbb{N}_0$, wobei man die Energien \mathcal{E}_α so anordnen kann, daß $\Gamma_\alpha < \Gamma_{\alpha+1}$ gilt. Jeder Energie \mathcal{E}_α ist eine Wannier–Stark–Leiter

$$\mathcal{E}_{\alpha,n} = \mathcal{E}_\alpha + 2\pi F_0 n, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.3)$$

zugeordnet. Eine entsprechende numerische Rechnung wurde in Kapitel 1.2.5 bereits durchgeführt.

Geht man nun zu zeitabhängigen Systemen ($\epsilon \neq 0$) über, so werden die Quasienergien Funktionen des Quasiimpulses. Die genaue Abhängigkeit soll nun untersucht werden. Um den in Kapitel 2.3 hergeleiteten Formalismus benutzen zu können, muß man sich dabei auf solche Systeme (3.1) beschränken, für die die Kommensurabilitätsbedingung $T = pT_\omega = q\tau_B$ mit $T_\omega = 2\pi/\omega$, $\tau_B = \hbar/F_0$ und $p, q \in \mathbb{N}$ gilt. In diesem Fall erhält man ein Quasienergiespektrum, das im Intervall $0 \leq E < \hbar\omega$ definiert ist, und das für jede Resonanzenergie \mathcal{E}_α aus p identischen Bändern besteht:

$$\mathcal{E}_{\alpha,n}(\kappa) = \mathcal{E}_{\alpha,0}(\kappa) + \frac{n}{p}\hbar\omega, \quad n = 0, \dots, p-1. \quad (3.4)$$

Die Brillouinzone ist p -fach entartet, deshalb kann man den Quasiimpuls auf das Intervall $-1/2p < \kappa < 1/2p$ beschränken.

Betrachtet man nun ein System, bei dem die Amplitude ϵ des zeitabhängigen Teils des Potentials klein ist, so kommt man mit Hilfe einer Störungsanalyse [32] zu dem Ergebnis, daß der Bandverlauf in Abhängigkeit vom Blochindex annähernd kosinusförmig ist. Realteil und Imaginärteil des Quasienergiespektrums lassen sich daher mit den Gleichungen

$$E_{\alpha,n}(\kappa) = \left[\bar{E}_\alpha + \frac{n}{p}\hbar\omega + \frac{\Delta E_\alpha}{2} \cos(p2\pi\kappa) \right] \bmod \hbar\omega, \quad n = 0, \dots, p-1 \quad (3.5)$$

und

$$\Gamma_\alpha(\kappa) = \bar{\Gamma}_\alpha + \frac{\Delta\Gamma_\alpha}{2} \cos(p2\pi\kappa) \quad (3.6)$$

beschreiben. Die mittlere Bandenergie \bar{E}_α , die mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_\alpha$, sowie die zugehörigen Bandbreiten ΔE_α und $\Delta\Gamma_\alpha$ hängen sowohl von der Frequenz ω als auch von der Amplitude ϵ der „Störung“ ab. Diese Abhängigkeit wird weiter unten noch genauer betrachtet². Dabei stellt sich heraus, daß die Frequenzabhängigkeit der Bandbreiten ΔE_α und $\Delta\Gamma_\alpha$ durch unstetige Funktionen $\Delta E_\alpha = \Delta E_\alpha(\omega)$ und $\Delta\Gamma_\alpha = \Delta\Gamma_\alpha(\omega)$ beschrieben wird, während die Funktionen $\bar{E}_\alpha = \bar{E}_\alpha(\omega)$ und $\bar{\Gamma}_\alpha = \bar{\Gamma}_\alpha(\omega)$ für die mittlere Bandenergie und die mittlere Resonanzbreite stetig sind.

¹Bei der numerischen Berechnung der Resonanzen nutzt man dieses Kriterium, um die Ergebnisse der verwendeten Algorithmen durch geschickte Wahl der numerischen Parameter zu optimieren.

²Um Mißverständnisse zu verhindern, sei explizit darauf hingewiesen, daß es sich bei den hier durchgeführten numerischen Rechnungen nicht um störungstheoretische sondern um exakte Simulationen handelt. Das Wort „Störung“ wird in dem Sinne verwendet, daß man von einem zeitunabhängigen System ausgeht, das dann durch Hinzunahme des zeitabhängigen Teils des Potentials „gestört“ wird.

3.1.2 Numerische Untersuchung

Numerischer Algorithmus

Die in den Gln. (3.5) und (3.6) gemachte Aussage soll durch die Ergebnisse numerischer Berechnungen unterstützt werden. Deshalb wird nun eine entsprechende Beispielrechnung durchgeführt. Dazu wird der Hamiltonoperator (3.1) mit den Parametern $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.08$ betrachtet. Diese Werte liegen ungefähr in dem Bereich, der durch die Experimente mit neutralen Atomen in stehenden Laserwellen [21] erfaßt wird. Außerdem illustrieren die numerischen Ergebnisse für diesen Parametersatz die hier und in den folgenden Abschnitten untersuchten Eigenschaften des Systems besonders gut.

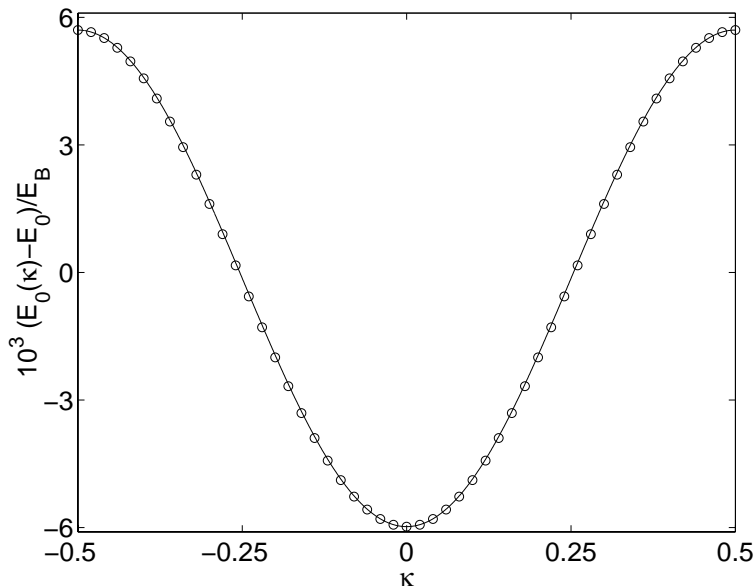


Abbildung 3.1: Realteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$, $\epsilon = 0.08$ und $T = T_\omega = \tau_B$.

Die Matrix $\tilde{U}(T)$ aus Gl. (2.89) wird in einer Basis von $M = 2N + 1$ Basiszuständen berechnet. Als Basis werden hier die ebenen Wellen $\langle x | n + \kappa \rangle$ benutzt, wobei für n_κ verschiedene Werte des Quasiimpulses κ im Intervall $-1/2 < \kappa < 1/2$ jeweils eine Rechnung durchgeführt wird. Für jede Matrix $\tilde{U}^{(\kappa)}(T)$ gilt dann

$$\tilde{U}^{(\kappa)}(T) \approx \prod_{j=1}^{j_{\max}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}^{(\kappa)}(t_j) \Delta t\right) \quad (3.7)$$

mit

$$\tilde{H}^{(\kappa)}(t_j) = \frac{(p - F_0 t_j + \hbar \kappa)^2}{2} + V(x, t_j), \quad (3.8)$$

wobei $t_j = (j - 1/2)\Delta t$, $j \in \{1, 2, \dots, j_{\max}\}$ und $\Delta t = T/j_{\max}$ ist. Daraus wird dann die Matrix $B_N(\kappa)$ (2.97) konstruiert und ihre Eigenwerte $\lambda(\kappa)$ berechnet. Die entsprechenden

Quasienergiebänder ergeben sich aus

$$\mathcal{E}(\kappa) = i \frac{F_0}{q} \ln \lambda(\kappa). \quad (3.9)$$

Ein entsprechendes MATLAB-Programm, das diesen Algorithmus realisiert, findet man in Anhang A.1.2. Dieses Programm liefert für Werte der Planckschen Konstanten im Bereich von $1,5 \lesssim \hbar \lesssim 2,5$ brauchbare numerische Ergebnisse. Das ist ein weiterer Grund für die Wahl des Parameters $\hbar = 2$ in der Beispielrechnung.

Dispersionsrelation des Grundzustands für $T = T_\omega = \tau_B$

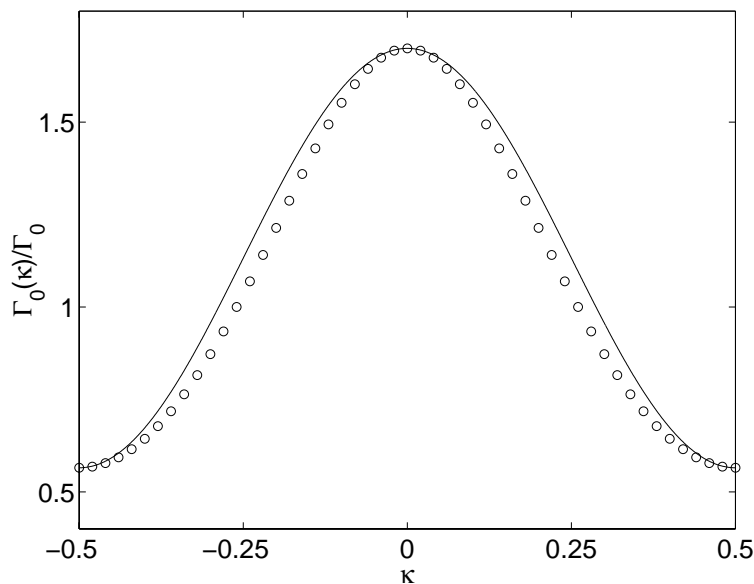


Abbildung 3.2: Imaginärteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für die gleichen Parameter wie in Abbildung 3.1.

In den Abbildungen 3.1 und 3.2 werden für die Quasienergie des Grundzustands $\mathcal{E}_0(\kappa)$ die für $n_\kappa = 50$ verschiedene Quasiimpulse κ numerisch berechneten Daten mit der Vorhersage der Näherungsformeln (3.5) und (3.6) verglichen. Dabei sind die numerischen Daten durch Kreise dargestellt, die durchgezogene Linie entspricht der kosinusförmigen Dispersionsrelationen aus den Theorieformeln. Da der Vergleich mehr qualitativer Natur sein soll, werden die Größen \bar{E}_α , ΔE_α , $\bar{\Gamma}_\alpha$ und $\Delta \Gamma_\alpha$ als Fitparameter verwendet und gemäß

$$\bar{E}_\alpha = \frac{1}{2} [\max(E_\alpha(\kappa)) + \min(E_\alpha(\kappa))] , \quad \Delta E_\alpha = \max(E_\alpha(\kappa)) - \min(E_\alpha(\kappa)) \quad (3.10)$$

und

$$\bar{\Gamma}_\alpha = \frac{1}{2} [\max(\Gamma_\alpha(\kappa)) + \min(\Gamma_\alpha(\kappa))] , \quad \Delta \Gamma_\alpha = \max(\Gamma_\alpha(\kappa)) - \min(\Gamma_\alpha(\kappa)) . \quad (3.11)$$

(vgl. (3.12) und (3.13)) an die numerisch berechneten Daten angepaßt. Bei der Berechnung der numerischen Daten wurden folgende Parameter verwendet: Um zunächst den einfachsten Fall zu realisieren, wird die Periodendauer der Potentials T_ω so gewählt, daß $T = T_\omega = \tau_B$, also $p = q = 1$ gilt. Für die numerischen Parameter werden die Werte Matrixgröße $M = 21$ und Anzahl der Iterationsschritte $j_{\max} = 1024$ eingesetzt. Abbildung 3.1 zeigt die Abhängigkeit des Realteils der Quasienergie vom Blochindex. Die Energie wird dabei in Einheiten von $E_B = \hbar\omega_B = h/\tau_B = 2\pi F$ gemessen. Außerdem wird nur die Energiedifferenz zwischen der Quasienergie mit zeitabhängiger Störung $E_0(\kappa)$ und der Quasienergie ohne Störung E_0 betrachtet. Für die in diesem Beispiel verwendeten Parameter erhält man $E_B = 3.833 \times 10^{-1}$ und $E_0 = 3.853 \times 10^{-2}$. Man erkennt, daß die numerisch berechneten Daten sehr gut den vorhergesagten kosinusförmigen Verlauf wiedergeben. Weiterhin sieht man, daß die mittlere Bandenergie \bar{E}_0 ungefähr mit der ungestörten Quasienergie E_0 übereinstimmt, denn die Kurve oszilliert fast symmetrisch um den Nullpunkt der Energieskala. Diese Erhaltung des ‘‘Energieschwerpunktes‘‘ beobachtet man allerdings nur für kleine Frequenzen $\omega \lesssim \omega_B$. Für größere Frequenzen kann die mittlere Bandenergie bedingt durch den Einfluß des periodischen Antriebs deutlich von der ungestörten Quasienergie abweichen (s. z.B. Abbildung 3.11).

Abbildung 3.2 zeigt das analoge Bild für den Imaginärteil der Quasienergie. Die Resonanzbreite $\Gamma_0(\kappa)$ wird dabei in Einheiten der Resonanzbreite Γ_0 des ungestörten Systems gemessen. Für dieses Beispiel gilt $\Gamma_0 = 1.251 \times 10^{-4}$. Auch hier zeigen die Daten das erwartete Verhalten, wobei geringe Abweichungen von der Kosinusform zu erkennen sind. Am Rand und im Zentrum der Brillouinzone ist die Übereinstimmung jedoch sehr gut. Wie man erkennt, gibt es Bereiche der Brillouinzone, in denen $\Gamma_0(\kappa) > \Gamma_0$ ist (Zentrum) und Bereiche, in denen $\Gamma_0(\kappa) < \Gamma_0$ ist (Rand), d.h. durch die zeitabhängige Störung kann die Lebensdauer der hier betrachteten Zustände verkürzt aber auch verlängert werden. Die Kurve ist nicht symmetrisch zur Achse $\Gamma_0(\kappa)/\Gamma_0 = 1$, die mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ stimmt also nicht mit der ungestörten Resonanzbreite Γ_0 überein. In Abbildung 3.2 gilt ungefähr $\bar{\Gamma}_0/\Gamma_0 = 1.1$. Durch den zeitabhängigen Anteil des Potentials hat sich die mittlere Lebensdauer des Grundzustands also verkürzt. In Kapitel 3.2 wird dieses Phänomen detailliert erörtert.

Dispersionsrelation $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für $T = 2T_\omega = \tau_B$ und $T = 3T_\omega = \tau_B$

Bisher wurde nur der einfachste Fall $T = T_\omega = \tau_B$ untersucht. Deshalb stellt sich nun die Frage, ob die bis hierher gefundene Übereinstimmung zwischen theoretischer Überlegung und numerischer Simulation für die Dispersionsrelation $\mathcal{E}_0(\kappa)$ auch für den komplizierteren Fall $T = pT_\omega = q\tau_B$ bestätigt werden kann. Dies ist tatsächlich möglich, wie man den Abbildungen 3.3 bis 3.6 entnimmt.

Bei der Berechnung der Dispersionsrelation $\mathcal{E}_0(\kappa)$ werden die bekannten Parameter $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.08$ sowie die numerischen Parameter $n_\kappa = 50$, $M = 21$ und $j_{\max} = 1024$ beibehalten und nur T_ω variiert. Dabei werden die Fälle $p = 2$ und $q = 1$ sowie $p = 3$ und $q = 1$ realisiert. Für die Periodendauern bedeutet das $T = 2T_\omega = \tau_B$ bzw. $T = 3T_\omega = \tau_B$. Die Gln. (3.5) und (3.6) sagen hierfür voraus, daß sich die Dispersionsrelationen wie $\cos(4\pi\kappa)$ für $p = 2$ und $\cos(6\pi\kappa)$ für $p = 3$ verhalten. Man erkennt

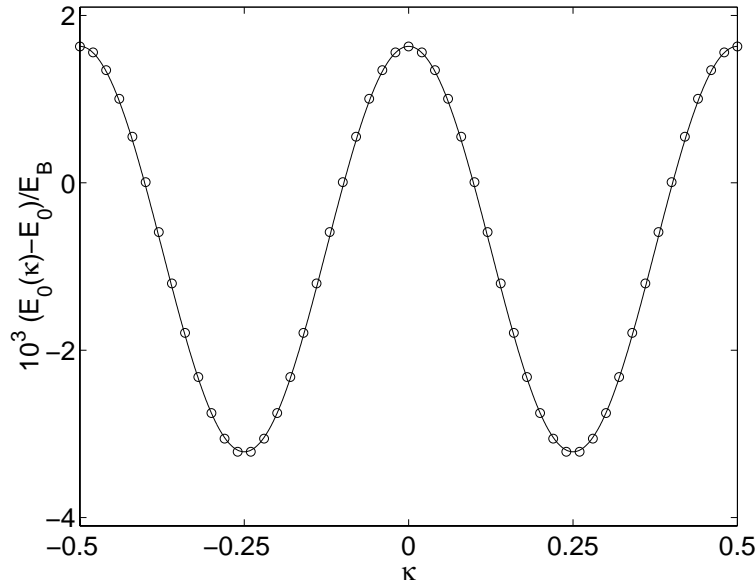


Abbildung 3.3: Realteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$, $\epsilon = 0.08$ und $T = 2T_\omega = \tau_B$, also $p = 2$, $q = 1$.

wiederum deutlich, daß sowohl der Realteil als auch der Imaginärteil der numerisch berechneten Funktion $\mathcal{E}_0(\kappa)$ (Kreise) mit dem vorhergesagten kosinusförmigen Verlauf der Theoriekurve (durchgezogene Linie) näherungsweise übereinstimmen. Außerdem sieht man, daß die Brillouinzone nun wie erwartet p -fach entartet ist, denn für $p = 2$ (Abbil-

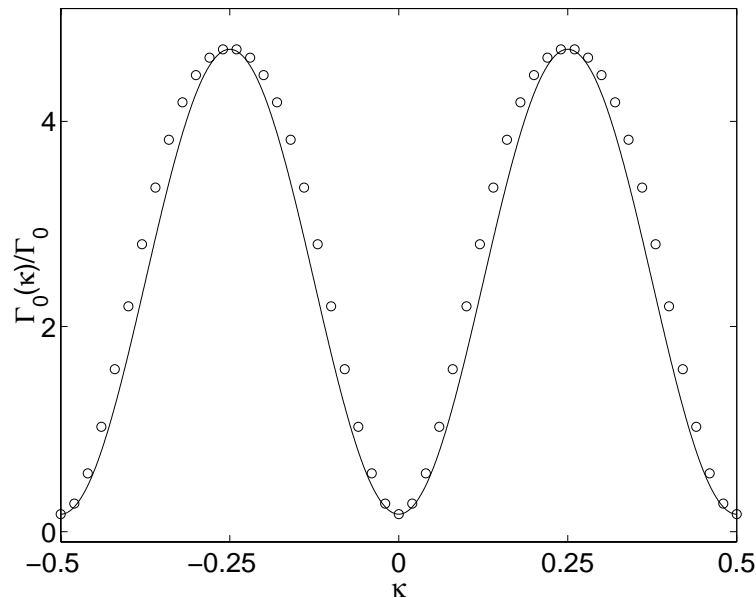


Abbildung 3.4: Imaginärteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für die gleichen Parameter wie in Abbildung 3.3.

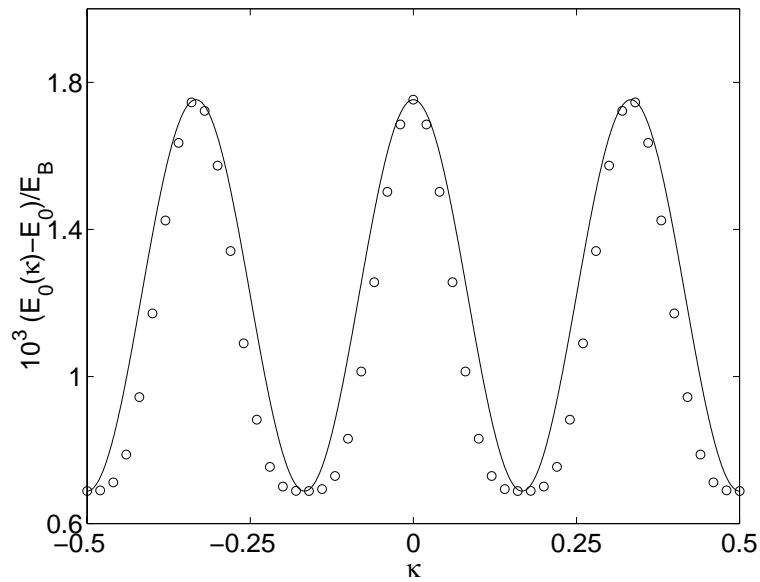


Abbildung 3.5: Realteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$, $\epsilon = 0.08$ und $T = 3T_\omega = \tau_B$, also $p = 3$, $q = 1$.

dungen 3.3 und 3.4) durchläuft die Dispersionsrelation für $-1/2 \leq \kappa \leq 1/2$ zwei Perioden der Kosinusfunktion. Als neue Brillouinzone kann man daher $-1/2p \leq \kappa \leq 1/2p$ festlegen, im hier betrachteten Fall also $-1/4 \leq \kappa \leq 1/4$. Ganz äquivalent hierzu sind die

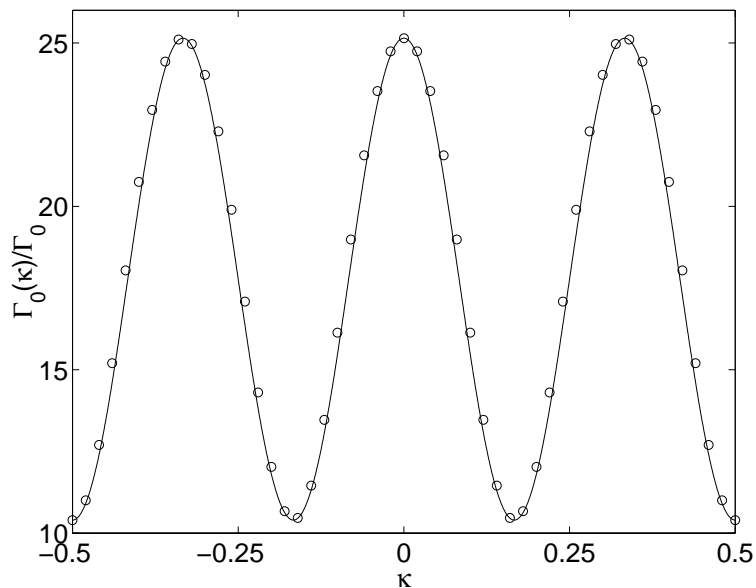


Abbildung 3.6: Imaginärteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für die gleichen Parameter wie in Abbildung 3.5.

Abbildungen 3.5 und 3.6 für $p = 3$. Die Brillouinzone ist dreifach entartet und kann auf das Intervall $-1/6 \leq \kappa \leq 1/6$ eingeschränkt werden.

Dispersionsrelationen für den ersten angeregten Zustand

Da bisher nur numerische Berechnungen der Dispersionsrelation für den Grundzustand durchgeführt wurden, soll nun noch der erste angeregte Zustand, stellvertretend für alle höher angeregten Zustände, betrachtet werden. Für ihn lassen sich ebenso wie für den Grundzustand der kosinusförmige Verlauf der Funktion $\mathcal{E}_1(\kappa)$ als auch die Entartung der Brillouinzone zeigen. Dies entnimmt man den Abbildungen 3.7 bis 3.10.

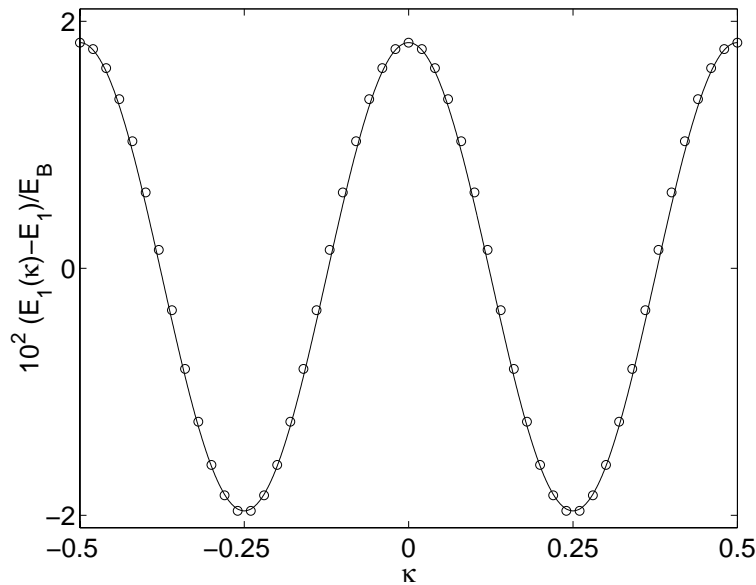


Abbildung 3.7: Realteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_1(\kappa)$ für $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$, $\epsilon = 0.08$ und $T = 2T_\omega = \tau_B$.

In den einzelnen Abbildungen sind wiederum die numerischen Daten (Kreise) den theoretischen Kurvenverläufen (durchgezogene Linie) gegenübergestellt. Die Parameter $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.08$ sowie $n_\kappa = 50$, $M = 21$ und $j_{\max} = 1024$ bleiben auch für die hier durchgeführten Simulationen unverändert. Die Energie $E_1(\kappa)$ wird weiterhin in Einheiten von $E_B = \hbar\omega_B$ gemessen, aber nun auf die Energie des ersten angeregten Zustands $E_1 = 3.388 \times 10^{-1}$ im zeitunabhängigen Fall bezogen. Die Resonanzbreite $\Gamma_1(\kappa)$ wird relativ zur Resonanzbreite $\Gamma_1 = 1.304 \times 10^{-1}$ des ungestörten Zustands betrachtet.

Abbildung 3.7 und Abbildung 3.8 zeigen das Verhalten der Dispersionsrelation für den Fall $p = 2$ und $q = 1$, also $T = 2T_\omega = \tau_B$. Die dargestellten Kurven sind ganz analog zu den Graphen für den Grundzustand in Abbildung 3.3 und Abbildung 3.4. Gleiches gilt für die Abbildungen 3.9 und 3.10, die zum Fall $T = 3T_\omega = \tau_B$ gehören. Sie bestätigen, wie schon die zugehörigen Abbildungen 3.5 und 3.6 für den Grundzustand, die Kosinusform

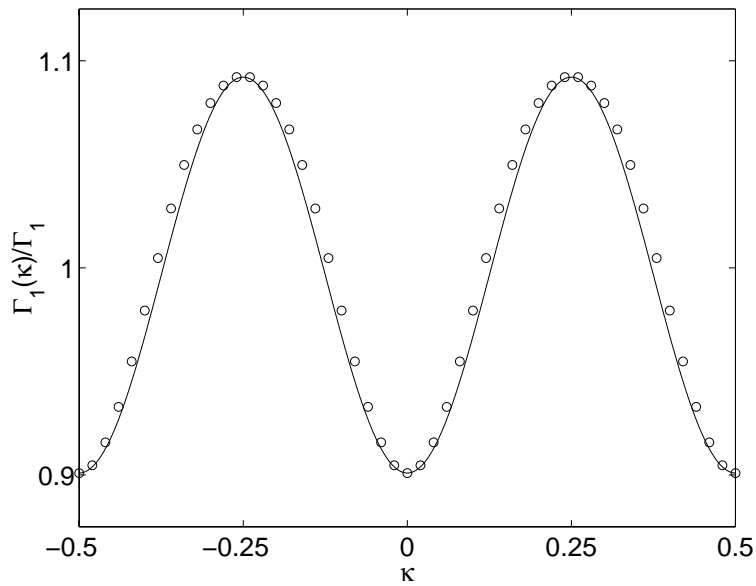


Abbildung 3.8: *Imaginärteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_1(\kappa)$ für die gleichen Parameter wie in Abbildung 3.7.*

der Dispersionsrelation und die Entartung der Brillouinzone. Abweichungen der numerischen Daten von der Kosinusform, z.B. in Abbildung 3.5 und Abbildung 3.9 können dadurch erklärt werden, daß man in diesem Fall schon Terme höherer störungstheoretischer Ordnung in den Theoriegleichungen (3.5) und (3.6) berücksichtigen müßte.

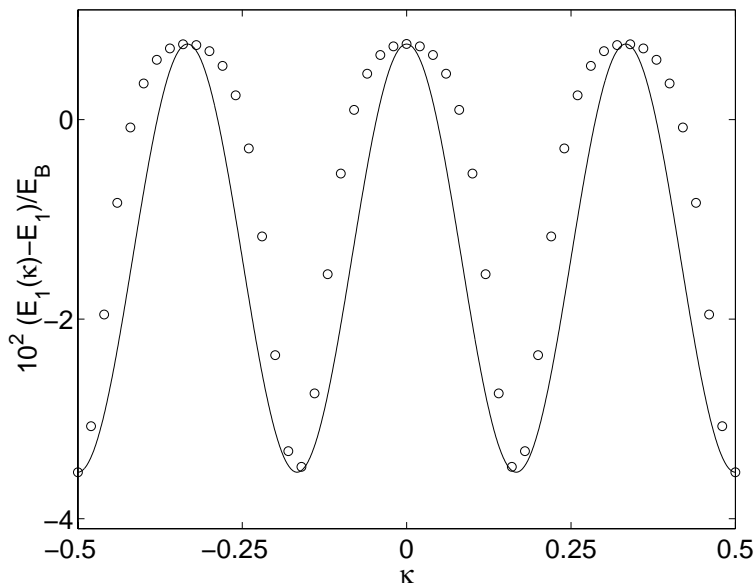


Abbildung 3.9: *Realteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_1(\kappa)$ für $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$, $\epsilon = 0.08$ und $T = 3T_\omega = \tau_B$.*

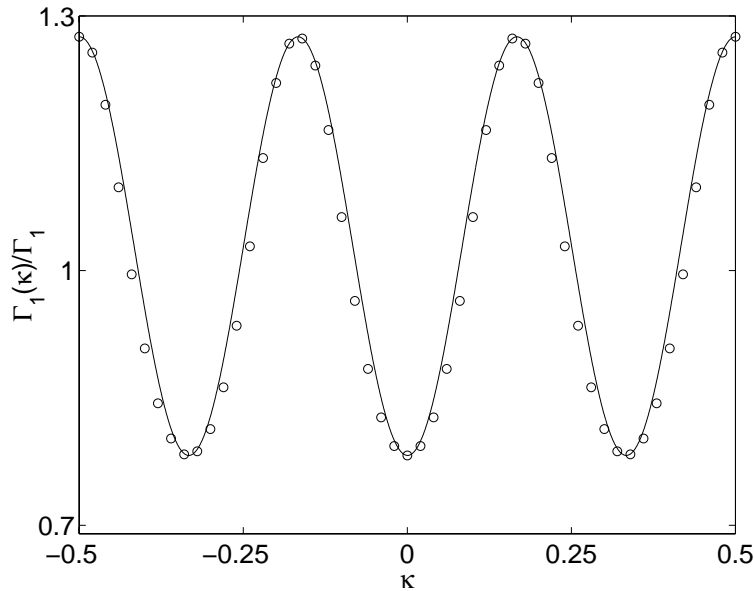


Abbildung 3.10: *Imaginärteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_1(\kappa)$ für die gleichen Parameter wie in Abbildung 3.9.*

Damit sollen die Betrachtungen zur Struktur des Quasienergiespektrums abgeschlossen werden. Es wurde gezeigt, daß die Dispersionsrelationen im wesentlichen kosinusförmig sind, wie es die Störungstheorie vorhersagt. Es sei noch erwähnt, daß man zum gleichen Ergebnis kommt, wenn man Berechnungen mit weiteren Parametern wie z.B. $p = 1$ und $q = 2, 3, \dots$ oder für andere Werte von \hbar , F_0 , und ϵ durchführt. Nun soll jedoch das Verhalten der Quasienergie als Funktion der Anregungsfrequenz betrachtet werden.

3.2 Frequenzabhängigkeit der Quasienergie

Nachdem im obigen Abschnitt die Abhängigkeit der Quasienergie vom Quasiimpuls bei konstanter Frequenz erörtert wurde, soll nun die Abhängigkeit des Quasienergiespektrums von der Frequenz ω untersucht werden. Dazu wird wiederum eine Beispielrechnung mit den Parametern $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.08$ durchgeführt. Dabei geht man analog zum vorhergehenden Abschnitt vor, d.h. man berechnet für verschiedene Werte der Frequenz $\omega = \omega_B p/q$ mit $p, q \in \mathbb{N}$ die Matrix $\tilde{U}(T)$ (2.89) in der Basis der ebenen Wellen $\langle x|n + \kappa\rangle$. Danach konstruiert man die Matrix B_N (2.97) und bestimmt nach Gl. (3.9) aus ihren Eigenwerten λ die Quasienergien.

Aus dem vorhergehenden Abschnitt ist außerdem bekannt, daß die Funktionen $E_\alpha(\kappa)$ und $\Gamma_\alpha(\kappa)$ einen kosinusförmigen Verlauf haben. Daher wird die Dispersionsrelation als bekannt vorausgesetzt und kann man den numerischen Aufwand reduzieren. Nun muß man nämlich für jede Frequenz ω nur zwei Werte der Funktion $\mathcal{E}_\alpha(\omega, \kappa)$ berechnen, nämlich für das Zentrum der Brillouinzone $\kappa = 0$ und für ihren linken oder rechten Rand $\kappa = \pm 1/2p$. An diesen Stellen haben der Real- und der Imaginärteil der Quasienergie ihre

Maxima bzw. Minima (vgl. Abbildungen 3.1 bis 3.10) und die Kenntnis dieser Werte reicht aus, um mit Hilfe der Gln. (3.5) und (3.6) den gesamten Bandverlauf berechnen zu können. Es gelten nämlich die aus dem letzten Abschnitt bekannten Beziehungen

$$\bar{E}_\alpha = \frac{1}{2} [\max(E_\alpha(\kappa)) + \min(E_\alpha(\kappa))] , \quad \Delta E_\alpha = \max(E_\alpha(\kappa)) - \min(E_\alpha(\kappa)) \quad (3.12)$$

und

$$\bar{\Gamma}_\alpha = \frac{1}{2} [\max(\Gamma_\alpha(\kappa)) + \min(\Gamma_\alpha(\kappa))] , \quad \Delta \Gamma_\alpha = \max(\Gamma_\alpha(\kappa)) - \min(\Gamma_\alpha(\kappa)) . \quad (3.13)$$

Eine entsprechende Rechnung wurde für die Parameter $0 < \omega/\omega_B = p/q \leq 14$ mit

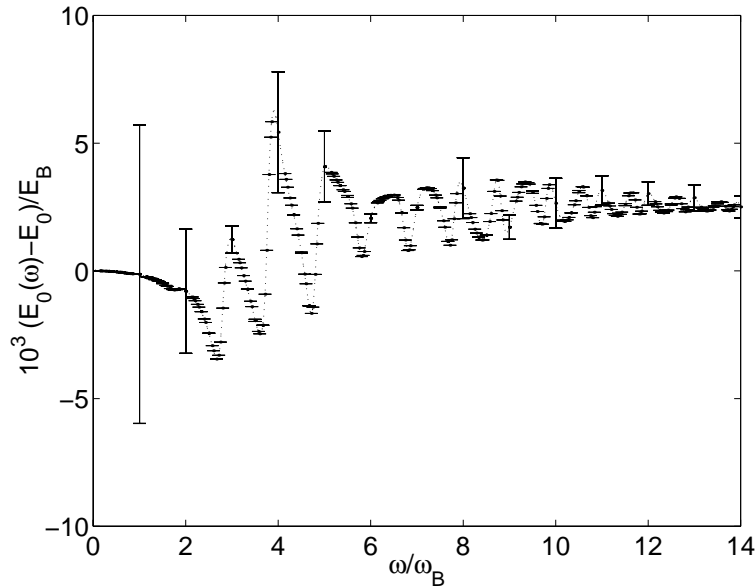


Abbildung 3.11: *Realteil der Grundzustandsenergie \bar{E}_0 als Funktion der Frequenz ω für $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.08$. Die gepunktete Kurve erhält man durch Interpolation aus den berechneten Werten. Die Bandbreite ΔE_0 wird durch die „Fehlerbalken“ dargestellt.*

$q \in \{1, 2, \dots, 7\}$, mit der Matrixgröße $M = 21$ und $j_{\max} = 2048$ Iterationsschritten durchgeführt. Das zugehörige MATLAB-Programm findet man in Anhang A.1.3.

Die Ergebnisse für den Grundzustand sind in den Abbildungen 3.11 und 3.12 zu sehen. Die numerisch berechneten Werte für die mittlere Bandenergie \bar{E}_0 und die mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ sind als Punkte mit „Fehlerbalken“ eingezeichnet, wobei die Fehlerbalken die Bandbreiten ΔE_0 und $\Delta \Gamma_0$ wiedergeben. Wie in den vorhergehenden Abbildungen wird die Energie in der Einheit $E_B = \hbar\omega_B$ gemessen und nur die Differenz zur ungestörten Quasienergie E_0 betrachtet. Analog wird die mittlere Resonanzbreite auf die ungestörte Resonanzbreite Γ_0 bezogen. Da nur Berechnungen für gebrochen rationale Frequenzverhältnisse $\omega/\omega_B = p/q$ durchgeführt werden können, müssen die Werte für irrationale Frequenzverhältnisse durch Interpolation gewonnen werden (gepunktete Kurve). Man erkennt, daß sich die Abhängigkeiten $\bar{E}_0 = \bar{E}_0(\omega)$ und $\bar{\Gamma}_0 = \bar{\Gamma}_0(\omega)$ durch stetige Funktionen

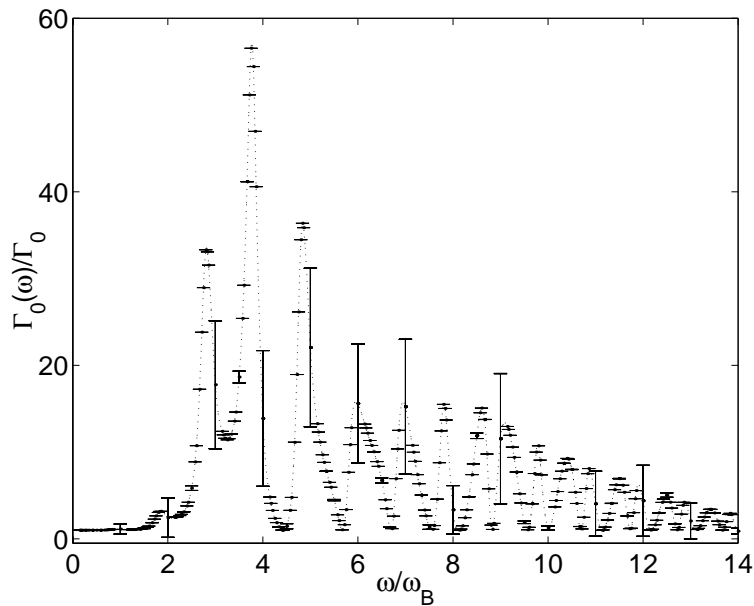


Abbildung 3.12: Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ als Funktion der Frequenz ω für die gleichen Parameter wie in Abbildung 3.11. Auch hier wird die gepunktete Kurve durch Interpolation gewonnen und die „Fehlerbalken“ beschreiben die Bandbreite $\Delta\Gamma_0$.

beschreiben lassen. Dabei fällt vor allem in Abbildung 3.12 auf, daß die Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ für bestimmte Frequenzen sehr hohe äquidistante Peaks aufweist. An diesen Stellen ist die Resonanzbreite sehr viel größer als im ungestörten System, die Zustände sind also sehr viel kurzlebiger. Wie dieses Verhalten zustande kommt, wird weiter unten geklärt.

3.2.1 Verhalten der Bandbreiten $\Delta E_0(\omega)$ und $\Delta\Gamma_0(\omega)$

Im Gegensatz zu den oben betrachteten Mittelwerten hängen die Bandbreiten ΔE_0 und $\Delta\Gamma_0$ nicht stetig von der Frequenz ω ab. Vielmehr erkennt man, daß nur für Frequenzen $\omega = \omega_B p/q$ mit $q = 1$ die Bandbreiten „groß“ sind. Für $q = 2$ erhält man bereits bedeutend kleinere Bandbreiten und für $q \geq 3$ sind die Bandbreiten in den Abbildungen gar nicht mehr zu erkennen, d.h. sie können mit den verwendeten Skalen nicht mehr aufgelöst werden. Dieses Verhalten stimmt qualitativ mit dem in [53] für die Bandbreite des Realteils gewonnenen Ergebnis

$$\Delta E_0 = (-1)^q \Delta_0 J_q \left(\epsilon \frac{2\pi p \omega_B}{\hbar} \right) \quad (3.14)$$

überein, wobei Δ_0 die Breite des Bloch-Grundzustandsbandes ist und $J_q(z)$ für die gewöhnlichen Besselfunktionen steht.

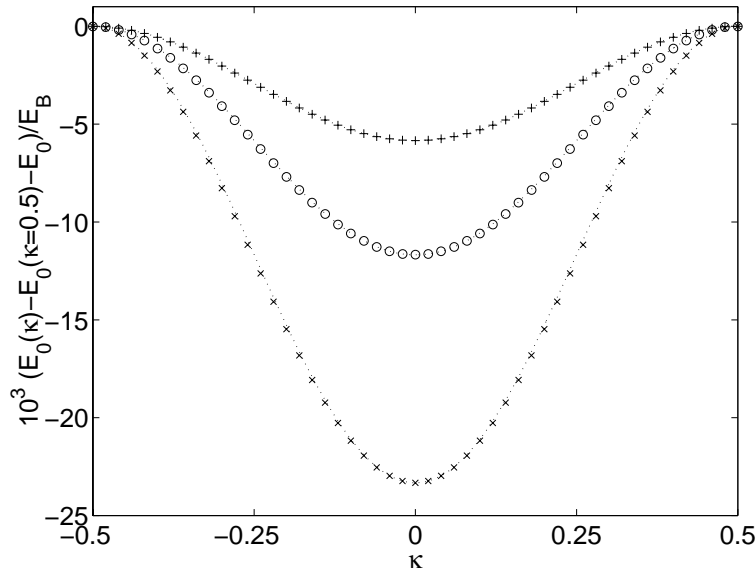


Abbildung 3.13: Realteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $T = T_\omega = \tau_B$. Die drei Kurven kommen durch Variation der Amplitude des Antriebs zustande: $\epsilon = 0.04$ (+), $\epsilon = 0.08$ (o), $\epsilon = 0.16$ (x).

Allerdings kann diese Gleichung das exakte Verhalten des hier untersuchten Systems nicht wiedergeben, denn sie wurde im Rahmen des Tight-Binding-Modells³ hergeleitet und kann daher höchstens als Näherung dienen.

Betrachtet man Gl. (3.14) für den Fall $q = 1$ und nicht zu große Werte von ϵ , so gilt für die Bandbreite $\Delta E_0(\epsilon) \sim \epsilon$. Dieses Verhalten wird durch Abbildung 3.13, in der der Realteil der Dispersionsrelation $\mathcal{E}_0(\kappa)$ dargestellt ist, bestätigt. Zur Berechnung aller drei gezeigten Kurven wurden die Parameter $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $T = T_\omega = \tau_B$, d.h. $p = q = 1$ verwendet. Sie unterscheiden sich lediglich in der Wahl von ϵ . Dabei wird $E_0(\kappa, \epsilon = 0.04)$ durch Pluszeichen, $E_0(\kappa, \epsilon = 0.08)$ (vgl. Abbildung 3.1) durch Kreise und $E_0(\kappa, \epsilon = 0.16)$ durch Kreuze dargestellt. Die Energieskala ist auf den Werte der Dispersionsrelation $E_0(\kappa = 0.5)$ am rechten Rand der Brillouinzone bezogen, so daß man aus dem Wert des Minimums direkt die Bandbreite ablesen kann. Dabei entnimmt man Abbildung 3.13 die Werte $\Delta E_0(\epsilon = 0.04) \approx 5.840$, $\Delta E_0(\epsilon = 0.08) \approx 11.68$ und $\Delta E_0(\epsilon = 0.16) \approx 23.33$. Das Verhältnis der Bandbreiten ist also $1.00 : 2.00 : 3.99$ und bestätigt somit den Zusammenhang $\Delta E_0(\epsilon) \sim \epsilon$.

Ein äquivalentes Verhalten zeigen die Bandbreiten $\Delta \Gamma_0(\epsilon)$ des Imaginärteils der Resonanzenergien, wie man in Abbildung 3.14 erkennt. Zur Berechnung der drei dargestellten Kurven wurden die gleichen Parameter wie in Abbildung 3.13 verwendet. Außerdem werden auch hier die Funktionswerte $\Gamma_0(\kappa)$ auf die Resonanzbreite $\Gamma_0(\kappa = 0.5)$ am rechten Rand der Brillouinzone bezogen. Die Werte der Maxima geben dann direkt die Band-

³Die Single-Band-Näherung und das Tight-Binding-Modell, auf die in dieser Arbeit nicht näher eingegangen wird, werden häufig zur Untersuchung von Blochteilchen in äußeren Feldern benutzt (s. [8], [54]–[64]).

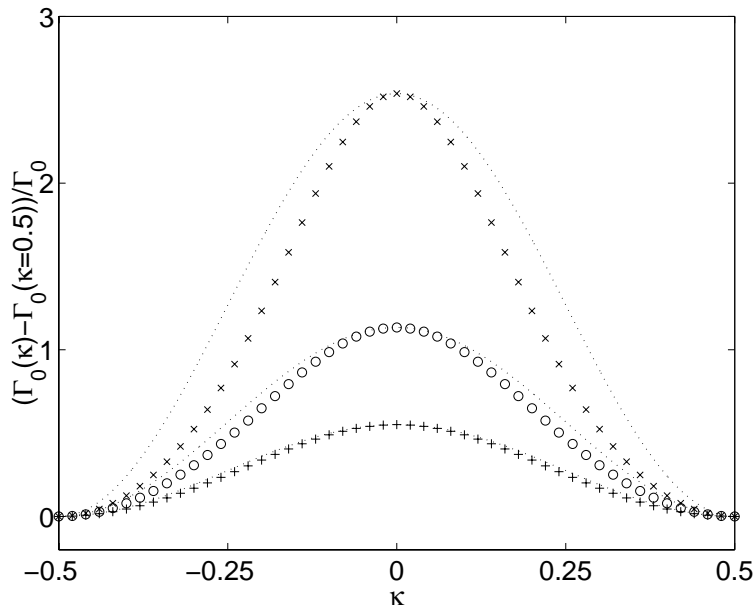


Abbildung 3.14: *Imaginärteil der Dispersionsrelation des Energiebandes $\mathcal{E}_0(\kappa)$ für die gleichen Parameter wie in Abbildung 3.13.*

breite wieder. Abbildung 3.14 entnimmt man $\Delta\Gamma_0(\epsilon = 0.04) \approx 0.551$ (Pluszeichen), $\Delta\Gamma_0(\epsilon = 0.08) \approx 1.134$ (vgl. Abbildung 3.2, Kreise) und $\Delta\Gamma_0(\epsilon = 0.16) \approx 2.537$ (Kreuze). Das entspricht einem Verhältnis der Bandbreiten von $1.00 : 2.06 : 4.61$. Während für den Bereich $\epsilon \lesssim 0.08$ die Beziehung $\Delta\Gamma_0(\epsilon) \sim \epsilon$ für dieses Beispiel verifiziert werden kann, gibt es im Bereich $\epsilon \approx 0.16$ bereits deutliche Abweichungen, die für $\Delta E_0(\epsilon)$ nicht auftreten. Die Aussage, daß für „genügend kleine“ ϵ eine Proportionalitätsrelation gilt, muß also für Real- und Imaginärteil unterschiedlich interpretiert werden.

Nun soll noch kurz der Effekt der Bandbreiten $\Delta\Gamma_0$ des Imaginärteils auf die mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ erörtert werden. Auch sie sind für Frequenzen $\omega = p\omega_B$ (also $q = 1$) am größten, wie man Abbildung 3.12 entnimmt. Aber selbst dort ist die mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ in der Regel deutlich größer als die Bandbreite $\Delta\Gamma_0$ und ihre Auswirkung auf den Zerfallsprozeß ist dann vernachlässigbar klein. Es gibt jedoch auch Ausnahmen, in Abbildung 3.12 beispielsweise an den Stellen $\omega = 2\omega_B, 8\omega_B, 11\omega_B, 12\omega_B$, wo der Einfluß der Bandbreite berücksichtigt werden muß. Dieses Verhalten erkennt man ebenfalls in Abbildung 3.15, die die mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0(\omega, \epsilon)$ und die Bandbreite $\Delta\Gamma_0(\omega, \epsilon)$ als Funktion der Amplitude ϵ der zeitabhängigen Störung für $\omega = 4\omega_B$ zeigt. Dieser Abbildung entnimmt man, daß die Effekte der endlichen Bandbreite $\Delta\Gamma_0$ für kleine Werte von ϵ durchaus eine Rolle spielen können. Dort gilt $\Delta\Gamma_0 \sim \epsilon$ und $\bar{\Gamma}_0(\epsilon) - \bar{\Gamma}_0(0) \sim \epsilon^2$ und es kann der Fall auftreten, daß die Bandbreite $\Delta\Gamma_0$ fast ihren Maximalwert $\Delta\Gamma_{0,\max} = 2\bar{\Gamma}_0$ annimmt. Nach Gl. (3.6) bedeutet das, daß die Zerfallsrate der Quasienergiezustände am Rand der Brillouinzone sehr klein ist, denn

$$\Gamma_0(\kappa = \pm 1/2p) = \bar{\Gamma}_0 - \frac{\Delta\Gamma_0}{2} \quad (3.15)$$

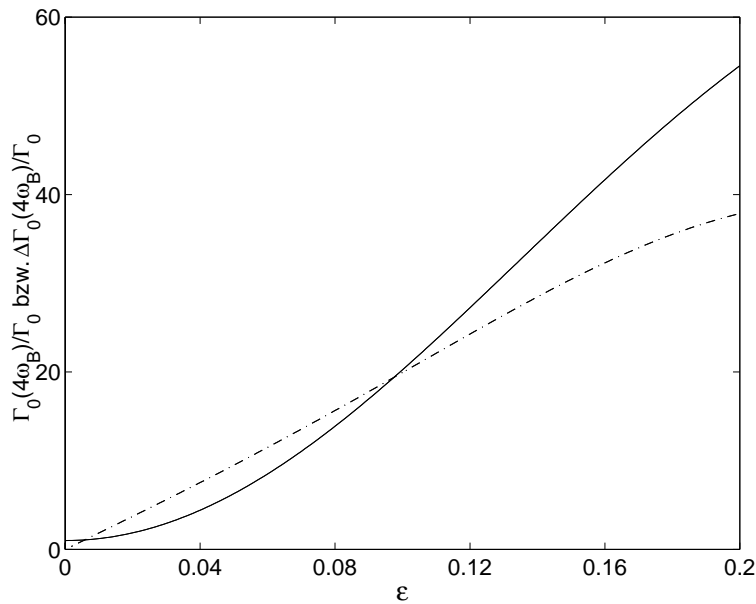


Abbildung 3.15: Mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0 = \bar{\Gamma}_0(\omega, \epsilon)$ in Einheiten von Γ_0 (durchgezogene Linie) und Bandbreite $\Delta\Gamma_0 = \Delta\Gamma_0(\omega, \epsilon)$ in Einheiten von Γ_0 (gestrichelte Linie) in Abhängigkeit von ϵ für $\omega = 4\omega_B$.

geht für $\Delta\Gamma_0 \rightarrow 2\bar{\Gamma}_0$ gegen Null. Der zeitabhängige Teil des Potentials bewirkt also in diesem Fall eine Stabilisierung bestimmter Zustände. Für den Fall $p = q = 1$ wurde dieser Stabilisierungseffekt in [32] untersucht. Geht man davon aus, daß zunächst das Bloch-Grundzustandsband im feldfreien Fall gleichmäßig besetzt ist und transformiert das Band dann adiabatisch in die dem Grundzustand zugeordnete Wannier-Stark-Leiter, kommt man zu dem Resultat, daß die Abnahme der Besetzung extrem verlangsamt wird und kein exponentielles Zerfallsgesetz gilt.

3.2.2 Die mittlere Resonanzbreite des Grundzustands $\bar{\Gamma}_0(\omega)$

Es steht noch die Erklärung dafür aus, wie das Verhalten der Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ (s. Abbildung 3.12) zustande kommt. Der Verlauf der Funktion und insbesondere das Auftreten der äquidistanten Peaks läßt sich mit Hilfe Fermis Goldener Regel erklären. Um sie anwenden zu können, müßte streng genommen ein quantenmechanisches System vorliegen, das durch ein äußeres Wechselfeld beeinflusst wird. Wie aber in Kapitel 2.1.2 gezeigt wurde, ist ein solches System zu dem hier betrachteten unitär äquivalent. Besitzt ein System ein kontinuierliches Spektrum und treten zusätzlich Resonanzzustände auf, so lassen sich diese als Besonderheit der Zustandsdichte auffassen. Für die Zustandsdichte gilt dann

$$\rho_{res} \sim \frac{\Gamma_{res}}{(E - E_{res})^2 + \Gamma_{res}^2/4}, \quad (3.16)$$

wobei E_{res} für die Resonanzenergie und Γ_{res} für die Resonanzbreite steht. Zunächst sei nur der Grundzustand besetzt. Außerdem soll die Breite der Grundzustands Γ_0 vernachlässigt

werden. Diese Annahme ist gerechtfertigt, denn der Grundzustand ist die stabilste Resonanz, und somit ist seine Breite klein im Verhältnis zur Breite der angeregten Zustände. Jedem Zustand ist eine Wannier–Stark–Leiter zugeordnet, so daß hier die Leiter

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega_B, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (3.17)$$

den „Ausgangszustand“ bildet. Dabei steht $\omega_B = 2\pi F_0/\hbar$ für die Blochfrequenz und E_0 für die Energie des Grundzustands im Intervall $0 \leq E < \hbar\omega_B$. Das äußere Wechselfeld induziert nun Übergänge von Teilchen aus dem Grundzustand in angeregte Zustände. Diese „Endzustände“ sind Überlagerungen all jener Resonanzen, die zu den angeregten Wannier–Stark–Leitern gehören. Wegen ihrer kurzen Lebensdauer zerfallen diese Zustände sehr schnell, d.h. die Teilchen werden im Gleichfeld F_0 beschleunigt. Für die hier verwendeten Parameter sind nur die Zustände der ersten angeregten Wannier–Stark–Leiter von Bedeutung, da die Breiten Γ_α der höher angeregten Zustände ($\alpha \geq 2$) sehr groß sind. Man kann sie also als Bestandteil des kontinuierlichen Hintergrundspektrums $\rho_b(E)$ betrachten und insofern vernachlässigen. Damit kann man für die Zustandsdichte des „Endzustands“

$$\rho(E) = \rho_b(E) + \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma_1/2}{(E - E_1 - l\hbar\omega_B)^2 + \Gamma_1^2/4} \quad (3.18)$$

ansetzen, wobei E_1 die Resonanzenergie des ersten angeregten Zustands im Intervall $0 \leq E < \hbar\omega_B$ ist. Nach Fermis Goldener Regel kann man die Übergangsrate berechnen, indem man das Produkt des Betragsquadrats des Übergangsmatrixelements $d(E_0 \rightarrow E) = d(\hbar\omega)$ mit der Zustandsdichte im Kontinuum bildet. Für den hier betrachteten induzierten Zerfall des Grundzustands erhält man damit die Zerfallsrate

$$\tau^{-1}(\omega) = \tau_0^{-1} + \frac{|d(\hbar\omega)|^2 \rho(E_0 + \hbar\omega)}{\hbar}. \quad (3.19)$$

Der Grundzustand besitzt, auch wenn kein äußeres Wechselfeld angelegt ist, bedingt durch Tunneleffekte nur eine endliche Lebensdauer. Das wird durch den Term $\tau_0 = \hbar/\Gamma_0$ berücksichtigt. Die Matrixelemente $d(\hbar\omega)$ für induzierte Übergänge vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand liefern nur dann einen merklichen Beitrag, wenn man sich im Bereich der Resonanzbedingung $\hbar\omega = E_1 - E_0 + l\hbar\omega_B$ befindet. Man ersetzt dann die stetige Funktion $d(\hbar\omega)$ in (3.19) durch die Werte an den diskreten Stellen $\omega_L = (E_0 - E_1 - l\hbar\omega_B)/\hbar$ und erhält für Gl. (3.19) die Näherung

$$\tau^{-1}(\omega) = \tau_0^{-1} + \sum_l \frac{|d_l|^2}{\hbar} \frac{\Gamma_1/2}{(\hbar\omega + E_0 - E_1 - l\hbar\omega_B)^2 + \Gamma_1^2/4} \quad (3.20)$$

mit $d_l = d(E_1 - E_0 + l\hbar\omega_B)$. Aus dieser Gleichung kann man ablesen, daß die inverse Lebensdauer, also auch die hier betrachtete Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$, Peaks mit äquidistantem Abstand $\hbar\omega_B$ aufweist. Die Breite aller Peaks ist gleich und durch die Resonanzbreite Γ_1 des ersten angeregten Wannier–Stark–Zustands gegeben.

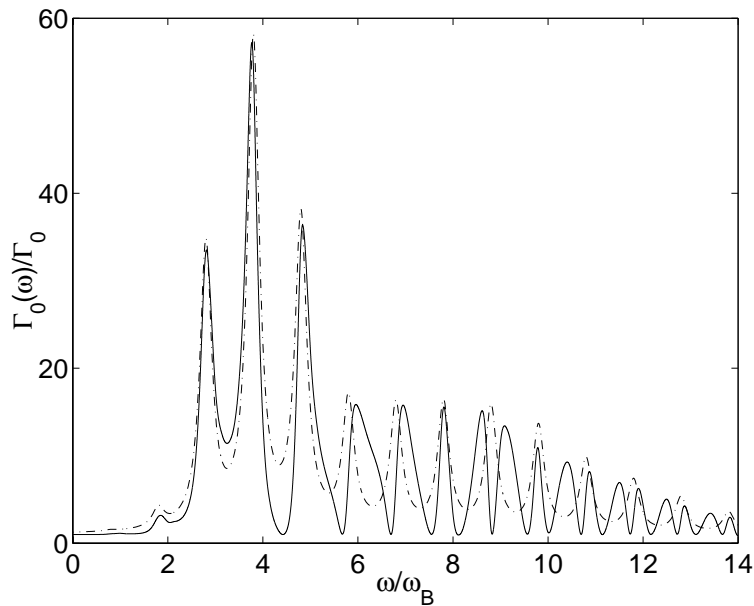


Abbildung 3.16: Vergleich der in Abbildung 3.12 dargestellten Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ (durchgezogene Linie) mit der Funktion aus Gl. (3.20) (unterbrochene Linie).

Diese Aussagen sollen nun mit Hilfe des hier betrachteten Beispielsystems überprüft werden. Dazu wird die in Abbildung 3.12 dargestellte Funktion mit Hilfe von Gl. (3.20) gefittet, d.h. das Betragsquadrat der Matrixelemente $|d_l|^2$ wird den Peakhöhen entsprechend angepaßt. Alle anderen Parameter, die in Gl. (3.20) eingehen, sind bekannt: $\Gamma_0 = 1.251 \times 10^{-4}$, $\Gamma_1 = 1.304 \times 10^{-1}$ und $E_1 - E_0 = 0.216 \hbar\omega_B$. Das Ergebnis ist in Abbildung 3.16 dargestellt. Man erkennt, daß zumindest für $\omega < 5\omega_B$ die beiden Funktionen recht gut übereinstimmen. Insbesondere werden die Positionen und die Breite der ersten drei Peaks gut wiedergegeben. Die Abweichungen für größere Werte von ω sind darauf zurückzuführen, daß für diese Frequenzen der Einfluß des zweiten angeregten Wannier-Stark-Zustands bedeutsam wird [35]. Außerdem wird in Gl. (3.20) nicht berücksichtigt, daß die Matrixelemente komplex sind, was sich bereits für kleine Frequenzen bemerkbar macht. Zwischen den Peaks stimmen nämlich die Minima der Fitkurve und die Minima der numerisch berechneten Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ nicht überein.

Variation der Amplitude ϵ des Wechselfelds

Nun soll noch kurz betrachtet werden, wie sich der Graph der Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ ändert, wenn man die Amplitude ϵ des zeitabhängigen Antriebs ändert. Legt man Gl. (3.20) zugrunde, so sollte $\bar{\Gamma}_0(\epsilon) - \bar{\Gamma}_0(0)$ proportional zu ϵ^2 sein, denn für die Matrixelemente gilt $|d_l| \sim \epsilon$. Diese ϵ^2 -Abhängigkeit kann, zumindest für kleine Werte von ϵ , schon in Abbildung 3.15 abgelesen werden. Zur weiteren Überprüfung dieser Aussage wird die Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ nun für $\epsilon = 0.04$ berechnet und die so erhaltenen Daten mit dem Ergebnis für $\epsilon = 0.08$ verglichen. Dazu sind in Abbildung 3.17 die Funktionen $\bar{\Gamma}_0(\omega, \epsilon = 0.08)/\Gamma_0$ (durchgezogene Linie) und $4\bar{\Gamma}_0(\omega, \epsilon = 0.04)/\Gamma_0 - 3$ (Punkte) dargestellt. Wie man sieht, stimmen die bei-

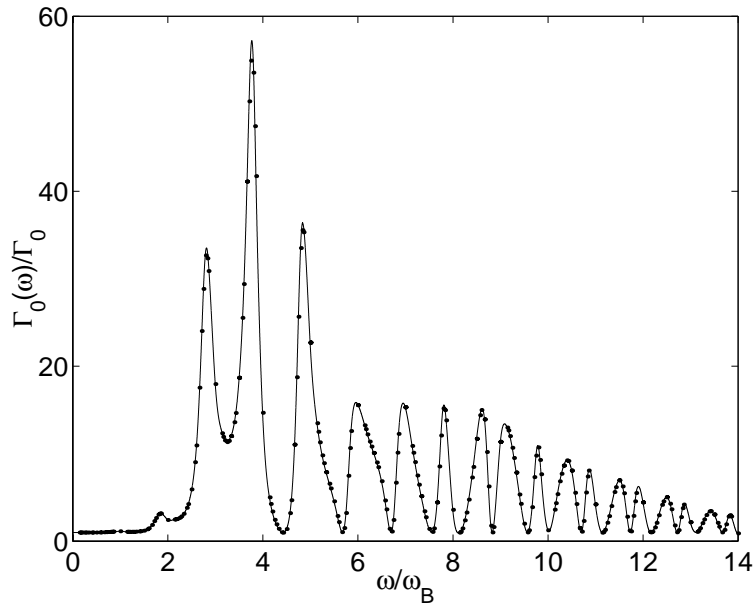


Abbildung 3.17: Vergleich der in Abbildung 3.12 dargestellten Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ (durchgezogene Linie, $\epsilon = 0,08$) mit der analogen Funktion für $\epsilon = 0,04$ (Punkte).

den Graphen sehr gut überein, d.h. die oben gemachte Vermutung $\bar{\Gamma}_0(\omega, \epsilon) - \bar{\Gamma}_0(\omega, 0) \sim \epsilon^2$ bestätigt sich. Damit läßt sich zusammenfassend feststellen, daß Gl. (3.20) das Verhalten der mittleren Resonanzbreiten zumindest näherungsweise wiedergibt und somit die Anwendung Fermis Goldener Regel gerechtfertigt ist.

Variation der skalierten Planckschen Konstanten \hbar

Es soll nun erörtert werden, wie sich das Aussehen der Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ ändert, wenn man den Parameter \hbar variiert. Bisher war der verwendete Parametersatz $\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.08$. Die zugehörige numerische Rechnung wurde oben erläutert und das Ergebnis in Abbildung 3.12 dargestellt. Wählt man nun $\hbar = 1.9$ bzw. $\hbar = 2.1$ und behält alle übrigen Parameter bei, so ergeben sich die in den Abbildungen 3.18 und 3.19 dargestellten Resultate. Vergleicht man diese mit dem Ergebnis für $\hbar = 2$, so erkennt man, daß sich die drei Funktionen $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ ähneln. Sie weisen alle äquidistante Peaks gleicher Breite auf, wobei der Peakabstand und die Peakbreite selbstverständlich vom verwendeten Parametersatz abhängt. So gilt im Fall $\hbar = 1.9$ für den Abstand der Peaks, der durch die Blochfrequenz gegeben ist, $\omega_B = 2\pi F_0/\hbar = 0.202$. Die Distanz zwischen den Peaks ist also umgekehrt proportional zur skalierten Planckschen Konstanten und für $\hbar = 2$ bzw. $\hbar = 2.1$ ist $\omega_B = 0.192$ bzw. $\omega_B = 0.183$. Die Peaks rücken folglich mit wachsendem \hbar näher zusammen. Dieses Verhalten wird allerdings durch die Abbildungen nicht verdeutlicht, da die Frequenzskala auf die Blochfrequenz ω_B bezogen ist. Die Breite der Peaks ist, wie oben gezeigt, durch die Resonanzbreite Γ_1 des ersten angeregten Zustands gegeben. Für die hier verwendeten Parameter ergibt sich $\Gamma_1(\hbar = 1.9) = 8.467 \times 10^{-2}$, $\Gamma_1(\hbar = 2) = 1.304 \times 10^{-1}$ und $\Gamma_1(\hbar = 2.1) = 1.147 \times 10^{-1}$. Sie zeigen also keine eindeutige Abhängigkeit von \hbar .

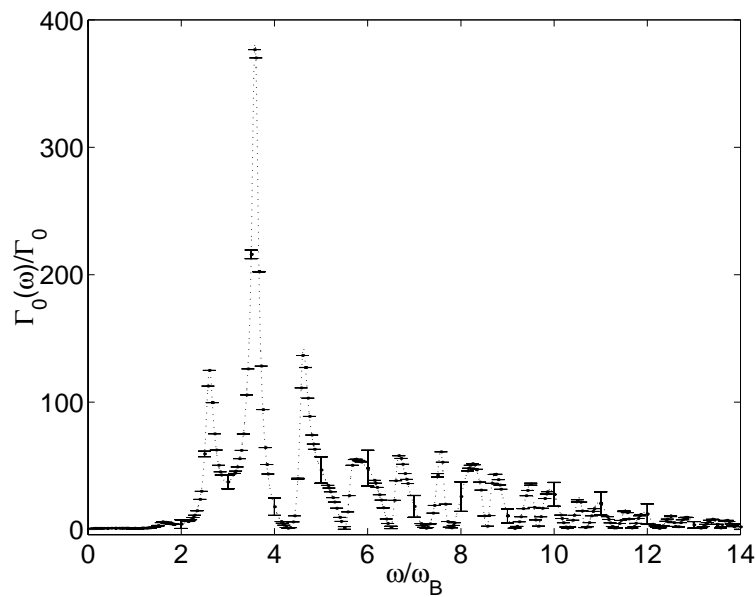


Abbildung 3.18: Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ als Funktion der Frequenz ω für $\hbar = 1.9$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.08$. Analog zu Abbildung 3.12 wird die gepunktete Kurve durch Interpolation gewonnen und die „Fehlerbalken“ beschreiben die Bandbreite $\Delta\Gamma_0$.

Die Kurven unterscheiden sich deutlich in der relativen Peakhöhe und der relativen Bandbreite. Mit wachsendem \hbar nimmt die Lebensdauer $\tau_0 = \hbar/\Gamma_0$ des ungestörten Grundzustands schnell ab ($\tau_0(\hbar = 1.9) = 5.866 \times 10^4$, $\tau_0(\hbar = 2) = 1.599 \times 10^4$, $\tau_0(\hbar = 2.1) =$

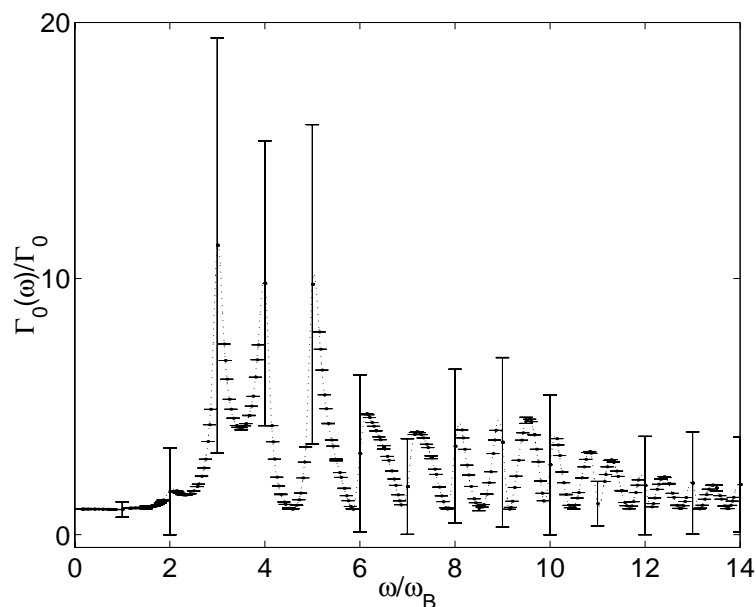


Abbildung 3.19: Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ als Funktion der Frequenz ω analog zu Abbildung 3.18 für $\hbar = 2.1$.

2.089×10^3) während die Lebensdauer $\tau_1 = \hbar/\Gamma_1$ des ersten angeregten Zustands in der gleichen Größenordnung bleibt ($\tau_1(\hbar = 1.9) = 2.244 \times 10^1$, $\tau_1(\hbar = 2) = 1.534 \times 10^1$, $\tau_1(\hbar = 2.1) = 1.831 \times 10^1$). Die relative Auswirkung der induzierten Übergänge vom Grundzustand in angeregte Zustände nimmt deshalb mit wachsendem \hbar ab. Während für $\hbar = 1.9$ (Abbildung 3.18) die Resonanzbreite durch den zeitperiodischen Antrieb maximal fast vierhundert mal größer wird als in zeitunabhängigen Fall, ist für $\hbar = 2$ (Abbildung 3.12) nur noch eine Vergrößerung um den Faktor 60 und für $\hbar = 2.1$ (Abbildung 3.19) um den Faktor 10 zu erkennen. Man sieht ebenfalls deutlich, daß der Einfluß der Bandbreiten auf den Zerfall um so geringer wird, je kleiner \hbar ist. Im Fall $\hbar = 1.9$ sind die „Fehlerbalken“, die die Bandbreite symbolisieren, kaum zu erkennen, d.h. man kann sie vernachlässigen. Für $\hbar = 2$ müssen sie zumindest dort berücksichtigt werden, wo durch ihren Einfluß $\Gamma_0(\kappa = \pm 1/2p) \rightarrow 0$ gilt, also ein Stabilisierungseffekt auftritt. Dies ist beispielsweise für die ganzzahligen Vielfachen ($p = 1$) der Blochfrequenz $\omega/\omega_B = 2, 8, 11, 12$ der Fall. Betrachtet man $\hbar = 2.1$, so muß praktisch für alle ganzzahligen Vielfachen der Blochfrequenz die Bandbreite berücksichtigt werden.

Variation der Feldstärke F_0

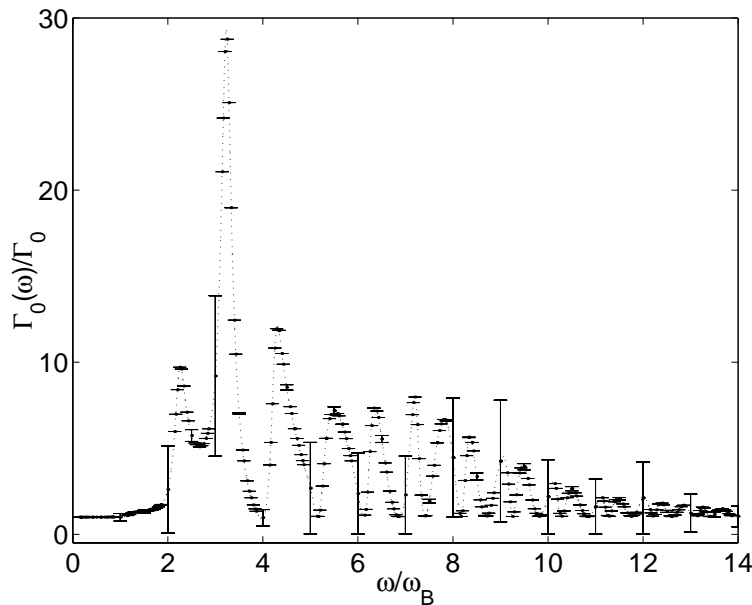


Abbildung 3.20: Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ als Funktion der Frequenz ω für $\hbar = 2$, $F_0 = 0.071$ und $\epsilon = 0.08$. Analog zu Abbildung 3.12 wird die gepunktete Kurve durch Interpolation gewonnen und die „Fehlerbalken“ beschreiben die Bandbreite $\Delta\Gamma_0$.

Abschließend soll die Abhängigkeit der Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ von der Feldstärke F_0 untersucht werden. Dazu wird Abbildung 3.12 ($\hbar = 2$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.08$) mit den Abbildungen 3.20 und 3.21 verglichen, die die Resonanzbreite für die Feldstärken $F_0 = 0.071$ und $F_0 = 0.051$ zeigen, während \hbar und ϵ sowie die numerischen Parameter unverändert bleiben. Wiederum erkennt man, daß die Struktur der drei Kurven ähnlich

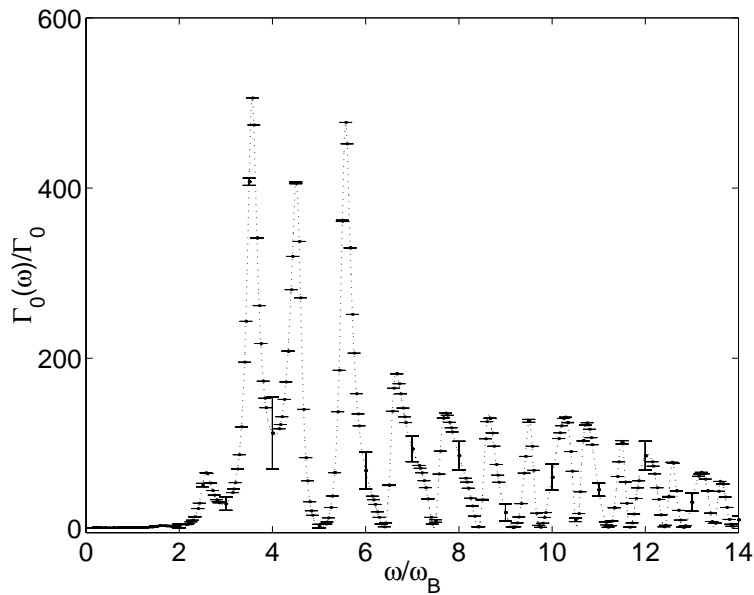


Abbildung 3.21: Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ als Funktion der Frequenz ω analog zu Abbildung 3.20 für $F_0 = 0.051$.

ist. Der Abstand der äquidistanten Peaks beträgt $\omega_B = 2\pi F_0/\hbar$, nimmt also für den hier betrachteten Fall proportional mit F_0 zu und es ergibt sich $\omega_B(F = 0.051) = 1.602 \times 10^{-1}$, $\omega_B(F = 0.061) = 1.916 \times 10^{-1}$ und $\omega_B(F = 0.071) = 2.231 \times 10^{-1}$. Die Breite der Peaks ist durch die Resonanzbreite Γ_1 des ersten angeregten Zustands im zeitunabhängigen Fall gegeben und beträgt in diesem Beispiel $\Gamma_1(F_0 = 0.051) = 9.831 \times 10^{-2}$, $\Gamma_1(F_0 = 0.061) = 1.304 \times 10^{-1}$ sowie $\Gamma_1(F_0 = 0.071) = 1.317 \times 10^{-1}$. Sie nimmt also mit wachsender Feldstärke zu, d.h. die Peaks werden breiter. Man kann das auch sofort verstehen, denn dieses Verhalten bedeutet, daß die Lebensdauer der Zustände für große Feldstärken abnimmt. Es ist klar, daß dies so sein muß, denn die Höhe der Potentialwälle, die durchtunnelt werden müssen, nimmt mit zunehmender Feldstärke ab. Außerdem werden die Teilchen umso stärker beschleunigt, je größer F_0 ist. Noch deutlicher als für den ersten angeregten Zustand wird diese Tatsache durch die Lebensdauern des ungestörten Grundzustands ausgedrückt: $\tau_0(F_0 = 0.051) = 1.487 \times 10^5$, $\tau_0(F_0 = 0.061) = 1.599 \times 10^4$, $\tau_0(F_0 = 0.071) = 7.086 \times 10^3$.

Damit erklären sich auch die großen Unterschiede zwischen den Abbildungen 3.12, 3.20 und 3.21 bei der relativen Peakhöhe. Während sich für $F_0 = 0.051$ die Lebensdauern τ_0 und τ_1 ohne zeitlich periodisches Wechselfeld um vier Größenordnungen unterscheiden, beträgt dieser Unterschied für $F_0 = 0.061$ nur drei und für $F_0 = 0.071$ nur zwei Größenordnungen. Der Einfluß der durch den periodischen Antrieb induzierten Übergänge vom Grundzustand in höher angeregte Zustände macht sich folglich für $F_0 = 0.051$ am deutlichsten bemerkbar. Dort ist die maximale Peakhöhe ungefähr $500 \Gamma_0$. Dagegen kann die Resonanzbreite des Grundzustands für den Fall $F_0 = 0.071$ höchstens um den Faktor 30 zunehmen, wie man in Abbildung 3.20 sieht. Auch der Einfluß der Bandbreite auf den Zerfall hängt von F_0 ab. Man entnimmt den Abbildungen, daß die Bandbrei-

ten für abnehmende Feldstärken F_0 zunehmend vernachlässigt werden können. Im Fall $F_0 = 0.071$ müssen zumindest für alle ganzzahligen Verhältnisse ω/ω_B die Bandbreiten berücksichtigt werden, während sie für $F_0 = 0.051$ weniger stark ins Gewicht fallen.

Damit soll die Analyse der rein numerisch gewonnenen Daten abgeschlossen werden. Es konnte gezeigt werden, daß die Bandbreiten $\Delta E_0(\omega)$ und $\Delta \Gamma_0(\omega)$ nicht stetig von der Frequenz abhängen. Vielmehr werden sie durch die Wahl des Parameters q in der Kommensurabilitätsbedingung $T = pT_\omega = q\tau_B$ bestimmt. Im Fall $q = 1$ sind sie am größten und werden mit wachsendem q immer kleiner. Für kleine Amplituden ϵ des äußeren Wechselfelds und $q = 1$ sind die Bandbreiten proportional zu ϵ . Dann kann der Fall auftreten, daß die Bandbreite $\Delta \Gamma_0$ gegenüber der mittleren Lebensdauer $\bar{\Gamma}_0$ nicht vernachlässigt werden darf. Für bestimmte Werte des Quasiimpulses κ kommt es dann zu einer deutlichen Verlängerung bzw. Verkürzung der Lebensdauer.

Die Funktionen $\bar{E}_0(\omega)$ und $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ sind im Gegensatz zu den Bandbreiten stetige Funktionen der Frequenz. In diesem Abschnitt wurden vor allem die Eigenschaften der mittleren Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ untersucht. Es wurde gezeigt, daß diese Funktion charakteristische äquidistante Peaks gleicher Breite aufweist. Aus Fermis Goldener Regel folgt, daß der Abstand der Peaks der Blochfrequenz ω_B entspricht, während die Breiten durch die Resonanzbreite Γ_1 des ersten angeregten Zustands ohne äußeren Antrieb gegeben sind. Diese charakteristische Struktur behält die Funktion auch dann bei, wenn die Parameter ϵ , \hbar und F_0 variiert werden. Durch die Variation läßt sich lediglich den Peakabstand, die Peakbreite, die Peakhöhe und die Position der Peaks ändern. Damit kann man einerseits die Erklärung der Peakstruktur mittels der Fermischen Goldenen Regel als verifiziert ansehen. Andererseits ist die Stabilität des verwendeten numerischen Algorithmus überprüft worden. Diese Überprüfung wird im folgenden Abschnitt fortgesetzt, indem mit Hilfe des hier verwendeten Formalismus experimentell gewonnene Daten reproduziert werden sollen.

3.3 Vergleich mit experimentellen Daten

In diesem Abschnitt soll das System (3.1) für die Parameter analysiert werden, die in einem Experiment [21] der Gruppe von M. G. Raizen (University of Texas, Austin/USA) verwendet wurden. Bei diesem Experiment befinden sich ultrakalte Natriumatome in einem periodischen Potential, das durch eine stehende Laserwelle erzeugt wird. Die stehende Welle wird beschleunigt und zusätzlich werden die Atome einer zeitlich periodischen Störung ausgesetzt. Das System wird also durch folgenden Hamiltonoperator beschrieben

$$H = \frac{p^2}{2M} + V_0 \cos(2k_L x) + Max + \frac{(2\pi\nu_p)^2 M \lambda}{2k_L} x \cos(2\pi\nu_p t), \quad (3.21)$$

wobei M die Masse der Atome, V_0 die Amplitude des optischen Potentials, k_L die Wellenzahl des Lasers, a die Beschleunigung, ν_p die Modulationsfrequenz und λ die dimensionslose Modulationsamplitude ist⁴.

⁴Eine genaue Beschreibung des Experimentes findet man in [21] (s. auch [22, 65]).

Skalierte Einheiten

Um diesen Hamiltonoperator untersuchen zu können, muß er zuerst in die Form (3.1) gebracht werden, d.h. man muß skalierte Einheiten verwenden und den Hamiltonoperator mittels der in Kapitel 2.1.2 beschriebenen Transformation in die Standardform überführen. Mißt man die Energie in Einheiten von V_0 und benutzt die skalierte Ortskoordinate $x' = 2k_L x$ sowie die skalierte Zeit $t' = \Omega_{ph} t$ mit $\Omega_{ph} = (8\omega_{rec} V_0/\hbar)^{1/2}$ und $\omega_{rec} = \hbar k_L^2/2M$, so ergeben sich folgende Transformationsformeln:

$$\hbar' = \sqrt{\frac{8\hbar\omega_{rec}}{V_0}}, \quad (3.22)$$

$$F_0 = \frac{Ma}{2k_L V_0}, \quad (3.23)$$

$$F_\omega = \frac{M\omega^2 \lambda}{4k_L^2 V_0} \quad \text{mit} \quad \omega = 2\pi\nu_p, \quad (3.24)$$

$$\epsilon = \frac{F_\omega}{\omega'^2} = \lambda \quad \text{mit} \quad \omega' = \frac{\omega}{\Omega_{ph}}. \quad (3.25)$$

Der Hamiltonoperator hat nun die gewünschte Form

$$H = \frac{p'^2}{2} + \cos[x' + \epsilon \cos(\omega' t')] + F_0 x', \quad (3.26)$$

wobei die Striche zur Kennzeichnung der skalierten Größen dienen. Bei der Durchführung des Experimente wurden die Parameter $\omega_{rec}/2\pi = 25.94 \text{ kHz}$, $V_0/h = 75 \pm 7 \text{ kHz}$, $a = 1570 \pm 10 \text{ m/s}^2$ und $\lambda = 0.096 \pm 0.002$ verwendet. Für das skalierte System bedeutet das $\hbar' = 1.747$, $F_0 = 0.061$ und $\epsilon = 0.096$, wobei zur Berechnung dieser Größen $V_0/h = 68 \text{ kHz}$ benutzt wurde. Spezielle für diesen Wert von V_0/h ist die Übereinstimmung zwischen numerischen und experimentellen Daten besonders gut, wie man im folgenden Abschnitt sieht.

Mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ und Überlebenswahrscheinlichkeit $P_t(\omega)$

Mit Hilfe dieser Parameter wird wiederum die mittlere Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ in Abhängigkeit von der Frequenz ω berechnet. Dabei geht man analog zu Kapitel 3.2 vor, d.h. man berechnet die Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ an den Stellen $0 < \omega/\omega_B = p/q \leq 14$ mit $p, q \in \mathbb{N}$ und $1 \leq q \leq 7$ mit Hilfe des bekannten Algorithmus, der mit $M \times M$ Matrizen arbeitet, wobei hier $M = 2N + 1 = 21$ ist. Die Anzahl der Iterationsschritte bleibt ebenfalls unverändert und beträgt $j_{\max} = 2048$.

Das Ergebnis dieser Rechnung ist in Abbildung 3.22 dargestellt. Man erkennt, daß

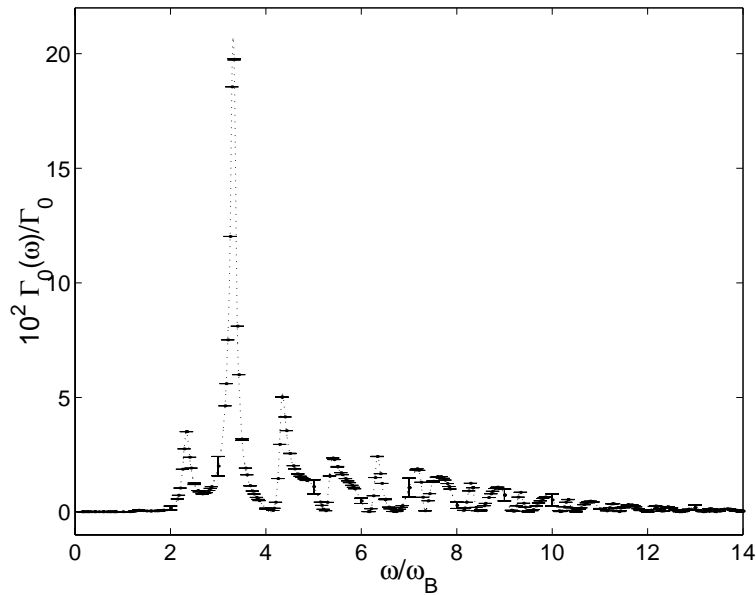


Abbildung 3.22: Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0$ als Funktion der Frequenz ω für die in Experiment [21] verwendeten Parameter. Die gepunktete Kurve interpoliert die berechneten Daten. Die „Fehlerbalken“ beschreiben die Bandbreite $\Delta\Gamma_0$.

der Zusammenhang zwischen Resonanzbreite und Frequenz für die experimentellen Parameter dem in Abbildung 3.12 dargestellten Ergebnis ähnelt (vgl. auch Abbildung 3.18 bis 3.21). Wiederum ergibt sich eine glatte Kurve, die Peaks mit äquidistantem Abstand ω_B aufweist. Es soll jedoch darauf hingewiesen werden, daß für den hier benutzten Wert von $\hbar = 1.747$ die Amplitude der Störung $\epsilon = 0.096$ nicht mehr als klein angesehen werden kann. Daher weicht die Dispersionsrelation $\mathcal{E}_0(\kappa)$ von der Kosinusform (3.5) und (3.6) ab. Ebenso gilt in diesem Bereich nicht mehr $\bar{\Gamma}_0(\epsilon) - \bar{\Gamma}_0(0) \sim \epsilon^2$.

Im Experiment wurde nicht die Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ sondern die Überlebenswahrscheinlichkeit

$$P_t(\omega) = \exp\left(-\frac{\bar{\Gamma}_0(\omega)t}{\hbar}\right) \quad (3.27)$$

gemessen. Die Bandbreiten $\Delta\Gamma_0$ können bei der Berechnung der Überlebenswahrscheinlichkeit vernachlässigt werden, denn sie sind, wie man in Abbildung 3.22 erkennt, sehr klein. Für die oben berechneten Werte $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ und eine Beobachtungszeit $t = 170\mu s$, wie sie auch im Experiment verwendet wird, ist die numerisch berechnete Funktion $P_t(\omega)$ in Abbildung 3.23 dargestellt (durchgezogene Linie). Wie man sieht, wird der experimentell bestimmte Verlauf der Überlebenswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Frequenz (Punkte) durch die numerische Rechnung gut wiedergegeben. Die Güte der Übereinstimmung ist bemerkenswert, da bei der numerischen Berechnung der Überlebenswahrscheinlichkeit keinerlei freie Fitparameter angepaßt wurden. Die einzige Möglichkeit der Anpassung der Theoriekurve an die experimentellen Daten besteht darin, die experimentellen Parameter V_0/\hbar , a und λ innerhalb der oben angegebenen Fehlerschranken

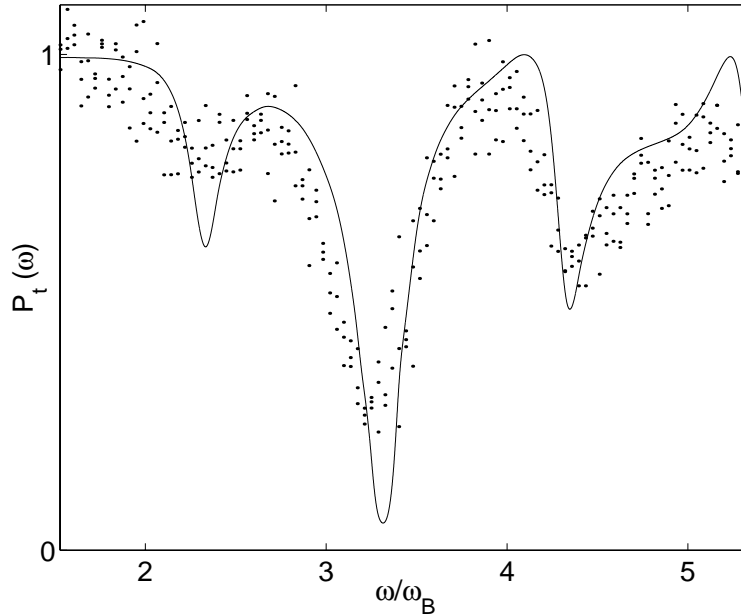


Abbildung 3.23: Überlebenswahrscheinlichkeit $P_t(\omega)$ in Abhängigkeit von der Frequenz ω für $t = 170\mu\text{s}$. In der Abbildung werden experimentelle Daten [21] (Punkte) mit numerischen Resultaten dieser Arbeit (durchgezogene Linie) verglichen.

zu variieren. Diese Ungenauigkeiten spiegeln sich auch in der Streuung der Meßwerte wider. Die drei Minima in Abbildung 3.23 entsprechen den drei ausgeprägtesten Maxima in Abbildung 3.22, denn an den Stellen, wo die Resonanzbreite $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ am größten ist, sind die Zustände am kurzlebigsten und die Überlebenswahrscheinlichkeit $P_t(\omega)$ besitzt dort ein Minimum. Die Minima sind äquidistant und ihr Abstand ist durch die Blochfrequenz ω_B gegeben. Dies folgt aus der Tatsache, daß die den Minima zugeordneten Maxima der Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ ebenfalls den Abstand ω_B besitzen. Die Resonanzbreite Γ_1 , die der Breite der Peaks in Abbildung 3.22 entspricht, läßt sich jedoch aus dem Graphen für die Überlebenswahrscheinlichkeit $P_t(\omega)$ nicht direkt ablesen.

Die experimentellen Daten bestätigen also die Anwendbarkeit des hier beschriebenen Formalismus. Andererseits können die Ergebnisse des Experiments dazu benutzt werden, bestimmte Systemparameter zu berechnen. Aus der experimentell ermittelten Überlebenswahrscheinlichkeit $P_t(\omega)$ läßt sich direkt die Blochfrequenz ω_B aus dem Abstand der Minima ablesen. Durch Umkehrung der Beziehung (3.27) kann man aus der Überlebenswahrscheinlichkeit $P_t(\omega)$ die Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ konstruieren, wenn man die zugehörige Zeit t kennt. Dann ist es nicht nur möglich die Blochfrequenz aus dem Abstand der Peaks zu bestimmen, sondern man erhält auch die Möglichkeit, die Resonanzbreite Γ_1 der Zustände der ersten angeregten Wannier–Stark–Leiter aus der Breite der Peaks zu bestimmen. Das ist bemerkenswert, denn im Experiment werden nur Messungen an Teilchen im Grundzustand und nicht an Teilchen in angeregten Zuständen durchgeführt.

Fazit

Zusammenfassend läßt sich folgendes sagen: Im ersten Abschnitt dieses Kapitels konnte gezeigt werden, daß die Dispersionsrelation der Energiebänder $\mathcal{E}_\alpha(\kappa)$, solange die Amplitude des zeitlich periodischen Wechselfeldes nicht zu groß ist, näherungsweise kosinusförmig ist. Dies wurde am Beispiel des Grundzustands und des ersten angeregten Zustands demonstriert. Im zweiten Abschnitt konnte die Struktur der Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$, also das Verhalten der mittleren Resonanzbreite des Grundzustands in Abhängigkeit von der Antriebsfrequenz, mit Hilfe der Fermischen Goldenen Regel erklärt werden: Diese Funktion zeichnet sich durch charakteristische Peaks mit äquidistantem Abstand und gleicher Breite aus. Der Abstand ist durch die Blochfrequenz ω_B , die Breite durch die Resonanzbreite Γ_1 des ersten angeregten Zustands gegeben. Die Grundstruktur der Funktion $\bar{\Gamma}_0(\omega)$ bleibt erhalten, auch wenn man verschiedene Systemparameter wie \hbar , F_0 oder ϵ ändert. Schließlich konnten im letzten Teil des Kapitels experimentelle Daten für Versuche mit neutralen Natriumatomen in stehenden Laserwellen mit Hilfe einer numerischen Simulation sehr gut reproduziert werden. Die hier verwendete Methode erweist sich somit als sehr geeignet zur Berechnung von Wannier–Stark–Resonanzen unter dem Einfluß elektrischer Wechselfelder.

Kapitel 4

Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war die Untersuchung des Verhaltens von Wannier–Stark–Leitern in elektrischen Wechselfeldern. Das spezielle Interesse galt dabei den Auswirkungen des zeitlich periodischen Antriebs auf die Lebensdauer des stabilsten Zustands. Im einzelnen wurden dabei folgende Themen behandelt:

- In Kapitel 1 wurden zeitunabhängige Stark–Systeme untersucht. Der erste Teil des Kapitels beschäftigte sich mit Blochteilchen, die einem zusätzlichen homogenen elektrischen Feld ausgesetzt sind. Blochzustände und Wannierzustände wurden eingeführt und einige ihrer Eigenschaften erläutert. Es wurde dargelegt, daß das System eines Blochteilchens in einem äußeren Gleichfeld eine intrinsische Zeitskala, die sogenannte Blochzeit, besitzt. Betrachtet man die Zeitentwicklung von Blochzuständen in einem solchen System, so stellt sich heraus, daß sie zu Zeitpunkten, die Vielfache der Blochzeit sind, ihren ursprünglichen Quasiimpuls wiedererlangen. Daher kann man die sogenannten Floquet–Bloch–Operatoren definieren und die Dynamik des betrachteten Hamiltonoperators mit Floquet–Bloch–Zuständen beschreiben. Im zweiten Teil des Kapitels wurde die Streutheorie für Stark–Systeme im zeitunabhängigen Fall behandelt. Dabei wurde ein effizientes Verfahren entwickelt, mit dessen Hilfe man die Pole der S–Matrix und damit auch die Energieeigenwerte des Systems bestimmen kann. Dazu wurde zunächst über die Asymptotik der Wellenfunktionen im Impulsraum die S–Matrix definiert. Anschließend wurde unter Verwendung von Floquet–Bloch–Zuständen eine alternative Definition formuliert. Mit Hilfe dieser Darstellung entstand ein Algorithmus zur Berechnung der Pole der S–Matrix, dessen Effizienz durch eine numerische Beispielrechnung unter Beweis gestellt wurde.
- In Kapitel 2 wurden zeitabhängige Stark–Systeme behandelt. Die Ergebnisse der ersten Kapitels konnten auf den zeitabhängigen Fall ausgedehnt werden. Zunächst wurde gezeigt, daß man den Hamiltonoperator, wenn die äußeren Felder zeitlich periodisch sind, in die sogenannte Standardform transformieren kann. Durch diese Transformation erhält man einen äquivalenten Hamiltonoperator mit zeitlich

konstantem äußerem Feld. Anschließend wurden die Floquet–Operatoren der beiden äquivalenten Systeme untersucht. Diese beiden Operatoren besitzen das gleiche Spektrum. Man kann daher je nach Problemstellung die geeignetere Darstellung wählen. Im zweiten Teil des Kapitels wurden die Eigenschaften der Floquet–Bloch–Operatoren untersucht, die anschließend für die Formulierung der Streutheorie benötigt wurden. Die Vorgehensweise war dabei analog zum zeitunabhängigen Fall. Man muß jedoch beachten, daß die zeitabhängigen Systeme neben der Blochzeit noch eine zweite Zeitskala, nämlich die Periodendauer des Potentials, besitzen. Nur wenn diese beiden Größen kommensurabel sind, läßt sich der Formalismus für zeitunabhängige Systeme auch auf zeitabhängige Systeme ausweiten.

- In Kapitel 3 wurden numerische Anwendungen der Ergebnisse der beiden ersten Kapitel präsentiert. Das untersuchte System war dabei stets ein Teilchen in einem periodischen Potential mit zusätzlichem äußerem Stark–Feld und einem zeitlich periodischen Antrieb. Im ersten Teil des Kapitels wurde die Struktur des Quasienergiespektrums, also die Quasienergie als Funktion des Quasiimpulses, untersucht. Dabei wurde bestätigt, daß die Dispersionsrelation der Energiebänder, zumindest bei einem äußeren Antrieb mit kleiner Amplitude, kosinusförmig ist. Der zweite Teil des Kapitels widmete sich der Abhängigkeit der Quasienergie von der Frequenz des elektrischen Wechselfelds. Dabei wurde vor allem untersucht, wie sich die Lebensdauer des Grundzustands verhält. Der Graph der Resonanzbreite des Grundzustands als Funktion der Frequenz weist charakteristische äquidistante Peaks gleicher Breite auf. Mit Hilfe von Fermis Goldener Regel wurde erklärt, daß diese Peaks durch induzierte Übergänge vom Grundzustand in höher angeregte Zustände der Wannier–Stark–Leiter zustandekommen. Näherungsweise wurde dabei nur der erste angeregte Zustand als relevant angenommen. Der Abstand der Peaks ist durch die Blochfrequenz, die Breite der Peaks durch die Resonanzbreite des „ungestörten“ ersten angeregten Zustands gegeben. Die Höhe der Peaks, also die Verbreiterung der Resonanzen, ist proportional zum Quadrat der Amplitude des äußeren Antriebs, solange diese Amplitude genügend klein im Vergleich zur Feldstärke des Gleichfelds ist. Abschließend wurde mit Hilfe experimenteller Daten die Anwendbarkeit des in dieser Arbeit verwendeten Formalismus bestätigt. Dazu wurde versucht, die Ergebnisse eines Experiments mit neutralen Atomen in stehenden Laserwellen durch numerische Simulationen zu reproduzieren. Dabei wurde eine sehr gute Übereinstimmung zwischen numerischen und experimentellen Resultaten für die Überlebenswahrscheinlichkeit des Grundzustands in Abhängigkeit von der Antriebsfrequenz gefunden.

Im Rahmen dieser Arbeit konnte nur ein Teilaspekt des Themengebietes “Wannier–Stark–Leitern“ behandelt werden. Es gibt für dieses System immer noch eine Fülle offener Fragen und neuer Erkenntnisse, was sich auch in der Anzahl der diesbezüglichen Veröffentlichungen zeigt. Ausgehend von den Ergebnissen dieser Arbeit wurde bereits gezeigt, wie sich das Verhalten der Überlebenswahrscheinlichkeit des Grundzustands noch genauer beschreiben läßt, indem man Übergänge in höher angeregte Zustände mitberücksichtigt [35]. In aktuellen Experimenten [65] werden Wannier–Stark–Leitern unter

dem Einfluß zweier äußerer Wechselfelder betrachtet. Dabei ist eines der beiden Felder als stark, das andere als schwach anzusehen. Die Ausweitung des hier beschriebenen Formalismus auf diese Situation steht noch aus, sollte jedoch einfach durchzuführen sein. Außerdem waren bisher ausschließlich eindimensionale Systeme Gegenstand der Untersuchung. Daher sollte zukünftig auch die Betrachtung mehrdimensionaler Systeme angestrebt werden, da hierdurch neue Erkenntnisse zu erwarten sind.

Anhang A

Numerik

A.1 MATLAB–Programme

Hier sind die Programme aufgelistet, mit deren Hilfe die numerischen Berechnungen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden. Sie realisieren das in Kapitel 1.2 hergeleitete Verfahren, das es ermöglicht, die Pole der S–Matrix zu bestimmen, indem man die Eigenwerte der Matrix B_N berechnet. Die Programme wurden alle unter MATLAB programmiert, denn diese Software ermöglicht es, mit relativ geringem Programmieraufwand komplizierte Matrixoperationen durchzuführen.

A.1.1 Zeitunabhängige Stark–Systeme

Dieses Programm (`resonanz.m`) ist weitestgehend [25] entnommen. Mit seiner Hilfe lassen sich die Resonanzenergien des zeitunabhängigen Hamiltonoperators

$$H = \frac{p^2}{2} + \cos(x) + Fx \quad (\text{A.1})$$

berechnen.

```
% ***** resonanz.m *****  
f = 0.07;      % Feldstaerke  
hbar = 1.0;  
J = 100;      % Iterationsschritte  
N = 15;      % Matrixgroesse  
    M = 2*N+1;  
    n = 1:M;  
    p = hbar*(n-N-1);  
    U = eye(M);  
    d = 0.5*ones(1,M-1);  
    for j = 1:J      % Schleife zur Berechnung der Zeitentwicklungsmatrix
```

```

        h = (p-hbar*(j-0.5)/J).^2/2;
        U = expm(-i*(diag(h,0)+diag(d,-1)+diag(d,1))/J/f)*U;
    end
S = spdiags(ones(M,1),1,M,M);
D = eig(S*U);
D(length(D)) = [];
D = i*log(D);
[a,In] = sort(-imag(D));
E = D(In)*f    % Resonanzenergien nach zunehmendem Imaginaerteil sortiert

```

A.1.2 Berechnung der Dispersionsrelation $\mathcal{E}_0(\kappa)$

Das Programm `state.m` berechnet die Dispersionsrelation für das System

$$H = \frac{p^2}{2} + \cos[x + \epsilon \cos(\omega t)] + Fx. \quad (\text{A.2})$$

Es greift dabei auf die Funktion `matrix.m` zurück, die die Zeitevolutionsmatrix \tilde{U} in der Basis der ebenen Wellen $\langle x|n + \kappa \rangle$ berechnet. Setzt man $\epsilon = 0$, so ist dieses Programm auch für zeitunabhängige Stark-Systeme geeignet. Weil in diesem Fall die Quasienergie unabhängig vom Blochindex ist, sollte es dann für jedes κ das gleiche Ergebnis wie das Programm `resonanz.m` aus Anhang A.1.1 liefern.

```

% ***** state.m (benoetigt die Funktion matrix.m) *****
clear
global hbar om f v NN M tmax;
hbar = 2.0;
f = 0.061;    % Feldstaerke
r = 1;
q = 1;
v = 0.08;    % epsilon
om = 2*pi*r*f/hbar/q;    % omega = omega_B * r/q
NN = 11;
M = q;
tmax = 1024;    % Iterationsschritte
nkmax = 50;    % Anzahl der betrachteten Quasiimpulse

N = 2*NN-1;    % Matrixgroesse
nN = (N+M):-1:1;
dk = 1.0/nkmax;
EE = zeros(nkmax+1,N+M);
EP = EE;
z = zeros(N,M);

```

```

b = [diag(ones(M,1));z];
N = N+1;

%***** Berechnung der Zeitevolutionsmatrix *****
for nk = 1:nkmax+1;
    k = dk*(nk-1)-0.5;
    U = matrix(k);          % Zugriff auf Funktion matrix.m
    U = [z' zeros(M,M); U z];
    d = eig(U);            % Berechnung der Eigenwerte von B_N
    [s,sN] = sort(abs(d));
    d(nN) = d(sN);
    EE(nk,:) = -angle(d)';
    EP(nk,:) = abs(d)';
end
%*****

gamma = -2*log(EP(:,1))/M*f;      % Breite des Grundzustands
E = EE(:,1)/M*f;                % Energie des Grundzustands

% ***** Funktion matrix.m *****
function U = matrix(k)
global hbar om f v NN M tmax;
dt = M*hbar/f/tmax;
N = 2*NN-1;
p = hbar*(NN-[1:N]+1)';
U = eye(N);
h = zeros(N,3);

for t = 1:tmax          % Schleife zur Berechnung der Zeitevolutionsmatrix
time = dt*(t-0.5);
h(:,2) = (p+hbar*k-f*time).^2/2;
wc = exp(i*v*cos(om*time));
h(2:N,3) = 0.5*conj(wc);
h(1:N-1,1) = 0.5*wc;
H = spdiags(h,[-1 0 1],N,N);
U = expm(-i*dt*full(H)/hbar)*U;
end

```

A.1.3 Frequenzabhängigkeit der Quasienergie

Das Programm `state1.m` ist eine modifizierte Version von `state.m` (vgl. Anhang A.1.2), das ebenfalls auf die Funktion `matrix.m` zugreift. Mit seiner Hilfe kann man für das Sys-

tem (A.2) die Funktionen $\bar{E}_0(\omega)$ und $\bar{\Gamma}_0(\omega)$, d.h. die mittlere Bandenergie und die mittlere Resonanzbreite als Funktion der Frequenz, berechnen.

```
% ***** state1.m (benoetigt die Funktion matrix.m) *****
clear
global hbar om f v NN M tmax;
hbar = 2.0;
f = 0.061;      % Feldstaerke
v = 0.08;      % epsilon
q = 1;

for r = 1:q*14;
om = 2*pi*r*f/hbar/q;      % omega = omega_B * r/q
NN = 11;
M = q;
tmax = 2048;      % Iterationsschritte
nkmax = 2*r;

N = 2*NN-1;      % Matrixgroesse
nN = (N+M):-1:1;
dk = 1.0/nkmax;
EE = zeros(nkmax+1,N+M);
EP = EE;
z = zeros(N,M);
b = [diag(ones(M,1));z];
N = N+1;

if gcd(r,q)==1 index = 2;
elseif gcd(r,q)==q index = q+1;
else for suche = 1:floor(q/2);
if (mod(r,q)==suche | mod(r,q)==(q-suche)) index = suche+1; end;
end;
end;

%***** Berechnung der Zeitevolutionsmatrix *****
for nk = 1:index;
if (nk==1 | nk==index)
k = dk*(nk-1)-0.5;
U = matrix(k);      % Zugriff auf Funktion matrix.m
U = [z' zeros(M,M); U z];
d = eig(U);      % Berechnung der Eigenwerte von B_N
[s,sN] = sort(abs(d));
d(nN) = d(sN);
EE(nk,:) = -angle(d)';
EP(nk,:) = abs(d)';
end;
end;
```



```
end;
end
%*****
gamma1 = -2*log(EP(:,1))/M*f;      % Grundzustand
gamma2 = -2*log(EP(:,2))/M*f;      % erster angeregter Zustand

E1 = EE(:,1)/M*f;      % Grundzustand
E2 = EE(:,2)/M*f;      % erster angeregter Zustand

end;

% ***** Funktion matrix.m *****
function U = matrix(k)
global hbar om f v NN M tmax;
dt = M*hbar/f/tmax;
N = 2*NN-1;
p = hbar*(NN-[1:N]+1)';
U = eye(N);
h = zeros(N,3);

for t = 1:tmax      % Schleife zur Berechnung der Zeitevolutionsmatrix
time = dt*(t-0.5);
h(:,2) = (p+hbar*k-f*time).^2/2;
wc = exp(i*v*cos(om*time));
h(2:N,3) = 0.5*conj(wc);
h(1:N-1,1) = 0.5*wc;
H = spdiags(h,[-1 0 1],N,N);
U = expm(-i*dt*full(H)/hbar)*U;
end
```


Literaturverzeichnis

- [1] F. Bloch, *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Z. Phys **52** (1928) 555
- [2] G. H. Wannier, *Wave Functions and Effective Hamiltonian for Bloch Electrons in an Electric field*, Phys. Rev. **117** (1960) 432
- [3] J. B. Krieger and G. J. Iafrate, *Time Evolution of Bloch Electrons in a Homogeneous Electric Field*, Phys. Rev. B **33** (1986) 5494
- [4] G. Nenciu, *Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields: rigorous justification of the effective Hamiltonians*, Rev. Mod. Phys. **63** (1991) 91
- [5] C. Zener, *A Theory of Electrical Breakdown of Solid Dielectrics*, Proc. Roy. Soc. Lond. A **145** (1934) 523
- [6] J. Zak, *Stark Ladder in Solids?*, Phys. Rev. Lett. **20** (1968) 1477
- [7] J. Zak, *Comment on "Time evolution of Bloch electrons in a homogeneous electric field"*, Phys. Rev. B **38** (1988) 6322
- [8] D. Emin and C. F. Hart, *Existence of Wannier-Stark Localization*, Phys. Rev. B **36** (1987) 7353
- [9] L. Kleinman, *Comment on "Existence of Wannier-Stark localization"*, Phys. Rev. B **41** (1990) 3857
- [10] J. E. Avron, *The Lifetime of Wannier Ladder States*, Ann. Phys. (N.Y.) **143** (1982) 33
- [11] R. W. Koss and L. M. Lambert, Phys. Rev. B **5** (1972) 1479
- [12] E. E. Mendez, F. Agullo-Rueda, and J. M. Hong, *Stark Localizations in GaAs-GaAlAs Superlattices under an Electric field*, Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 2426
- [13] P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gaillard, C. Alibert, and A. Regreny, *Observation of the Wannier-Stark quantization in a semiconductor superlattice*, Phys. Rev. Lett. **61** (1988) 1639

- [14] J. Feldmann, K. Leo, J. Shah, B. A. B. Miller, J. E. Cunningham, T. Meier, G. von Plessen, A. Schulze, P. Thomas, and S. Schmitt-Rink, *Optical Investigation of Bloch Oscillations in a Semiconductor Superlattice*, Phys. Rev. B **46** (1992) 7252
- [15] G. von Plessen and P. Thomas, *Method for Observing Bloch Oscillations in the Time Domain*, Phys. Rev. B **45** (1992) 9185
- [16] K. Leo, P. H. Bolivar, F. Brüggemann, R. Schwedler, and K. Köhler, *Observation of Bloch Oscillations in a Semiconductor Superlattice*, Solid State Comm. **84** (1992) 943
- [17] E. E. Mendez and G. Bastard, *Wannier-Stark Ladders and Bloch Oscillations in Superlattices*, Physics Today **46(6)** (1993) 34
- [18] P. Leisching, P. H. Bolivar, W. Beck, Y. Dhaibi, F. Brüggemann, R. Schwedler, H. Kurz, K. Leo, and K. Köhler, *Bloch Oscillations of Excitonic Wave Packets in Semiconductor Superlattices*, Phys. Rev. B **50** (1994) 14389
- [19] K. Leo, *Interband Optical Investigation of Bloch Oscillations in Semiconductor Superlattices*, Semicond. Sci. Technol. **13** (1998) 249
- [20] M. B. Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin, and C. Salomon, *Bloch Oscillations of Atoms in an Optical Potential*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 4508
- [21] S. R. Wilkinson, C. F. Bharucha, K. W. Madison, Qian Niu, and M. G. Raizen, *Observation of Atomic Wannier-Stark Ladders in an Accelerating Optical Potential*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 4512
- [22] Qian Niu, Xian-Geng Zhao, G. A. Georgakis, and M. G. Raizen, *Atomic Landau-Zener Tunneling and Wannier-Stark ladders in Optical Potentials*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 4504
- [23] M. G. Raizen, C. Salomon, and Qian Niu, *New light on quantum transport*, Physics Today July (1997) 30
- [24] M. Glück, A. R. Kolovsky, H. J. Korsch, and N. Moiseyev, *Calculation of Wannier-Bloch and Wannier-Stark states*, Eur. Phys. J. D **4** (1998) 239
- [25] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *A truncated shift-operator technique for the calculation of resonances in Stark systems*, J. Phys. A **32** (1999) L49
- [26] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Chaotic Wannier-Bloch resonance states*, Phys. Rev. E **58** (1998) 6835
- [27] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Bloch particle in presence of dc and ac fields*, Phys. Lett. A **249** (1998) 483
- [28] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Bloch particle in presence of dc and ac fields: Statistics of the Wigner delay time*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 1534

- [29] N. Moiseyev, M. Glück, and H. J. Korsch, *Stark resonances in dc fields from short time propagation of the field-free Hamiltonian*, Chem. Phys. Lett. **303** (1999) 22
- [30] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Lifetime statistics for a Bloch particle in ac and dc fields*, Phys. Rev. E **60** (1999) 247
- [31] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Lifetime of Wannier-Stark states*, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 891
- [32] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Perturbation theory for Wannier resonance states affected by ac-field*, Phys. Lett. A **258** (1999) 383
- [33] M. Glück, M. Hankel, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Wannier-Stark Ladders in Driven Optical Lattices*, Phys. Rev. A **xxx** (2000) xxx, submitted
- [34] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *About universality of lifetime statistics in quantum chaotic scattering*, Physica E **xxx** (2000) xxx, submitted
- [35] M. Glück, M. Hankel, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Induced transitions between Wannier ladders*, Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics (2000)
- [36] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Fractal stabilization of Wannier-Stark resonances*, Europhys. Lett. (2000)
- [37] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Resonant tunneling of Wannier-Stark-states*, Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics (2000)
- [38] M. Grifoni and P. Hänggi, *Driven quantum tunneling*, Phys. Rep. **304** (1998) 229
- [39] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer, New York, 1990
- [40] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, Springer, New York, 1991
- [41] M. Glück, *Dissertation (in Vorbereitung)*, Universität Kaiserslautern, 2000
- [42] W. V. Houston, *Acceleration of Electrons in a Crystal lattice*, Phys. Rev. **57** (1940) 184
- [43] J. E. Avron, J. Zak, A. Grossmann, and L. Gunther, *Instability of the continuous spectrum: The N-band Stark ladder*, J. Math. Phys. **18** (1977) 918
- [44] W. Kohn, *Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions*, Phys. Rev. **115** (1959) 809
- [45] W. Kohn, *Construction of Wannier Functions and Applications to Energy Bands*, Phys. Rev. B **7** (1972) 4388
- [46] G. Nenciu, *Existence of the Exponentially Localized Wannier Functions*, Com. Math. Phys. **91** (1983) 81

- [47] J. Zak, *Quasienergy states for a Bloch electron in a constant electric field*, J.Phys. Cond. Mat. **8** (1996) 8295
- [48] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, Inc., New York, New York, 1972
- [49] H. A. Kramers, in R. Stoops, editor, *Les Particules Élémentaires, Proceedings of the Eighth Solvay Conference*, New York, 1950. Wiley
- [50] H.A.Kramers, *Collected Scientific Papers*, North-Holland, Amsterdam, 1956
- [51] W. C. Henneberger, *Perturbation Method for Atoms in Intense Light Beams*, Phys. Rev. Lett. **21** (1968) 838
- [52] C. K. Choi, W. C. Henneberger, and F. C. Sanders, *Intensity-dependent Ionization Potentials for H and He in Intense Laser Beams*, Phys. Rev. A **9** (1974) 1895
- [53] J. Zak, *Finite Translations in Time and Energy*, Phys. Rev. Lett. **71** (1993) 2623
- [54] H. Fukuyama, R. A. Bari, and H. C. Fogedby, *Tightly Bound Electrons in a Uniform Electric Field*, Phys. Rev. B **8** (1973) 5579
- [55] D. H. Dunlap and V. M. Kenkre, *Dynamic localization of a charges particle moving under the influence of an electric field*, Phys. Rev. B **34** (1986) 3625
- [56] X.-G. Zhao, R. Jahnke, and Q. Niu, *Dynamic Fractional Stark Ladders in dc-ac Fields*, Phys. Lett. A **202** (1995) 297
- [57] M. Holthaus, G. H. Ristow, and D. W. Hone, *ac-Field-Controlled Anderson Localization in Disordered Semiconductor Superlattices*, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 3914
- [58] K. Drese and M. Holthaus, *Exploring a Metal-Insulator Transition with Ultracold Atoms in Standing Light Waves?*, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 2932
- [59] J. Rotvig, A.-P. Jauho, and H. Smith, *Bloch Oscillations, Zener Tunneling and Wannier-Stark Ladders in the Time Domain*, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 1831
- [60] D. W. Hone and X.-G. Zhao, *Time-periodic behaviour of multiband superlattices in static electric fields*, Phys. Rev. B **53** (1997) 4834
- [61] X.-G. Zhao, G. A. Georgakis, and Q. Niu, *Rabi oscillations between Bloch bands*, Phys. Rev. B **54** (1996) R5235
- [62] X.-G. Zhao, W.-X. Yan, and D. W. Hone, *Zener transitions between dissipative Bloch bands*, Phys. Rev. B **57** (1998) 9849
- [63] W.X. Yan, X.-G. Zhao, and S.-Q. Bao, *Dynamics of two-band semiconductor superlattices driven by static and time-dependent fields*, Physica B **252** (1998) 63

-
- [64] V. Dolcher, G. Grosso, L. Martinelli, and G. P. Parravicini, *Modified Lanczos procedure for Wannier-Stark resonances in solids*, Phys. Rev. B **53** (1996) 10813
- [65] K. W. Madison, M. C. Fischer, and M. G. Raizen, *Observation of the Wannier-Stark Fan and the Fractional Ladder in an Accelerating Optical Lattice*, Phys. Rev. A **60** (1999) R1767

Danksagung

Folgenden Personen möchte ich zum Abschluß dafür danken, daß sie mich bei der Erstellung dieser Arbeit unterstützt haben:

Herrn Prof. Dr. H. J. Korsch, Herrn Prof. Dr. A. R. Kolovsky, Herrn Markus Glück, Herrn Christian Hebell, Herrn Frank Keck und Herrn Bernd Schellhaaß.

Jeder hat durch seine Anregungen und Hinweise einen spezifischen Anteil am Zustandekommen dieser Arbeit.

Mein ganz besonderer Dank gilt meinen Eltern für die Unterstützung, die sie mir während meines Studiums zuteil werden ließen.