

Resonanzstrukturen in Wannier–Stark Systemen

Diplomarbeit von

Frank E. Zimmer

Durchgeführt am
Fachbereich Physik
der Universität Kaiserslautern

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

22. Januar 2002

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1 Grundlagen	5
1.1 Periodische Strukturen im feldfreien Fall	5
1.1.1 Bloch-Zustände	5
1.1.2 Wannier-Zustände	6
1.2 Der Feld-Fall	7
1.2.1 Floquet-Bloch-Operator	7
1.2.2 Streutheorie in Stark-Systemen	8
1.2.3 Landau-Zener-Theorie	11
2 Resonanzstrukturen in Stark-Systemen	15
2.1 Resonanzenergie für konstante Feldstärke	15
2.1.1 Das Rechteck-Potential	15
2.1.2 Variation der Anzahl der Fourierkomponenten	16
2.2 Resonanzenergie als Funktion der Feldstärke	20
2.2.1 Das Kosinus-Potential	21
2.2.2 Das Rechteck-Potential	25
2.2.3 Betrachtung spezieller Potentiale	31
2.2.4 Zusammenfassung	38
3 Matrixmodell von Wannier-Stark-Leitern	39
3.1 System zweier koppelnder Wannier-Stark-Leitern	39
3.2 Kopplung von mehr als zwei WS-Leitern	44
3.3 Kritische Kopplung zweier WS-Leitern	47
3.4 Vergleich des Matrixmodelles mit den numerischen Berechnungen	47
3.5 Zusammenfassung	52

4	Absorbtiionsspektren in Halbleiter-Übergittern	53
4.1	Einführung	53
4.2	Herleitung der Absorptionsdichte	53
4.3	Numerische Untersuchung	55
4.3.1	Variation der Potentialparameter	57
4.3.2	Absorptionspektren	58
4.4	Zusammenfassung	59
	Zusammenfassung	61
	Anhang	62
A	Programme zu Kap. 3.4	63
A.1	Simulated-Annealing-Algorithmus	63
A.2	Matrixmodell für vier Wannier-Stark-Leitern	65
B	Skalierte Einheiten	69
	Literaturverzeichnis	71

**Kein Ziel ist es wert erreicht zu werden,
ohne es mit jemanden teilen zu können.**

unbekannter Autor

Einleitung

Im Jahre 1970 wurde erstmals von Esaki¹ und Tsu [Esa70] vorgeschlagen, mittels epitaktischer Verfahren, d. h. durch das periodische Aufwachsen von verschiedenen Halbleitermaterialien, wie z. B. *GaAs*, *GaInAs*, etc., Übergitterstrukturen (engl. *superlattices*) herzustellen. Diese Schichtenfolge führt dazu, dass die Elektronen in dieser Struktur einem periodischen Potential ausgesetzt sind. Dies gilt für einen kristallinen Festkörper aufgrund seiner regelmäßigen Anordnung der Konstituentenatome natürlich auch, jedoch ist die Periode des Übergitterpotentials wesentlich größer (Übergitter $\sim 10\text{ nm}$, Halbleiter $\sim 0.1\text{ nm}$) und deren Größe insbesondere kontrollierbar. Wie wir im Laufe der Arbeit sehen werden, definiert die Periode des Gitters eine charakteristische Zeitskala (Übergitter $\sim 400\text{ fs}$, Halbleiter $\sim 40\text{ ps}$ für die Feldstärke $E = 10\text{ kV/cm}$) des Systems, die Blochzeit. Je nach Größe der Blochzeit ändert sich die Möglichkeit der Beobachtung der hiermit verbundenen Effekte. Analog zu natürlichen Halbleitern, bilden sich in Halbleiter-Übergittern ebenfalls eine Bandstrukturen aus, deren Form durch das künstliche Wachstum kontrolliert werden kann.

Legt man die beiden Enden des Übergitters bzgl. der Schichtwachstumsrichtung auf ein unterschiedliches Potential so bildet sich im Inneren der periodischen Struktur ein Gleichfeld aus. Die Elektronen in dieser Anordnung können näherungsweise durch den eindimensionalen Hamiltonoperator

$$H' = \frac{p^2}{2m} + V(x) + eEx \quad \text{mit} \quad V(x) = V(x + d) \quad (1)$$

beschrieben werden, wobei d die Periodenlänge des Übergitterpotentials ist. Systeme, die man durch einen solchen Hamiltonoperator beschreiben kann, werden *Wannier-Stark-Systeme* (*WS-Systeme*) genannt. Diese stellen das Bindeglied zwischen Systemen mit reinem periodischen Potential $H = p^2/2m + V(x)$ und reinen Streusystemen dar. Man spricht hier von Streusystemen, da der Hamiltonoperator $H = p^2/2m + eEx$ keine gebundenen Zustände besitzt, denn alle betrachteten Zustände (je nach Vorzeichen der Ladung e) zerfallen in Richtung $x \rightarrow -\infty$.

Betrachtet man höherdimensionale Systeme, so ist der Massenterm m in (1) eine tensorielle Größe, die vom Quasiimpuls abhängt. In dieser Arbeit soll diese Eigenschaft durch eine konstante effektive Masse genähert werden.

¹geb. 1925, hat 1973 den Nobelpreis als Anerkennung für seine Pionierarbeiten im Bereich der Tunnelphänomene in Festkörpern bekommen (*Tunnelodiode*) und war bei der Entwicklung der Übergitterstrukturen ausschlaggebend beteiligt

Um die Zahl der freien Parameter zu reduzieren und um die verschiedenen experimentellen Realisierungen des obigen Hamiltonoperators in einem gemeinsamen Rahmen beschreiben zu können, werden im weiteren skalierte Einheiten benutzt. Der Übergang von natürlichen zu skalierten Einheiten wird in Anhang B beschrieben und führt auf den Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x) + Fx \quad \text{mit} \quad V(x) = V(x + 2\pi). \quad (2)$$

Der betrachtete Hamiltonoperator (2) konnte experimentell nicht nur in Halbleiter-Übergittern, sondern noch in weiteren Bereichen realisiert werden. In Wellenleiterstrukturen konnte dies durch eine periodische Variation des Brechungsindex erreicht werden. Der lineare Term des Hamiltonoperators wurde ebenfalls durch die Anpassung des Brechungsindex gegeben. Eine weitere experimentelle Realisierung findet man bei der Untersuchung kalter Atome in optischen Gittern. Dieses System wurde ausführlich in früheren Arbeiten unserer Gruppe [Glü00a, Han00] untersucht.

Der Hamiltonoperator (2) steht schon seit den zwanziger Jahren des letzten Jahrhunderts im Blickpunkt wissenschaftlicher Untersuchungen und ist mit Begriffen wie Bloch-Oszillation [Blo28], Landau-Zener-Tunneln [Zen34] und Wannier-Stark-Leitern [Wan60] verbunden. Das äußere Feld F von (2) zerstört die Translationssymmetrie des feldfreien Hamiltonoperators

$$H_0 = \frac{p^2}{2} + V(x), \quad (3)$$

dennoch erhält man durch eine kombinierte Symmetrieoperation bzgl. Translation eines beliebigen Eigenzustandes $H\Psi = E\Psi$ über n Perioden 2π und eine Energieverschiebung um $n2\pi F$ eine Leiter von Eigenzuständen (vgl. Abb. 1) mit Energien

$$E_n = E + n2\pi F, \quad (4)$$

die sogenannten *Wannier-Stark-Leiter* (*WS-Leiter*).

Jede Superposition von solchen Eigenzuständen zu unterschiedlichen WS-Leitern hat eine periodische Zeitentwicklung mit der Frequenz $\omega_B = 2\pi F/\hbar$. Dies ist die sogenannte Bloch-Oszillation. Über mehrere Jahrzehnte wurde über die Existenz und Natur der WS-Leitern und Bloch-Oszillation gestritten [Kri86, Nen91, Bou95, Ros98]. Erst in den letzten Jahren kam man zu dem im Folgenden dargestellten abschließenden Ergebnis.

Aus heutiger Sicht wurde diese Diskussion hauptsächlich über die *Single Band Approximation* geführt. Das Landau-Zener-Tunneln koppelt aber die Bänder und wird in der Single Band Approximation vernachlässigt. Bei glatten Potentialen $V(x)$ nimmt die Bandlücke schnell mit wachsendem Bandindex ab. Da die Tunnelwahrscheinlichkeit mit kleiner werdender Bandlücke zunimmt, tunneln die Blochzustände in höhere Bänder. Die Grundzustandspopulation zerfällt also mit der Zeit. Dies zeigt, dass das diskrete Spektrum E_n nur eine Näherung sein kann.

Zak und Avron [Avr77] konnten zeigen, dass das reelle Spektrum von (2) kontinuierlich ist, und außerdem wurde bewiesen, dass WS-Leitern aus Resonanzen existieren,

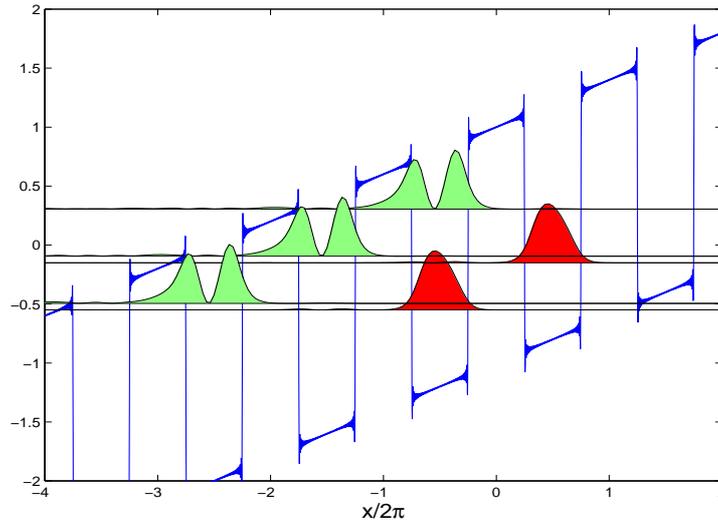


Abbildung 1: Wannier–Stark–Leitern des Grund- und ersten angeregten Zustandes in einem periodischen Rechteckpotential.

d. h. instabile Zustände, mit den komplexen Eigenwerten

$$\mathcal{E}_{\alpha,n} = E_{\alpha,n} + 2\pi F n - i \frac{\Gamma_{\alpha}}{2} \quad (5)$$

bilden. Hierbei gibt α die Abhängigkeit vom Bandindex an. Die analytische Berechnung dieser Eigenwerte führt auf unüberwindbare Schwierigkeiten. Numerische Methoden, die es auch erlauben die Imaginärteile der Resonanzenergien zu berechnen, gab es ebenfalls nicht. Vor kurzem wurde in unserer Gruppe ein Verfahren entwickelt, um die Resonanzenergien des betrachtete Systems numerisch zu bestimmen. Dieses Verfahren soll in dieser Arbeit angewendet werden, um insbesondere die Phänomene in Halbleiter–Übergittern zu simulieren

Zu dieser Arbeit

Die Arbeit gliedert sich wie folgt:

- Das erste, einführende Kapitel erläutert die zum späteren Verständnis notwendigen Begriffe. Insbesondere erklärt es die im Rahmen der Arbeit benutzte Streutheorie in Starksystemen.
- Das zweite Kapitel wendet diese Streutheorie auf ein Kastenpotential im konstanten elektrischen Feld an. Die erhaltenen Resonanzstrukturen, d. h. die Resonanzenergien als Funktion der Feldstärke, werden mit den Bändern des Blochspektrums verglichen und Gemeinsamkeiten aufgezeigt.

-
- Das dritte Kapitel gibt eine Einführung in ein Matrixmodell zur Beschreibung der betrachteten Wannier–Stark–Leitern. Dieses Modell wird dazu benutzt, Effekte, die im zweiten Abschnitt bei der numerischen Untersuchung aufgetreten sind, zu erläutern. Es wird außerdem ein Algorithmus vorgestellt, der es erlaubt, das Matrixmodell an die numerischen Ergebnisse des letzten Kapitels zu fitten.
 - Das letzte Kapitel befasst sich mit Absorptionsspektren von Halbleiter–Übergittern. Es wird eine Herleitung einer Formel zur Berechnung von Absorptionsspektren gegeben und diese im Rahmen von Halbleiter–Übergittern angewandt. Die Ergebnisse werden mit experimentellen Werten verglichen.

Kapitel 1

Grundlagen

1.1 Periodische Strukturen im feldfreien Fall

In diesem Kapitel werden zunächst Begriffe eingeführt, die in dieser Arbeit gebraucht werden. Als erstes wird der feldfreie Fall betrachtet und die dazu gehörenden Begriffe, wie Bloch-Zustand und Wannier-Zustand geklärt werden. Als nächstes wird die Streutheorie in Stark-Systemen erläutert und die im Feld-Fall benutzt Begriffe der Blochzeit und des Floquet-Bloch-Operators definiert. Die Streutheorie wird dann später benutzt, um die Resonanzenergie des Systems zu berechnen. Der letzte Abschnitt gibt kurz eine Einführung in die Landau-Zener-Theorie.

1.1.1 Bloch-Zustände

Bloch-Zustände sind Eigenzustände des feldfreien Hamiltonoperators

$$H_0 = \frac{p^2}{2} + V(x) \quad \text{mit} \quad V(x + 2\pi) = V(x) \quad (1.1)$$

d. h. für sie gilt die Eigenwertgleichung

$$H_0 \phi_{l,k} = \epsilon_l(k) \phi_{l,k}. \quad (1.2)$$

Hierbei gibt $l \in \mathbb{N}$ das betrachtete Bloch-Band und k den Quasiimpuls des betrachteten Bloch-Zustandes an. Nach dem Blochschen Theorem [Kit70, Blo28] lassen sich die Eigenfunktionen darstellen durch

$$\phi_{l,k}(x) = \exp(ikx) u_{l,k}(x), \quad (1.3)$$

wobei die $u_{l,k}(x)$ die Periodizität des periodischen Potentials wiedergeben, d. h. es gilt

$$u_{l,k}(x) = u_{l,k}(x + 2\pi). \quad (1.4)$$

Glg. (1.3) stellt eine Eichtransformation des Hamiltonoperators H_0 dar und führt diesen über in

$$H_0^{(k)} = \frac{(p + \hbar k)^2}{2} + V(x). \quad (1.5)$$

Die sich ebenfalls daraus ergebende Eigenwertgleichung

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

und die Entwicklung der periodischen Ortsanteile in der Basis ebener Wellen $\langle x|n\rangle$

$$u_{l,k}(x) = \sum_n c_n^{(l,k)} \langle x|n\rangle, \quad \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(inx) \quad (1.7)$$

stellen die Basis für die numerische Lösung des Eigenwertproblems (1.2) dar. Dieser Zugang wird später genutzt, um das Bloch-Spektrum $\epsilon_l(k)$ in Abhängigkeit vom Quasiimpuls k zu bestimmen. Die Bloch-Funktionen $\phi_{l,k}(x)$ sind periodische Funktionen in k und müssen daher nur im Intervall $-1/2 \leq k \leq 1/2$ (Brillouinzone) betrachtet werden. Zusätzlich zu dieser Eigenschaft sind die Bloch-Funktionen auch noch Eigenzustände des unitären Translationsoperators $T_{2\pi} = \exp(i2\pi p/\hbar)$

$$\phi_{l,k}(x + 2\pi) = T_{2\pi} \phi_{l,k}(x) = \exp(i2\pi k) \phi_{l,k}(x), \quad (1.8)$$

denn es gilt $[T_{2\pi}, H_0] = 0$.

1.1.2 Wannier-Zustände

Aufgrund der Periodizität der Bloch-Funktionen als Funktion des Quasiimpulses können diese als Fourierreihe in k geschrieben werden

$$\phi_{l,k}(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \exp(i2\pi kn) \psi_{l,n}(x). \quad (1.9)$$

Die Wannier-Funktionen sind nun die Entwicklungskoeffizienten $\psi_{l,n}(x)$ in (1.9) und können aus den Bloch-Zuständen mittels inverser Fouriertransformation bestimmt werden

$$\psi_{l,n}(x) = \int_{-1/2}^{1/2} dk \exp(-i2\pi kn) \phi_{l,k}(x). \quad (1.10)$$

Damit sind die Wannier-Funktionen Linearkombinationen der Bloch-Funktionen eines Bandes. Die Wannier-Funktionen haben die folgenden Eigenschaften: a) sie sind reell, b) entweder symmetrisch oder antisymmetrisch bzgl. $x = 0$ und c) exponentiell lokalisiert [Koh59, Koh72]. Die Eigenschaften gelten nur dann, wenn man die Phasen der korrespondierenden Bloch-Funktionen auf eine bestimmte Art wählt. Durch diese Wahl der Phase (Eichung) werden die Observablen, d. h. z. B. die Energieeigenwerte, nicht verändert,

weshalb dies erlaubt ist [Boh93, Coh97]. Dies fällt unter den Begriff der Eichinvarianz der Quantenmechanik.

Sowohl Bloch-Funktionen als auch Wannier-Funktionen stellen vollständige Orthornormalsysteme in den Indizes k bzw. n dar, d. h. durch (1.9) und (1.10) können Bloch- und Wannier-Funktionen durch die jeweils anderen dargestellt werden. Im Gegensatz zu den Bloch-Funktionen erfüllen die Wannier-Funktionen die Schrödinger-Gleichung nicht.

1.2 Der Feld-Fall

1.2.1 Floquet-Bloch-Operator

Nun soll der Hamiltonoperator

$$H = \frac{p^2}{2} + V(x) + Fx \quad \text{mit} \quad V(x + 2\pi) = V(x) \quad (1.11)$$

mit äußerem Feld-Anteil untersucht werden. Im Gegensatz zum feldfreien Fall kommutiert der Hamiltonoperator H nicht mehr mit dem Translationsoperator. Hier gilt für den Kommutator

$$[T_{2\pi}, H] = 2\pi FT_{2\pi}. \quad (1.12)$$

Betrachtet man nun den Zeitentwicklungsoperator des Systems (2) $U(t, 0) = \exp(-iHt/\hbar)$, so wirkt $T_{2\pi}$ wie folgt darauf:

$$T_{2\pi}U(t, 0) = e^{-i2\pi Ft/\hbar}U(t, 0)T_{2\pi}. \quad (1.13)$$

Die beiden Operatoren kommutieren also genau dann, wenn gilt

$$2\pi q = \frac{2\pi Ft}{\hbar}, \quad q \in \mathbb{Z}. \quad (1.14)$$

Den Zeitpunkt τ_B mit $q = 1$ bezeichnet man als **Blochperiode** oder **Blochzeit**. Die Blochzeit kann noch über einen weiteren Zugang hergeleitet werden. Dazu betrachtet man einen Bloch-Zustand im äußeren Stark-Feld. Ein Bloch-Zustand ist nicht in einem System mit äußerem Stark-Feld definiert, aber man kann die Dynamik eines solchen in einem Stark-Feld betrachten. Für den Bloch-Zustand im zeitunabhängigen Stark-Feld gilt aufgrund der Bewegungsgleichung

$$\hbar \dot{k}(t) = -F \quad (1.15)$$

des Quasiimpulses $\hbar k(t) = \hbar k_0 - Ft$. Die Bewegungsgleichung wurde bereits von Bloch [Blo28] hergeleitet. Die Blochzeit ist nun die Zeitspanne, während der der Quasiimpuls eines propagierten Bloch-Zustandes im Gleichfeld wieder seinen anfänglichen Wert *modulo* 1 annimmt. Diese periodische Bewegung und ihr Analogon im Ortsraum bezeichnet man als Bloch-Oszillation. Den Zeitentwicklungsoperator über eine Blochperiode nennt man **Floquet-Bloch-Operator**.

Im Feld-Fall können mit diesen Begriffen nun ebenfalls Wannier-Funktionen

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\tau_B} \int_0^{\tau_B} dt' \exp\left(i \frac{Et'}{\hbar}\right) U(t' + t) \phi_k(x, 0) \quad (1.16)$$

definiert werden. Diese erfüllen im Gegensatz zu ihrem feldfreien Analogon die zeitabhängige Schrödingergleichung, denn es gilt $i\hbar\partial_t U(t) = HU(t)$ und damit $i\hbar\partial_t \Psi(x, t) = H\Psi(x, t)$.

1.2.2 Streutheorie in Stark-Systemen

In diesem Abschnitt soll kurz die in den kommenden Kapiteln benutzte Streutheorie für Stark-Systeme erläutert werden. Eine ausführliche Einführung findet man in den Arbeiten [Han00, Glü00a] und in der Veröffentlichung [Glü00b].

Man kann auf zwei grundsätzlich unterschiedlichen Wegen an das Problem der Berechnung der Resonanzenergien des von uns betrachteten Systems herangehen. Zum einen kann man den Feldterm als „Störung“ des feldfreien Hamiltonoperators $H_B = p^2/2 + V(x)$ auffassen. Dies ist der ursprünglich benutzte Zugang und führt auf größere mathematische Probleme bei der Untersuchung der spektralen Eigenschaften des Hamiltonoperators (2). Der zweite Weg kehrt die Sichtweise um. Man betrachtet den kinetischen Anteil und den Feldterm als „ungestörtes“ System, denn der Feldterm dominiert für große x -Werte (unbeschränkter Operator) das periodische Potential. Diesem „ungestörten“ Operator wird nun das periodische Potential überlagert. Man spricht in diesem Fall von freien Lösungen, wenn man die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators ¹

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2} + Fx \text{ mit } F > 0 \quad (1.17)$$

betrachtet. Wie wir schon wissen, besitzt das Potential $V(x) + Fx$ keine gebundenen Zustände, da jeder Zustand durch eine endliche Anzahl von Potentialbarrieren tunneln und dann in negativer x -Richtung zerfallen kann. Da es sich bei den betrachteten Zuständen um Resonanzen handelt, kann man sie im Rahmen einer Streutheorie untersuchen. Die Pole der zu definierenden S (treu)-Matrix stellen dann die gesuchten Resonanzenergien dar.

Es ist vorteilhafter, die Berechnung der Streumatrix in der Impulsdarstellung herzuleiten. Die Äquivalenz dieses Zugangs zur Ortsraumdarstellung wurde in [Glü00b] gezeigt. In der Impulsraumdarstellung haben die Eigenfunktionen von (1.17) die folgende Form

$$\Psi_0(E, k) = \exp\left[i \left(\frac{\hbar^2 k^3}{6F} - \frac{Ek}{F} \right)\right]. \quad (1.18)$$

Diese sollen nun mit den Streueigenzuständen der Schrödingergleichung

$$H_S \Psi_S(E) = (H_0 + V(x)) \Psi_S(E) = E \Psi_S \quad (1.19)$$

¹Die Einschränkung $F > 0$ ist nicht notwendig.

verglichen werden. Der Vergleich wird mittels der S -Matrix durchgeführt, die definiert ist durch

$$S(E) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\Psi_S(E, -k)\Psi_0(E, k)}{\Psi_0(E, -k)\Psi_S(E, k)}. \quad (1.20)$$

Die Berechnung der S -Matrix mittels der Eigenzustände des Hamiltonoperators H wird nun ersetzt durch den Übergang zu Floquet-Bloch-Zuständen. Diese sind Eigenzustände des Floquet-Bloch-Operators, d.h. sie erfüllen

$$\exp\left(-i\frac{H\tau_B}{\hbar}\right)\Phi_S(E, \kappa) = \exp\left(-i\frac{E\tau_B}{\hbar}\right)\Phi_S(E, \kappa). \quad (1.21)$$

Der Übergang wird dadurch gerechtfertigt, dass es einen eindeutigen Zusammenhang zwischen den Lösungen von (1.19) und (1.21) gibt:

$$\Psi_S(E) = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} d\kappa \Phi_S(E, \kappa). \quad (1.22)$$

Damit zeigt man, dass die Funktionen $\langle k|\Psi_S(E)\rangle$ und $\langle n + \kappa|\Phi_S(E)\rangle$ für $k = n + \kappa$ übereinstimmen, und die S -Matrix damit die Gestalt:

$$S(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\langle -n + \kappa|\Phi_S\rangle\langle n + \kappa|\Phi_0\rangle}{\langle -n + \kappa|\Phi_0\rangle\langle n + \kappa|\Phi_S\rangle} \quad (1.23)$$

hat. Die Pole der S -Matrix sind die gesuchten Resonanzen, d. h. Streuzustände mit rein auslaufendem Anteil der Wellenfunktion (Siegert-Randbedingungen). Sie entsprechen den Nullstellen von $\Psi_S(E, k)/\Psi_0(E, k)$. Deshalb werden die Entwicklungskoeffizienten $C_n = \langle n|\Phi_S(E)\rangle$ der äquivalenten Floquet-Bloch-Zustände in der Basis ebener Wellen betrachtet. Dies soll nun detailliert durchgeführt werden. Dazu betrachtet man den Zeitentwicklungsoperator. Durch Übergang zur Impulseichung mittels $S(t) = \exp(-iFxt/\hbar)$ kann der Zeitentwicklungsoperator in ein Produkt von zwei Operatoren zerlegt werden [Glü99c]

$$U(t) = \exp(-iFxt/\hbar)\tilde{U}(t) \quad \text{mit} \quad \tilde{U}(t) = \widehat{\exp}\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \tilde{H}(t)dt\right). \quad (1.24)$$

Hierbei ist $\tilde{H} = (p-Ft)^2/2 + V(x)$ und das Dach über der Exponential-Funktion bedeutet Zeitordnung. Der Floquet-Bloch-Operator wird damit zu $U(\tau_B) = e^{ix}\tilde{U}(\tau_B)$. Glg. (1.21) erhält mittels dieser Überlegung in der Basis ebener Wellen die Gestalt

$$\sum_n \tilde{U}_{m+1,n} C_n = \exp(-iE\tau_B/\hbar) C_m = \lambda C_m. \quad (1.25)$$

Für $n \rightarrow \pm\infty$ kann man den Anteil des periodischen Potentials von H vernachlässigen. Die Matrix \tilde{U} geht für diesen Grenzfall in Diagonalform über. Angenommen dies sei für $|n| > N$ ausreichend erfüllt, dann hat \tilde{U} die Form

$$\tilde{U}_{m,n} \approx u_m \delta_{m,n} \quad \text{mit} \quad u_m = \exp\left(-\frac{i}{2\hbar}\int_0^{\tau_b} (\hbar m - Ft)dt\right). \quad (1.26)$$

Damit können wir den Vektor C , der mit steigenden Indizes von unten nach oben sortiert sei, in natürlicher Weise in drei Teile zerlegen

$$C = \begin{pmatrix} C^{(+)} \\ C^{(0)} \\ C^{(-)} \end{pmatrix}. \quad (1.27)$$

Hierbei enthält $C^{(+)}$ die Koeffizienten mit $n > N$, $C^{(-)}$ die mit $n < -N - 1$ und $C^{(0)}$ den Rest. Aufgrund von (1.25) und (1.26) hängen die Koeffizienten von $C^{(+)}$ rekursiv über

$$C_{m+1} = (u_{m+1}/\lambda)C_m \quad (1.28)$$

von C_N ab. Eine ähnliche Rekursion gilt auch für $C^{(-)}$ und C_{-N-1} . Sei nun W die Matrix, die man erhält, wenn man von \tilde{U} nur den Anteil der Größe $(2N+1) \times (2N+1)$ nimmt. Mit der Matrix B , definiert als

$$B_N = \begin{pmatrix} \mathbf{0}^t & 0 \\ W & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (1.29)$$

lässt sich die endlichdimensionale Version von (1.25) so umformen, dass man die Matrixgleichung

$$(B_N - \lambda \mathbb{1})C^{(0)} = -u_{N+1}C_{N+1}\mathbf{e}_N \quad (1.30)$$

mit $\mathbf{e}_N^t = (1, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{2N+2}$ erhält. Für gegebenes λ stellt (1.30) das Bindeglied zwischen den Koeffizienten der einlaufenden $C^{(+)}$ und der auslaufenden Asymptotik $C^{(-)}$ dar. Man kann also mit dieser Gleichung und den Rekursionsbeziehungen (1.28) alle Matrixelemente der S -Matrix bestimmen. Um die Pole der S -Matrix zu finden muß man nun die Nullstellen von

$$\langle k | \Psi_S(E) \rangle / \langle k | \Psi_0(E) \rangle$$

suchen. Wie man anhand von (1.18) sieht, geht $\langle k | \Psi_0(\mathcal{E}) \rangle$ für komplexes $\mathcal{E} = E - i\Gamma/2$ mit $k \rightarrow \infty$ exponentiell gegen null. Für jedes endliche k gilt aber $\langle k | \Psi_0(E) \rangle \neq 0$. Dies gilt auch für die Streulösungen, da diese sich von $\Psi_0(E, k)$ nur durch einen Phasenterm im Exponenten unterscheiden. Gilt also $C^{(+)} \neq 0$, hat die S -Matrix keine Pole. Umgekehrt impliziert $C^{(+)} = 0$, dass die S -Matrix einen Pol besitzt. Um die Pole der S -Matrix zu bestimmen, müssen also die Eigenwerte der Gleichung

$$(B_N - \lambda \mathbb{1})C^{(0)} = 0. \quad (1.31)$$

bestimmt werden.

Numerischer Zugang

Nach Glg. (1.31) muss zunächst die Floquet–Bloch–Matrix des Hamiltonoperators

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

berechnet werden. Dazu bestimmt man die Matrix $\tilde{U}(\tau_B)$ in der Basis ebener Wellen $\langle x|n\rangle$ mit $M = 2N + 1$ Basisfunktionen. Das in der Definition des Floquet–Bloch–Operators auftretende Integral wird dann durch eine endliche Summe genähert

$$\tilde{U}(\tau_B) \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^{j_{max}} \tilde{H}(t_j) \Delta t\right) = \prod_{j=1}^{j_{max}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}(t_j) \Delta t\right), \quad (1.32)$$

wobei $t_j = (j - 1/2)\Delta t$, $j \in 1, 2, \dots, j_{max}$ und $\Delta t = \tau_B / j_{max}$ gilt. Mit Glg. (1.29) wird die Matrix B_N konstruiert und die Eigenwerte λ von B_N berechnet. Die Resonanzenergien $\mathcal{E} = E - i\Gamma/2$ ergeben sich, da gilt $\lambda = \exp(-i\mathcal{E}/F)$, zu

$$\mathcal{E} = iF \ln \lambda. \quad (1.33)$$

1.2.3 Landau–Zener–Theorie

In diesem Abschnitt soll die Herleitung der Landau-Zener-Formel kurz erläutert werden. Hierbei wird analog zu der Herleitung in der Originalarbeit von Zener [Zen34] vorgegangen.

In einem Festkörper, Halbleiter–Übergitter oder allg. in der Theorie quasifreier Teilchen (z.B. Elektronen) in periodischen Potentialen sind nicht alle Energieniveaus erlaubt. Die möglichen Energieniveaus sind in Bändern gruppiert und durch Bandlücken α der Breite E_g^α voneinander getrennt. Setzt man nun diese Anordnung einem äußeren Starkfeld aus, im Falle eines Übergitters also einem äußeren konstanten elektrischen Feld, so verlieren die obigen Blochbänder ihre Bedeutung. Das äußere Feld führt dazu, dass die Bänder des feldfreien Falles degenerieren und damit ihre Anordnung (Numerierung) bedeutungslos wird (vgl. auch Abb. 1.1). Ein Teilchen kann nun durch Tunneln auch in ein anderes Band gelangen, das im feldfreien Fall energetisch über diesem liegen würde.

Ziel ist es nun, die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit γ zu bestimmen, mit der das Teilchen durch die Bandlücke (klassisch verbotener Bereich) tunnelt. Dazu muss die Tunnelwahrscheinlichkeit p mit der Zahl der Tunnelversuche pro Zeiteinheit multipliziert werden. Diese Zahl entspricht der zur Bloch–Oszillation gehörenden Frequenz $\nu_b = 1/\tau_B$. Es gilt also

$$\gamma = \nu_b p. \quad (1.34)$$

Die Tunnelwahrscheinlichkeit ist nun gegeben durch

$$p = \frac{\rho(x + \Delta x)}{\rho(x)}, \quad \rho(x) = |\Psi(x)|^2, \quad (1.35)$$

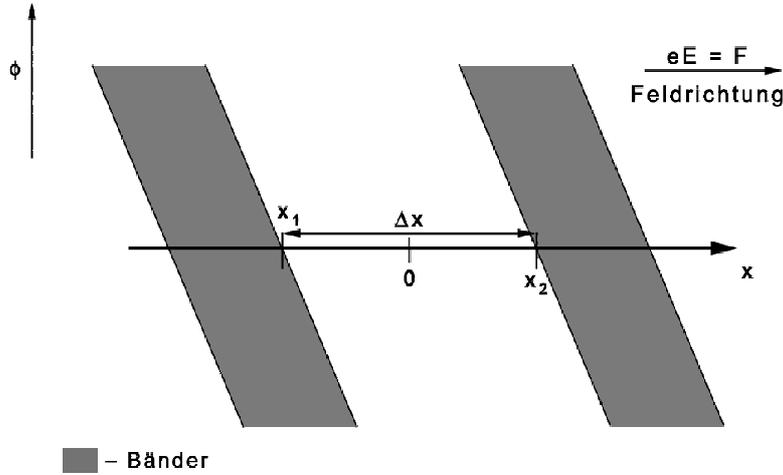


Abbildung 1.1: Bänder, die durch starkes elektrisches Gleichfeld energetisch entartet sind

wobei die $\Psi(x)$ Lösung der stationären Schrödingergleichung ist

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (1.36)$$

Diese Differentialgleichung besitzt für jede Energie Lösungen, auch wenn $V(x)$ ein periodisches Potential ist. Es gilt nicht für jede Lösung, dass sie die Bloch-Bedingung erfüllt und damit ist sie auch keine Eigenlösung mit periodischen Randbedingungen. Mit dem Lösungsansatz

$$\Psi_k(x) = \sum_q c_{k-q} e^{i(k-q)x} \quad (1.37)$$

erhält man aus der Schrödingergleichung die Determinantengleichung (vgl. auch (2.22))

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 - E \right) \left(\frac{\hbar^2}{2m} (k-q)^2 - E \right) = |\langle q|V|0 \rangle|^2. \quad (1.38)$$

Mit E als beliebigem Parameter kann daraus k berechnet werden. Führt man die Substitution $k = 1/2q + \kappa$ und $E = E^0 + \epsilon$ durch, wobei $E^0 = \hbar^2(k-q)^2/2m$ gilt, und nimmt an, dass κ und ϵ klein sind (Näherung quasifreier Elektronen), so erhält man als Näherungslösung

$$\kappa^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\epsilon^2 - |\langle q|V|0 \rangle|^2}{4E^0} \right). \quad (1.39)$$

Für $|\epsilon| < |\langle q|V|0 \rangle|$ wird κ rein imaginär, weshalb die Wellenfunktion in der Bandlücke einen Exponentialfaktor $\exp(-\beta(x))$ mit

$$\beta(x) = \text{Im } \kappa = \frac{|\langle q|V|0 \rangle|q}{4E^0} \left(1 - \frac{4x^2}{(\Delta x)^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.40)$$

enthält. Hierbei wurde für die Energie des Elektrons in der Bandlücke angenommen, dass sie proportional zum Abstand vom Mittelpunkt dieser ist. Die Breite der Bandlücke sei Δx . Damit gilt aufgrund der WKB-Methode

$$p \approx \exp \left(-2 \int_{x_0}^{x_1} \beta(x) dx \right), \quad (1.41)$$

wobei x_1 und x_2 dabei die Grenzen der Bandlücke sind. Der Faktor 2 kommt vom Quadrieren der Wellenfunktion bei der Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte. Führt man die Integration von (1.40) durch und benutzt (1.34), so erhält man

$$\gamma \approx \frac{F}{\hbar} \exp \left(-\frac{\pi^2}{4} \frac{qE_g^2}{2\pi F E^0} \right). \quad (1.42)$$

Trägt man $\ln(\gamma/2F)$ gegen $1/F$ auf, so erhält man aufgrund der Landau-Zener-Formel (1.42) eine Gerade. Die hier gegebene Herleitung der Tunnelwahrscheinlichkeit ist nur eine semiklassische Näherung, in der u. a. das Übergangsmatrixelement vernachlässigt wurde. Macht man für die Energie des Elektrons in der Bandlücke einen anderen Ansatz, so unterscheidet sich das Resultat natürlich. In der Literatur [Hau64] findet man weitere Landau-Zener-Formeln. Die Unterschiede liegen vor allem in der Abhängigkeit von der Bandlückenenergie ([Hau64] erhält z. B. die Abhängigkeit $E_g^{3/2}$). In dieser Arbeit soll von

$$\gamma = aF \exp \left(-\frac{b}{F} \right) \quad (1.43)$$

als Landau-Zener-Formel ausgegangen werden. Die Größen a, b können mittels semiklassischer Rechnungen bestimmt werden, dies soll hier aber nicht geschehen. Die Werte werden im Rahmen der Modellbetrachtungen des Kapitels 3 so eingestellt, dass die Landau-Zener-Formel die Ergebnisse der numerischen Untersuchungen im Durchschnitt wiedergibt.

Die Betrachtung zur Landau-Zener-Theorie werden im Rahmen dieser Arbeit an zwei Stellen aufgegriffen und zwar im Bereich der numerischen Untersuchung als Modellvorstellung und im Rahmen der Modellbetrachtung des vierten Kapitels als Ansatz.

Kapitel 2

Resonanzstrukturen in Stark-Systemen

Bei der Untersuchung von Halbleiter-Übergittern wird in der Literatur [Esa70] zumeist von einem Rechteck-Potential ausgegangen. Dieses Potential soll in diesem Kapitel mit der in der Einführung vorgestellten Streutheorie untersucht und die dabei auftretenden Phänomene, wie z.B. das Auftreten von Paaren der Lebensdauern, qualitativ erläutert werden. Als Zugang zum Kastenpotential wird die Fourierentwicklung genommen. Weiterhin wird ein geglättetes Rechteckpotential untersucht, wodurch die unphysikalischen Sprungstellen des Rechteck-Potentials vermieden werden. Das Kapitel beginnt zunächst mit der Betrachtung der Eigenwerte für eine feste Feldstärke und geht im Späteren auf die Eigenschaften der Resonanzenergien als Funktion der Feldstärke ein.

2.1 Resonanzenergie für konstante Feldstärke

2.1.1 Das Rechteck-Potential

Einführung Das Rechteckpotential soll im Folgenden als periodisches Potential des Hamiltonoperators Glg. (2) untersucht werden. Es sei wie folgt definiert:

$$V(x) = \begin{cases} -v & \text{für } x \bmod 2\pi \in (b/2, 2\pi - b/2) \\ v & \text{sonst.} \end{cases} \quad \text{mit } a + b = 2\pi \quad (2.1)$$

Das Potential hat also die in Abb. 2.1 zu sehende Form. Um die Streutheorie zu nutzen, ist es am einfachsten, das periodische Potential $V(x)$ in der Basis ebener Wellen $\langle x|n\rangle = 1/\sqrt{2\pi} \exp(-inx)$, $n \in \mathbb{Z}$, darzustellen. Im Falle des Rechteck-Potentials (2.1) ($M \rightarrow \infty$)

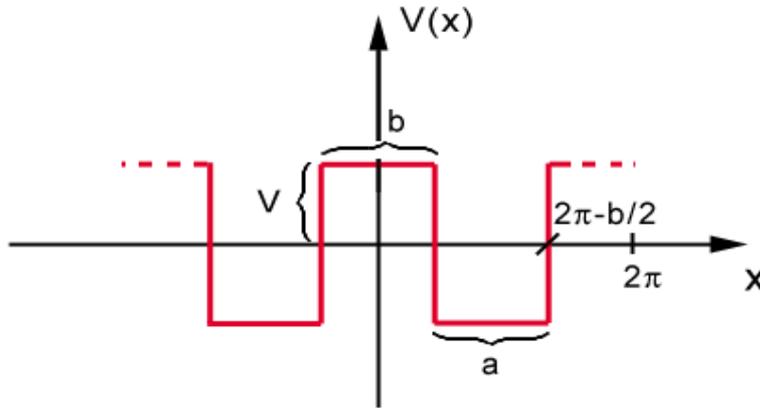


Abbildung 2.1: Rechteckpotential Glg. (2.1) ohne äußeres Stark-Feld

ergibt sich die Fourierreihe bis zum M -ten Term zu:

$$\langle n|V|n'\rangle = \begin{cases} \frac{v}{\pi}[b - \pi] & \text{für } n = n' \\ \frac{2v}{\pi(n-n')} \sin\left(\frac{(n-n')b}{2}\right) \stackrel{l=n-n'}{=} \frac{2v}{\pi l} \sin\left(\frac{lb}{2}\right) & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.2)$$

$$V_M(x) = \sum_{l=0}^M \langle l|V|0\rangle (\exp(ilx) + \exp(-ilx)) = 2 \sum_{l=0}^M \langle l|V|0\rangle \cos(lx). \quad (2.3)$$

Im Rahmen der numerischen Untersuchungen ist nur eine endliche Basis, d.h. $n \in \{-N, \dots, N\}$ mit $N \in \mathbb{N}$, verfügbar. Dadurch ist die maximale Zahl der betrachteten Fourierkomponenten beschränkt auf $M \leq N$. Die Exponentialdarstellung in Glg. (2.3) wurde hingeschrieben, da man an ihr den Aufbau der Matrizen zur Beschreibung des Potentials besser erkennt. Die Fourierterme $\langle l|V|0\rangle$ werden auf die $-l$ -te und l -te Nebendiagonale der Potentialmatrizen geschrieben. Der Diagonalterm verursacht nur eine Energieverschiebung und ist deshalb im allgemeinen gleich Null gesetzt worden. Ist dies nicht der Fall, so wird es explizit erwähnt. Aufgrund der eingeführten skalierten Einheiten bleiben als freie Potential-Parameter nur noch die Anzahl der betrachteten Fourierkomponenten M und die Barrierenbreite b übrig. Die Variation dieser beiden Parameter und \hbar soll in den nächsten Abschnitten getrennt voneinander betrachtet werden.

2.1.2 Variation der Anzahl der Fourierkomponenten

Zunächst soll die Konvergenz der Energieeigenwerte bei steigender Anzahl der betrachteten Fourierkomponenten des Rechteck-Potentials untersucht werden. Die Fourierreihe des Rechteck-Potentials konvergiert besonders schlecht ($\mathcal{O}(M^{-1})$). Die Sprungstellen spielen hier die ausschlaggebende Rolle (Gibbs'sches Phänomen). Da es numerisch nicht möglich

M	$E_1 - i\Gamma_1/2$	$E_2 - i\Gamma_2/2$
49	0.0323972 - 0.0002379i	-0.0081830 - 0.0054474i
51	0.0323944 - 0.0002403i	-0.0077587 - 0.0058379i
53	0.0323956 - 0.0002371i	-0.0080584 - 0.0053588i
55	0.0323926 - 0.0002358i	-0.0084197 - 0.0050970i
57	0.0323947 - 0.0002337i	-0.0079952 - 0.0051840i
59	0.0323970 - 0.0002319i	-0.0076104 - 0.0055706i

Tabelle 2.1: Die zwei langlebigsten Resonanzenergien in Abhängigkeit von der Zahl der Fourierterme M des Potentials. Als numerischen Parameter wurde $N = 70$ und $j_{max} = 120$ benutzt.

ist, das Rechteck-Potential durch seine Fourierreihe exakt darzustellen, muss die Konvergenz der Resonanzenergien in Abhängigkeit von der Fourierdarstellung des Potentials, d. h. von M , überprüft werden. Die zur Berechnung der Resonanzenergien herangezogenen Potentiale $V_M(x)$ sind also nur Näherungen des Rechteck-Potentials (2.1). Im Folgenden soll das symmetrische Rechteck-Potential ($a = b = \pi$) betrachtet werden. Die geraden Terme der Fourierreihe sind aufgrund dieser Wahl identisch Null. Aus (2.3) ergibt sich damit:

$$V_M(x) = 2 \sum_{l=0}^{\widetilde{M}} \frac{\sin((2l+1)\pi/2)}{(2l+1)\pi} \cos((2l+1)x). \quad (2.4)$$

wobei $\widetilde{M} = [(M-1)/2]$, d. h. die Gauß-Klammer von $(M-1)/2$ ist. Die weiteren physikalischen Parameter seien durch $\hbar = 1$ und $F = 0.1$ gegeben. In diesem Abschnitt sollen die Resonanzenergien, die mittels zweier in unserer Gruppe entwickelter Methoden berechnet wurden, verglichen werden. Die standardmäßig in dieser Arbeit benutzte Streutheorie in Stark-Systemen bietet den einen Zugang. Der andere ergibt sich durch die schon seit langem benutzte Transfer-Matrix-Methode, die in unserer Gruppe [Moß01] so erweitert wurde, dass mit ihrer Hilfe die Resonanzenergien für ein unendliches Rechteck-Potential berechnet werden können. In den Tabellen 2.1 und 2.2 sind die Ergebnisse der numerischen Untersuchungen mittels der Streutheorie zu finden. Das Rechteck-Potential wurde durch M Fourierterme beschrieben. Die beiden Tabellen unterscheiden sich durch die zu ihrer Berechnung verwendeten numerischen Parameter N und M . Zunächst betrachten wir Tabelle 2.1. Dort sind die Resonanzenergien für $M = 49, \dots, 59$ angegeben. Die Realteile der Eigenenergien E_α sind auf das fundamentale Energieintervall $[0, 2\pi]F$ eingeschränkt (in den Abbildungen des nächsten Abschnittes z. B. Abb. 2.3 ist das fundamentale Energieintervall $[0, 2]$). Die Hinzunahme weiterer Fourierterme verändert das Potential so stark, dass die Realteile und Imaginärteile der Resonanzenergien sich noch ziemlich deutlich mit M verändern. Dies liegt an der oben schon erwähnten schlechten Konvergenz

α	$M = 250$	$M = 251$
1	0.0323997802 – 0.0002183659i	0.0324000253 – 0.0002187601i
2	0.0968415331 – 0.0019035434i	0.0968783549 – 0.0018988166i
3	–0.2159043357 – 0.0019476257i	–0.2158734037 – 0.0019250782i
4	0.0616772463 – 0.0019498727i	–0.2132975843 – 0.0019315225i
5	–0.2133166160 – 0.0019712389i	0.0617060283 – 0.0019862018i
6	–0.2518300045 – 0.0020484383i	–0.4775854971 – 0.0020660375i
7	0.0589728574 – 0.0020552326i	–0.2517885886 – 0.0020819631i
8	–0.2834221795 – 0.0021142334i	0.0997156493 – 0.0020894224i
9	–0.4164073037 – 0.0021231290i	–0.4164712898 – 0.0021040524i
10	–0.4775698736 – 0.0021235440i	0.0589709411 – 0.0021056737i

Tabelle 2.2: Die zehn stabilsten Resonanzenergien $E_\alpha - \Gamma_\alpha/2$ in Abhängigkeit von der Zahl der Fourierterme des Potentials ($N = 500$ und $j_{max} = 120$).

der Fourierreihe. Die Resonanzenergien oszillieren bei Variation des Parameters M ; es ist kein eindeutiges Verhalten erkennbar. Untersuchungen zur Konvergenzordnung sind nicht sinnvoll, da man sehr große Matrizen diagonalisieren müsste, was sehr fehlerbehaftet ist.

In Tabelle 2.2 ist für die selben physikalischen Parameter, aber mit $M = 250$ und $M = 251$ die Rechnung wiederholt worden. Es sind dort die zehn stabilsten Resonanzenergien angegeben. Vergleicht man beide Tabellen, so erkennt man, dass die Dezimalen des Grundzustandes sich nur auf den hinteren Nachkommastellen verändert haben, aber der erste angeregte Zustand von Tab. 2.1 nicht mehr in Tab. 2.2 zu finden ist. Der erste angeregte Zustand von Tabelle 2.2 ist stabiler als der in Tabelle 2.1. Da die Linienbreiten der höher angeregten Zustände sich teilweise nur auf der fünften Nachkommastelle unterscheiden, ist zu vermuten, dass die durch Variation von M bedingte Potentialveränderung ein Tausch der Zustandsidentitäten verursacht. Diesen Effekt findet man tatsächlich in Tabelle 2.2, wenn man die Zustände vier und fünf betrachtet. Deshalb ist die Berechnung der angeregten WS-Leitern nur bedingt sinnvoll.

Betrachtung eines geglätteten Rechteck-Potentials

Das in Glg. (2.5) definierte Potential vermeidet die Unstetigkeitsstellen des Rechteck-Potentials und entspricht damit eher den in der Natur vorliegenden Verhältnissen. Dieses geglättete Rechteck-Potential wird in Kapitel 4 benutzt und liefert im Rahmen der Berechnung der Absorptionsdichte sehr gute Übereinstimmungen mit den experimentellen Daten und soll deshalb hier kurz vorgestellt werden. Im Folgenden sollen zum letzten Abschnitt analoge Untersuchungen mit diesem Potential durchgeführt werden. Das

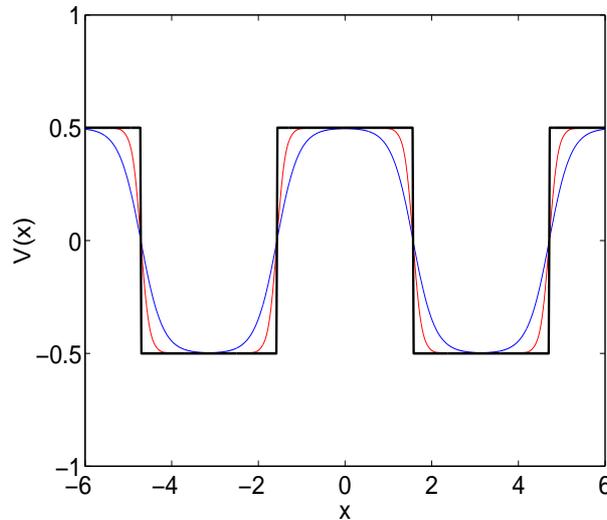


Abbildung 2.2: Vergleich des Potential Glg. (2.5) (blau $\sigma = 2$, rot $\sigma = 5$) ohne Stark-Feld mit dem Rechteck-Potential der Barrierenbreite $b = \pi$.

geglättete Potential sei durch die periodische Fortsetzung von

$$V(x) = \left(\tanh \left(\sigma \left(x + \frac{b}{a+b} \right) \right) - \tanh \left(\sigma \left(x - \frac{b}{a+b} \right) \right) \right) \quad \text{mit } a + b = 2\pi \quad (2.5)$$

gegeben¹. Damit dasselbe Potential wie im letzten Abschnitt beschrieben wird, muss von (2.5) noch $1/2$ abgezogen werden. Der Vorteil des tanh-Potentials gegenüber dem Rechteck-Potential ist, dass seine Fourierreihe sehr schnell konvergiert. Die Periode dieses Potentials ist, wie schon im letzten Abschnitt, durch $a + b$ gegeben. σ gibt die inverse Breite des Übergangsbereichs und $b/(a + b)$ den Wendepunkt der tanh-Funktion an. Der Wendepunkt befindet sich also an der Sprungstelle des Rechteck-Potentials (2.1). In Abb. 2.2 ist das Rechteck-Potentials sowie das Potential (2.5) für verschiedene Werte für σ dargestellt. Zur Berechnung der Resonanzenergien wurden größere Werte für σ benutzt als dargestellt, da die Approximation des Rechteck-Potentials so (Abb. 2.2) noch nicht ausreichend ist.

In Tabelle 2.3 sind die Resonanzenergien der fünf stabilsten WS-Leitern für $\hbar = 1$ und $F = 0.1$ angegeben. Die Resonanzenergie des Grundzustandes ist nahezu unabhängig von der Zahl M der zur Beschreibung der periodischen Fortsetzung von (2.5) benutzten Fourierkomponenten. Aber der erste angeregte Zustand reagiert wesentlich sensibler auf die Variation von M . Wie schon im letzten Abschnitt fällt auf, dass die Linienbreiten der angeregten Zustände sich teilweise erst ab der fünften Nachkommastelle unterscheiden, weshalb es hier ebenfalls zu dem oben beschriebenen Effekt des Identitätstauschs bei Variation von M kommt. Dies ist nicht verwunderlich, da die Resonanzenergien des Rechteck-Potentials lediglich durch eine andere Approximation des Potentials berechnet

¹Formel ist in skalierten Einheiten.

α	$M = 240$	$M = 245$
1	0.0324157503 – 0.0002224263i	0.0324157260 – 0.0002225201i
2	0.0617849460 – 0.0025208121i	0.0968337767 – 0.0024637153i
3	–0.1591906027 – 0.0025616802i	–0.2132299800 – 0.0024803196i
4	0.0967852203 – 0.0025648123i	0.0617106378 – 0.0025085311i
5	0.1507617494 – 0.0025768083i	–0.2158139745 – 0.0025091440i

Tabelle 2.3: Die fünf stabilsten Resonanzenergien in Abhängigkeit von der Zahl der Fourierterme des geglätteten Potentials. Es wurde für den Übergangsparameter der Wert $\sigma = 120$ gewählt.

wurden. Vergleicht man Tabelle 2.3 mit 2.2 so sind die Unterschiede ziemlich groß, lediglich die Quasienergien des Grundzustandes stimmen für beide Herangehensweisen überein. Die Resonanzenergien reagieren also sehr empfindlich auf etwaige Veränderungen des Potentials. Selbst dieser Glättungsprozess verursacht schon merklich Abweichungen.

Die Resonanzenergie, die mittels der Streutheorie bestimmt wurden, sollen nun mit den Ergebnissen der Transfer-Matrix-Methode noch verglichen werden. Diese liefert für die obigen physikalischen Parameter die folgende Tabelle: Auch hier ist wieder nur die

α	$E_\alpha - i\Gamma_\alpha/2$
1	0.0323985266 – 0.0002187008i
2	–0.006198119 – 0.0030488896i
3	–0.017224155 – 0.0033582594i

Tabelle 2.4: Mittels Transfer-Matrix-Methode berechnete Resonanzenergien der drei stabilsten Zustände für die physikalischen Parameter $F = 0.1$ und $\hbar = 1$

Resonanzenergie des Grundzustandes fast die selbe, wie in Tab. 2.2. Alle anderen Resonanzenergien sind unterschiedlich. Dies liegt daran, dass für die angeregten WS-Leitern eine der beiden Methoden noch nicht konvergiert ist.

Abschließend kann also gesagt werden, dass die Berechnung der Resonanzenergien der angeregten WS-Leiter sehr schwierig erscheint.

2.2 Resonanzenergie als Funktion der Feldstärke

Die Barrierenbreite wird in diesem Abschnitt für zwei charakteristische Werte betrachtet und die Zahl der Fourierkomponenten M der zur Beschreibung des Rechteck-Potentials benutzten Fourierreihe wird variiert. Aber im Gegensatz zum letzten Abschnitt wird

hier die Feldstärke des Systems kontinuierlich durchgeföhren. Die Untersuchungen dieses Abschnittes sind qualitativer Natur.

2.2.1 Das Kosinus-Potential

Zunächst soll das Kosinus-Potential als periodisches Potential des WS-Hamiltonoperators betrachtet werden. Das Kosinus-Potential tritt bei der Untersuchung kalter Atome in optischen Gittern auf [And96, Fri98, Dut99, MS97]. Die Atome in diesem System werden als zwei Niveau-Systeme approximiert. Diese werden einer vom Übergang zwischen den beiden Niveaus stark verstimmt (*far detuned*) stehenden Laserwelle ausgesetzt. Die auf die Atome wirkenden optischen Kräfte können näherungsweise durch das Potential [Wal95, CT92]

$$U(x) = \frac{\hbar\Omega_R^2}{4\delta} \cos^2(k_L x) \quad (2.6)$$

beschrieben werden. Hierbei ist Ω_R die Rabi-Frequenz des zwei Niveaus-Systems, $\delta = \omega_l - \omega_0$ die Verstimmung der Laserfrequenz ω_l gegenüber der Übergangsfrequenz ω_0 und k_L die Wellenzahl des Lasers. Mit der Beziehung $\cos^2(k_L x) = 1/2(1 + \cos(2k_L x))$, folgt, dass dieses Potential äquivalent zum Kosinus-Potential ist, bei dem der Energienullpunkt verschoben ist. Um diese Potentiale und damit verbundenen Experimente zu beschreiben, wurde die in der Einführung beschriebene Streutheorie entwickelt [Glü99a]. Durch die Einführung der skalierten Einheiten (siehe Anhang B) bleiben als variable Größen nur noch die skalierte Planck'sche Konstante \hbar und die skalierte Feldstärke F übrig. In den Abb. 2.3 (a)-(d) wird die Resonanzenergie $\mathcal{E}(F) = E(F) - i\Gamma(F)/2$ als Funktion der inversen Feldstärke $1/F$ für unterschiedliche \hbar dargestellt. Aus experimenteller Sicht lässt sich die Variation von \hbar erreichen, wenn man unterschiedliche Elemente und damit unterschiedliche Atommassen in den Experimenten mit kalten Atomen benutzt [Wil96, Bha97, Mad99, And98, Dah96], beziehungsweise die Eigenschaften wie Gitterperiode oder Potentialtiefe des optischen Gitters ändert. Dies und die Umskalierungsvorschrift kann Anhang A von [Glü00a] entnommen werden (die Umskalierungsformeln für \hbar und F sind aber auch Anhang B zu entnehmen). Das skalierte Planck'sche Wirkungsquantum liegt für bisherige Experimente zwischen eins und sechs.

Die Energien

$$E_n(F) = E_{n,l=0}(F) + 2\pi F l \quad \text{mit } l \in \mathbb{Z}, \quad (2.7)$$

bilden die sogenannten Wannier-Stark (WS)-Leitern. Für $F \rightarrow 0$ gehen die Energien $E_{n,0}$ gegen die Mittelwerte der Bandenergien des feldfreien Hamiltonoperators H_0 :

$$E_{n,l=0}(F) \xrightarrow{F \rightarrow 0} \langle E_{n,l=0} \rangle = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} E_n(k) dk. \quad (2.8)$$

Dies ergibt sich aus folgender Überlegung. Betrachtet man zunächst die Dynamik eines Blochteilchens, also eines Eigenzustandes des Hamiltonoperators H_0 unter dem Einfluß

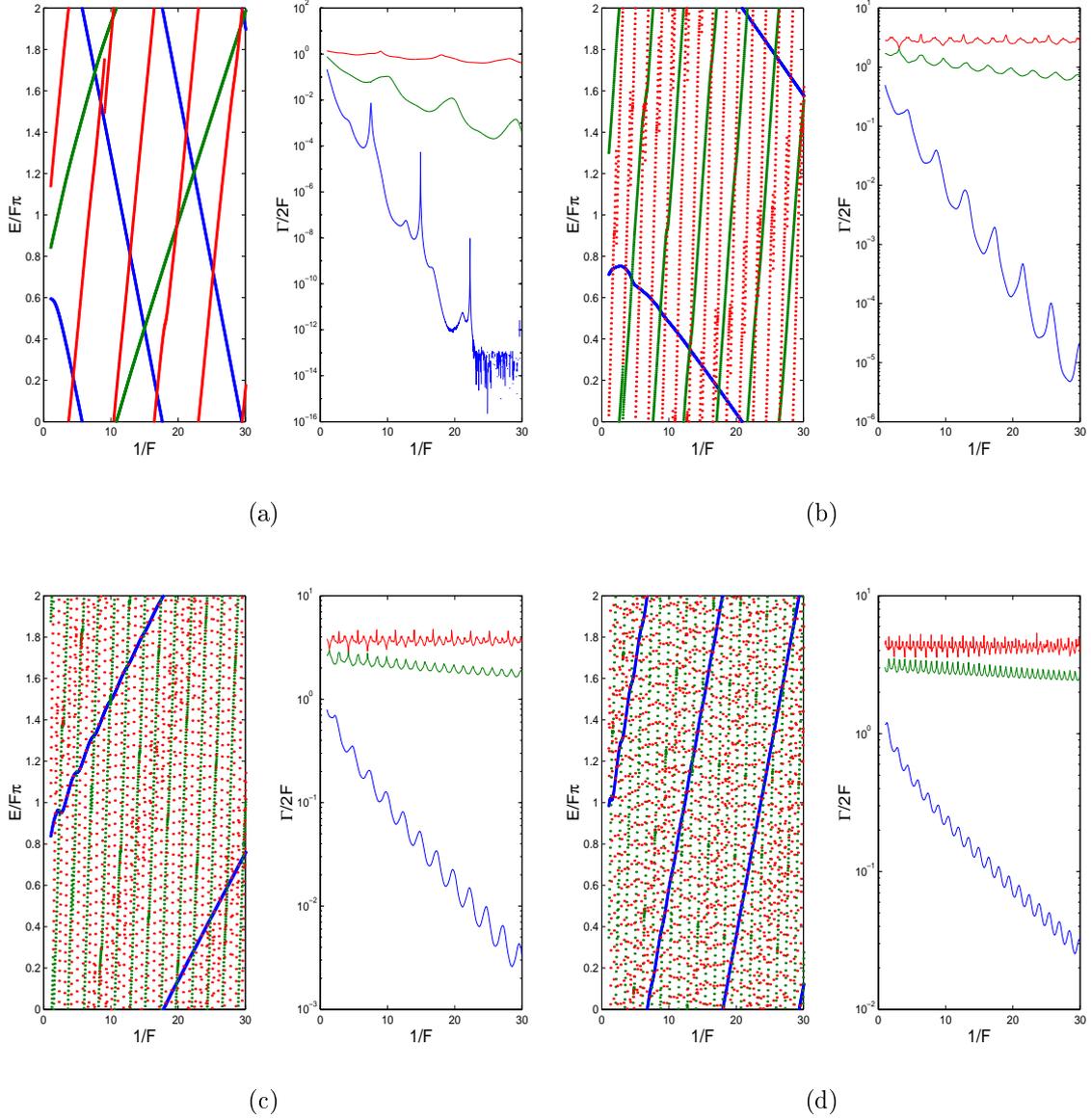


Abbildung 2.3: Darstellung der Energie und Linienbreite für das Kosinus-Potential für (a)-(d) $\hbar = 1, 2, 3, 4$ (numerische Parameter $N = 10$, $j_{max} = 120$ (vgl. Kap. 1.2.2))

des äußeren Feldes und vernachlässigt die Interbandübergänge für kleine Feldstärken, so erhält man die *single-band-approximation*. Man hat also den Eigenzustand $\phi_{n,k}$ mit Eigenenergie $E_n(k)$. Betrachtet man nun die zeitliche Entwicklung des Anfangszustands ϕ_{n,k_0} , so bleibt man — unter obiger Vernachlässigung — im n -ten Band des feldfreien Hamiltonoperators und der Zustand entwickelt sich zu $\phi_{n,k(t)}$. Die Wellenfunktion folgt dem Houston-Ansatz [Hou40]

$$\phi_{n,k(t)} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(k(t')) dt'\right) \phi_{n,k_0}. \quad (2.9)$$

Die Zeitentwicklung über eine Blochperiode ergibt also

$$\phi(\tau_B)_{n,k=k_0} = U(\tau_B)\phi_{n,k_0}(0) = e^{-i\bar{E}\tau_B/\hbar}\phi_{n,k_0}(0) \quad (2.10)$$

mit

$$\bar{E} = \frac{1}{\tau_B} \int_0^{\tau_B} E(k_0 - Ft/\hbar) dt = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} E(k) dk. \quad (2.11)$$

Deshalb erwartet man aufgrund von (2.7), dass die Energien für kleine Feldstärken, also große inverse Feldstärken, Scharen von Geraden der Form

$$\frac{E_n(F)}{F} = \frac{E_{n,l=0}}{F} + 2\pi l \quad \text{mit } l \in \mathbb{Z} \quad (2.12)$$

bilden. Jede Gerade bildet einen Repräsentanten der dazugehörigen Wannier-Stark-Leiter. Für große Feldstärken gilt dieses Verhalten nicht mehr, wie man z.B. Abb. 2.3 (b) durch Betrachtung der stabilsten WS-Leiter (*blau*) für $F \geq 0.1$ entnehmen kann.

Nun sollen die Linienbreiten $\Gamma/2F$ betrachtet werden. Man erkennt z. B. in Abb. 2.3 (b), dass das grobe Verhalten in der halblogarithmischen Darstellung einer Geraden entspricht. Dieses wurde bereits in Kap. 1.2.3 zur Landau-Zener-Theorie vorhergesagt. Folglich lässt sich die Grobstruktur der Linienbreite einer Wannier-Stark-Leiter durch die Landau-Zener-Formel (1.42) beschreiben. Aus der „Landau-Zener-Geraden“ ragen Peakstrukturen heraus, die sich zum Teil bei den Linienbreiten über mehrere Größenordnungen erstrecken. Die Peaks sind für $\hbar = 1$ (vgl. Abb. 2.3 (a)) sehr ausgeprägt, d. h. die Lebensdauer des Resonanzzustandes ist sehr sensitiv gegenüber kleinen Veränderungen der Feldstärke.

Betrachtet man sowohl Energien als auch die Linienbreiten, so sieht man, dass die Peaks in den Breiten genau an den Kreuzungen der Energien verschiedener WS-Leitern auftreten. Für $\hbar = 1$ erkennt man noch eine Hierarchie der Peaks, d. h. die Strukturen sind verschieden stark ausgeprägt. Die steilsten Peaks des Grundzustandes treten bei Kreuzungen der stabilsten WS-Leiter mit der nächst instabileren auf. Die nicht so ausgeprägten Peaks treten bei Kreuzungen der Grundzustandsenergie mit der zweiten angeregten WS-Leiter auf. Die Peakstrukturen, die durch Kreuzungen der Energie des Grundzustandes mit den Energien instabilerer WS-Leitern entstehen, können scheinbar vernachlässigt werden. Die starken Oszillationen des Grundzustandes für $1/F \geq 23$ sind auf numerische Fehler zurückzuführen.

Die Peakstrukturen können durch den Effekt des **resonanten Tunnelns** erklärt werden. Betrachtet man zwei Resonanzzustände, so gehört zu jedem eine WS-Leiter, wobei sich die Zustände einer WS-Leiter durch $2\pi Fl$ energetisch unterscheiden. Haben nun zwei Resonanzzustände unterschiedlicher WS-Leitern fast dieselbe Energie, d. h. gilt $E_n + 2\pi Fk = E_{n'} + 2\pi Fl$ ($k, l \in \mathbb{Z}$), so wird das Tunneln durch die Barrieren verstärkt (vgl. Abb. 1). Durch diesen Prozess des resonanten Tunnelns wird der stabilere Zustand instabiler und umgekehrt (vgl. Abb. 2.3 (a)).

In Abb. 2.3 (b) erkennt man ein weiteres Kreuzungsszenario. Für $1/F \approx 4$ findet man eine Kreuzung der Linienbreiten des ersten angeregten mit dem zweiten angeregten Zustand. Dies ist mit einer vermiedenen Kreuzung der Energien verbunden. Einen Punkt, in dem sowohl Energien als auch Linienbreiten sich kreuzen, nennt man *außergewöhnlichen Punkt*. Die Existenz eines solchen Punktes in Wannier–Stark–Systemen ist jedoch nicht gesichert.

Für wachsendes \hbar werden alle Resonanzen instabiler und die Realteile der Energie werden größer als die Potentialtopftiefe, d.h. die Zustände müssen nicht mehr durch den Potentialwall tunneln. Das die Zustände im Potentialtopf nach oben wandern erkennt man anhand der Steigungen der Quasienergien als Funktion der Feldstärken. Die Steigung werden für große \hbar positiv.

Für größere Werte von \hbar findet man nur noch die Peaks, die durch das resonante Tunneln zwischen Grundzustand und erstem angeregten Zustand verursacht werden.

Man erkennt außerdem, dass mit größerem \hbar immer mehr Kreuzungen der Realteile auftreten, d. h. auch die Zahl der Tunnelprozesse in einem beschränkten Feldstärkebereich nimmt zu. Durch Abzählen der Oszillationen der stabilsten WS–Leiter für jedes \hbar erhält man Tabelle 2.5.

\hbar	N_{Osz}	N_{Osz}/\hbar
1	4	4
2	7	3.5
3	12	4
4	20	5

Tabelle 2.5: Zahl der Oszillationen N_{Osz} des Grundzustandes für die Abb. 2.3 (a)-(d)

Die Zahl der Oszillationen nimmt also linear mit \hbar zu, was für den Abstand der Oszillationen bedeutet, dass er wie \hbar^{-1} gegen Null geht.

Dieses Verhalten kann man mit folgender Überlegung begründen. resonantes Tunneln tritt dann auf, wenn sich zwei verschiedene WS–Leitern kreuzen, d. h. wenn ihre Energien für eine bestimmte Feldstärke gleich sind. Betrachtet man z. B. die durch

$$E_m^{(0)}(F) = E_0 + 2\pi Fm \quad \text{und} \quad E_n^{(1)}(F) = E_1 + 2\pi Fn \quad \text{mit} \quad m, n \in \mathbb{Z} \quad (2.13)$$

gegebenen WS–Leitern des Grund– und ersten angeregten Zustandes, so gilt für den Kreuzungspunkt $E_m^{(0)}(F) = E_n^{(1)}(F)$ und damit

$$\frac{E_0 - E_1}{F} = 2\pi(n - m) =: 2\pi L \quad \text{mit} \quad L \in \mathbb{Z}. \quad (2.14)$$

Der Abstand zwischen zwei Maxima oder Minima der Linienbreite des Grundzustandes ergibt sich damit zu

$$\Delta \left(\frac{1}{F} \right) = \frac{2\pi}{E_0 - E_1} [(L + 1) - L] = \frac{2\pi}{\Delta E}. \quad (2.15)$$

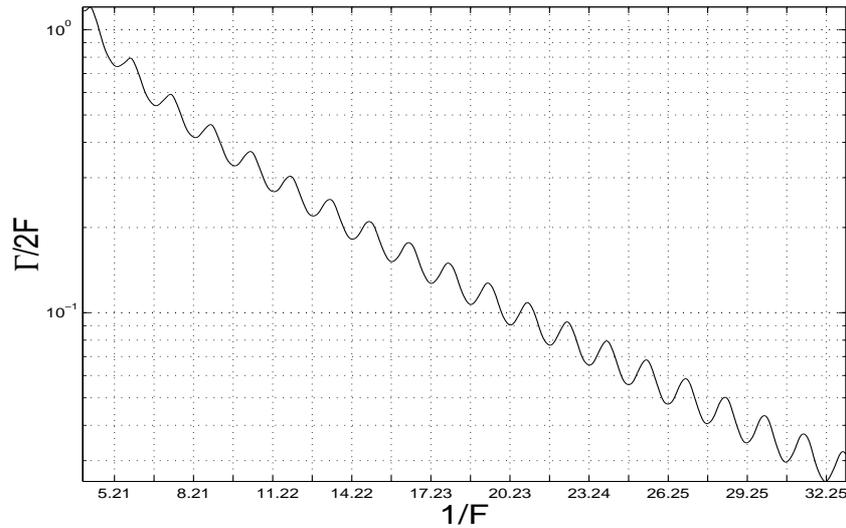


Abbildung 2.4: *Linienbreite des Grundzustandes für $\hbar = 4$. Das Gitter wurde mit dem Abstand eingeführt, den Glg. (2.15) liefert. Die absolute Position muss über Hand angepasst werden.*

Die Werte für E_0 und E_1 ergeben sich für kleines F , wie oben beschrieben, aus den Mittelwerten der Bandenergien des feldfreien Hamiltonoperators H_0 . Diese Werte erhält man durch Diagonalisierung von (1.6). Für $\hbar = 4$ ergab sich $E_0 = 0.5524$, $E_1 = 4.7333$. Den Vergleich zwischen diesen theoretischen Überlegungen und den numerischen Berechnungen kann Abb. 2.4 entnommen werden.

Damit konnte für den Fall kleiner Feldstärke die Zunahme der Oszillationen des Grundzustandes auf die Betrachtung des feldfreien Hamiltonoperators zurückgeführt werden. Da ΔE näherungsweise proportional zu \hbar ist, folgt

$$\Delta \left(\frac{1}{F} \right) \sim \frac{1}{\hbar} \xrightarrow{\hbar \rightarrow \infty} 0. \quad (2.16)$$

Das Auftreten der höheren Zahl der Oszillationen in der Linienbreite der stabilsten WS-Leiter kann so verstanden werden. Das selbe Phänomen in den angeregten WS-Leitern kann auf eine analoge Betrachtung zwischen den angeregten WS-Leitern zurückgeführt werden. Die Energien E_α angeregter WS-Leitern liegen näher zusammen, weshalb deren Differenz kleiner und damit die Zahl der Oszillationen größer ist.

2.2.2 Das Rechteck-Potential

Variation der Anzahl der Fourierkomponenten

Nun soll eine Fallunterscheidung durchgeführt werden, deren Bedeutung sich in Kap. 2.2.3 klärt. In den Abbildungen (2.5) und (2.6) sind, wie für das Kosinus-Potential, die Resonanzenergien $\mathcal{E}(F) = E(F) - i\Gamma(F)/2$ als Funktion der Feldstärke dargestellt. Obwohl wir im letzten Abschnitt gelernt haben, dass die Resonanzenergien nur sehr langsam mit

wachsender Anzahl M der Fourierterme konvergieren, werden in diesem Abschnitt die Resonanzenergien nur für die kleine Werte $M = 3, 5, 7, 9, 19$ betrachtet, da lediglich qualitative Betrachtungen durchgeführt werden. Die Rechenzeit für die im weiteren betrachteten Darstellungen wäre für die Matrizen Größen von $M = 100$ immens. Es werden hier nur die sechs (oder vier) stabilsten Zustände dargestellt, da bei Hinzunahme weiterer Zustände die Abbildungen schnell unübersichtlich werden. Durch die Beschreibung des periodischen Potentials als Fourierreihe mit den wie oben gewählten M erfährt dieses noch erheblich Formveränderungen. Trotzdem wird der durch die Landau–Zener–Formel vorgegebene, grobe Verlauf durch Hinzunahme weiterer Fourierterme nicht stark beeinflusst. Ebenso verändert sich der Verlauf der Energien $E(F)$ nur schwach, insbesondere die Steigung ändert sich nur schwach.

Fall $b = \pi$: Bei diesem Fall sind Barrierenbreite und Topfbreite gleich, das Potential ist also eine symmetrische Funktion. Deshalb enthält die dazugehörige Fourierreihe nur die ungeraden Terme und hat damit die folgende Gestalt (2.4)

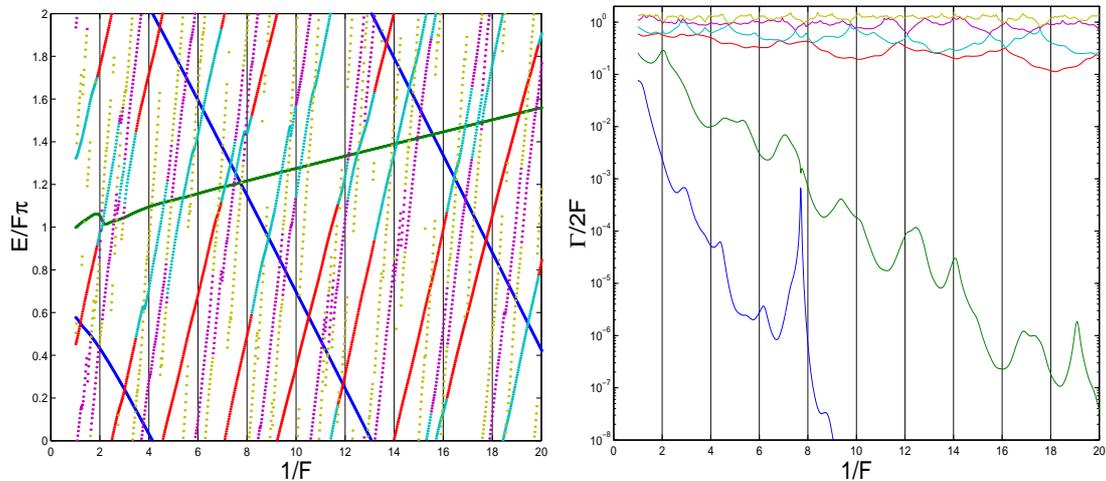
$$V_M(x) = 2 \sum_{l=0}^{\widetilde{M}} \frac{\sin((2l+1)\pi/2)}{(2l+1)\pi} \cos((2l+1)x),$$

wobei $\widetilde{M} = [(M-1)/2]$, d. h. die Gauß–Klammer von $(M-1)/2$ ist. Die numerische Untersuchung für dieses Beispielpotential ergibt für tiefe Potentiale, d. h. für kleines \hbar , die Abbildungen 2.5 und 2.6.

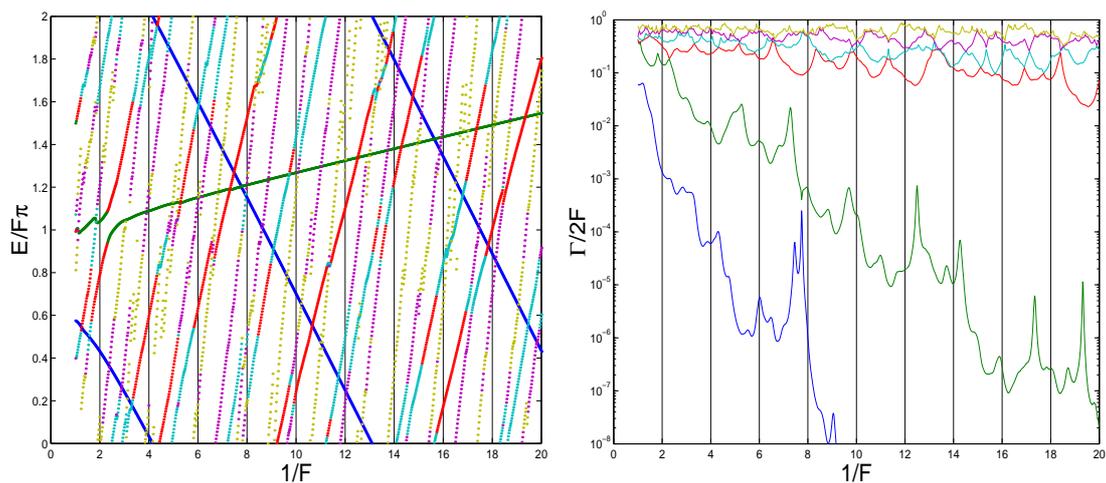
Exemplarisch sollen an den Abbildungen 2.5 (a) und (b) die auftretenden Phänomene erläutert und die Gemeinsamkeiten und Unterschiede diskutiert werden. Die weiteren Abbildungen sollen verdeutlichen, dass die Resonanzenergien als Funktion der Feldstärke durch Hinzunahme weiterer Fourierterme unter Beteiligung der beschriebenen Phänomene komplexer werden.

Genauso wie im Fall des Kosinus–Potentials tritt hier der Effekt des Resonanten Tunnelns auf, der mit Kreuzungen der Realteile der Resonanzenergien und einer vermiedenen Kreuzung der Imaginärteile verbunden ist. Zum anderen tritt auch der umgekehrte Fall ein, d. h. die Realteile als Funktion der Feldstärke vermeiden sich und die Imaginärteile schneiden (vgl. z. B. $1/F \approx 2.5$ in Abb. 2.5 (b)). Die betrachteten WS–Zustände tauschen bei diesem Typ von Kreuzung ihre Identität, denn der zunächst stabilere Zustand wird instabiler als der anfänglich instabilere.

An den angeregten WS–Leitern erkennt man, dass für steigende Zahl der Fourierterme der letzte Kreuzungstyp häufiger auftritt. Außerdem werden die Oszillationen der Linienbreiten durch resonantes Tunneln, ausgeprägter. Hierzu vergleiche man das Verhalten der Grundzustandslinienbreiten für $1/F \approx 6$ in Abb. 2.5 (a) und (b). Die stärkste Schwankung wird durch die Kreuzung des Grundzustandes (blau) mit dem dritten angeregten Zustand (cyan) verursacht. Links davon erkennt man nur schwach die Oszillation, die durch die Kreuzung des Grundzustandes mit dem vierten angeregten Zustand (magenta) bewirkt wird. Betrachtet man dieselbe Stelle für $\widetilde{M} = 3$, fällt zunächst auf, dass mehr Oszillationen zu beobachten sind. Die Hauptoszillation ist ferner ausgeprägter, d. h. sie



(a)



(b)

Abbildung 2.5: Darstellung der Energie und Linienbreite für $\hbar = 1$, $b = \pi$, Variiert wird in diesem Fall der Parameter $\widetilde{M} = \text{Maximalzahl der beteiligten Fourierkomponenten}$ (a) $\widetilde{M} = 1$, (b) $\widetilde{M} = 2$.

geht höher und fällt an ihren Flanken steiler ab. Die für $\widetilde{M} = 1$ links davon nur schwach zu erkennende Oszillation tritt jetzt deutlicher hervor. Außerdem erkennt man an den Schwankungen der Linienbreiten eine hierarchische Ordnung, d. h. die stärksten Oszillationen werden durch Kreuzungen des Grundzustandes mit der ersten angeregten WS-Leiter (grün) verursacht, die nächst schwächeren durch Kreuzungen mit der zweiten angeregten WS-Leiter (rot) usw.

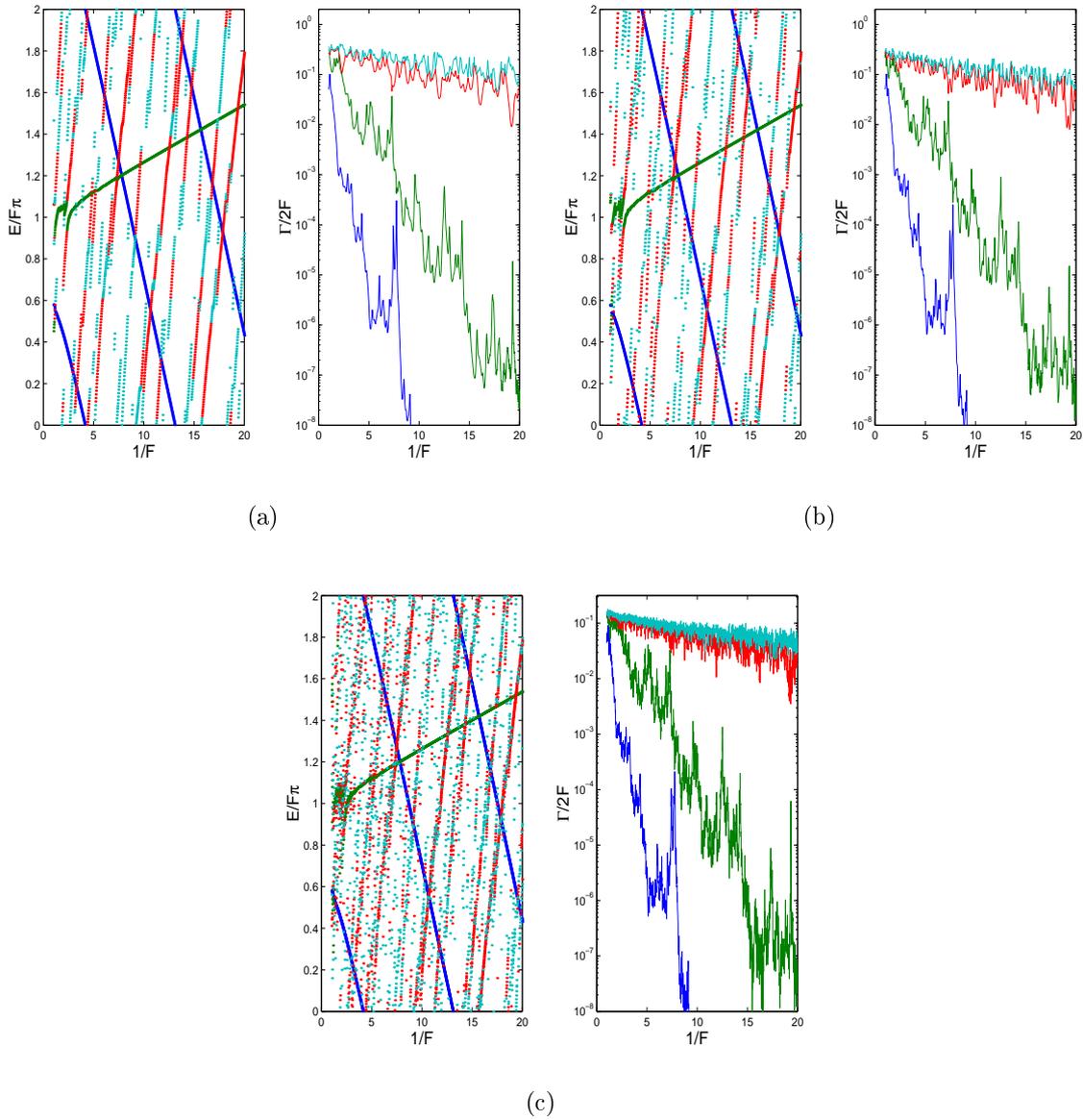


Abbildung 2.6: Darstellung der Energie und Linienbreite für $\hbar = 1$, $b = \pi$, Variiert wird in diesem Fall der Parameter $\widetilde{M} =$ Maximalzahl der beteiligten Fourierkomponenten, (a)-(c) $\widetilde{M} = 3, 4, 9$

Fall $b \neq \pi$: Für diesen Fall wurden als Potential-Parameter die folgenden Werte gewählt: $\hbar = 2.5$, $\widetilde{M} = 3$. Die Barrierenbreite wurde für Abb. 2.7 (a) auf $b = \pi$ und für (b) auf $b = 2$ eingestellt. Hier soll das Ergebnis dieser beiden Fälle verglichen werden. Die Fourierreihen dieser beiden Potentiale unterscheiden sich grundsätzlich, denn durch die Wahl von $b = \pi$ wird das Rechteck-Potential eine symmetrische Funktion des Ortes, weshalb alle geraden Fourierterme verschwinden. Im Gegensatz dazu führt die Wahl $b = 2$ nicht zum Verschwinden dieser Terme. In Abb. 2.7 (a) erkennt man, dass die erste und zweite

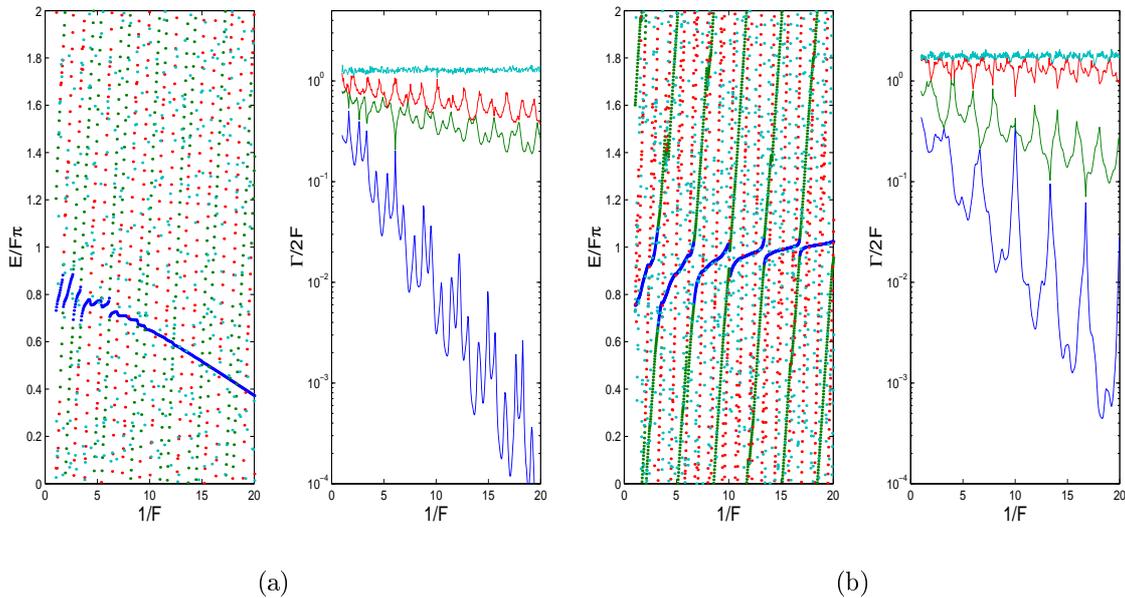


Abbildung 2.7: Darstellung der Quasienergien und Linienbreiten der vier stabilsten Wannier-Stark-Leitern für die Parameter (a) $\hbar = 2.5$, $b = \pi$, $M = 3$, (b) $\hbar = 2.5$, $b = 2$ und $M = 3$

angeregte WS-Leiter sich deutlich in den Linienbreiten von den anderen WS-Leitern absetzen. Dieses Phänomen wird im Folgenden Linienbreiten-(Lebensdauer-)Paarung (da $\tau = \hbar/\Gamma$) genannt. Für die Wahl $b = 2$ tritt dieses Phänomen nicht auf, es hängt also eindeutig von der Wahl der Barrierenbreite ab. Der Klärung des Phänomens sind Kap. 2.2.3 und Kap. 3.1 gewidmet. In Kap. 2.2.3 wird erläutert, weshalb das Verschwinden der Fourierterme wichtig ist, und Kap. 3.1 gibt eine Beschreibung des Phänomens im Rahmen eines Matrixmodells für WS-Leitern.

Variation der Barrierenbreite

Dieser Abschnitt befasst sich mit dem Einfluss der Barrierenbreite auf die Stärke der Oszillationen in den Linienbreiten der Resonanzstrukturen. Wie man folgender Überlegung entnehmen kann, lässt sich durch Verringerung des Überlapps der Wellenfunktionen zweier benachbarter Töpfe eine Kreuzung der Linienbreiten in eine vermiedene Kreuzung überführen. Diese Verringerung des Überlapps lässt sich durch Vergrößerung der Barrierenbreite erreichen [Wag93].

Das Tunneln in höhere WS-Leitern, insbesondere des Grundzustandes in den ersten angeregten Zustand wird durch die Landau-Zener-Formel

$$\gamma = a_1 F \exp\left(-\frac{a_2 E_g}{F}\right)$$

beschrieben. Die Bandlücke ist im Falle quasifreier Teilchen gegeben durch [Kit70]

$$E_g = 2 |\langle n|V|0\rangle|,$$

d. h. durch das Doppelte des n -ten Fourierterms. Für das Rechteckpotential haben wir für diesen Fourierkoeffizienten

$$\langle n|V|0\rangle = \frac{2v}{\pi n} \sin\left(\frac{bn}{2}\right) \quad \text{mit } n \in \mathbb{N}$$

erhalten. Dabei ist v die Potentialtiefe und b die Barrierenbreite des Rechteckpotentials. Das Tunneln vom Grundzustand in den ersten angeregten Zustand wird durch den Fourierkoeffizienten

$$\langle 1|V|0\rangle = \frac{2v}{\pi} \sin\left(\frac{b}{2}\right)$$

bestimmt. Dieser Koeffizient ist für $0 < b < 2\pi$ positiv und für $0 < b < \pi$ monoton wachsend. Also wird das Tunneln durch größer werdende Barrierenbreite zwischen $b = 0$ und $b = \pi$ immer unwahrscheinlicher. In den Abb. 2.8 und 2.9 ist für das Potential $V_M(x)$ mit $M = 5$ und $\hbar = 1$ die Barrierenbreite variiert worden. Es sind die drei stabilsten WS-Leitern dort dargestellt. Bei der sehr schmalen Barrierenbreite von $b = \pi/10$ (Abb. 2.8 (a)) ist die Tunnelwahrscheinlichkeit durch die Barriere sehr groß, weshalb die Zustände sehr instabil sind. Die Linienbreiten der betrachteten WS-Leitern haben alle dieselbe Größenordnung und es kommt vermehrt zu Kreuzungen der Linienbreiten. Die WS-Leitern wechselwirken also sehr stark miteinander. Für $b = \pi/2$ (Abb. 2.8 (b)) wird die Resonanzstruktur übersichtlicher, denn die Zahl der Kreuzungen der Linienbreiten nimmt ab. Es treten aber sowohl Kreuzungen als auch vermiedene Kreuzungen der Linienbreiten auf. Die betrachteten WS-Leitern werden im Ganzen um mehrere Größenordnungen stabiler. In Abb. 2.8 (c) sind die Resonanzstrukturen für $b = \pi$ dargestellt, d. h. für den Fall des symmetrischen Potentials (Barrieren- und Topfbreite sind gleich). Kreuzungen der Linienbreiten liegen nur noch bei den angeregten WS-Leitern vor. Der Grundzustand besitzt nur noch vermiedene Kreuzungen, wobei die stärksten Oszillationen durch resonantes Tunneln in den ersten angeregten Zustand verursacht werden. Die Linienbreiten der angeregten WS-Leitern unterscheiden sich noch deutlich voneinander.

Vergrößert man die Barrierenbreite weiter, so nimmt die Oszillationstärke der Linienbreiten aller dargestellten WS-Leitern ab (Abb. 2.9 (a)). Insbesondere die Linienbreite des Grundzustandes entspricht nahezu dem durch die Landau-Zener-Theorie vorhergesagtem Verlauf. Betrachtet man zuletzt Abb. 2.9 (b), so erkennt man, dass der Grundzustand wieder instabiler wird. Außerdem bildet die Quasienergie $E/\pi F$ des Grundzustandes im Gegensatz zu den vorherigen Abbildungen eine Gerade mit positiver Steigung, d. h. der Zustand ist im Potentialtopf nach oben gewandert. Die Stärke der Oszillationen der Linienbreite haben wieder zugenommen. Dies ist auch anhand der obigen Überlegungen verständlich, da die Tunnelwahrscheinlichkeit für $\pi \leq b \leq 2\pi$ wieder größer wird. Auch die Linienbreiten der angeregten WS-Leitern oszillieren wieder stärker.

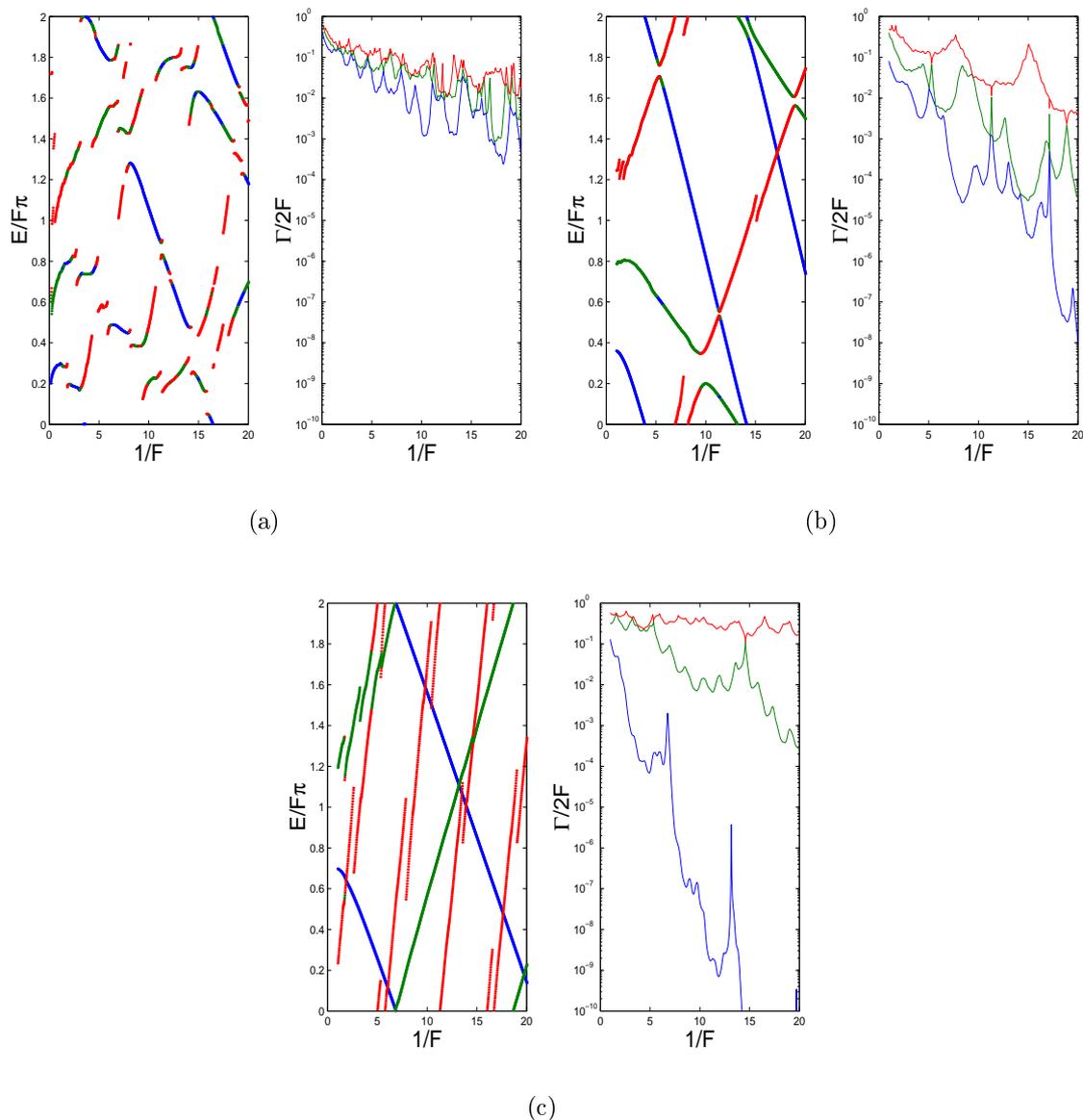


Abbildung 2.8: Darstellung der Energien und Linienbreiten für $\hbar = 1$ und $M = 5$ mit den Barrierenbreiten (a) $b = 0.1\pi$ (b) $b = 0.5\pi$ und (c) $b = \pi$

2.2.3 Betrachtung spezieller Potentiale

In diesem Abschnitt soll folgendes Modellpotential als periodisches Potential betrachtet werden:

$$V(x) = \alpha \cos(mx) + \beta \cos(nx), \quad (2.17)$$

wobei $m, n \in \mathbb{N}$ und $0 \leq m \leq n$ sowie $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ sind. Bei diesen Potentialen ist darauf zu achten, dass die kleinste Periode nicht notwendigerweise 2π ist. Die Floquet-Bloch-

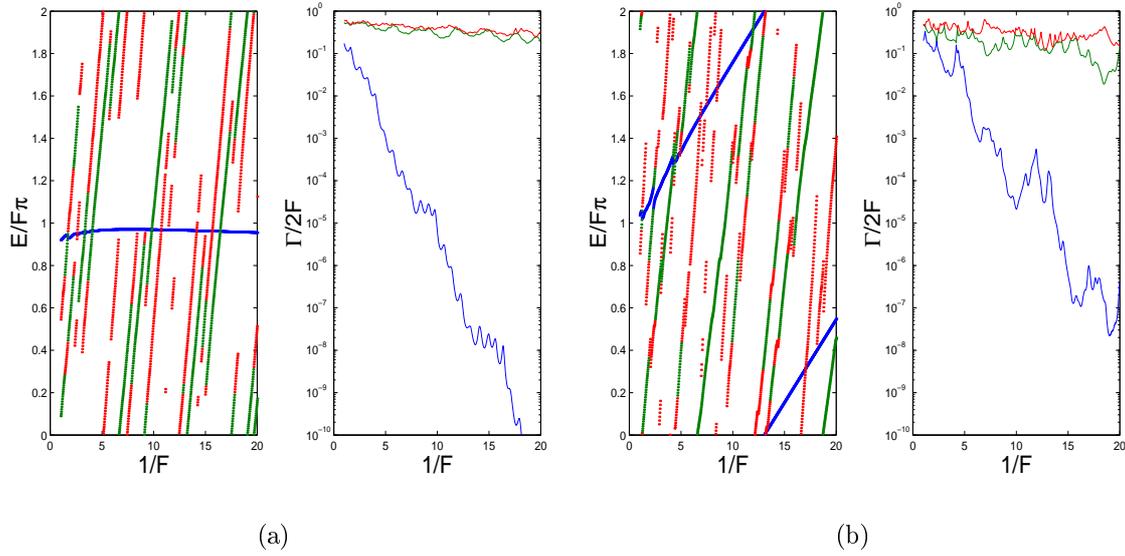


Abbildung 2.9: Darstellung der Energien und Linienbreiten für $\hbar = 1$ und $M = 5$ mit den Barrierenbreiten (a) $b = 1.57\pi$ (b) $b = 1.7\pi$

Periode muss aber an diese Periode angepasst werden. Die kleinste Periode ergibt sich zu 2π durch den größten gemeinsamen Teiler (ggT) von m und n .

Zunächst soll der feldfreie Fall betrachtet werden. Dies soll an reduzierten Bandschemata geschehen. Diese Potentiale haben z. B. die in Abb. 2.10 zu sehende Bandstruktur im feldfreien Fall. Die Symmetrie der Dispersionsbeziehung bzgl. $k = 0$ ergibt sich aus der Symmetrie $V(x) = V(-x)$ des periodischen Potentials [Kit70]. Quasifreie und quasigebundene Zustände lassen sich in dieser Darstellung gut unterscheiden. Quasigebundene Zustände zeichnen sich dadurch aus, dass die Energieeigenwerte nahezu unabhängig vom Quasiimpuls sind. Im *Tight-Binding*-Limit stimmen diese Energien an den Rändern der Brillouin-Zone mit den Eigenenergien im Potentialtopf überein (siehe Anhang in [Koh59]). Im Gegensatz dazu erhält man einen quadratischen Verlauf der Dispersionsrelation im Modell quasifreier Zustände. Zusätzlich zu den erlaubten Energiebändern treten auch Bandlücken auf, d. h. Energiebereiche für die das Eigenwertproblem keine Lösungen besitzt. Für quasigebundene Zustände ist das Auftreten der Bandlücken unmittelbar klar, da sie aus den Energieabständen der Niveaus des Potentialtopfes entspringen. Eine weitere Ursache für das Auftreten von Bandlücken kann im Rahmen der Theorie quasifreier Zustände gefunden werden (siehe z. B. [Ash76] Kapitel 9). Für verschwindendes Potential hat die Schrödingergleichung ebene Wellen als Lösungen. Deshalb entwickelt man für schwache Potentiale die Wellenfunktionen in der Basis ebener Wellen $\langle x|q\rangle = \exp(-iqx)/\sqrt{2\pi}$:

$$\Psi_k(x) = \sum_q c_{k-q} e^{i(k-q)x}. \quad (2.18)$$

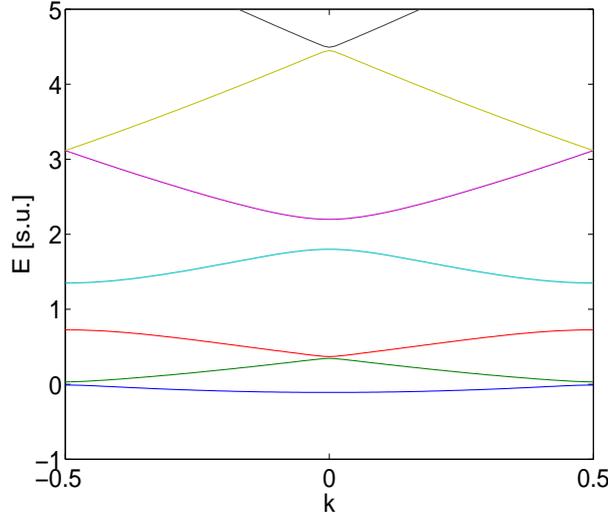


Abbildung 2.10: Bandstruktur des feldfreien Hamiltonoperators für das Potential $V(x) = 0.6 \cos(3x) + 0.4 \cos(4x)$ mit $\hbar = 1$.

Einsetzen in die zeitunabhängige Schrödingergleichung und elementare Umformungen liefern das Gleichungssystem

$$0 = \left[\frac{1}{2} \hbar^2 (k - q)^2 - E \right] c_{k-q} + \sum_{q'} \langle q' | V | q \rangle c_{k-q'} \quad \text{mit } q, q' \in \mathbb{Z} \quad (2.19)$$

wobei gilt

$$\langle q_1 | V | q_2 \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} V(x) e^{i(q_2 - q_1)x} dx. \quad (2.20)$$

Betrachtet man nun zwei Zustände, deren Energienniveaus sich in der Größenordnung von V voneinander unterscheiden, jedoch von allen anderen Niveaus weiter separiert sind, ergibt sich aus Glg. (2.19):

$$\begin{pmatrix} E - E_{k-q_1}^0 & -\langle q_2 | V | q_1 \rangle \\ -\langle q_1 | V | q_2 \rangle & E - E_{k-q_2}^0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k-q_1} \\ c_{k-q_2} \end{pmatrix} = 0, \quad (2.21)$$

wobei $E_{k-q_i}^0 = 1/2 \hbar^2 (k - q_i)^2$ die Dispersionsrelationen der quasifreien Zustände sind. Dieses Gleichungssystem hat genau dann nichttriviale Lösungen, wenn gilt:

$$\begin{vmatrix} E - E_{k-q_1}^0 & -\langle q_1 | V | q_2 \rangle^* \\ -\langle q_1 | V | q_2 \rangle & E - E_{k-q_2}^0 \end{vmatrix} = 0. \quad (2.22)$$

Dies führt zu einer quadratischen Gleichung, deren Lösungen sich zu

$$E_{\pm}(k) = \frac{1}{2} (E_{k-q_1}^0 + E_{k-q_2}^0) \pm \sqrt{\left(\frac{E_{k-q_1}^0 - E_{k-q_2}^0}{2} \right)^2 + |\langle q_1 | V | q_2 \rangle|^2} \quad (2.23)$$

ergeben. Insbesondere für den Rand der Brillouin-Zone, also $k = 1/2$, lässt sich dies noch weiter vereinfachen, denn es gilt $E_{1/2-q_1}^0 = E_{1/2-q_2}^0$, und damit

$$E_{\pm}(1/2) = E_{1/2-q_1}^0 \pm |\langle q_1 | V | q_2 \rangle|. \quad (2.24)$$

Die Energielücke am Rand ist also gegeben durch

$$E_g = 2|\langle q_1 | V | q_2 \rangle|, \quad (2.25)$$

d. h. sie entspricht der Größe des Fourierkoeffizienten des periodischen Potentials zum Quasiimpuls $q_1 - q_2$. Nun soll diese Betrachtung auf den Fall mit Feld ausgedehnt werden. Dies ist natürlich nur eine Näherung, da nicht klar ist, inwieweit die Begriffe dieses Abschnittes erhalten bleiben.

Durch das Anlegen eines äußeren Feldes kommt es zu Interbandübergängen, wie wir in Kap. 1.2.3 gelernt haben. Für die Tunnelwahrscheinlichkeit ergab sich ein Ausdruck der Form

$$\gamma = aF \exp\left(-\frac{bE_g^2}{F}\right).$$

Die Bandlücke E_g ist, wie wir gesehen haben, im Fall quasifreier Zustände gegeben durch die Fourierkomponente zum Quasiimpuls $q = q_1 - q_2$. Ist diese Fourierkomponente identisch Null, so geht die Tunnelwahrscheinlichkeit für den Übergang zwischen Band q und $(q + 1)$ für wachsende inverse Feldstärke polynomial wie $1/F$ gegen Null, d. h. der Zustand wird immer stabiler, je größer die inverse Feldstärke wird. Ist die Bandlücke nicht identisch Null, so nimmt die Tunnelwahrscheinlichkeit mit wachsender inverser Feldstärke exponentiell ab.

Die Bildung von Lebensdauer-Paaren oder allgemeiner Zustands-Clustern lässt sich mit diesem Modell qualitativ erklären. Unter einem Zustands-Cluster verstehen wir Graphen der Linienbreiten, die in Darstellungen $\Gamma/2F$ gegen $1/F$ nahezu parallel verlaufen (vgl. Abb. 2.7 (a)). Hierauf soll anhand der anfänglich erwähnten Beispielpotentiale näher eingegangen werden. Deshalb betrachten wir zunächst die Fourierzerlegung dieser Potentiale

$$\langle q | V | 0 \rangle = \frac{\alpha}{2}(\delta_{q,m} + \delta_{q,-m}) + \frac{\beta}{2}(\delta_{q,n} + \delta_{q,-n}). \quad (2.26)$$

Diese Potentiale haben also eine Bandlücke der Größe α zwischen dem m -ten und $(m + 1)$ -ten und eine der Größe β zwischen dem n -ten und $(n + 1)$ -ten Band. Dies kann numerisch ebenfalls bestätigt werden. Mit dem in Kap. 1.1.1 beschriebenen Algorithmus erhält man für die Fourierkomponenten des im nächsten Absatz beschriebenen Beispielpotentials $V(x) = 0.6 \cos(3x) + 0.4 \cos(4x)$ mit $\hbar = 1$ die Werte: $\alpha \approx 0.59$ und $\beta \approx 0.38$. Die Tunnelwahrscheinlichkeit zwischen den unteren m -Bändern ist groß, weil die Bandlücke Null ist. Das Tunneln ins $(m+1)$ -Band ist aufgrund der Landau-Zener-Formel aber wesentlich unwahrscheinlicher, da für den Exponentialfaktor gilt $\exp(-bE_g^2/F) \ll 1$. Deshalb sind die Zustände der ersten m -Bänder wesentlich stabiler als die Zustände der

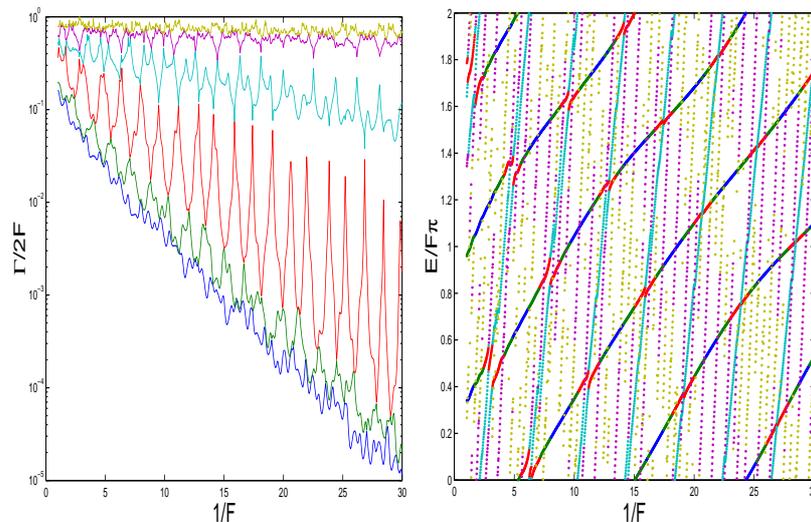


Abbildung 2.11: *Energien und Linienbreite der Resonanzenergien des Operators (2) für das Potential $V(x) = 0.6 \cos(3x) + 0.4 \cos(4x)$ mit $\hbar = 1$; das Auftreten der Cluster ist zu erkennen, wie im Haupttext erläutert.*

höheren Bänder. Für diese Potentiale wird deshalb ein Cluster der Größe m erwartet. Die nächst instabilere WS-Leiter hat einen Linienbreiten-Graphen, der sich deutlich von diesen absetzt.

Nach der selben Argumentation tritt als nächstes ein Cluster von $(m - n)$ -WS-Leitern auf, welcher sich wiederum deutlich von den instabileren WS-Leitern absetzt. Als Beispiel sei das Potential $V(x) = 0.6 \cos(3x) + 0.4 \cos(4x)$ mit $\hbar = 1$ betrachtet. Die Clusterbildung in Abb. 2.11 lässt sich im Rahmen quasifreier Zustände erklären, d. h. durch das Auftreten von Fourierkomponenten ungleich Null.

Als zweites Beispiel sei $V(x, \delta) = 2q(\cos(\delta) \cos(2x) + \sin(\delta) \cos(x))$ mit $\hbar = 0.2$, $\delta = 5\pi/6$ und $q = 1/2$ betrachtet. Dieses Potential ist [Nuñ91] entnommen, gehört aber zu der anfänglich eingeführten Klasse (2.17) von Potentialen. Die Besonderheit dieses Potentials liegt in seiner Asymmetrie, weshalb keine fast entarteten Eigenenergien auftreten. Diese Entartungen verursachen Schwierigkeiten bei den Betrachtungen des Abschnittes. Die Bandlücken, die durch nicht verschwindende Fourierkomponenten verursacht werden, treten erst zwischen erstem und zweitem sowie zweitem und dritten Band auf. Das Planck'sche Wirkungsquantum \hbar wird so klein gewählt, damit möglichst viele quasigebundene Zustände existieren. Ein kleines \hbar kann durch Vergrößerung der Potentialtiefe erreicht werden. Die Bandlücken, die man im Bandschema der Abbildung 2.12 zwischen allen höheren Bändern erkennt (siehe auch Tabelle 2.6) sind durch die Bandlücken zwischen quasigebundenen Zuständen zu erklären. Die Bänder mit Bandindex eins bis vier sind durch große Bandlücken voneinander getrennt. Danach kommen drei Paare von Bändern, die ebenfalls durch größere Bandlücken getrennt sind. Diese sind aber kleiner als die vorherigen.

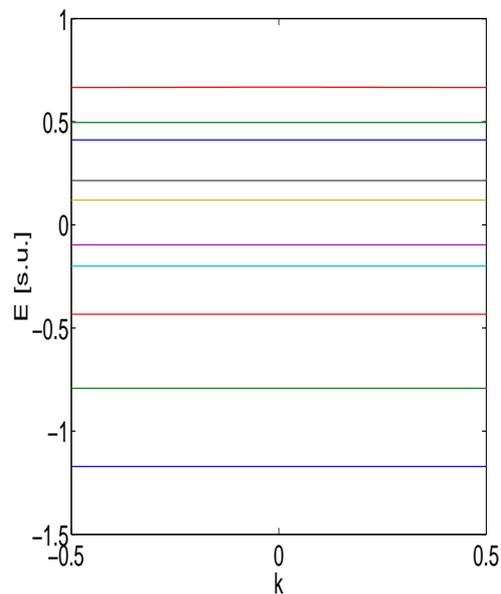


Abbildung 2.12: Bandstruktur des feldfreien Hamiltonoperators mit dem periodischen Potential $V(x, \delta)$ für $\hbar = 0.2$.

Bandindex n	E_n
1	-1.172
2	-0.792
3	-0.433
4	-0.200
5	-0.097
6	0.120
7	0.215
8	0.412
9	0.496
10	0.667

Tabelle 2.6: Mittlere Bandenergie des n -ten Bandes des feldfreien Hamiltonoperators mit $V(x) = \cos(\delta) \cos(2x) + \sin(\delta) \cos(x)$ und $\hbar = 0.2$ und $\delta = 5\pi/6$.

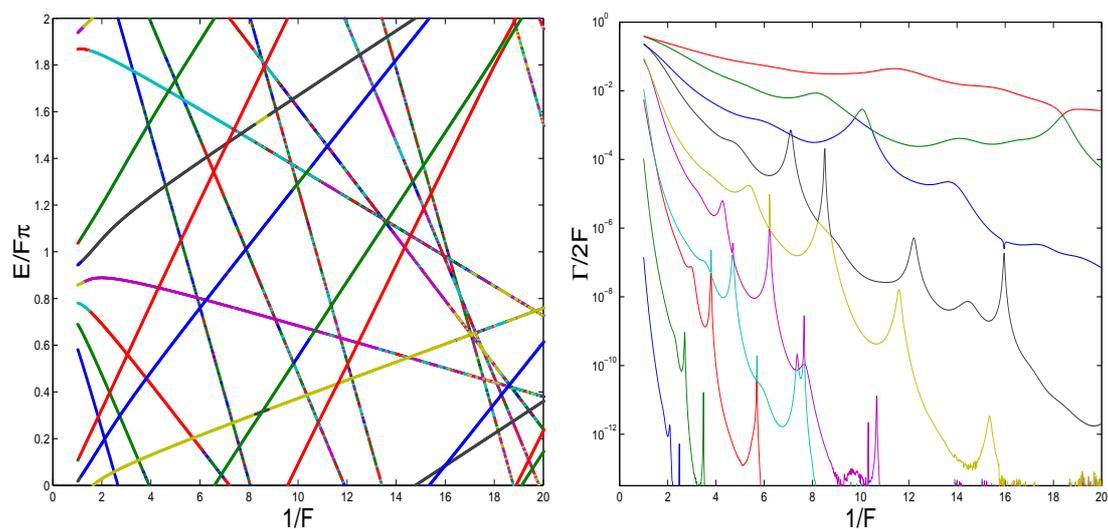


Abbildung 2.13: Dargestellt sind die Energien und Linienbreiten der zehn stabilsten WS-Leitern des Potentials $V(x, \delta)$ mit $\hbar = 0.2$; Bildung von Lebensdauer-Paaren durch Betrachtung quasigebundener Zustände im feldfreien Fall.

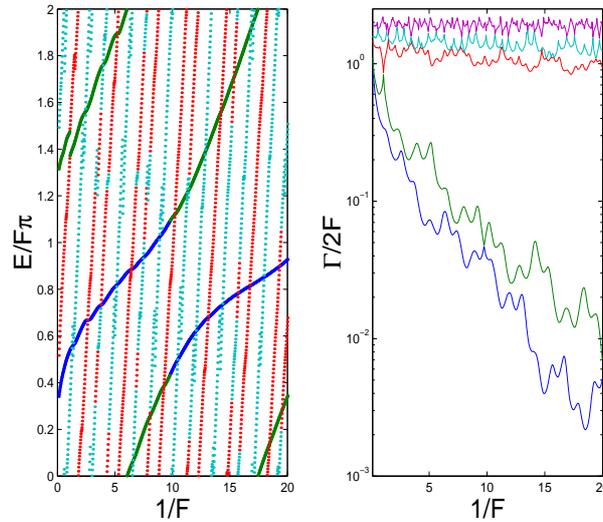


Abbildung 2.14: Quasienergien und Linienbreiten der vier stabilsten Wannier-Stark-Leitern für das Potential $V(x) = 0.3 \cos(x) + 0.7 \cos(2x)$ mit $\hbar = 1.5$.

Die hier beschriebene Ordnung der Bänder ist auch in den Linienbreiten der Abbildung 2.13 zu finden. Beginnt man bei seiner Betrachtung zunächst mit der Linienbreite des stabilsten Zustandes, so tritt zunächst ein Cluster mit drei Linienbreiten auf. Dieses setzt sich ab von einem Linienbreiten-Paar, das wiederum vom Nächsten getrennt verläuft.

Das nun folgende letzte Beispiel liefert noch einige interessante Eigenschaften, die im Folgenden Kapitel ebenfalls diskutiert werden. Außerdem wird das Beispiel noch zwei Mal im Rahmen der Matrixmodellbeschreibung als Illustration und Untersuchungsobjekt herangezogen. Das Beispiel sei gegeben durch das Potential

$$V(x) = 0.3 \cos(x) + 0.7 \cos(2x) \quad (2.27)$$

mit $\hbar = 1.5$. Aus den obigen Überlegungen kann mittels (2.27) direkt abgeleitet werden, dass ein Linienbreiten-Paar zu erwarten ist, welches sich deutlich von den instabileren Zuständen absetzt. Dies liegt an dem großen Fourierterm $\beta = 0.7$. Eine Bestätigung dieser Erwartung findet man in Abb. 2.14. Zusätzlich zum Auftreten des Linienbreiten-Paares fällt an Abb. 2.14 auf, dass die Quasienergien des Grund- und ersten angeregten Zustandes keine Geraden mehr bilden sondern oszillieren. Die Linienbreiten dieser beiden Zustände verlaufen nahezu *parallel* und haben lediglich eine vermiedene Kreuzung bei $1/F \approx 8$. Sie führen außerdem eine Hauptoszillation durch, welche von kleineren Oszillationen, die durch resonantes Tunneln mit den höher angeregten Zuständen verursacht wird, überlagert ist.

Diese Phänomene werden im nächsten Kapitel im Rahmen eines Matrixmodells für Wannier-Stark-Leitern geklärt.

2.2.4 Zusammenfassung

Das Kapitel lieferte zunächst Aussagen über das Verhalten der Resonanzenergien bei kleinen Änderungen des betrachteten periodischen Potentials. Es stellte sich heraus, dass die Resonanzenergien der angeregten WS-Leitern sehr sensibel gegenüber Veränderungen der benutzten Parameter sind. Im weiteren wurden die Resonanzstrukturen untersucht und eine qualitative Erklärung des Phänomens der Linienbreiten-Paarung gegeben.

Kapitel 3

Matrixmodell von Wannier–Stark–Leitern

Im folgenden Kapitel wird das Matrixmodell, das in [Glü99b, Glü00b] eingeführt wurde, für verschiedene Kopplungsstärken zwischen den beteiligten WS–Leitern untersucht. Zunächst wird der Fall zweier koppelnder Leitern ausführlich betrachtet. Im weiteren wird die kritische Kopplung zweier WS–Leitern bestimmt und die Erweiterung auf eine höhere Zahl von WS–Leitern kurz diskutiert. Der letzte Abschnitt befasst sich damit, die Erkenntnisse, die man bis dato gewonnen hat, auf die numerischen Ergebnisse des vorherigen Kapitels anzuwenden und im Rahmen des Matrixmodells zu klären und zu reproduzieren.

3.1 System zweier koppelnder Wannier–Stark–Leitern

Wir betrachten hier ein System aus zwei WS–Leitern, welches man erhält, wenn die Eigenenergien der anderen Leitern sich stark von diesen unterscheiden. Auch hier wird wieder, wie schon in der Streutheorie des Einführungskapitels, der Floquet–Bloch–Operator untersucht. Von diesem weiss man, dass seine Eigenwerte im Fall ungekoppelter Niveaus die Form

$$\lambda_\alpha = \exp(-i\theta_\alpha) = \exp(-i(E_\alpha(F) - \Gamma_\alpha(F)/2)/F)$$

haben. Der Realteil des Eigenwertes ist nicht eindeutig bestimmt, da λ_k mit $\exp(-i2\pi l)$ ($l \in \mathbb{Z}$) multipliziert werden kann, ohne die Eigenwerte der Matrix zu ändern. Dies entspricht den WS–Leitern des ursprünglichen Systems. Hierbei wird in diesem Abschnitt zunächst angenommen, dass beide Leitern eine endliche Lebensdauer Γ_α haben. Eine Kopplung in diesem Zustandsraum wird durch eine unitäre Kopplungsmatrix der Form:

$$W = \exp\left(-i\begin{pmatrix} 0 & w/F \\ w/F & 0 \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} \cos(w/F) & -i\sin(w/F) \\ -i\sin(w/F) & \cos(w/F) \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

vermittelt. Damit ergibt sich für den Evolutionsoperator $\tilde{U}(\tau_B)$ eines Systems untereinander koppelnder Zustände zu

$$\tilde{U}(\tau_B) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_0 \end{pmatrix} W. \quad (3.2)$$

Die Eigenwerte von $\tilde{U}(\tau_B)$ sind die gesuchten Energieeigenwerte. Für dieses Eigenwertproblem wird das charakteristische Polynom bestimmt und die Realteile der Resonanzenergien E_α und Linienbreiten Γ_α für die folgenden Fälle näher untersucht:

1. kleine Kopplung der Niveaus ($w/F \ll 1$),
2. fast maximale Kopplung der Niveaus ($w/F = \pi/2 - \epsilon$ mit $\epsilon \ll 1$).

Das charakteristische Polynom für Glg. (3.2) ist

$$0 = \lambda^2 - (\lambda_1 + \lambda_0) \cos(w/F) \lambda + \lambda_1 \lambda_0. \quad (3.3)$$

Der Fall ungekoppelter Niveaus liefert keine zusätzlichen Aussagen, die Eigenenergien und Linienbreiten sind die des anfänglichen Systems. Sind die Niveaus schwach gekoppelt, so liefert Glg. (3.3) mit $\epsilon = w/F$

$$0 = \lambda^2 - (\lambda_1 + \lambda_0)(1 - \epsilon^2/2) \lambda + \lambda_1 \lambda_0. \quad (3.4)$$

Mit dem Ansatz $\tilde{\lambda}_0 \approx \lambda_0(1 + \delta_0)$, der annimmt, dass die Eigenwerte des gekoppelten Systems sich nicht stark von den ursprünglichen unterscheiden, ergibt sich der Korrekturterm

$$\delta_0 = \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\lambda_1 + \lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0}. \quad (3.5)$$

Hierbei wurden Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\delta_0^2)$ vernachlässigt. Mit der Beziehung $-i\tilde{\Theta}_0 = \ln \tilde{\lambda}_0 = \ln(\lambda_0) + \ln(1 + \delta_0) \approx \ln \lambda_0 + \delta_0$ ($|\delta_0| \ll 1$) folgt für den Quasiwinkel $\tilde{\Theta}_0$

$$\frac{\tilde{E}_0(F)}{F} - i \frac{\tilde{\Gamma}_0(F)}{2F} = \tilde{\Theta}_0 = \Theta_0 + i \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\lambda_1 + \lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0}. \quad (3.6)$$

Die Zerlegung in Real und Imaginärteil liefert also die Energie und Linienbreite des Grundzustandes. Der letzte Teil der rechten Seite von Glg. (3.6) kann wie folgt umgeformt werden

$$i \frac{\lambda_1 + \lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} = i \frac{\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right)^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{\lambda_0}{\lambda_1}\right)^{\frac{1}{2}}}{\left(\frac{\lambda_0}{\lambda_1}\right)^{\frac{1}{2}} - \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right)^{\frac{1}{2}}} = -\frac{\cos\left(\frac{\theta_1 - \theta_0}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\theta_1 - \theta_0}{2}\right)}, \quad (3.7)$$

und mit den komplexen Additionstheoremen für Sinus und Cosinus erhält man daraus

$$i \frac{\lambda_1 + \lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} = \frac{i \sinh y \cosh y - \sin x \cos x}{\sin^2 x \cosh^2 y + \sinh^2 y \cos^2 x} \quad (3.8)$$

mit $x = (E_1 - E_0)/2F$ und $y = -(\Gamma_1 - \Gamma_0)/4F$. Somit erhält man für den Realteil

$$\operatorname{Re} \left[i \frac{\lambda_1 + \lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} \right] = -\frac{\sin x \cos x}{\sin^2 x \cosh^2 y + \sinh^2 y \cos^2 x} = \frac{\sin 2x}{\cos 2x - \cosh 2y} \quad (3.9)$$

und für den Imaginärteil

$$\operatorname{Im} \left[i \frac{\lambda_1 + \lambda_0}{\lambda_1 - \lambda_0} \right] = \frac{\sinh 2y}{\cosh 2y - \cos 2x}. \quad (3.10)$$

Mit Glg. (3.6) erhält man für die Korrektur der Energie

$$\tilde{E}_0 = E_0 - \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\sin \left(\frac{E_1(F) - E_0(F)}{F} \right)}{\cos \left(\frac{E_1(F) - E_0(F)}{F} \right) - \cosh \left(\frac{\Gamma_0 - \Gamma_1}{2F} \right)} \quad (3.11)$$

und für die der Linienbreite

$$\frac{\tilde{\Gamma}_0}{2} = \frac{\Gamma_0}{2} - \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\sinh \left(\frac{\Gamma_0 - \Gamma_1}{2F} \right)}{\cosh \left(\frac{\Gamma_0 - \Gamma_1}{2F} \right) - \cos \left(\frac{E_1(F) - E_0(F)}{F} \right)}. \quad (3.12)$$

Die Resonanzenergien der angeregten WS–Leiter erhält man mittels des Ansatzes $\tilde{\lambda}_1 = \lambda_1(1 - \delta_1)$. Aus einer analogen Rechnung wie oben folgt, dass für die Korrekturen $\delta_0 = \delta_1$ gilt und damit ergibt sich die Energie und Linienbreite der angeregten WS–Leiter zu:

$$\tilde{E}_1 = E_1 + \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\sin \left(\frac{E_1(F) - E_0(F)}{F} \right)}{\cos \left(\frac{E_1(F) - E_0(F)}{F} \right) - \cosh \left(\frac{\Gamma_0 - \Gamma_1}{2F} \right)},$$

$$\frac{\tilde{\Gamma}_1}{2} = \frac{\Gamma_1}{2} - \frac{\epsilon^2}{2} \frac{\sinh \left(\frac{\Gamma_0 - \Gamma_1}{2F} \right)}{\cosh \left(\frac{\Gamma_0 - \Gamma_1}{2F} \right) - \cos \left(\frac{E_1(F) - E_0(F)}{F} \right)}.$$

Die schon in (3.6) angedeutete F –Abhängigkeit der Energien und Linienbreiten soll für die Energien nun konkretisiert werden. Näherungsweise kann man für die Energien ansetzen, dass $E_\alpha(F) = E_\alpha + D_\alpha F$ gilt. Der Einfluss des Stark–Feldes wird durch diesen Ansatz berücksichtigt. Zum einen verursacht das Stark–Feld eine Verschiebung des Potentialminimums (dies wirkt sich aber auf alle Energien gleichermaßen aus) und zum anderen wird das periodische Potential durch dessen Einfluß deformiert. Die Deformation des Potentials ist größer für größere Feldstärken, was mit diesem Ansatz beschrieben wird. Dieser Ansatz bedeutet, dass die Deformation des Potentials und damit die Lage der Energieniveaus sich linear mit der Feldstärke erhöht.

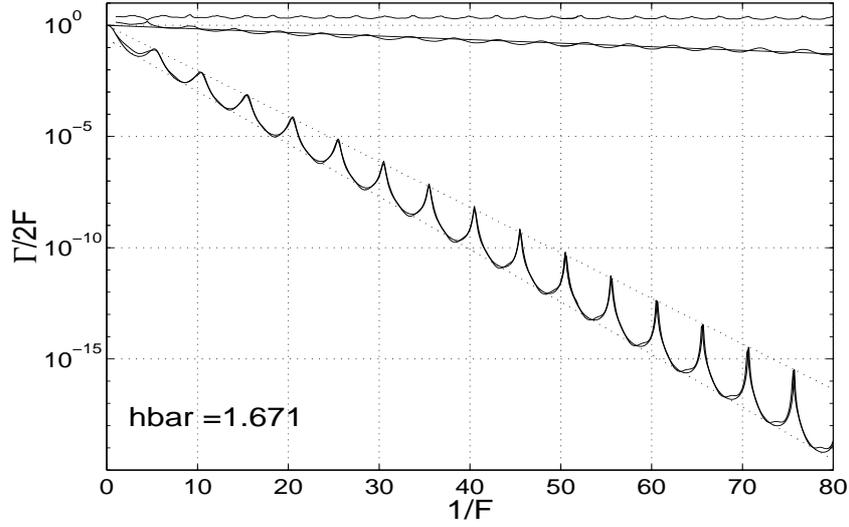


Abbildung 3.1: *Linienbreite der drei stabilsten Resonanzen als Funktion der inversen Feldstärke F für $\hbar = 1.6171$ (durchgezogene Linie). Betrachtet wurde hier das Potential $V(x) = \cos(x)$, das im Rahmen atomoptischer Untersuchungen bearbeitet wurde. Ebenfalls mit durchgezogener Linie ist der Fit eines Zwei-Zustands-Modells (aus [Glü00a]) dargestellt.*

Die Modellbeschreibung dieses Falles wurde im Rahmen der theoretischen Untersuchungen [Glü00b] kalter Atome in stehenden Laserfeldern unter dem Einfluss des Gravitationsfeldes als Stark–Feld benutzt [Rai97]. Hierbei wurde der Hamiltonoperator $H = p^2/2 + \cos(x) + Fx$ untersucht. Bei dem betrachteten System trat ein schwach koppelnder Grundzustand auf, dessen Verhalten mit Hilfe dieses Modells gut reproduziert werden konnte (siehe Abb. 3.1).

Im weiteren sollen die Fälle der maximalen und vor allem der fast maximalen Kopplung von WS–Leitern betrachtet werden. Die allgemeine Lösung des charakteristischen Polynoms (3.3) lautet

$$\lambda_{\pm} = \frac{\lambda_0 + \lambda_1}{2} \cos(w/F) \pm \sqrt{\frac{(\lambda_0 + \lambda_1)^2}{4} \cos^2(w/F) - \lambda_0 \lambda_1} \quad (3.13)$$

und führt im Fall maximaler Kopplung, d. h. $w/F = \pi/2$, zu

$$\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{-\lambda_0 \lambda_1}. \quad (3.14)$$

Hieraus kann man ebenfalls die Energien und die Linienbreiten für diesen Fall berechnen. Ausgehend von $\lambda_{0,1} = \exp(-i\mathcal{E}_{0,1}/F)$ mit $\mathcal{E}_{\alpha} = E_{\alpha} - i\Gamma_{\alpha}/2$ ergibt sich

$$\lambda_{\pm} = \pm \exp\left(-i\frac{\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1}{2F}\right) \exp\left(i\frac{\pi}{2}\right) = \exp\left(-\frac{i}{2F}(\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1 - \pi F)\right) \exp(im\pi). \quad (3.15)$$

Mit $m \in \{0, 1\}$ und

$$\lambda_{\pm} = \exp\left(-\frac{i}{2F}(\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1 - \pi F + 2m\pi F)\right) \stackrel{!}{=} \exp(-i\theta_{\pm}) \quad (3.16)$$

folgt

$$\theta_{\pm} = \left(\frac{E_{\pm}}{F} - i\frac{\Gamma_{\pm}}{2F}\right) = \frac{1}{2F}(\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1 + (2m - 1)\pi F). \quad (3.17)$$

Schließlich erhält man die Energien und die Linienbreite zu

$$E_{\pm} = \frac{E_0(F) + E_1(F)}{2F} \mp \frac{\pi}{2}F \quad \Gamma_{\pm} = \frac{\Gamma_0 + \Gamma_1}{2} \quad (3.18)$$

$$= \frac{E_0 + E_1}{2} + \frac{D_0 + D_1}{2}F \mp \frac{\pi}{2}F. \quad (3.19)$$

Die Energien zweier maximal koppelnder Leitern sind in den Darstellungen $E/\pi F$ vs. $1/F$ parallele Geraden mit der Steigung $(E_0 + E_1)/2$ und einem Abstand der Achsenabschnitte von π (vgl. Abb. 2.7). Ist nun die Wechselwirkung der beiden Wannier–Stark–Leitern fast maximal, d.h. $w/F = \pi/2 - \epsilon$, so erhält man aus dem Matrix–Modell die charakteristische Gleichung

$$0 = \lambda^2 + \epsilon(\lambda_0 + \lambda_1)\lambda + \lambda_0\lambda_1. \quad (3.20)$$

Bei maximaler Kopplung der Niveaus ergaben sich die Lösungen (3.14), von denen bei fast maximaler Kopplung eine kleine Abweichung zu erwarten ist, weshalb der Ansatz $\tilde{\lambda}_0 = i\sqrt{\lambda_0\lambda_1}(1 + \delta_0)$ in Glg. (3.20) eingesetzt wird. Terme der Ordnung $\mathcal{O}(\delta_0^2)$ werden wieder vernachlässigt. Dies führt auf den Korrekturterm

$$\delta_0 = -\frac{i\epsilon}{2} \left(\sqrt{\frac{\lambda_0}{\lambda_1}} + \sqrt{\frac{\lambda_1}{\lambda_0}} \right). \quad (3.21)$$

Führt man $\lambda_k = \exp(-i\mathcal{E}_k/F)$ ein, so lässt sich dies in die Form

$$\delta_0 = -i\epsilon \cos\left(\frac{\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_1}{2F}\right) \quad (3.22)$$

bringen. Als nächstes soll der Einfluss auf die Energie und die Linienbreite des Grundzustandes berechnet werden. Dazu muss der Quasiwinkel $\tilde{\theta}_0 = (\tilde{E}_0(F) - i\tilde{\Gamma}_0/2)/F$ des gestörten Eigenwertes berechnet werden. Mit

$$\tilde{\lambda}_0 = \sqrt{-\lambda_0\lambda_1}(1 + \delta_0) = \exp(-i\tilde{\theta}_0) \quad (3.23)$$

ergibt sich

$$\tilde{\theta}_0 = i \ln(\sqrt{-\lambda_0\lambda_1}) + i\delta_0 \quad (3.24)$$

$$= \frac{\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}_1}{2F} - \frac{\pi}{2} + \epsilon \cos\left(\frac{\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_1}{2F}\right) \quad (3.25)$$

und mit $\operatorname{Re} \cos(z) = \cos x \cosh y$ für $z = x + iy \in \mathbb{C}$ folgt für die Energie

$$\frac{\tilde{E}_0}{F} = \frac{E_0(F) + E_1(F)}{2F} - \frac{\pi}{2} + \epsilon \cos\left(\frac{E_0(F) - E_1(F)}{2F}\right) \cosh\left(\frac{\Gamma_1 - \Gamma_0}{4F}\right). \quad (3.26)$$

Für die Linienbreite folgt mit $\operatorname{Im} \cos(z) = -\sin x \sinh y$ für $z = x + iy \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\Gamma}_0}{2F} &= \frac{\Gamma_0 + \Gamma_1}{4F} + \epsilon \sin\left(\frac{E_0(F) - E_1(F)}{2F}\right) \sinh\left(\frac{\Gamma_1 - \Gamma_0}{4F}\right) \\ &= \frac{\Gamma_0 + \Gamma_1}{4F} + \epsilon \sin\left(\frac{E_0 - E_1}{2F} + \frac{D_0 - D_1}{2}\right) \sinh\left(\frac{\Gamma_1 - \Gamma_0}{4F}\right). \end{aligned} \quad (3.27)$$

Man sieht, dass die Differenz der Realteile die Frequenz einer Oszillation darstellt und die Differenz der Deformationskonstanten D_α eine Phasenverschiebung verursacht. Die Schwingung mit der Amplitude $\epsilon \sinh((\Gamma_0 - \Gamma_1)/4F)$ wird um die im Teil mit maximaler Kopplung berechnete Gerade durchgeführt. Der erste angeregte Zustand ergibt sich aus einer analogen Rechnung mittels des Ansatzes $\tilde{\lambda}_1 = -\sqrt{-\lambda_0 \lambda_1}(1 - \delta_0)$ zu

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{E}_1}{F} &= \frac{E_0(F) + E_1(F)}{2F} - \frac{\pi}{2} - \epsilon \cos\left(\frac{E_0(F) - E_1(F)}{2F}\right) \cosh\left(\frac{\Gamma_1 - \Gamma_0}{4F}\right) \\ \frac{\tilde{\Gamma}_1}{2F} &= \frac{\Gamma_0 + \Gamma_1}{4F} - \epsilon \sin\left(\frac{E_0(F) - E_1(F)}{2F}\right) \sinh\left(\frac{\Gamma_1 - \Gamma_0}{4F}\right). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Auch die Energien und Linienbreiten des ersten angeregten Zustandes fast maximal kopplender Systeme führen eine Oszillation um die Wert maximaler Kopplung durch.

Diese Formeln sollen nun mit den exakten, quantenmechanischen Berechnungen verglichen werden. Dazu wird das Potential $V(x) = 0.3 \cos(x) + 0.7 \cos(2x)$ mit $\hbar = 1.5$ gewählt. Dieses Potential wurde schon in Kap. 2.2.3 vorgestellt, wobei wir dort gesehen haben (siehe Abb. 2.14 oder Abb. 3.2), dass sich die Lebensdauern der stabilsten und der zweit stabilsten WS-Leiter paaren. Dieses Paar setzt sich deutlich von den instabileren WS-Leitern ab. Damit ist ein ideales Untersuchungsobjekt gefunden. Außerdem fällt auf, dass die Realteile der Resonanzenergien als Funktion der Feldstärke oszillieren (grüner und blauer Graph in Abb. 3.2). Deshalb liegt hier der Fall fast maximaler Kopplung vor.

Benutzt man (3.27) und (3.28), um das Verhalten der Resonanzenergien zu modellieren, so erhält man Abbildung 3.2. Dieser entnimmt man, dass das Matrixmodell mit zwei beteiligten WS-Leitern nicht ausreicht. Dieses Modell beschreibt nur die Hauptoszillation der Linienbreite. Die Oszillationen höherer Frequenz werden durch die Wechselwirkung der betrachteten WS-Leitern mit instabileren WS-Leitern verursacht. Die Beschreibung der Realteile der Resonanzenergien ist im Rahmen dieser Modellvorstellung schon recht gut.

3.2 Kopplung von mehr als zwei WS-Leitern

Das Matrixmodell kann auf mehr als zwei WS-Leitern erweitert werden. Der Aufbau ist analog dem Fall zweier Leitern. Zunächst wird die ungestörte Floquet-Bloch-Matrix mit

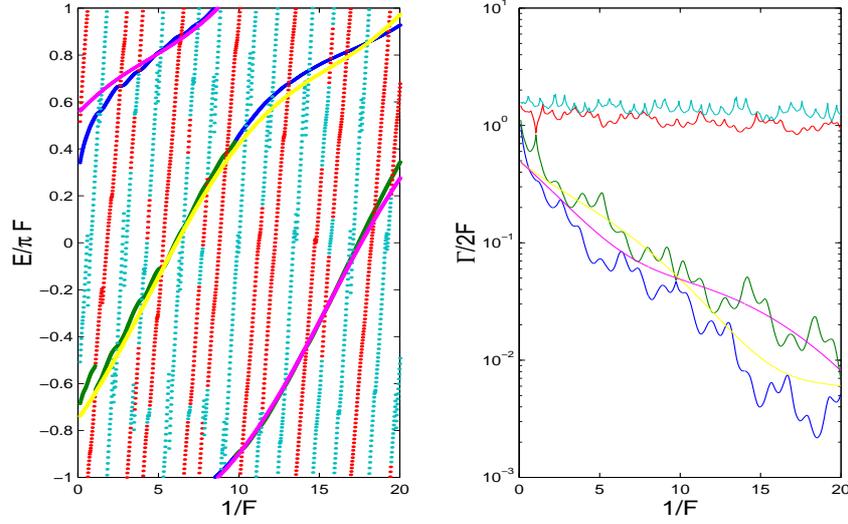


Abbildung 3.2: Modellierung der numerischen Daten des Potentials $V(x) = 0.3 \cos(x) + 0.7 \cos(2x)$ mit $\hbar = 1.5$ mittels eines 2×2 -Matrixmodells.

den Energie $\mathcal{E}_\alpha = E_\alpha - i\Gamma_\alpha/2$ aufgestellt. Betrachtet man den Fall von drei WS–Leitern, so ist die Floquet–Bloch–Matrix wie folgt aufgebaut

$$U_0(F) = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

mit $\lambda_\alpha = \exp(-i\mathcal{E}_\alpha/F)$. Die Wechselwirkung der WS–Leitern wird wiederum durch die Multiplikation mittels unitärer Matrizen (hier $\in SU(3)$) eingeführt. Hierbei nimmt man an, dass die Wechselwirkung der höheren WS–Leitern untereinander wesentlich schneller abläuft als mit dem Grundzustand. Die Wechselwirkung wird durch zwei aufeinanderfolgende Rotationen

$$U(F) = U_0(F)e^{-iW_{12}/F}e^{-iW_{01}/F} \quad (3.30)$$

bewirkt. Hierbei beschreibt

$$W_{12} = \begin{pmatrix} 0 & w_1 & 0 \\ w_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

die Kopplung zwischen λ_2 und λ_1 und ein analog aufgebautes W_{01} die zwischen λ_1 und λ_0 . Wie schon im Fall zweier kopplender Leitern kann man folgende Identität ausnutzen

$$e^{-iW_{12}/F} = \begin{pmatrix} \cos(w_1/F) & -i \sin(w_1/F) & 0 \\ -i \sin(w_1/F) & \cos(w_1/F) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

Dies führt mit $c_\alpha = \cos(w_\alpha/F)$ auf das charakteristische Polynom

$$\lambda_2 \lambda_1 \lambda_0 - \tilde{\lambda}(\lambda_2 \lambda_1 c_0 + \lambda_2 \lambda_0 c_1 c_0 + \lambda_1 \lambda_0 c_1) + \tilde{\lambda}^2(\lambda_2 c_1 + \lambda_1 c_1 c_0 \lambda_0 c_0) - \tilde{\lambda}^3 = 0 \quad (3.33)$$

und bei fast maximaler Kopplung, d. h. $w_\alpha = \epsilon_\alpha/F - \pi/2$, auf

$$\lambda_2 \lambda_1 \lambda_0 - \tilde{\lambda}(\lambda_2 \lambda_1 \epsilon_0 + \lambda_2 \lambda_0 \epsilon_1 \epsilon_0 + \lambda_1 \lambda_0 \epsilon_1) + \tilde{\lambda}^2(\lambda_2 \epsilon_1 + \lambda_1 \epsilon_1 \epsilon_0 + \lambda_0 \epsilon_0) - \tilde{\lambda}^3 = 0. \quad (3.34)$$

Mit den drei Ansätzen, für die verschiedenen Lösungszweige

$$\tilde{\lambda}_0 = \sqrt[3]{\lambda_0 \lambda_1 \lambda_2}(1 + \delta_0), \quad \tilde{\lambda}_1 = \exp(i2\pi/3) \sqrt[3]{\lambda_0 \lambda_1 \lambda_2}(1 + \delta_1), \quad (3.35)$$

$$\tilde{\lambda}_2 = \exp(i4\pi/3) \sqrt[3]{\lambda_0 \lambda_1 \lambda_2}(1 + \delta_2) \quad (3.36)$$

oder dem allgemeinen Ansatz

$$\tilde{\lambda}_k = \kappa \sqrt[3]{\lambda_0 \lambda_1 \lambda_2}(1 + \delta_k) \text{ mit } \kappa = \exp\left(i\frac{2\pi k}{3}\right), \quad k \in \{0, 1, 2\} \quad (3.37)$$

erhält man für die Korrekturterme mit einer Rechnung, wie im zwei WS-Leiter-Fall

$$\delta_k = -\frac{2\epsilon_1 i}{3} \sin\left(\frac{2\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_1}{3F} + \alpha\right) - \frac{2\epsilon_0 i}{3} \sin\left(\frac{2\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_1 - \mathcal{E}_2}{3F} + \alpha\right), \quad (3.38)$$

wobei $\kappa = \exp(i\alpha)$ benutzt wurde. Den Fall maximaler Kopplung erhält man, indem man $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 0$ setzt. Der Term für δ_k wird also dadurch Null, d. h. es liegen keine Oszillationen vor. Im Falle fast maximaler Kopplung ergeben sich die Energie und Linienbreite des Grundzustandes mit (3.38) zu:

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{E}_0}{F} &= \frac{E_0 + E_1 + E_2}{3F} + \frac{2\epsilon_0}{3} \sin\left(\frac{2E_0 - E_1 - E_2}{3F} + \alpha\right) \cosh\left(\frac{\Gamma_1 + \Gamma_2 - 2\Gamma_0}{6F}\right) \\ &\quad + \frac{2\epsilon_1}{3} \sin\left(\frac{2E_2 - E_0 - E_1}{3F} + \alpha\right) \cosh\left(\frac{\Gamma_0 + \Gamma_1 - 2\Gamma_2}{6F}\right) - \alpha \\ \frac{\tilde{\Gamma}_0}{2F} &= \frac{\Gamma_0 + \Gamma_1 + \Gamma_2}{6F} - \frac{2\epsilon_0}{3} \cos\left(\frac{2E_0 - E_1 - E_2}{3F} + \alpha\right) \sinh\left(\frac{\Gamma_1 + \Gamma_2 - 2\Gamma_0}{6F}\right) \\ &\quad + \frac{2\epsilon_1}{3} \cos\left(\frac{2E_2 - E_0 - E_1}{3F} + \alpha\right) \sinh\left(\frac{\Gamma_0 + \Gamma_1 - 2\Gamma_2}{6F}\right) \end{aligned} \quad (3.39)$$

Der Fall n fast maximal koppelnder Leitern ist schwierig zu berechnen. Man kann aber aus Glg. (3.39) sehen, dass die Struktur analog der von zwei koppelnden Leitern sein sollte. Wie erwartet steigt die Zahl der Oszillationen mit der Zahl der koppelnden Leitern. Die Amplitude der Oszillationen nimmt ab, je mehr die WS-Leitern koppeln.

3.3 Kritische Kopplung zweier WS–Leitern

Nun soll noch einmal die allgemeine Lösung (3.13) des Eigenwertproblems (3.2) betrachtet werden. In diesem Abschnitt soll die Abhängigkeit der Lösungen λ_{\pm} , vom Kopplungsparameter $\epsilon = w/F$ untersucht werden. Die Betrachtung findet bei festgehaltener Feldstärke statt. Der Kopplungsparameter kann im Rahmen der Streutheorie z.B. durch Variation der Bandlücke (vgl. Kap. 2.2.3) erreicht werden. Glg. (3.13) wird nun wie folgt umgeformt:

$$\lambda_{\pm} = \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{2} \right) \cos \epsilon \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{2} \right)^2 \cos^2 \epsilon - (\cos^2 \epsilon + \sin^2 \epsilon) \lambda_0 \lambda_1} \quad (3.40)$$

$$= \left(\frac{\lambda_0 + \lambda_1}{2} \right) \cos \epsilon \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda_0 - \lambda_1}{2} \right)^2 \cos^2 \epsilon - \lambda_0 \lambda_1 \sin^2 \epsilon} \quad (3.41)$$

Mit der Darstellung $\lambda_k = r_k \exp(i\phi_k) = \exp(-i(E_k - i\Gamma_k/2)/F)$; $\phi_k \in [0, 2\pi)$, $r_k \in \mathbb{R}$ und unter Betrachtung von Kreuzungen der Energien des ungekoppelten Systems (d.h. für die Realteile der Quasienergien gilt $\phi = \phi_1 = \phi_2$) folgt

$$\lambda_{\pm} = \left[\left(\frac{r_0 + r_1}{2} \right) \cos \epsilon \pm \sqrt{\left(\frac{r_0 - r_1}{2} \right)^2 \cos^2 \epsilon - r_0 r_1 \sin^2 \epsilon} \right] \exp(i\phi). \quad (3.42)$$

Für $\epsilon = 0$ sind die Phasen von λ_+ und λ_- identisch, d. h. es gilt immer noch $\phi = \phi_1 = \phi_2$. Erhöht man die Kopplung zwischen den Leitern, d. h. vergrößert man ϵ ($0 \leq \epsilon \leq \pi/2$), so ändert sich zunächst nur der Betrag von λ_{\pm} . Wird die Kopplung nun so groß, dass die Diskriminante negativ wird, so ändern sich auch die Phasen von λ_{\pm} . Die Phasen der beiden Leitern stimmen nicht mehr überein (siehe Abb. 3.3). Mit den Energien E_k und Linienbreiten Γ_k argumentiert bedeutet dies, dass durch Variation der Kopplungsstärke der betrachteten WS–Leitern für konstante Feldstärke so eine Kreuzung der Energien in eine vermiedene Kreuzung der Energien übergehen kann und die Linienbreiten gerade den umgekehrten Prozess durchlaufen.

Man kann nun die Kopplung zwischen den Leitern bestimmen, ab der die Kreuzungen der Energien in vermiedene Kreuzungen übergehen. Setzt man die Diskriminante also Null und löst nach ϵ auf, so erhält man

$$\tan^2 \epsilon_{krit} = \frac{(|\lambda_0| - |\lambda_1|)^2}{4|\lambda_0 \lambda_1|}. \quad (3.43)$$

ϵ_{krit} soll kritische Kopplung genannt werden. Abbildung 3.3 entnimmt man, dass für diesen Wert das oben beschriebene Szenario eintritt.

3.4 Vergleich des Matrixmodelles mit den numerischen Berechnungen

Das im letzten Abschnitt eingeführte Matrixmodell soll dazu benutzt werden, die in Kap. 2.2 durch die Streutheorie bestimmten Resonanzstrukturen zu fitten. Das Matrixmo-

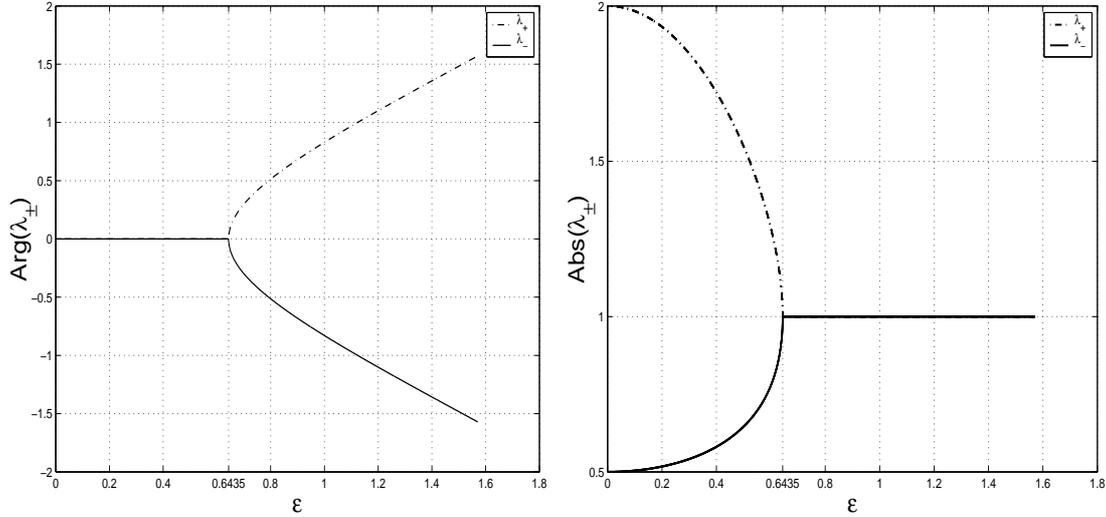


Abbildung 3.3: Phase und Absolutwert der Lösungen λ_{\pm} in Abhängigkeit vom Kopplungsparameter ϵ . Die Kritische Kopplung ist an der Bifurkationsstelle der Lösungen (hier $\epsilon_{krit} = 0.6435$).

dell und damit die dazugehörigen freien Parameter werden so angepasst, dass Modell und quantenmechanische Berechnung zur Deckung kommen. Dies führt auf ein hochdimensionales Optimierungsproblem, wie wir im Folgenden sehen werden. Ein zukünftiges Ziel ist es, diese hier anzupassenden Parameter aus unabhängigen Rechnungen semiklassisch oder auch quantenmechanisch zu bestimmen. Die hier benutzte Optimierung verläuft je nach Kopplungsart unterschiedlich. Für schwache Kopplung zwischen den beteiligten Niveaus lässt sich dies anhand der Beschreibung, die in [Glü00b] gegeben ist, durchführen. Um das Modell mit den numerischen Ergebnissen vergleichen zu können, müssen wir Annahmen über das allgemeine Verhalten der benutzten Parameter in Abhängigkeit von der Feldstärke machen. Die Feldstärke verursacht eine Energieverschiebung des Potentialminimums der beiden Nachbartöpfe um πF und eine Deformation des feldfreien periodischen Potentials. Die Verschiebung beeinflusst alle Energien gleichermaßen, weshalb sie durch eine Verschiebung des Energienullpunktes kompensiert werden kann. Die Deformation wirkt sich jedoch stärker auf die höher liegenden Energieniveaus aus. Deshalb benutzen wir für diese den Ansatz $E_{\alpha}(F) = E_{\alpha} + D_{\alpha}F$, den wir schon im letzten Kapitel eingesetzt haben. Der Ansatz für die Linienbreiten stammt aus der Zener-Theorie [Zen34]. Hierbei nehmen wir an, dass die höchste noch betrachtete WS-Leiter mit

$$\Gamma/2 = aF \exp(-b/F) \quad (3.44)$$

an das Kontinuum koppelt, also eine endliche Lebensdauer hat. Die Linienbreiten der niedrigeren WS-Leitern werden dann durch die Kopplung dieser Leitern untereinander beschrieben. Diese Kopplung soll durch den selben Zener-Ansatz wie bei (3.44) gegeben sein, also

$$w = cF \exp(-d/F). \quad (3.45)$$

Die unteren WS–Leitern werden also als stabil vorausgesetzt ($\Gamma_\alpha = 0$). Die instabile Natur der Resonanzen wird durch die Kopplung der Leitern erreicht. Zunächst werden die Parameter a und b so angepasst, dass das mittlere Verhalten der numerischen Daten beschrieben wird. Der Parameter a ist dabei der Schnittpunkt mit der Γ –Achse und b die Steigung in der halblogarithmischen Darstellung (vgl. z.B. Abb. 3.4). Dieselbe Anpassung wird für die Kopplung durchgeführt, so dass dann das Verhalten der Linienbreiten im Mittel beschrieben wird. Damit ist gemeint, dass die Gerade, die durch den Zeneransatz in der halblogarithmischen Darstellung gegeben ist, die richtige Steigung hat. Im nächsten Schritt werden die E_α bestimmt. Diese erhält man näherungsweise als mittlere Energie des α -ten Bandes des feldfreien Hamiltonoperators, also durch (vgl. Kap. 2.2.1)

$$E_\alpha = \langle E_\alpha(\kappa) \rangle = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} E_\alpha(\kappa) d\kappa. \quad (3.46)$$

Die Differenz dieser Energien bestimmt die Frequenz der Oszillationen der Linienbreiten, wie man an (3.27) und der Überlegung in Abschnitt Kap. 3.1 erkennt. Zuletzt werden die Deformationskonstanten D_α angepasst, die, wie wir im letzten Abschnitt gelernt haben, eine Phasenverschiebung verursachen, d.h. durch Variation dieser Parameter kann man die Maxima der numerischen Ergebnisse und diese Modellbetrachtung zur Deckung bringen. Ist die Kopplung zwischen zwei benachbarten Niveaus groß, d.h. gilt $w/F \approx \pi/2$, so muss man mehr Niveaus berücksichtigen. Zunächst muss man beachten, dass nach (3.27) und (3.28) die Linienbreiten der beiden Zustände nahezu entartet sind.

Exemplarisch soll eine Optimierung anhand des Potentials

$$V(x) = 0.3 \cos(x) + 0.7 \cos(2x) \quad \text{mit } \hbar = 1.5,$$

welches schon aus dem letzten Abschnitt bekannt ist, durchgeführt werden. Dieses Potential wurde schon in Kap. 2.2.3 und Kap. 3.1 betrachtet und zeichnete sich durch zwei fast maximal koppelnde WS–Leitern aus. Außerdem erkennt man zwei stark–koppelnde, angeregte Niveaus (siehe Abb. 3.4). Deshalb beschreibt man dieses System — unter Vernachlässigung der Wechselwirkung mit höheren Leitern — durch ein Modell mit vier WS–Leitern. Die Kopplung zwischen den beiden Leiter–Paaren wird als schwach angenommen. Die Anpassung der fast maximal koppelnden WS–Leitern erfolgt zunächst analog der schwach koppelnden Leitern. Der entscheidende Unterschied dieser Kopplungsarten liegt nun darin, dass man für im letzten Fall die Gleichungen (3.27) und (3.28) beachten muss. Dort liest man ab, dass bei konstanter Summe $E_1(F) + E_2(F)$ die Differenz $E_1(F) - E_2(F)$ richtig eingestellt werden muss, d. h. sowohl die Schwingungsfrequenz als auch die Phasenlage der Schwingung müssen passend gewählt werden. Die Modellanpassung bei fast maximaler Kopplung ist also ein Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen. Dieses Beispiel benötigt also sowohl die Anpassung für schwach als auch für fast maximal koppelnde Leitern.

Das zunächst grob angepasste Modell kann mittels eines *Simulated Annealing*–Algorithmus optimiert werden. Die Methode des *Simulated Annealing* ist ein Vertreter aus einer Klasse von Algorithmen, die erstmals 1953 von Metropolis et al. [Met53] benutzt

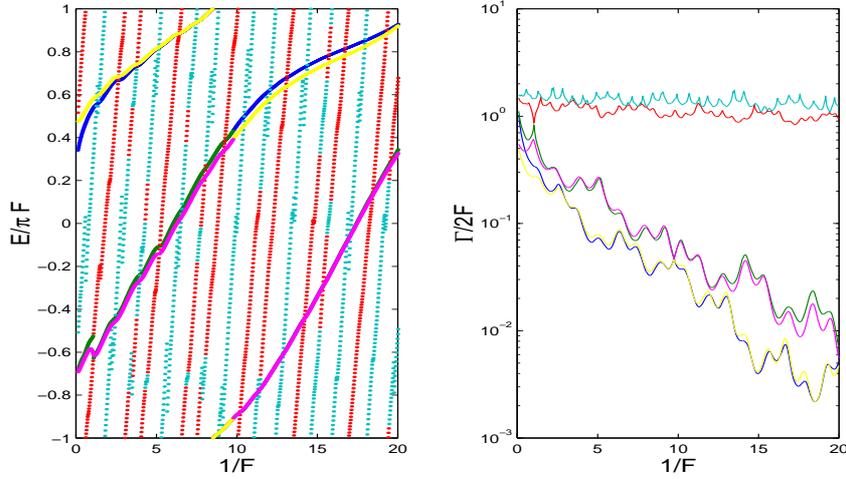


Abbildung 3.4: Modellierung der Numerischen Daten des Potentials $V(x) = 0.3 \cos(x) + 0.7 \cos(2x)$ mit $\hbar = 1.5$ mittels eines 4×4 -Matrixmodells.

worden. Man verwendet sie für hochdimensionale Optimierungsprobleme, wobei ihre Implementierung vergleichsweise einfach ist (siehe Anhang A).

Will man diesen Algorithmus benutzen, so muss man folgendes beachten [Pre95]:

- man muss eine Beschreibung der möglichen Zustände des Systems haben,
- man muss die Möglichkeit haben, zufällige Konfigurationen des Systems zu erzeugen,
- man muss eine Bewertungsfunktion definieren können, deren Minimierung das Ziel des Algorithmus ist
- und man muss einen Kontrollparameter T einführen, der die Abkühlung kontrolliert, d. h. welchen Prozentsatz der Schritte der Algorithmus in die falsche Richtung akzeptiert.

In diesem Fall ist die Bewertungsfunktion durch ein Abstandsmaß (Norm) zweier Funktionen der folgenden Form gegeben (vgl. auch Anhang A):

$$\|\mathcal{E}_{QM} - \mathcal{E}_{mod}\| = \sum_k \left(\int_{1/F_0}^{1/F_1} |E_{QM,k}(F) - E_{mod,k}(F)| d\left(\frac{1}{F}\right) + \int_{1/F_0}^{1/F_1} \left| \ln \left(\frac{\Gamma_{mod,k}(F)}{\Gamma_{QM,k}(F)} \right) \right| d\left(\frac{1}{F}\right) \right), \quad (3.47)$$

wobei sich die Summe über die betrachteten WS-Leitern erstreckt. Hierbei sind E_{QM} , Γ_{QM} die quantenmechanischen Werte der Streutheorie und E_{mod} , Γ_{mod} die Werte, die man mittels der Modellbeschreibung erhält. Nun soll noch gezeigt werden, dass die so definierte Bewertungsfunktion die WS-Leitern nicht unterschiedlich wichtet. Hierbei wird

angenommen, dass die Modellparameter sich nur noch durch eine kleine absolute Abweichung von den quantenmechanischen Werten unterscheiden.

Betrachtet man die Energien, so ist sofort mit dem Ansatz $E_k(F) = E_k + D_k F$ klar, dass sich die Unterschiede zwischen den verschiedenen WS–Leitern nur linear auswirken. Deshalb ist eine unausgeglichene Gewichtung der unterschiedlichen Energien nicht zu erwarten.

Bei den Linienbreiten ist dies nicht unmittelbar klar. Würde man den natürlichen Logarithmus in Glg. (3.47) durch eine Differenz der beiden Linienbreiten ersetzen und die Annahmen (3.44) und (3.45) machen, so würden die instabileren WS–Leitern stärker gewichtet werden. Dies erkennt man an folgender Überlegung. Definiert man die Beiträge der Linienbreite durch:

$$J_k = \int_{1/F_0}^{1/F_1} |\Gamma_{QM,k}(F) - \Gamma_{M,k}(F)| d(1/F), \quad (3.48)$$

so folgt mit dem Landau-Zener Ansatz ($\Gamma_k \sim F \exp(-\mu_k/F)$), der den mittleren Verlauf der Linienbreiten approximiert, dass gilt $J_m \ll J_n$ für $m < n$. Bei einem Fit gleichzeitig mehrerer WS–Leitern würde dies nicht zum erwünschten Ziel führen. Der Fit würde nur für die instabilste betrachtete WS–Leiter ein vernünftiges Ergebnis liefern. Die anderen WS–Leitern würden nicht richtig berücksichtigt werden.

Jetzt soll noch der Anteil der Linienbreiten in obiger Bewertungsfunktion betrachtet werden.

$$J_k = \int_{1/F_0}^{1/F_1} \left| \ln \left(\frac{\Gamma_{m,k}(F)}{\Gamma_{QM,k}(F)} \right) \right| d(1/F) \approx \int_{1/F_0}^{1/F_1} |\mu_{QM,k}/F - \mu_{M,k}/F| d(1/F) \quad (3.49)$$

$$\stackrel{1/F > 0}{=} \int_{1/F_0}^{1/F_1} |\mu_{QM,k} - \mu_{M,k}| / F d(1/F) = |\mu_{QM,k} - \mu_{M,k}| \frac{1}{2} (1/F_1^2 - 1/F_0^2) \quad (3.50)$$

Die Wichtungen sind also für verschiedenen WS–Leitern nicht wesentlich unterschiedlich, da die μ_k sich nicht stark (nicht in Zehnerpotenzen) unterscheiden.

Zur Auswertung der Bewertungsfunktion muss garantiert werden, dass die Resonanzenergien der beiden Berechnungsmethoden identisch sortiert sind. Diese Sortierung wird für Linienbreiten und Energien getrennt durchgeführt. Sowohl die Linienbreiten als auch die Energien werden in steigender Reihenfolge geordnet. Diese Ordnung wurde eingeführt, damit die Quasienergie eine stetige Funktionen wird. Würde man die Energie nach der Ordnung der Lebensdauern sortieren hätte man Sprünge in der Funktion $E(F)$ an Kreuzungen der Linienbreiten und vermiedenen Kreuzungen der Energien.

Abbildung 3.4 stellt das Ergebnis nach einer endlichen Anzahl von Annealing–Schritten dar. Dargestellt sind in gelb die stabilste und in magenta die zweit stabilste WS–Leiter, die mittels des Matrixmodells bestimmt wurden. Die Übereinstimmung der beiden Methoden ist schon recht gut. Die Linienbreiten werden durch dieses Modell wesentlich besser reproduziert als durch das zwei Leiter–Modell. Damit wurde auch eine Erklärung für das Linienbreiten–Paarungs–Phänomen im Rahmen des Matrixmodells für WS–Leitern geliefert.

3.5 Zusammenfassung

Das 2×2 -Matrixmodell gibt im Falle maximal oder fast maximaler Kopplung der betrachteten WS-Leitern eine Beschreibung des Phänomens der Linienbreiten-Paarung. Das höherdimensionale Matrixmodell konnte als Ausgangspunkt genommen werden, die durch die Streutheorie erhaltenen Werte zu fitten. Das Fitproblem wurde durch einen Optimierungs-Algorithmus für die Modell-Parameter gelöst.

Kapitel 4

Absorptionsspektren in Halbleiter–Übergittern

4.1 Einführung

Das letzte Kapitel befasst sich mit der Absorptionsspektroskopie von Halbleiter–Übergittern. Das Thema soll zunächst geschichtlich eingeordnet werden. Im Jahre 1960 schlug Wannier [Wan60] vor, dass das Spektrum eines Blochteilchens unter dem Einfluss eines äußeren elektrischen Feldes aus äquidistanten Eigenwerten besteht, den sogenannten Wannier–Stark–Leitern. Später wurde von Avron [Avr77] jedoch bewiesen, dass das Spektrum kontinuierlicher Natur ist. WS–Leitern und Bloch–Oszillationen wurden schon für natürliche Kristalle vorhergesagt, die Beobachtung ist jedoch unwahrscheinlich, da unter realistischen Bedingungen die Lebensdauer der WS–Zustände wesentlich kürzer ist als die Periode der Bloch–Oszillationen. In künstlichen Halbleiter–Übergittern [Esa70] ist die Situation jedoch geeigneter, da die Gitterkonstanten wesentlich größer und die Breiten der Minibänder kleiner sind. 1988 wurde die WS–Quantisierung erstmals experimentell durch Spektroskopie an Übergittern nachgewiesen [Men88, Voi88]. Es ist deshalb von Interesse die im Experiment gemessenen Absorptionsspektren mit theoretischen Werten zu vergleichen.

4.2 Herleitung der Absorptionsdichte

Bei der Spektroskopie von Halbleiter–Übergittern setzt man die Probe einem schwachen Wechselfeld $F_\omega x \cos(\omega t)$ mit variabler Frequenz ω aus. Hier wirkt das Wechselfeld auf ein System verschiedener WS–Leitern resonanter Zustände. Ein passend eingestelltes Wechselfeld induziert Übergänge zwischen den verschiedenen WS–Leitern. Fährt man die Frequenz ω des Probelasers kontinuierlich durch, so werden nacheinander Übergänge aktiviert und damit unterschiedliche, angeregte WS–Leitern besetzt. In den betrachteten Materialien ist die Lebensdauer der angeregten Zustände wesentlich kürzer als die

Blochperiode des Systems, so dass die Zustände zerfallen, bevor es zur Bloch-Oszillation kommt.

Die Zerfallsrate des Grundzustandes wird damit durch die Übergangsrate $D(\omega)$ in eine angeregte WS-Leiter bestimmt. Die Linienbreite des Grundzustandes ist also gegeben durch

$$\Gamma_0(\omega) \approx \Gamma_0 + D(\omega),$$

wobei Γ_0 die Linienbreite ohne äußeres Wechselfeld ist. In Wannier-Stark-Systemen ist das Zerfallsspektrum des Grundzustandes durch

$$\Gamma_0(\omega) = \Gamma_0 + \frac{F_\omega^2}{2} \sum_{\beta > 0} \sum_L \text{Im} \left[\frac{V_{0,\beta}^2(L)}{(E_{\beta,l} + 2\pi FL - E_{0,l} - \hbar\omega) - i\Gamma_\beta/2} \right] \quad (4.1)$$

gegeben [Glü00a] wobei

$$V_{0,\beta}^2(L) = \langle \Psi_{0,l} | x | \Psi_{\beta,l+L} \rangle \langle \Psi_{\beta,l+L} | x | \Psi_{0,l} \rangle$$

das Dipolmatrixelement zwischen einem beliebigen Wannier-Stark-Zustand $\Psi_{0,l}(x)$ der stabilsten Leiter und einem angeregten und um L Gitterperiode verschobenen Zustand $\Psi_{\beta,l+L}(x)$ ist. Formel (4.1) kann auf die Betrachtung von Halbleiter-Übergittern angepasst werden [Glü01], so dass das Absorptionsspektrum $D(\omega)$ eines undotierten Halbleiter-Übergitters bestimmt werden kann:

$$D(\omega) \sim \sum_{\alpha,\beta} \sum_L \text{Im} \left[\frac{I_{\alpha,\beta}^2(L)}{(E_{\beta,l}^e - E_{\alpha,l}^h + edFL + E_g - \hbar\omega) - i(\Gamma_\beta^e + \Gamma_\alpha^h)/2} \right]. \quad (4.2)$$

Die oberen Indizes e und h geben an, dass hier ein Elektronen- respektive Loch-WS-Zustand betrachtet wird. Die Bandlücke zwischen Valenz- und Leitungsband im Halbleiter-Übergitter wird durch E_g angegeben. Das Überlappintegral $I_{\alpha,\beta}^2 \in \mathbb{C}$ zwischen Loch- und Elektronenwellenfunktion:

$$I_{\alpha,\beta}^2 = \langle \Psi_{\alpha,l}^h | \Psi_{\beta,l+L}^e \rangle \langle \Psi_{\beta,l+L}^e | \Psi_{\alpha,l}^h \rangle$$

ist natürlich von der Feldstärke F abhängig, da die Lage und Form der Wellenfunktionen dies auch ist. Formel (4.2) kann wie folgt hergeleitet werden: die Absorption von Photonen wird durch die Übergangsrate in eine angeregte WS-Leiter, d. h. durch die Erzeugungswahrscheinlichkeit eine Elektronen-Loch-Paare (Exziton), und durch die Zerfallswahrscheinlichkeit der angeregten Zustände bestimmt. Wenn die Coulomb-Wechselwirkung vernachlässigt wird, ist die Wellenfunktion des Exzitons gegeben durch das Produkt der Elektronen- und Loch-Wellenfunktionen

$$|1_L\rangle = |\Psi_{\beta,l+L}^e\rangle |\Psi_{\alpha,l}^h\rangle. \quad (4.3)$$

Als Index des Exzitons sei der nur durchschnittliche Abstand L von Elektronen- und Loch-Zustand angegeben. Die Indizes α, β und l , die die beteiligten WS-Leitern angeben

sind für die folgenden Betrachtungen überflüssig und werden erst wieder zum Schluss eingeführt.

Ein Hamiltonoperator, der Exzitonen in Halbleiter-Übergittern unter dem Einfluss eines monochromatischen Lasers beschreibt, ist durch

$$\mathcal{H} = \sum_L \mathcal{E}_L a_L^\dagger a_L + \epsilon \cos(\omega t) \sum_L \left(\langle \Psi_{l+L}^e | \Psi_l^h \rangle a_L^\dagger + \langle \Psi_l^h | \Psi_{l+L}^e \rangle a_L \right) \quad (4.4)$$

gegeben. Hierbei ist a_L^\dagger (a_L) der Erzeugungs- (Vernichtungs-) Operator des L -ten Exziton-Zustandes mit der Energie $\mathcal{E}_L = E^e - E^h + E_g + edFL - i(\Gamma^e + \Gamma^h)/2 = E_L - i\Gamma/2$ und ϵ proportional zur Amplitude des Lasers. Nimmt man nun an, dass die Exzitonendichte klein ist (was durch die in den Experimenten benutzten niedrigen Laserintensitäten gegeben ist), so kann man mittels zeitabhängiger Störungstheorie die Korrekturen des Vakuumzustandes berechnen [Lan84]. Nach der Störungstheorie erster Ordnung ergibt sich der Quasienergiezustand zu

$$|\Psi\rangle = |0\rangle - \frac{\epsilon}{2} \sum_L \frac{\langle \Psi_{l+L}^e | \Psi_l^h \rangle}{\mathcal{E}_L - \hbar\omega} e^{-i\omega t} |1_L\rangle. \quad (4.5)$$

Analog kann man die Korrektur zweiter Ordnung der Quasienergie berechnen und erhält

$$\Delta\mathcal{E}_L = \frac{\epsilon^2}{4} \sum_L \frac{\langle \Psi_l^h | \Psi_{l+L}^e \rangle \langle \Psi_{l+L}^e | \Psi_l^h \rangle}{\mathcal{E}_L - \hbar\omega}. \quad (4.6)$$

Die Absorbtdichte $D(\omega)$ ist proportional zur Zerfallsrate des Quasienergiezustandes (4.5), die durch den Imaginärteil von Gleichung (4.6) gegeben ist. Summiert man abschließend noch über alle beteiligten WS-Leitern, so erhält man (4.2).

4.3 Numerische Untersuchung

Mittels (4.2) wurde die Absorbtdichte $D(\omega)$ für ein aus experimentellen Daten vorgegebenes Feldstärkeintervall $[F_{min}, F_{max}]$ berechnet. An diese Werte $D(\omega, F)$ wurde für jede Feldstärke F eine Gauß-Verteilung $f(\omega) = \exp(-\omega^2/d^2)/2\sqrt{\pi}d$ gefittet und von dieser die Breite d bestimmt. Dieser Fit entspricht dem Vorgehen der Experimentatoren. Die Breite $d(F)$ wurde abschließend gegen die Feldstärke F aufgetragen (vgl. z. B. Abbildung 4.1). Um die Absorbtdichte zu berechnen mussten die Resonanzenergien bekannt sein. Diese werden in diesem Kapitel mittels der periodischen Fortsetzung des Potentials (vgl. Kap. 2.1.2)

$$V(x) = \frac{V_0}{2} \left(\tanh \left(\sigma \left(x + \frac{b}{a+b} \pi \right) \right) - \tanh \left(\sigma \left(x - \frac{b}{a+b} \pi \right) \right) \right)$$

bestimmt. Dabei wird von den Potential-Parametern Topfbreite $a = 7.6 \text{ nm}$, Barrierenbreite $b = 3.9 \text{ nm}$ und Topftiefe $V_0 = 62 \text{ meV}$ ausgegangen [Glu98]. Der Übergangsparameter σ wird frei gewählt und liegt hier im Intervall $[1, 4]$.

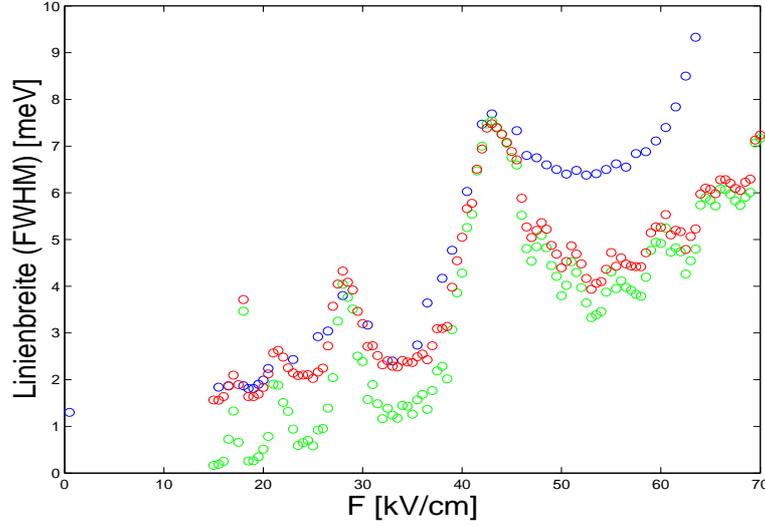


Abbildung 4.1: Vergleich der gemessenen (blau) mit den numerisch bestimmten Linienbreiten (reine numerische Daten = grün, geglättete numerische Daten = rot); als Potential wurde die periodische Fortsetzung von (4.7) mit den Parametern $\sigma = 2.5$, $a = 7.6$ nm, $b = 3.9$ nm und eine Topftiefe αV_0 mit $\alpha = 0.95$ sowie $V_0 = 62$ meV benutzt [Glu98].

Zusätzlich wurde die Funktion $D(\omega, F)$ für jede Feldstärke mit einer Gauß-Verteilung der Form

$$g(\omega) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}\tilde{\sigma}} \exp\left(-\left(\frac{\omega}{\tilde{\sigma}}\right)^2\right) \quad (4.7)$$

durch die Beziehung

$$\tilde{D}(\omega, F) = \mathcal{F}^{-1}\left[\mathcal{F}(g(\omega) * D(\omega, \tilde{F}))\right](t) = \mathcal{F}^{-1}\left(\mathcal{F}[g](t)\mathcal{F}[D(\tilde{F})](t)\right) \quad (4.8)$$

gefaltet. Dadurch wurden die numerischen Daten geglättet und eine inhomogene Linienverbreiterung $\tilde{\sigma}(F=0) \approx 1.5$ meV aufgeprägt (diese hängt von der untersuchten Probe ab und wird durch Oberflächenrauhigkeit und Schwankungen der Übergitterperiode bewirkt [Ros]). Die inhomogene Linienverbreiterung wird durch Glg. (4.2) nicht berücksichtigt, weshalb sie nachträglich in die numerischen Daten eingerechnet werden muss. Anhand der experimentellen Daten erkennt man den Wert der inhomogenen Linienverbreiterung, wenn man den Meßwert für $F = 0$ kV/cm bestimmt. Die Faltung führt zusätzlich zu einer Glättung der numerischen Werte, was für das spätere Anfitzen einer Gauß-Verteilung von Vorteil ist. Analog zu den reinen numerischen Daten wurde an diese ebenfalls für jede Feldstärke F eine Gauß-Verteilung gefittet.

In Abbildung 4.1 werden die experimentellen Daten mit den berechneten verglichen. Es wurde sowohl das Resultat der reinen numerischen Berechnung als auch die durch die Glättung erhaltenen Daten eingezeichnet. Die berechneten Linienbreiten geben das Verhalten der gemessenen sehr gut wieder. Dies ist insbesondere für kleine Feldstärken

$F < 40 \text{ kV/cm}$ der Fall. Lediglich im Bereich großer Feldstärken ($F \geq 40 \text{ kV/cm}$) sind die berechneten Daten durchweg zu klein. Diese Übereinstimmung zwischen den theoretischen und experimentellen Werten erlaubt die Schlussfolgerung, dass das geglättete Rechteck-Potential die Verhältnisse in Halbleiter-Übergittern gut beschreibt. Setze man das reine Rechteck-Potential ein, so war die Übereinstimmung nicht so gut. Das Verhalten der Linienbreiten als Funktion der Feldstärke kann wiederum durch einen Zener-Ansatz beschrieben werden [Glu98], das von einer Oszillation überlagert ist. Die Ursache dieser Oszillation ist das resonante Tunneln in angeregte Wannier-Stark-Leitern. Trägt man die Linienbreite von Abb. 4.1 gegen die inverse Feldstärke $1/F$, so sind die Maxima der Oszillationen äquidistant, was diese Behauptung belegt.

4.3.1 Variation der Potentialparameter

Der Einfluss der Potential-Parameter aus Glg. (4.7) auf die Linienbreiten soll in diesem Abschnitt numerisch untersucht werden. Die Berechnung der Linienbreiten erlaubt es den Einfluss verschiedener Parameter bei einer experimentellen Realisierung abzuschätzen und eventuell passende Proben zu designen. Im Unterschied zu Kap. 2.1.2 ist hier die Amplitude des Potentials nicht auf eins normiert sondern V_0 , d. h. man hat noch einen weiteren Parameter. Für die numerischen Rechnungen dieses Abschnittes wurde $a = 7.6 \text{ cm}$, $b = 3.9 \text{ nm}$ und $V_0 = 62 \text{ meV}$ gewählt (dies entsprach einer im Experiment benutzten Probe [Glu98]). Durch einen Vorfaktor α wurde die Potentialtiefe V_0 in den Rechnungen um den durch den oben vorgegebenen Wert variiert. Deshalb soll im Folgenden der Einfluss des Übergangsparameters σ und der Potentialtiefe αV_0 auf die Linienbreiten betrachtet werden.

Variation von σ bei konstantem αV_0

In diesem Abschnitt wird der Übergangsparameter σ bei festgehaltener Potentialtiefe αV_0 variiert. Der Parameter beschreibt wie schnell sich der Übergang vom Topf- zum Barrierenbereich vollzieht, d. h. je größer σ desto steiler sind die Flanken der Potentialbarriere (vgl. Abb. 2.2). Die Abbildungen 4.2 (a) und (b) sind für $\alpha = 0.95$ erstellt worden. Die Position der Maxima, die durch das resonante Tunneln hervorgerufen werden, wird nicht oder nur unmerklich durch Variation des Parameter σ beeinflusst. Die Höhe der Maxima und die Form dieser wird aber durch den Übergangsparameter σ bestimmt. Die Maxima der berechneten Linienbreiten in Abb. 4.2 (a) und Abb. 4.2 (b) sind ungefähr gleich, jedoch der Untergrund der Linienbreiten, der durch die Landau-Zener-Formel gegeben ist, ist für (b) kleiner als für (a). Dies lässt sich folgendermaßen verstehen: für eine konstante Quasienergie ist die Potentialbarriere für kleinen Übergangsparameter σ schmaler als für großes σ . Deshalb kann der Zustand für kleines σ leichter durch die Potentialbarriere tunneln, weshalb seine Lebensdauer im Vergleich mit dem Zustand bei großem σ kleiner ist. Da aber Lebensdauer und Linienbreite aufgrund der Beziehung $\tau = \hbar/\Gamma$ antiproportional zueinander sind, folgt, dass die Linienbreiten für schmale Barrieren größer sind als für breite Barrieren. Dies gibt das in Abb. 4.2 zu sehende Verhalten wieder.

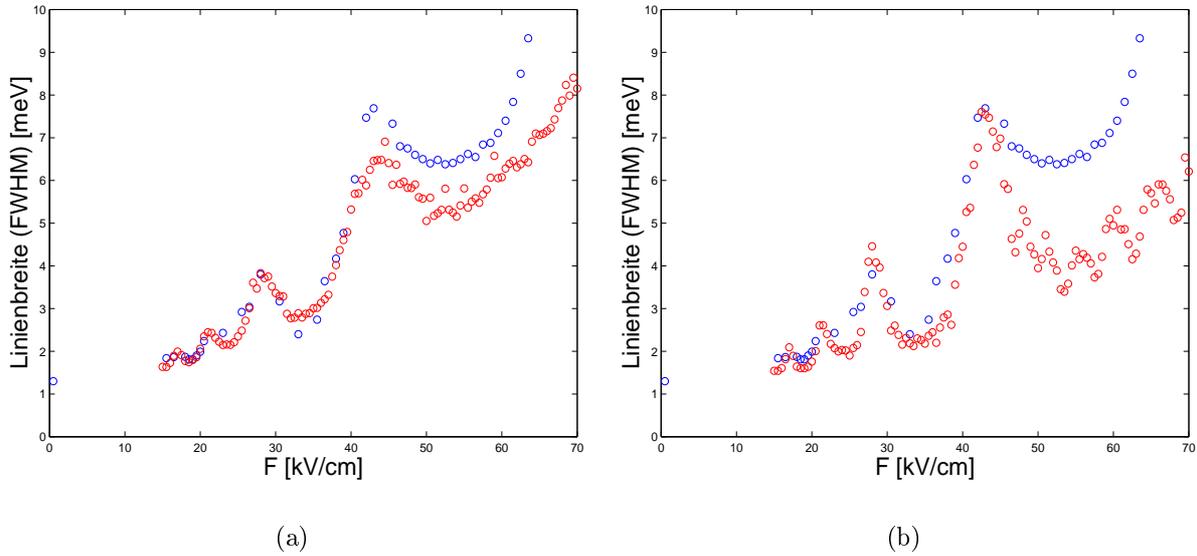


Abbildung 4.2: Vergleich der experimentellen Linienbreiten mit den berechneten Linienbreiten des Potential (2.5) mit den Parametern $\alpha = 0.95$ sowie (a) $\sigma = 1$, und (b) $\sigma = 4$; es wurden nur die geglätteten numerischen Werte dargestellt.

Variation von V_0 bei konstantem σ

Der Einfluss des Vorfaktors α der Potentialtiefe V_0 und damit der Potentialtiefe selbst ist, wie man Abb. 4.3 entnehmen kann, stärker als der des Übergangsparmeters. Durch Variation der Potentialtiefe wird die Position der Maxima der Linienbreiten geändert. Dies liegt daran, dass sich durch die Potentialveränderung dieses Typs die Lage der Quasienergieniveaus zueinander verschieben. Der Effekt ist analog dem in Kap. 2.2.1.

4.3.2 Absorptionsspektren

Abbildung 4.4 zeigt das Absorptionsspektrum $D(\omega, F)$ als Funktion der Feldstärke F und der Frequenz ω des eingestrahlt Lasers. Diese Abbildung vergleiche man mit den Abbildungen 1 (a) und (b) in [Ros99]. Abbildung 1 (a) wurde im Rahmen von Experimenten bestimmt wohingegen Abb. 1.(b) mittels einer Box-Quantisierungsmethode berechnet wurde. Eine Übereinstimmung unserer Methode mit dem Experiment ist auch hier zu erkennen. Abbildung 4.4 ist ein typisches Beispiel eines Wannier-Stark Fans (engl. Fächer). Betrachtet man die Darstellung näher, so sind zumindest zwei Fächer-Strukturen zu erkennen. Diese Strukturen werden durch die in Kap. 4.2 beschriebenen Übergänge verursacht. Die dunklen Bereiche entsprechen den Maxima von $D(\omega, F)$ und sind gegeben durch

$$\hbar\omega = E^e - E^h + E_g + edFL.$$

Dies ist für $\hbar\omega$ als Funktion der Feldstärke F eine Schar von Geraden mit den Steigungen edL und dem gemeinsamen Achsenabschnitt $E^e - E^h - E_g$. Zu jedem Übergang zwischen

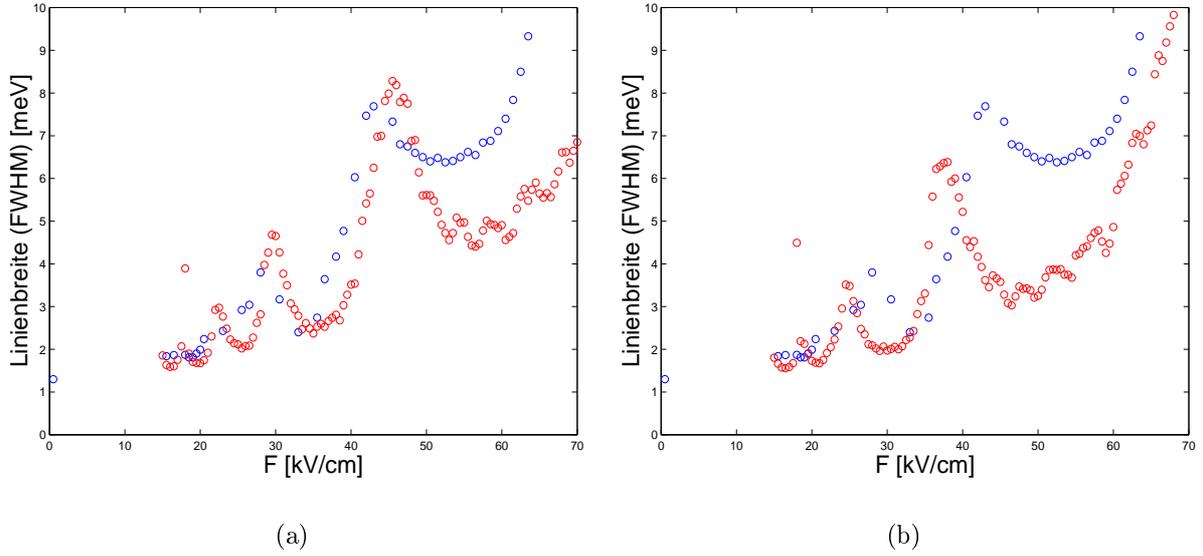


Abbildung 4.3: Vergleich der experimentellen Linienbreiten mit den berechneten Linienbreiten des Potential (2.5) mit den Parametern $\sigma = 2.5$ und (a) $\alpha = 0.9$, und (b) $\alpha = 1.1$; es wurden nur die geglätteten numerischen Werte eingezeichnet.

einem Lochzustand der Energie E^h und einem Elektronenzustand der Energie E^e existiert also ein Wannier-Stark Fächer.

Für große Feldstärken wird diese Fächerstruktur durch den direkten Übergang $L = 0$ dominiert. In der dazugehörigen Struktur sind Unterbrechungen zu erkennen, die durch vermiedene Kreuzungen der Linienbreite des Grundzustandes mit dem des ersten angeregten Zustands verursacht werden. Diese *gebrochene Federstruktur* wird auch im Experiment beobachtet [Ros99].

4.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde ein Ausdruck für die Absorptionsdichte in Halbleiter-Übergittern mittels zeitabhängiger Störungstheorie hergeleitet. Der erhaltene Ausdruck wurde dazu benutzt, spektroskopisch bestimmte Linienbreiten theoretisch zu verifizieren. Abschließend wurde der Einfluss der Potential-Parameter auf die Linienbreiten untersucht und ein Absorptionsspektrum $D(\omega, F)$ dargestellt und erläutert.

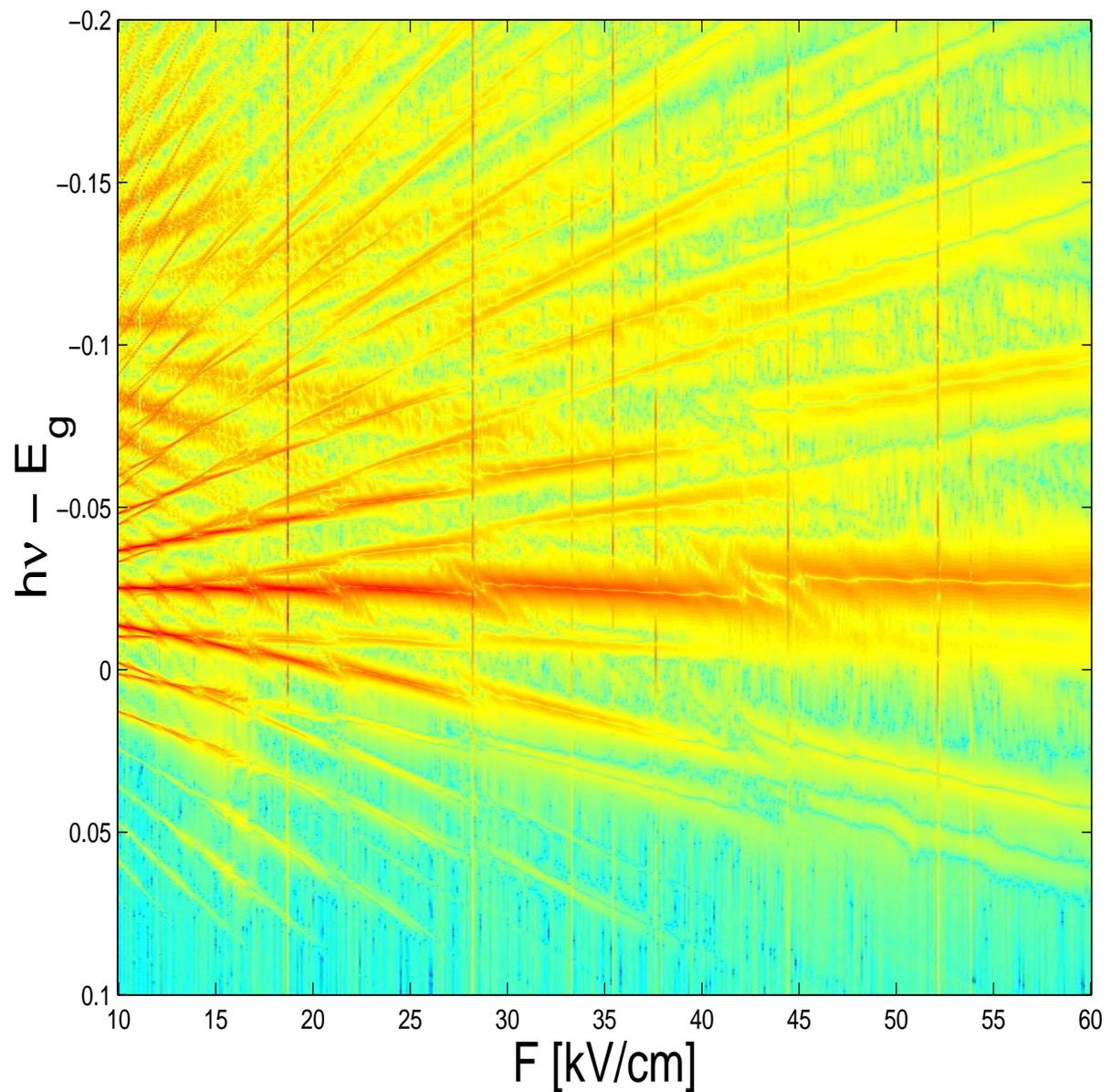


Abbildung 4.4: Die Ableitung der Absorptionsdichte $dD(\omega, F)/d\omega$ als Funktion der Laserfrequenz ω und der äußeren Feldstärke F (mit $E_g = 1.55\text{eV}$).

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die Streutheorie in Stark-Systemen auf das im Rahmen der Untersuchung von Halbleiter-Übergittern vorgeschlagene periodische Rechteck-Potential angewendet. Das Verhalten der Resonanzenergien als Funktion verschiedener Parameter wurde untersucht. Hierbei trat das Phänomen der Paarung von Linienbreiten auf, welches durch Betrachtung der Bandstruktur des korrespondierenden feldfreien Hamiltonoperators und durch Modellierung mittels eines Matrixmodells für Wannier-Stark-Leitern geklärt werden konnte. Im letzten Abschnitt wurden die Untersuchungen auf die Beschreibung von Absorptionsspektren von Halbleiter-Übergittern ausgedehnt. Es wurde mittels zeitabhängiger Störungsrechnung eine Formel zur Berechnung des Absorptionsspektrums hergeleitet. Wird das periodische Potential in Halbleiter-Übergittern durch ein geglättetes Rechteck-Potential beschrieben, so können die spektroskopisch bestimmten Linienbreiten durch unsere Theorie gut beschrieben werden. Dies führt zu dem Schluss, dass das periodische Potential der Realität nicht wie anfänglich vermutet durch ein Rechteck-Potential beschrieben werden sollte sondern durch eine geglättete Version desselben.

Trotz dieser interessanten Ergebnisse bleiben noch einige Fragen ungeklärt. So ist z. B. ungeklärt, ob es möglich ist die Parameter des Matrixmodells aus semiklassischen oder quantenmechanischen Berechnungen zu bestimmen, so dass das Modell es erlaubt die Resonanzenergien ab initio zu berechnen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Phänomen der Paarung der Lebensdauern untersucht. Hier wäre es interessant nach den Symmetrien der dazugehörigen Wellenfunktionen zu fragen. Es ist zu hoffen, dass dies Gegenstand zukünftiger Untersuchungen sein wird.

Anhang A

Programme zu Kap. 3.4

Hier sind die Programme aufgelistet, die im Rahmen des Kapitel 3.4 benutzt wurden, um die durch die Streutheorie erhaltenen Resonanzenergien durch ein Matrixmodell von WS-Leitern zu reproduzieren. Die Programme wurde alle in Matlab programmiert, denn dieses Software-Paket ermöglicht es, mit geringem Programmieraufwand komplizierte Matrixoperationen durchzuführen.

A.1 Simulated-Annealing-Algorithmus

Dieses Programm ist eine Anpassung des standardmäßigen *Simulated-Annealing-Algorithmus* auf ein Matrixmodell für WS-Leitern. Entscheidend ist hierbei die Umsetzung der Bewertungsfunktion (3.47) für das betrachtete System.

```
% Programm führt simulated annealing mit der Abweichung der
% Modellberechnung vom numerisch bestimmten Graphen
clear;
load numdat.mat % laden der zu fittenden numerischen Daten

qa=Quasiangle;

% sortieren der numerischen Daten

[wert, ind]=sort(real(qa(1:4,:))); %Sortierung nach Realteilen

qas=[];

for m=1:length(invF);
    qas=[qas qa(ind(:,m),m)];
end;

% Simulated annealing Algorithmus
```

```
par = [1.117,-5,-2.8,-0.02,0.5954,-1.07,-0.6,-0.002,0.18,-1.1,0, ...
       0.8,1.3,-0.108,1.4,-0.01,1.3,-0.019];
% par definiert die Anfangsparameter in der Modellrechnung in anmodel2.m

for index=1:20;

    [qmi, qmr]=anmodel2(par, invF);

    % Bewertungsfunktion des Simulated Annealing Algorithmuses
    abwr=sum(sum(abs(real(qas(1:2,:))-real(qmr(1:2,:)))));
    abwi=sum(sum(abs(log(imag(qa(1:2,:))./imag(qmi(1:2,:))))));

    abwropt=abwr;
    abwiopt=abwi;

    fprintf('Startwert: %f \n', abwr+abwi);

    figure(1); % graphischer Vergleich der numerischen Daten
    qopt=qmi; % mit den Modelldaten
    egplot2;

    for temp=1:25; % Variation der Temperatur (absenken)

        T=2*1.1^(25-temp); % neue Temperatur

        for n=0:10;

            parneu=par;

            % Anfangsbedingung verändern
            r=ceil(16*rand); % Nummer des zu ändernden Parameters
            delta = -0.1 + 0.2*rand; % Veränderung bestimmen
            parneu(r)=parneu(r)+delta;

            [qmi,qmr]=anmodel2(parneu, invF);

            % Bewertungsfunktion

            abwrneu=sum(sum(abs(real(qas(1:2,:))-real(qmr(1:2,:)))));
            abwineu=sum(sum(abs(log(imag(qa(1:2,:))./imag(qmi(1:2,:))))));

            fprintf('Aktueller Wert der Bewertungsfunktion: %f \n', ...
                    abwrneu+abwineu);
            fprintf('Variierter Parameter: %d \n', r);
```

```

        if (abwrneu+abwineu<=abwr+abwi)
par=parneu;
abwr=abwrneu;
abwi=abwineu;
        else
if rand < exp(-(abwrneu+abwineu-abwr-abwi)/T)
        fprintf('falscher Schritt akzeptiert ');
        par=parneu;
        abwr=abwrneu;
        abwi=abwineu;
end;
        end;

        if (abwropt+abwiopt>abwrneu+abwineu)
        fprintf('Neues Optimum: %f \n', abwrneu+abwineu);
paropt=parneu;
abwropt=abwrneu;
abwiopt=abwineu;
qopt=qmi;
        figure(2);
        egplot2;
        end

        end;
end;
% hier sollte das neue Optimum abgespeichert werden
end;

```

A.2 Matrixmodell für vier Wannier–Stark–Leitern

Diese MATLAB-Funktion `anmodel2` implementiert ein 4×4 -Matrixmodell zur Berechnung der Resonanzenergien. Diese Modelldaten werden dann im vorherigen Programm an der Stelle der Bewertungsfunktion benutzt, um die Abweichung zwischen Matrixmodell und Streutheoriedaten zu bestimmen.

```

function [Quasianglem,qams]= anmodel2(t,invF);
Quasianglem=[];
Quasianglemplot=[];
indexmax = length(invF);
for index=1:length(invF);
% index, indexmax
        F=1/invF(index);

```

```

quasienergie3=t(1)*pi+t(2)*pi*F-i*t(3)*F*exp(-t(4)/F);
quasienergie2=t(5)*pi+t(6)*pi*F-i*t(7)*F*exp(-t(8)/F);
quasienergie1= t(9)*pi+t(10) *pi*F;
quasienergie0= t(11)*pi+t(12)*pi*F;

w2=t(13)*F*exp(-t(14)/F);
w1=t(15)*F*exp(-t(16)/F);
w0=t(17)*F*exp(-t(18)/F);

lambda3=exp(-i*quasienergie3/F);
lambda2=exp(-i*quasienergie2/F);
lambda1=exp(-i*quasienergie1/F);
lambda0=exp(-i*quasienergie0/F);

u=[lambda3 lambda2 lambda1 lambda0];
U=diag(u);

W02=[0 w2 0 0;
      w2 0 0 0;
      0 0 0 0;
      0 0 0 0];

W01=[0 0 0 0;
      0 0 w1 0;
      0 w1 0 0;
      0 0 0 0];

W00=[0 0 0 0;
      0 0 0 0;
      0 0 0 w0;
      0 0 w0 0];

U=U*expm(-i*W02/F)*expm(-i*W01/F)*expm(-i*W00/F);
d=eig(U);
[wert,ind]=sort(-abs(d));
d=d(ind); % sortiert nach Lebensdauern
Quasianglem=[Quasianglem i*log(d)];
end;

[wert, ind]=sort(real(Quasianglem(1:4,:)));

qams=[];

```

```
for m=1:length(invF);           % nach den Energie sortiert
    qams=[qams Quasiangleme(ind(:,m),m)];
end;
```


Anhang B

Skalierte Einheiten

Um die verschiedenen experimentellen Realisierungen des Hamiltonoperators

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + eEx \quad (\text{B.1})$$

vergleichen zu können, werden in dieser Arbeit skalierte Einheiten benutzt. Der skalierte Hamiltonoperator soll die Masse $\tilde{m} = 1$ haben und das skalierte Potential $\tilde{V}(x)$ soll 2π -periodisch sein. Die Ortskoordinate wird aus diesem Grund mittels

$$\tilde{x} = \frac{2\pi}{d}x$$

auf die skalierte Koordinate \tilde{x} umgerechnet. Aus historisch gewachsenen Gründen soll die Energieskala so gewählt werden, dass das skalierte Potential im Energiebereich $[-1, 1]$ variiert. In Kap. 2.1.2 wurde zu diesem Zweck noch die mittlere potentielle Energie

$$\bar{V} = \frac{V_{max} + V_{min}}{2}$$

vom ursprünglichen Potential subtrahiert. Man erhält deshalb als Potentialumrechnungsausdruck

$$\tilde{V}(\tilde{x}) = \frac{V(x) - \bar{V}}{\gamma} \quad \text{mit} \quad \gamma = \frac{V_{max} - V_{min}}{2}.$$

Die Energie (der Hamiltonoperator) transformiert sich analog zum Potential

$$\tilde{H} = \frac{H - \bar{V}}{\gamma}.$$

Betrachtet man nun noch den Ausdruck der kinetischen Energie $p^2/2m = (-i\hbar\partial_x)^2/2m$ näher, so geht dieser über in

$$\frac{\tilde{p}^2}{2} = \frac{(-i\tilde{\hbar}\partial_{\tilde{x}})^2}{2} \quad \text{mit} \quad \tilde{\hbar} = \frac{2\pi}{d\sqrt{M}\gamma}\hbar.$$

Als letztes wird der Feldterm noch wie folgt umgerechnet

$$\tilde{F} = \frac{d}{2\pi\gamma} e E = \frac{d}{2\pi\gamma} F.$$

Damit ergibt sich der im weiteren betrachtete Hamiltonoperator zu

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2} + \tilde{V}(\tilde{x}) + \tilde{F}\tilde{x} \quad \text{mit} \quad \tilde{V}(\tilde{x} + 2\pi) = \tilde{V}(\tilde{x}).$$

Im Rahmen der Arbeit werden die Tilde, die hier zur Unterscheidung eingeführt wurden, wieder weggelassen. Abschließend sollen noch die Umskalierungsvorschrift für die Planck'sche Konstante des Hamiltonoperators kalter Atome in optischen Gittern angegeben werden. Die Herleitung dieser Formel entnimmt man [Glü00a].

$$\tilde{\hbar} = \frac{4}{\sqrt{(V_{max} - V_{min})/E_R}}$$

Hierbei ist $E_R = \hbar^2 k^2 / 2M$ mit $k = 2\pi/\lambda = \pi/L$ die Rückstossenergie und λ die Wellenlänge des Lasers. Die Periode des optischen Gitters ist somit $\lambda/2 = L$.

Literaturverzeichnis

- [And96] B. P. Anderson, T. L. Gustavson, and M. A. Kasevich, *Atom Trapping in Non-dissipative Optical Lattices*, *Phys. Rev. A* **53** (1996) R3727.
- [And98] B. P. Anderson and M. A. Kasevich, *Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays*, *Science* **282** (1998) 1686.
- [Ash76] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia, 1976.
- [Avr77] 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.
- [Bha97] C. F. Bharucha, K. W. Madison, P. R. Morrow, S. R. Wilkinson, B. Sundaram, and M. G. Raizen, *Observation of Atomic Tunneling from an Accelerating Optical Potential*, *Phys. Rev. A* **55** (1997) R857.
- [Blo28] F. Bloch, *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, *Z. Phys* **52** (1928) 555.
- [Boh93] Arno Bohm, *Quantum Mechanics, Foundations and Applications*, Springer Verlag, New York Berlin, 1993.
- [Bou95] A. M. Bouchard and M. Luban, *Bloch Oscillations and other Dynamical Phenomena of Electrons in Semiconductor Superlattices*, *Phys. Rev. B* **52** (1995) 5105.
- [Coh97] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantenmechanik*, W. de Gruyter, Berlin, New York, 1997.
- [CT92] C. Cohen-Tannoudji, *Atomic Motion in Laser Light*, in J.-M. Raimond J. Dalibard and J. Zinn-Justin, editors, *Les Houches 1990, Session LIII, fundamental systems in quantum optics*, North-Holland, 1992.
- [Dah96] 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.
- [Dut99] S. K. Dutta, B. K. Teo, and G. Raithel, *Tunneling Dynamics and Gauge Potentials in Optical Lattices*, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 1934.

- [Esa70] L. Esaki and R. Tsu, *IBM J. Res. Dev.* **14** (1970) 61.
- [Fri98] S. Friebel, C. D'Andrea, J. Walz, M. Weitz, and T. W. Hänsch, *CO₂-Laser Optical Lattice with Cold Rubidium Atoms*, *Phys. Rev. A* **57** (1998) R20.
- [Glu98] S. Glutsch, F. Bechstedt, B. Rosam, and K. Leo, *Zener tunneling effect of excitons in shallow superlattices*, *PRB* **63** (1998) 085307.
- [Glü99a] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Lifetime of Wannier-Stark states*, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 891.
- [Glü99b] 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.
- [Glü99c] 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.
- [Glü00a] M. Glück, *Wannier-Stark Resonances*, Dissertation, Universität Kaiserslautern, 2000.
- [Glü00b] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Resonant tunneling of Wannier-Stark-states*, *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **2** (2000) 694.
- [Glü01] M. Glück, A. R. Kolovsky, H. J. Korsch, and F. Zimmer, *Wannier-Stark resonances in semiconductor superlattices*, *Phys. Rev. B* **in press** (2001) xxx.
- [Han00] M. Hankel, *Untersuchung der Lebensdauer des Grundzustands in getriebenen Wannier-Stark-Systemen*, Diplomarbeit, Universität Kaiserslautern, 2000.
- [Hau64] A. Haug, *Theoretical Solid State Physics* volume 1, Pergamon Press, Oxford New York Toronto Sydney Braunschweig, 1964.
- [Hou40] W. V. Houston, *Acceleration of Electrons in a Crystal lattice*, *Phys. Rev.* **57** (1940) 184.
- [Kit70] C. Kittel, *Quantentheorie der Festkörper*, R. Oldenbourg, München, Wien, 1970.
- [Koh59] W. Kohn, *Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions*, *Phys. Rev.* **115** (1959) 809.
- [Koh72] W. Kohn, *Construction of Wannier Functions and Applications to Energy Bands*, *Phys. Rev. B* **7** (1972) 4388.
- [Kri86] J. B. Krieger and G. J. Iafrate, *Time Evolution of Bloch Electrons in a Homogeneous Electric Field*, *Phys. Rev. B* **33** (1986) 5494.
- [Lan84] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik: Quantenmechanik*, Akademie-Verlag, Berlin, 1984.

- [Mad99] 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.
- [Men88] 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.
- [Met53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller and E. Teller, *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, *J. Chem. Phys.* **21(6)** (1953) 1087.
- [Moß01] S. Moßmann, Diplomarbeit, Universität Kaiserslautern, 2001.
- [MS97] T. Müller-Seydlitz, M. Hartl, B. Brezger, H. Hänsel, C. Keller, A. Schnez, R. J. C. Spreeuw, T. Pfau, and J. Mlynek, *Atoms in the Lowest Motional Band of a Three-Dimensional Optical Lattice*, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 1038.
- [Nen91] G. Nenciu, *Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields: rigorous justification of the effective Hamiltonians*, *Rev. Mod. Phys.* **63** (1991) 91.
- [Nuñ91] J. A. Nuñez, F. Bensch, and H. J. Korsch, *On the Solution of Hill's Equation Using Milne's Method*, *J. Phys. A* **24** (1991) 2069.
- [Pre95] W. H. Press and B. P. Flannery and S. A. Teukolsky and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, London, 2. edition, 1995.
- [Rai97] M. G. Raizen, C. Salomon, and Qian Niu, *New light on quantum transport*, *Physics Today* July (1997) 30.
- [Ros] B. Rosam, private communication.
- [Ros98] F. Rossi, *Coherent phenomena in semiconductors*, *Semicond. Sci. Technol.* **13** (1998) 147.
- [Ros99] B. Rosam, D. Meinhold, F. Löser, V.G. Lyssenko, S. Glutsch, F. Bechstedt, F. Rossi, K. Köhler, and K. Leo, *Field-Induced Delocalization and Zener Breakdown in Semiconductor Superlattices*, *PRL* **86(7)** (1999) 1307.
- [Voi88] 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.
- [Wag93] M. Wagner and H. Mizuta, *Complex-energy analysis of intrinsic lifetime of resonances in biased multiple quantum wells*, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 14393.
- [Wal95] H. Wallis, *Quantum Theory of Atomic Motion in Laser Light*, *Phys. Rep.* **255** (1995) 203.

-
- [Wan60] G. H. Wannier, *Wave Functions and Effective Hamiltonian for Bloch Electrons in an Electric field*, *Phys. Rev.* **117** (1960) 432.
- [Wil96] 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.
- [Zen34] C. Zener, *A Theory of Electrical Breakdown of Solid Dielectrics*, *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **145** (1934) 523.

Danksagung

Nun soll noch den Personen gedankt werden, die mir ihre Unterstützung beim Entstehen dieser Arbeit zukommen ließen.

Herrn Prof. Dr. H. J. Korsch soll insbesondere gedankt werden für die Möglichkeit, an einem aktuellen Thema und in der angenehmen Atmosphäre seiner Arbeitsgruppe arbeiten zu dürfen,

Herrn Prof. Dr. A. R. Kolovsky für seine Hilfe und Ergänzungen,

Herrn Dr. Markus Glück für die vielen klärenden Gespräche und vieles mehr,

Herrn Frank Keck für seine Geduld, Hilfsbereitschaft sowie viele lehrreiche Gespräche,

Herrn Stefan Moßmann für seine Daten zur Transfer-Matrix-Methode und für seinen aufmunternden Zuspruch,

Frau Bettina Uebe für Ihre seelische und moralische Unterstützung in den letzten eineinhalb Jahren sowie für die sonntäglichen Spaziergänge

und *last but not least* meinen Eltern und Geschwistern, ohne deren Unterstützung mein Studium nicht möglich gewesen wäre.