Dynamik kalter Atome in Wannier–Stark–Systemen

Diplomarbeit von

Dirk Witthaut

Durchgeführt am
Fachbereich Physik
der Technischen Universität Kaiserslautern

Unter Anleitung von Herrn
apl. Prof. Dr. H. J. Korsch
Kaiserslautern, Mai 2004

Überblick

Der Hauptteil dieser Arbeit beschäftigt sich mit der Dynamik in periodischen Potentialen in einem konstanten externen Feld, den so genannten Wannier-Stark-Systemen. Diese Systeme werden durch den Hamiltonoperator

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \mathbf{F}\cdot\mathbf{r} \tag{1}$$

mit einem periodischen Potential $V(\mathbf{r})$ beschrieben.

Bereits kurz nach der Entwicklung der Quantenmechanik studierten Bloch und Zener die Dynamik eines solchen Systems im Hinblick auf die Bewegung eines Elektrons in einem Festkörper [1, 2]. Es ergab sich, dass ein Teilchen in einem Wannier-Stark-System eine periodische Bewegung ausführt, die so genannten Bloch-Oszillationen. Dieses Verhalten ist nicht intuitiv. Schließlich erwartet man, dass ein Strom fließt, wenn ein elektrisches Feld an einem Festkörper anliegt. In der Tat können sich in einem normalen Festkörper keine Bloch-Oszillationen ausbilden, da ihre Periode sehr viel größer ist als typische Dämpfungszeiten aufgrund der Streuung an Phononen und Gitterfehlstellen. Erst im Jahre 1992 gelang es, Bloch-Oszillationen von Elektronen in Halbleiter-Übergittern nachzuweisen [3]. In diesen Systemen ist die Oszillationsperiode wesentlich kleiner als in homogenen Festkörpern.

Mit der Entwicklung der Laserkühlung stehen allerdings ganz andere Systeme zur Verfügung, um die Dynamik in periodischen Potentialen zu untersuchen: ultrakalte Atome in optischen Fallen oder Gittern. Diese Systeme sind experimentell sehr gut kontrollierbar und haben zu einer Reihe von spektakulären Ergebnissen geführt. Inzwischen konnten Bloch-Oszillationen von ultrakalten Atomen oder Bose-Einstein-Kondensaten in mehreren Experimenten demonstriert werden [4–7].

Die Wechselwirkung der Atome in einem Bose-Einstein-Kondensat kann man bei tiefen Temperaturen in guter Näherung durch ein *mean-field*-Potential $g|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ berücksichtigen. Mit dieser Näherung wird die Dynamik der Kondensatwellenfunktion durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung bzw. die nichtlineare Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(H_0 + g|\psi(\mathbf{r},t)|^2\right)\psi(\mathbf{r},t) \tag{2}$$

beschrieben. Ein zentrales Anliegen dieser Arbeit ist es, den Einfluss der Nichtlinearität auf die Dynamik von Bloch-Oszillationen zu klären.

Zu dieser Arbeit

In dieser Arbeit studieren wir Bloch-Oszillationen in ein- und zweidimensionalen optischen Gittern. Wir diskutieren die Dynamik in verschiedenen zweidimensionalen Potentialen und bei verschiedenen Anfangsbedingungen unter Vernachlässigung der Nichtlinearität. Der Schwerpunkt dieser Arbeit besteht dann im Studium der Dynamik unter dem Einfluss der Nichtlinearität $g|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ für ein eindimensionales System. Wir diskutieren grundsätzliche Effekte wie die Dämpfung der Bloch-Oszillationen und analysieren diese quantitativ mithilfe einer Zerlegung in Wannier-Stark-Funktionen.

Schließlich werden auch stationäre Lösungen der nichtlinearen Schrödingergleichung diskutiert. Nachdem sich im linearen Fall die Wannier-Stark-Resonanzzustände als wichtiges Hilfsmittel erwiesen haben, stellt sich die Frage, ob auch im Rahmen der nichtlinearen Schrödingergleichung resonanzartige Zustände existieren. Um diese Frage zu beantworten, untersuchen wir zwei einfache Modellpotentiale: das Delta-Potential und das Delta-Shell-Potential. Dabei interessieren wir uns besonders für den Übergang zwischen gebundenen und Streuzuständen sowie die Existenz und Eigenschaften von Resonanzen.

Im Einzelnen gliedert sich die Arbeit folgendermaßen:

Kapitel 1 In der Einleitung werden die wichtigsten experimentellen und theoretischen Grundlagen dieser Arbeit vorgestellt. Zunächst geben wir einen kurzen Überblick über die Physik von Bose-Einstein-Kondensaten in optischen Gittern, insbesondere über die Herleitung und die Anwendbarkeit der Gross-Pitaevskii-Gleichung. Schließlich wenden wir uns den linearen, eindimensionalen Wannier-Stark-Systemen zu ($g = 0$). Wir diskutieren das Spektrum des Wannier-Stark-Hamiltonoperators und zeigen, wie sich für schwache Feldstärken Bloch-Oszillationen ergeben und wie man diese theoretisch beschreiben kann.

Kapitel 2 Das Studium der Bloch-Oszillationen in linearen Wannier-Stark-Systemen ($g = 0$) wird in diesem Kapitel auf zweidimensionale Gitter erweitert. Wir zeigen, dass ein Wellenpaket wie im eindimensionalen Fall je nach Anfangsbedingungen Bloch-Oszillationen oder ein atmendes Verhalten zeigt. Ein längerer Abschnitt ist einer detaillierten Analyse der Dispersion in Wannier-Stark-Systemen gewidmet, die in eindimensionalen Systemen nicht auftritt. Schließlich demonstrieren wir kohärente Bloch-Zener-Oszillationen in einem speziell konstruierten Potential.

Kapitel 3 In diesem Kapitel beschränken wir uns wieder auf eindimensionale Wannier-Stark-Systeme. Der Einfluss der Nichtlinearität der Gross-Pitaevskii-Gleichung wird jetzt aber nicht mehr vernachlässigt, sondern systematisch untersucht. Numerische Studien zeigen, dass Bloch-Oszillationen unter dem Einfluss einer Nichtlinearität gedämpft sind. Für bestimmte Parameter findet man Phasensprünge und ein Wiederaufleben (*Revival*) der Oszillation.

Kapitel 4 Zur Interpretation der numerischen Ergebnisse des vorigen Kapitels entwickeln wir die Wellenfunktion in die Eigenfunktionen des linearen Systems, die Wannier-Stark-Resonanzzustände, und studieren die Dynamik der Entwicklungskoeffizienten. Im Rahmen einer einfachen Näherung lassen sich die beobachteten dynamischen Effekte wie die Dämpfung der Bloch-Oszillationen auch quantitativ verstehen.

Kapitel 5 Nachdem wir in den vorigen Kapiteln die Dynamik eines Kondensates im Rahmen der Gross-Pitaevskii-Gleichung studiert haben, suchen wir nun nach stationären Lösungen. Dazu betrachten wir zunächst das einfachste, nicht triviale Beispiel: ein einziges Delta-Potential in einer Raumdimension. Insbesondere interessiert uns dabei der Übergang von gebundenen Zuständen in Streuzustände.

Kapitel 6 Das letzte Kapitel widmet sich schließlich einem weiteren einfachen Modell-Potential, dem Delta-Shell-Potential. Vorab rekapitulieren wir den linearen Fall $g = 0$. Dabei interessieren uns besonders Resonanzzustände, die man für ein repulsives Potential findet. Im nichtlinearen Fall $g \neq 0$ müssen wir zunächst einmal klären, was unter Resonanzen zu verstehen ist. Solche Zustände werden wir dann für ein repulsives Delta-Shell-Potential identifizieren und charakterisieren.

**War es nicht eine Komödie, eine seltsame und dumme Sache,
diese Wiederholung, dieses Laufen in einem verhängnisvollen Kreise?**

Hermann Hesse, „Siddhartha"

Inhaltsverzeichnis

Überblick **iii**

1 Einleitung **1**
1.1 Bose-Einstein-Kondensate in optischen Gittern . . . 1
1.1.1 Die Gross-Pitaevskii-Gleichung . . . 2
1.1.2 Niedrig-dimensionale Kondensate . . . 4
1.1.3 Optische Gitter . . . 6
1.2 Wannier-Stark-Systeme . . . 7
1.2.1 Die Wannier-Stark-Leiter der Resonanzen . . . 8
1.2.2 Floquet-Bloch-Theorie für die zeitabhängige Schrödingergleichung . 10
1.2.3 Bloch-Oszillationen . . . 13
1.2.4 Experimentelle Realisierungen . . . 15

2 Bloch-Oszillationen in zweidimensionalen Gittern **17**
2.1 Einleitung . . . 17
2.2 Zweidimensionale Bloch-Oszillationen . . . 19
2.2.1 Lissajous-Oszillationen . . . 20
2.2.2 Atmende Wellenpakete . . . 24
2.2.3 Dispersion . . . 26
2.3 Kohärente Bloch-Zener-Oszillationen . . . 31
2.4 Zusammenfassung . . . 34

3 Bloch-Oszillationen unter dem Einfluss einer Nichtlinearität **37**
3.1 Einfluss einer Nichtlinearität . . . 38
3.2 Abhängigkeit von der Stärke der Nichtlinearität . . . 43
3.3 Abhängigkeit von der Feldstärke . . . 45

4 Beschreibung von Bloch-Oszillationen in einer Basis **49**
4.1 Basissatzentwicklungen für die nichtlineare Schrödingergleichung . . . 49
4.2 Dynamik der Koeffizienten und der Wellenfunktion . . . 54
4.3 Hohe Feldstärken . . . 61

5 Das Delta-Potential **65**
5.1 Einleitung . . . 65
5.2 Attraktive Nichtlinearität . . . 66
5.3 Repulsive Nichtlinearität . . . 69
5.4 Variation der Nichtlinearität . . . 72

6 Das Delta-Shell-Potential **75**
6.1 Einleitung . . . 75
6.2 Lineare Schrödingergleichung . . . 75
6.2.1 Attraktives Potential . . . 76
6.2.2 Repulsives Potential . . . 78
6.3 Nichtlineare Schrödingergleichung mit einem repulsiven Potential . . . 79
6.3.1 Repulsive Nichtlinearität: Resonanzen . . . 81
6.3.2 Attraktive Nichtlinearität: Resonanzen . . . 85
6.3.3 Attraktive Nichtlinearität: gebundene Zustände . . . 88

Anhang **91**

A Skalierte Einheiten **91**

B Numerische Methoden **95**
B.1 Das Split-Operator-Verfahren . . . 95
B.1.1 Das Split-Operator-Verfahren für die lineare Schrödingergleichung . 95
B.1.2 Das Split-Operator-Verfahren für die nichtlineare Schrödingergleichung . . . 96
B.1.3 Numerischer Test I . . . 97
B.1.4 Numerischer Test II . . . 99
B.2 Berechnung von Blochbändern und Blochfunktionen . . . 101
B.3 Projektion auf ein Blochband . . . 103
B.4 Berechnung von Wannier-Stark-Zuständen und Quasienergien . . . 105

C Jacobische elliptische Funktionen **109**

Literaturverzeichnis **111**

Kapitel 1

Einleitung

Im ersten Teil dieser Arbeit diskutieren wir die Dynamik von Bose-Einstein-Kondensaten in einem periodischen Potential und einem Stark-Feld, also in einem Wannier-Stark-System. Die Dynamik der Wellenfunktion bzw. des Ordnungsparameters des Kondensates wird bei tiefen Temperaturen gut durch die Gross-Pitaevskii-Gleichung (oder nichtlineare Schrödingergleichung) beschrieben. Für ein Wannier-Stark-System lautet diese Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \mathbf{F}\cdot\mathbf{r} + g|\psi(\mathbf{r},t)|^2\right)\psi(\mathbf{r},t) \tag{1.1}$$

mit einem periodischen Potential $V(\mathbf{r})$. Der Term $g|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ beschreibt dabei die Wechselwirkung der kondensierten Atome in einer *mean-field*-Approximation.

In diesem Kapitel wollen wir zunächst die Gross-Pitaevskii-Gleichung herleiten und darstellen, wie Wannier-Stark-Systeme für ultrakalte Atome in verschiedenen Dimensionen realisiert werden können (Abschnitt 1.1). Schließlich diskutieren wir in Abschnitt 1.2 die wesentlichen Eigenschaften des eindimensionalen Wannier-Stark-Hamiltonoperators

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + Fx \quad \text{mit} \quad V(x+d) = V(x). \tag{1.2}$$

1.1 Bose-Einstein-Kondensate in optischen Gittern

In dieser Arbeit untersuchen wir die Dynamik von Bose-Einstein-Kondensaten im Rahmen der Gross-Pitaevskii-Gleichung. In Abschnitt 1.1.1 leiten wir diese Gleichung aus dem vollen Vielteilchen-Problem ab und diskutieren ihren Gültigkeitsbereich.

Weiterhin stellen wir kurz die experimentellen Grundlagen dieser Arbeit vor: Die Realisierung von quasi-eindimensionalen oder zweidimensionalen Kondensaten, die wir in dieser Arbeit betrachten, ist in Abschnitt 1.1.2 dargestellt. In Abschnitt 1.1.3 beschreiben wir, wie man Wannier-Stark-Systeme mithilfe von optischen Gittern hergestellt.

Einen guten Überblick über die Physik der Bose-Einstein-Kondensate geben die Übersichtsartikel [8–10] und das Buch [11].

1.1.1 Die Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die Wellenfunktion eines Bose-Einstein-Kondensates bei Temperaturen weit unterhalb der kritischen Temperatur T_C wird sehr gut durch die die Gross-Pitaevskii-Gleichung (bzw. nichtlineare Schrödingergleichung) beschrieben. Im Folgenden geben wir einen kurzen Überblick über die Herleitung dieser Gleichung.

Der Hamiltonoperator für ein Bose-Einstein-Kondensat in einem externen Potential $V_{\rm ext}(\mathbf{r})$ ist in der Schreibweise der zweiten Quantisierung

$$\begin{aligned} H &= \int \hat{\psi}(\mathbf{r})^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_{\rm ext}(\mathbf{r})\right)\hat{\psi}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} \\ &\quad + \frac{1}{2}\int \hat{\psi}(\mathbf{r})^\dagger \hat{\psi}(\mathbf{r}')^\dagger\, U(\mathbf{r},\mathbf{r}')\,\hat{\psi}(\mathbf{r}')\hat{\psi}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}'\,\mathrm{d}^3\mathbf{r}, \end{aligned} \tag{1.3}$$

wobei $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ und $\hat{\psi}(\mathbf{r})^\dagger$ die bosonischen Feldoperatoren sind. In dieser Gleichung wurden Drei- oder Mehr-Körper-Wechselwirkungen bereits vernachlässigt.

Die interatomare Wechselwirkung $U(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ lässt sich weiter vereinfachen, wenn man bedenkt, dass die Dichte n eines Bose-Einstein-Kondensates ($n \approx 10^{13}\,\mathrm{cm}^{-3}$) und die Temperatur des Kondensates sehr gering sind ($T < T_c \approx 200$ nK für ^{87}Rb). Die effektive Streuamplitude der Partialwellen mit Drehimpuls $l \neq 0$ ist dann gegenüber der s-Wellen-Streuung um einen Faktor $(k_BT/E_c)^l$ kleiner. E_c ist eine charakteristische Energie des interatomaren Potentials und liegt für Alkali-Atome in der Größenordnung $0.1-1\,\mathrm{mK}\cdot k_B$ [10]. Für Bose-Einstein-Kondensate weit unterhalb der kritischen Temperatur können wir die Beiträge mit $l \neq 0$ daher problemlos vernachlässigen. Die asymptotische Form der s-Wellen-Streuwellenfunktion ist für kleine Energien, $E \to 0$, gegeben durch (siehe [12], Kapitel 11):

$$\psi(r) \overset{r\to\infty}{\longrightarrow} \frac{\sin(k(r-a))}{r}\,. \tag{1.4}$$

Die Streuung wird also vollständig durch die s-Wellen-Streulänge a charakterisiert. Da das Wechselwirkungspotential kurzreichweitig ist, kann man für hinreichend kleine Dichten und Streuenergien die Details des Streuprozesses vernachlässigen und sich auf die asymptotische Form (1.4) der Wellenfunktion beschränken. In der Tat ersetzt man das Streupotential $U(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ direkt durch ein Potential, das wesentlich einfacher handhabbar ist und die gleiche s-Wellen-Streulänge ergibt:

$$U(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{4\pi\hbar^2 a}{M}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \tilde{g}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{1.5}$$

Dieses Wechselwirkungspotential ist attraktiv für $a, \tilde{g} < 0$ und repulsiv für $a, \tilde{g} > 0$. Mit dieser Näherung ergeben sich aus Gleichung (1.3) die Heisenberg-Bewegungsgleichungen für die Feldoperatoren

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{\psi}(\mathbf{r},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_{\rm ext}(\mathbf{r})\right)\hat{\psi}(\mathbf{r},t) + \tilde{g}\,\hat{\psi}(\mathbf{r},t)^\dagger\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\hat{\psi}(\mathbf{r},t)\,. \tag{1.6}$$

Bogoliubov führte 1947 den folgenden Lösungsansatz für die Gleichung (1.6) ein [13]:

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \hat{a}_0\psi_0(\mathbf{r}) + \sum_m \hat{a}_m\psi_m(\mathbf{r}) \approx \sqrt{N}\psi_0(\mathbf{r}) + \delta\hat{\psi}(\mathbf{r}). \tag{1.7}$$

Dabei sind $\hat{a}_m$ die bosonischen Vernichtungsoperatoren, $N \gg 1$ bezeichnet die Besetzungszahl des auf eins normierten Grundzustandes $\psi_0(\mathbf{r})$. Dieser Ansatz ist motiviert durch die makroskopisch große Besetzungszahl N des Grundzustands:

$$\hat{a}_0|N,\ldots\rangle = \sqrt{N}|N-1,\ldots\rangle \approx \sqrt{N}|N,\ldots\rangle. \tag{1.8}$$

Mit diesem Ansatz folgt aus Gleichung (1.6) unter Vernachlässigung der Quantenfluktuationen $\delta\hat{\psi}$ die Gross-Pitaevskii-Gleichung für die Grundzustandswellenfunktion $\psi_0(\mathbf{r})$:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_0(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}) + g|\psi_0(\mathbf{r},t)|^2\right)\psi_0(\mathbf{r},t), \tag{1.9}$$

mit der Wechselwirkungsstärke

$$g = \tilde{g}N = \frac{4\pi\hbar^2 aN}{M}. \tag{1.10}$$

Es sei hier angemerkt, dass die Näherung (1.8) eine spontane Brechung der globalen Eichinvarianz bedeutet [11, 14], der Erwartungswert des Feldoperators ist ungleich null: $\langle\hat{\psi}\rangle = \sqrt{N}\psi_0$. Dies ist natürlich nur möglich für Zustände ohne wohldefinierte Teilchenzahl. Die Brechung der Eichsymmetrie hat einige kritische Konsequenzen, so ist die Teilchenzahl nicht erhalten und die Theorie ist nicht Galilei-invariant [10, 14]. Man kann die Gross-Pitaevskii-Gleichung auch ohne spontane Symmetriebrechung herleiten [10, 15, 16], dies ist allerdings aufwändiger.

Die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (1.9) erhält die Norm der Wellenfunktion, die in dieser Arbeit immer auf eins fixiert ist, $\|\psi_0\|^2 = 1$. Eine andere gebräuchliche Konvention ist, die Wellenfunktion gemäß $\|\psi_0\|^2 = N$ auf die Teilchenzahl zu normieren. In diesem Fall wird die Wechselwirkungsstärke g in der Gross-Pitaevskii-Gleichung durch $\tilde{g} = g/N$ ersetzt. Da die Norm erhalten ist, gilt für die Wellenfunktion $\psi_0(\mathbf{r},t) = \sqrt{n(\mathbf{r},t)}\exp(\mathrm{i}S(\mathbf{r},t))$ die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0 \tag{1.11}$$

mit der Flußdichte

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = -\frac{\mathrm{i}\hbar}{2M}(\psi_0^*\nabla\psi_0 - \psi_0\nabla\psi_0^*) = \frac{\hbar n(\mathbf{r},t)}{M}\nabla S(\mathbf{r},t). \tag{1.12}$$

Eine weitere Erhaltungsgröße ist das Energiefunktional

$$E = \int \frac{\hbar^2}{2M}|\nabla\psi_0(\mathbf{r})|^2 + V_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r})|\psi_0(\mathbf{r})|^2 + \frac{g}{2}|\psi_0(\mathbf{r})|^4\,\mathrm{d}\mathbf{r}. \tag{1.13}$$

Stationäre Zustände der Form

$$\psi_0(\mathbf{r},t) = \psi_0(\mathbf{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t/\hbar}, \quad \mu \in \mathbb{R} \tag{1.14}$$

erfüllen die *zeitunabhängige* Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V_{\mathrm{ext}}(\mathbf{r}) + g|\psi_0(\mathbf{r})|^2\right)\psi_0(\mathbf{r}) = \mu\,\psi_0(\mathbf{r}) \tag{1.15}$$

mit dem chemischen Potential μ. Die stationären Zustände sind Extremallösungen des Energiefunktionals (1.13). Dieses Energiefunktional und damit die zeitunabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung kann man für eine repulsive Wechselwirkung im Limit $N \to \infty, g = \tilde{g}N$ fest, rigoros herleiten [17].

Man bezeichnet die Gross-Pitaevskii-Gleichung (1.9) auch als *mean-field*-Approximation, da die Wechselwirkung der Kondensat-Atome durch ein mittleres Potential $g|\psi(\mathbf{r},t)|^2$ beschrieben wird. Der Name Gross-Pitaevskii-Gleichung ist auf die Physik von Bose-Einstein-Kondensaten beschränkt, in anderen Gebieten der Physik und in der mathematischen Literatur wird die Gleichung (1.9) als nichtlineare Schrödingergleichung bezeichnet. Zum Beispiel wird auch die Propagation von Lichtpulsen in optisch nichtlinearen Medien durch eine nichtlineare Schrödingergleichung beschrieben (siehe z.B. [18], Kapitel 8).

Zum Schluss wollen wir noch kurz auf den Gültigkeitsbereich der Gross-Pitaevskii-Gleichung für ein superfluides Bose-Einstein-Kondensat eingehen. Bei der Herleitung dieser Gleichung wurde die Wechselwirkung zweier Atome auf die asymptotische s-Wellen-Streuung reduziert. Die Streuung von drei oder mehr Körpern ist bereits im Ansatz (1.3) vernachlässigt worden. Die Ersetzung der Feldoperatoren durch Wellenfunktionen erfordert die Vernachlässigung von Quantenfluktuationen und nicht-kondensierten Atomen. All diese Näherungen setzen voraus, dass die Temperatur und die Dichte $\rho(\mathbf{r}) = Nn(\mathbf{r})$ des Kondensates hinreichend klein sind (vgl. [8]):

$$T \ll T_c \quad \text{und} \quad a^3\rho \ll 1. \tag{1.16}$$

Unter bestimmten Bedingungen ist aber auch dann die Vernachlässigung nicht-kondensierter Teilchen nicht gerechtfertigt [19].

1.1.2 Niedrig-dimensionale Kondensate

Bose-Einstein-Kondensate werden in der Regel erzeugt, indem man verdünnte Gase in einem harmonischen Fallenpotential

$$V(\mathbf{r}) = \frac{M}{2}\left(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2\right) \tag{1.17}$$

unter die kritische Temperatur abkühlt. In stark anisotropen Fallen kann man die Bewegung der Atome in einer oder zwei Raumrichtungen so weit einschränken, dass die Atome nur noch den Grundzustand des harmonischen Potentials besetzen können. Man erhält ein quasi-eindimensionales oder zweidimensionales Kondensat in den verbleibenden Richtungen.

Eine ausführliche Einführung in die Physik niedrig-dimensionaler Bose-Einstein-Kondensate findet sich zum Beispiel in [11]. Die erste experimentelle Realisierung ist in [20] dargestellt, ein Experiment mit ein- und zweidimensionalen Kondensaten in optischen Gittern ist in [21] beschrieben. Wir beschränken uns hier darauf, den Wert der eindimensionalen Kopplungskonstante $g_{1\mathrm{D}}$ abzuschätzen. Eine genauere Analyse, die weitere Korrekturen zu dieser Formel ergibt, findet sich in [22].

Wir betrachten jetzt eine stark anharmonische, radialsymmetrische Falle mit $\omega_x \ll \omega_y = \omega_z = \omega_r$ Wenn die *mean-field*-Wechselwirkungsenergie klein gegenüber $\hbar\omega_r$ ist,

$$g\rho_{\max} \ll \hbar\omega_r, \tag{1.18}$$

so besetzt das Kondensat nur den Grundzustand des radialen Potentials und der dreidimensionale Feldoperator kann separiert werden in

$$\hat{\psi}_{3\mathrm{D}}(\mathbf{r}) = \hat{\psi}(x)\,\phi_0(y,z), \tag{1.19}$$

wobei $\hat{\psi}(x)$ den bosonischen Feldoperator in einer Dimension bezeichnet. $\phi_0(y,z)$ ist die Grundzustandswellenfunktion des zweidimensionalen harmonischen Oszillators

$$\phi_0(y,z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a_\perp}\exp\left(-\frac{y^2+z^2}{2a_\perp^2}\right), \tag{1.20}$$

mit $a_\perp^2 = \hbar/(M\omega_r)$. Der Wechselwirkungsanteil des Vielteilchen-Hamiltonoperators (1.3) mit dem Potential (1.5) ist dann

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{int}} &= \frac{\tilde{g}_{3\mathrm{D}}}{2}\int \hat{\psi}(\mathbf{r})^\dagger\hat{\psi}(\mathbf{r})^\dagger\hat{\psi}(\mathbf{r})\hat{\psi}(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3\mathbf{r} \\ &= \frac{\tilde{g}_{3\mathrm{D}}}{2}\int \hat{\psi}(x)^\dagger\hat{\psi}(x)^\dagger\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x)\,\mathrm{d}x \int |\phi_0(y,z)|^4\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z \\ &= \frac{1}{2}\frac{\tilde{g}_{3\mathrm{D}}}{2\pi a_\perp^2}\int \hat{\psi}(x)^\dagger\hat{\psi}(x)^\dagger\hat{\psi}(x)\hat{\psi}(x)\,\mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{1.21}$$

Den Feldoperator $\hat{\psi}(x)$ ersetzt man mit der Bogoliubov-Näherung $\hat{\psi}(x) \approx \sqrt{N}\psi(x)$ wiederum durch die auf eins normierte Wellenfunktion $\psi(x)$ und findet die eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{\mathrm{ext}}(x) + g_{1\mathrm{D}}|\psi(x,t)|^2\right)\psi(x,t) \tag{1.22}$$

mit der Wechselwirkungsstärke

$$g_{1\mathrm{D}} = \frac{g_{3\mathrm{D}}}{2\pi a_\perp^2} = \frac{2\hbar^2 aN}{Ma_\perp^2}\,. \tag{1.23}$$

1.1.3 Optische Gitter

Optische Dipolpotentiale sind eine der wichtigsten experimentellen Methoden zur Manipulation ultrakalter Atome. In dieser Arbeit interessiert uns vor allem die Realisierung von periodischen Potentialen. Diese optischen Gitter sind sehr gut kontrollierbar und bieten daher vielfältige experimentelle Möglichkeiten. So konnten mithilfe von optischen Gittern Phasenübergänge von einem superfluiden Bose-Einstein-Kondensat in einen Mott-Isolator [23] und in ein Tonks-Gas [24] beobachtet werden.

Wir erläutern hier die Realisierung optischer Gitter anhand eines einfachen Modellsystems. Eine detaillierte Übersicht über die theoretischen und experimentellen Grundlagen optischer Dipolpotentiale geben die Referenzen [25–27].

Um das Prinzip des Dipolpotentials darzustellen, betrachten wir ein Zweiniveauatom $|g\rangle, |e\rangle$ in einem Laserfeld der Frequenz ω_L, das wir klassisch beschreiben können. Da das Atom klein gegenüber der Laserwellenlänge ist, können wir das elektrische Feld des Lasers $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ als näherungsweise konstant über den Atomdurchmesser ansehen und schreiben $\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{e}E(\mathbf{r})\cos(\omega_L t)$. Das Atom wechselwirkt mit dem Laserfeld über das atomare Dipolmoment d in Feldrichtung $\mathbf{e}$ mit dem Wechselwirkungsoperator $H_{AF} = dE(\mathbf{r},t)$. In der Drehwellennäherung und im Wechselwirkungsbild vereinfacht sich der Operator H_{AF} zu

$$H_{AF} = -\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} -\Delta & \Omega(\mathbf{r}) \\ \Omega(\mathbf{r}) & \Delta \end{pmatrix}. \tag{1.24}$$

Dabei ist $\Omega(\mathbf{r}) = -dE(\mathbf{r})/\hbar$ die Rabifrequenz und $\Delta = \omega_L - \omega_0$ die Verstimmung des Lasers von der atomaren Übergangsfrequenz ω_0. Setzt man jetzt die Wellenfunktion $|\psi\rangle = \exp(\mathrm{i}\Delta t/2)\,[\psi_g(\mathbf{r},t)|g\rangle + \psi_e(\mathbf{r},t)|e\rangle]$ in die Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator $H = p^2/(2M) + H_{AF}$ ein, so erhält man die gekoppelten Gleichungen:

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\psi_e(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= \frac{p^2}{2M}\psi_e(\mathbf{r},t) + \hbar\Delta\psi_e(\mathbf{r},t) - \frac{\hbar\Omega(\mathbf{r})}{2}\psi_g(\mathbf{r},t) \\ \mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial\psi_g(\mathbf{r},t)}{\partial t} &= \frac{p^2}{2M}\psi_g(\mathbf{r},t) - \frac{\hbar\Omega(\mathbf{r})}{2}\psi_e(\mathbf{r},t). \end{aligned} \tag{1.25}$$

Wir nehmen weiterhin an, dass sich das Atom anfänglich im Grundzustand $|g\rangle$ befindet und dass das Laserfeld stark verstimmt ist, $\Delta \gg \Omega$. Dann ist $\psi_e \approx (\Omega/2\Delta)\psi_g$ und man findet die Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi_g(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2M} - \frac{\hbar^2\Omega^2(\mathbf{r})}{4\Delta}\right)\psi_g(\mathbf{r},t) \tag{1.26}$$

für die Grundzustandswellenfunktion, die die Schwerpunktsbewegung des Atoms bestimmt. Das Atom bewegt sich also in dem Dipolpotential

$$V_{\mathrm{Dipol}}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2\Omega^2(\mathbf{r})}{4\Delta} = -\frac{\hbar^2 d^2}{4c\varepsilon_0\,\Delta}I(\mathbf{r}), \tag{1.27}$$

das direkt proportional zur Intensität des Laserfeldes ist.

Wenn man zwei entgegengesetzt laufende Laserstrahlen der Wellenzahl k kohärent überlagert, erhält man eine stehende Welle der Intensität $I_0 \cos^2(kx)$. Dieses Stehwellenfeld realisiert also ein periodisches optisches Potential

$$V_{\text{Dipol}}(x) = -\frac{\hbar^2 d^2 I_0}{4c\varepsilon_0 \Delta} \cos^2 kx, \tag{1.28}$$

dessen Periode die Hälfte der Laserwellenlänge λ ist. In zwei Dimensionen kann man zwei stehende Laserwellen in x- und y-Richtung kohärent oder inkohärent überlagern. Bei gleicher Intensität ergibt dies die optischen Potentiale

$$V(x,y) = V_0 \left(\cos kx + \cos ky\right)^2 \quad \text{bzw.} \quad V(x,y) = V_0 \left(\cos^2 kx + \cos^2 ky\right), \tag{1.29}$$

die wir in Kapitel 2 untersuchen.

Um mithilfe von optischen Gittern ein Wannier-Stark-System zu realisieren, muss man weiterhin ein Stark-Feld implementieren. Indem man das optische Gitter einfach vertikal installiert, ist das Feld durch die Gravitationskraft gegeben [5, 7, 28]. Die Feldstärke ist in diesem Fall allerdings durch die Erdbeschleunigung auf den Wert $F/M = 9.81\,\text{m/s}^2$ festgelegt.

Mehr Möglichkeiten bietet ein anderer Ansatz [4, 6, 29–31]. Die entgegengesetzt laufenden Laserstrahlen passieren zwei phasengekoppelte akusto-optische Modulatoren mit einem Frequenzunterschied $\nu(t)$. Die Frequenz der beiden Laserstrahlen unterscheidet sich dann ebenfalls um $\nu(t)$. Erhöht man nun die Verstimmung ν linear mit der Zeit, so erfährt das ganze optische Gitter eine konstante Beschleunigung

$$a = \frac{\lambda}{2}\frac{\mathrm{d}\nu}{\mathrm{d}t}\,. \tag{1.30}$$

Die Atome im optischem Gitter werden somit relativ zum Gitter mit einer konstanten Kraft $F = Ma$ beschleunigt, die man frei wählen kann.

In der Praxis erzeugt man ein optisches Gitter zumeist mit einen einzigen Laser, der entsprechend aufgeteilt oder reflektiert wird. Für ^{87}Rb-Atome verwendet man Diodenlaser mit einer Wellenlänge von 850 nm, die gegenüber der $2S, J = 1/2 \to 2P, J = 3/2$-Linie bei 780 nm stark verstimmt sind (siehe z.B. [5, 6, 21]). Allerdings wurde auch die Erzeugung einer optischen Dipol-Falle mit einem extrem verstimmten CO_2-Laser der Wellenlänge $\lambda = 10.6\,\mu$m demonstriert [32].

1.2 Wannier-Stark-Systeme

In diesem Abschnitt diskutieren wir die grundlegenden Eigenschaften *eines* quantenmechanischen Teilchens in einem Wannier-Stark-System. Dieses System wird also durch die normale Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + Fx \quad \text{mit} \quad V(x+d) = V(x) \tag{1.31}$$

ohne Selbst-Wechselwirkung beschrieben.

Zunächst diskutieren wir in Abschnitt 1.2.1 das Spektrum des Hamiltonoperators (1.31). In Abschnitt 1.2.2 wenden wir uns dann der zeitabhängigen Schrödingergleichung zu, um in Abschnitt 1.2.3 die Dynamik in schwachen Feldern (Bloch-Oszillationen) ein wenig genauer zu betrachten. Bei all dem beschränken wir uns zunächst auf eindimensionale Systeme. Das Spektrum des zweidimensionalen Wannier-Stark-Hamiltonoperators wird in [33] diskutiert, die Dynamik in zwei Dimensionen untersuchen wir detailliert in Kapitel 2. Schließlich werden wir in Abschnitt 1.2.4 noch einige weitere experimentelle Realisierungen kennen lernen, nachdem optische Gitter bereits in Abschnitt 1.1.3 beschrieben wurden.

1.2.1 Die Wannier-Stark-Leiter der Resonanzen

Die Physik der Wannier-Stark-Systeme (1.31) wurde bereits kurz nach nach der Entwicklung der Quantenmechanik im Kontext der Festkörperphysik studiert [1, 2]. Die Natur des Spektrums des Hamiltonoperators H konnte jedoch erst sehr viel später von Zak und Wannier aufgeklärt werden [34–37]. Einen Überblick über die Eigenschaften der Resonanzeigenfunktionen von H gibt der Artikel [38].

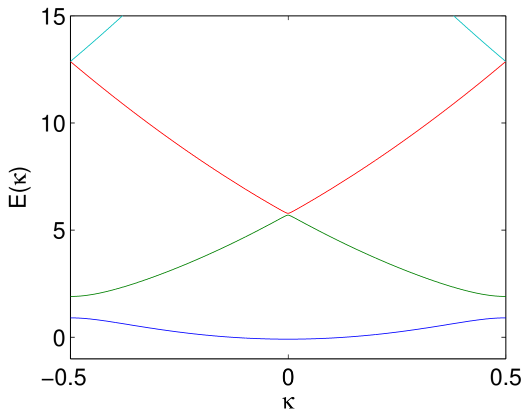

Abbildung 1.1: Blochbänder $E_\alpha(\kappa)$ für ein Potential $V(x) = \cos x$ mit $\hbar = 3.3806$ und $M = 1$.

Im feldfreien Fall $F = 0$ vertauscht der Hamiltonoperator H mit dem Translationsoperator T_m über m Gitterperioden. Die beiden Operatoren haben daher ein gemeinsames System von Eigenfunktionen, die Blochfunktionen:

$$H\phi_{\alpha,\kappa}(x) = E_\alpha(\kappa)\phi_{\alpha,\kappa}(x), \quad T_m\phi_{\alpha,\kappa}(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}md\kappa}\phi_{\alpha,\kappa}(x). \tag{1.32}$$

Die Größe $\hbar\kappa$ wird Quasiimpuls genannt, α bezeichnet den Bandindex. Die Energieeigenwerte $E_\alpha(\kappa)$ bilden die bekannten Blochbänder, die in Abbildung 1.1 für ein Kosinus-Potential dargestellt sind. Eine ausführliche Darstellung dieser als Bloch-Theorem bezeichneten Zusammenhänge findet sich in Büchern über theoretische Festkörperphysik (z.B. in [39, 40]). Da die Blochfunktionen $\phi_{\alpha,\kappa}(x)$ periodisch im Quasiimpuls $\hbar\kappa$ sind, kann man sie bezüglich dieser Variablen in eine Fourierreihe entwickeln:

$$\psi_{\alpha,\kappa}(x) = \sum_{m\in\mathbb{Z}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}d\kappa m} w_{\alpha,m}(x). \tag{1.33}$$

Die so definierten Wannier-Funktionen $w_{\alpha,m}(x)$ lösen *nicht* die Schrödingergleichung. Sie sind aber sehr praktisch, da sie am m-ten Gitterplatz lokalisiert sind und wie die Blochfunktionen eine orthogonale Basis bilden [41].

Für $F \neq 0$ ist die diskrete Translationssymmetrie durch den Feldterm Fx gebrochen und die Operatoren T_m und H kommutieren nicht mehr:

$$[T_m, H] = mdF\,T_m\,. \tag{1.34}$$

Es existiert also kein gemeinsames System von Eigenfunktionen mehr. Ist vielmehr $\Psi(x)$ ein Eigenzustand von H mit dem Eigenwert $\mathcal{E}$ so ist $T_m\Psi(x)$ ein Eigenzustand zum Eigenwert $\mathcal{E} - mdF$. Man findet also eine ganze Leiter von Eigenenergien, die so genannte Wannier-Stark-Leiter [34]. Zak konnte jedoch 1968 zeigen [35], dass das Spektrum des Hamiltonoperators (1.31) kontinuierlich ist. In der folgenden Diskussion zwischen Wannier und Zak [36,37] wurde klar, dass in das kontinuierliche Spektrum von H diskrete Resonanzen eingebettet sind. Diese Wannier-Stark-Resonanzen bilden die Wannier-Stark-Leitern:

$$\mathcal{E}_{\alpha,m} = E_{\alpha,0} + mdF - \mathrm{i}\Gamma_\alpha/2 \quad \text{mit} \quad \alpha \in \mathbb{N}_0,\ m \in \mathbb{Z}. \tag{1.35}$$

Man interpretiert den Realteil der Resonanzenergie $\mathcal{E}_{\alpha,m}$ als Energieerwartungswert und die Größe $\Gamma/\hbar$ als Zerfallsrate. Die Wannier-Stark-Leiter ist in Abbildung 1.2 illustriert.

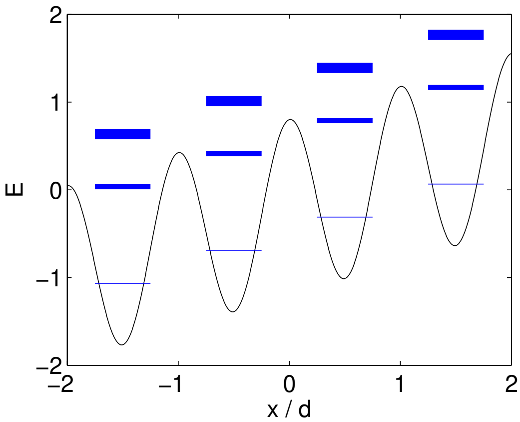

Abbildung 1.2: Schematische Darstellung der Wannier-Stark-Leitern der Resonanzen. Die Breite der Linien symbolisiert die Zerfallsrate.

Die Eigenfunktionen zur Resonanzenergie $\mathcal{E}_{\alpha,m}$ sind die Wannier-Stark-Zustände $\Psi_{\alpha,m}(x)$. Die verschiedenen Zustände einer Leiter α gehen durch eine einfache räumliche Translation ineinander über

$$\Psi_{\alpha,m}(x) = T_{-m}\Psi_{\alpha,0}(x) = \Psi_{\alpha,0}(x - md). \tag{1.36}$$

Die Wannier-Stark-Zustände sind Resonanzen, das heißt, dass sie nicht mehr im Hilbertraum $\mathcal{L}^2$ liegen und nicht normierbar sind [12, 42]. Die Resonanzen liegen in einem erweiterten Raum, dem so genannten *rigged Hilbertspace*, in dem der Hamiltonoperator nicht mehr hermitesch ist. Die Wellenfunktion des Wannier-Stark-Zustandes $\Psi_{0,0}$ in einem Kosinus-Potential $V(x) = \cos x$ mit $M = 1$ und $\hbar = 3.3806$ ist in den Abbildungen 4.1 und 4.11 für die Feldstärken $F = 0.005$ bzw. $F = 0.0661$ dargestellt.

Ein effizienter Algorithmus zur Berechnung der Quasienergien $\mathcal{E}$ und der Wannier-Stark-Zustände ist im Anhang B.4 beschrieben. Die streutheoretischen Grundlagen dieses Verfahrens finden sich in [43–45].

1.2.2 Floquet-Bloch-Theorie für die zeitabhängige Schrödingergleichung

Kommen wir zurück zur zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = H\psi(x,t) \tag{1.37}$$

mit dem Wannier-Stark-Hamiltonoperator (1.31). Es erweist sich als nützlich, einen explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator $\widetilde{H}(t)$ einzuführen, der im Gegensatz zum ursprünglichen Hamiltonoperator H mit dem Translationsoperator T_m vertauscht.

Mit der Substitution

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ftx/\hbar}\,\widetilde{\psi}(x,t) \tag{1.38}$$

kann man den Anteil des Stark-Feldes in den Term der kinetischen Energie transformieren und erhält

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\widetilde{\psi}(x,t)}{\partial t} = \widetilde{H}(t)\widetilde{\psi}(x,t) \quad \text{mit} \quad \widetilde{H}(t) = \frac{(p-Ft)^2}{2M} + V(x). \tag{1.39}$$

Der transformierte Hamiltonoperator $\widetilde{H}(t)$ vertauscht mit dem Translationsoperator T_m.

Die zeitliche Evolution eines beliebigen Zustandes wird durch den Zeitentwicklungsoperator $U(t)$ beschrieben,

$$\psi(x,t) = U(t)\psi(x,0), \tag{1.40}$$

der ebenfalls eine zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllt:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t) = HU(t) \quad \text{mit} \quad U(0) = \mathbb{1}\,. \tag{1.41}$$

Für einen zeitunabhängigen Hamiltonoperator kann man diese Gleichung direkt integrieren und erhält

$$U(t) = \exp\left(-\mathrm{i}Ht/\hbar\right). \tag{1.42}$$

Für einen explizit zeitabhängigen Hamiltonoperator wie $\widetilde{H}(t)$ schreibt man symbolisch

$$\widetilde{U}(t) = \widehat{\exp}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \widetilde{H}(t')\mathrm{d}t'\right), \tag{1.43}$$

wobei $\widehat{\exp}$ die zeitgeordnete Exponentialfunktion ist.

Da der transformierte Hamiltonoperator $\widetilde{H}(t)$ mit dem Translationsoperator T_m kommutiert, gilt dies auch für den Zeitentwicklungsoperator $\widetilde{U}(t)$. Aus Gleichung (1.38) folgt, dass sich der Evolutionsoperator $U(t)$ zum ursprünglichen Hamiltonoperator H gemäß

$$U(t) = S(t)\widetilde{U}(t) \quad \text{mit} \quad S(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ftx/\hbar} \tag{1.44}$$

aus dem Operator $\widetilde{U}(t)$ ergibt. Die Wirkung des Stark-Feldes wird also allein durch den Operator $S(t)$ beschrieben, der eine zeitabhängige Impulsverschiebung bewirkt.

Da der ursprüngliche Hamiltonoperator H und der Translationsoperator T_m nicht kommutieren, vertauscht T_m auch nicht mit $U(t)$. Vielmehr gilt

$$T_m U(t) = T_m S(t)\widetilde{U}(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}mdFt/\hbar}\, U(t) T_m, \tag{1.45}$$

da T_m zwar mit $\widetilde{U}(t)$, nicht aber mit $S(t)$ vertauscht. Zu Vielfachen der **Blochzeit**

$$T_B = \frac{2\pi\hbar}{dF} \tag{1.46}$$

ist der Exponentialfaktor in Gleichung (1.45) gleich eins und der Translationsoperator T_m vertauscht mit dem Zeitentwicklungsoperator $U(T_B)$. Die Blochzeit T_B prägt dem System eine intrinsische Zeitskala auf, zu der die durch das Stark-Feld gestörte Symmetrie wiederhergestellt wird.

Der Zeitentwicklungsoperator über eine Blochzeit $U(T_B)$ wird als Floquet-Bloch-Operator bezeichnet. Da er mit dem Translationsoperator vertauscht, besitzen sie einen gemeinsamen Satz von Eigenfunktionen, die Floquet-Bloch-Funktionen:

$$U(T_B)\Phi_\kappa(x) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}T_B/\hbar}\Phi_\kappa(x), \quad T_m\Phi_\kappa(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}md\kappa}\Phi_\kappa(x)\,. \tag{1.47}$$

Man bezeichnet $\mathcal{E}$ als Quasienergie und $\mathcal{E}T_B/\hbar$ als Quasiwinkel. Der Quasiwinkel ist nur modulo 2π definiert, was gerade der Wannier-Stark-Leiter entspricht.

Die Zeitabhängigkeit der Floquet-Bloch-Funktionen ist durch $U(t)$ gegeben. Es ist allerdings günstig, die Phase dieser Zustände durch

$$U(t)\Phi_\kappa(x,0) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}t/\hbar}\Phi_\kappa(x,t) \tag{1.48}$$

zu fixieren. Wie man durch Einsetzen der Gleichung (1.41) sieht, sind die zeitabhängigen Zustände $\Phi_\kappa(x,t)$ ebenfalls Eigenzustände des Floquet-Bloch-Operators zur selben Quasienergie

$$U(T_B)\Phi_\kappa(x,t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}T_B/\hbar}\Phi_\kappa(x,t), \tag{1.49}$$

aber einem anderen Quasiimpuls:

$$T_m\Phi_\kappa(x,t) \overset{(1.48)}{=} T_m U(t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathcal{E}t/\hbar}\Phi_\kappa(x,0) \overset{(1.45)}{=} \mathrm{e}^{\mathrm{i}md(\kappa-Ft/\hbar)}\Phi_\kappa(x,t). \tag{1.50}$$

Der Quasiimpuls des Zustandes durchläuft also gemäß $\hbar\kappa - Ft$ gleichmäßig die Brillouinzone. Im Ortsraum führt dies zu einer periodischen Bewegung, den Bloch-Oszillationen, die wir in Abschnitt 1.2.3 noch genauer betrachten werden.

Zuletzt wollen wir zeigen, wie die Floquet-Bloch-Funktionen und die Wannier-Stark-Funktionen auseinander hervorgehen. Dazu definieren wir die Zustände

$$\Psi_0(x,t) = \frac{1}{T_B}\int_0^{T_B} \exp(\mathrm{i}\mathcal{E}t'/\hbar)\, U(t+t')\Phi_\kappa(x)\,\mathrm{d}t'\,. \tag{1.51}$$

Aus der Gleichung (1.41) für den Zeitentwicklungsoperator folgt, dass die so definierten Zustände die zeitabhängige Schrödingergleichung erfüllen:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_0(x,t) = H\Psi_0(x,t)\,. \tag{1.52}$$

Mit der Zeitentwicklung der Floquet-Bloch-Zustände (1.48) kann man Gleichung (1.51) umschreiben in

$$\Psi_0(x,t) = \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}t/\hbar}}{T_B}\int_0^{T_B} \Phi_\kappa(x,t')\,\mathrm{d}t' = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}t/\hbar}\,\Psi_0(x,0)\,. \tag{1.53}$$

Damit folgt, dass die Zustände $\Psi_0(x) = \Psi_0(x,0)$ auch die zeitunabhängige Schrödingergleichung

$$H\Psi_0(x) = \mathcal{E}\Psi_0(x) \tag{1.54}$$

erfüllen. Die in Gleichung (1.51) definierten Zustände sind also gerade die Wannier-Stark-Zustände.

Indem man im Impulsraum einen Weg $t \to \kappa - Ft/\hbar$ definiert, kann man die Gleichung (1.53) für die Wannier-Stark-Zustände in eine Integration im Impulsraum umschreiben:

$$\Psi_0(x) = \frac{d}{2\pi}\int_{\kappa-2\pi/d}^{\kappa} \Phi_{\kappa'}(x)\,\mathrm{d}\kappa' \tag{1.55}$$

Aufgrund der Periodizität der Floquet-Bloch-Funktionen im Quasiimpuls hängen die so definierten Wannier-Stark-Funktionen *nicht* vom Anfangspunkt κ ab. Dies ist im zweidimensionalen Fall anders, die Wannier-Stark-Funktionen hängen dann vom Anteil des Quasiimpulses senkrecht zur Feldrichtung $\kappa_\perp$ ab [33].

Die weiteren Zustände einer Wannier-Stark-Leiter ergeben sich analog durch

$$\Psi_m(x) = \frac{d}{2\pi}\int_0^{2\pi/d} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}md\kappa}\,\Phi_{\kappa'}(x)\,\mathrm{d}\kappa'\,. \tag{1.56}$$

Andererseits sind die Floquet-Bloch-Zustände gegeben durch

$$\Phi_\kappa(x) = \sum_{m\in\mathbb{Z}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}md\kappa}\,\Psi_m(x)\,. \tag{1.57}$$

Die Zusammenhänge zwischen den Floquet-Bloch-Funktionen und den Wannier-Stark-Funktionen sind also analog zu den Relationen zwischen den Blochfunktionen und den Wannier-Funktionen im feldfreien Fall. Allerdings sind die konkreten Eigenschaften durchaus unterschiedlich: Im feldfreien Fall sind die Blochfunktionen die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators, sonst die Wannier-Stark-Funktionen.

1.2.3 Bloch-Oszillationen

Erste Untersuchungen zur Dynamik in einem Wannier-Stark-System finden sich bereits bei Bloch und Zener [1,2]. In diesen semiklassischen Studien wird ein Wellenpaket mit einem scharf definierten Quasiimpuls betrachtet, das somit eine breite Verteilung im Ortsraum besitzt. Der Quasiimpuls dieses Wellenpaketes folgt dann der bekannten semiklassischen Blochgleichung

$$\dot{\kappa} = -F/\hbar, \tag{1.58}$$

die wir im vorigen Abschnitt für die Floquet-Bloch-Zustände streng gezeigt haben. Die Gruppengeschwindigkeit und damit die Bewegung des Wellenpaketes im Ortsraum ergibt sich aus der feldfreien Dispersionsrelation, den Blochbändern (vgl. Abbildung 1.1), gemäß

$$v_g = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E(\kappa)}{\partial \kappa}\,. \tag{1.59}$$

Erreicht der Quasiimpuls den Rand der Brillouinzone, so tunnelt ein Teil des Wellenpaketes in das angeregte Band („Zener-Tunneln") und zerfällt schließlich. Der Rest kehrt zum Ausgangspunkt zurück, was im Ortsraum gerade die Bloch-Oszillationen ergibt. Die Amplitude der Oszillationen kann man in diesem Bild zu

$$x_{\max} = \frac{\Delta E}{F} \tag{1.60}$$

abschätzen, wobei ΔE die Breite des Grundbandes bezeichnet.

Eine weitere populäre Betrachtungsweise ist die *Tight-Binding*-Approximation, die ebenfalls vom feldfreien Problem ausgeht. Oft beschränkt man sich weiter auf ein einziges Blochband der Breite ΔE (Einband- oder *Single-Band*-Näherung). Mit dieser Näherung ist der Hamiltonoperator in einer Entwiklung nach Wannier-Funktionen $|n\rangle$ (siehe z.B. [46, 47]) gegeben durch:

$$H = -\frac{\Delta E}{4}\sum_n \big(|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|\big) + dF\sum_n n|n\rangle\langle n|\,. \tag{1.61}$$

Eine Lie-algebraische Lösung dieses Problems findet sich in [48], die resultierende Dynamik wird in [49] diskutiert.

Wir wollen einen anderen Ansatz etwas genauer betrachten, auf den wir in dieser Arbeit noch öfter zurück kommen werden. Man entwickelt den Anfangszustand $\psi(0)$ im Impulsraum in die Resonanzeigenzustände, die Wannier-Stark-Funktionen $\Psi_{\alpha,m}$:

$$\begin{aligned}\psi(k,t) &= \sum_{\alpha,m}\langle\Psi_{\alpha,m}|\psi(0)\rangle\Psi_{\alpha,m}(k,t)\\ &= \sum_{\alpha,m} c_{\alpha,m}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathcal{E}_{\alpha,0}+mdF)t/\hbar}\,\Psi_{\alpha,m}(k,0).\end{aligned} \tag{1.62}$$

Die verschiedenen Wannier-Stark-Zustände einer Leiter α gehen durch eine einfache Translation ineinander über. Im Impulsraum entspricht dies einfach der Multiplikation mit einem Phasenfaktor

$$\Psi_{\alpha,m}(k) = T_{-m}\Psi_{\alpha,0}(k) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}mdk}\Psi_{\alpha,0}(k). \tag{1.63}$$

Wir beschränken uns hier auf eine einzige Leiter α. Dies wird ganz allgemein die Grundleiter $\alpha = 0$ sein, wenn man wartet, bis die Beiträge der anderen, instabileren Leitern zerfallen sind. Die Dynamik ist dann gegeben durch [49, 50]

$$\begin{aligned}\psi(k,t) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}_{\alpha,0}t/\hbar}\,\Psi_{\alpha,0}(k)\sum_m c_{\alpha,m}\exp\big(-\mathrm{i}md\big(k+Ft/\hbar\big)\big)\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}_{\alpha,0}t/\hbar}\,\Psi_{\alpha,0}(k)\,\widetilde{C}_\alpha\big(k+Ft/\hbar\big)\,. \end{aligned} \tag{1.64}$$

Bis auf den Exponentialfaktor wird die Dynamik ausschließlich durch die Funktion $\widetilde{C}_\alpha(k+Ft/\hbar)$ beschrieben. Diese Funktion ist periodisch mit der Periode $2\pi/d$ und weist für ein breites Wellenpaket $\psi(x,0)$ scharfe Peaks bei $k + Ft\hbar = 2\pi n$, $n \in \mathbb{Z}$ auf. Aufgrund des Terms $Ft\hbar$ bewegt sich die „Kammfunktion" $\widetilde{C}_\alpha$ gleichförmig unter der Einhüllenden $\Psi_{\alpha,0}(k)$ hinweg. Nach einer Blochperiode $T_B = 2\pi\hbar/dF$ ist

$$\widetilde{C}(k + FT_B/\hbar) = \widetilde{C}(k) \tag{1.65}$$

und die Wellenfunktion reproduziert sich bis auf den Faktor $\exp(-\mathrm{i}\mathcal{E}_{\alpha,0}T_B/\hbar)$.

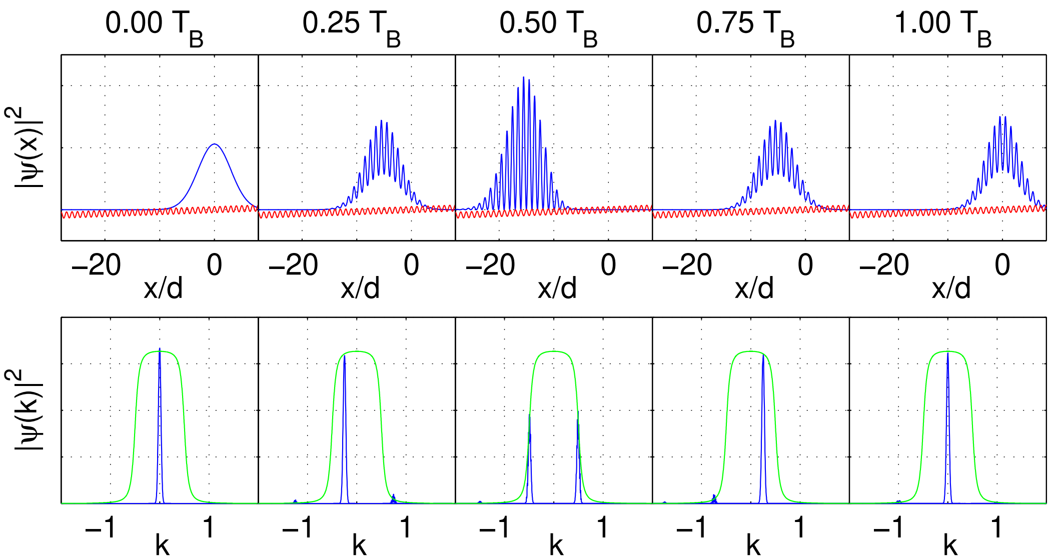

Abbildung 1.3: Bloch-Oszillationen im Orts- (oben) und Impulsraum (unten). Unten ist neben der Wellenfunktion $|\psi(k)|^2$ (blau) auch die Wannier-Stark-Funktion $|\Psi_{0,0}(k)|^2$ (grün) dargestellt.

In Abbildung 1.3 sind Bloch-Oszillationen in einem Kosinus-Potential $V(x) = \cos x$ und einem Stark-Feld $F = 0.01$ für $M = 1$ und $\hbar = 3.3806$ im Orts- und Impulsraum dargestellt. Für diese Parameter sind die Zerfallsraten $\Gamma_0 = 8 \times 10^{-9}$ und $\Gamma_1 = 0.029$. Der Zerfall in der Grundleiter ist daher völlig vernachlässigbar, während die Anteile in den höheren Leitern schnell zerfallen. Nach einer Blochperiode T_B wird daher nur der Anteil des Anfangszustands in der Grundleiter wiederhergestellt.

1.2.4 Experimentelle Realisierungen

Neben den kalten Atomen in optischen Gittern, die wir in Abschnitt 1.1 eingehend betrachtet haben, existieren eine ganze Reihe weiterer experimenteller Realisierungen von Wannier-Stark-Systemen, die wir in diesem Abschnitt kurz vorstellen wollen.

Die Frage nach der Dynamik in einem periodischen Potential und einem konstanten elektrischen Feld stellte sich ursprünglich im Kontext der Bewegung von Elektronen in einem Festkörper. Aufgrund der kleinen Periode des Kristallgitters ist die Blochzeit in einem normalen Festkörper (1.46) jedoch sehr viel größer als typische Dämpfungszeiten. Die Streuung der Elektronen an Phononen und Störstellen verhindert, dass sich Bloch-Oszillationen ausbilden können.

Erst mit der Entwicklung von Halbleiter-Heterostrukturen in den letzten Jahrzehnten wurde es möglich, Wannier-Stark-Leitern und Bloch-Oszillationen in Festkörpern experimentell nachzuweisen. Im Jahre 1988 gelang es zum ersten Mal, Wannier-Stark-Leitern in GaAs/AlGaAs-Übergittern zu beobachten [51,52], Bloch-Oszillationen wurden dann 1992 in einem ähnlichen Material demonstriert [3]. Einen guten Überblick über dieses Thema gibt das Buch [53].

Auch elektromagnetische Wellen können Bloch-oszillieren. Die Wirkung eines Potentials wird dabei durch eine Variation des Brechungsindexes ersetzt [54–57]. Das periodische Potential wird durch eine periodische Anordnung von Materialien mit unterschiedlichen Brechungsindizes in einem Wellenleiter implementiert. Ein zusätzlich angelegter Temperaturgradient sorgt für einen linearen Anstieg des Brechungsindexes, dies realisiert das Stark-Feld.

Ein stromdurchflossener Josephson-Tunnelkontakt (*current biased Josephson junction*) bildet ebenfalls ein Wannier-Stark-System [58–60]. Solche Tunnelkontakte sind ,,heiße" Kandidaten für die Realisierung eines Quantencomputers [60–62]. Allerdings stellen nicht alle dieser Josephson-Elemente ein Wannier-Stark-System dar, da an die Stelle des Feldterms Fx je nach elektrischer Schaltung ein in x quadratischer Term tritt.

Kapitel 2

Bloch-Oszillationen in zweidimensionalen Gittern

2.1 Einleitung

Das Studium der Dynamik in Wannier-Stark-Systemen beschränkt sich bis heute zum größten Teil auf eindimensionale Systeme. Mit Ausnahme einiger weniger Arbeiten der Pioniere auf diesem Gebiet wie Wannier [63] wurde das Verhalten in höheren Dimensionen erst kürzlich eingehend untersucht [64–71]. Wir diskutieren in diesem Kapitel die Dynamik in zweidimensionalen Systemen für relativ schwache Felder unter Vernachlässigung der *mean-field*-Wechselwirkung ($g = 0$).

In [64, 67] wurde die Korrespondenz klassischer und quantenmechanischer Systeme für hohe Feldstärken studiert, deren Dynamik von Zerfall und chaotischer Streuung dominiert wird. Ein zweidimensionales *Tight-Binding*- und Ein-Band-Modell kann mithilfe der mehrdimensionalen Bessel-Funktionen gelöst werden [66]. Eine Studie der Dynamik eines zweidimensionalen *Tight-Binding*-Modells zeigte Bloch-Oszillationen und, in einem speziell konstruierten Zwei-Band-Modell, kohärente Bloch-Zener-Oszillationen [68]. Weitere Studien wurden vor dem Hintergrund der Festkörperphysik durchgeführt. In diesen Arbeiten wurden Bloch-Oszillationen in Quantenpunkt-Übergittern in zwei und drei Dimensionen [69] und die Dämpfung der Oszillationen [70] untersucht.

In diesem Kapitel diskutieren wir ausgewählte numerische Studien der Wellenpaketdynamik in zwei Dimensionen für relativ schwache Felder. Man findet, dass ein *Tight-Binding*-Modell [68] im Wesentlichen die gleiche Dynamik zeigt wie die hier beschriebene voll quantenmechanische Simulation. Weiterhin untersuchen wir die Unterdrückung von Dispersion in zweidimensionalen Wannier-Stark-Systemen. Die hier diskutierten Ergebnisse sowie Animationen zu den dargestellten Simulationen sind auch in dem Artikel [71] zu finden.

Wir verwenden skalierte Einheiten, wie sie im Anhang A beschrieben sind. Der Hamiltonoperator des Systems in diesen Einheiten ist

$$H = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + V(x, y) + F_x\, x + F_y\, y\,. \tag{2.1}$$

Potentiale der Form

$$V(x,y) = V_0\,\left(\cos^2 kx + \cos^2 ky\right) \quad \text{oder} \quad V(x,y) = V_0\,(\cos kx + \cos ky)^2 \tag{2.2}$$

kann man einfach durch zwei gekreuzte Laserstrahlen realisieren, wie in Abschnitt 1.1.3 beschrieben. Durch eine Skalierung und Rotation der Variablen kann man beide Potentiale in die Form

$$V(x,y) = V_0\,(\cos x + \cos y + \epsilon \cos x \cos y) \tag{2.3}$$

mit $\epsilon = 0$ oder $\epsilon = 1$ bringen. Wenn ϵ gegeben ist, sind die einzigen unabhängigen Systemparameter die Komponenten des Stark-Feldes F_x und F_y und der Wert des skalierten Planckschen Wirkungsquantums, welches experimentell durch die Intensität des Lasers variiert werden kann. Mit Ausnahme des Abschnitts 2.3, in dem $\hbar = 2$ verwendet wird, setzen wir im Folgenden immer $\hbar = 3.3806$ an, was dem Experiment der Kasevich-Gruppe entspricht [5].

Für $\epsilon = 0$ ist das Potential (2.3) separabel und zeigt eine typische „Eierkarton"-Struktur mit alternierenden Minima und Maxima. Für $\epsilon = -1$ besteht das Potential aus einem Gitter von Minima auf einem flachen Hintergrund (ein Quantenpunktgitter in der Terminologie der Halbleiterphysik), für $\epsilon = +1$ aus einem Gitter von Maxima (ein Antipunktgitter). Diese drei Potentiale sind in Abbildung 2.1 dargestellt, einen allgemeineren Fall diskutieren wir in Abschnitt 2.3.

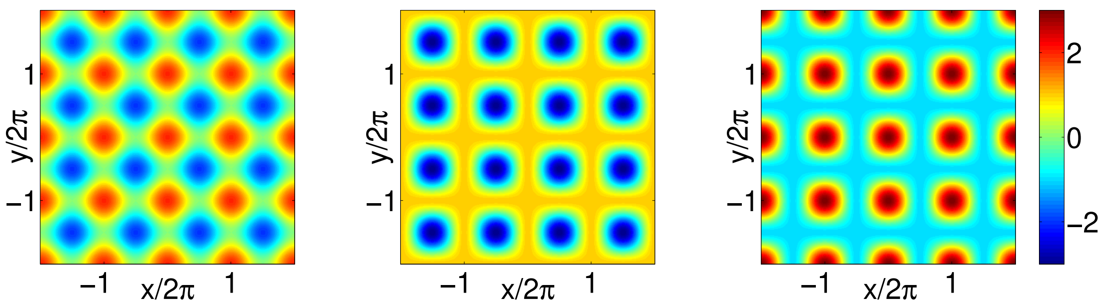

Abbildung 2.1: Falschfarbendarstellung des Potentials (2.3) für $\epsilon = 0$ (links, Eierkarton), $\epsilon = -1$ (Mitte, Quantenpunktgitter) und $\epsilon = +1$ (rechts, Antipunktgitter). Maxima sind rot dargestellt, Minima blau.

Die Dynamik hängt stark von der Richtung des Stark-Feldes relativ zum Gitter ab. Wir nehmen an, dass das Verhältnis der Feldkomponenten rational ist:

$$F_x/F_y = q/r\ , \quad \text{mit teilerfremden } q,\, r \in \mathbb{N}\,. \tag{2.4}$$

Mit der Definition der Feldstärke

$$F = \sqrt{F_x^2 + F_y^2}\,, \tag{2.5}$$

kann man das Stark-Feld schreiben als

$$\begin{pmatrix} F_x \\ F_y \end{pmatrix} = \frac{F}{\sqrt{q^2 + r^2}} \begin{pmatrix} q \\ r \end{pmatrix}\,. \tag{2.6}$$

Eine Studie der Dynamik in diesem System im Rahmen einer *Tight-Binding*-Näherung findet sich in [68].

Der Anfangszustand aller folgenden Simulationen ist ein gaußförmiges Wellenpaket minimaler Unschärfe

$$\psi(x,y) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2}\,\mathrm{e}^{-[(x-x_0)^2+(y-y_0)^2]/4\sigma^2+\mathrm{i}\,p_{0,x}\,x/\hbar+\mathrm{i}\,p_{0,y}\,y/\hbar} \tag{2.7}$$

mit einem Maximum bei (x_0, y_0), einem Anfangsimpuls von $(p_{0,x}, p_{0,y})$ und der Breite $\sigma = \Delta x = \Delta y$. Dieser Zustand wird mit dem Split-Operator-Verfahren (siehe Anhang B.1) zeitlich propagiert. Wir betrachten zwei verschiedenen Fälle, die zu einer sehr unterschiedlichen Dynamik führen: Breite Wellenpakete mit einem scharfen Impuls, die mehrere Potentialtöpfe kohärent bevölkern, und anfänglich stark lokalisierte Wellenpakete mit einer breiten Impulsverteilung. Wir diskutieren hauptsächlich den ersten Fall, für den wir Oszillationen des Wellenpaketes (Abschnitt 2.2.1) mit einer erstaunlich kleinen Dispersion zeigen werden. Die Unterdrückung der Dispersion wird in Abschnitt 2.2.3 detailliert analysiert. Für ein doppelt periodisches Potential kann ein solches Wellenpaket kohärente Bloch-Zener-Oszillationen in zwei Energiebändern zeigen, die in Abschnitt 2.3 beschrieben werden. Im zweiten Fall, der in Abschnitt 2.2.2 diskutiert wird, findet man starke Oszillationen in der Breite des Wellenpaketes, das so genannte Atmen oder *Breathing*, während der Ortserwartungswert näherungsweise konstant ist.

Die numerischen Parameter wurden wie folgt gewählt. In den Abschnitten 2.2.2 und 2.3 hat die Koordinatenebene eine Länge von 320π und ist diskretisiert in 2048 Teile pro Koordinatenrichtung. Dies führt zu einer Auflösung von $\Delta x = \Delta y = 5\pi/32$ im Ortsraum und $\Delta k = 1/160$ im Impulsraum. In den restlichen Abschnitten hat die Koordinatenebene eine Länge von 200π, die Auflösung beträgt $\Delta x = 25\pi/128$ ($\Delta k = 1/100$). Die Blochzeit ist diskretisiert in 16384 (Abschnitt 2.3), 4096 (Abschnitt 2.2.2), bzw. 1024 Schritten (sonst). Für die betrachteten Feldstärken zerfallen nur sehr kleine Teile des Anfangswellenpaketes, die allerdings durch das endliche numerische Gitter reflektiert werden. Um dieses nichtphysikalische Verhalten zu vermeiden wird die Wellenfunktion nach jedem Zeitschritt mit einer Funktion multipliziert, die fast überall gleich eins ist und an den Rändern glatt verschwindet. Da das numerische Gitter groß genug ist, wird die Propagation des Hauptteils des Wellenpaketes davon nicht beeinflusst.

2.2 Zweidimensionale Bloch-Oszillationen

In diesem Abschnitt diskutieren wir verschiedene Aspekte von Bloch-Oszillationen in zweidimensionalen Gittern. Zunächst betrachten wir die Dynamik eines im Ortsraum breiten Wellenpaketes. Für ein separables Potential und eine rationale Feldrichtung bewegt sich der Ortserwartungswert eines solchen Wellenpaketes auf einer geschlossenen Trajektorie. Diese Trajektorie ist die Superposition zweier orthogonaler Oszillationen mit kommensurablen Frequenzen, also eine Lissajous-Figur. Die Bewegung des Wellenpaketes wird mithilfe des Bandschemas des feldfreien Falls und quasiklassischen Argumenten in Abschnitt 2.2.1 diskutiert. Eine Lissajous-artige Oszillation findet man ebenfalls im nicht-separablen Fall.

Für anfänglich stark lokalisierte Wellenpakete findet man anstatt der Oszillationen des Ortserwartungswertes Oszillationen in der Breite des Wellenpaketes. Dieses so genannte Atmen oder *Breathing* wird in Abschnitt 2.2.2 dargestellt. In Abschnitt 2.2.3 werden wir schließlich detailliert die Dispersion in zweidimensionalen Wannier-Stark-Systemen analysieren.

2.2.1 Lissajous-Oszillationen

Der Mittelpunkt eines anfänglich breiten Wellenpaketes in einem zweidimensionalen Wannier-Stark-System führt Lissajous-artige Bloch-Oszillation aus. In den folgenden Beispielen betrachten wir ein gaußförmiges Wellenpaket (2.7) mit $\sigma = 7\pi/\sqrt{2}$.

Aufgrund der diskreten Translationsinvarianz des Potentials (2.3) im feldfreien Fall existiert eine weitere Quantenzahl, der Quasiimpuls $\boldsymbol{\kappa}$. Für das Verständnis der Dynamik erweist sich die feldfreie Dispersionsrelation $E(\boldsymbol{\kappa})$, also die Eigenenergien des feldfreien Systems, als sehr hilfreich. Die Eigenenergien des feldfreien Systems hängen vom Quasiimpuls $\boldsymbol{\kappa}$ ab und bilden die bekannten Blochbänder, die in Abbildung 2.2 für das Potential (2.3) dargestellt sind. Aus den Symmetrien des Potentials folgen Symmetrien der Dispersionsrelation:

$$E(\kappa_x, \kappa_y) = E(-\kappa_x, -\kappa_y) \quad \text{und} \quad E(\kappa_x, \kappa_y) = E(\kappa_x, -\kappa_y)\,. \tag{2.8}$$

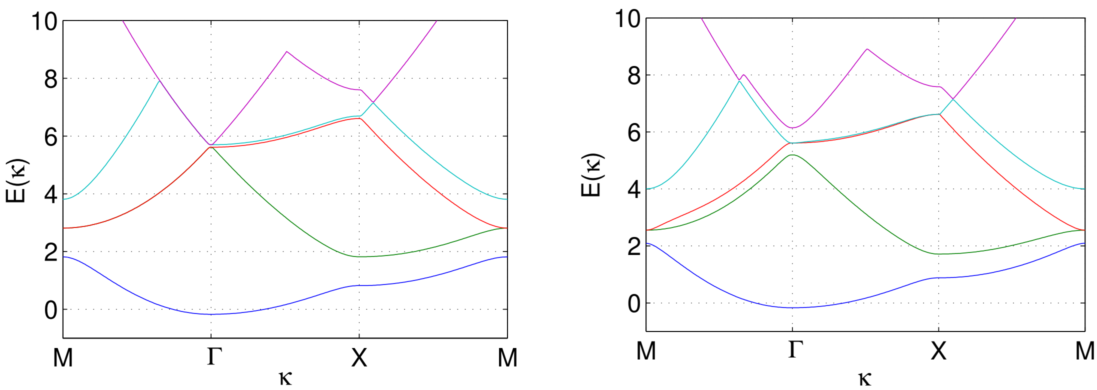

Abbildung 2.2: Feldfreie Dispersionsrelation für das separable Potential ($\epsilon = 0$, links) und das nicht-separable Potential ($\epsilon = +1$, rechts).

In Abbildung 2.2 ist die Dispersionsrelation entlang eines Weges dargestellt, der die Punkte hoher Symmetrie Γ, X und M in der ersten Brillouinzone verbindet (siehe auch Abbildung 2.3). Die Bezeichnung dieser Punkte folgt der in der Festkörperphysik üblichen Notation (siehe z.B. [40]).

In einer quasiklassischen Näherung ergibt sich der Quasiimpuls aus der Blochgleichung [1]

$$\hbar\,\dot{\boldsymbol{\kappa}}(t) = -\mathbf{F}\,. \tag{2.9}$$

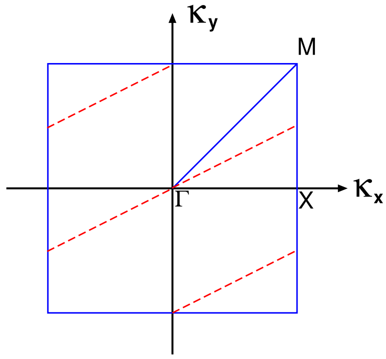

Abbildung 2.3: Die erste Brillouinzone für ein zweidimensionales Gitter. Die gestrichelte rote Linie illustriert die quasiklassische Bewegung eines Wellenpaketes für die Feldrichtung $F_x/F_y = 2/1$.

In den folgenden Beispielen beträgt die Feldstärke jeweils $F = 0.03$ und die Feldrichtung ist $F_x/F_y = q/r$. Für den Fall $q/r = 2/1$ und $\boldsymbol{\kappa}(0) = 0$ bewegt sich das Wellenpaket quasiklassisch entlang der gestrichelten Linie in Abbildung 2.3 in der ersten Brillouinzone. Wir vergleichen die Dynamik im separablen Potential $\epsilon = 0$ mit dem nicht-separablen Fall $\epsilon = +1$.

Separabler Fall $\epsilon = 0$: Im separablen Fall ist die Dynamik einfach eine Überlagerung von zwei unabhängigen Bewegungen in der x- und y-Richtung. In beiden Richtungen führt das Wellenpaket eine Bloch-Oszillation aus, wie sie z.B. in [49] detailliert beschrieben ist. Die anfängliche Population in höheren Bändern zerfällt schnell und die verbleibende Population im Grundband oszilliert mit der Blochperiode $T_{Bx} = \hbar/F_x$ in der x-Richtung über eine Strecke von $L_x = \Delta/F_x$, wobei Δ die Bandbreite des Grundbandes der feldfreien Dispersionsrelation ist. Eine solche Oszillation findet auch in der y-Richtung statt, allerdings mit der Periode $T_{By} = \hbar/F_y$ und $L_y = \Delta/F_y$. Für rationale Feldrichtungen $F_x/F_y = q/r$ kann man die Blochperiode T_B des zweidimensionalen Systems als kleinstes gemeinsames Vielfaches der beiden eindimensionalen Blochperioden definieren. Für die hier betrachtete Feldrichtung $q/r = 2/1$ ist $T_B = T_{By} = 2T_{Bx}$ und $L_y = 2L_x$.

Die Simulation der Wellenpaketdynamik in Abbildung 2.4 zeigt diese Lissajous-Bewegung. Zu Beginn der Bewegung (am Γ-Punkt in Abbildung 2.2) erkennt man die Emission von vier ähnlichen Wellenpaketen in alle vier Koordinatenrichtungen, die den Anteilen des Anfangswellenpaketes in den höheren Blochbändern entsprechen (siehe auch die Diskussion in [49]). Nach einem Viertel der Blochzeit, am Umkehrpunkt der Bewegung in x-Richtung, erreicht der Quasiimpuls $\boldsymbol{\kappa}(t)$ den Rand der ersten Brillouinzone bei $\boldsymbol{\kappa} = (-1/2, -1/4)$ und ein weiteres Wellenpaket wird emittiert. In Abbildung 2.2 ist dies gerade die Mitte zwischen den Punkten X und M (vgl. Abbildung 2.3 und 2.6 weiter unten). An diesem Punkt tunnelt ein Teil des Wellenpaketes in das erste angeregte Band. Die Tunnelwahrscheinlichkeit und damit der Anteil des emittierten Wellenpaketes ist gegeben durch

$$P = \exp\left(-\frac{\pi\delta^2}{2\hbar^2 F}\right), \tag{2.10}$$

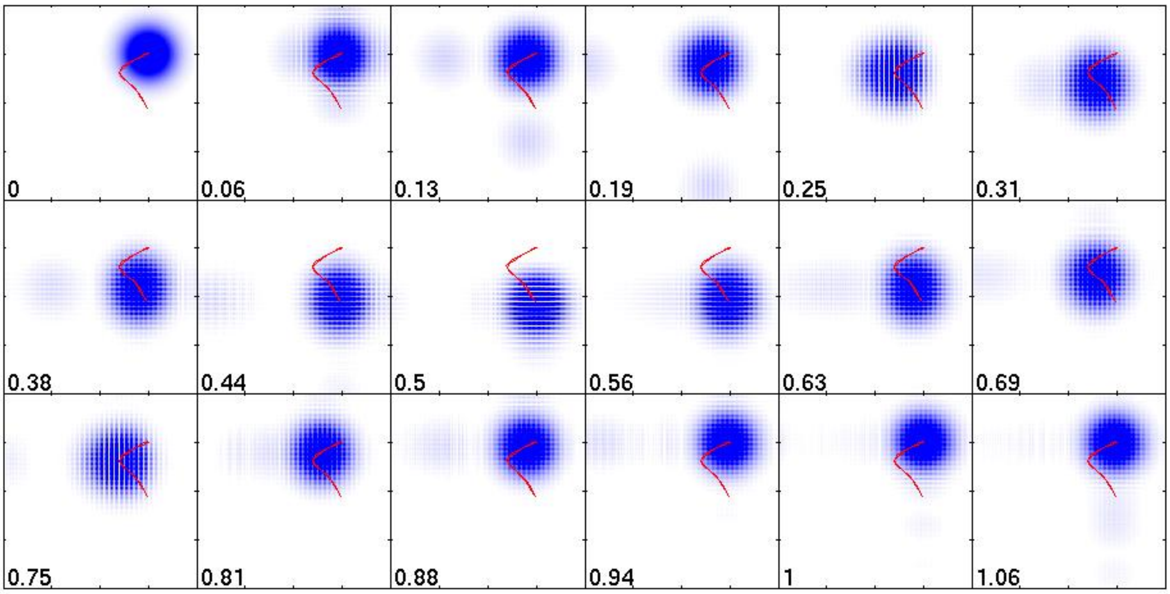

Abbildung 2.4: Wellenpaketdynamik für $F_x/F_y = 2/1$ (separables Potential $\epsilon = 0$). Dargestellt ist der Ausschnitt $x, y = -60\pi, \ldots, 20\pi$. Die Zeit ist in Einheiten der Blochzeit T_B angegeben. Zur Orientierung ist außerdem in rot die Trajektorie $(\langle x\rangle(t), \langle y\rangle(t))$ eingezeichnet.

wobei δ die Bandlücke zwischen dem Grundband und dem ersten angeregten Band bezeichnet. Die Formel (2.10) geht auf Zener zurück [2]. Eine detaillierte Herleitung und Diskussion findet sich in [72]. In diesem Fall ergibt sich eine Bandlücke von $\delta \approx 0.998$ und somit eine Tunnelwahrscheinlichkeit von $P \approx 0.01$, was gut mit den Ergebnissen der Simulation übereinstimmt.

An den Umkehrpunkten der Bewegung ist die Wellenfunktion hauptsächlich in den Minima des Potentials lokalisiert, was aus dem eindimensionalen Fall bekannt ist [49]. Da das System zwei unterschiedliche Blochzeiten in den beiden Koordinatenrichtungen aufweist, erkennt man diese Lokalisierung jeweils als Streifenmuster. Nach einer vollen Blochperiode T_B ist der Anteil des Wellenpaketes im Grundband wiederhergestellt.

Nicht-separables Potential $\epsilon = +1$: Obwohl das Potential nicht mehr separabel ist, findet man sehr ähnliche Lissajous-artige Bloch-Oszillationen wie im separablen Fall. In Abbildung 2.2 erkennt man, dass die Dispersionsrelation des Grundbandes in beiden Fällen fast identisch ist. Signifikante Unterschiede ergeben sich erst für die höheren Bänder. Dies macht die große Ähnlichkeit der Bloch-Oszillationen im separablen und nicht-separablen Fall verständlich. Nur der Zerfall kleiner Anteile durch Bloch-Zener-Tunneln in höhere Bänder zeigt charakteristische Unterschiede. Zur Zeit $t = T_B/4 = T_{Bx}/2$, am Umkehrpunkt der Bewegung in x-Richtung (vgl. Abbildung 2.3), beobachtet man die Emission eines Wellenpaketes wie im separablen Fall. Aufgrund der kleineren Bandlücke zwischen dem Grundband und dem ersten angeregten Band von $\delta \approx 0.788$ ist die Emission hier jedoch viel stärker. Das emittierte Wellenpaket zerfällt sofort in zwei Teile im ersten und zweiten angeregten Band. Die Bandlücke ist bei $\boldsymbol{\kappa} = (0.34, -0.34)$ nur $\delta \approx 0.395$ groß

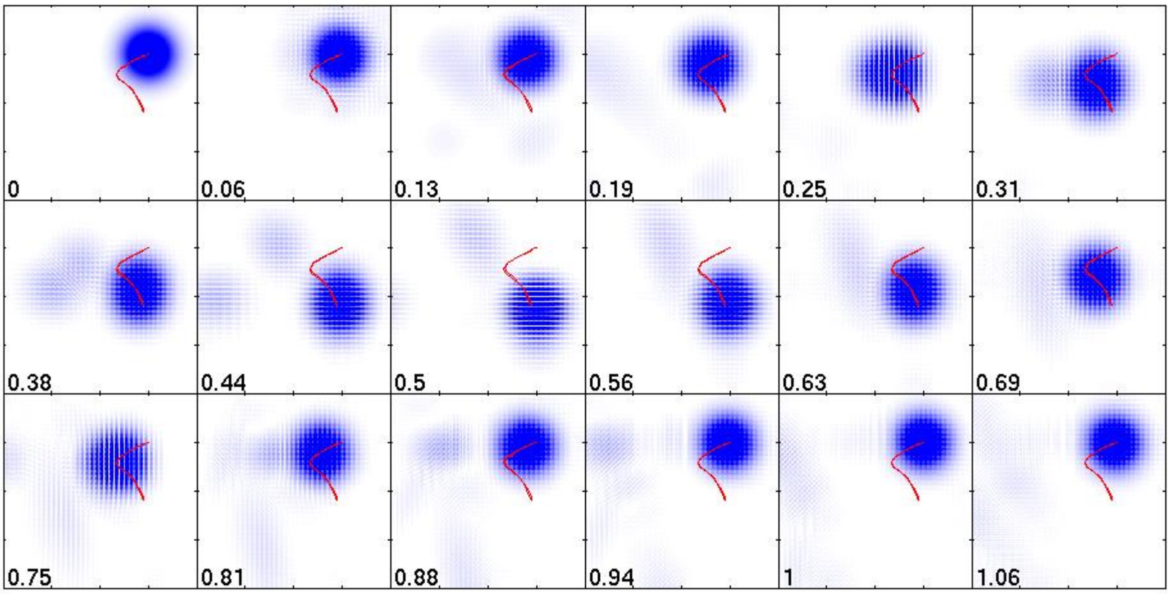

Abbildung 2.5: Wellenpaketdynamik für $F_x/F_y = 2/1$ (nicht-separables Potential $\epsilon = +1$). Man erkennt das im Text diskutierte Splitting des emittierten Wellenpaketes. Dargestellt ist der Ausschnitt $x, y = -60\pi, \ldots, 20\pi$. Die Zeit ist in Einheiten der Blochzeit T_B angegeben. Zur Orientierung ist außerdem in rot die Trajektorie $(\langle x\rangle(t), \langle y\rangle(t))$ eingezeichnet.

(siehe Abbildung 2.6, in welcher die Dispersionsrelation $E(\boldsymbol{\kappa}(t))$ dargestellt ist), was zu einer etwa gleich großen Intensität der beiden Teilwellenpakete führt. Ein ähnlicher Prozess passiert zur Zeit $t = 3T_B/4$. Allerdings zerfällt das emittierte Wellenpaket hier nicht, da die Bandlücke zwischen dem ersten und zweiten angeregten Band groß genug ist.

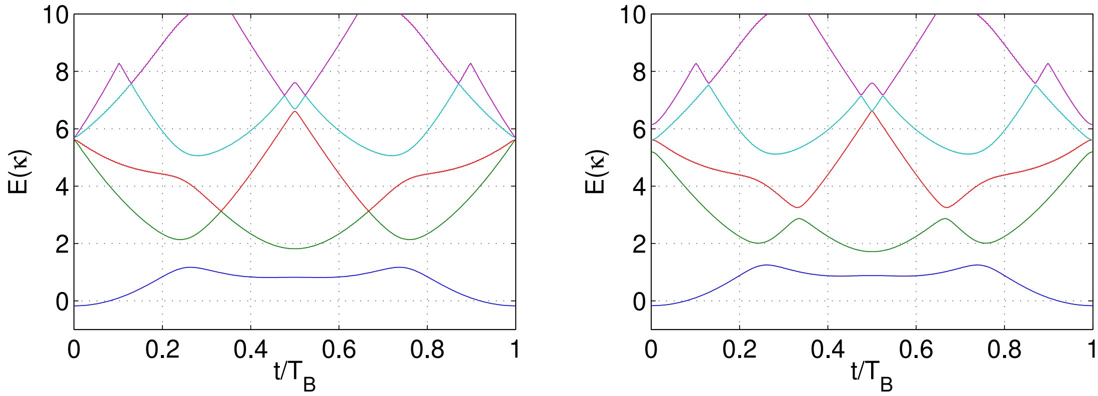

Abbildung 2.6: Dispersionsrelation $E(\boldsymbol{\kappa}(t))$ mit $F_x/F_y = 2/1$ für das separable ($\epsilon = 0$, links) und für das nicht-separable Potential ($\epsilon = +1$, rechts).

Verschiedene Feldrichtungen: Im separablen Fall $\epsilon = 0$ bildet die Trajektorie des Ortserwartungswertes eines Wellenpaketes eine Lissajous-Figur, da die Bewegung gerade die

Superposition zweier eindimensionaler Bloch-Oszillationen ist. Die Form dieser Lissajous-Figur wird bestimmt durch das Verhältnis der eindimensionalen Bloch-Frequenzen und damit durch die Feldrichtung und die Phasenverschiebung $\Delta\phi$ der beiden eindimensionalen Oszillationen. Diese Phasenverschiebung ist durch die Differenz der Komponenten des Anfangsimpulses gegeben:

$$\Delta\phi = 2\pi(p_{0,x} - p_{0,y})/\hbar\,. \tag{2.11}$$

Drei Beispiele solcher Lissajous-Figuren sind in der Abbildung 2.7 dargestellt. Die Bewegung des Ortserwartungswertes $(\langle x\rangle(t), \langle y\rangle(t))$ ist für die Feldrichtungen $q/r = 1/1$ (blau) und $q/r = 2/1$ (rot und magenta) aufgetragen. Ein Anfangsimpuls $(p_{0,x}, p_{0,y}) = (\hbar/4, 0)$ (magenta) und somit eine Phasenverschiebung von $\Delta\phi = \pi/2$ führen zu einer charakteristischen Acht-Form der Trajektorie. Da die Dynamik im Grundband für ein nicht-separables System sehr ähnlich ist, kann man auch in diesem Fall Lissajous-Oszillationen beobachten.

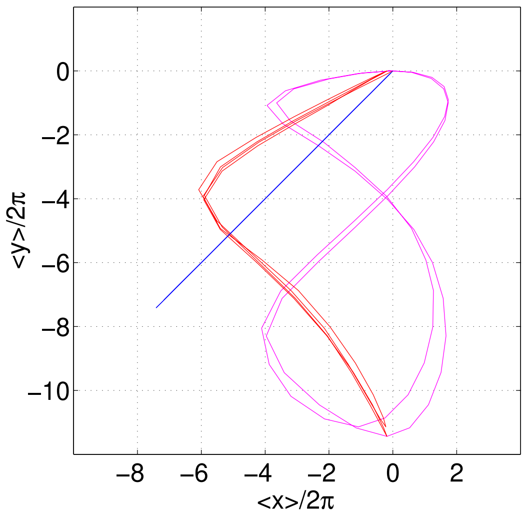

Abbildung 2.7: Trajektorien des Ortserwartungswertes $(\langle x\rangle(t), \langle y\rangle(t))$ für die Feldrichtungen $F_x/F_y = 1/1$ (blau) und $F_x/F_y = 2/1$ (rot und magenta). Im letzten Fall (magenta) hat das Wellenpaket einen Anfangsimpuls, der zu einer Phasenverschiebung von $\pi/2$ führt. Dargestellt ist die Bewegung über zwei Blochperioden.

2.2.2 Atmende Wellenpakete

Ein anfänglich stark lokalisiertes Wellenpaket ($\sigma \leq \pi$) mit einer breiten Impulsverteilung zeigt keine Bloch-Oszillationen sondern ein atmendes Verhalten (*Breathing*). Die Zeitabhängigkeit der Breite eines solchen Wellenpaketes kann man in einem *Tight-Binding*-Modell verstehen, was in [48, 49] für eindimensionale Systeme detailliert gezeigt ist. Im Rahmen einer Diskussion von Elektronen-Lokalisierung in Halbleiter-Übergittern wurde ein solches Atmen der Wellenfunktion auch in zwei Dimensionen mit Hilfe eines Ein-Band-Ansatzes gezeigt [69].

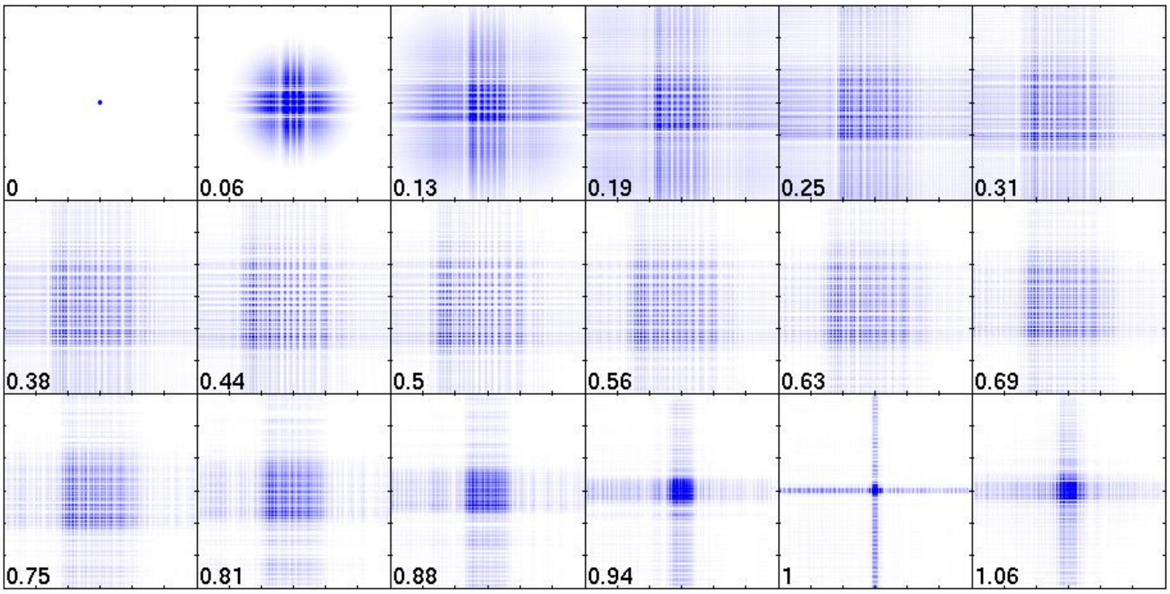

Abbildung 2.8: Ein atmendes Wellenpaket im separablen Potential $\epsilon = 0$. Dargestellt ist der Ausschnitt $x, y = -60\pi, \ldots, 60\pi$. Die Zeit ist in Einheiten der Blochzeit T_B angegeben.

Atmende Wellenpakete in zwei Dimensionen sind in Abbildung 2.8 für den separablen Fall $\epsilon = 0$ und in Abbildung 2.9 für den nicht-separablen Fall $\epsilon = +1$ illustriert. Das Stark-Feld hat die Stärke $F = 0.015$ und die Richtung $q = r = 1$.

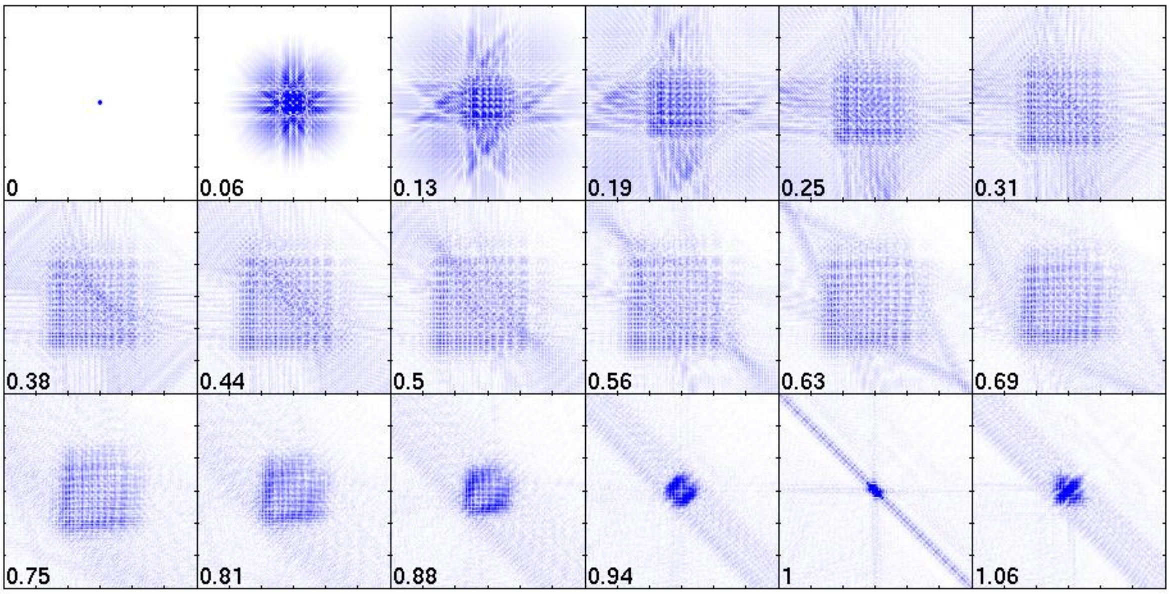

Abbildung 2.9: Ein atmendes Wellenpaket im nicht-separablen Potential $\epsilon = +1$. Dargestellt ist der Ausschnitt $x, y = -60\pi, \ldots, 60\pi$. Die Zeit ist in Einheiten der Blochzeit T_B angegeben.

Für ein separables Potential ist dieses Atmen (Abbildung 2.8) einfach die Superposition zweier eindimensionaler Bewegungen. Der nicht-separable Fall (Abbildung 2.9) zeigt ein ähnliches atmendes Verhalten, jedoch erkennt man signifikante Unterschiede bei den zerfallenden Anteilen des Wellenpaketes und der Form nach ganzzahligen Vielfachen der Blochperiode. Im separablen Fall beobachtet man Zerfall hauptsächlich entlang der Koordinatenachsen. Nach einer Blochperiode ist das Wellenpaket im Wesentlichen wiederhergestellt. Nur geringe Anteile sind entlang der Koordinatenrichtungen ausgeschmiert. Im nicht-separablen Fall findet man außerdem zerfallende Anteile in Feldrichtung und in der dazu orthogonalen Richtung. Weiterhin beobachtet man eine schwache Dispersion orthogonal zur Feldrichtung.

2.2.3 Dispersion

Ein Wellenpaket in einem eindimensionalen Wannier-Stark-System zeigt keinerlei systematische Dispersion. Auch wenn die Breite des Wellenpaketes $\Delta x_t = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle}$ stark oszillieren kann, bleibt sie doch immer beschränkt. Im Rahmen einer *Tight-Binding*-Näherung kann man dies sogar für beliebige zeitabhängige Felder zeigen [48, 49].

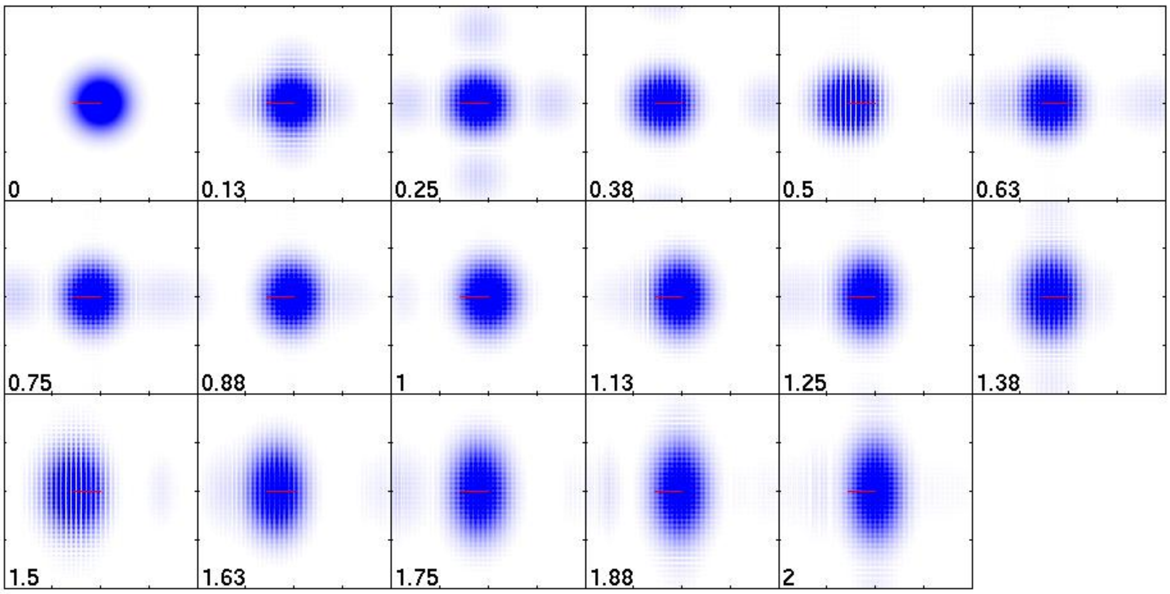

Abbildung 2.10: Bloch-Oszillationen und Dispersion eines Wellenpaketes für ein Stark-Feld entlang der x-Achse in einem separablen Potential $\epsilon = 0$. Dargestellt ist der Ausschnitt $x, y = -40\pi, \ldots, 40\pi$. Die Zeit ist in Einheiten der Blochzeit T_B angegeben. Zur Orientierung ist außerdem in rot die Trajektorie $(\langle x \rangle(t), \langle y \rangle(t))$ eingezeichnet.

Im Gegensatz dazu zeigt ein zweidimensionales Wannier-Stark-System auch in einer Ein-Band *Tight-Binding*-Näherung [68] Dispersion. Diese Dispersion ist jedoch, abhängig von der Feldrichtung, teilweise stark unterdrückt, was wir im Folgenden zeigen werden. Wenn das Stark-Feld $\mathbf{F}$ entlang der x-Achse ausgerichtet ist, beobachtet man Bloch-Oszillationen in dieser Richtung und eine starke Dispersion in der orthogonalen Richtung. Dies ist in

Abbildung 2.10 für den separablen Fall $\epsilon = 0$ und in Abbildung 2.11 für den nicht-separablen Fall $\epsilon = +1$ dargestellt.

Zur Analyse der Dispersion unterscheiden wir explizit zwischen dem separablen und nicht-separablen Fall.

Separables Potential $\epsilon = 0$: Für ein separables Potential $V(x,y) = V_x(x) + V_y(y)$ zerfällt der Hamiltonoperator (2.1) in $H = H_x + H_y$ mit

$$H_x = \frac{p_x^2}{2} + V_x(x) + F_x\, x \quad , \quad H_y = \frac{p_y^2}{2} + V_y(y) + F_y\, y \tag{2.12}$$

und das zweidimensionale Problem reduziert sich auf zwei eindimensionale. Da in einem eindimensionalen Wannier-Stark-System keine Dispersion existiert, tritt auch in einem separablen zweidimensionales System keine Dispersion auf, falls F_x und F_y beide ungleich null sind. Wenn das Feld entlang einer Koordinatenachse ausgerichtet ist, so ist das System in der dazu orthogonalen Richtung feldfrei und zeigt natürlich Dispersion (siehe Abbildung 2.10).

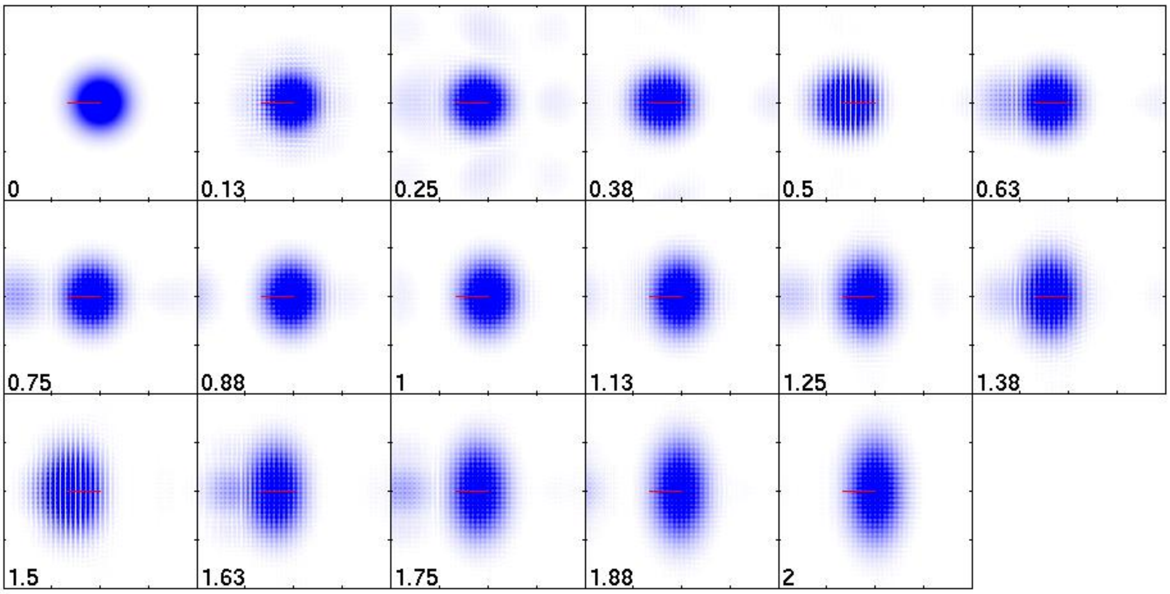

Abbildung 2.11: Bloch-Oszillationen und Dispersion eines Wellenpaketes für ein Stark-Feld entlang der x-Achse in einem nicht-separablen Potential $\epsilon = +1$. Dargestellt ist der Ausschnitt $x, y = -40\pi, \ldots, 40\pi$. Die Zeit ist in Einheiten der Blochzeit T_B angegeben. Zur Orientierung ist außerdem in rot die Trajektorie $(\langle x \rangle(t), \langle y \rangle(t))$ eingezeichnet.

Nicht-separables Potential $\epsilon \neq 0$: Zur Analyse der Dispersion in einem nicht-separablen System entwickeln wir die Wellenfunktion in die Eigenfunktionen des Hamiltonoperators (2.1), die Wannier-Stark-Zustände (vgl. Abschnitt 1.2),

$$H\, \Psi_{\alpha,\mathbf{m},\kappa_\perp} = \mathcal{E}_{\alpha,\mathbf{m}}(\kappa_\perp)\, \Psi_{\alpha,\mathbf{m},\kappa_\perp}\, . \tag{2.13}$$

Die Wannier-Stark-Zustände und die Quasienergien $\mathcal{E}_{\alpha,\mathbf{m}}(\kappa_\perp)$ hängen nur vom Anteil $\kappa_\perp$ des Quasiimpulses $\boldsymbol{\kappa}$ senkrecht zur Feldrichtung ab. Die Quasienergien bilden die Wannier-Stark-Leiter

$$\mathcal{E}_{\alpha,\mathbf{m}}(\kappa_\perp) = \mathcal{E}_{\alpha,0}(\kappa_\perp) + 2\pi\,\mathbf{F}\cdot\mathbf{m}\,, \tag{2.14}$$

wobei α die Wannier-Stark-Leiter und $\mathbf{m}$ den Gitterplatz indiziert (vgl. Abschnitt 1.2.1). Da wir hier nur den Fall geringer Feldstärken betrachten, können wir den Imaginärteil der komplexen Eigenenergien $\mathcal{E}$ im Folgenden vernachlässigen. Die Dynamik in starken Feldern wird zum Beispiel in [68] diskutiert. Die Quasienergie $\mathcal{E}(\kappa_\perp)$ darf nicht mit der Dispersionsrelation im feldfreien Fall (vgl. Abbildung 2.2) verwechselt werden.

Wannier-Stark-Zustände mit verschiedenen Platzindizes $\mathbf{m}$ und $\mathbf{n}$ gehen durch eine einfache Translation ineinander über:

$$T_{\mathbf{n}}\,\Psi_{\alpha,\mathbf{m},\kappa_\perp}(\mathbf{r}) = \Psi_{\alpha,\mathbf{m},\kappa_\perp}(\mathbf{r}-2\pi\mathbf{n}) = \Psi_{\alpha,\mathbf{m}+\mathbf{n},\kappa_\perp}(\mathbf{r})\,. \tag{2.15}$$

In der Basis der Wannier-Stark-Zustände ist die Wellenfunktion

$$|\psi(t)\rangle = \int \mathrm{d}\kappa_\perp \sum_{\mathbf{m},\alpha} c_{\alpha,\mathbf{m}}(\kappa_\perp)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}_{\alpha,\mathbf{m}}(\kappa_\perp)t/\hbar}\,|\Psi_{\alpha,\mathbf{m},\kappa_\perp}\rangle\,. \tag{2.16}$$

Zur Vereinfachung der Notation nehmen wir an, dass nur die Grundleiter $\alpha = 0$ signifikant zu der Summe beiträgt, so dass wir den Index α im Folgenden weglassen können.

Setzt man die Gleichung (2.14) hier ein und benutzt weiterhin $\Psi_{\mathbf{m},\kappa_\perp}(\mathbf{k}) = \mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}\mathbf{m}\cdot\mathbf{k}}\,\Psi_{0,\kappa_\perp}(\mathbf{k})$ (siehe Gleichung (2.15)), so erhält man

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{k},t) &= \int \mathrm{d}\kappa_\perp \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}_0(\kappa_\perp)t/\hbar} \sum_{\mathbf{m}} c_{\mathbf{m}}(\kappa_\perp)\,\mathrm{e}^{-2\pi\mathrm{i}\mathbf{m}(\mathbf{k}+\mathbf{F}t/\hbar)}\Psi_{0,\kappa_\perp}(\mathbf{k})\\ &= \int \mathrm{d}\kappa_\perp \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}_0(\kappa_\perp)t/\hbar} \widetilde{C}_{\kappa_\perp}(\mathbf{k}+\mathbf{F}t/\hbar)\,\Psi_{0,\kappa_\perp}(\mathbf{k})\end{aligned} \tag{2.17}$$

für die Impulsdarstellung der Wellenfunktion. Eine ähnliche Gleichung ergibt sich im eindimensionalen Fall [49]. Nach ganzzahligen Vielfachen der Blochzeit, $t = \nu\,T_B$ mit $T_B = \sqrt{r^2+q^2}\,\hbar/F$ und $\nu = 1,2,3,...$, findet man

$$\widetilde{C}_{\kappa_\perp}(\mathbf{k}+\mathbf{F}\nu T_B/\hbar) = \widetilde{C}_{\kappa_\perp}(\mathbf{k})\,. \tag{2.18}$$

Wenn die Quasienergie $\mathcal{E}_0(\kappa_\perp)$ nicht von $\kappa_\perp$ abhängt, $\mathcal{E}_0(\kappa_\perp) = \mathcal{E}_0 = \text{const.}$, so wird die Wellenfunktion nach ganzzahligen Vielfachen der Blochzeit bis auf einen globalen Phasenfaktor $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathcal{E}_0\,\nu T_B/\hbar}$ wiederhergestellt und es tritt keine Dispersion auf. Dies ist zum Beispiel der Fall in einem separablen Potential mit $q, r \neq 0$. Die Stärke der Dispersion kann daher durch die Bandbreite der Quasidispersionsrelation $\mathcal{E}(\kappa_\perp)$ abgeschätzt werden. Für schwache Felder kann man den Realteil der Quasienergie näherungsweise mithilfe eines Houston-Ansatzes [73] berechnen:

$$\mathcal{E}(\kappa_\perp) = \frac{1}{T_B}\int_0^{T_B} E(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{F}t/\hbar)\,\mathrm{d}t\,, \tag{2.19}$$

wobei $E(\boldsymbol{\kappa})$ die (periodische) Dispersionsrelation im feldfreien Fall ist. Setzt man die Fourierentwicklung dieser Dispersionsrelation

$$E(\boldsymbol{\kappa}) = \sum_{\mathbf{m}} \widetilde{E}_{\mathbf{m}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\mathbf{m}\cdot\boldsymbol{\kappa}}\,, \tag{2.20}$$

in Gleichung (2.19) ein, so erhält man nach einer kurzen Rechnung

$$\mathcal{E}(\kappa_\perp) = \sum_n \widetilde{E}_{rn,-qn}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi n(r\kappa_x - q\kappa_y)} = \sum_n \widetilde{E}_{rn,-qn}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi n\kappa_\perp\sqrt{q^2+r^2}}\,. \tag{2.21}$$

Im zweiten Schritt haben wir $\kappa_\perp = \mathbf{e}_\perp \cdot \boldsymbol{\kappa}$ verwendet, wobei $\mathbf{e}_\perp = (r^2+q^2)^{-1/2}\,(r,-q)$ der Einheitsvektor orthogonal zur Feldrichtung ist. Da die Fourierkoeffizienten $\widetilde{E}_{rn,-qn}$ mit $|n|$ schnell abnehmen (siehe Abbildung 2.12), kann man in guter Näherung die Fourierreihe nach der ersten Ordnung abbrechen und erhält

$$\mathcal{E}(\kappa_\perp) \;\approx\; \widetilde{E}_{0,0} + 2\widetilde{E}_{r,-q}\cos\left(2\pi\kappa_\perp\sqrt{q^2+r^2}\right). \tag{2.22}$$

Daher ist die Bandbreite der Quasidispersionsrelation näherungsweise gegeben durch

$$\Delta\mathcal{E} \approx 4\widetilde{E}_{r,-q}\,. \tag{2.23}$$

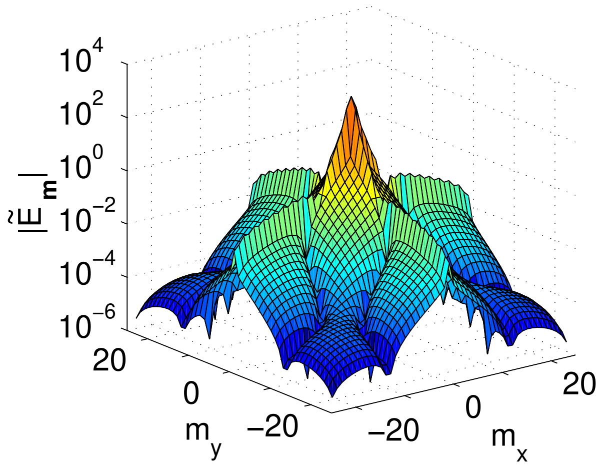

Abbildung 2.12: Fourierkoeffizienten $|\widetilde{E}_{\mathbf{m}}|$ der Dispersionsrelation des Grundbandes im feldfreien Fall.

Außerdem können wir eine Abschätzung für die Abhängigkeit der Bandbreite $\Delta\mathcal{E}$ der Quasidispersionsrelation von der Feldrichtung herleiten. Wir entwickeln die Eigenfunktionen des feldfreien Systems, die Blochfunktionen $\phi_{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{r})$, in eine Fourierreihe in $\boldsymbol{\kappa}$

$$\phi_{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{n}} w_{\mathbf{n}}(\mathbf{r})\,, \tag{2.24}$$

wobei die Fourierkomponenten die Wannier-Funktionen $w_{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$ sind. Es gilt $\langle w_{\mathbf{0}}|\phi_{\boldsymbol{\kappa}}\rangle = 1$. Damit berechnen wir die Fourierkomponenten der Quasidispersionsrelation:

$$\begin{aligned}\widetilde{E}_{\mathbf{m}} &= \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{m}} E(\boldsymbol{\kappa})\,\mathrm{d}\boldsymbol{\kappa} = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{m}}\langle w_{\mathbf{0}}|H|\phi_{\boldsymbol{\kappa}}\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{\kappa}\\ &= \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{m}}\sum_{\mathbf{n}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{n}}\langle w_{\mathbf{0}}|H|w_{\mathbf{n}}\rangle\,\mathrm{d}\boldsymbol{\kappa} = \langle w_{\mathbf{0}}|H|w_{\mathbf{m}}\rangle. \end{aligned} \tag{2.25}$$

Im separablen Fall faktorisieren die Wannier-Funktionen und man kann ihre exponentielle Lokalisierung [41] ausnutzen, um die Koeffizienten $\widetilde{E}_{r,-q}$ abzuschätzen:

$$\widetilde{E}_{r,-q} = \langle w_0|H_x|w_r\rangle\langle w_0|w_{-q}\rangle + \langle w_0|w_r\rangle\langle w_0|H_y|w_{-q}\rangle \sim \mathrm{e}^{-a(|q|+|r|)}\,. \tag{2.26}$$

Dabei bezeichnet a eine Konstante, die wir später als Fitparameter verwenden werden. Man beachte, dass diese Abhängigkeit eine andere ist, als in [69] hergeleitet wird. Da die feldfreie Dispersionsrelation im separablen und nicht-separablen Fall sehr ähnlich ist, gilt die Abschätzung (2.26) auch für ein nicht-separables Potential. Wir erwarten also, dass die Bandbreite der Quasidispersionsrelation als Funktion der Feldrichtung $F_x/F_y = q/r$ exponentiell abfällt:

$$\Delta\mathcal{E} \approx 4\widetilde{E}_{r,-q} \sim \mathrm{e}^{-a(|q|+|r|)}\,. \tag{2.27}$$

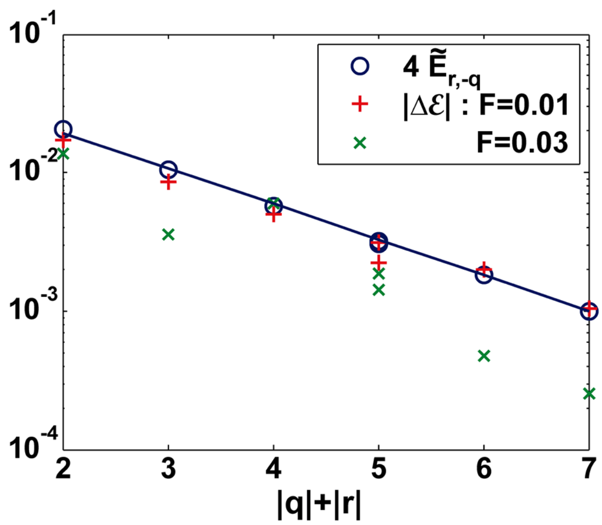

Abbildung 2.13: Bandbreite der numerisch exakten Quasidispersionsrelation für verschiedene Feldstärken $|\mathbf{F}| = 0.01\,(+)$ und $|\mathbf{F}| = 0.03\,(\times)$ und Feldrichtungen $F_x/F_y = 1/1,\ 2/1,\ 3/1,\ 3/2,\ 4/1,\ 5/1$ und $6/1$. Außerdem sind die Fourierkoeffizienten der feldfreien Dispersionsrelation $(\circ)$ mit einem exponentiellen Fit aufgetragen.

In Abbildung 2.13 ist die Bandbreite der numerisch berechneten Quasidispersionsrelation (zur Berechnung siehe Anhang B.4) für zwei Feldstärken, $|\mathbf{F}| = 0.01\,(+)$ und $|\mathbf{F}| = 0.03\,(\times)$, und verschiedene Feldrichtungen $F_x/F_y = 1/1,\ 2/1,\ 3/1,\ 3/2,\ 4/1,\ 5/1$ und $6/1$

im Vergleich mit der Näherung (2.23) dargestellt. Zunächst erkennt man, dass die Fourierkomponenten $\widetilde{E}_{r,-q}$ tatsächlich exponentiell mit $|q|+|r|$ abfallen, wie es die Abschätzung (2.26) vorhersagt. Für das hier diskutierte Potential findet man als Fitparameter $a \approx 0.59$. Weiterhin folgt die numerisch berechnete Bandbreite $\Delta\mathcal{E}$ näherungsweise der einfachen Formel (2.27) für schwache Felder. Für $|\mathbf{F}| = 0.03$ sieht man bereits deutliche Abweichungen.

Für Feldrichtungen mit großen Werten von $|q|+|r|$ ist die Bandbreite $\Delta\mathcal{E}$ der Quasidispersionsrelation sehr klein und die Dispersion ist schwach. Jedoch findet man bereits für relativ kleine Werte von $|q|+|r|$, dass die Bandreite $\Delta\mathcal{E}$ sehr viel kleiner ist als im feldfreien Fall. Damit ist auch die Dispersion stark unterdrückt. Man betrachte zum Beispiel die in Abschnitt 2.2.1 diskutierten Bloch-Oszillationen für $q = 2$ und $r = 1$. Die Bandbreite $\Delta\mathcal{E}$ ist für diese Feldrichtung bereits ca. zwei Größenordnungen kleiner als die Breite des Grundbandes im feldfreien Fall und die Dispersion ist schwach. In der Tat kann man in den Abbildungen 2.4 und 2.5 kaum eine Dispersion erkennen. Für irrationale Feldrichtungen, die durch rationale im Grenzfall großer q und r angenähert werden können, sollte es keinerlei systematische Dispersion mehr geben. Ähnliche Resultate ergaben sich in einer *Tight-Binding*-Näherung [68].

2.3 Kohärente Bloch-Zener-Oszillationen

In einer kürzlich erschienen Arbeit [68] wurden im Rahmen einer *Tight-Binding*-Näherung Bloch-Zener-Oszillationen in einem Potential der Form

$$V(x,y) = -(1+\epsilon)\left(\cos^2 x + \cos^2 y\right) + \epsilon\,(\cos x + \cos y)^2 \tag{2.28}$$

mit $\epsilon \ll 1$ gezeigt und analysiert. Ein solches Potential kann als Superposition der beiden Potentiale aus Gleichung (2.2) erzeugt werden.

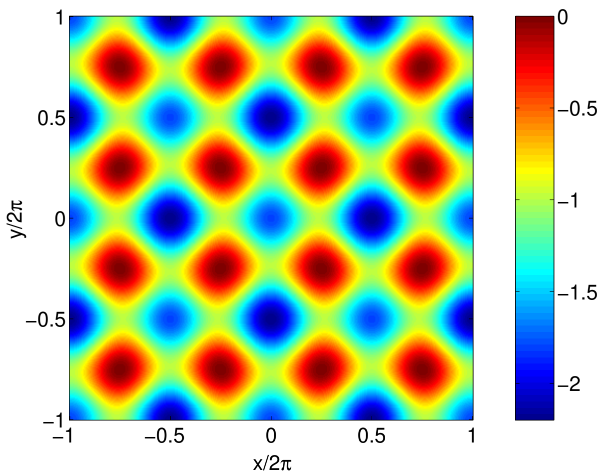

Abbildung 2.14: Das doppelt periodische Potential (2.28) für $\epsilon = 0.1$ zeigt Maxima und Minima alternierender Höhe.

In Abbildung 2.14 ist illustriert, dass ein solches Potential (hier für $\epsilon = 0.1$) Maxima und Minima alternierender Höhe zeigt. Die Periode ist daher im Vergleich zum separablen Fall $\epsilon = 0$ verdoppelt. Diese Verdopplung bewirkt, dass die Energiebänder der feldfreien Dispersionsrelation in Subbänder aufspalten, was man wie folgt verstehen kann: Im separablen Fall $\epsilon = 0$ hat das Potential (2.28) die Periodenlänge π in beiden Koordinatenrichtungen. Die Länge der Brillouinzone ist $2\pi/\pi = 2$. Betrachtet man das Potential als periodisch mit der Periode 2π, so ist die Länge der Brillouinzone nur noch gleich 1. Die Blochbänder müssen in die reduzierte Brillouinzone hineingefaltet werden, so dass jedes Energieband der größeren Brillouinzone vier Subbändern in der reduzierten Brillouinzone entspricht. Ein kleines nicht verschwindendes ϵ führt dann dazu, dass die vier sonst verbundenen Subbänder aufspalten, wie man in Abbildung 2.15 erkennen kann. Die entstehende Bandlücke wird *Rowland ghost gap* genannt (siehe z.B. [74, 75] und die darin angegebenen Referenzen).

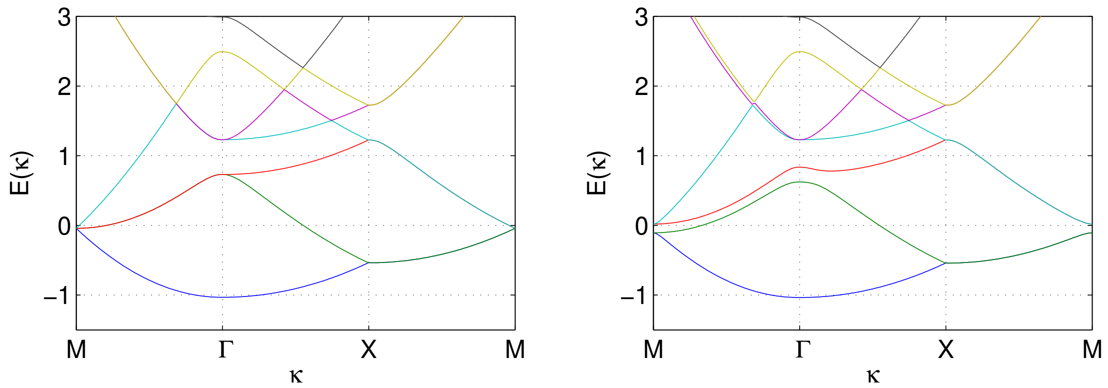

Abbildung 2.15: Dispersionsrelation $E(\kappa)$ für das doppelt periodische Potential (2.28) mit $\epsilon = 0$ (links) bzw, $\epsilon = 0.1$ (rechts).

Wie bereits diskutiert, tunnelt ein Teil des Wellenpaketes in das erste angeregte Band, wenn es den Rand der Brillouinzone erreicht. Dabei ist die Tunnelwahrscheinlichkeit durch Gleichung (2.10) gegeben ist. Für das Potential (2.28) ist die Tunnelwahrscheinlichkeit sehr viel größer als im Fall der Lissajous-Oszillationen (vgl. Abschnitt 2.2.1), da die Bandlücke δ viel kleiner ist. Die Größe der Bandlücke hängt sehr stark von der Größe des Parameters ϵ ab, was eine experimentelle Kontrolle der Tunnelwahrscheinlichkeit ermöglicht. Aus diesen Gründen ist das Potential (2.28) ein ideales Modellsystem für das Studium des Zener-Tunnelns.

In den Abbildungen 2.16 und 2.17 sind Bloch-Zener-Oszillationen für $\epsilon = 0.02$ und $\epsilon = 0.1$ dargestellt. Das Stark-Feld ist in beiden Fällen diagonal zu den Koordinatenrichtungen ($q = r = 1$), die Feldstärke beträgt $|\mathbf{F}| = 0.005$. Nach einer halben Blochzeit splittet das Wellenpaket in Folge des Zener-Tunnelns in zwei Teile auf. Die Intensität der beiden Teile hängt stark von ϵ ab, wie man es nach der Landau-Zener-Theorie erwartet. Nach dem Aufsplitten bewegen sich die beiden Teilwellenpakete in entgegengesetzte Richtungen weiter, weil die Subbänder der feldfreien Dispersionsrelation $E(\kappa_x, \kappa_y)$ eine unterschiedliche Krümmung aufweisen.

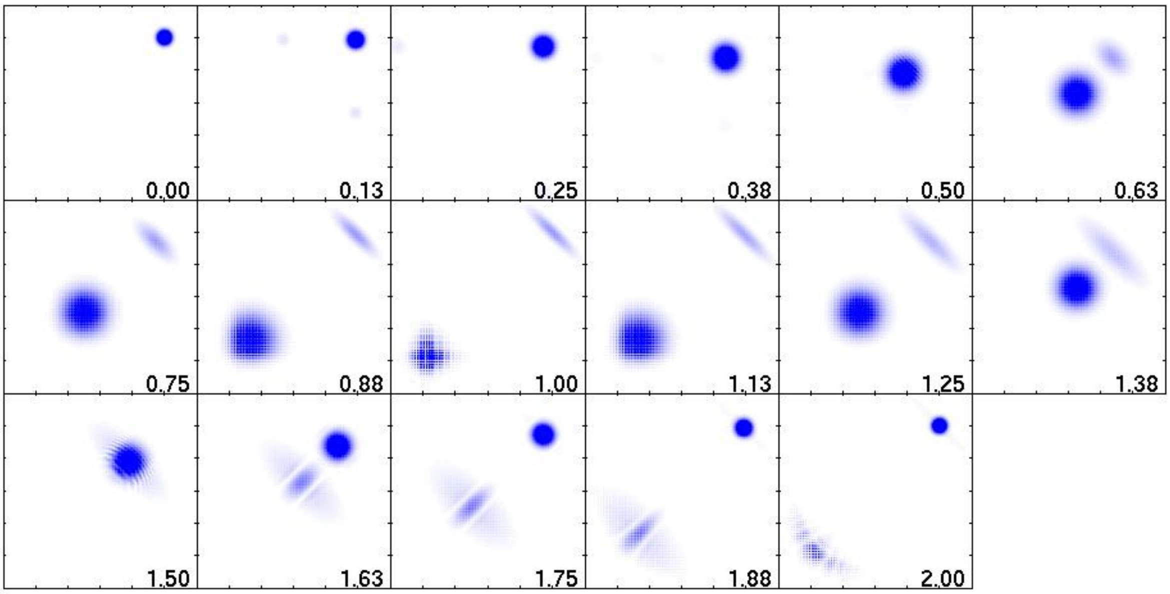

Abbildung 2.16: Kohärente Bloch-Zener-Oszillation für das doppelt periodische Potential (2.28) für $F = 0.005$, $\hbar = 2$ und $\epsilon = 0.02$. Dargestellt ist der Ausschnitt $x, y = -120\pi, \ldots, 120\pi$. Die Zeit ist in Einheiten der Blochzeit T_B angegeben.

Nach einer Blochperiode kehrt eines der Teilwellenpakete zum Startpunkt zurück und zeigt eine starke Dispersion orthogonal zur Feldrichtung, während das zweite Wellenpaket hauptsächlich in den Potentialminima am Umkehrpunkt der Oszillation lokalisiert ist. Man beobachtet weiterhin, dass die Dispersion signifikant stärker ist als im Fall der

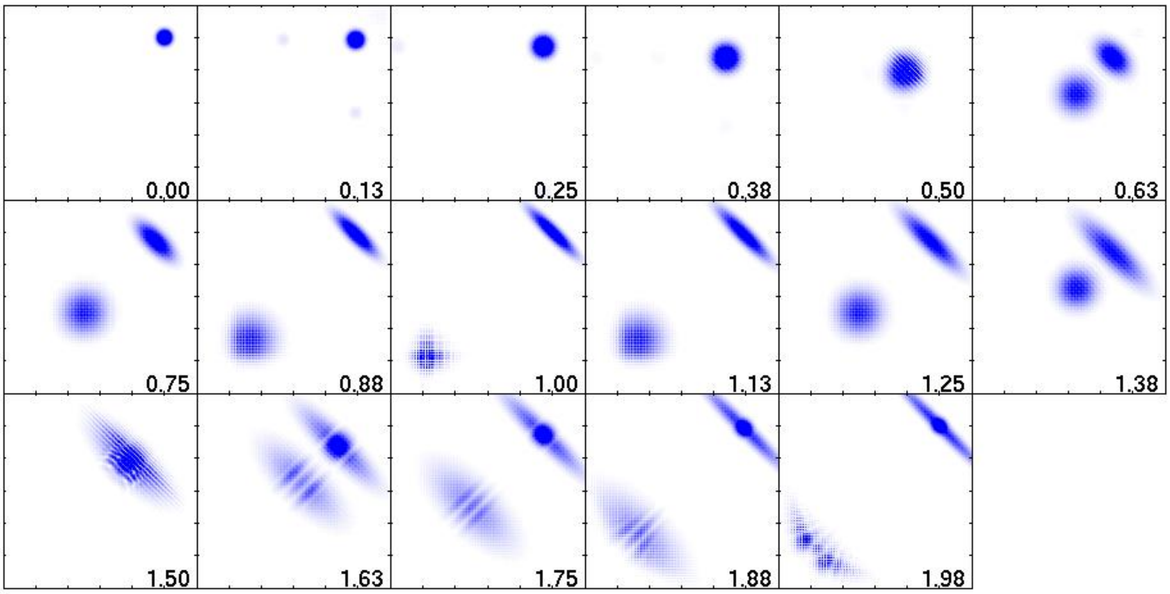

Abbildung 2.17: Wie Abbildung 2.16, allerdings für $\epsilon = 0.1$.

Lissajous-Oszillationen (siehe Abschnitt 2.2.1). Die Dispersion hängt ebenfalls von ϵ ab, da im separablen Fall $\epsilon = 0$ klarerweise keine Dispersion auftritt. Bei diesen Betrachtungen muss man allerdings die Zeitskalen im Auge behalten: Aufgrund der kleineren Feldstärke ist die Blochzeit hier sechs mal so groß wie in Abschnitt 2.2.1.

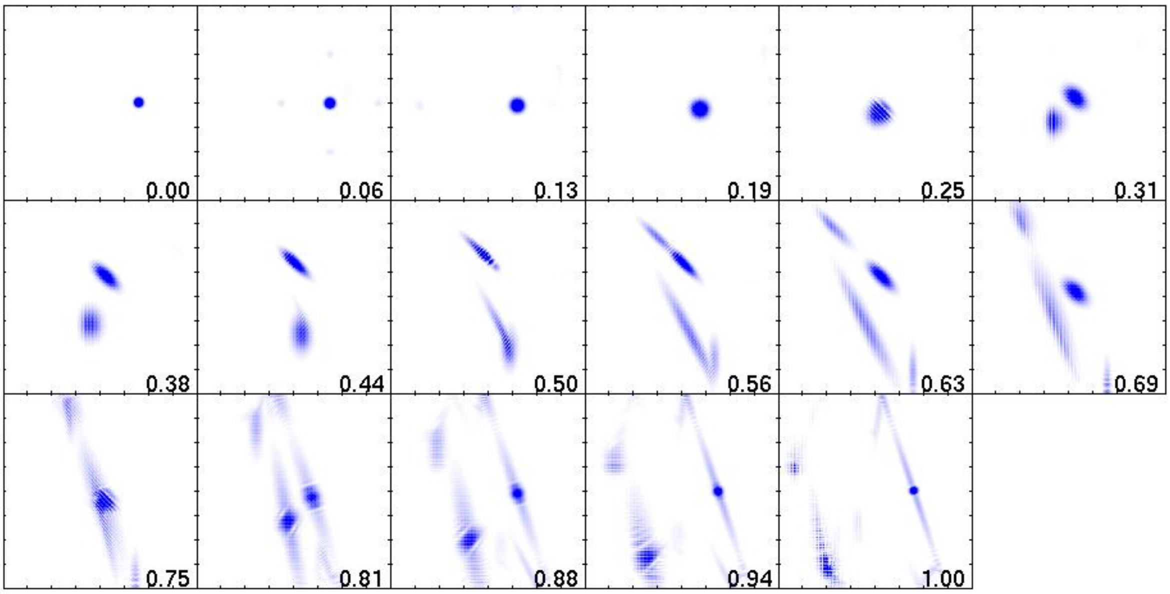

Abbildung 2.18: Wie Abbildung 2.17, allerdings für die Feldrichtung $q = 3$ und $r = 1$. Dargestellt ist der Ausschnitt $x, y = -160\pi, \ldots, 160\pi$. Die Zeit ist in Einheiten der Blochzeit T_B angegeben.

In Abbildung 2.18 sind Bloch-Zener-Oszillationen für $\epsilon = 0.1$ und eine andere Feldrichtung, $q = 3$ und $r = 1$, dargestellt. Für diese Feldrichtung findet das erste Aufsplitten des Wellenpaketes bereits zur Zeit $t = 0.25\, T_B$ statt und die entstehenden Teilwellenpakete spalten wiederum auf. Während der vollen Blochperiode beobachtet man drei Aufspaltungen, weil der Quasiimpuls dreimal den Rand der Brillouinzone kreuzt. Die Bewegung der Mittelpunkte der Teilwellenpakete kann semiklassisch in einem Ein-Band-Modell beschrieben werden [68]. Einige Eigenschaften der Dynamik gehen in dieser Näherung jedoch verloren, wie die starke Dispersion und die Interferenzmuster der einzelnen Teilwellenpakete. Nach einer Blochperiode kehrt ein Wellenpaket zum Ausgangspunkt zurück, während die anderen an verschiedenen Orten in den Minima des Potentials lokalisiert sind. Diese Lokalisierung verschwindet ebenfalls in der Ein-Band-Näherung.

2.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel haben wir die lineare Dynamik in verschiedenen zweidimensionalen Wannier-Stark-Systemen untersucht. Nahezu dispersionsfreie Bloch-Oszillationen, Oszillationen in der Breite (Atmen) und kohärente Bloch-Zener-Oszillationen in zwei Bändern wurden gezeigt und diskutiert. Es ergab sich, dass die Dynamik und insbesondere die

Dispersion empfindlich von der Richtung des Stark-Feldes relativ zu den Gitterachsen abhängt. Die Unterdrückung der Dispersion wurde im Detail analysiert und es wurde gezeigt, dass die Stärke der Dispersion exponentiell mit $|r| + |q|$ abnimmt. Für typische irrationale Feldrichtungen ist eine dispersionsfreie Bewegung zu erwarten.

Es bleibt zu sagen, dass in allen bisherigen Arbeiten zur Dynamik in zweidimensionalen Wannier-Stark-Systemen das Stark-Feld zeitlich konstant ist, wohingegen angetriebene Systeme in einer Dimension bereits detailliert untersucht wurden. Zeitabhängige zweidimensionale Systeme sind besonders interessant, wenn sie resonant periodisch angetrieben werden, d.h. wenn alle Frequenzverhältnisse rational sind. In diesem Fall sind die Wannier-Stark-Zustände über das gesamte Gitter delokalisiert. Es ist eine offene Frage, ob in diesen Systemen eine dynamische Lokalisierung wie im eindimensionalen Fall auftritt [46, 47, 76].

Kapitel 3

Bloch-Oszillationen unter dem Einfluss einer Nichtlinearität

In diesem Kapitel wird die Nichtlinearität nicht mehr vernachlässigt, im Gegenteil betrachten wir sogar große Werte von g, um den prinzipiellen Einfluss der Nichtlinearität auf die Dynamik zu untersuchen. Dabei beschränken wir uns auf den eindimensionalen Fall:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cos(x) + Fx + g|\psi(x,t)|^2\right)\psi(x,t). \tag{3.1}$$

Wir setzen in Anlehnung an das Experiment der Kasevich-Gruppe [5] das skalierte Plancksche Wirkungsquantum als $\hbar = 3.3806$ an (zu den skalierten Einheiten siehe Anhang A). Die Nichtlinearität g ist dann von der Größenordnung $g \lesssim 1$. Da wir hier den Einfluss der Nichtlinearität untersuchen wollen, setzen wir auch höhere Werte an, bis zu $|g| = 15$.

Wir interessieren uns insbesondere für die Dynamik von Bloch-Oszillationen und betrachten daher zunächst eine kleine Feldstärke $F = 0.005$ und nehmen weiterhin einen Anfangszustand im niedrigsten Blochband an. In diesem Fall ist Zerfall vernachlässigbar und man findet im linearen Fall ($g = 0$) Bloch-Oszillationen mit einer großen Amplitude. Die Dispersionsrelation im linearen feldfreien Fall (siehe Abbildung 1.1) weist eine Bandlücke von $\delta = 0.998$ zwischen dem Grundband und dem ersten angeregten Band auf. Die Zener-Tunnelwahrscheinlichkeit (2.10) beträgt im linearen Fall $P \approx 10^{-12}$ und ist somit vernachlässigbar.

In Abschnitt 4.3 diskutieren wir dann auch den Fall höherer Feldstärken, wie sie zum Beispiel im Kasevich-Experiment [5] realisiert sind. Ein weiteres interessantes Experiment, das die nichtlineare Dynamik von Bose-Einstein-Kondensaten untersucht, wurde vor kurzem in der Arbeitsgruppe von Arimondo in Pisa durchgeführt [31]. Wir gehen in Abschnitt 3.3 auf dieses Experiment ein.

Eine ähnliche numerische Studie findet sich in dem Artikel von Holthaus [72]. Dort wird zunächst die Dynamik im Rahmen der linearen Schrödingergleichung diskutiert, insbesondere die Abhängigkeit von der Feldstärke und das Zener-Tunneln. Schließlich werden diese Ergebnisse mit Simulationen der Dynamik im Rahmen der nichtlinearen Schrödingergleichung verglichen. In diesem Artikel wird auch deutlich, dass der Einfluss einer Nichtlinearität nicht in einfacher Weise vorhersagbar ist und stark von anderen Systemparametern wie der Feldstärke F abhängt. Man beachte, dass in diesem Artikel andere skalierte Einheiten und eine andere Normierung verwendet werden. Wir diskutieren im Folgenden sowohl den prinzipiellen Einfluss einer Nichtlinearität auf die Dynamik als auch die Abhängigkeit von der Stärke der Nichtlinearität g und der Feldstärke F.

In den folgenden Beispielen ist der Anfangszustand jeweils ein gaussförmiges Wellenpaket

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}\sigma^{1/2}} \mathrm{e}^{-(x-x_0)^2/(2\sigma)^2} \tag{3.2}$$

der Breite $\sigma = 40\pi$, das wie in Anhang B.3 erläutert auf das niedrigste Bloch-Band projiziert wurde. Dieses Wellenpaket wird wie in Anhang B.1 beschrieben mit dem Split-Operator-Verfahren propagiert. Der Anfangszustand ist auf eins normiert, die Norm ist unter der Zeitevolution (3.1) erhalten.

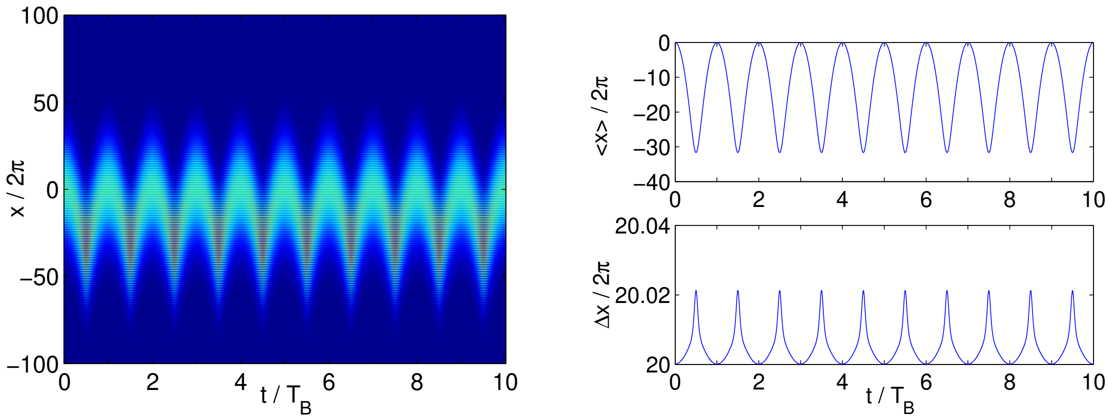

Abbildung 3.1: Links: Falschfarbendarstellung der Wellenfunktion $|\psi(x,t)|^2$ im Wannier-Stark-System, d.h. der Lösung von Gleichung (3.1) für $g = 0$. Rot codiert eine hohe Intensität, blau eine geringe. Rechts: Erwartungswerte des Ortes $\langle x\rangle(t)$ und der Breite $\Delta x(t)$ der Wellenfunktion. Die Parameter sind dem Text zu entnehmen.

Zum Vergleich ist in Abbildung 3.1 die Wellenfunktion $|\psi(x,t)|^2$ und der zeitliche Verlauf des Ortserwartungswertes $\langle x\rangle(t)$ und der Breite $\Delta x(t)$ der Wellenfunktion für $g = 0$ dargestellt Aufgrund der sehr kleinen Feldstärke erkennt man Bloch-Oszillationen mit einer großen Amplitude, Zerfall ist vollkommen vernachlässigbar.

3.1 Einfluss einer Nichtlinearität

Zunächst diskutieren wir den prinzipiellen Einfluss der Nichtlinearität auf das dynamische Verhalten. Dazu fixieren wir zunächst die Stärke der Nichtlinearität auf $g = \pm 5$.

In Abbildung 3.2 ist ein Falschfarbenbild von $|\psi(x,t)|^2$ für $g = \pm 5$ dargestellt. Die Bloch-Oszillationen bleiben zumindest für kurze Zeiten erhalten. Auch für längere Zeiten, hier

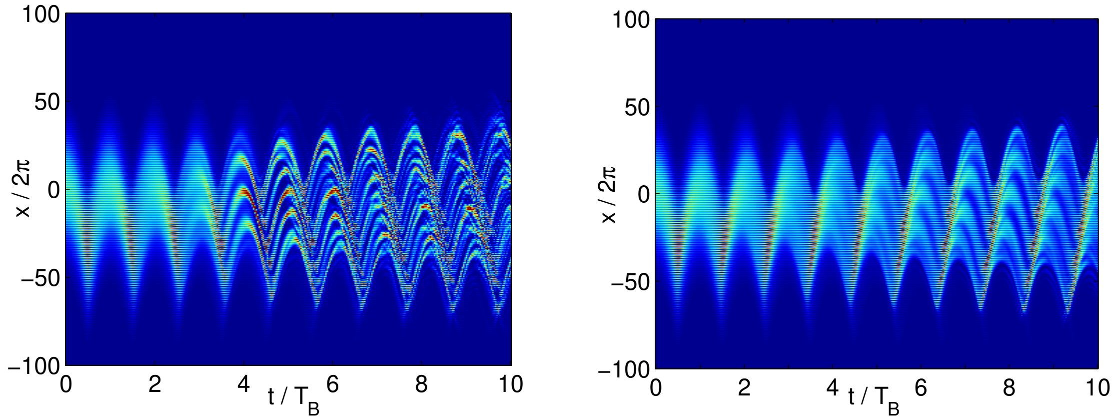

Abbildung 3.2: Falschfarbendarstellung der Lösung $|\psi(x,t)|^2$ der nichtlinearen Schrödingergleichung im Wannier-Stark-System (3.1) für $g = -5$ (links) und $g = +5$ (rechts). Rot codiert eine hohe Intensität, blau eine geringe. Die Parameter sind dem Text zu entnehmen.

$t = 10\,T_B$, erkennt man weiterhin ein oszillatorisches Verhalten, jedoch scheint das Wellenpaket zu dispergieren.

Zusätzlich zur wohl bekannten Lokalisierung von $|\psi(x)|^2$ in den Minima des periodischen Potentials $V(x) = \cos(x)$ beobachtet man eine weitere „Filamentierung". Insbesondere für $g = -5$, also für eine attraktive Wechselwirkung, erkennt man, dass die Wellenfunktion in einigen Streifen lokalisiert. Dieses Verhalten beobachtet man auch für eine repulsive Wechselwirkung, jedoch ist es dann nicht so ausgeprägt. Insgesamt kann man daraus aber nicht schließen, dass eine attraktive Nichtlinearität einen stärkeren Einfluss auf die Dynamik hat (vgl. Abschnitt 3.2).

In Abbildung 3.2 kann man bereits erkennen, dass das Wellenpaket unter dem Einfluss einer Nichtlinearität weiterhin oszilliert. Allerdings nimmt die Amplitude der Oszillation mit der Zeit ab. Diese Dämpfung wird besonders klar in der Darstellung der zeitlichen Entwicklung des Ortserwartungswertes in Abbildung 3.3. Die Abnahme der Amplitude folgt jedoch nicht einem einfachen Exponentialgesetz. Man erkennt weiterhin, dass die Dämpfung für $g = -5$ stärker ist als für $g = +5$.

Diese zeitliche Entwicklung des Ortserwartungswertes kann im Rahmen einer Basissatzentwicklung erklärt werden, wie es in Kapitel 4 ausführlich dargestellt ist. Man findet für den Ortserwartungswert näherungsweise

$$\langle x \rangle(t) \approx \bar{x} + \frac{\Delta E}{2F}\, \mathrm{e}^{-(\gamma g t)^2} \cos(\omega_B t), \tag{3.3}$$

wobei ΔE die Breite der Dispersionsrelation $E(\kappa)$ im feldfreien Fall ist. Das gleiche Ergebnis ergibt sich in einer *Tight-Binding*-Näherung, die auf eine diskrete nichtlineare Schrödingergleichung führt [77].

Der Faktor γ kann prinzipiell aus anderen Größen errechnet werden (siehe Gleichung (4.34)), allerdings gehen in diese Berechnung verschiedene Näherungen und Abschätzungen ein. Wir verwenden γ daher zunächst als Fitparameter.

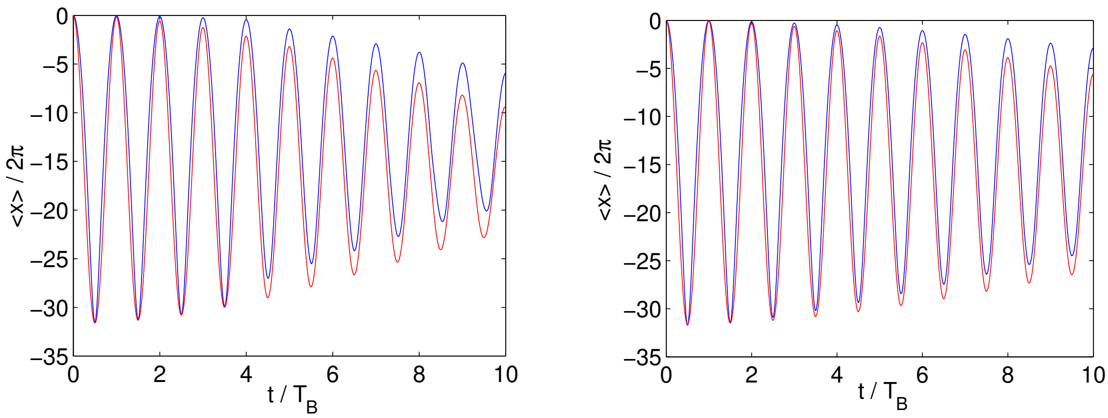

Abbildung 3.3: Zeitentwicklung des Ortserwartungswertes $\langle x\rangle(t)$ für die Lösung der nichtlinearen Schrödingergleichung im Wannier-Stark-System (3.1) für $g = -5$ (links) und $g = +5$ (rechts). Blau dargestellt sind die numerischen Daten, rot ein Fit gemäß Gleichung (3.3).

In Abbildung 3.3 ist die Funktion (3.3) an die numerisch berechnete Funktion $\langle x\rangle(t)$ gefittet. Die Breite der Dispersionsrelation ΔE wurde wie in Anhang B.2 beschrieben berechnet, γ wurde als Fitparameter verwendet. Es ergab sich $\gamma = 0.019\,T_B^{-1}$ für $g = -5$ und $\gamma = 0.013\,T_B^{-1}$ für $g = +5$. Der Fit gibt die Oszillation und die Dämpfung sehr gut wieder. Jedoch verschiebt sich der Mittelwert der Oszillation mit der Zeit zu größeren x, was durch Gleichung (3.3) nicht erklärt wird.

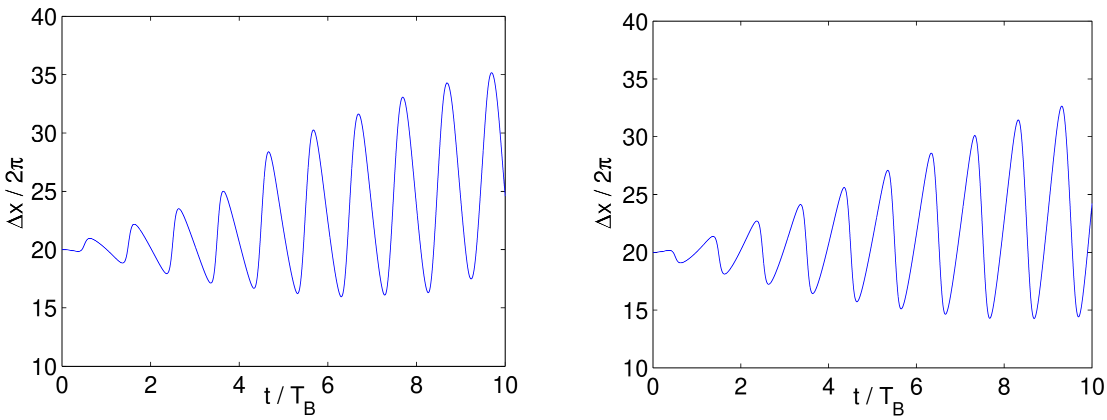

Abbildung 3.4: Zeitentwicklung der Breite $\Delta x(t)$ für die Lösung der nichtlinearen Schrödingergleichung im Wannier-Stark-System (3.1) für $g = -5$ (links) und $g = +5$ (rechts).

Weiterhin ist in Abbildung 3.4 die zeitliche Entwicklung der Breite der Wellenfunktion $\Delta x(t)$ aufgetragen. Im Gegensatz zu der sehr kleinen Oszillation der Breite im linearen Fall (siehe Abbildung 3.1) erkennt man eine sehr starke Oszillation der Breite, die sich langsam aufbaut (siehe auch [72]). Eine solches Phänomen wird gewöhnlich als *Breathing* bzw. Atmen der Wellenfunktion bezeichnet. Ein ähnliches Verhalten findet man im linearen Fall für ein Wellenpaket, das zunächst im Ortsraum stark lokalisiert ist und damit eine breite Impulsverteilung besitzt (vgl. Abschnitt 2.2.2 und [48, 49]). Die Oszillation in der Breite ist für $g = -5$ und $g = +5$ gerade entgegengesetzt. Für eine repulsive Nichtlinearität $g = +5$ wird das Wellenpaket also zunächst breiter, für eine attraktive Nichtlinearität $g = -5$ zunächst schmaler, wie man es intuitiv erwarten würde. Für noch stärkere Nichtlinearitäten erkennt man, dass sich das Atmen noch schneller aufbaut, dann aber auch wieder ausdämpft. Dabei wird die Breite Δx systematisch mit der Zeit größer, bleibt allerdings für die hier betrachteten Zeiten beschränkt (vgl. Abbildung 3.6).

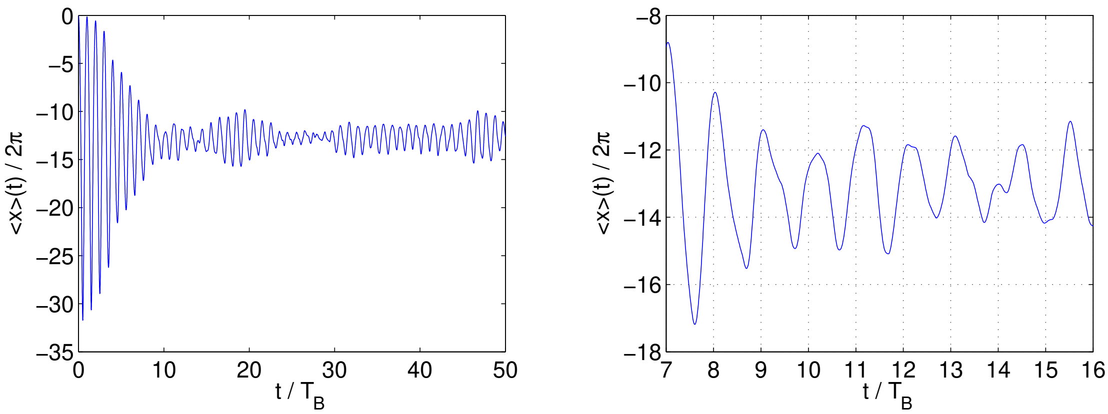

Abbildung 3.5: Zeitentwicklung des Ortserwartungswertes $\langle x \rangle(t)$ für die Lösung nichtlinearen Schrödingergleichung im Wannier-Stark-System (3.1) für $g = 10$. Rechts ist ein vergrößerter Ausschnitt dargestellt.

In Abbildung 3.5 ist die zeitliche Entwicklung des Ortserwartungswertes $\langle x \rangle(t)$ für eine starke repulsive Nichtlinearität $g = +10$ über einen längeren Zeitraum (50 Blochzeiten) dargestellt. Wie bereits für $g = \pm 5$ diskutiert, ist die Bloch-Oszillation zunächst gedämpft. Schließlich beobachtet man jedoch, dass die Amplitude nicht gegen null abfällt, sondern auch für lange Zeiten noch um einen Wert von ein bis zwei Gitterperioden schwankt.

Weiterhin zeigt diese Oszillation Phasensprünge, wie sie bereits in [72] beschrieben sind. Einen solchen Phasensprung sieht man in Abbildung 3.5 auf der rechten Seite, wo ein Ausschnitt aus der zeitlichen Entwicklung des Ortserwartungswertes $\langle x \rangle(t)$ dargestellt ist. Man erkennt, dass die Periode der nichtlinearen Bloch-Oszillationen etwas größer als T_B ist. Die Funktion $\langle x \rangle(t)$ nimmt ihre *Maxima* jeweils etwas nach den Vielfachen der Blochzeit an. Schließlich erfolgt bei $t \approx 14\, T_B$ ein Phasensprung, danach nimmt $\langle x \rangle(t)$ zu Vielfachen der Blochzeit gerade ein *Minimum* an. Nach dem Phasensprung wächst die Amplitude der Oszillationen kurzzeitig wieder an. Dieses Wiederaufleben der Oszillationen ist im Rahmen einer Entwicklung nach Wannier-Stark-Funktionen leicht verständlich (siehe Abschnitt 4.2).

In Abbildung 3.6 ist auf der rechten Seite weiterhin die Fouriertransformierte der Funktion $\langle x \rangle(t)$ dargestellt. Da $\langle x \rangle(t)$ reell ist, ist die Fouriertransformierte symmetrisch um null. Der DC-Anteil ($\omega = 0$) wurde herausgenommen. Die Oszillation wird von dem Peak bei

$\omega \approx \omega_B$ dominiert, der aufgrund der Dämpfung verbreitert ist. Der Peak ist allerdings leicht zu kleineren Frequenzen hin verschoben. Dies bestätigt die Beobachtung, dass die Periode der nichtlinearen Bloch-Oszillationen etwas größer als T_B ist. Weiterhin erkennt man einen signifikanten Peak bei der doppelten Bloch-Frequenz $\omega \approx 2\omega_B$.

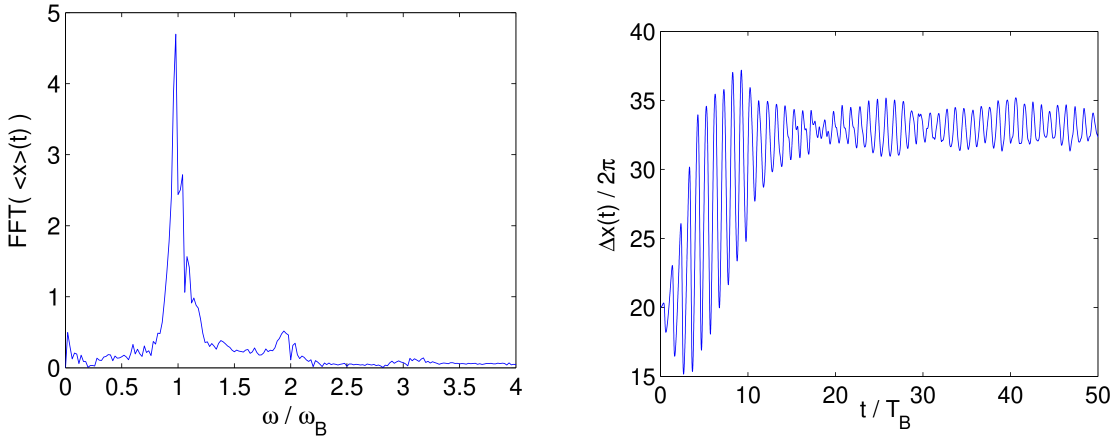

Abbildung 3.6: Fouriertransformierte von $\langle x \rangle(t)$ (links) und Zeitentwicklung der Breite (rechts) für die Lösung der nichtlinearen Schrödingergleichung im Wannier-Stark-System (3.1) für $g = +10$.

Die Breite der Wellenfunktion $\Delta x(t)$ (siehe Abbildung 3.6 rechts) zeigt für lange Zeiten ein ähnliches Verhalten wie der Ortserwartungswert $\langle x \rangle(t)$. Nachdem sich eine starke Oszillation (Atmen) aufgebaut hat, wird diese wieder gedämpft und oszilliert schließlich mit einer kleinen schwankenden Amplitude. Während des starken Atmens der Wellenfunktion steigt auch der Mittelwert der Oszillationen an, bleibt aber trotz der starken repulsiven Selbst-Wechselwirkung über die betrachteten Zeiträume beschränkt. Für höhere Feldstärken nimmt die Breite wie im linearen Fall $g = 0$ aufgrund des Zerfalls der Wellenfunktion zu (siehe dazu Abschnitt 4.3).

Diese Beschränktheit wird im Rahmen einer Entwicklung nach den Eigenfunktionen des linearen Problems (Wannier-Stark-Resonanzen) verständlich, die im nächsten Kapitel ausführlich diskutiert ist. Man findet, dass die Beträge der Entwicklungskoeffizienten in guter Näherung konstant sind. Da ferner die Wannier-Stark-Resonanzen bei Vernachlässigung des Zerfalls lokalisiert sind, bleiben der Ortserwartungswert und die Breite beschränkt. Die Dynamik der Wellenfunktion wird nahezu ausschließlich durch die Zeitentwicklung der Phasen der Entwicklungskoeffizienten bestimmt.

In Abbildung 3.7 ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion $|\psi(x)|^2$ nach fünfzig Blochperioden dargestellt. Die Wellenfunktion sieht „chaotisch" aus, da die Dynamik der Entwicklungskoeffizienten nichtlinear und somit in der Regel chaotisch ist [78]. Die Beträge der Entwicklungskoeffizienten sind aber näherungsweise konstant und somit bleiben gewisse Eigenschaften erhalten: Die Wellenfunktion ist weiterhin in einem Raumbereich lokalisiert und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi(x)|^2$ ist maximal in den Minima des periodischen Potentials $V(x)$. Dies folgt direkt aus den entsprechenden Eigenschaften der Wannier-Stark-Resonanzzustände (vgl. Abbildung 4.1).

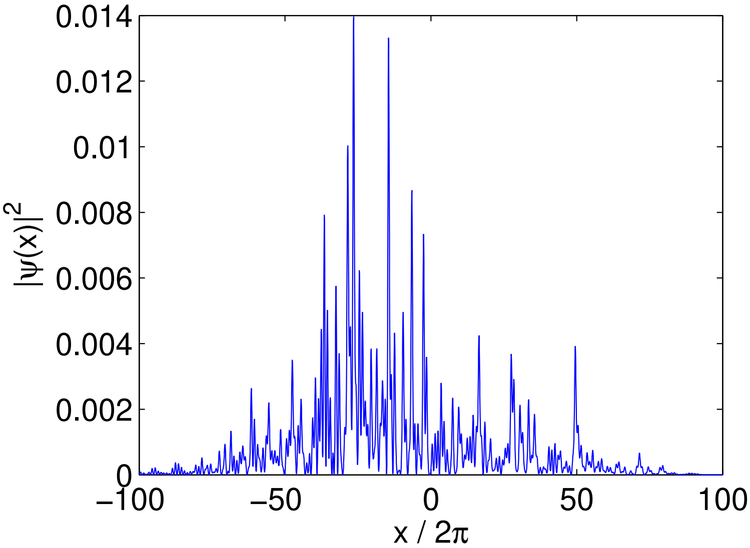

Abbildung 3.7: Wellenfunktion $|\psi(x,t)|^2$ nach fünfzig Blochperioden, $t = 50\,T_B$. Die Nichtlinearität beträgt $g = +10$.

Man stellt weiterhin fest, dass das Wellenpaket $\psi(x,t)$ auch im Fall $g \neq 0$ praktisch keine Anteile in höheren Bloch-Bändern besitzt. Die Implementierung einer Projektion auf ein Blochband ist in Anhang B.3 beschrieben. Damit ist die Beschränkung einer Basissatzentwicklung auf die niedrigste Wannier-Stark-Leiter im nächsten Kapitel gerechtfertigt.

3.2 Abhängigkeit von der Stärke der Nichtlinearität

Im letzten Abschnitt wurde diskutiert, dass die Bloch-Oszillationen unter dem Einfluss der Nichtlinearität zunächst stark gedämpft sind. Weiterhin verändert sich die die Form der Wellenfunktion, zum Beispiel beginnt die Wellenfunktion zu „atmen".

Nun wollen wir die Abhängigkeit von der Stärke der Nichtlinearität g untersuchen. Dazu ist in Abbildung 3.8 die Autokorrelationsfunktion $C(t) := |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|$ zu Vielfachen der Blochzeit ($t/T_B = 1; 5; 10$) über der Stärke der Nichtlinearität aufgetragen. Da Zerfall vernachlässigt werden kann, ist im linearen Fall $C(nT_B) = 1$.

Zunächst betrachten wir das Verhalten zu kurzen Zeiten ($t = T_B$). Für diese kurzen Zeiten sind die Bloch-Oszillation auch für große $|g|$ noch nicht stark ausgedämpft. Wie erwartet fällt die Autokorrelation insgesamt mit wachsendem $|g|$ ab. Eine Nichtlinearität stört das oszillatorische Verhalten. Interessant ist, dass die Autokorrelation aber keineswegs monoton mit $|g|$ abfällt. Weiterhin beobachtet man, dass die Autokorrelation nach einer Blochperiode für eine repulsive Nichtlinearität ($g > 0$) kleiner ist als für eine attraktive Nichtlinearität ($g < 0$) gleichen Betrags. Dies ist verwunderlich, hatten wir doch oben festgestellt, dass die Form der Wellenfunktion durch eine attraktive Nichtlinearität stärker gestört wird als durch eine repulsive („Filamentierung").

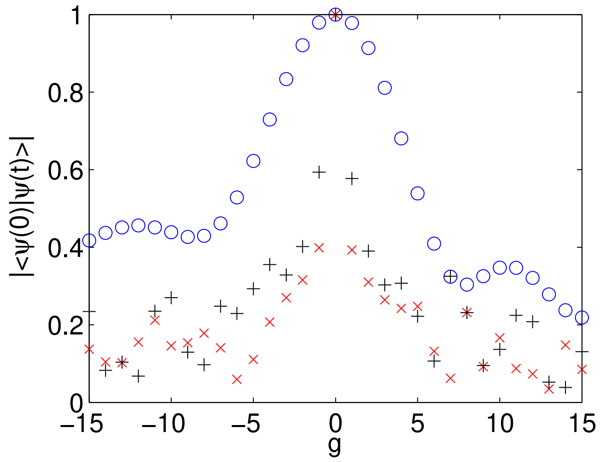

Abbildung 3.8: Autokorrelationsfunktion $|\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|$ für die Lösungen der nichtlinearen Schrödingergleichung im Wannier-Stark-System (3.1). Abhängigkeit von der Nichtlinearität g zu den Zeiten $t = T_B$ ($\circ$), $t = 5\,T_B$ ($+$) und $t = 10\,T_B$ ($\times$).

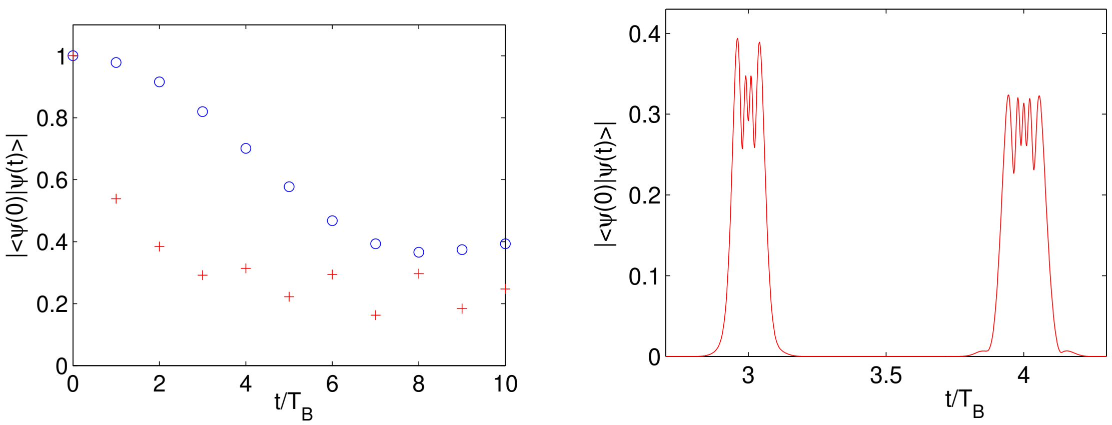

Abbildung 3.9: Zeitabhängigkeit der Autokorrelationsfunktion $|\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|$. Links: Autokorrelation zu Vielfachen der Blochzeit für $g = 1$ ($\circ$) und $g = 5$ ($+$). Rechts: Ausschnitt der Zeitabhängigkeit für $g = 5$.

Für längere Zeiten, insbesondere für $t = 10\,T_B$, und große Nichtlinearitäten $|g|$ sind die Oszillationen fast komplett ausgedämpft. Hier erkennt man keine systematische Abhängigkeit mehr von g, die Autokorrelation nimmt Werte von $C(10\,T_B) \approx 0.1$ an. Für „kleinere" Nichtlinearitäten ist die Autokorrelation erkennbar größer, jedoch wird dieser Bereich um $g = 0$ mit der Zeit immer schmaler.

In Abbildung 3.9 ist der Abfall der Autokorrelation $C(nT_B)$ mit der Zeit für $g = 1$ und $g = 5$ dargestellt. Man erkennt, dass die Autokorrelation nicht monoton abnimmt. Der Grund wird auf der rechten Seite klar, in dem $C(t)$ für $g = 5$ genauer dargestellt ist. Die Peaks der Autokorrelation zu Vielfachen der Blochzeit werden breiter und entwickeln eine Substruktur. Die maximale Höhe dieser Peaks nimmt monoton mit der Zeit ab, jedoch wird das Maximum nicht mehr notwendigerweise genau zu Vielfachen der Blochzeit erreicht. Dieser Effekt ist auch der Grund dafür, dass $C(nT_B)$ nicht monoton mit $|g|$ abnimmt. Die Peaks der Autokorrelation werden breiter, da auch die Wellenfunktion selbst im Impulsraum breiter wird, wie im nächsten Kapitel erläutert wird.

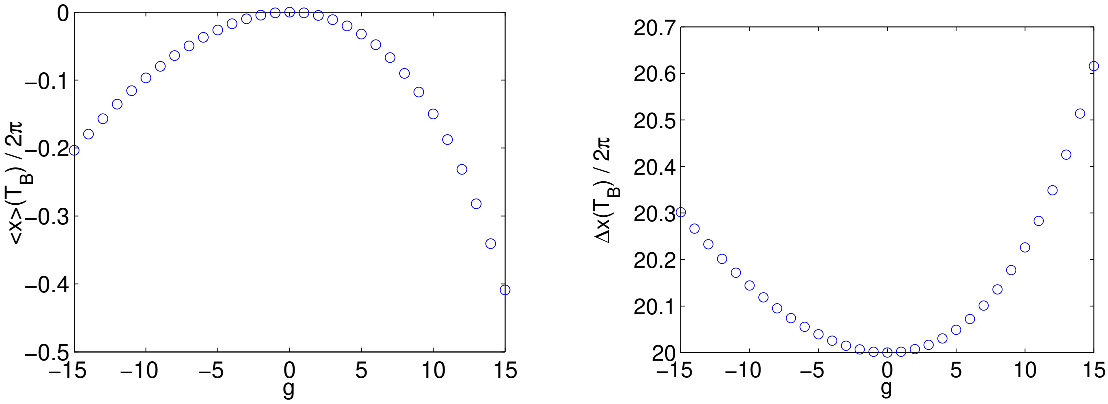

Abbildung 3.10: Abhängigkeit des Ortserwartungswertes $\langle x\rangle(T_B)$ (links) und der Breite $\Delta x(T_B)$ (rechts) der Lösung der nichtlinearen Schrödingergleichung im Wannier-Stark-System (3.1) von der Nichtlinearität g.

In Abbildung 3.10 sind weiterhin die mittlere Position $\langle x\rangle$ und die Breite Δx des Wellenpaketes nach einer Blochperiode über g aufgetragen. Mit wachsendem $|g|$ nimmt $\langle x\rangle(T_B)$ ab, was auf die bereits diskutierte Dämpfung der Oszillation zurückzuführen ist. Wie im Fall der Autokorrelation ist der Effekt einer repulsiven Nichtlinearität ($g > 0$) stärker als der einer attraktiven Nichtlinearität ($g < 0$) gleichen Betrages. Der Ortserwartungswert $\langle x\rangle(T_B)$ skaliert dabei näherungsweise quadratisch in g. Dies ergibt sich auch aus Gleichung (3.3) durch eine Entwicklung der Exponentialfunktion. Allerdings erfasst diese Gleichung nicht den unterschiedlichen Einfluss einer positiven bzw. negativen Nichtlinearität.

Für die Breite $\Delta x(T_B)$ findet man eine Zunahme mit $|g|$, die ebenfalls näherungsweise quadratisch in g skaliert. Hier ist es intuitiv verständlich, dass eine repulsive Wechselwirkung zu einer stärkeren Dispersion führt als eine attraktive Wechselwirkung.

3.3 Abhängigkeit von der Feldstärke

In diesem Abschnitt diskutieren wir die Abhängigkeit der Dynamik von der Feldstärke F. Holthaus stellt dar [72], dass sich die Nichtlinearität nur für kleine Feldstärken signifikant auswirkt. Dazu betrachtet er die Autokorrelation nach einer Blochperiode $C(T_B) = |\langle\psi(0)|\psi(T_B)\rangle|$ in Abhängigkeit von der Feldstärke. Dies ist Abbildung 3.11 auf der linken Seite für zwei verschiedene Nichtlinearitäten $g = 1$ und $g = 5$ dargestellt.

Man beobachtet in der Tat, dass die Autokorrelation $C(T_B)$ für kleine Feldstärken $F \lesssim 0.04$ signifikant einbricht, es ergeben sich deutliche Unterschiede zwischen $g = 1$ und $g = 5$. Der Abfall der Autokorrelation $C(T_B)$ für hohe Feldstärken ist auf den Zerfall zurückzuführen und unterscheidet sich praktisch nicht vom linearen Fall.

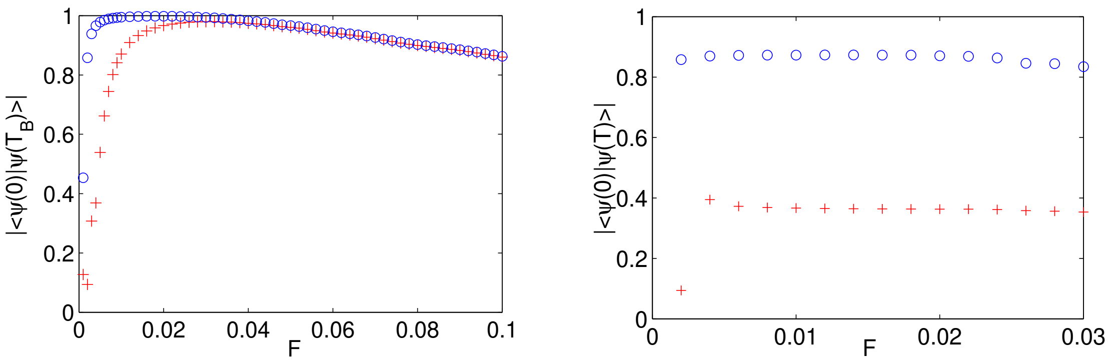

Abbildung 3.11: Autokorrelationsfunktion $|\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|$ nach einer Blochzeit T_B (links) und nach einer festen Zeit $t = \hbar/F_0 = n\,T_B(F)$ (rechts) für $g = 1$ (○) und $g = 5$ (+).

Es ist allerdings zu bedenken, dass die Blochzeit invers proportional zur Feldstärke ist ($T_B = \hbar/F$). Für kleine F ist also einfach die Zeit größer, in der sich die Nichtlinearität auswirken kann. Um diesen Effekt auszuschließen, ist in Abbildung 3.11 auf der rechten Seite die Autokorrelation $C(t)$ zu einem festen Zeitpunkt dargestellt. Die Feldstärken sind $F = n\,F_0$ mit $F_0 = 0.002$, so dass die Zeit $t = \hbar/F_0 = n\,T_B(F)$ jeweils ein Vielfaches der Blochzeit ist.

Hier wird klar, dass die Abhängigkeit von F sehr viel geringer ist, als es der Plot auf der linken Seite nahe legt. Nur für sehr geringe Feldstärken und hohe Nichtlinearitäten ergibt sich eine signifikant kleinere Autokorrelation. In diesem Fall kommt keine vollständige Bloch-Oszillation mehr zustande und die Dynamik wird wesentlich durch die Nichtlinearität bestimmt. Als Beispiel für diesen extremen Fall ist in Abbildung 3.12 die Zeitentwicklung der Wellenfunktion und der Erwartungswerte des Ortes und der Breite für $g = +5$ und $F = 0.001$ dargestellt.

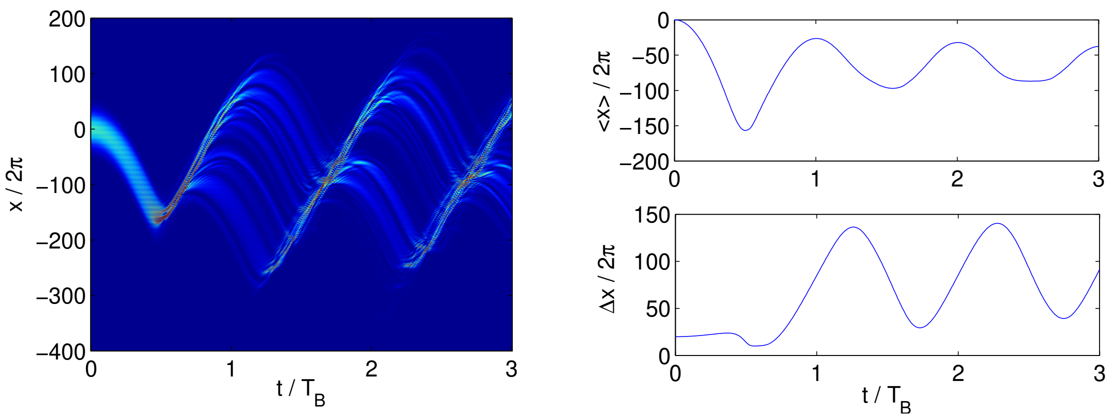

Abbildung 3.12: Links: Falschfarbendarstellung der Wellenfunktion $|\psi(x,t)|^2$ im Wannier-Stark-System für $g = +5$ und $F = 0.001$. Rot codiert eine hohe Intensität, blau eine geringe. Rechts: Erwartungswerte des Ortes $\langle x\rangle(t)$ und der Breite $\Delta x(t)$ der Wellenfunktion. Die weiteren Parameter sind dem Text zu entnehmen.

Für höhere Feldstärken nimmt die Autokorrelation ebenfalls mit der Feldstärke ab, da Zerfall nicht mehr vernachlässigbar ist. Dies ist jedoch kein ursächlicher Effekt der Nichtlinearität.

Ein Experiment zum Einfluss der Feldstärke auf die nichtlineare Dynamik eines Bose-Einstein-Kondensates in einem Wannier-Stark-System wurde vor kurzem in der Gruppe von Arimondo durchgeführt [31]. In diesem Experiment wurde ein Kondensat für vier verschiedenen Feldstärken über verschiedene Zeiten $0 \leq t/T_B \leq 1/2$ beschleunigt und der Einfluss der Nichtlinearität in Abhängigkeit der Beschleunigungszeit bzw. des erreichten Quasiimpulses aufgetragen. Der Einfluss der Nichtlinearität wurde über den Kontrast der Kondensatdichte im Impulsraum und die transversale Ausdehnung des Kondensates charakterisiert. Diese Größen sind aus einem Absorptionsbild nach einer kurzen Zeit ballistischer Expansion direkt bestimmbar.

Die Systemparamter dieses Experiments sind $\hbar = 2.828$, $g = 0.3$ und $F = 0.001$ bis zu $F = 0.018$ in skalierten Einheiten (siehe Anhang A). Wie die Betrachtungen dieses Abschnitts zeigen, kommt für diese Parameter der unterschiedlich starke Einfluss der Nichtlinearität bei verschiedenen Feldstärken hauptsächlich durch die Länge der Beschleunigungszeiten zustande.

Kapitel 4

Beschreibung von Bloch-Oszillationen in einer Basis

4.1 Basissatzentwicklungen für die nichtlineare Schrödingergleichung

Wie im vorigen Kapitel betrachten wir die nichtlineare Schrödingergleichung in einem Wannier-Stark-System

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cos(x) + Fx + g|\psi(x,t)|^2\right)\psi(x,t). \tag{4.1}$$

Um die Dynamik der Wellenfunktion zu verstehen, entwickeln wir die Wellenfunktion in eine Basis $\{\Psi_n(x)\}$:

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n(t)\Psi_n(x). \tag{4.2}$$

Als Basissatz bieten sich zunächst stark lokalisierte Zustände an, wie z.B. die Grundzustands-Wellenfunktionen der einzelnen Potentialtöpfe [77, 79]. Vernachlässigt man den Überlapp der Basisfunktionen verschiedener Potentialtöpfe, so ergibt sich eine diskrete nichtlineare Schrödingergleichung:

$$\mathrm{i}\dot{c}_n = -\frac{1}{2}\left(c_{n-1} + c_{n+1}\right) + \left(\widetilde{E}_n + \tilde{g}|c_n|^2\right)c_n. \tag{4.3}$$

Die Kopplung zwischen den verschiedenen Gitterplätzen wird also über die Nicht-Diagonalelemente des linearen Hamiltonoperators vermittelt. Dies entspricht der in der Festkörperphysik gebräuchlichen *Tight-Binding*-Näherung.

Ein großer Vorteil dieser Basissatzentwicklung ist, dass die Entwicklungskoeffizienten c_n direkt als Amplituden der Wellenfunktion an einem Gitterplatz interpretiert werden können. Im Rahmen dieses Ansatzes kann man mit einigen weiteren Näherungen explizite Formeln für die Dynamik der Erwartungswerte des Ortes und der Breite der Wellenfunktion ableiten [77], die wir im vorigen Kapitel bereits angesprochen haben.

Wir wählen hier einen anderen Ansatz und entwickeln die Wellenfunktion in die Resonanz-Eigenzustände des linearen Systems, die Wannier-Stark-Zustände:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) + Fx\right)\Psi_{\alpha,n}(x) = H_0\Psi_{\alpha,n}(x) = \mathcal{E}_{\alpha,n}\Psi_{\alpha,n}(x), \tag{4.4}$$

wobei α der Leiterindex und n der Platzindex ist (vgl. Abschnitt 1.2.1). Die Wannier-Stark-Zustände sind im Ortsraum über mehrere Gitterplätze ausgedehnt. In Abbildung 4.1 ist der Wannier-Stark-Zustand $\Psi_{0,0}$ für die Parameter $\hbar = 3.3806$ und $F = 0.005$ dargestellt, die im vorigen Kapitel zumeist verwendet wurden. Für höhere Feldstärken oder geringere Werte des skalierten Planckschen Wirkungsquantums $\hbar$ nimmt die Lokalisierung der Wannier-Stark-Zustände zu. Der Algorithmus zur Berechnung dieser Zustände ist in Anhang B.4 erläutert.

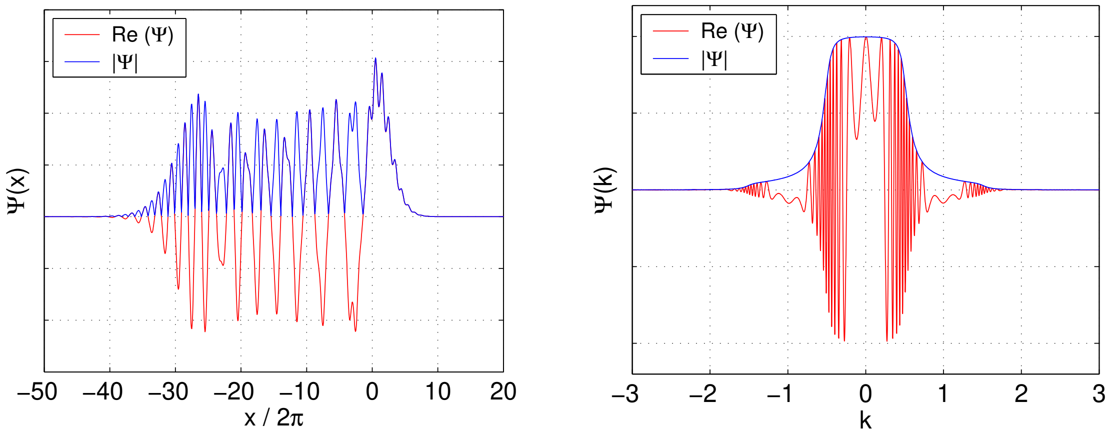

Abbildung 4.1: Wannier-Stark-Zustand $|\Psi_{0,0}\rangle$ für die Parameter $\hbar = 3.3806$ und $F = 0.005$ im Ortsraum (links) und im Impulsraum (rechts).

Für kleine Feldstärken kann man den Zerfall vernachlässigen und sich auf die Grundleiter $\alpha = 0$ beschränken, daher wird der Leiterindex α im Folgenden weggelassen. Setzt man die Entwicklung nach Wannier-Stark-Zuständen

$$\psi(x,t) = \sum_m c_m(t)\Psi_m(x) \tag{4.5}$$

in die nichtlineare Schrödingergleichung (4.1) ein, ergibt sich

$$\mathrm{i}\hbar \sum_k \dot{c}_m \Psi_m = \sum_m (\mathcal{E}_0 + 2\pi F m)\, c_m \Psi_m + g \sum_{klm} c_k^* c_l c_m \Psi_k^* \Psi_l \Psi_m. \tag{4.6}$$

Für kleine Feldstärken, wie wir sie hier zunächst betrachten, kann man den Imaginärteil der Quasienergie $\mathcal{E}_0$, der die Zerfallsrate beschreibt, vernachlässigen. Der Realteil der Quasienergie ergibt dann nur eine globale Phase $\exp(-\mathrm{i}\mathcal{E}_0 t/\hbar)$, die wir hier zumeist weglassen werden.

Aus dieser Gleichung wird nun durch Projektion auf einen Basiszustand $\Psi_n(x)$ eine Gleichung für die Koeffizienten abgeleitet. Dabei ist zu beachten, dass der Hamiltonoperator H_0 aufgrund der Randbedingungen nicht hermitesch ist, die Eigenzustände dieses Hamiltonoperators sind also nicht orthogonal. Allerdings bilden die Eigenzustände des adjungierten Operators $H_0^\dagger$ (die so genannten linken Eigenzustände),

$$H_0^\dagger \, \Psi_n^L = \mathcal{E}_n^* \, \Psi_n^L, \tag{4.7}$$

ein Biorthogonalsystem zu den Eigenzuständen von H_0 (den so genannten rechten Eigenzuständen)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^{L*}(x)\Psi_m(x)\mathrm{d}x = \delta_{n,m}, \tag{4.8}$$

wenn die linken und rechten Eigenzustände einander entsprechend angeordnet sind. Eine ausführliche Darstellung dieses Themas findet sich zum Beispiel in [80]. Die Wannier-Stark-Zustände Ψ_m sind nicht normierbar. Sie divergieren exponentiell für $x \to -\infty$ bzw. $k \to -\infty$, was gerade den Zerfall im Stark-Feld widerspiegelt. Allerdings können wir diesen Zerfall und auch das exponentielle Anwachsen für $x, k \to -\infty$ für eine kleine Feldstärke wie $F = 0.005$ problemlos vernachlässigen.

Multiplikation von Gleichung (4.6) mit der komplex konjugierten linken Eigenfunktion $\Psi_n^{L*}(x)$ und Integration ergibt die diskrete Gleichung

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c}_n = 2\pi F \, n \, c_n + g \sum_{klm} \chi_{klm}^n c_k^* c_l c_m, \tag{4.9}$$

mit dem Kopplungstensor

$$\chi_{klm}^n = \int \Psi_n^{L*}(x)\Psi_k(x)^*\Psi_l(x)\Psi_m(x)\,\mathrm{d}x. \tag{4.10}$$

Aufgrund der Translationseigenschaften der Wannier-Stark-Zustände $\Psi_n(x) = \Psi_0(x - 2\pi n)$ findet man mit $\chi_{klm} := \chi_{klm}^0$ schließlich (siehe auch [78])

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c}_n = 2\pi F \, n \, c_n + g \sum_{klm} \chi_{klm} c_{n+k}^* c_{n+l} c_{n+m}. \tag{4.11}$$

Mit dieser Zerlegung lassen sich alle dynamischen Effekte zumindest qualitativ einfach verstehen. Außerdem kann dieser Ansatz problemlos auch auf Systeme mit größeren Feldstärken erweitert werden, wobei der Zerfall dann natürlich nicht mehr vernachlässigt werden kann. Eine Diskussion eines solchen Systems (F = 0.0661 in skalierten Einheiten) unter Vernachlässigung der Nichtlinearität findet sich in [50], wir behandeln diesen Fall später in Abschnitt 4.3.

In der Form (4.11) ist die diskrete Gleichung für numerische Berechnungen nicht praktikabel, da sie eine dreifache unendliche Summe enthält. Da die Wannier-Stark-Zustände im Ortsraum lokalisiert sind und daher $|\chi_{klm}|$ für große $|k|, |l|, |m|$ schnell gegen null geht, kann man die Summe allerdings problemlos als endlich annehmen. Man stellt fest, dass eine Summation über $|k| \leq 25$ für die verwendeten Parameter ausreichend ist. Aber auch

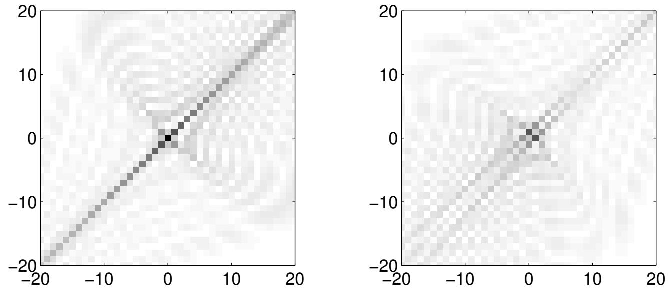

Abbildung 4.2: Überlapp-Tensor $|\chi_{0,l,m}|$ (links) und $|\chi_{1,l,m}|$ (rechts) für $\hbar = 3.3806$ und $F = 0.005$ in einer Graustufendarstellung.

in diesem Fall sind die Rechenzeiten aufgrund der dreifachen Summation noch zu lang, man kann aber noch weitere Elemente von χ_{klm} vernachlässigen.
Aus der Definition des Kopplungstensors folgt direkt, dass

$$\chi_{klm} = \chi_{kml} \neq \chi_{lkm}. \tag{4.12}$$

Man stellt weiterhin fest, dass die dominierenden Beiträge des Kopplungstensors gerade χ_{000}, $\chi_{kk0} = \chi_{k0k}$ und χ_{0kk} sind. Es ist verständlich, dass der verallgemeinerte Überlapp in der Definition des Kopplungstensors (4.10) am größten ist, wenn nur zwei verschiedene Basisfunktionen $\Psi_0(x)$ und $\Psi_k(x)$ eingehen. Dies ist in Abbildung 4.2 illustriert, wo die Matrixelemente $|\chi_{0,l,m}|$ und $|\chi_{1,l,m}|$ in einer Grauskala dargestellt sind.
Wir betrachten daher im Folgenden als diskretes Modell statt der vollen Gleichung (4.11) nur die reduzierte Form

$$\mathrm{i}\hbar\dot{c}_n = 2\pi F\, n\, c_n + g\chi_{000}|c_n|^2 c_n + g\sum_{k\neq 0} 2\chi_{k0k}|c_{n+k}|^2 c_n + \chi_{0kk} c_n^* c_{n+k}^2. \tag{4.13}$$

Die Berücksichtigung weiterer Terme ergibt nur geringe Änderungen in der Dynamik der Erwartungswerte des Ortes und der Breite der Wellenfunktion, steigert aber die Rechenzeit erheblich.
In den Abbildungen 4.3 und 4.4 ist die Zeitentwicklung der Position $\langle x\rangle(t)$ und der Breite $\Delta x(t)$ der Wellenfunktion über jeweils zwanzig Blochzeiten für die Parameter $\hbar = 3.3806$, $F = 0.005$ und $g = 1$ bzw. $g = 10$ dargestellt. Der Anfangszustand ist jeweils von der Form (4.2) mit

$$c_n \sim \mathrm{e}^{-n^2/(2\sigma)^2}, \quad \sigma = 20, \tag{4.14}$$

und auf eins normiert. Die Zeitentwicklung wurde einmal mithilfe der Split-Operator-Methode (siehe Anhang B.1, jeweils blau dargestellt) und einmal mit der Zerlegung nach Wannier-Stark-Funktionen gemäß der reduzierten Gleichung (4.13) berechnet (jeweils rot dargestellt).
Um die Zeitentwicklung der Erwartungswerte effizient aus den Entwicklungskoeffizienten c_n zu berechnen, bestimmt man zunächst die Matrixelemente der Operatoren in der Basis der Wannier-Stark-Zustände, zum Beipiel

$$x_{k,l} = \int \Psi_k^*(x)\, x\, \Psi_l(x)\,\mathrm{d}x, \tag{4.15}$$

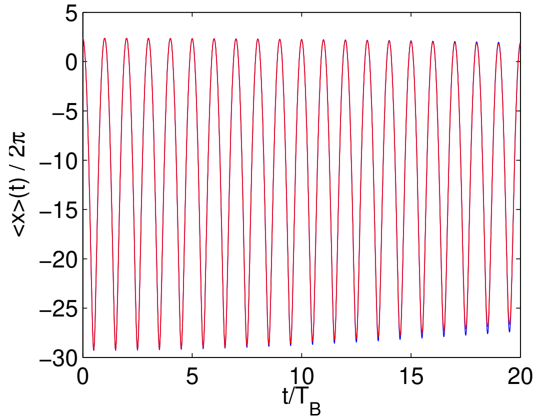

Abbildung 4.3: Bloch-Oszillationen: Erwartungswerte des Ortes $\langle x\rangle(t)$ und der Breite der Wellenfunktion $\Delta x(t)$ für eine moderate Nichtlinearität $g = 1$. Die Zeitentwicklung wurde mit der Split-Operator-Methode (blau) und mit der diskreten Gleichung (4.13) berechnet (rot).

und kann dann die Erwartungswerte zur Zeit t durch einfache Matrixmultiplikationen berechnen:

$$\langle x\rangle(t) = \sum_{k,l} c_k^*(t)\, x_{k,l}\, c_l(t). \tag{4.16}$$

Für eine moderate Nichtlinearität $g = 1$ wird die Dynamik sehr gut durch die reduzierte diskrete Gleichung beschrieben. Lediglich die Oszillationen der Breite $\Delta x(t)$ ergeben für längere Zeiten zu große Werte. Für höhere Nichtlinearitäten wie $g = 10$ ergeben sich große Abweichungen. Insbesondere ist die Amplitude nach dem Wiederaufleben der Oszillation der Position $\langle x\rangle(t)$ im diskreten Modell zu groß und das Anwachsen der mittleren Breite wird zu klein berechnet. Die Abweichungen ergeben sich aus der beschriebenen Vernachlässigung von Termen in Gleichung (4.13), die aber nötig sind, um den numerischen Aufwand beherrschbar zu machen. Im folgenden Abschnitt werden wir noch weitere Näherungen durchführen, die sehr zum Verständnis der Dynamik beitragen.

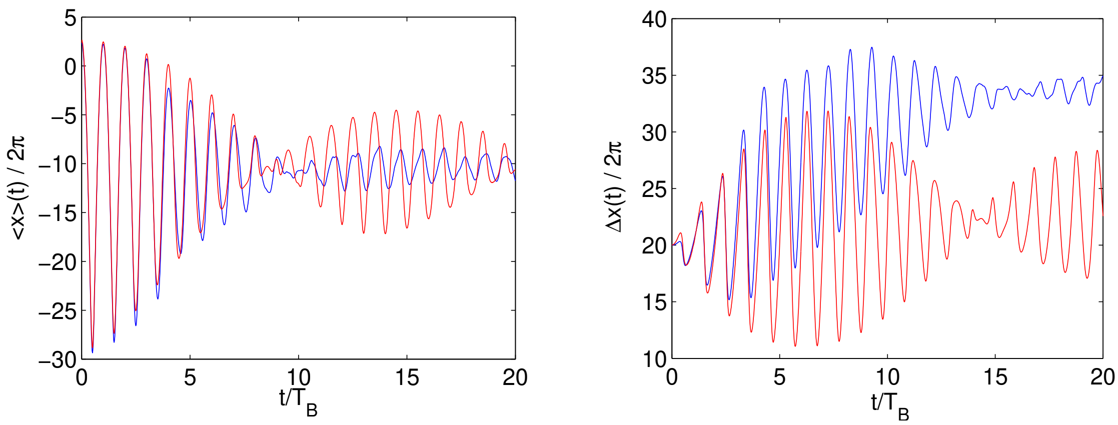

Abbildung 4.4: Wie Abbildung 4.3, jedoch für eine große Nichtlinearität $g = 10$.

Allerdings werden auch für sehr große Nichtlinearitäten wie $g = 10$ die wesentlichen Eigenschaften der Dynamik durch das diskrete Modell (4.13) qualitativ richtig wiedergegeben. Das diskrete Modell beschreibt die Dämpfung und das Wiederaufleben der Oszillation $\langle x\rangle(t)$ und die Phasenverschiebung dieser Oszillation um eine halbe Periode, sowie auch die starken Oszillationen der Breite $\Delta x(t)$, das so genannte Atmen der Wellenfunktion.

4.2 Dynamik der Koeffizienten und der Wellenfunktion

Anhand des im vorigen Abschnitt eingeführten diskreten Modells diskutieren wir jetzt die dynamischen Eigenschaften des Systems. Dazu betrachten wir eine sehr einfache, aber erstaunlich gute Näherung für die Zeitentwicklung der Koeffizienten c_n. Zerlegt man diese Koeffizienten c_n in Amplituden und Phasen

$$c_n = \sqrt{\rho_n}\,\mathrm{e}^{i\varphi_n}, \tag{4.17}$$

so ergeben sich statt Gleichung (4.11) die Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}
\hbar\dot{\varphi}_n &= -2\pi F n - g\rho_n \sum_{klm} \chi_{klm} \left(\frac{\rho_{k+n}\rho_{l+n}\rho_{m+n}}{\rho_n^3}\right)^{1/2} \\
&\qquad\qquad \times \cos(\varphi_{l+n} + \varphi_{m+n} - \varphi_{k+n} - \varphi_n) \\
\hbar\dot{\rho}_n &= 2g\rho_n^2 \sum_{klm} \chi_{klm} \left(\frac{\rho_{k+n}\rho_{l+n}\rho_{m+n}}{\rho_n^3}\right)^{1/2} \\
&\qquad\qquad \times \sin(\varphi_{l+n} + \varphi_{m+n} - \varphi_{k+n} - \varphi_n).
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Für genügend breite Verteilungen der Amplituden ρ_n kann man weitere Näherungen machen. Für den hier betrachteten Anfangszustand (4.14) sind diese Näherungen immer gerechtfertigt.

In diesem Fall ist $\rho_n(t = 0) \ll 1$ und damit $|\dot{\rho}_n| \ll |\dot{\varphi}_n|$. Die dynamischen Effekte sind also zumindest für kurze Zeiten durch die Dynamik der Phasen bestimmt. Wir nehmen also die Amplituden näherungsweise als konstant an:

$$\rho_n(t) \approx \rho_n(t = 0) = \rho_n \sim \mathrm{e}^{-n^2/(2\sigma^2)}. \tag{4.19}$$

Nimmt man weiterhin die Summen in den Gleichungen (4.18) als konstant an, erhält man eine integrable Näherung für die Zeitentwicklung der Phasen φ_n. Für $\{l, m\} = \{k, 0\}$ ist das Argument des Kosinus in Gleichung (4.18) gleich null. Der Kosinus ist also immer eins. Für andere Indizes ist der zeitliche Mittelwert über den Kosinus gleich null. Wir definieren daher

$$\alpha_n = \chi_{000} + 2\sum_{k\neq 0} \chi_{k0k} \frac{\rho_{n+k}}{\rho_n} \tag{4.20}$$

und nähern die Differentialgleichung (4.18) durch

$$\hbar\dot{\varphi}_n \approx \hbar\omega_n = -2\pi F n - g\alpha_n\rho_n. \tag{4.21}$$

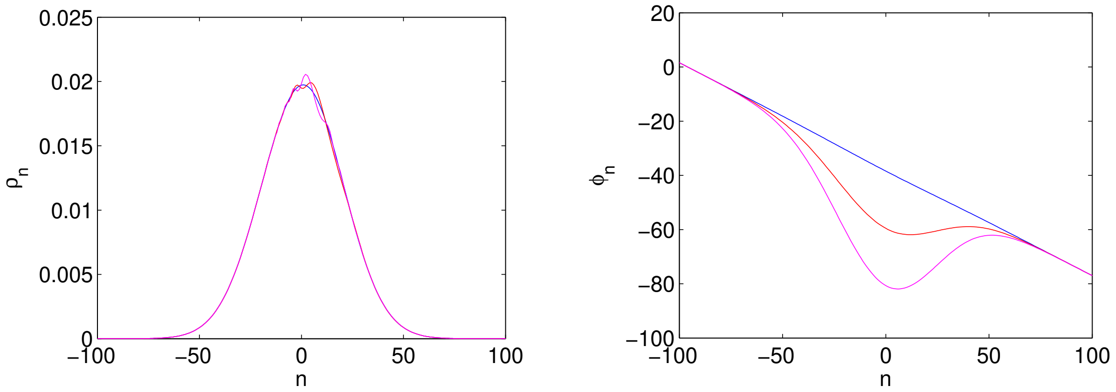

Abbildung 4.5: Amplituden $\rho_n(t)$ (links) und Phasen $\varphi_n(t)$ (rechts) nach der numerischen Integration der Gleichung (4.13) dargestellt zu den Zeiten $t = 1/16\,T_B$ (blau), $t = 33/16\,T_B$ (rot) und $t = 65/16\,T_B$ (magenta).

Man kann in guter Näherung die Abhängigkeit der Koeffizienten α_n von n vernachlässigen und $\alpha_n \approx \alpha_0 = \alpha$ annehmen. Für die Parameter $\hbar = 3.3806$ und $F = 0.005$ und den Anfangszustand (4.14) findet man $\alpha = 0.278$.

Diese recht grobe Näherung erweist sich als erstaunlich gut. In Abbildung 4.5 sind die Amplituden ρ_n und die Phasen φ_n zu den Zeiten $t = 1/16\,T_B$ (blau), $t = 33/16\,T_B$ (rot) und $t = 65/16\,T_B$ (magenta) dargestellt, wie sie sich aus der numerischen Integration der Gleichungen (4.13) ergeben. Dabei wurden die üblichen Parameter $F = 0.005$ und $\hbar = 3.3806$ sowie eine starke Nichtlinearität $g = 10$ gewählt. Man erkennt, dass die Amplituden in guter Näherung konstant sind. Auch für die Phasen φ_n wird die Näherung (4.19) gut bestätigt; die lineare Abhängigkeit von n mit der überlagerten Gauß-Glocke ist deutlich zu sehen.

In Abbildung 4.6 ist die zeitliche Entwicklung des Ortserwartungswertes $\langle x\rangle(t)$ (links) und der Breite $\Delta x(t)$ (rechts) für $g = 10$ dargestellt. Blau gezeichnet sind die Werte, die sich aus der numerischen Integration der Gleichungen (4.13) ergeben, rot die Werte gemäß der Näherung (4.19). Dabei wurde der Parameter α im Ausdruck für ω_n als Fitparameter angenommen. Für diese Parameter ergaben sich die Werte $\alpha = 0.2203$ für $g = 1$ und $\alpha = 0.2221$ für $g = 10$, die etwas geringer sind als die Abschätzung (4.20). Man erkennt, dass die integrable Näherung (4.21) die Ergebnisse der numerischen Lösung der diskreten Gleichung (4.13) sehr gut beschreibt. Für den Fall $g = 1$ (nicht dargestellt) ist die Übereinstimmung noch besser. In der Zeitentwicklung des Ortserwartungswertes sind keine Unterschiede mehr erkennbar.

Mit diesen Kenntnissen über die zeitliche Entwicklung der Koeffizienten c_n lässt sich die Dynamik der Wellenfunktion gut im Impulsraum verstehen. Dazu betrachten wir zunächst nochmals den linearen Fall (siehe Abschnitt 1.2.3). Für $g = 0$ kann man die Gleichungen 4.18 einfach integrieren:

$$\rho_n(t) = \rho_n(t=0) \quad \text{und} \quad \varphi_n(t) = -2\pi F n t/\hbar. \tag{4.22}$$

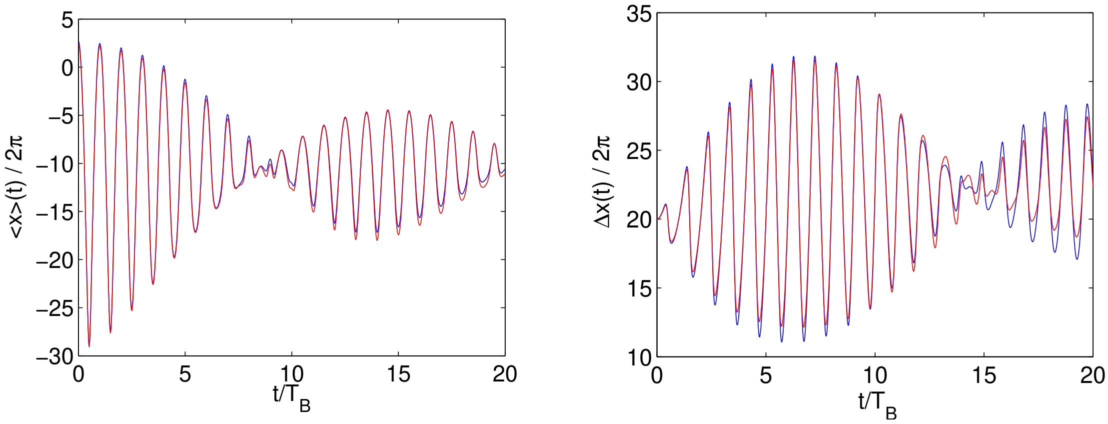

Abbildung 4.6: Erwartungswerte des Ortes $\langle x\rangle(t)$ (links) und der Breite $\Delta x(t)$ (rechts) der Wellenfunktion für eine große Nichtlinearität $g = 10$. Vergleich der Ergebnisse für eine numerische Integration der Gleichung (4.13) (blau) und der Näherung (4.19) (rot).

Die Wannier-Stark-Funktionen Ψ_n gehen durch eine räumliche Translation ineinander über. Im Impulsraum ist der Translationsoperator einfach die Multiplikation mit einem Phasenfaktor

$$\Psi_n(k) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi nk}\Psi_0(k). \tag{4.23}$$

Damit ist die Dynamik der Wellenfunktion im Impulsraum gegeben durch

$$\begin{aligned} \psi(k,t) &= \Psi_0(k)\sum_n \sqrt{\rho_n}\exp\left(-\mathrm{i}2\pi n\left(k + Ft/\hbar\right)\right) \\ &= \Psi_0(k) \times \widetilde{C}(k + Ft/\hbar), \end{aligned} \tag{4.24}$$

wiederum unter Vernachlässigung der globalen Phase. Die Dynamik ist also gerade die Überlagerung einer zeitunabhängigen Funktion $\Psi_0(k)$ und der diskreten Fouriertransformation $\widetilde{C}(k)$ der Amplituden $\sqrt{\rho_n}$, ausgewertet an der Stelle $k + Ft/\hbar$.

Die Funktion $\widetilde{C}(k)$ ist im Impulsraum periodisch mit $\widetilde{C}(k+n) = \widetilde{C}(k)$ für $n \in \mathbb{Z}$. Daher ist die Funktion $\widetilde{C}(k + Ft/\hbar)$ periodisch in der Zeit mit der Periode $T_B = \hbar/F$. Für die betrachtete breite gaussförmige Verteilung der Amplituden ρ_n ist die Fouriertransformierte $\widetilde{C}(k)$ eine „Kammfunktion", sie hat schmale Peaks bei $k = n$, sonst ist sie vernachlässigbar klein.

Man erhält also ein einfaches Bild der Dynamik im Impulsraum. Die Kammfunktion $\widetilde{C}(k)$ bewegt sich „unter" der Einhüllenden $\Psi_0(k)$ hinweg, diese Bewegung ist zeitlich periodisch mit der Periode T_B. Dies ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Im Ortsraum führt diese periodische Bewegung dann zu den Bloch-Oszillationen, wie es in Abbildung 1.3 dargestellt ist.

Im nichtlinearen Fall hat man statt Gleichung (4.24) nun

$$\begin{aligned} \psi(k,t) &= \Psi_0(k)\sum_n \sqrt{\rho_n}\exp\left(-\mathrm{i}\left(2\pi nk - \varphi_n(t)\right)\right) \\ &= \Psi_0(k) \times \widetilde{C}(k,t). \end{aligned} \tag{4.25}$$

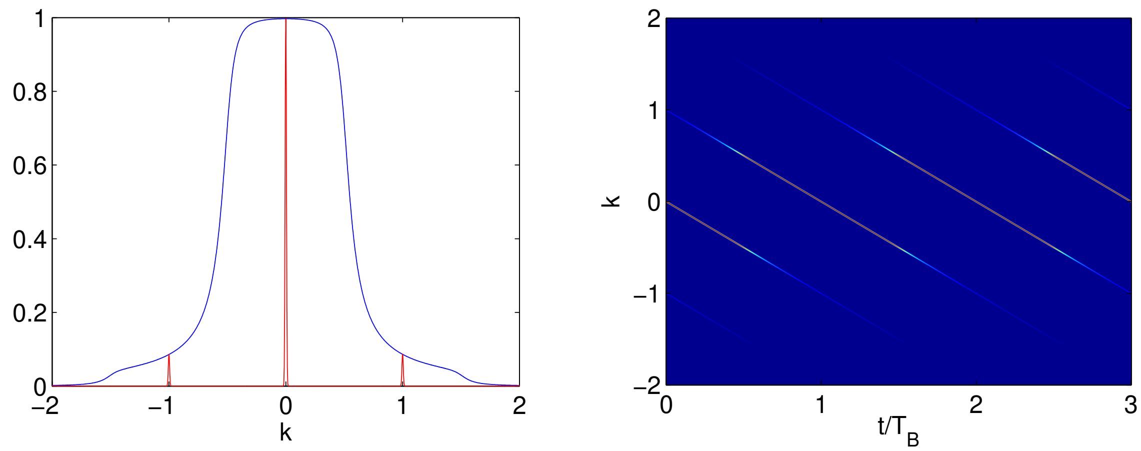

Abbildung 4.7: Bloch-Oszillationen im Impulsraum. Links: Wannier-Stark-Funktion $|\Psi_0(k)|$ (blau) und Wellenfunktion $|\psi(k, t = 0)|$ (rot). Rechts: $|\psi(k, t)|$ in einer Falschfarbendarstellung.

Die Zeitentwicklung der Amplituden und Phasen nähern wir wie oben beschrieben durch $\rho_n = const.$ und $\varphi_n(t) = \omega_n t$ an (siehe Gleichungen (4.19) und (4.21)). Wie im linearen Fall führt der zum Stark-Feld F proportionale Term in der Frequenz $\hbar\omega_n = -2\pi F n - \alpha g \rho_n$ zu einer gleichförmigen Bewegung der Funktion $\widetilde{C}(k, t)$ im Impulsraum. Der nichtlineare Term führt zu einer Dephasierung der Koeffizienten c_n, die Fouriertransformierte $\widetilde{C}(k, t)$ wird breiter. Im Ortsraum führt dies zu der beobachteten Dämpfung der Bloch-Oszillationen.

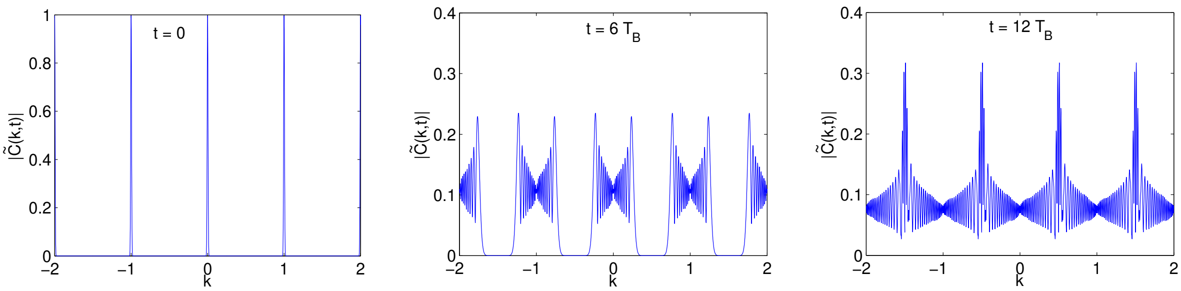

Abbildung 4.8: Zeitliche Entwicklung der Funktion $\widetilde{C}(k, t)$ in Gleichung (4.25) für $g = 10$. Die Funktion $\widetilde{C}$ ist skaliert, so dass $\max |\widetilde{C}(k, t = 0)| = 1$.

Auch die Oszillationen in der Breite $\Delta x(t)$ der Wellenfunktion, das so genannte Atmen, wird in dieser Betrachtung verständlich. Ein solches Atmen ist im linearen Fall wohl bekannt für eine Wellenfunktion, die anfänglich im Ortsraum stark lokalisiert ist, also eine breite Impulsverteilung besitzt. Wie bereits dargestellt, führt der nichtlineare Term zu einer Verbreiterung der Funktion $\widetilde{C}(k, t)$, also zu einer breiteren Impulsverteilung und damit zum atmenden Verhalten. Für lange Zeiten führt die Nichtlinearität zu einer vollständigen Dephasierung der Koeffizienten c_n und die Oszillationen im Ort $\langle x\rangle(t)$ und in der Breite $\Delta x(t)$ sind gedämpft.

Um das Wiederaufleben der Oszillationen der Position $\langle x \rangle(t)$ und die dabei auftretenden Phasensprünge zu verstehen, müssen wir die Dynamik der Funktion $\widetilde{C}(k,t)$ genauer betrachten. In Abbildung 4.8 ist die Funktion $|\widetilde{C}(k,t)|$ für $g = 10$ zu den Zeiten $t = 0$, $t = 6\,T_B$ und $t = 12\,T_B$ dargestellt, wie sie sich aus der numerischen Integration der Gleichung (4.13) ergibt. Man beobachtet, dass die anfänglich schmalen Peaks breiter werden, wie wir es bereits besprochen haben. Dabei bilden sich jedoch zwei deutliche Maxima an den Rändern der immer breiter werdenden Verteilung der Funktion $|\widetilde{C}(k,t)|$ aus. Aufgrund der Periodizität der Funktion $\widetilde{C}(k,t)$ laufen schließlich benachbarte Maxima ineinander. Dies führt zu dem Wiederaufleben der Oszillation, die dann gerade um eine halbe Periode phasenverschoben ist.

Nun betrachten wir die zeitliche Entwicklung der Erwartungswerte. Im linearen Fall $g = 0$ kann man die Erwartungswerte in einer *Tight-Binding*-Näherung direkt auswerten [48,49]. Der Ortserwartungswert $\langle x \rangle(t)$ oszilliert in dieser Näherung harmonisch mit der Blochfrequenz ω_B und der Amplitude

$$\frac{\Delta E}{2F}\,\mathrm{e}^{-2\pi^2 \Delta p^2/\hbar^2} \tag{4.26}$$

wobei Δp die Impulsbreite und ΔE die Breite der Dispersionsrelation $E(\kappa)$ im feldfreien Fall ist. Die Nichtlinearität führt zu einer Dephasierung der Komponenten c_n und damit zu einer Verbreiterung der Wellenfunktion im Impulsraum, wie es in Abbildung 4.8 dargestellt ist (dort allerdings für eine starke Nichtlinearität). Für eine kleine Nichtlinearität geschieht diese Verbreiterung langsam im Vergleich zu den Bloch-Oszillationen. Daher können wir die zeitliche Entwicklung des Ortserwartungswertes $\langle x \rangle$ auch im Fall einer schwachen Nichtlinearität näherungsweise als gedämpfte harmonische Schwingung annehmen, deren Amplitude durch Gleichung (4.26) mit einer zeitlich langsam veränderlichen Impulsbreite $\Delta p(t)$ beschrieben wird.

Die Impulsbreite Δp schätzen wir gemäß Gleichung (4.25) aus der Breite der Peaks der Funktion $\widetilde{C}(k,t)$ ab. Für eine breite Verteilung der Koeffizienten c_n wie in unserem Fall können wir die Summe über n in Gleichung (4.25) durch ein Integral über n ersetzen. Für $|k| \leq 0.5$ ist dann

$$\widetilde{C}(k,t) = \int \sqrt{\rho_n}\,\exp\left(-\mathrm{i}(2\pi n k - \varphi_n(t))\right)\,\mathrm{d}n. \tag{4.27}$$

Für größere $|k|$ ergibt sich $\widetilde{C}(k,t)$ aus der Periodizität dieser Funktion. Die Amplituden ρ_n werden wie oben als zeitlich konstant angesehen. Normiert man die ρ_n, indem man wiederum die Summe über n durch ein Integral ersetzt, so ist

$$\rho_n = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\,\mathrm{e}^{-n^2/2\sigma^2}. \tag{4.28}$$

Einsetzen von Gleichung (4.19) ergibt mit den Abkürzungen $\tilde{k} = k + Ft/\hbar$ und $\beta = \alpha g t/(\sqrt{2\pi}\sigma\hbar)$ dann

$$\widetilde{C}(k,t) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} \int \mathrm{e}^{-n^2/(2\sigma)^2} \exp\left(-\mathrm{i}2\pi n\tilde{k} - \mathrm{i}\beta \mathrm{e}^{-n^2/2\sigma^2}\right) \mathrm{d}n. \tag{4.29}$$

Dieses Integral kann man nun mit der Methode der stationären Phase näherungsweise auswerten. In dieser Näherung verschwindet das Integral, wenn es keine Punkte stationärer Phase mehr gibt. Dies ist der Fall für $|\tilde{k}| > |k_c|$, wobei

$$k_c = \frac{\beta}{2\pi \mathrm{e}^{1/2}\,\sigma}\,. \tag{4.30}$$

Für $|\tilde{k}| < |k_c|$ findet man

$$\widetilde{C}(k,t) = \left(\frac{2\pi\sigma^2}{\beta^2}\right)^{1/4}\left(\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\zeta_+}}{\sqrt{1-z_+}} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\zeta_-}}{\sqrt{1-z_-}}\right) \tag{4.31}$$

wobei $z_\pm$ die beiden Lösungen der Gleichung

$$z\mathrm{e}^{-z} = \left(2\pi\sigma\tilde{k}/\beta\right)^2 \tag{4.32}$$

bezeichnen und die Abkürzung $\zeta_\pm = -2\pi\sigma\tilde{k}\,(z_\pm^{+1/2} + z_\pm^{-1/2})$ verwendet wurde.

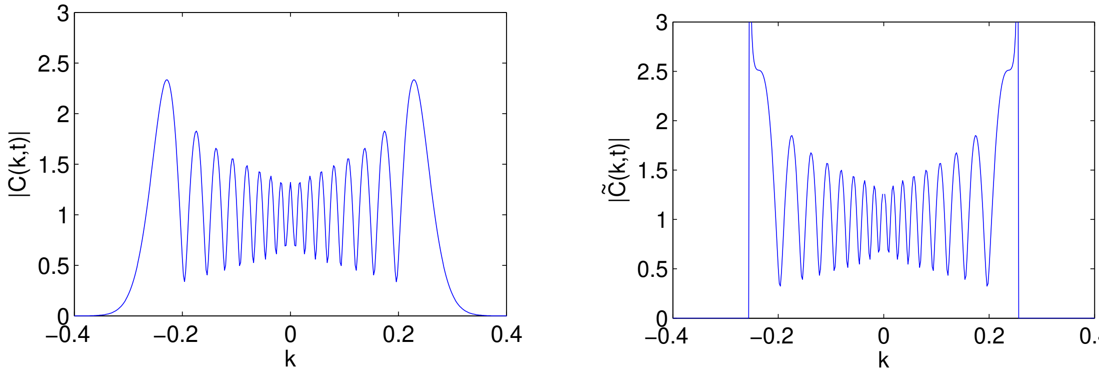

Abbildung 4.9: Funktion $|\widetilde{C}(k,t)|$ (4.29) nach sechs Blochzeiten für $g = 10$ und $\alpha = 0.22$. Das Integral wurde numerisch gelöst (links) bzw. mit der Methode der stationären Phase näherungsweise berechnet (rechts).

In Abbildung 4.9 ist die Näherung (4.31) mit einer numerischen Lösung des Integrals (4.29) verglichen. In dieser Näherung divergiert $\widetilde{C}(\tilde{k})$ für $|\tilde{k}| \to |k_c|$, da dann $z_\pm \to 1$. Ohne die Näherung findet man keine Divergenz, aber deutliche Maxima für $|\tilde{k}| \lesssim |k_c|$. Die Oszillationen von $\widetilde{C}(\tilde{k})$, die man in Abbildung 4.9 sieht, ergeben sich aus der Interferenz der zwei Summanden in Gleichung (4.31).
Wir können die Breite im Impulsraum damit als $\Delta p \approx \hbar|k_c|$ abschätzen und erhalten

$$\Delta p(t) \approx \frac{|\alpha g|}{(2\pi)^{3/2}\mathrm{e}^{1/2}\,\sigma^2}\,t. \tag{4.33}$$

Damit ergibt sich

$$\langle x\rangle(t) \approx \bar{x} + \frac{\Delta E}{2F}\exp\left(-\frac{\alpha^2 g^2 t^2}{4\pi\mathrm{e}\hbar^2\sigma^4}\right)\cos(\omega_B t). \tag{4.34}$$

Für den Abfall der Amplitude ergibt sich wie in [77] eine exponentielle Abhängigkeit von $-g^2t^2$.

Für den Parameter $\hbar = 3.3806$ ist die Breite der feldfreien Dispersionsrelation $\Delta E = 0.994$ (zur Berechnung siehe Anhang B.2). In Abbildung 4.10 links ist der Ortserwartungswert $\langle x\rangle(t)$ dargestellt, wie er sich aus der Lösung der reduzierten diskreten Gleichung (4.13) und aus der Näherung (4.34) für $g = 2$ und $\alpha = 0.22$ ergibt. Die Abnahme der Amplitude der Bloch-Oszillationen wird durch die Näherungsformel etwas überschätzt. Außerdem verschiebt sich auch der Mittelwert der Oszillation, was sich aus der Gleichung (4.34) nicht ergibt.

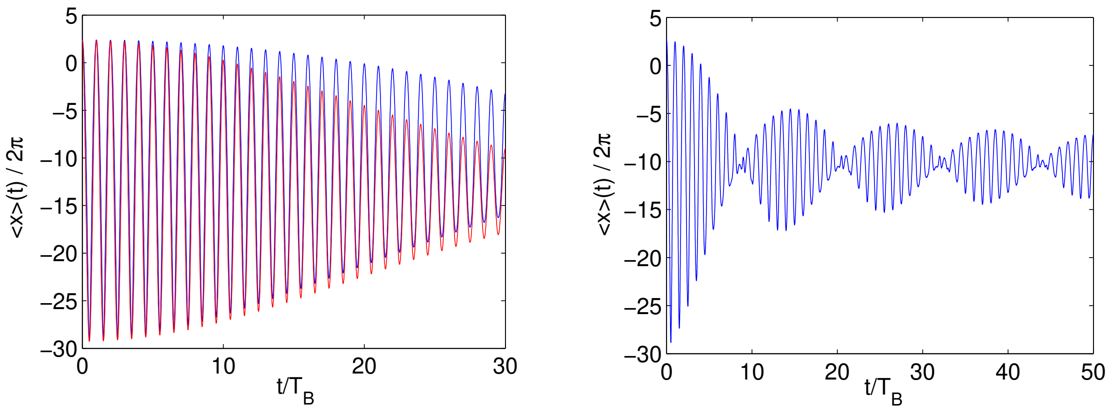

Abbildung 4.10: Bloch-Oszillationen des Ortserwartungswertes $\langle x\rangle(t)$ für $g = 2$ (links) und $g = 10$ (rechts). Vergleich der Lösung der diskreten nichtlinearen Gleichung (4.13) (blau) und der Näherung (4.34) (rot, nur für $g = 2$).

Für größere Werte des Parameters β, also größere Zeiten oder größere Werte von g, kann man keine geschlossene Näherungsformel mehr angeben. Man kann jedoch die Zeit bis zur ersten Rephasierung der Koeffizienten, und damit dem ersten vollständigen Wiederaufleben der Oszillation, gut abschätzen. Dieses tritt ein, wenn die äußeren Peaks von $\widetilde{C}(k,t)$ bei $k = n + 1/2$, $n \in \mathbb{Z}$ ineinander fließen, wie es in Abbildung 4.8 dargestellt ist. Daher erhält man die erste Rephasierung für

$$k_c \stackrel{!}{=} 0.5 \quad \Rightarrow \quad t \approx \frac{(2\pi)^{3/2}\mathrm{e}^{1/2}\,\hbar\sigma^2}{2|\alpha g|}. \tag{4.35}$$

Für $g = 10$ und $\alpha = 0.22$ ergibt sich

$$t \approx 12\,T_B. \tag{4.36}$$

In Abbildung 4.10 ist $\langle x\rangle(t)$ für $g = 10$ über 50 Blochperioden dargestellt, wie es sich aus der Lösung der reduzierten diskreten Gleichung (4.13) ergibt. Man erkennt, dass sich die De- und Rephasierung, d.h. die Dämpfung und das Wiederaufleben der Oszillation periodisch wiederholt. Die Periode dieser De-/Rephasierung stimmt gut mit der Abschätzung $t = 12\,T_B$ überein. In einer vollen numerischen Rechnung mit dem Split-Operator-Verfahren (siehe Abbildung 3.5) verschwinden die Details dieses Verhaltens teilweise. Das erste Wiederaufleben ist allerdings noch deutlich zu erkennen, der Phasensprung geschieht nach etwa 14 Blochperioden.

Weiterhin kann man den Ortserwartungswert für lange Zeiten $\langle x \rangle_\infty$ einfach abschätzen. Durch die Nichtlinearität dephasieren die Koeffizienten c_n und man kann die Wellenfunktion für lange Zeiten als inkohärente Superposition der Basiszustände ansehen. Nimmt man gemäß Gleichung (4.19) weiterhin an, dass die ρ_n zeitlich konstant sind, so erhält man

$$\langle x \rangle = \sum_n \rho_n \langle \Psi_n | x | \Psi_n \rangle. \tag{4.37}$$

Aufgrund der Translationseigenschaften der Wannier-Stark-Zustände gilt

$$\langle \Psi_n | x | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_0 | x | \Psi_0 \rangle + 2\pi n \tag{4.38}$$

und man findet für den Ortserwartungswert

$$\langle x \rangle_\infty \approx \langle \Psi_0 | x | \Psi_0 \rangle + 2\pi \sum_n n \rho_n. \tag{4.39}$$

Für den den Anfangszustand (4.14) ergibt sich $\langle x \rangle_\infty \approx -10.5 \cdot 2\pi$. Dies entspricht gut den numerischen Ergebnissen, wie sie in den Abbildungen 4.6 und 4.10 dargestellt sind.

Es ist weiterhin interessant, dass die Differentialgleichungen (4.11) für die Koeffizienten c_n für bestimmte Parameter zu einer chaotischen Dynamik führen [78]. In dieser Arbeit sind die Parameter in skalierten Einheiten $\hbar = \sqrt{8/5}$ und $F = 1/40\pi$. Für diese Werte sind die Wannier-Stark-Zustände im Wesentlichen auf einem Gitterplatz lokalisiert. Es ist dann ausreichend, in der Differentialgleichung (4.11) nur Kopplungen zwischen nächsten Nachbarn zu betrachten. Das chaotische Verhalten wird allerdings für eine spezielle Anfangsverteilung, in der nur drei Gitterplätze besetzt sind, gezeigt. Im Fall einer solch starken Lokalisierung beobachtet man im linearen Fall keine Bloch-Oszillationen, sondern ein Atmen der Wellenfunktion. Die Breite Δx oszilliert stark, während die Position $\langle x \rangle$ näherungsweise konstant bleibt.

4.3 Hohe Feldstärken

Auch für höhere Feldstärken ist die Dynamik im Rahmen einer Entwicklung nach Wannier-Stark-Zuständen verständlich. Wir diskutieren im Folgenden die zeitliche Entwicklung für die Parameter $\hbar = 3.3806$ und $F = 0.0661$, die dem Experiment der Kasevich-Gruppe [5] entsprechen. Eine detaillierte Diskussion des Kasevich-Experiments mittels einer Entwicklung nach Wannier-Stark-Zuständen, jedoch unter Vernachlässigung der Nichtlinearität g, findet sich in [50].

In Abbildung 4.11 ist der Wannier-Stark-Zustand $\Psi_{0,0}$ für diese Parameter dargestellt. Klarerweise kann Zerfall nun nicht mehr vernachlässigt werden, allerdings erweist sich eine Beschränkung auf die Grundleiter weiterhin als ausreichend. In dieser Darstellung wird deutlich, dass die Resonanzzustände für x oder $k \to -\infty$ nicht verschwinden, sondern

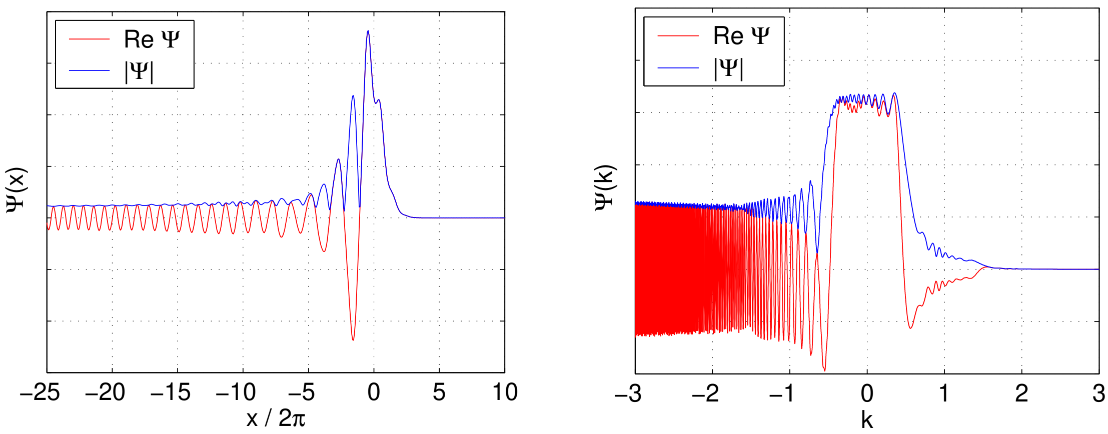

Abbildung 4.11: Wannier-Stark-Zustand $\Psi_{0,0}$ für die Parameter $\hbar = 3.3806$ und $F = 0.0661$ im Ortsraum (links) und im Impulsraum (rechts).

sogar exponentiell divergieren. Eine Wellenfunktion der Form (4.25), also eine Summe über Resonanzen, ist daher nicht normierbar.

Wie in [50] beschrieben, lässt sich das Problem der Normierung lösen, wenn man zu trunkierten Resonanzen übergeht. Diese sind definiert durch

$$\Psi_n^K(k) = \Theta(k+K)\Psi_n(k), \tag{4.40}$$

mit der Heaviside-Funktion $\Theta(k+K)$, die die Resonanzen bei $-K$ trunkiert. Ist $|K|$ groß genug, so ist die Zeitevolution dieser Zustände gegeben durch

$$\Psi_n^K(k,t) = \Theta(k+K+Ft/\hbar)\Psi_n(k,t). \tag{4.41}$$

Wenn der Träger des Anfangszustands im Impulsraum durch $|k| < |K|$ beschränkt ist, so können wir ihn in diese Basis zerlegen. Statt Gleichung (4.25) ist die Zeitentwicklung dieser Wellenfunktion dann gegeben durch

$$\psi(k,t) = \Theta(k+K+Ft/\hbar)\,\Psi_0(k,t)\,\widetilde{C}(k,t), \tag{4.42}$$

mit $\Psi_0(k,t) = \exp(-\mathrm{i}\mathcal{E}_0 t/\hbar)\Psi_0(k)$.

Im linearen Fall ist die Funktion $\widetilde{C}(k,t)$ für eine kohärente Anfangsverteilung $c_n \sim \exp(-n^2/(2\sigma)^2)$ eine Kammfunktion, wie im vorigen Abschnitt diskutiert. Im Ortsraum ergibt sich eine Reihe von Pulsen an den Punkten

$$x = x_0 - \frac{F}{2}(t + j\,T_B)^2, \tag{4.43}$$

mit $x_0 = E_0/F$ und $j \in \mathbb{Z}$. Diese Pulse werden also wie ein klassisches Teilchen im Stark-Feld beschleunigt, wie es im Experiment [5] beobachtet wird. Dies ist in Abbildung 4.12 für eine kohärente Anfangsverteilung mit $\sigma = 15/2$ illustriert. Die Wellenfunktion $|\psi(x,t)|^2$ ist dargestellt zu den Zeiten $t/T_B = 2.7$; 4.5; 6.4 und 9.1, in realen Zeiten entspricht dies gerade $t = 3$ ms, 5 ms, 7 ms und 10 ms (vgl. [5, 50]).

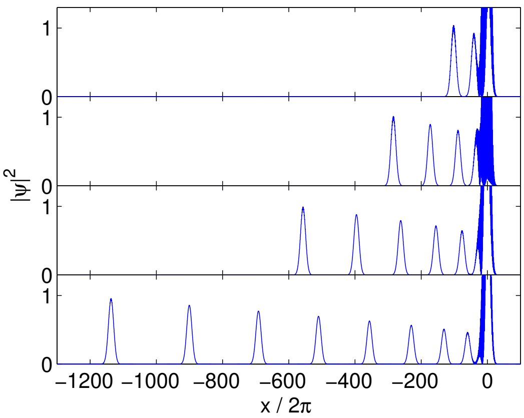

Abbildung 4.12: Zerfall der Wellenfunktion im Ortsraum für $g = 0$. Dargestellt ist $|\psi(x,t)|^2$ zu den Zeiten $t/T_B = 2.7$; 4.5; 6.4 und 9.1 (von oben nach unten).

Die Form der Pulse wird auch im Ortsraum näherungsweise durch die Funktion $\widetilde{C}$ beschrieben. Wie im vorigen Kapitel diskutiert, führt die Nichtlinearität g zu einer Verbreiterung und Verformung der Funktion $\widetilde{C}$ (vgl. Abbildung 4.8), was für hohe Feldstärken direkt am gepulsten Output beobachtbar ist.

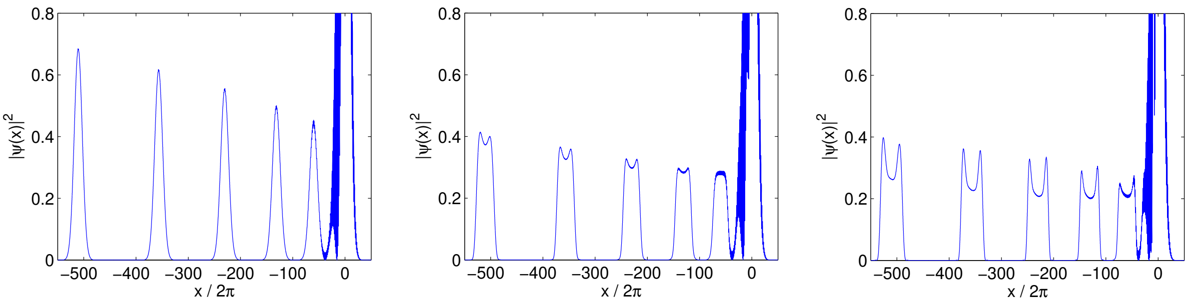

Abbildung 4.13: Gepulster Output für verschiedene Nichtlinearitäten $g = 0$; 5 und 10 (von links nach rechts). Dargestellt ist die Wellenfunktion $|\psi(x,t)|^2$ für $t = 9.1\,T_B$.

In Abbildung 4.13 ist die Wellenfunktion $|\psi(x,t)|^2$ zur Zeit $t = 9.1\,T_B$, wie sie sich aus einer vollen Wellenpaketpropagation ergibt, für drei verschiedene Nichtlinearitäten $g = 0$; 5 und 10 dargestellt. Man erkennt deutlich die Verbreiterung der Pulse und die Ausbildung der charakteristischen Form mit den zwei Maxima bei einem steigenden Wert von g.

In der oben diskutierten integrablen Näherung zeigen die Peaks der Funktion $\widetilde{C}(k,t)$ außerdem eine oszillierende Substruktur (vgl. Abbildung 4.9). Diese Oszillation ist in Abbildung 4.13 nicht zu sehen, da die Korrekturen zu dieser Näherung zu einer weiteren Dephasierung der Koeffizienten c_n führen, die die Substruktur der Pulse zerstört.

Kapitel 5

Das Delta-Potential

5.1 Einleitung

Nachdem wir in den vorigen Kapiteln die Dynamik eines Bose-Einstein-Kondensats diskutiert haben, betrachten wir jetzt stationäre Zustände. Diese Zustände erfüllen die *zeitunabhängige* nichtlineare Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) + g|\psi(x)|^2\right)\psi(x) = \mu\,\psi(x), \quad \mu \in \mathbb{R}. \tag{5.1}$$

Ihre Zeitentwicklung ist durch den Faktor $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t/\hbar}$ gegeben.

Wir beschränken uns weiterhin auf eine räumliche Dimension und betrachten zwei einfache, aber sehr instruktive Modellpotentiale, die analytisch lösbar sind. In diesem Kapitel diskutieren wir das einfache Delta-Potential

$$V(x) = \lambda\delta(x), \tag{5.2}$$

das eine sehr kurzreichweitige Wechselwirkung modelliert. Insbesondere interessiert uns dabei die Existenz von gebundenen Zuständen und der Übergang zu Streuzuständen. Eine Diskussion eines nichtlinearen Flusses für ein Delta-Potential findet sich in [81, 82]. Im nächsten Kapitel betrachten wir dann das Delta-Shell-Potential, ein instruktives Modellsystem für die Diskussion von Resonanzzuständen.

Um die Notation nicht zu überladen, verwenden wir jetzt Einheiten, in denen $\hbar = 1$ und $m = 1$ ist. Wir betrachten also die nichtlineare Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \lambda\delta(x) + g|\psi(x)|^2\right)\psi(x) = \mu\,\psi(x). \tag{5.3}$$

Mit der Skalierung $x = x'/|g|$, $\psi = \psi'\sqrt{|g|}$, $\lambda = \lambda'|g|$ und $\mu = \mu' g^2$, die die Norm der Wellenfunktion erhält, kann man den Parameter g in Gleichung (5.3) auf das Vorzeichen reduzieren. Daher fixieren wir die Stärke der Nichtlinearität mit Ausnahme von Abschnitt 5.4 auf $g = \pm 1$.

Die Lösungen von Gleichung (5.3) sind im Wesentlichen die der freien nichtlinearen Schrödingergleichung. Die Wellenfunktion selbst ist stetig, allerdings ist ihre erste Ableitung unstetig bei $x = 0$ aufgrund des Delta-Potentials:

$$\lim_{\epsilon \to 0+} \big(\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\big) = 2\lambda\psi(0). \tag{5.4}$$

Wie man leicht zeigt, ist diese Anschlussbedingung die Gleiche wie für die lineare Schrödingergleichung. Im linearen Fall $g = 0$ findet man für die Gleichung (5.3) mit $\lambda < 0$ genau einen gebundenen Zustand mit der Energie $E_0 = -\lambda^2/2$ und ein kontinuierliches Spektrum für $E > 0$. Die normierte Wellenfunktion des gebundenen Zustandes ist

$$\psi_0(x) = \sqrt{|\lambda|}\, \mathrm{e}^{\lambda|x|}\,. \tag{5.5}$$

Im Folgenden diskutieren wir Abweichungen von diesem linearen Fall aufgrund einer attraktiven oder repulsiven Nichtlinearität.

5.2 Attraktive Nichtlinearität

Im Fall einer attraktiven Nichtlinearität, $g = -1$, hat die nichtlineare Schrödingergleichung (5.3) für $\lambda = 0$ und $\mu < 0$ wohl bekannte Solitonenlösungen [83, 84],

$$\psi(x) = k\,\mathrm{sech}\big(k\,(x - x_0)\big)\ , \quad \text{mit} \quad k = \sqrt{-2\mu}\,. \tag{5.6}$$

Diese Lösungen werden helle Solitonen genannt, da sie ein Maximum bei x_0 aufweisen. Um nichtlineare gebundene Zustände, also normierbare Lösungen der Gleichung (5.3), zu finden, setzen wir für $x > 0$ und $x < 0$ Lösungen der Form (5.6) an und fügen diese bei $x = 0$ unter Beachtung der Bedingung (5.4) zusammen. Wie man leicht sieht, muss die Wellenfunktion $\psi(x)$ symmetrisch sein, sie ist daher gegeben durch den Ausdruck (5.6) für $x \geq 0$ und $\psi(x) = \psi(-x)$ sonst. Die Gleichung (5.4) ergibt dann

$$\tanh(kx_0) = \lambda/k\,. \tag{5.7}$$

Zusammen mit der Normierung der Wellenfunktion

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \big|\psi(x)\big|^2\,\mathrm{d}x = 2k^2 \int_0^{+\infty} \mathrm{sech}^2\big(k\,(x - x_0)\big)\,\mathrm{d}x \\ &= 2k\big(1 + \tanh(kx_0)\big)\,, \end{aligned} \tag{5.8}$$

ergibt dies

$$k = \tfrac{1}{2} - \lambda\ , \quad \text{also} \quad \mu = -\tfrac{1}{8}(2\lambda - 1)^2\,. \tag{5.9}$$

Wegen $|\tanh(kx_0)| < 1$ findet man eine Bedingung für die Existenz eines gebundenen Zustandes:

$$\lambda < \lambda_c = \tfrac{1}{4}\,. \tag{5.10}$$

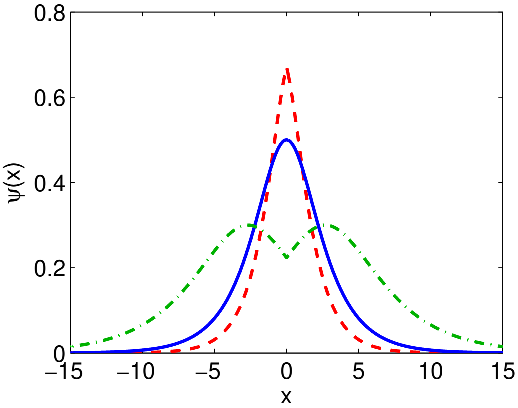

Abbildung 5.1: Wellenfunktion $\psi(x)$ gebundener Zustände der nichtlinearen Schrödingergleichung (attraktive Nichtlinearität, $g = -1$) für ein Delta-Potential $V(x) = \lambda\delta(x)$ mit $\lambda = -0.2$ (– – –), $\lambda = 0$ (—) und $\lambda = +0.2$ (– · –).

Ein gebundener Zustand existiert also nicht nur für jedes attraktive Delta-Potential, sondern auch für nicht zu starke repulsive Potentiale. Die Bindung kommt dann durch die attraktive Selbstwechselwirkung $-|\psi(x)|^2$ zustande, die ein nicht zu starkes externes repulsives Potential kompensieren kann.

In Abbildung 5.1 sind die Wellenfunktionen solcher gebundener Zustände für drei verschiedene Werte der Potentialstärke λ dargestellt. Für ein attraktives Delta-Potential ist x_0 negativ und die Wellenfunktion ist am Ort des Potentials um so mehr konzentriert, je kleiner λ ist. Ein repulsives Delta-Potential stößt die Wellenfunktion ab, x_0 ist positiv und $\psi(x)$ hat zwei Peaks bei $x = \pm x_0$, die sich von $x = 0$ entfernen, wenn λ erhöht wird. Für $\lambda \to \lambda_c$ besteht die Wellenfunktion aus zwei unendlich weit entfernten hellen Solitonen.

Es ist bemerkenswert, dass der gebundene Zustand bei einem negativen Wert des chemischen Potentials verschwindet:

$$\mu_c = -\tfrac{1}{8}(2\lambda_c - 1)^2 = -\tfrac{1}{32}\,. \tag{5.11}$$

Dies entspricht der Tatsache, dass die Wellenfunktion durch die interne Selbstwechselwirkung gebunden ist und nicht durch ein externes Potential, wie es für die lineare Schrödingergleichung der Fall wäre.

Für $\lambda > \lambda_c$, existiert kein gebundener Zustand, aber man findet periodische Lösungen. Diese sind gegeben durch die Jacobischen elliptischen Funktionen [83, 84]

$$\psi(x) = \frac{4\sqrt{p}K(p)}{L}\,\mathrm{cn}\left(4K(p)\frac{x - x_0}{L}\,\middle|\,p\right). \tag{5.12}$$

Dabei ist L die Periode, $p \in [0, 1]$ der Parameter der Jacobischen elliptischen Funktion cn und $K(p)$ das vollständige elliptische Integral erster Art (vgl. Anhang C). Das chemische Potential ergibt sich aus diesen Parametern gemäß der Gleichung

$$\mu = 8(1 - 2p)\,K^2(p)/L^2\,. \tag{5.13}$$

Diese periodischen Lösungen sind natürlich nicht normierbar, wir werden sie als Streuzustände bezeichnen. Die Streuzustände sind durch drei Parameter, das chemische Potential μ, die Periode L und die Verschiebung x_0, charakterisiert, müssen aber nur die Bedingung (5.4) erfüllen. Daher existieren für einen festen Wert der Potentialstärke λ eine Vielzahl von Lösungen, wobei das chemische Potential μ und die Periode L in gewissen Grenzen unabhängig gewählt werden können. Der Wert von x_0 ergibt sich dann aus der Bedingung (5.4).

Im Folgenden werden wir eine spezielle Klasse von Streuzuständen diskutieren, die stetig in die gebundenen Zustände übergehen, wenn λ unter den kritischen Wert λ_c sinkt. Dafür machen wir den Ansatz, dass μ und $\psi(x = 0)$ auch beim kritischen Wert λ_c stetig von der Stärke λ des Delta-Potentials abhängen. Weiterhin beschränken wir uns auf Lösungen, für die die funktionale Abhängigkeit dieselbe ist für $\lambda > \lambda_c$ und $\lambda < \lambda_c$. Für μ und $\psi(x = 0)$ setzen wir also Gleichung (5.9) und

$$\psi(0) = k \operatorname{sech}(\operatorname{arctanh}(\lambda/k)) \tag{5.14}$$

an. Man findet in der Tat Lösungen der Form (5.12), die diesen Ansatz erfüllen und der Bedingung (5.4) genügen. In Abbildung 5.2 ist solch eine Wellenfunktion für $\lambda = 0.26$ (blau), direkt oberhalb des kritischen Wertes $\lambda_c = 0.25$ im Vergleich mit einem gebundenen Zustand für $\lambda = 0.24$ (rot) dargestellt. In der Umgebung des Delta-Potentials bei $x = 0$ sehen die Wellenfunktionen sehr ähnlich aus und man schließt daraus, dass der Übergang von einem gebundenen Zustand in einen Streuzustand stetig ist. Der beobachtete Unterschied für $|x| > L$ verschwindet im Grenzfall $\lambda \searrow \lambda_c$, da die Periode L der Jacobischen elliptischen Lösung gegen unendlich geht.

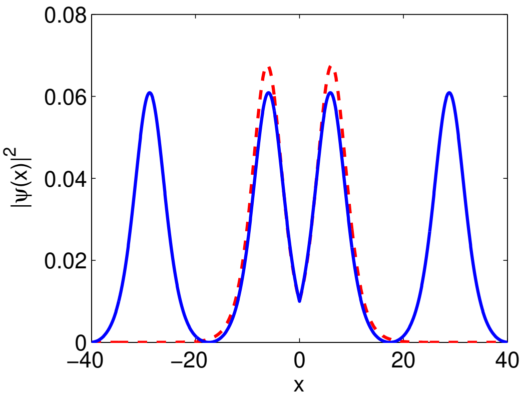

Abbildung 5.2: Wellenfunktion eines gebundenen Zustandes (−−, $\lambda = 0.24$) und eines Streuzustandes (—, $\lambda = 0.26$) für eine attraktive Nichtlinearität und ein repulsives Delta-Potential $V(x) = \lambda\delta(x)$ in der Nähe des kritischen Wertes $\lambda_c = 0.25$.

Diesen Übergang wollen wir detaillierter diskutieren. Dazu betrachten wir die Position x_0 des ersten Maximums von $|\psi(x)|^2$ als eine Funktion von λ. Diese ist gegeben durch

$$x_0(\lambda) = \frac{1}{1/2 - \lambda} \operatorname{arctanh}\left(\frac{\lambda}{1/2 - \lambda}\right) \tag{5.15}$$

für $\lambda < \lambda_c$ und durch die Lösung der Gleichungen

$$\begin{aligned}\psi(0) &= k\sqrt{\frac{p}{2p-1}}\,\mathrm{cn}\left(\frac{kx_0(\lambda)}{\sqrt{2p-1}}\,\middle|\,p\right) \quad \text{und}\\ \lambda\psi(0) &= k^2\frac{\sqrt{p}}{2p-1}\,\mathrm{sn}\left(\frac{kx_0(\lambda)}{\sqrt{2p-1}}\,\middle|\,p\right)\mathrm{dn}\left(\frac{kx_0(\lambda)}{\sqrt{2p-1}}\,\middle|\,p\right)\end{aligned} \tag{5.16}$$

für $\lambda > \lambda_c$, wobei k und $\psi(0)$ durch die Gleichungen (5.9) und (5.14) gegeben sind. Bei λ_c hat die Funktion $x_0(\lambda)$, die in Abbildung 5.3 auf der linken Seite dargestellt ist, eine logarithmische Singularität. Auf der rechten Seite von Abbildung 5.3 ist die Norm pro Periode $\int_{-L/2}^{L/2}|\psi(x)|^2\mathrm{d}x$ dargestellt, die am kritischen Punkt λ_c gegen eins geht, also gegen die Norm eines gebundenen Zustandes. Daher ist die Norm ebenfalls stetig.

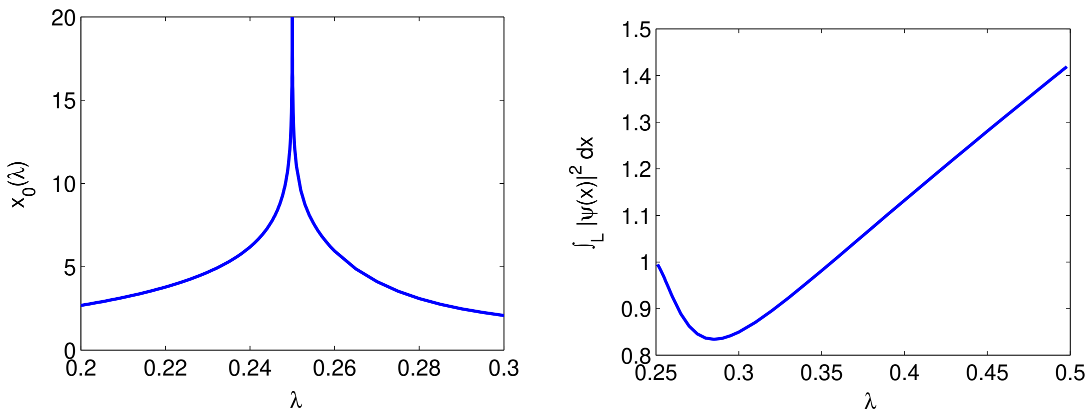

Abbildung 5.3: Übergang von einem gebundenen Zustand in einen Streuzustand. Links: Position $x_0(\lambda)$ des ersten Maximums der Wellenfunktion. Rechts: Norm pro Periode L. Man beachte, dass $L \to \infty$ für $\lambda \searrow \lambda_c$.

5.3 Repulsive Nichtlinearität

Im Fall einer repulsiven Nichtlinearität, $g = +1$, hat die nichtlineare Schrödingergleichung (5.3) für $\lambda = 0$ und $\mu > 0$ Solitonenlösungen der Form [84, 85]:

$$\psi = \sqrt{\mu}\,\tanh\left(\sqrt{\mu}(x - x_0)\right). \tag{5.17}$$

Diese Solitonen heißen dunkle Solitonen, da sie eine Nullstelle bei x_0 haben. Macht man einen solchen Ansatz separat für $x > 0$ und $x < 0$ und fügt diese Ansätze bei $x = 0$ unter der Bedingung (5.4) zusammen, so findet man $x_0 = 0$ unabhängig von λ. Interessanterweise hat die Wellenfunktion also eine Nullstelle bei $x = 0$ auch für ein attraktives Delta-Potential. Lösungen dieser Art sind allerdings nicht normierbar. Eine weitere mögliche Lösung ist

$$\psi(x) = k\,\mathrm{cosech}(k\,(x - x_0))\,, \quad \text{mit} \quad k = \sqrt{-2\mu}\,, \tag{5.18}$$

die normalerweise aufgrund ihrer unphysikalischen Singularität bei $x = x_0$ nicht betrachtet wird. Im Fall eines Delta-Potentials ergibt ein solcher Ansatz allerdings reguläre normierbare Lösungen, wie wir noch zeigen werden. Mit dem Ansatz (5.18) für $x > 0$ findet man, dass die Wellenfunktion symmetrisch sein muss, also $\psi(-x) = \psi(x)$. Außerdem muss x_0 negativ sein, da die Wellenfunktion sonst bei $x = x_0$ singulär wird. Für diesen Ansatz ergibt die Bedingung (5.4) dann

$$\tanh(kx_0) = k/\lambda\,. \tag{5.19}$$

Die Normierung der Wellenfunktion ergibt

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi(x)\right|^2 \mathrm{d}x = 2k^2 \int_0^{+\infty} \mathrm{cosech}^2\big(k\,(x - x_0)\big)\,\mathrm{d}x \\ &= -2k\big(1 + \coth(kx_0)\big)\,. \end{aligned} \tag{5.20}$$

Damit erhält man

$$k = -\tfrac{1}{2} - \lambda. \tag{5.21}$$

Diese Größe muss positiv sein, was die Bedingung

$$\lambda < \lambda_c = -\tfrac{1}{2}\,, \tag{5.22}$$

für die Existenz eines gebundenen Zustandes ergibt. Das bedeutet, dass das Delta-Potential hinreichend stark bindend sein muss, um die repulsive Wechselwirkung zu kompensieren.

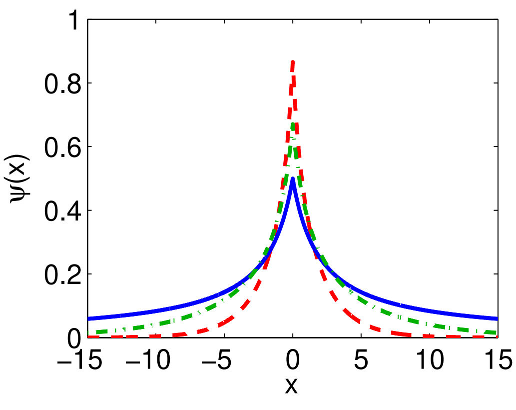

Abbildung 5.4: Wellenfunktionen $\psi(x)$ von gebundenen Zuständen der nichtlinearen Schrödingergleichung (repulsive Nichtlinearität, $g = +1$) für ein Delta-Potential $V(x) = \lambda\delta(x)$ und drei Werte der Potentialstärke $\lambda = -1$ (– – –), $\lambda = -0.7$ (– · –) und für den kritischen Wert $\lambda = -0.5$ (—) .

In Abbildung 5.4 sind solche gebundenen Zustände für verschiedene Werte der Potentialstärke λ dargestellt. Für abnehmende Werte von λ ist die Wellenfunktion am Ort des Delta-Potentials konzentriert. Im anderen Grenzfall $\lambda \nearrow \lambda_c$ findet man durch eine Taylorentwicklung des tanh und des sinh, dass gilt

$$x_0 \to x_c = 1/\lambda_c \quad \text{und} \quad \mu \to \mu_c = 0\,. \tag{5.23}$$

Die Wellenfunktion konvergiert gegen

$$\psi_c(x) = \frac{1}{|x| - x_c} = \frac{1}{|x| + 2}. \tag{5.24}$$

Diese Funktion ist ebenfalls in der Abbildung 5.4 dargestellt. Dieses Verhalten ist anders als im Fall einer attraktiven Nichtlinearität, wo die Solitonenpeaks am kritischen Wert λ_c gegen $\pm\infty$ verschwinden.

Für $\lambda > \lambda_c$ gibt es wiederum periodische Lösungen, die durch Jacobische elliptische Funktionen gegeben sind [84, 85]:

$$\psi(x) = \frac{4\sqrt{p}K(p)}{L}\,\mathrm{sn}\left(4K(p)\frac{x - x_0}{L}\,\middle|\, p\right). \tag{5.25}$$

Dabei bezeichnet L die Periode, $p \in [0, 1]$ den elliptischen Parameter und $K(p)$ das vollständige elliptische Integral erster Art (vgl. Anhang C). Das chemische Potential ist

$$\mu = 8(p + 1)\, K(p)^2/L^2. \tag{5.26}$$

Für einen festen Wert der Potentialstärke λ findet man wie im Fall einer attraktiven Nichtlinearität eine Vielzahl von Lösungen. Das chemische Potential μ und die Periode L können in gewissen Grenzen frei gewählt werden, allerdings gibt es periodische Lösungen nur für $\mu > 0$.

Weiterhin existiert eine untere Grenze für die Periode L. Aus Gleichung (5.26) folgt

$$L = \sqrt{\frac{8(p + 1)}{\mu}}\, K(p) \geq \frac{2\pi}{\sqrt{2\mu}}\,. \tag{5.27}$$

Im Grenzfall $\lambda \searrow \lambda_c$ und $\mu \searrow 0$ geht die Periode L der Wellenfunktion gegen unendlich und die Wellenfunktion ist nicht mehr periodisch. Man kann aber keinen stetigen Übergang zu dem gebundenen Zustand (5.18) finden. Für $\lambda \nearrow \lambda_c$ gibt es den gebundenen Zustand (5.24) mit $\psi(0) = 1/2$ und $\mu = 0$. Im Gegensatz dazu findet man für die periodischen Lösungen (5.25) mit Gleichung (5.26), dass $\psi(0) \to 0$ für $\mu \searrow 0$. Vielmehr geht die elliptische Funktion sn stetig in den tanh über, wenn der elliptische Parameter p gegen eins geht [86].

Weiterhin existieren die Jacobischen elliptischen Funktionen ds und cs, die stetig in den cosech übergehen, wenn der elliptische Parameter p gegen eins geht [86]. Diese Funktionen haben aber Pole an den Nullstellen der elliptischen Funktion sn und sind daher unphysikalisch.

5.4 Variation der Nichtlinearität

In diesem Abschnitt wollen wir kurz die Abhängigkeit der Lösungen der nichtlinearen Schrödingergleichung in einem attraktiven Delta-Potential von der Stärke der Selbstwechselwirkung diskutieren. Daher variieren wir jetzt die Stärke der Nichtlinearität g.

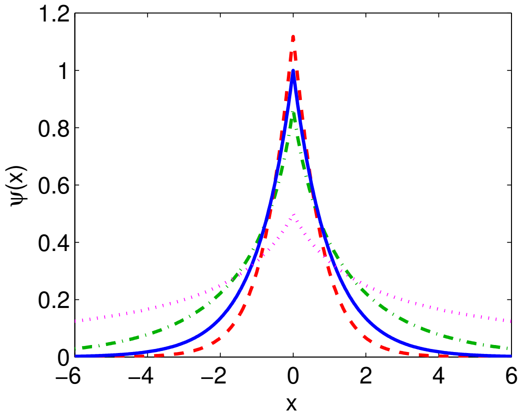

Abbildung 5.5: Wellenfunktionen $\psi(x)$ gebundener Zustände der nichtlinearen Schrödingergleichung für ein attraktives Delta-Potential $V(x) = -\delta(x)$ und verschiedene Werte der Nichtlinearität: $g = -1$ (−−), $g = 0$ (—), $g = +1$ (− · −) und $g = g_c = 2$ (· · ·) .

Die Eigenschaften gebundener Zustände haben wir bereits in den vorigen Abschnitten hergeleitet. Wellenfunktionen solcher Zustände sind in Abbildung 5.5 für vier verschiedene Werte der Nichtlinearität $g = -1,\, 0,\, +1,\, +2$ und für eine Potentialstärke $\lambda = -1$ dargestellt. Mit zunehmender Nichtlinearität g ist die Wellenfunktion weniger am Ort des Delta-Potentials konzentriert.

Sowohl für eine attraktive wie für eine repulsive Nichtlinearität ist das chemische Potential gleich

$$\mu = -\frac{1}{8}\,(2\lambda + g)^2\ , \tag{5.28}$$

was direkt aus der Bedingung (5.4) und der Normierung folgt. An einem kritischen Wert der Nichtlinearität g wird das chemische Potential μ null und oberhalb dieses Wertes gibt es keinen gebundenen Zustand mehr. Die Bedingung für die Existenz eines gebundenen Zustandes ist dieselbe wie im Abschnitt 5.3. Schreibt man diese Bedingung für die Stärke der Nichtlinearität g um, so findet man

$$g < g_c = -2\lambda\,. \tag{5.29}$$

Die Situation für $g \nearrow g_c$ ist ähnlich wie im Fall einer festen repulsiven Nichtlinearität g und $\lambda \nearrow \lambda_c$, wie wir es im vorigen Abschnitt diskutiert haben. Für den kritischen Wert von g ist die Wellenfunktion

$$\psi_c(x) = \frac{\sqrt{-\lambda}}{|x| - 2\lambda}\,. \tag{5.30}$$

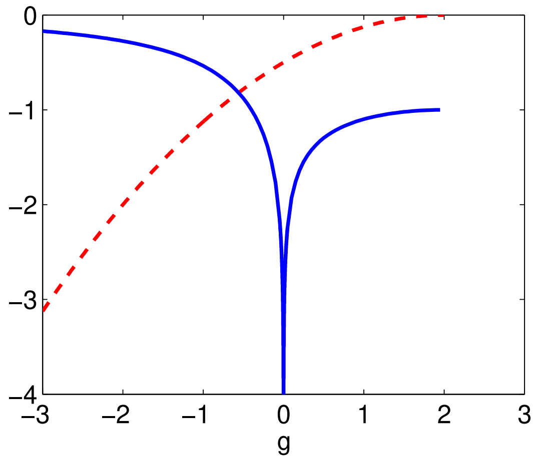

Abbildung 5.6: Abhängigkeit des chemischen Potentials μ (−−) und des Parameters x_0 (—) von der Nichtlinearität $g \leq g_c = 2$ für den gebundenen Zustand der nichtlinearen Schrödingergleichung für ein attraktives Delta-Potential $V(x) = -\delta(x)$.

Dies ist in Abbildung 5.6 illustriert, wo x_0 und μ als Funktion von g aufgetragen sind. Die Position x_0 ist gegeben durch (5.7) für $g < 0$ und (5.19) für $g > 0$, allerdings mit $k = -\lambda - g/2$.

Für $g = 0$ findet man den wohl bekannten Wert $\mu = -\lambda^2/2$ und die Funktion $x_0(g)$ hat eine logarithmische Singularität. Trotzdem geht die Wellenfunktion $\psi(x)$ für eine attraktive wie eine repulsive Nichtlinearität stetig in den bekannten gebundenen Zustand (5.5) der linearen Schrödingergleichung über.

Für $g \to g_c = -2\lambda$ geht das chemische Potential μ gegen null und x_0 nimmt den Wert $1/\lambda$ an. Ein ähnliches Verschwinden des gebundenen Zustandes bei der Erhöhung von g über einen kritischen Wert g_c wurde von Moiseyev *et al.* in [87] für ein glattes Potential $V(x)$ beobachtet. In diesem Fall geht der gebundene Zustand in einen resonanzartigen Zustand über.

Kapitel 6

Das Delta-Shell-Potential

6.1 Einleitung

In diesem Kapitel diskutieren wir ein weiteres Modellpotential, das ein reichhaltigeres Spektrum zeigt. Im linearen Fall zeigt das attraktive Delta-Shell-Potential einen Übergang von einem gebundenen zu einem anti-gebundenen oder virtuellen Zustand, das repulsive Potential zeigt Resonanzen. Eine Diskussion des linearen dreidimensionalen Delta-Shell-Potentials findet sich in [88]. Wir beschränken uns hier auf den eindimensionalen Fall

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{für } x < 0 \\ \lambda\delta(x-a) & \text{für } x > 0 \end{cases} \tag{6.1}$$

mit $a > 0$. In drei Dimensionen kann man sich das Potential $V(\mathbf{r}) = \lambda\delta(|\mathbf{r}| - a)$ als das einfachste Modell eines Neutrons vorstellen, das mit der Schale eines Kerns wechselwirkt. Das eindimensionale Potential beschreibt dann gerade den s-Wellen-Anteil des Systems. Das Delta-Shell-Potential wird als einfaches, aber sehr instruktives Modellpotential in der Literatur ausführlich diskutiert [89–91].

Wir rekapitulieren zunächst die grundlegenden Eigenschaften des linearen Problems ($g = 0$), um dann den Fall einer nichtverschwindenden Nichtlinearität zu diskutieren und mit dem linearen Fall zu vergleichen. Wie im vorigen Kapitel setzen wir $\hbar = 1$ und $m = 1$.

6.2 Lineare Schrödingergleichung

Wir können wiederum einen Ansatz für die Wellenfunktion für $x < a$ und $x > a$ machen und an der Stelle des Potentials zusammenfügen. Im *linearen Fall* erweist es sich allerdings als einfacher, die Schrödinger-Gleichung in folgende Integralgleichung umzuschreiben

$$\psi_k(x) = \Psi_{k,0}(x) + 2\int_0^x \mathrm{d}x' \Psi_k(x') V(x') G_k(x, x'), \tag{6.2}$$

wobei k die Wellenzahl ist und die Energie gemäß $E = k^2/2$ bestimmt. $\psi_{k,0}$ ist die Lösung der freien Schrödingergleichung, die in diesem Fall gegeben ist als

$$\psi_{k,0}(x) = \sin(kx), \tag{6.3}$$

da $\psi(0) \stackrel{!}{=} 0$. $G_k(x, x')$ ist die freie Greensche Funktion

$$G_k(x, x') = \frac{1}{k} \sin(k(x - x')) \operatorname{sgn}(x - x'). \tag{6.4}$$

Einsetzen des Potentials (6.1) und Lösen der Integralgleichung ergibt

$$\psi_k(x) = \begin{cases} \sin(kx) & \text{für } x < a \\ \sin(kx) + \frac{2\lambda}{k} \sin(ka) \sin(k(x-a)) & \text{für } x > a. \end{cases} \tag{6.5}$$

Umschreiben in ein- und auslaufende Wellen für $x > a$,

$$\psi_k(x) = c_- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} + c_+ \mathrm{e}^{+\mathrm{i}kx}, \tag{6.6}$$

ergibt nach einer kurzen Rechnung

$$c_\pm = \frac{\lambda}{2k} \left(\mathrm{e}^{\mp 2\mathrm{i}ka} - 1 \right) \pm \frac{1}{2\mathrm{i}}. \tag{6.7}$$

Für $k \in \mathbb{R}$ gilt $c_+^* = c_-$. Man schreibt

$$\begin{aligned} c_+ &= -\mathrm{i}c\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta} \\ c_- &= \mathrm{i}c\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\delta} \end{aligned}$$

mit der Phasenverschiebung δ. Damit folgt

$$\tan \delta(k) = \frac{\cos(2ka) - 1}{\sin(2ka) + k/\lambda}. \tag{6.8}$$

Die S-Matrix ergibt sich aus der Phasenverschiebung gemäß [12]

$$S(k) = \frac{1 + \mathrm{i} \tan \delta(k)}{1 - \mathrm{i} \tan \delta(k)}. \tag{6.9}$$

Diesen Ausdruck für die S-Matrix erhält man auch für $k \notin \mathbb{R}$ durch analytische Fortsetzung.

6.2.1 Attraktives Potential

Unter bestimmten Bedingungen existiert ein gebundener Zustand im attraktiven Delta-Shell-Potential, also für $\lambda < 0$. Für ein Potential mit endlicher Reichweite, wie das Delta-Shell-Potential, entspricht ein gebundener Zustand einem Pol der S-Matrix $S(k)$ auf der positiven imaginären Achse [12]. Man findet diese Pole, indem man den Nenner in Gleichung (6.9) null setzt

$$\begin{aligned} & \tan\delta(k) = -\mathrm{i} \\ \Rightarrow \quad & \frac{\cos(2ka)-1}{\sin(2ka)+k/\lambda} = -\mathrm{i}. \end{aligned} \tag{6.10}$$

Wir definieren $k = \mathrm{i}\kappa$ mit $\kappa \in \mathbb{R}^+$. Damit ergibt sich ein gebundener Zustand für

$$\mathrm{e}^{-2\kappa a} = 1 + \frac{\kappa}{\lambda}. \tag{6.11}$$

Die Gleichung hat eine Lösung in $\mathbb{R}^+$ falls

$$\lambda a < -\frac{1}{2}. \tag{6.12}$$

Diese Bedingung kann man einfach verstehen: Das Delta-Shell-Potential muss hinreichend stark bindend sein, um einen gebundenen Zustand zu unterstützen. Falls die Bedingung (6.11) erfüllt ist, gilt $c_- = 0$ und die Wellenfunktion verschwindet exponentiell für $x > a$:

$$\psi_\kappa(x) = c_+\mathrm{e}^{-\kappa x}. \tag{6.13}$$

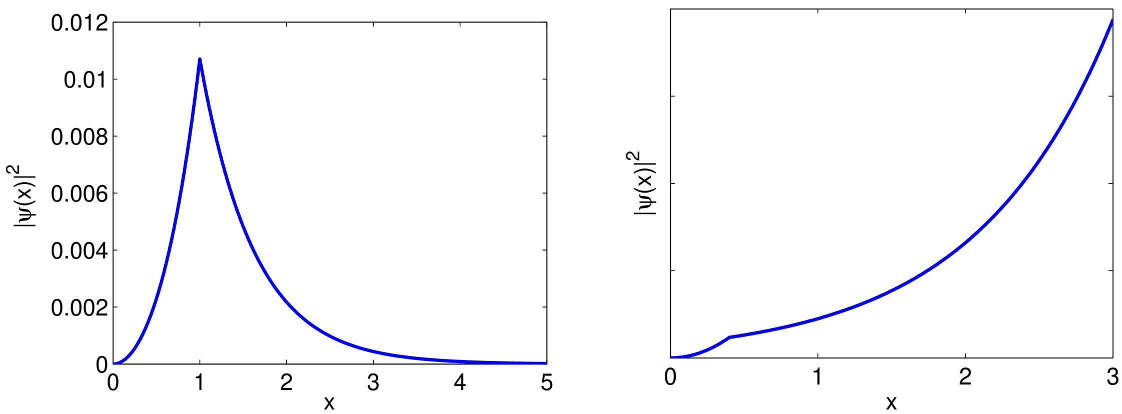

Abbildung 6.1: Wellenfunktion $|\psi(x)|^2$ eines gebundenen (links, $a = 1$) und eines antigebundenen (rechts, $a = 0.4$) Zustandes im Delta-Shell-Potential der Stärke $\lambda = -1$.

Wir betrachten als Beispiel $\lambda = -1$ und $a = 1$. Für diese Parameter findet man einen gebundenen Zustand für $k = 0.797\mathrm{i}$ und $E = -0.318$. Die Wellenfunktion dieses gebundenen Zustandes ist in Abbildung 6.1 links dargestellt.

Verringert man die Position a des Delta-Shell-Potentials, so dass die Bedingung (6.11) nicht mehr erfüllt ist, geht der gebundene Zustand in einen anti-gebundenen Zustand über. Ein anti-gebundener Zustand ist ebenfalls durch einen Pol der S-Matrix charakterisiert, allerdings auf der negativen imaginären Achse. Die Wellenzahl ist also weiterhin rein

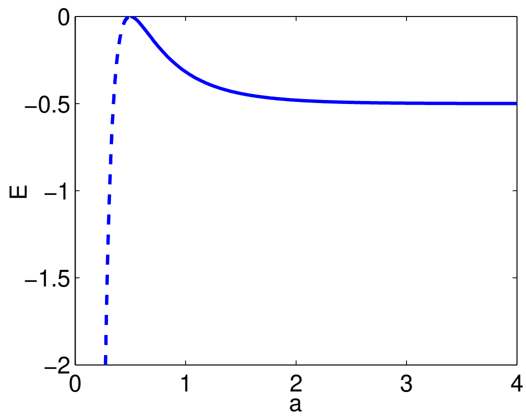

Abbildung 6.2: Übergang eines gebundenen Zustandes in einen anti-gebundenen Zustand bei der Variation der Position a des Delta-Shell-Potentials.

imaginär, die Wellenfunktion wächst für $x > a$ exponentiell an. Die Energie eines anti-gebundenen Zustandes ist wie die eines gebundenen Zustandes rein reell und negativ [12]. In Abbildung 6.1 ist rechts die Wellenfunktion für $\lambda = -1$ und $a = 0.4$ dargestellt. Man findet $k = -0.539\mathrm{i}$ und $E = -0.145$.
Der Übergang von einem gebundenen in einen anti-gebundenen Zustand bei der Variation der Position a ist in Abbildung 6.2 dargestellt. Für die kritische Distanz $a_c = -1/(2\lambda)$ ist die Energie $E = 0$. Für $a \to \infty$ entspricht das Delta-Shell-Potential einem einfachen Delta-Potential und für die Energie gilt $E \to \lambda^2/2$.

6.2.2 Repulsives Potential

In einem repulsiven Potential $\lambda > 0$ gibt es klarerweise keine gebundenen Zustände, allerdings existieren Resonanz-Zustände. Resonanzen können definiert werden über eine schnelle Änderung des Phasenunterschiedes $\delta(k)$ um π (siehe [12], Kapitel 13). Für Potentiale mit einer endlichen Reichweite entspricht dies wiederum einem Pol der S-Matrix $S(k)$. Diese Pole liegen allerdings in der unteren Halbebene mit einem positiven Realteil. Je näher diese Pole an der realen Achse liegen, desto schärfer sind die Resonanzen. Die Energie

$$\mathcal{E} = -k^2/2 = E - \mathrm{i}\Gamma/2 \tag{6.14}$$

ist ebenfalls komplex, wobei Γ die Zerfallsrate des Resonanzzustandes ist.

Resonanzen ergeben sich daher aus der gleichen Bedingung wie gebundene Zustände für ein attraktives Potential

$$\mathrm{e}^{2\mathrm{i}ka} = 1 - \frac{\mathrm{i}k}{\lambda}, \tag{6.15}$$

jetzt allerdings mit $k \in \mathbb{R}^+ - \mathrm{i}\mathbb{R}^+$.

Für sehr stabile Resonanzen ist der Imaginärteil der Wellenzahl k klein gegen den Realteil. In diesem Fall kann man den Realteil der Resonanzbedingung (6.15) als $\cos(2ka) \approx 1$

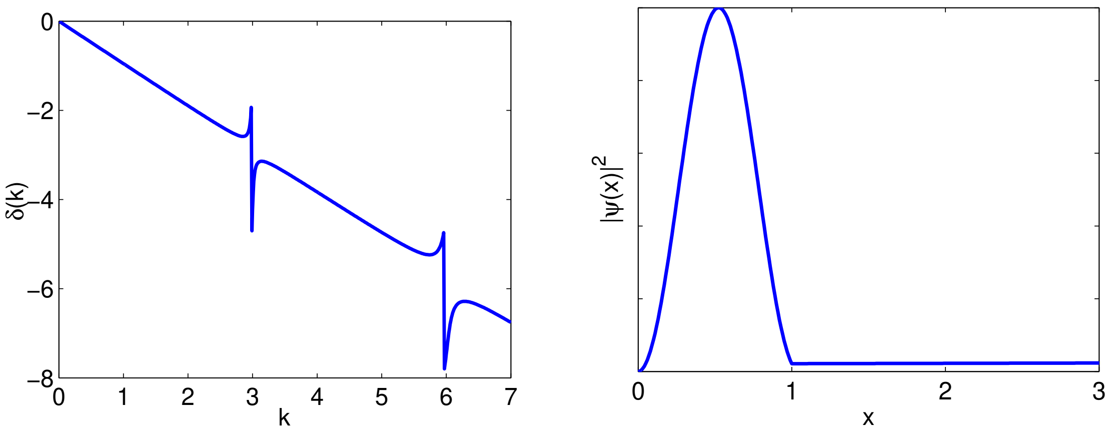

Abbildung 6.3: Phasenverschiebung $\delta(k)$ (links) und Wellenfunktion der stabilsten Resonanz (rechts) für das Delta-Shell-Potential mit $a = 1$ und $\lambda = 10$.

annähern und erhält eine Abschätzung für den Realteil der Wellenzahl k der Resonanzen

$$k \approx \frac{\pi n}{a}, \quad n \in \mathbb{N}\,. \tag{6.16}$$

Diese Abschätzung ist anschaulich verständlich, wenn man die Wellenfunktion eines Resonanzzustandes wie in Abbildung 6.3 betrachtet. Die Wellenfunktion $|\psi(x)|^2$ ist für $x < a$ resonant überhöht. Um die Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = a$ zu garantieren, muss der Abstand a ungefähr ein Vielfaches der halben Wellenlänge sein. Man beachte jedoch, dass die Wellenfunktion $|\psi(x)|^2$ in Abbildung 6.3 für große x wieder ansteigt und für $x \to \infty$ exponentiell divergiert.

Als Beispiel betrachten wir ein repulsives Potential mit $\lambda = 10$ und $a = 1$. Die stabilste Resonanz, also die Resonanz mit der kleinsten Zerfallsrate, findet man für $k = 2.996 - 0.021\mathrm{i}$ und $\mathcal{E} = 4.487 - 0.061\mathrm{i}$. In Abbildung 6.3 ist die Wellenfunktion dieser Resonanz, sowie der Phasenunterschied $\delta(k)$ des Delta-Shell-Potentials in Abhängigkeit der Wellenzahl k (vgl. Gleichung (6.8)) dargestellt. Diese Größe ist für rein reelle Wellenzahlen k dargestellt, so dass man natürlich keine Resonanz direkt trifft. Man erkennt trotzdem deutlich die schnelle Phasenänderung in der Nähe der Resonanzen.

In Abbildung 6.4 ist die Abhängigkeit der Energie der stabilsten Resonanz von der Position a des Delta-Shell-Potentials für eine feste Stärke $\lambda = 10$ dargestellt. Für $a \to 0$ divergieren sowohl der Realteil der Energie E als auch die Zerfallsrate Γ. Die Abhängigkeit des Realteils der Energie von a ist mit der Abschätzung (6.16) direkt verständlich.

6.3 Nichtlineare Schrödingergleichung mit einem repulsiven Potential

Jetzt betrachten wir wieder die nichtlineare Schrödingergleichung

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) + g|\psi|^2\right)\psi = \mu\psi. \tag{6.17}$$

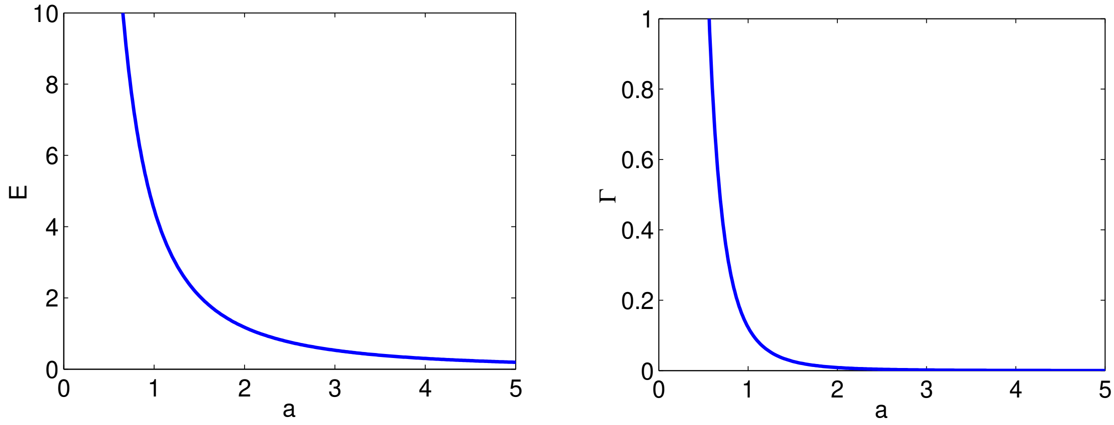

Abbildung 6.4: Realteil der Energie (links) und Zerfallsrate Γ (rechts) für die stabilste Resonanz eines Delta-Shell-Potentials der Stärke $\lambda = 10$.

Im vorigen Kapitel haben wir die Eigenschaften von gebundenen Zuständen in einem einfachen Delta-Potential bereits ausführlich diskutiert. Wir beschränken uns daher nun auf die Diskussion des *repulsiven* Delta-Shell-Potentials, also auf das Potential (6.1) mit $\lambda > 0$. Für dieses Potential ergaben sich im linearen Fall Resonanzzustände, die wir jetzt auch im nichtlinearen Fall charakterisieren und mit dem linearen Fall vergleichen wollen. Allerdings ist im nichtlinearen Fall die Definition einer Resonanz schwierig. Eine Zerlegung in ein- und auslaufende Wellen und somit die Definition einer Phasenverschiebung δ ist nicht möglich.

Eine Möglichkeit zur Berechnung und Charakterisierung von Resonanzen besteht in der Methode des *exterior complex scaling*. Dieses Verfahren wurde zur numerischen Berechnung von Resonanzenergien im linearen Fall entwickelt und ist mittlerweile eine Standardtechnik (siehe z.B. [92]). Das Verfahren kann aber auch auf die nichtlineare Schrödingergleichung angewendet werden [87, 93].

Stattdessen suchen wir in dieser Arbeit nach analytischen Lösungen und werden dieses Verfahren daher nicht anwenden. Wie im vorigen Kapitel bereits angedeutet, ist die allgemeine *relle* Lösung der freien nichtlinearen Schrödingergleichung explizit durch eine Jacobische elliptische Funktion gegeben (vgl. Anhang C). Diese Lösungen werden wir wiederum bei $x = a$ geeignet anschließen, um die Lösungen im Delta-Shell-Potential zu finden. Das chemische Potential einer solchen Lösung ist reell, wir können eine Resonanz also weder durch eine komplexe Eigenenergie, noch durch die Phasenverschiebung definieren. Wir wollen daher im Folgenden unter einer Resonanz einen Zustand verstehen, dessen Amplitude im Bereich des Potentials, d.h. für $x < a$, resonant überhöht ist.

An dieser Stelle wollen wir noch kurz auf die Zeitentwicklung solcher Resonanzen der nichtlinearen Schrödingergleichung eingehen. Im Falle eines komplexen chemischen Potentials $\mu = \mu_r - \mathrm{i}\Gamma/2$ erfüllen die Zustände

$$\psi(x,t) = \exp(-\mathrm{i}\mu t)\psi(x) \tag{6.18}$$

nicht die zeitabhängige nichtlineare Schrödingergleichung, da die Norm dieser Zustände nicht konstant ist. Man kann sich behelfen, indem man einen zusätzlichen Quellterm einbaut oder die Zustände (6.18) nur als eine adiabatische Näherung betrachtet [93].

Im Gegensatz dazu erfüllen die Zustände (6.18) mit einem rellen chemischen Potential μ, die wir in dieser Arbeit diskutieren, zwar die zeitabhängige nichtlineare Schrödingergleichung, es findet aber *kein* Zerfall statt. Wie wir sehen werden, ist es ebenfalls nicht möglich, eine Breite der Resonanzen zu definieren. In Fall reller μ muss man sich daher behelfen, wenn man eine Zerfallsrate Γ definieren will. Eine Möglichkeit ist es, die Zeitentwicklung eines anfänglich im Wechselwirkungsgebiet $x \leq a$ lokalisierten Wellenpaketes zu untersuchen. Man erwartet eine deutlich erhöhte Verweildauer im Wechselwirkungsbereich, wenn das Wellenpaket für $x < a$ einer Resonanzwellenfunktion entspricht. Des weiteren werden wir sehen, dass eine resonante Wellenfunktion für $x > a$ einer Lösung der linearen Schrödingergleichung sehr ähnlich ist ($p_r \to 0$, siehe unten). Man könnte also die nichtlineare Wechselwirkung für $x > a$ vernachlässigen und hätte damit wieder die lineare Streutheorie zur Verfügung. Beide Ansätze sind Gegenstand weiterer Untersuchungen. Wir werden in dieser Arbeit nicht darauf eingehen.

6.3.1 Repulsive Nichtlinearität: Resonanzen

Wir diskutieren zunächst den Fall der nichtlinearen Schrödingergleichung mit einer repulsiven, also positiven Nichtlinearität. Wie im vorigen Kapitel fixieren wir die Stärke dieser Nichtlinearität auf $g = +1$, weiterhin setzen wir für die Stärke des Delta-Shell-Potentials $\lambda = +10$ an.

Die nicht-singulären Lösungen der freien nichtlinearen Schrödingergleichung mit einer positiven Nichtlinearität sind gegeben durch die Jacobische elliptische Funktion [84, 85]

$$\psi(x) = A \,\mathrm{sn}\left(4K(p)\frac{x + x_0}{L}\middle| p\right) \tag{6.19}$$

mit

$$A^2 = \frac{16\, p\, K(p)^2}{L^2} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{8(p+1)\, K(p)^2}{L^2}. \tag{6.20}$$

Dabei ist L die Periodizität der elliptischen Funktion und $p \in [0, 1]$ bezeichnet den elliptischen Parameter. $K(p)$ bezeichnet das vollständige elliptische Integral erster Art (vgl. Anhang C).

Um nun Lösungen im Delta-Shell-Potential zu finden, machen wir für die Wellenfunktion links ($x < a$) und rechts ($x > a$) vom Potential jeweils einen Ansatz

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_l(x) = A_l \,\mathrm{sn}\left(4K(p_l)\frac{x}{L_l}\middle| p_l\right) & \text{für } x < a \\ \psi_r(x) = A_r \,\mathrm{sn}\left(4K(p_r)\frac{x+x_0}{L_r}\middle| p_r\right) & \text{für } x > a, \end{cases} \tag{6.21}$$

die wiederum bei $x = a$ geeignet angeschlossen werden. Die Wellenfunktion muss stetig sein, während die erste Ableitung gemäß Gleichung (5.4) unstetig ist. Die Amplituden

$A_{l,r}$ und die Perioden $L_{l,r}$ hängen gemäß Gleichung (6.20) vom chemischen Potential μ und von den elliptischen Parametern $p_{l,r}$ ab. Es gibt selbstverständlich nur einen Wert für das chemische Potential μ. Die Amplitude A, der Parameter p und die Periodenlänge L können aber für $x < a$ und $x > a$ sehr wohl unterschiedlich sein. Wie bereits dargestellt charakterisieren wir Resonanzen durch eine resonante Überhöhung der Wellenfunktion für $x < a$, also durch ein Maximum im Verhältnis A_l/A_r. Dieses Verhältnis kann man direkt durch die elliptischen Parameter ausdrücken

$$\frac{A_l}{A_r} = \left[\frac{p_l(p_r+1)}{(p_l+1)p_r}\right]^{1/2} . \tag{6.22}$$

Es ist monoton steigend in p_l und monoton fallend in p_r und divergiert für $p_r \to 0$. Weiterhin gilt

$$0.5 \leq \frac{(A_l/A_r)^2}{p_l/p_r} \leq 2. \tag{6.23}$$

Eine resonante Überhöhung der Amplitude $A_l \gg A_r$ erfordert daher $p_l \gg p_r$.

Die Bedingung $\psi(0) = 0$ ist durch den Ansatz automatisch erfüllt. Es verbleiben die Anschlussbedingungen für die Wellenfunktion und ihre Ableitungen bei $x = a$:

$$\begin{aligned} \text{I.} \qquad A_l \,\mathrm{sn}(u_l|p_l) &= A_r \,\mathrm{sn}(u_r|p_r) \\ \text{II.} \quad 2\lambda A_l \,\mathrm{sn}(u_l|p_l) &= \frac{4A_rK_r}{L_r}\mathrm{cn}(u_r|p_r)\mathrm{dn}(u_r|p_r) \\ &\quad -\frac{4A_lK_l}{L_l}\mathrm{cn}(u_l|p_l)\mathrm{dn}(u_l|p_l), \end{aligned} \tag{6.24}$$

wobei die Abkürzungen $u_l = 4K(p_l)a/L_l$ und $u_r = 4K(p_r)(a + x_0)/L_r$ benutzt wurden.

Falls $|A_l/A_r \mathrm{sn}(u_l|p_l)| \leq 1$, kann die erste Bedingung immer durch eine geeignete Wahl von x_0, also der ,,Phasenverschiebung" beider Wellen erreicht werden. Setzt man die erste Bedingung in die zweite ein und nutzt die Additionstheoreme der Jacobischen elliptischen Funktionen (siehe Anhang C), so ergibt sich die Bedingung

$$\begin{aligned} &\frac{2\lambda^2}{\mu}\frac{p_l}{p_l+1}\mathrm{sn}^2(u_l|p_l) + \frac{p_l}{(p_l+1)^{3/2}}\frac{4\lambda}{\sqrt{2\mu}}\mathrm{cn}(u_l|p_l)\mathrm{dn}(u_l|p_l)\mathrm{sn}(u_l|p_l) \\ &= \quad \frac{p_r}{(p_r+1)^2} - \frac{p_l}{(p_l+1)^2} . \end{aligned} \tag{6.25}$$

Bevor wir zu konkreten Ergebnissen kommen, wollen wir uns zunächst einige Sachverhalte klarmachen. Die Energie E_{lin} ist im linearen Fall durch die Wellenlänge L gemäß

$$E_{\mathrm{lin}} = \frac{k^2}{2} = \frac{2\pi^2}{L^2}$$

gegeben. Im Fall einer repulsiven Wechselwirkung ist der Zusammenhang zwischen dem chemischen Potential μ und der Periode L stattdessen durch Gleichung (6.20) bestimmt.

Dabei wächst das elliptische Integral $K(p)$ monoton mit dem elliptischen Parameter p, es ist $K(0) = \pi/2$ und $K(p) \to \infty$ für $p \to 1$. Es gilt also unabhängig von p

$$\mu \geq \frac{2\pi^2}{L^2}. \tag{6.26}$$

Wie bereits angedeutet, findet man Zustände mit einer resonant überhöhten Amplitude für $p_l \gg p_r$, im Extremfall also für $p_l \lesssim 1$ und $p_r \gtrsim 0$. Ein Wert $p_r \gtrsim 0$ des elliptischen Parameters bedeutet, dass die Wellenfunktion für $x > a$ sehr ähnlich zur Lösung der linearen Schrödingergleichung ist, die sich im Grenzfall $p \to 0$ ergibt. Es ist $\mu \gtrsim 2\pi^2/L_r^2$.

Um die Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = a$ auch für eine resonant überhöhte Amplitude $A_l \gg A_r$ zu erfüllen, muss $\mathrm{sn}(u_l|p_l) \ll 1$ gelten. Als Bedingung für eine Resonanz erhalten wir also

$$L_l \approx \frac{2a}{n}, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{6.27}$$

Diese Bedingung ist ganz analog zur Gleichung (6.16) für den linearen Fall.

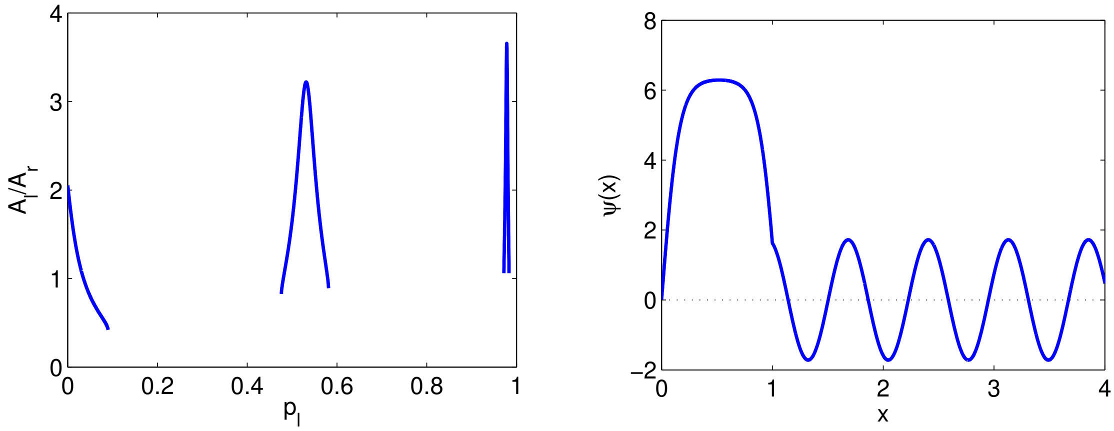

Abbildung 6.5: Links: Verhältnis der Amplituden A_l/A_r für $\mu = 40$ für ein Delta-Shell-Potential mit $a = 1$ und $\lambda = 10$. Die Maxima des Amplituden-Verhältnisses werden als Resonanzen identifiziert. Rechts: Wellenfunktion $\psi(x)$ für $p_l = 0.9782$. Dies entspricht dem Maximum von A_l/A_r in Abhängigkeit von p_l.

Ist μ gegeben, so sind die verbleibenden drei freien Parameter (p_l, p_r und x_0) bestimmt durch die zwei Bedingungen in Gleichung (6.24) und durch die Bedingung, dass A_l/A_r maximal ist. Zur numerischen Berechnung von Resonanzzuständen gehen wir daher folgendermaßen vor: Für einen festen Wert von μ wird für ein Raster von Werten für $p_l \in [0, 1]$ die Bedingung (6.25) ausgewertet, i.e. p_r berechnet. Diese Bedingung ist nicht für alle Werte von p_l erfüllbar, sondern immer nur auf gewissen Intervallen. Für die so bestimmten Werte von p_l und p_r wird das Verhältnis A_l/A_r gemäß Gleichung (6.22) ermittelt, wie es in Abbildung 6.5 für ein Beispiel ($\mu = 40$) dargestellt ist. Die lokalen Maxima des Verhältnisses A_l/A_r identifizieren wir als Resonanzen, für diese Werte wird anschließend noch die Verschiebung x_0 aus der ersten Bedingung in Gleichung (6.24) berechnet.

Jetzt betrachten wir die Abhängigkeit der so gefundenen Resonanzen vom chemischen Potential μ. Dazu ist in Abbildung 6.6 das Verhältnis der Amplituden A_l/A_r und die Phasenverschiebung $\delta = 2\pi x_0/L_r$ der Lösungen für $x < a$ und $x > a$ aufgetragen.

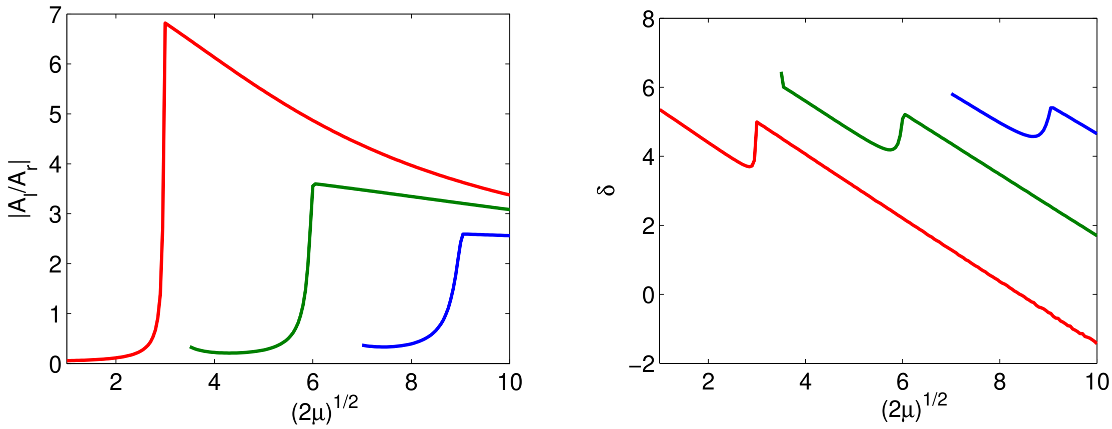

Abbildung 6.6: Verhältnis der Amplituden A_l/A_r (links) und Phasenverschiebung δ (rechts) für Resonanzzustände in einem Delta-Shell-Potential mit $a = 1$ und $\lambda = 10$.

Wie oben bereits diskutiert sind Resonanzen durch Gleichung (6.27) charakterisiert. Setzt man dies in die Ungleichung (6.26) ein, so findet man Resonanzen für

$$\sqrt{2\mu} \gtrsim \frac{\pi n}{a}, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{6.28}$$

Dies ist in Abbildung 6.6 deutlich zu sehen. Die Maxima des Verhältnisses A_l/A_r findet man für Werte von $\sqrt{2\mu}$ etwas unterhalb der ganzzahligen Vielfachen von π. Für größere Werte des chemischen Potentials fällt das Amplituden-Verhältnis nur langsam ab, da das chemische Potential μ und die Periode L_l nur durch eine Ungleichung (6.26) verbunden sind und die Bedingung (6.27) somit weiterhin erfüllt werden kann. Die Resonanzen sind auch deutlich über die schnelle Änderung der Phasenverschiebung δ identifizierbar, wie man in Abbildung 6.6 rechts erkennt.

Zum Schluss betrachten wir noch die Abhängigkeit der Resonanzen von der Position a des Potentials. Diese Abhängigkeit ist näherungsweise durch die Gleichungen (6.27) und (6.28) gegeben. Wir berechnen nun numerisch in Abhängigkeit von der Position a das maximale Amplitudenverhältnis

$$\max_{\mu} \frac{A_l}{A_r} \tag{6.29}$$

und das chemische Potential $\mu_{\max}$, für das dieser Wert angenommen wird. Die Ergebnisse sind in Abbildung 6.7 dargestellt. Der Verlauf von $\mu_{\max}(a)$ wird gut durch die Formel (6.28) beschrieben und ist dem linearen Fall sehr ähnlich (vgl. Abbildung 6.4).

Das Amplitudenverhältnis A_l/A_r ergibt sich mit Gleichung (6.22) aus den elliptischen Parametern, Resonanzen findet man für $p_r \ll p_l$. Bei einer Resonanz verschwindet der Parameter p_r für große a wie $1/a^2$, was wir gleich zeigen werden. Eingesetzt in die Abschätzung

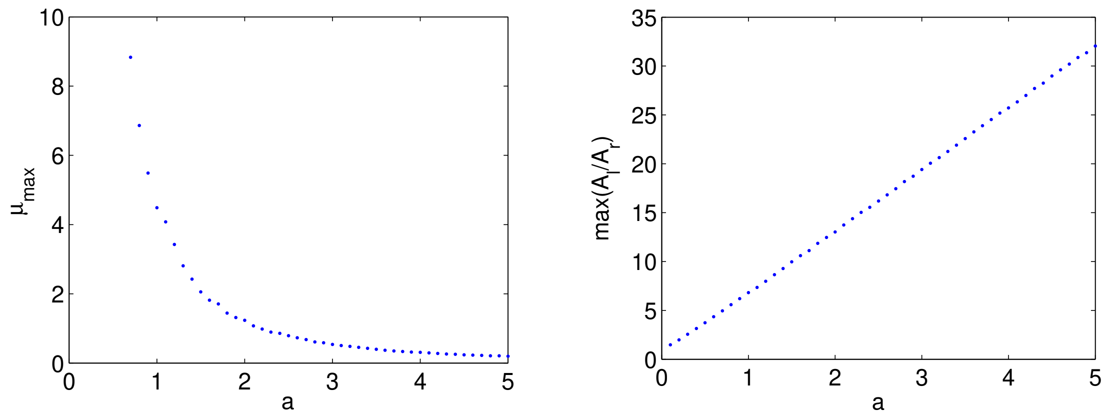

Abbildung 6.7: Resonanzen: Maximales Amplitudenverhältnis A_l/A_r (rechts) und chemisches Potential $\mu_{\max}$ (links), für das dieser Wert angenommen wird, in Abhängigkeit von der Position a des Delta-Shell-Potentials.

(6.23) ergibt dies eine lineare Abhängigkeit des Amplitudenverhältnisses $\max(A_l/A_r)$ von a, wie man es in Abbildung 6.7 rechts erkennen kann.

Um den Verlauf $p_r \sim 1/a^2$ zu verstehen, betrachten wir die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{2\lambda^2}{\mu}\frac{p_r}{p_r+1}\mathrm{sn}^2(u_r|p_r) + \frac{p_r}{(p_r+1)^{3/2}}\frac{4\lambda}{\sqrt{2\mu}}\mathrm{cn}(u_r|p_r)\mathrm{dn}(u_r|p_r)\mathrm{sn}(u_r|p_r) \\ = \quad \frac{p_l}{(p_l+1)^2} - \frac{p_r}{(p_r+1)^2}\,, \end{aligned} \tag{6.30}$$

die sich ganz analog zur Gleichung (6.25) ergibt. Die rechte Seite dieser Gleichung strebt für $p_l \to 1$ und $p_r \to 0$ gegen den Wert $1/4$, weiterhin gilt $\mu \sim 1/a^2$ nach Gleichung (6.28). Damit die linke Seite der Gleichung für große a weder divergiert, noch verschwindet, muß $p_r \sim 1/a^2$ gelten.

Zusammenfassend findet man, dass Resonanzen im nichtlinearen Fall für ähnliche Werte des chemischen Potentials auftreten wie im linearen Fall (vgl. Gleichung (6.28)) und dass sich die Phasenverschiebung δ wie im linearen Fall bei einer Resonanz schnell ändert. Der wesentliche Unterschied zwischen dem linearen und dem nichtlinearen Fall ist, dass der Zusammenhang zwischen dem chemischen Potential μ und der Periode L nur noch durch eine Ungleichung (6.26) gegeben ist. Dies führt dazu, dass es für einen Wert von μ mehrere Lösungen der nichtlinearen Schrödingergleichung gibt und Resonanzen nur an einer Seite scharf begrenzt sind. Für größere Werte von μ fällt das Amplituden-Verhältnis A_l/A_r dagegen nur langsam ab.

6.3.2 Attraktive Nichtlinearität: Resonanzen

Als nächstes betrachten wir den Fall einer attraktiven Nichtlinearität, dabei beschränken wir uns auf $g = -1$. Außerdem fixieren wir die Stärke des Potentials wiederum auf $\lambda = +10$.

Die Lösungen der freien nichtlinearen Schrödingergleichung sind dann durch die Jacobische elliptische Funktion cn gegeben [83, 84]. Für die Wellenfunktion im Delta-Shell-Potential machen wir also den Ansatz

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_l(x) = A_l \, \mathrm{cn}\left(4K(p_l)\left(\frac{x}{L_l} + \frac{1}{4}\right)\middle| p_l\right) & \text{für } x < a \\ \psi_r(x) = A_r \, \mathrm{cn}\left(4K(p_r)\frac{x+x_0}{L_r}\middle| p_r\right) & \text{für } x > a. \end{cases} \tag{6.31}$$

Die Amplituden $A_{l,r}$ und die Perioden $L_{l,r}$ sind dabei durch das chemische Potential μ und die elliptischen Parameter $p_{l,r}$ durch

$$A = \frac{4\sqrt{p}\,K(p)}{L} \quad \text{und} \quad \mu = \frac{8\,(1-2p)\,K(p)^2}{L^2} \tag{6.32}$$

festgelegt. Um $\mu \geq 0$ zu erfüllen, ist der elliptische Parameter auf $p_{l,r} \in [0, 1/2]$ eingeschränkt.

Resonanzen sind charakterisiert durch eine resonante Überhöhung der Amplitude, also durch ein Maximum des Verhältnisses A_l/A_r. Dieses ergibt sich aus den elliptischen Parametern $p_{l,r}$ durch:

$$\frac{A_l}{A_r} = \left[\frac{p_l(1-2p_r)}{(1-2p_l)p_r}\right]^{1/2} . \tag{6.33}$$

Der Ansatz erfüllt $\psi(0) = 0$ automatisch. Weiterhin müssen bei $x = a$ die folgenden Anschlussbedingungen erfüllt sein:

$$\begin{aligned} \text{I.} \quad A_l \, \mathrm{cn}(u_l|p_l) &= A_r \, \mathrm{cn}(u_r|p_r) \\ \text{II.} \quad 2\lambda A_l \, \mathrm{cn}(u_l|p_l) &= -\frac{4A_r K_r}{L_r}\mathrm{sn}(u_r|p_r)\mathrm{dn}(u_r|p_r) \\ &\quad + \frac{4A_l K_l}{L_l}\mathrm{sn}(u_l|p_l)\mathrm{dn}(u_l|p_l), \end{aligned} \tag{6.34}$$

wobei die Abkürzungen $u_l = K(p_l)(4a/L_l + 1)$ und $u_r = 4K(p_r)(a + x_0)/L_r$ benutzt wurden.

Die erste Bedingung ist durch die Wahl von x_0 immer dann erfüllbar, wenn $|A_l \, \mathrm{cn}(u_l|p_l)| \leq |A_r|$ ist. In diesem Fall kann man die erste Bedingung in die zweite einsetzen und findet schließlich

$$\begin{aligned} &\frac{2\lambda^2}{\mu}\frac{p_l}{1-2p_l}\mathrm{cn}(u_l|p_l)^2 - \frac{4\lambda}{\sqrt{2\mu}}\frac{p_l}{(1-2p_l)^{3/2}}\,\mathrm{cn}(u_l|p_l)\mathrm{dn}(u_l|p_l)\mathrm{sn}(u_l|p_l) \\ &= \frac{(1-p_r)p_r}{(1-2p_r)^2} - \frac{(1-p_l)p_l}{(1-2p_l)^2} \, . \end{aligned} \tag{6.35}$$

Numerisch geht man jetzt ganz analog zum Fall einer repulsiven Nichtlinearität vor. Für einen festes μ wird für jeden Wert $p_l \in [0, 1/2]$ gemäß Gleichung (6.35) p_r sowie das Amplitudenverhältnis A_l/A_r bestimmt. Im Gegensatz zum Fall einer repulsiven Nichtlinearität sind die Bedingungen (6.34) für alle Werte $p_l \in [0, 1/2]$ erfüllbar.

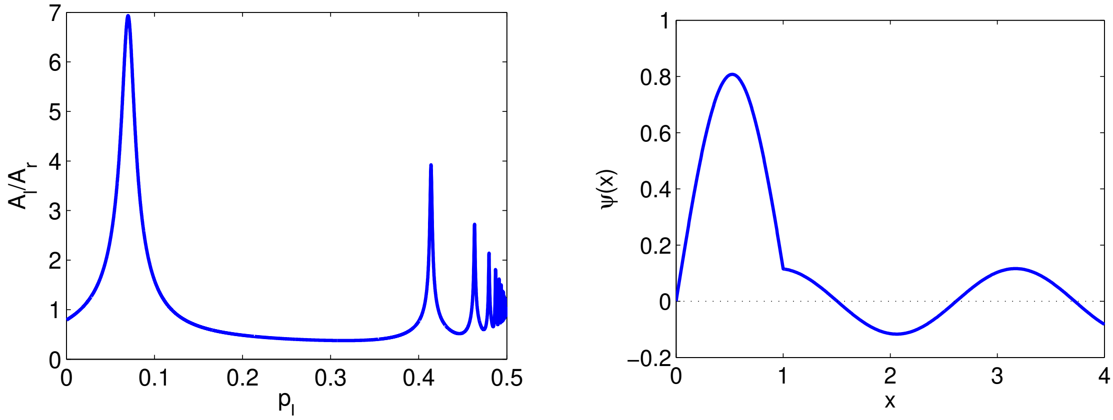

Abbildung 6.8: Links: Verhältnis der Amplituden A_l/A_r für $\mu = 4$ für ein Delta-Shell-Potential mit $a = 1$ und $\lambda = 10$. Die Maxima des Amplituden-Verhältnisses werden als Resonanzen identifiziert. Rechts: Wellenfunktion $\psi(x)$ für $p_l = 0.07$, dies entspricht dem Maximum von A_l/A_r in Abhängigkeit von p_l.

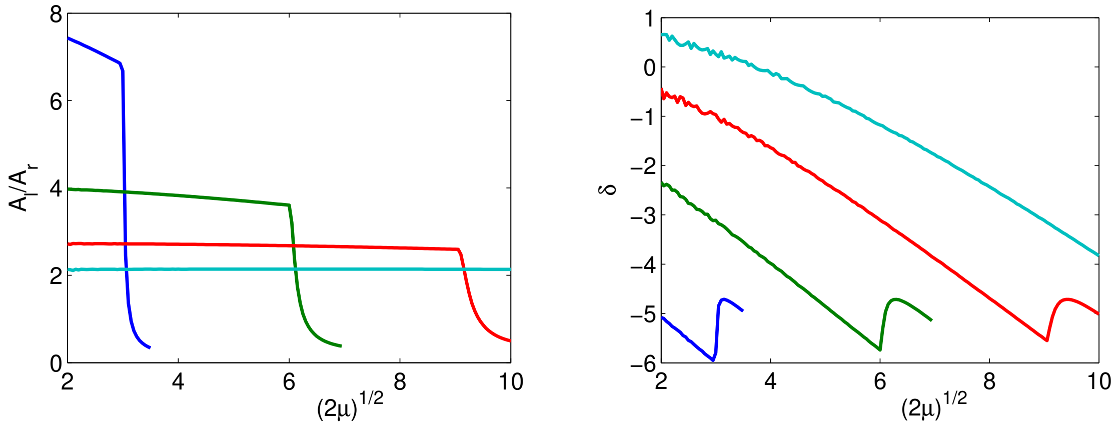

Abbildung 6.9: Verhältnis der Amplituden A_l/A_r (links) und Phasenverschiebung δ (rechts) für Resonanzzustände in einem Delta-Shell-Potential mit $a = 1$ und $\lambda = 10$.

In Abbildung 6.8 ist für ein Delta-Shell-Potential mit $a = 1$ für ein chemisches Potential $\mu = 4$ die Abhängigkeit des Amplitudenverhältnisses von p_l dargestellt. Die lokalen Maxima dieses Verhältnisses identifizieren wir wiederum als Resonanzen. Die Wellenfunktion $\psi(x)$ der Resonanz bei $p = 0.07$ ist auf der rechten Seite von Abbildung 6.8 dargestellt.

Diese Resonanzen berechnet man jetzt in Abhängigkeit des chemischen Potentials μ. Die Ergebnisse einer solchen Rechnung für $\lambda = 10$ sind in Abbildung 6.9 dargestellt. Man beachte, dass aus Gründen der Übersichtlichkeit nur die vier Resonanzen mit dem größten Verhältnis A_l/A_r dargestellt sind. Um den dargestellten Verlauf des Amplitudenverhältnisses A_l/A_r und der Phasenverschiebung $\delta = 2\pi x_0/L$ zu verstehen, müssen wir uns zunächst einige Sachverhalte klarmachen.

Für die Periode L und das chemische Potential μ kann man mit Gleichung (6.32) wieder eine Ungleichung finden. Aus $p \in [0, 1/2]$ folgt

$$0 \leq \mu \leq \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{L_l} \right)^2 . \tag{6.36}$$

Wir charakterisieren Resonanzen durch eine resonante Überhöhung der Amplitude, also durch Maxima des Verhältnisses A_l/A_r. Nach Gleichung (6.33) findet man solche Maxima für $p_r \ll p_l$. Wegen $p_r \ll 1$ hat die Wellenfunktion für $x > a$ wieder näherungsweise die Sinus-Form des linearen Falls, der sich im Grenzwert $p_r \to 0$ ergibt. Es ist dann $\mu \lesssim \pi^2/(2L_r^2)$.

Um die Stetigkeit der Wellenfunktion bei $x = a$ auch für eine resonant überhöhte Amplitude A_l zu garantieren, muss wiederum $\mathrm{cn}(u_l|p_l) \ll 1$ gelten. Damit ergibt sich wie im Fall einer repulsiven Nichtlinearität die folgende Bedingung für eine Resonanz:

$$L_l \approx \frac{2a}{n}, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{6.37}$$

Mit der Ungleichung (6.36) findet man Resonanzustände für

$$\sqrt{2\mu} \lesssim \frac{\pi n}{a}, \tag{6.38}$$

also unterhalb einer gewissen Schwelle. Dies ist genau entgegengesetzt zum Fall einer repulsiven Nichtlinearität.

Man erkennt also wie im Fall einer repulsiven Nichtlinearität "Kanten" der Resonanzen bei Werten des chemischen Potentials von $\sqrt{2\mu} \approx n\pi/a$. Im Unterschied zu einer repulsiven Nichtlinearität fällt das Amplitudenverhältnis hier oberhalb dieser Kanten stark ab, unterhalb verändert es sich nur langsam. Da das Amplitudenverhältnis A_l/A_r auch oberhalb dieser Abbruchkanten mit $\sqrt{2\mu}$ langsam abnimmt, ergeben sich keine lokalen Maxima des Amplitudenverhältnisses mehr (siehe Abbildung 6.9 links). Wie man in Abbildung 6.9 rechts erkennt, sind die Resonanzen, bzw. ihre Abbruchkanten, wiederum durch eine schnelle Änderung der Phase $\delta = 2\pi x_0/L$ eindeutig zu identifizieren.

6.3.3 Attraktive Nichtlinearität: gebundene Zustände

Es soll nicht verschwiegen werden, dass es auch im repulsiven Delta-Shell-Potential gebundene Zustände gibt, wenn die attraktive Wechselwirkung stark genug ist. Solche gebundenen Zustände in einem repulsiven Potential ergeben sich bereits für das einfache Delta-Potential (siehe Kapitel 5), daher werden wir hier nur kurz auf diese Zustände eingehen. Wir fixieren die Nichtlinearität wiederum auf $g = -1$.

Für die Wellenfunktion setzen wir an

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_l(x) = A \, \mathrm{cn}\left(K(p) \left(\frac{4x}{L} + 1 \right) \middle| p \right) & \text{für } x < a \\ \psi_r(x) = \sqrt{-2\mu} \, \mathrm{sech} \left(\sqrt{-2\mu}(x - x_0) \right) & \text{für } x > a, \end{cases} \tag{6.39}$$

wobei die Amplitude A und die Periode L wiederum gemäß Gleichung (6.32) durch das chemische Potential μ und den elliptischen Parameter p gegeben sind. Um $\mu \leq 0$ zu garantieren, muss jetzt aber im Gegensatz zum vorigen Abschnitt $p \in [1/2, 1]$ gelten.

Bei $x = a$ sind die Anschlussbedingungen für die Wellenfunktion und ihre Ableitung

$$\begin{aligned}
\text{I.} \qquad A\,\mathrm{cn}(u|p) &= \sqrt{-2\mu}\,\mathrm{sech}\left(\sqrt{-2\mu}(x - x_0)\right) \\
\text{II.} \quad 2\lambda A\,\mathrm{cn}(u|p) &= 2\mu \tanh\left(\sqrt{-2\mu}(x - x_0)\right)\mathrm{sech}\left(\sqrt{-2\mu}(x - x_0)\right) \\
&\quad + \frac{4K(p)A}{L}\,\mathrm{sn}(u|p)\,\mathrm{dn}(u|p)
\end{aligned} \tag{6.40}$$

mit der Abkürzung $u = K(p)(4a/L + 1)$. Die erste Bedingung ist durch die Wahl von x_0 lösbar, wenn

$$0 < A\,\mathrm{cn}(u|p) \leq \sqrt{-2\mu}$$

erfüllt ist. Einsetzen in die zweite Bedingung ergibt dann:

$$\frac{4\lambda^2}{-2\mu}\mathrm{cn}(u|p) - \frac{4\lambda}{\sqrt{-2\mu\,(2p-1)}}\mathrm{sn}(u|p)\mathrm{dn}(u|p)\mathrm{cn}(u|p) + \frac{1-p}{2p-1} = 0 \tag{6.41}$$

Im Gegensatz zu den Resonanzen lassen sich diese beiden Bedingungen bei gegebenem μ nur noch für höchstens *einen* Wert von p erfüllen, da ein freier Parameter (p_r) weniger „zur Verfügung" steht.

Weiterhin muss die Wellenfunktion auf eins normiert werden. Dies legt für ein gegebenes Potential, i.e. gegebenes λ und a , schließlich das chemische Potential fest. Diese Bedingungen sind nicht für alle Werte von a und λ erfüllbar.

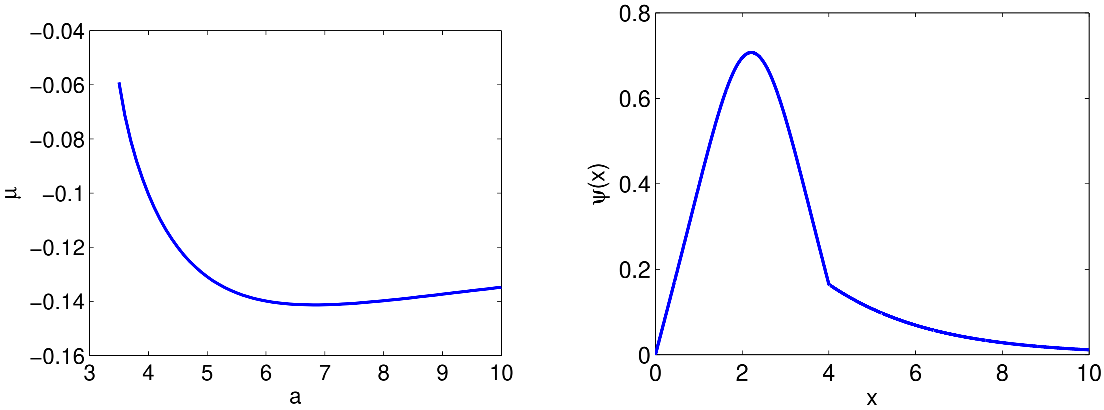

Abbildung 6.10: Links: Chemisches Potential μ eines gebundenen Zustandes in einem repulsiven Delta-Shell-Potential ($\lambda = +1$) in Abhängigkeit von a. Rechts: Wellenfunktion $\psi(x)$ für $a = 4$.

Als Beispiel für solche gebundenen Zustände betrachten wir ein Delta-Shell-Potential der Stärke $\lambda = 1$. In Abbildung 6.10 auf der linken Seite ist das chemische Potential μ in Abhängigkeit von der Position a des Potentials dargestellt. Unterhalb eines kritischen

Wertes $a_c \approx 3.42$ existieren keine gebundenen Zustände mit der richtigen Normierung mehr. Wie in einem einfachen Delta-Potential (vgl. Kapitel 5.2) gehen die gebundenen Zustände also bei einem endlichen negativen Wert von μ in Streuzustände über. Auf der rechten Seite sieht man die Wellenfunktion $\psi(x)$ eines gebundenen Zustandes für $a = 4$. Die Wellenfunktion fällt für $x \to \infty$ exponentiell wie $\psi(x) \sim \exp(\sqrt{-2\mu}x)$ ab.

Anhang A

Skalierte Einheiten

Im Laufe dieser Arbeit wurden zumeist skalierte Einheiten verwendet. Dies hat den Vorteil, dass verschiedene Experimente vergleichbar werden und außerdem die Anzahl der freien Parameter eines Systems auf ein Mindestmaß reduziert wird. Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten skalierten Einheiten für kalte Atome in optischen Gittern definiert und für zwei Experimente [5, 31] diskutiert.

Wie in Abschnitt 1.1 beschrieben, wird die Wellenfunktion eines Bose-Einstein Kondensates in einem optischen Gitter und einem externen Feld bei tiefen Temperaturen gut durch eine nichtlineare Schrödingergleichung, oder Gross-Pitaevskii-Gleichung, beschrieben (siehe auch [11]):

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + Fx + g|\psi(x,t)|^2\right)\psi(x,t), \tag{A.1}$$

mit einem periodischen Potential $V(x) = V(x+d)$. Die Wellenfunktion ist auf eins normiert, $\|\psi\| = 1$.

In den hier verwendeten skalierten Einheiten ist die Masse $M_s = 1$ und die Periode des Potentials $d_s = 2\pi$. Weiterhin wird die Energieskala so gewählt, dass das skalierte Potential in einem Energieintervall $[-1, 1]$ variiert. Die letzte Skalierung ist natürlich nur möglich, wenn $V(x)$ beschränkt ist, was wir hier immer annehmen. Die Wahl der Einheiten ist motiviert durch die Kosinus-Form des Potentials, das in dieser Arbeit zumeist diskutiert wird. Das Potential ist in skalierten Einheiten dann einfach $V_s(x_s) = \cos(x_s)$.

Mit einer Skalierung der Ortsvariable $x_s = (2\pi/d)\cdot x$ beträgt die Periode des Potentials 2π. Weiterhin definieren wir

$$\gamma = \frac{V_{max} - V_{min}}{2}, \quad \bar{V} = \frac{V_{max} + V_{min}}{2}. \tag{A.2}$$

Der konstante Teil des Potentials $\bar{V}$ führt nur zu einer Verschiebung der Energieskala und ist daher ohne Bedeutung. Indem man Gleichung (A.1) durch γ dividiert und x durch x_s ersetzt, erhält man die nichtlineare Schrödingergleichung in skalierten Einheiten:

$$\mathrm{i}\hbar_s\frac{\partial\psi(x_s,t_s)}{\partial t_s} = \left(\frac{-\hbar_s^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x_s^2} + V_s(x_s) + F_s x_s + g_s|\psi(x_s,t_s)|^2\right)\psi(x_s,t_s). \tag{A.3}$$

Dabei ist

$$F_s = \frac{L}{2\pi\gamma}\,F, \quad \hbar_s = \frac{2\pi}{L\sqrt{M\,\gamma}}\,\hbar \quad \text{und} \quad g_s = \frac{2\pi}{\gamma L} g. \tag{A.4}$$

In den skalierten Einheiten ist die Zeitskala gegeben durch

$$\mathrm{d}t_s = \frac{2\pi}{L}\sqrt{\frac{\gamma}{M}}\,\mathrm{d}t. \tag{A.5}$$

Die intrinsische Zeitskala eines Wannier-Stark-Systems ist die Bloch-Zeit

$$T_B = \frac{2\pi\hbar}{Fd} \quad \text{bzw.} \quad T_{B,s} = \frac{\hbar_s}{F_s}. \tag{A.6}$$

Wenn das optische Gitter durch zwei entgegengesetzt propagierende Laser realisiert wird, ist die Periode des Potentials gleich der Hälfte der Wellenlänge des verwendeten Lasers, also $d = \lambda/2$. Mit der Photonen-Rückstoßenergie (*recoil energy*) $E_R = \hbar^2 k^2/2M$, wobei k die Wellenzahl des Lasers ist, lässt sich das skalierte Plancksche Wirkungsquantum leicht angeben:

$$\hbar_s = \frac{4}{\sqrt{(V_{max} - V_{min})/E_R}}. \tag{A.7}$$

Zur Orientierung wollen wir noch die Systemparameter einiger Experimente diskutieren, auf die sich diese Arbeit bezieht. Wie in der Einleitung (siehe Abschnitt 1.1.2) beschrieben, erreicht man ein quasi-eindimensionales Bosegas durch ein starkes transversales Potential. Die effektive eindimensionale Nichtlinearität ergibt sich aus Gleichung (1.23). Viele interessante Experimente zur Dynamik von Bose-Einstein-Kondensaten in Wannier-Stark-Systemen werden allerdings ohne einen solchen transversalen Einschluss durchgeführt. Wir werden daher auch für zwei dieser Experimente eine eindimensionale Nichtlinearität nach der Formel (1.23) angeben. Diese Größe muss allerdings mit Vorsicht interpretiert werden.

Eine solche eindimensionale Näherung ist für das Experiment der Kasevich-Gruppe [5,94] gerechtfertigt. In der Tat findet man, dass sich dieses Experiment auch bei einer kompletten Vernachlässigung der Nichtlinearität gut beschreiben lässt [50]. Für das Experiment der Arimondo-Gruppe [31] ist eine solche Näherung nicht mehr gerechtfertigt. Für kleine Feldstärken führt die Nichtlinearität gerade zu einer starken Expansion in transversaler Richtung.

In beiden Experimente werden Kondensate aus etwa 10^4 ^{87}Rubidium-Atomen verwendet. Die dreidimensionale Nichtlinearität ist nach Gleichung (1.10) mit einer Streulänge von $a = 5.5$ nm gleich

$$g_{\mathrm{3D}} = 5.3\,\times\,10^{-47}\,\frac{\mathrm{kg\,m}^5}{\mathrm{s}^2}. \tag{A.8}$$

Die eindimensionale Nichtlinearität g_{1D} ergibt sich aus der transversalen Breite des Kondensates $a_\perp$ gemäß Gleichung (1.23). Die Systemparamter in skalierten Einheiten folgen dann aus der Gleichung (A.4), die Ergebnisse sind in der Tabelle A.1 zusammengefasst.

Experiment	λ	$V_{max} - V_{min}$		F/M	$a_\perp$	$\hbar_s$	F_s	g_s
Kasevich [5]	850 nm	6.62 kHz	$2.1E_R$	9.81 m/s^2	10 μm	2.760	0.0441	0.6
		4.41 kHz	$1.4E_R$			3.381	0.0661	0.9
		3.15 kHz	$1.0E_R$			4.000	0.0925	1.1
Arimondo [31]	780 nm	7.54 kHz	$2.0E_R$	5 m/s^2	20 μm	2.828	0.0179	0.3
				1 m/s^2			0.0036	
				0.5 m/s^2			0.0018	
				0.3 m/s^2			0.0011	

Tabelle A.1: Systemparameter und skalierte Einheiten für zwei in dieser Arbeit diskutierte Experimente.

Man kann größere Werte für die Nichtlinearität erreichen, indem man die s-Wellen-Streulänge a über eine Feshbach-Resonanz verändert [95] oder ein dichteres Kondensat herstellt. Allerdings ist die Gültigkeit der Gross-Pitaevskii-Gleichung dann fraglich (vgl. die Bedingungen (1.16)). Die bessere Möglichkeit, um den Einfluss der Nichtlinearität auf die Dynamik zu studieren, besteht darin, einfach schwächere optische Gitter zu verwenden. Dann ist die Selbstwechselwirkung des Kondensates relativ stärker, was in skalierten Einheiten durch die Abhängigkeit $g_s \sim 1/\gamma$ zum Ausdruck kommt.

Anhang B

Numerische Methoden

B.1 Das Split-Operator-Verfahren

B.1.1 Das Split-Operator-Verfahren für die lineare Schrödingergleichung

Das Split-Operator-Verfahren [96] ist ein Standardverfahren zur Zeitpropagation eines Quantenzustands, also zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi = (T + V)\,\psi, \tag{B.1}$$

mit einem Hamiltonoperator H, der in die kinetische und potentielle Energie zerlegt werden kann. Die Zeitentwicklung eines Anfangszustandes Zustandes ψ wird dann beschrieben durch den Zeitentwicklungsoperator U

$$\psi(t) = U(t, t_0)\psi(t_0), \tag{B.2}$$

der gegeben ist durch

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{U} &= HU, \\ U(t_0, t_0) &= \mathbb{1}\,. \end{aligned} \tag{B.3}$$

Im Falle eines zeitunabhängigen Hamiltonoperators kann diese Gleichung direkt integriert werden:

$$U(t, t_0) = \mathrm{e}^{-i(T+V)(t-t_0)/\hbar}. \tag{B.4}$$

Das Split-Operator-Verfahren nutzt jetzt aus, dass T im Impulsraum und V im Ortsraum diagonal ist. Damit reduziert sich die Wirkung der Operatoren auf eine einfache Multiplikation. Zwischen den Darstellungen von ψ im Impuls- und im Ortsraum kann man dann effizient mittels schneller Fouriertransformation (siehe z.B. [97]) umrechnen. Dazu muss der Zeitentwicklungsoperator allerdings gesplittet werden. Es gilt nach der Baker-Campbell-Hausdorff-Relation:

$$U(t + \delta t, t) = \mathrm{e}^{-i(T+V)\delta t/\hbar} = \mathrm{e}^{-iV\delta t/2\hbar}\mathrm{e}^{-iT\delta t/\hbar}\mathrm{e}^{-iV\delta t/2\hbar} + O(\delta t^3). \tag{B.5}$$

Der Fehler pro Zeitschritt skaliert also kubisch in der Zeitdiskretisierung δt.

Für die numerischen Berechnungen in dieser Arbeit wurde `matlab` benutzt, da es effiziente Algorithmen für Matrixoperationen und schnelle Fouriertransformation bereitstellt und einfach zu programmieren ist. In `matlab` wird ein Propagationsschritt implementiert als

```
expV = exp(-i*V*deltat/2/hbar);
expT = exp(-i*T*deltat/hbar);
psi = expV .* fft( expT .* ifft( expV.*psi ));
```

wobei `psi` die Wellenfunktion im Ortsraum ist und `T` und `V` die kinetische bzw. potentielle Energie auf dem Gitter im Orts- bzw. Impulsraum sind. Dabei ist auf die korrekte Definition des Impulsgitters zu achten (siehe auch die Hilfe zum `matlab`-Befehl `fftshift`).

B.1.2 Das Split-Operator-Verfahren für die nichtlineare Schrödingergleichung

Die nichtlineare Schrödingergleichung, oder Gross-Pitaevskii-Gleichung,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \Big(T + V_0 + \underbrace{g|\psi(x,t)|^2}_{V_1(x,t)}\Big)\psi(x,t) \tag{B.6}$$

entspricht der Schrödingergleichung mit einem zusätzlichen, zeitabhängigen Potential $V_1(x,t) = g|\psi(x,t)|^2$. Wie wir sehen werden, kann auch in diesem Fall das Split-Operator-Verfahren angewandt werden, jedoch skaliert der Fehler pro Zeitschritt dabei nur noch quadratisch in der Zeitdiskretisierung.

Wir betrachten einen Propagationsschritt von $t = 0$ nach $t = \delta t$. Es gilt wiederum

$$\psi(\delta t) = U(\delta t)\psi(0), \tag{B.7}$$

mit dem Zeitentwicklungsoperator U, der definiert ist durch

$$\mathrm{i}\hbar\dot{U} = (T + V_0 + V_1(t))\,U \tag{B.8}$$

$$U(0) = \mathbb{1}\,. \tag{B.9}$$

Diese Gleichung kann wiederum integriert werden, jedoch ist die Zeitordnung zu beachten. Es ergibt sich

$$U(\delta t) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_0^{\delta t} \mathrm{d}\tau_1 \int_0^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} \mathrm{d}\tau_n H(\tau_1)\cdots H(\tau_n) \tag{B.10}$$

mit $H(t) = T + V_0 + V_1(t)$. Wir definieren jetzt

$$\tilde{V}_0 := V_0 + V_1(t=0)$$
$$\tilde{V}_1(t) := V_1(t) - V_1(t=0).$$

Da $\tilde{V}_1(t=0)=0$ ist, gilt $\tilde{V}_1(t)=O(t)$. Einsetzen in die Gleichung (B.10) für den Zeitentwicklungsoperator ergibt

$$\begin{aligned}\int_0^{\delta t} \mathrm{d}\tau H(\tau) &= \int_0^{\delta t} \mathrm{d}\tau (T+\tilde{V}_0)+\underbrace{\tilde{V}_1(\tau)}_{=O(\tau)}\\ &= (T+\tilde{V}_0)\delta t+O(\delta t^2)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\int_0^{\delta t}\mathrm{d}\tau_1\int_0^{\tau_1}\mathrm{d}\tau_2 H(\tau_1)H(\tau_2) &= (T+\tilde{V}_0)^2\frac{\delta t^2}{2}+O(\delta t^3)\\ &\vdots\end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned}U(\delta t) &= 1+\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n (T+\tilde{V}_0)^n\frac{\delta t^n}{n!}+O(\delta t^2)\\ &= \mathrm{e}^{-i(T+\tilde{V}_0)\delta t/\hbar}+O(\delta t^2).\end{aligned} \tag{B.11}$$

Das Split-Operator-Verfahren für die nichtlineare Schrödingergleichung beinhaltet also zwei numerische Fehler. Zum einen ergibt sich ein Fehler aus der Vernachlässigung von $\tilde{V}_1(t)$, also aus der Approximation des *mean-field*-Potentials $g|\psi(t)|^2$ durch $g|\psi(t=t_n)|^2$. zu Beginn des Zeitschritts. Dieser Fehler skaliert quadratisch in der Zeitdiskretisierung. Außerdem ergibt sich, wie im linearem Fall, ein Fehler aus dem Splittings des Zeitentwicklungsoperators in den kinetischen und potentiellen Teil. Dieser Fehler skaliert kubisch in der Zeitdiskretisierung.

B.1.3 Numerischer Test I

Um das Split-Operator-Verfahren für die nichtlineare Schrödingergleichung zu testen, vergleichen wir die analytische Lösung mit der numerischen Lösung für ein eindimensionales, lösbares Beispiel.

Ein analytisch lösbares Beispiel ist die nichtlineare Schrödingergleichung im Starkfeld

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+Fx+g|\psi(x,t)|^2\right)\psi(x,t). \tag{B.12}$$

Zur Vereinfachung der Notation haben wir die Masse $M=1$ gesetzt. Mit dem Ansatz

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Fxt/\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mu t+F^2t^3/6)/\hbar}\chi(x+Ft^2/2) \tag{B.13}$$

ergibt sich für χ die zeitunabhängige nichtlineare Schrödingergleichung:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\chi''+g|\chi|^2\chi=\mu\chi. \tag{B.14}$$

Für $g < 0$ hat Gleichung (B.14) die Solitonen-Lösung

$$\chi(y) = \sqrt{\frac{2\mu}{g}} \operatorname{sech}\left(\sqrt{-2\mu}(y - y_0)/\hbar\right). \tag{B.15}$$

Die Normierung dieser Lösung mit $\|\chi\| = 1$ ergibt $\mu = -g^2/8\hbar^2$. Die Lösung der zeitabhängigen nichtlinearen Schrödingergleichung $\psi(x,t)$ ist also ein Soliton mit fester Form, dessen Schwerpunkt sich beschleunigt bewegt.

Zum Test des Split-Operator-Verfahrens vergleichen wir jetzt die analytische Lösung (B.13) mit der numerischen Lösung von Gleichung (B.12), die im folgenden als $\phi(x,t)$ bezeichnet wird. $\phi(x,t)$ wird mit verschiedenen Orts- und Zeitdiskretisierungen berechnet.

Wir berechnen $\psi(x,t)$ und $\phi(x,t)$ jeweils für eine Zeit $T = \hbar/2F$. Im Falle eines zusätzlichen periodischen Potentials der räumlichen Periode 2π, also eines Wannier-Stark-Systems, entspräche dies gerade der halben Blochzeit. Da wir das Split-Operator-Verfahren später zur Simulation der Dynamik in einem Wannier-Stark-System über einige Blochzeiten nutzen wollen, ist dies eine sinnvolle Zeitspanne. Als Parameter wurden $\hbar = 3.3806$, $F = 0.005$ und $g = -1$ gewählt (zu den Einheiten siehe Anhang A).

Einfluss der Zeitdiskretisierung

In Abbildung B.1 ist der numerische Fehler, also die Norm der Differenz der numerischen Lösung $\phi(x,T)$ und der analytischen Lösung $\psi(x,T)$, nach einer Propagationszeit $T = \hbar/2F = 338.06$ in Abhängigkeit der Zeitdiskretisierung δt dargestellt.

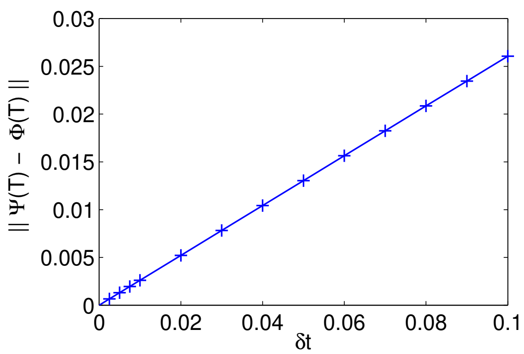

Abbildung B.1: Numerischer Fehler $\|\psi(T) - \phi(T)\|$ nach einer Propagationszeit $T = \hbar/2F$ in Abhängigkeit der zeitlichen Diskretisierung δt. Die numerischen Daten sind als Kreuze dargestellt, die durchgezogene Linie ist ein linearer Fit. Die Ortsdiskretisierung ist $\delta x = 300\pi/256$, die restlichen Parameter sind dem Text zu entnehmen.

Da der Fehler pro Zeitschritt quadratisch in δt skaliert, erwartet man für den Fehler nach einer festen Zeit T eine lineare Skalierung in δt. Dies wird von den numerischen Daten in Abbildung B.1 hervorragend bestätigt. An die numerischen Daten wurde eine Gerade $k \cdot \delta t$ gefittet, es ergab sich $k = 0.2606$.

Einfluss der Ortsdiskretisierung

Für die Abhängigkeit der numerischen Fehler von der Ortsdiskretisierung lässt sich nicht, wie im Falle der Zeitdiskretisierung, ein einfacher quantitativer Zusammenhang angeben. Man beobachtet vielmehr, dass eine gewisse Mindestauflösung notwendig ist. Die Numerik liefert vollständig falsche Ergebnisse, wenn die Auflösung zu klein ist.

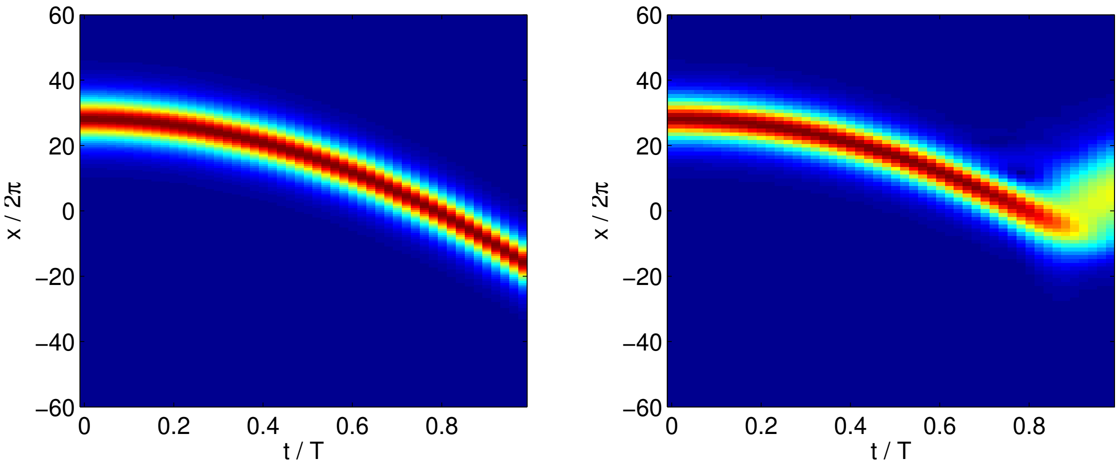

Abbildung B.2: Falschfarbendarstellung der numerischen Lösung $|\phi(x,t)|$ der nichtlinearen Schrödingergleichung (B.12) für zwei verschiedene Ortsdiskretisierungen $\delta x = 300\pi/256$ (links) und $\delta x = 300\pi/128$ (rechts). Die restlichen Parameter sind dem Text zu entnehmen. Rot codiert eine hohe Intensität, blau eine geringe.

Dies ist in Abbildung B.2 illustriert, wo die numerische Lösung $|\phi(x,t)|$ für zwei verschiedene Ortsdiskretisierungen als Falschfarbenbild dargestellt ist. Die Zeitdiskretisierung ist jeweils $\delta t = 0.01$. Für $\delta x = 300\pi/256$ gibt die numerische Lösung die Dynamik richtig wieder. In der Falschfarbendarstellung sind keinerlei Unterschiede zwischen der numerischen und der analytischen Lösung zu beobachten. Eine Ortsdiskretisierung von $\delta x = 300\pi/128$ ist dagegen nicht mehr ausreichend. Nach einer Zeit $t \approx 0.8\,T$ ist die numerische Lösung auch qualitativ nicht mehr richtig. Das Wellenpaket bewegt sich in die falsche Richtung und dispergiert. Dieses falsche qualitative Verhalten ist auch weitgehend unabhängig von der gewählten Zeitdiskretisierung.

B.1.4 Numerischer Test II

Wie bereits diskutiert, muss die Ortsdiskretisierung hinreichend klein sein, um die Dynamik numerisch richtig zu berechnen. Die kritische Größe der Ortsdiskretisierung hängt jedoch vom jeweiligen physikalischen System ab. Wir überprüfen daher weiterhin, welche Ortsdiskretisierung in den Fällen notwendig ist, die dann mittels der Split-Operator-Methode simuliert werden sollen.

In Kapitel 3 simulieren wir die Dynamik in Wannier-Stark-Systemen

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \cos(x) + Fx + g|\psi(x,t)|^2\right)\psi(x,t). \tag{B.16}$$

Im linearen Fall ($g = 0$) findet man in einem solchen System Bloch-Oszillationen [49]. In einem schwachen Feld kann man den Zerfall vernachlässigen und man findet, dass nach einer Blochperiode ein Wellenpaket, bzw. dessen Projektion auf das niedrigste Bloch-Band, bis auf eine Phase rekonstruiert wird.

Dieses Verhalten für $g = 0$ haben wir mit der Split-Operator-Methode für die in Kapitel 3 verwendeten Parameterwerte $\hbar = 3.3806$ und $F = 0.005$ und verschiedene Zeit- und Ortsdiskretisierungen simuliert. Als Anfangszustand wurde jeweils ein gaussförmiges Wellenpaket

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4}\sigma^{1/2}} \mathrm{e}^{-(x-x_0)^2/(2\sigma)^2} \tag{B.17}$$

der Breite $\sigma = 40\pi$ angenommen, das wie in Abschnitt B.3 beschrieben auf das niedrigste Bloch-Band projiziert wurde.

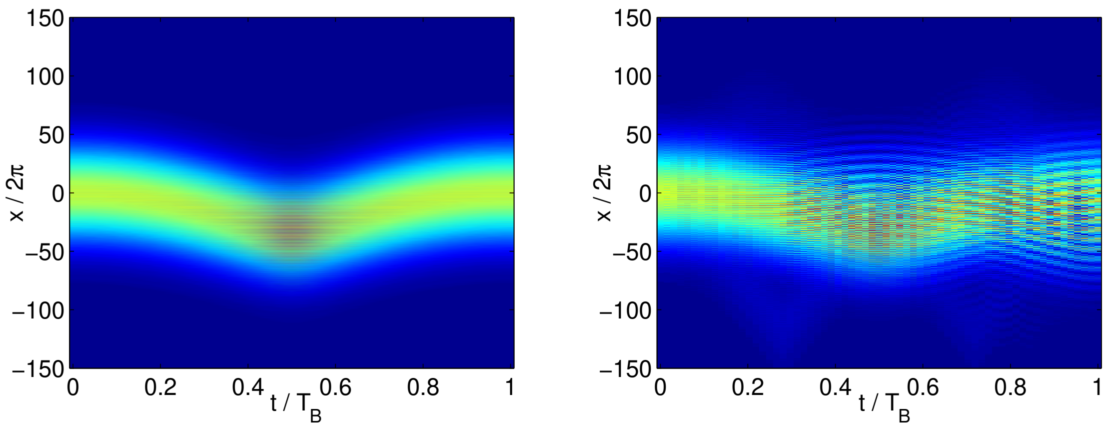

Abbildung B.3: Falschfarbendarstellung der numerischen Lösung $|\phi(x,t)|$ der Schrödingergleichung (B.16) mit $g = 0$ für zwei verschiedene Ortsdiskretisierungen $\delta x = 800\pi/2^{11}$ (links) und $\delta x = 800\pi/2^{10}$ (rechts). Die restlichen Parameter sind dem Text zu entnehmen. Rot codiert eine hohe Intensität, blau eine geringe.

In Abbildung B.3 ist die numerische Lösung $|\phi(x,t)|$ für zwei verschiedene Ortsdiskretisierungen als Falschfarbenbild dargestellt ist. Die Zeitdiskretisierung ist jeweils $\delta t = T_B/2^{19} = 0.0013$. Für $\delta x = 800\pi/2^{11}$ gibt die numerische Lösung die Dynamik richtig wieder. Nach einer Blochperiode wird das Wellenpaket bis auf die Phase reproduziert. Eine Ortsdiskretisierung von $\delta x = 800\pi/2^{10}$ ist dagegen nicht mehr ausreichend. Dieses falsche qualitative Verhalten ist weitgehend unabhängig von der gewählten Zeitdiskretisierung.

Aufgrund dieser Ergebnisse und der notwendigen Rechenzeiten wird in Kapitel 3 eine Ortsdiskretisierung von $\delta x = 1600\pi/2^{14}$ und eine Zeitdiskretisierung von $\delta t = T_B/2^{18}$ gewählt. Die Ortsdiskretisierung wurde gegenüber der notwendigen Diskretisierung im linearen Fall (siehe Abb. B.3 links) nochmals um den Faktor 4 verfeinert.

B.2 Berechnung von Blochbändern und Blochfunktionen

Die Eigenfunktionen des Hamilton-Operators

$$H_0 = \frac{p^2}{2} + V(x) \quad \text{mit } V(x+2\pi) = V(x) \tag{B.18}$$

bezeichnet man als Blochfunktionen $|\phi_{\alpha,\kappa}\rangle$. Der Bandindex $\alpha = 0, 1, 2, \ldots$ nummeriert die Blochfunktionen nach aufsteigenden Energien. Aufgrund der Periodizität des Potentials sind sie zudem Eigenfunktionen des Translationsoperators T_m über m Gitterperioden und es existiert eine weitere Quantenzahl, der Quasiimpuls $\hbar\kappa$:

$$H_0|\phi_{\alpha,\kappa}\rangle = E_\alpha(\kappa)|\phi_{\alpha,\kappa}\rangle, \quad T_m|\phi_{\alpha,\kappa}\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi m\kappa}|\phi_{\alpha,\kappa}\rangle. \tag{B.19}$$

Diese Zusammenhänge werden als Bloch-Theorem bezeichnet. Als eine Konsequenz dieses Theorems ergibt sich, dass die Blochfunktionen im Ortsraum das Produkt aus einem Faktor $\exp(\mathrm{i}2\pi m\kappa)$ und einer gitterperiodischen Funktion $u_{\alpha,\kappa}(x)$ sind. Die Funktion $u_{\alpha,\kappa}(x)$ kann man also in eine Fourier-Reihe entwickeln.

Die Zustände —$n+\kappa\rangle$ bilden eine geeignete Basis, um die Energien $E_\alpha(\kappa)$ und die Blochfunktionen $|\phi_{\alpha,\kappa}\rangle$ für ein gegebenes κ zu berechnen. Man wählt dazu einen endlichen Teil der Basis $n = -N, -N+1, \ldots, N$ und diagonalisiert den Hamilton-Operator in dieser Basis

$$H_{m,n} = \langle m+\kappa|H_0|n+\kappa\rangle \tag{B.20}$$

numerisch. Die Matrixelemente kann man leicht analytisch berechnen, wenn $V(x)$ als Fourier-Reihe gegeben ist. Für das Kosinus-Potential $V(x) = \cos(x)$ ist die Matrix $H_{m,n}$ tridiagonal:

$$H_{m,n} = \frac{\hbar^2}{2}(n+\kappa)^2\delta_{m,n} + \frac{1}{2}(\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1}). \tag{B.21}$$

Die Eigenwerte dieser Matrix sind gerade die Energien $E_\alpha(\kappa)$ zu verschiedenen Bandindizes. Die Eigenvektoren $w_{\alpha,n}(\kappa)$, wobei α die verschiedenen Eigenvektoren und n ihre Einträge durchnummeriert, sind gerade die Entwicklungskoeffizienten der Blochfunktionen

$$|\phi_{\alpha,\kappa}\rangle = \sum_n w_{\alpha,n}(\kappa)|n+\kappa\rangle. \tag{B.22}$$

Im Folgenden wollen wir eine Implementierung dieses Algorithmus darstellen. Diese ist bereits auf die Projektion eines Wellenpaketes auf ein Blochband optimiert. Das Programm gibt die Energie $E_\alpha(\kappa)$ und die Koeffizienten $w_{\alpha,n}(\kappa)$ für einen Bandindex α zurück. Das Programm kann leicht modifiziert werden, um das gesamte Bandschema zu berechnen. Wir beschränken uns auf das Potential $V(x) = \cos(x)$, das in dieser Arbeit zumeist diskutiert wird. Der Programmkopf der zugehörigen `matlab`-Routine lautet:

```
function[E,w] = blochcoef(hbar,kappa,alpha,NN);
```

Die Parameter der Funktion `blochcoef` sind

- das skalierte Plancksche Wirkungsquantum $\hbar$ (siehe Anhang A),
- ein Vektor `kappa`, der die Werte von κ enthält, für die $E_\alpha(\kappa)$ und die Koeffizienten $w_{\alpha,n}(\kappa)$ berechnet werden,
- der Bandindex `alpha`
- und der numerische Parameter `NN`. Die Anzahl der Basiszustände beträgt `2*NN+1`.

Die Rückgabewerte sind die Energien $E_\alpha(\kappa)$ für die gegebenen Werte κ, die im Vektor `E` zusammengefasst sind und die Koeffizienten $w_{\alpha,n}$. Diese sind in einer Weise angeordnet, dass der Vektor `w` einer diskretisierten Darstellung der Funktion $w(k) = w_{\alpha,n}(\kappa)$ entspricht, wobei $k = n + \kappa$ ist.

Zunächst wird der Impuls der ebenen Wellen für $\kappa = 0$ (Variable `p`) und das Potential $V(x) = \cos(x)$ in der Basis der ebenen Wellen berechnet (Variable `V`), außerdem werden einige Variablen initialisiert:

```
% Gesamtzahl Basisvektoren
N=2*NN+1;

% Impuls- und Potentialoperator in einer Basis ebener Wellen:
p=hbar*[-NN:1:NN]';
V=0.5*(spdiags(ones(N-1,1),-1,N,N)+spdiags(ones(N-1,1),-1,N,N)');

% Variablen initialisieren:
E = []; w = zeros(length(kappa)*N,1);
```

Dann wird zur Indizierung der Koeffizienten im Vektor `w` der Vektor `ind` initialisiert. Dieser gibt die Indizes der Koeffizienten $w_{\alpha,n}(\kappa = 0)$ für alle Basiszustände n wieder. Für $\kappa \neq 0$ werden sämtliche Indizes jeweils um den Wert κ/δ_κ erhöht. Diesem Wert entspricht später die Laufvariable `counter`.

```
% Vektor zur Indizierung der Blochfunktion zu einem Quasiimpuls
ind = [1:length(kappa):(N-1)*length(kappa)+1];
```

Schließlich wird für jedes κ der Hamiltonoperator `H` berechnet und diagonalisiert. Die Eigenwerte werden aufsteigend geordnet. Der Energieeigenwert des Bandes α und der zugehörige Eigenvektor werden gespeichert. Die Einträge des zugehörigen Eigenvektors sind gerade die Koeffizienten $w_{\alpha,n}(\kappa)$, die an den entsprechenden Stellen in den Vektor `w` geschrieben werden.

```
% Energie und Blochfunktion in Abhaengigkeit von kappa berechnen
for counter = 1:length(kappa)

   T=0.5*(p+hbar*kappa(counter)).^2; % kinetische Energie
   H = diag(T) + V; % Hamiltonoperator

   [C,A]= eig(H); % Eigenwerte und Eigenvektoren von H
   A = real(diag(A));

   [crap,index]=sort(A); % Index zum Sortieren
   E = [E,A(index(alpha))]; % alpha-ten Eigenwert auswaehlen
   C = C(:,index(alpha));

   w(ind+counter-1) = C; % Koeffizienten w speichern

end
```

B.3 Projektion auf ein Blochband

Um den Zustand $|\psi\rangle$ auf ein Blochband α zu projizieren, entwickelt man diesen Zustand nach Blochfunktionen und berücksichtigt nur die Terme des Bandes α:

$$|\psi_\alpha\rangle = \int_{-1/2}^{1/2} \langle\phi_{\alpha,\kappa}|\psi\rangle \; |\phi_{\alpha,\kappa}\rangle \, \mathrm{d}\kappa. \tag{B.23}$$

Der Quasiimpuls ist ein kontinuierlicher Index. In der numerischen Behandlung muss er jedoch selbstverständlich diskretisiert werden. Die Berechnung der Entwicklungskoeffizienten kann effizient im Impulsraum durchgeführt werden. Mit der Fourier-Entwicklung der Blochfunktionen

$$|\phi_{\alpha,\kappa}\rangle = \sum_n w_{\alpha,n}(\kappa)|n+\kappa\rangle \tag{B.24}$$

ergibt sich

$$\begin{aligned} b_\alpha(\kappa) &= \langle\phi_{\alpha,\kappa}|\psi\rangle = \sum_n w^*_{\alpha,n}(\kappa)\langle n+\kappa|\psi\rangle \\ &= \sum_n w^*_{\alpha,n}(\kappa)\tilde{\psi}(n+\kappa). \end{aligned} \tag{B.25}$$

Dabei ist $\tilde{\psi}(k)$ die Darstellung des Zustandes $|\psi\rangle$ im Impulsraum. Damit ist die projizierte Wellenfunktion

$$\tilde{\psi}_\alpha(k) = \int_{-1/2}^{1/2} b_\alpha(\kappa) w_{\alpha,n}(\kappa) \, \mathrm{d}\kappa, \tag{B.26}$$

mit $k = n + \kappa$.

Dieser Algorithmus wir durch die folgende `matlab`-Routine `blochproject` implementiert. Der Programmkopf dieser Funktion lautet

```
function[psi_alpha] = blochproject(psi,delta_kappa,hbar,alpha);
```

Die Parameter dieser Funktion sind

- die zu projizierende Wellenfunktion `psi` im Impulsraum,
- die Diskretisierung `delta_kappa` im Impulsraum,
- das skalierte Plancksche Wirkungsquantum $\hbar$ (siehe Anhang A)
- und der Bandindex `alpha` des Blochbandes, auf das `psi` projiziert werden soll.

Zurückgegeben wird die projizierte Wellenfunktion `psi_alpha` im Impulsraum.

Die Blochfunktionen werden wie im vorigen Kapitel beschrieben berechnet und in der Variable `w` gespeichert. Sie werden bei hohen Impulswerten abgeschnitten, damit sie auf demselben Impulsgitter wie die Wellenfunktion `psi` definiert sind.

```
% Blochfunktionen berechnen und Größe anpassen:
NN = 10; % Anzahl Basiszustaende
kappa = [-0.5:delta_kappa:0.5-delta_kappa];
[E,w]= blochcoef(hbar,kappa,alpha,NN); % Blochfunktionen berechnen
cut = (length(w)-length(psi))/2;
w = w(cut+1:end-cut).'; % Raender abschneiden
```

Wie oben beschrieben, sind die Koeffizienten der Blochfunktionen $w_{\alpha,n}(\kappa)$ in einem Vektor `w` zusammengefasst. Zur Indizierung der Koeffizienten wird der Vektor `ind` initialisiert. Dieser Vektor gibt die Indizes der Koeffizienten $w_{\alpha,n}(\kappa = 0)$ für alle Basiszustände n wieder. Für $\kappa \neq 0$ werden sämtliche Indizes jeweils um den Wert κ/δ_κ erhöht. Diesem Wert entspricht später die Laufvariable `counter`.

```
% Vektoren initialisieren:
phi_alpha = zeros(size(psi)); b = zeros(size(kappa));
indmax = floor((length(psi)/length(kappa)-1)/2);
ind = [-indmax:1:indmax]*length(kappa)+(length(psi)-length(kappa))/2;
```

Für alle Werte von κ werden zunächst die Entwicklungskoeffizienten $b(\kappa)$ als Skalarprodukt aus der entsprechenden Blochfunktion und der Wellenfunktion im Impulsraum berechnet und dann die Summation $\sum_\kappa b(\kappa)\phi_{\kappa,\alpha}(k)$ ausgeführt. Die Blochfunktionen sind im Impulsraum direkt durch die Koeffizienten im Vektor `w` gegeben. Die Koeffizienten zu einem Wert von κ werden durch den Vektor `ind + counter` indiziert.

```
% Koeffizienten und projizierte Wellenfunktion berechnen:
for counter=1:length(kappa)

   b(counter) = dot(w(ind+counter),psi(ind+counter));
   psi_alpha(ind+counter) = b(counter) * w(ind+counter);

end
```

B.4 Berechnung von Wannier-Stark-Zuständen und Quasienergien

Wie in Abschnitt 1.2.2 beschrieben, ergeben sich die Wannier-Stark-Zustände durch Propagation eines Floquet-Bloch-Zustandes über eine Blochzeit. Den Algorithmus zur Berechnung der Quasienergien und der Wannier-Stark-Zustände für ein eindimensionales System wollen wir hier kurz darstellen. Die streutheoretischen Grundlagen dieses Verfahrens finden sich in [43–45].

Wir beschränken uns auf den eindimensionalen Fall und auf das Potential $V(x) = \cos(x)$. Die Floquet-Bloch-Zustände sind Eigenzustände des Translationsoperators und haben daher wie die Bloch-Zustände eine zusätzliche Quantenzahl, den Quasiimpuls κ. Wir beschränken uns auf $\kappa = 0$, da die Wannier-Stark-Zustände unabhängig vom Quasiimpuls sind. Mit der zeitabhängigen Transformation

$$\psi(x,t) = S(t)\tilde{\psi}(x,t) = \exp(-iFxt/\hbar)\tilde{\psi}(x,t), \tag{B.27}$$

wobei $S(t)$ eine Verschiebung des Impulses um $-Ft/\hbar$ implementiert, ergibt sich ein Hamiltonoperator, der numerisch leichter handhabbar ist:

$$\widetilde{H}(t) = \frac{1}{2}(p - Ft)^2 + \cos x. \tag{B.28}$$

Dieser Hamiltonoperator kann nun wieder effizient in einer Basis $\{|m\rangle\}$ aus ebenen Wellen dargestellt werden:

$$\widetilde{H}_{m,n}(t) = \langle m|\widetilde{H}(t)|n\rangle = \frac{1}{2}(\hbar^2 n - Ft)^2\delta_{m,n} + \frac{1}{2}(\delta_{m,n+1} + \delta_{m,n-1}). \tag{B.29}$$

Durch Integration über eine Blochperiode ergibt sich der Floquet-Bloch-Operator

$$U(T_B) = S(T_B)\,\widetilde{U}(T_B) = S(T_B)\,\widehat{\exp}\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^{T_B}\widetilde{H}(t)\mathrm{d}t\right), \tag{B.30}$$

wobei $\widehat{\exp}$ die zeitgeordnete Exponentialfunktion ist. Die Eigenwerte und Eigenfunktionen des Floquet-Bloch-Operators $U(T_B)$ ergeben die Quasienergien $\mathcal{E}_\alpha$ und die Floquet-Bloch-Funktionen $|\Phi_\alpha\rangle$ in der gewählten Basis. Die Wannier-Stark-Zustände im Impulsraum erhält man nun durch eine weitere Integration über eine Blochperiode

$$|\Psi_\alpha\rangle = \frac{1}{T_B}\int_0^{T_B} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathcal{E}_\alpha t/\hbar} U(t)|\Phi_\alpha\rangle \mathrm{d}t. \tag{B.31}$$

Diese Rechnung wird ebenfalls im Impulsraum durchgeführt. Da der Floquet-Bloch-Zustand $|\Phi_\alpha\rangle$ periodisch in x ist, hat er im Impulsraum nur Beiträge für $k = n$, $n \in \mathbb{Z}$. Der Shift-Operator $S(t)$ verschiebt den Impuls gerade um $-Ft/\hbar$. Damit folgt

$$\langle k = n - Ft/\hbar|\Psi_\alpha\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathcal{E}_\alpha t/\hbar}\langle n|\tilde{U}(t)|\Phi_\alpha\rangle. \tag{B.32}$$

Durch eine zeitliche Propagation des Floquet-Bloch-Zustandes mit dem Propagator $U(t)$ ergibt sich direkt der Wannier-Stark-Zustand im Impulsraum.
Der Programmkopf der zugehörigen `matlab`-Routine lautet

```
function [E,k,wR] = wannierstark(F,hbar,alpha,NN,N_t);
```

Die Parameter der Funktion `wannierstark` sind

- das skalierte Plancksche Wirkungsquantum $\hbar$ (siehe Anhang A),
- die Feldstärke in skalierten Einheiten,
- der Bandindex α und
- die numerische Parameter `NN` und `N_t`. Die Anzahl der Basiszustände beträgt `2*NN+1`. Die Blochzeit wird bei der numerischen Integration in `N_t` Zeitschritte diskretisiert.

Die Rückgabewerte sind die Quasienergie $E_{\alpha,0}$ und die Wannier-Stark-Funktion `wR` auf dem Impulsgitter `k`.
Zunächst werden der Impuls der ebenen Wellen (Variable `p1`) und das Potential $V(x) = \cos(x)$ in der Basis der ebenen Wellen bestimmt (Variable `Pot`), sowie einige Variablen initialisiert:

```
N=2*NN+1; % Gesamtzahl Basisvektoren
T_B = hbar/F; % Bloch-Zeit

% Impuls- und Potentialoperator in einer Basis aus ebenen Wellen:
p1=hbar*([1:N]-NN-1);
Pot = 1/2*(diag(ones(1,N-1),-1)+diag(ones(1,N-1),1));

U=eye(N); % Propagator initialisieren
```

Als nächstes wird der Floquet-Bloch-Operator durch Integration über eine Blochperiode berechnet. Dazu muss die Blochzeit diskretisiert werden und man erhält aus Gleichung (B.30):

$$U(T_B) = S(T_B)\tilde{U}(T_B) \approx S(T_B) \prod_{n=1}^{N_T} \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\tilde{H}(t_n)\Delta t\right). \tag{B.33}$$

Der Shift-Operator $S(t) = \exp(-iFxt/\hbar)$ verschiebt den Impuls für $t = T_B$ gerade um -1, bildet einen Basiszustand $|n\rangle$ also auf $|n-1\rangle$ ab.

```
% Propagator ueber eine Blochzeit integrieren:
for t=1:N_t

   T = 0.5 * (p1-F*T_B*t/N_t).^2; % kin. Energie
   H = diag(T,0) + Pot; % Hamiltonian

   U = expm(-i*H*T_B/N_t/hbar) * U;

end

S = diag(ones(N-1,1),1); % Shift-Operator
U = S*U; % der Floquet-Bloch Operator
```

Dann wird der Floquet-Bloch-Operator diagonalisiert. Die Eigenwerte werden nach steigendem Imaginärteil der Quasienergie $\mathcal{E}$, also nach steigendem Absolutbetrag des Quasiwinkels $\exp(-i\mathcal{E}T_B/\hbar)$, geordnet. Die Quasienergie und der Floquet-Bloch-Zustand zum Leiterindex α werden ausgewählt.

```
% Spektrum von U, rechte Eigenvektoren
[V,D] = eig(U);
D=diag(D); % Eigenwerte: Quasiwinkel
[sorted,pos] = sort(abs(D)); % sortieren nach Imaginaerteil
pos = flipud(pos); % der Quasienergie
pos = pos(find(abs(D(pos))>0));
pos = pos(find(abs(D(pos))<1));
D = D(pos);
V = V(:,pos);

E= i*log(D)*F; % Quasiwinkel => Quasienergie
E = E(alpha); % alpha-te Leiter auswaehlen
V = V(:,alpha);
v0 = V;
```

Jetzt wird der Floquet-Bloch-Zustand in der Variable `v0` sukzessive mit dem Operator $\tilde{U}(t)$ über eine Blochzeit propagiert. Dies ergibt gemäß Gleichung (B.32) den Wannier-

Stark-Zustand im Impulsraum, der in der Variable `V` gespeichert wird. Gleichzeitig wird das Impulsgitter in `k_temp` definiert.

```
k_temp = [0];
for t=1:N_t % Zeitpropagation: entspricht Propagation im k-Raum

   % Upart fuer Unterschritte:
   T = 0.5 * (p1-F*T_B*t/N_t).^2;
   H = diag(T,0) + Pot;
   Upart = expm(-i*H*T_B/N_t/hbar);

   v0=Upart*v0;
   V=[V exp(i*E/F*t/N_t)*v0];
   k_temp = [-F*T_B*t/N_t/hbar,k_temp];

end
```

Schließlich müssen die Koeffizienten `V` noch auf das Impulsgitter transformiert werden. Außerdem wird das Impulsgitter symmetrisch gewählt.

```
V(:,t+1)=[];
k_temp(1) = [];
k = [];
for istep = -NN:NN
   k=[k,k_temp+istep];
end
k = k.';

wR = rot90(V);
wR = reshape(wR,N_t*N,1);

% Symmetrisierung des k-Bereiches
k = k(N_t:length(k));
wR = wR(N_t:length(wR));
```

Dieser Algorithmus kann problemlos auf zweidimensionale Probleme erweitert werden. Dabei ist lediglich auf die Anordnung der Basiszustände $|m_x, m_y\rangle$ zu achten. Dies ist in [33] dargestellt.

Anhang C

Jacobische elliptische Funktionen

In dieser Arbeit werden an verschiedenen Stellen die Jacobischen elliptischen Funktionen verwendet. In diesem Anhang wollen wir ihre wichtigsten Eigenschaften kurz zusammenstellen, eine ausführliche Darstellung findet sich in [86].

Eine elliptische Funktion ist eine doppelt periodische, meromorphe Funktion. Die zwölf Jacobischen elliptischen Funktionen werden mithilfe bestimmter Integrale definiert.

Wir definieren den *Parameter* $p \in [0,1]$ und den *komplementären Parameter* $p_1 = 1 - p$. Man beachte, dass manche Autoren statt des Parameters p das *elliptische Modul* $k = \sqrt{p}$ verwenden. Für ein festes p ergibt sich die *Amplitude* φ aus dem Argument u durch die Gleichung

$$u = \int_0^{\varphi} \frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{1 - p\sin^2\theta}}\,, \tag{C.1}$$

man schreibt kurz $\varphi = \mathrm{am}(u|p)$. Die Jacobischen elliptischen Funktionen sn, cn und dn sind dann definiert als

$$\mathrm{sn}(u|p) = \sin\varphi \tag{C.2}$$

$$\mathrm{cn}(u|p) = \cos\varphi \tag{C.3}$$

$$\mathrm{dn}(u|p) = \sqrt{1 - p\sin^2\varphi}\,. \tag{C.4}$$

Diese Funktionen sind doppelt periodisch. Ihre Peridizität wird ausgedrückt durch die relle Viertel-Periode $K = K(p)$ und die imaginäre Viertel-Periode $\mathrm{i}K' = \mathrm{i}K(p_1)$, wobei $K(p)$ *das vollständige elliptische Integral erster Art* ist:

$$K(p) = \int_0^{\pi/2} \frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{1 - p\sin^2\theta}}\,. \tag{C.5}$$

Die genaue Periodizität aller Jacobischen elliptischen Funktionen ist in Tabelle C.1 aufgelistet.

Die weiteren Jacobischen elliptischen Funktionen können mithilfe der Funktionen sn, cn und dn definiert werden. Seien r und q zwei der Buchstaben s, c und d. Dann gilt

$$\mathrm{nr}(u|p) = \frac{1}{\mathrm{rn}(u|p)} \quad \text{und} \quad \mathrm{rq}(u|p) = \frac{\mathrm{rn}(u|p)}{\mathrm{qn}(u|p)}\,. \tag{C.6}$$

Man kann die die zwölf Jacobischen elliptischen Funktionen über ihre Polstellen und Perioden charaktersieren, dies ist in der Tabelle C.1 dargestellt.

Halb-Periode	Polstellen				Perioden
	$\mathrm{i}K'$	$K+\mathrm{i}K'$	K	0	
$\mathrm{i}K'$	sn u	cd u	dc u	ns u	$2\mathrm{i}K'$, $4K+4\mathrm{i}K'$, $4K$
$K+\mathrm{i}K'$	cn u	sd u	nc u	ds u	$4\mathrm{i}K'$, $2K+2\mathrm{i}K'$, $4K$
K	dn u	nd u	sc u	cs u	$4\mathrm{i}K'$, $4K+4\mathrm{i}K'$, $2K$

Tabelle C.1: Klassifikation der zwölf Jacobischen elliptischen Funktionen nach Polstellen und Perioden

Im Folgenden sind noch einige Eigenschaften der drei Funktionen sn, cn und dn aufgelistet, die in dieser Arbeit hauptsächlich diskutiert werden. Wir notieren zunächst die Additionstheoreme

$$-\mathrm{dn}^2 u + p_1 = -p\,\mathrm{cn}^2 u = p\,\mathrm{sn}^2 u - p. \tag{C.7}$$

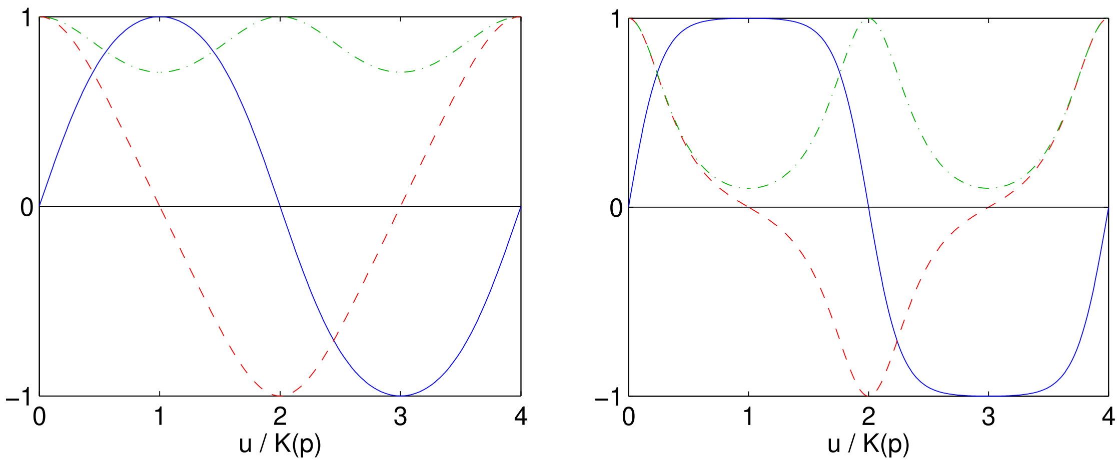

Abbildung C.1: Die Jacobischen elliptischen Funktionen sn (—), cn (– –) und dn (–·–) für $p = 0.5$ (links) und $p = 0.99$ (rechts).

Der Parameter p bestimmt unter anderem die Form der Jacobischen elliptischen Funktionen. Dies ist in Abbildung C.1 dargestellt, in der die Funktionen sn,cn und dn für zwei Werte des Parameters ($p = 0.5$ und $p = 0.99$) aufgetragen sind. Für $p \to 0$ und $p \to 1$ gehen die elliptischen Funktionen in trigonometrische bzw. hyperbolische Funktionen über (siehe Tabelle C.2).

Die Ableitungen der Jacobischen elliptischen Funktionen sind:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\,\mathrm{sn}(u|p) &= \mathrm{cn}(u|p)\,\mathrm{dn}(u|p), \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\,\mathrm{cn}(u|p) &= -\mathrm{sn}(u|p)\,\mathrm{dn}(u|p), \\
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\,\mathrm{dn}(u|p) &= -p\,\mathrm{sn}(u|p)\,\mathrm{cn}(u|p).
\end{aligned} \tag{C.8}$$

	$p \to 0$	$p \to 1$
$\mathrm{sn}(u\|p)$	$\sin u$	$\tanh u$
$\mathrm{cn}(u\|p)$	$\cos u$	$\mathrm{sech} u$
$\mathrm{dn}(u\|p)$	1	$\mathrm{sech} u$

Tabelle C.2: Grenzwerte Jacobischer elliptischer Funktionen für $p \to 0$ und $p \to 1$

Mit diesen Formeln und den Additionstheoremen (C.7) zeigt man leicht, dass die Jacobischen elliptischen Funktionen die freie nichtlineare Schrödingergleichung erfüllen.

Die Integrale über die Quadrate der Jacobischen elliptischen Funktionen führen auf das elliptische Integral zweiter Art [86]. Wir notieren hier nur die Ergebnisse für die Funktionen sn und cn:

$$\begin{aligned} p \int_0^u \mathrm{sn}^2(t|p)\,\mathrm{d}t &= -E(u|p) + u \\ p \int_0^u \mathrm{cn}^2(t|p)\,\mathrm{d}t &= E(u|p) - p_1 u. \end{aligned} \tag{C.9}$$

Das elliptische Integral zweiter Art ist mit $\varphi = \mathrm{am}\, u$ definiert als

$$E(u|p) = \int_0^{\varphi} \sqrt{1 - p\sin^2\theta}\,\mathrm{d}\theta. \tag{C.10}$$

Literaturverzeichnis

[1] F. Bloch, *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Z. Phys **52** (1928) 555

[2] C. Zener, *A Theory of Electrical Breakdown of Solid Dielectrics*, Proc. Roy. Soc. Lond. A **145** (1934) 523

[3] J. Feldmann, K. Leo, J. Shah, B. A. B. Miller, J. E. Cunningham, T. Meier, G. von Plessen, A. Schulze, P. Thomas, and S. Schmitt-Rink, *Optical Investigation of Bloch Oscillations in a Semiconductor Superlattice*, Phys. Rev. B **46** (1992) 7252

[4] Qian Niu, Xian-Geng Zhao, G. A. Georgakis, and M. G. Raizen, *Atomic Landau-Zener Tunneling and Wannier-Stark ladders in Optical Potentials*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 4504

[5] B. P. Anderson and M. A. Kasevich, *Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays*, Science **282** (1998) 1686

[6] O. Morsch, J. H. Müller, M. Cristiani, D. Ciampini, and E. Arimondo, *Bloch Oscillations and Mean-Field Effects of Bose-Einstein Condensates in 1D Optical Lattices*, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 140402

[7] J. Zapata, A. M. Guzmán, M. G. Moore, and P. Meystre, *Gravity-induced Wannier-Stark ladder in an optical lattice*, Phys. Rev. A **63** (2001) 023607

[8] A. S. Parkins and D. F. Walls, *The Physics of Trapped Dilute-Gas Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rep. **303** (1998) 1

[9] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. Pitaevskii, and S. Stringari, *Theory of Bose-Einstein condensation in trapped gases*, Rev. Mod. Phys. **71** (1999) 463

[10] A. J. Leggett, *Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts*, Rev. Mod. Phys. **73** (2001) 307

[11] L. Pitaevskii and S. Stringari, *Bose-Einstein Condensation*, Oxford University Press, Oxford, 2003

[12] J. R. Taylor, *Scattering Theory*, John Wiley, New York, 1972

[13] N. N. Bogoliubov, J. Phys. USSR **11** (1947) 23

[14] S. Stenholm, *Heuristic field theory of Bose-Einstein condensates*, Phys. Rep. **363** (2002) 173

[15] C. W. Gardiner, *Particle-number-conserving Bogoliubov method which demonstrates the validity of the time-dependent Gross-Pitaevskii equation for a highly condensed Bose gas*, Phys. Rev. A **56** (1997) 1414

[16] Y. Castin and R. Dum, *Low-temperature Bose-Einstein condensates in time-dependent traps: Beyond the $U(1)$ symmetry-breaking approach*, Phys. Rev. A **57** (1998) 3008

[17] E. H. Lieb, R. Seiringer, and J. Yngvason, *Bosons in a trap: A rigorous derivation of the Gross-Pitaevskii energy functional*, Phys. Rev. A **61** (2000) 043602

[18] R. K. Dodd, J. C. Eilbeck, J. D. Gibbon, and H. C. Morris, *Solitons and nonlinear wave equations*, Academic Press, London, 1982

[19] Y. Castin and R. Dum, *Instability and Depletion of an Excited Bose-Einstein Condensate in a Trap*, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 3553

[20] A. Görlitz, J. M. Vogels, A. E. Leanhardt, C. Raman, T. L. Gustavson, J. R. Abo-Shaeer, A. P. Chikkatur, S. Gupta, S. Inouye, T. R. Rosenbrand, D. E. Pritchard, and W. Ketterle, *Realization of Bose-Einstein Condensates in Lower Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **87** (2001) 130402

[21] M. Greiner, I. Bloch, O. Mandel, T. W. Hänsch, and T. Esslinger, *Bose-Einstein condensates in 1D- and 2D- optical lattices*, Appl. Phys. B **73** (2001) 769

[22] M. Olshanii, *Atomic Scattering in the Presence of an External Confinement and a Gas of Impenetrable Bosons*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 938

[23] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature **415** (2002) 39

[24] B. Paredos, A. Widera, V. Murg, O. Mandel, S. Fölling, I. Cirac, G. V. Shlyapnikov, T.W. Hänsch, and I. Bloch, *Tonks gas in an optical lattice*, Nature (2004) submitted

[25] H. J. Metcalf and P. van der Straten, *Laser Cooling and Trapping*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 1999

[26] R. Grimm and M. Weidemüller, *Optical Dipole Traps for Neutral Atoms*, Adv. At. Mol. Opt. Phys. **42** (2000) 95

[27] P. Meystre, *Atom Optics*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2001

[28] B. P. Anderson, T. L. Gustavson, and M. A. Kasevich, *Atom Trapping in Nondissipative Optical Lattices*, Phys. Rev. A **53** (1996) R3727

[29] 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

[30] K. W. Madison, M. C. Fischer, R. B. Diener, Qian Niu, and M. G. Raizen, *Dynamical Bloch Band Supression in an Optical Lattice*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 5093

[31] M. Cristiano, O. Morsch, N. Malossi, M. Jona-Lasinio, M. Anderlini, E. Courtade, and E. Arimondo, *Instabilities of a Bose-Einstein condensate in a periodic potential: an experimental investigation*, Optics Express **12** (2004) 4

[32] G. Cennini, G. Ritt, C. Geckeler, and M. Weitz, *All-Optical Realization of an Atom Laser*, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 240408

[33] F. Keck, *Wannier-Stark-Systeme in zwei Dimensionen*, Dissertation, Universität Kaiserslautern, 2002

[34] G. H. Wannier, *Wave Functions and Effective Hamiltonian for Bloch Electrons in an Electric field*, Phys. Rev. **117** (1960) 432

[35] J. Zak, *Stark Ladder in Solids?*, Phys. Rev. Lett. **20** (1968) 1477

[36] G. H. Wannier, *Stark Ladder in Solids? A Reply*, Phys. Rev. **181** (1969) 1364

[37] J. Zak, *Stark Ladder in Solids? A Reply to a Reply*, Phys. Rev. **181** (1969) 1366

[38] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Wannier-Stark resonances in optical and semiconductor superlattices*, Phys. Rep. **366** (2002) 103

[39] G. Czycholl, *Theoretische Festkörperphysik*, Vieweg, Braunschweig, 2000

[40] E. Kaxiras, *Atomic and Electronic Structure of Solids*, Cambridge University Press, Cambridge, 2003

[41] W. Kohn, *Analytic Properties of Bloch Waves and Wannier Functions*, Phys. Rev. **115** (1959) 809

[42] A. J. F. Siegert, *On the derivation of the Dispersion Formula for Nuclear Reactions*, Phys. Rev. **56** (1939) 750

[43] M. Glück, A. R. Kolovsky, H. J. Korsch, and N. Moiseyev, *Calculation of Wannier-Bloch and Wannier-Stark states*, Eur. Phys. J. D **4** (1998) 239

[44] M. Glück, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Lifetime statistics for a Bloch particle in ac and dc fields*, Phys. Rev. E **60** (1999) 247

[45] M. Glück, *Wannier-Stark Resonances*, Dissertation, Universität Kaiserslautern, 2000

[46] M. Holthaus and D. W. Hone, *Localization effects in ac-driven tight-binding lattices*, Phil. Mag. B **74** (1996) 105

[47] M. Grifoni and P. Hänggi, *Driven quantum tunneling*, Phys. Rep. **304** (1998) 229

[48] H. J. Korsch and S. Mossmann, *An algebraic solution of driven single band tight binding dynamics*, Phys. Lett. A **317** (2003) 54

[49] T. Hartmann, F. Keck, H. J. Korsch, and S. Mossmann, *Dynamics of Bloch oscillations*, New J. Phys. **6** (2004) 2

[50] M. Glück, F. Keck, and H. J. Korsch, *Coherent Pulse Output from Bose-Einstein Condensates in Wannier-Stark Systems*, Phys. Rev. A **66** (2002) 043418

[51] 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

[52] 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

[53] K. Leo, *High-Field Transport in Semiconductor Superlattices*, Springer, Berlin Heidelberg New York, 2003

[54] C. M. de Sterke, J. N. Bright, P. A. Krug, and T. E. Hammon, *Observation of an optical Stark ladder*, Phys. Rev. E **57** (1998) 2365

[55] R. Morandotti, U. Peschel, J. S. Aitchinson, H. S. Eisenberg, and Y. Silberberg, *Experimental Observation of Linear and Nonlinear Optical Bloch Oscillations*, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 4756

[56] T. Pertsch, P. Dannberg, W. Elflein, A. Bräuer, and F. Lederer, *Optical Bloch Oscillations in Temperature Tuned Waveguide Arrays*, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 4752

[57] G. Lenz, I. Talanina, and C. Martijin de Sterke, *Bloch Oscillations in an Array of Curved Optical Waveguides*, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 963

[58] J. M. Martinis, M. H. Devoret, and J. Clarke, *Experimental tests for the quantum behavior of a macroscopic degree of freedom: The phase difference across a Josephson junction*, Phys. Rev. B **35** (1987) 4682

[59] J. B. Ketterson and S. N. Song, *Superconductivity*, Cambridge University Press, Cambridge, 1999

[60] J. M. Martinis, S. Nam, and J. Aumentado, *Rabi Oscillations in a large Josephson–Junction qubit*, Phys. Rev. Lett. **89** (2002) 117901

[61] Y. Nakamura, Y. A.Pashkin, and J. S. Tsai, *Coherent control of macroscopic quantum states in a single-Cooper-pair box*, Nature **398** (1999) 786

[62] D. Vion, A. Aassime, A. Cottet, P. Joyez, H. Pothier, C. Urbina, D. Esteve, and M. H. Devoret, *Manipulating the quantum state of an electrical circuit*, Science **296** (2002) 886

[63] A. Rauh and G. H. Wannier, *Theory of Stark Ladders in the Optical Absorption of solids*, Solid State Commun. **15** (1974) 1239

[64] M. Glück, F. Keck, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Wannier-Stark states of a quantum particle in 2D lattices*, Phys. Rev. Lett. **86** (2001) 3116

[65] W. Yan, F. Claro, Z.Y. Zeng, Y.L. Zhao, and J.Q. Liang, *Probing the ladder spectrum arising from motion in a 2-D lattice driven by the in-plane constant force*, cond-mat/0105567 (2001)

[66] F. Keck and H. J. Korsch, *Infinite-variable Bessel functions in two-dimensional Wannier-Stark systems*, J. Phys. A **35** (2002) L105

[67] M. Glück, F. Keck, A. R. Kolovsky, and H. J. Korsch, *Branched classical and quantum flow in 2D Wannier-Stark systems*, Phys. Rev. A **66** (2002) 023403

[68] A. R. Kolovsky and H. J. Korsch, *Bloch oscillations of cold atoms in two-dimensional optical lattices*, Phys. Rev. A **67** (2003) 063601

[69] I.A. Dmitriev and R.A. Suris, *Electron localization and Bloch oscillations in quantum-dot superlattices under a constant electric field*, Semiconductors **35** (2001) 212

[70] I.A. Dmitriev and R.A. Suris, *Damping of Bloch oscillations in quantum-dot superlattices: a general approach*, Semiconductors **36** (2002) 1364

[71] D. Witthaut, F. Keck, H. J. Korsch, and S. Mossmann, *Bloch oscillations in two-dimensional lattices*, New J. Phys. **6** (2004) 41

[72] M. Holthaus, *Bloch oscillations and Zener breakdown in an optical lattice*, J. Opt. B **2** (2000) 589

[73] W. V. Houston, *Acceleration of Electrons in a Crystal lattice*, Phys. Rev. **57** (1940) 184

[74] N. G. R. Broderick, C. M. de Sterke, and B. J. Eggleton, *Soliton solutions in Rowland ghost gaps*, Phys. Rev. E **52** (1995) 5788

[75] A. A. Sukhorukov and Y. S. Kivshar, *Discrete gap solitons in modulated waveguide arrays*, Opt. Lett. **27** (2002) 2112

[76] D. H. Dunlap and V. M. Kenkre, *Dynamic localization of a charges particle moving under the influence of an electric field*, Phys. Rev. B **34** (1986) 3625

[77] A. Trombettoni and A. Smerzi, *Discrete Solitons and Breathers with Dilute Bose-Einstein Condensates*, Phys. Rev. Lett. **86** (2000) 2353

[78] Q. Thommen, J. C. Garreau, and V. Zehnlé, *Classical Chaos with Bose-Einstein Condensates in Tilted Optical Lattices*, Phys. Rev. Lett. **91** (2003) 210405

[79] F. Kh. Abdullaev, B. B. Baizakov, S. A. Darmanyan, V. V. Konotop, and M. Salerno, *Wannier function analysis of the nonlinear Scrödinger equation with a periodic potential*, Phys. Rev. A **64** (2001) 043606

[80] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, McGraw Hill, New York, 1953

[81] P. Leboeuf and N. Pavloff, *Bose-Einstein beams: Coherent propagation through a guide*, Phys. Rev. A **64** (2001) 033602

[82] V. Hakim, *Nonlinear Schrödinger flow past an obstacle in one dimension*, Phys. Rev. E **55** (1997) 2835

[83] L. D. Carr, C. W. Clark, and W. P. Reinhardt, *Stationary solutions of the one-dimensional nonlinear Schrödinger equation: II. Case of attractive nonlinearity*, Phys. Rev. A **62** (2000) 063611

[84] R. D'Agosta, B.A. Malomed, and C. Presilla, *Stationary solutions of the Gross–Pitaevski equation with a linear counterpart*, Phys. Lett. A **275** (2000) 424

[85] L. D. Carr, C. W. Clark, and W. P. Reinhardt, *Stationary solutions of the one-dimensional nonlinear Schrödinger equation: I. Case of repulsive nonlinearity*, Phys. Rev. A **62** (2000) 063610

[86] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, Inc., New York, 1972

[87] N. Moiseyev, L. D. Carr, B. A. Malomed, and Y. B. Band, *Transition from Resonances to Bound States in Nonlinear Systems: Application to Bose-Einstein condensates*, J. Phys. B (2004) L193

[88] K. Gottfried, *Quantum Mechanics*, Benjamin, New York, 1966

[89] J. R. Dormand and P. J. Prince, *A family of embedded Runge-Kutta formulae*, J. Comp. Appl. Math. **6** (1980) 19

[90] L. P. Kok, J. W. de Maag, and H. H. Brouwer, *Formulas for the delta-shell plus Coulomb potential for all partial waves*, Phys. Rev. C **26** (1982) 2381

[91] H. J. Korsch, R. Möhlenkamp, and H. D. Meyer, *On the Canonical Product Expansion of the S–Matrix*, J. Phys. B **17** (1984) 2955

[92] N. Moiseyev, *Quantum theory of resonances: calculating energies, widths and cross-sections by complex scaling*, Phys. Rep. **302** (1998) 211

[93] P. Schlagheck and T. Paul, *Complex scaling approach to the decay of Bose-Einstein condensates*, cond-mat/0402089 (2004)

[94] B. P. Anderson and M. A. Kasevich, *Spatial observation of Bose-Einstein condensation of ^{87}Rb in a confining potential*, Phys. Rev. A **59** (1999) R938

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

[96] M. D. Feit, J. A. Fleck Jr., and A. Steiger, *Solution of the Schrödinger Equation by a Spectral Method*, J. Comput. Phys. **47** (1982) 412

[97] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, London, 2. edition, 1995

Danksagung

Dem Leser, der bis hierhin durchgehalten hat, danke ich für seine Geduld und sein Interesse an meiner Arbeit. Diese wäre ohne die Hilfe vieler Personen, bei denen ich mich an dieser Stelle herzlich bedanken möchte, nicht möglich gewesen.

Meinem Chef, Herrn Prof. Dr. Hans Jürgen Korsch danke ich für interessante Antworten und noch interessantere Fragen, Anregungen, Diskussionen, einen dekadenten Computer und vieles mehr.

Ich danke den jetzigen und vormaligen Mitgliedern der Arbeitsgruppe ,,Theoretische Quantendynamik”, Dr. Frank Keck, Stefan Moßmann, Mauro Werder, Christian Schumann, Timo Hartmann, Kevin Rapedius und Andrea Schulze, für Gespräche, Anmerkungen und Korrekturen. Insbesondere Stefan, ,,mein” Doktorand und Büro-Mitinsasse, hat mir oft geholfen.

Einige sehr hilfsbereite Freunde haben sich um die Rechtschreibung und Lesbarkeit dieser Arbeit verdient gemacht: Michael Witthaut, Christian Schäfer, Martin Monerjan, Christian Barthel und Astrid Kronenberger. Vielen Dank für eure Geduld und euren unerschrockenen Kampf gegen die ,,gleichrangigen (nebengeordneten) Teilsätze”.

Ein besonderer Dank gebührt meinen Eltern, ohne deren Unterstützung mein Studium nicht möglich gewesen wäre.

So long, and thanks for all the fish.

Douglas Adams, ,,So long, and thanks for all the fish”