Landau-Zener-Tunneln von Atomen in beschleunigten Lichtfeldern

Dissertation
zur Erlangung des Grades
Doktor der Naturwissenschaften
(Dr. rer. nat.)
vorgelegt am Fachbereich Physik der
Universität Gesamthochschule Essen

von

Gerd Koboldt
geboren in Mühlhausen in Thüringen am 21.Juni 1970

Essen, Mai 2000

Referent: Prof. Dr. Robert Graham
Koreferent: Prof. Dr. Fritz Haake

Disputation: Essen, den 10. Juli 2000

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung

Das Verhalten von quantenmechanischen Teilchen in periodischen Potentialen war gleich nach der Entwicklung der Quantenmechanik von großem Interesse [1]. Ein Grund dafür war und ist die Möglichkeit, die Eigenschaften von Festkörpern richtig zu verstehen. Ohne eine quantenmechanische Beschreibung der Elektronen im periodischen Potential lassen sich zum Beispiel die Unterschiede zwischen Leitern, Halbleitern und Isolatoren nicht verstehen. Die Transporteigenschaften der Elektronen in Festkörpern werden maßgeblich vom periodischen Potential beeinflusst.

In der Quantenmechanik führt das Tunneln dazu, dass einzelne Teilchen nicht vollständig in den Mulden eines periodischen Potentials lokalisiert sein können [2]. Durch die Überlagerung der Zustände verschiedener Mulden ergibt sich für die Teilchen vielmehr die Möglichkeit, durch das gesamte Potential zu wandern. Das Bloch-Theorem [1] sagt uns, dass die Wellenfunktion für einen Zustand im periodischen Potential die einer ebenen Welle ist, welche mit einer periodischen Funktion moduliert wird. Außerdem gibt es nicht zu jeder Energie erlaubte Zustände. Das Spektrum besteht aus erlaubten Bereichen (den Bändern) und verbotenen Zonen (den Lücken). Die Dispersionsrelation, d.h. die Abhängigkeit der Energie vom Wellenvektor, ist eine periodische Funktion.

Legt man nun an solch einen (idealen) Festkörper eine Gleichspannung an, so führen die Elektronen Bloch-Oszillationen aus [1], d.h. dass unendlich ausgedehnte periodische System bildet einen perfekten Isolator für Gleichstrom. Die durch die Gleichspannung auf die Elektronen im Festkörper ausgeübte Kraft führt zu Oszillationen der Elektronen (Wechselstrom), aber nicht zu einem Transport von Ladung. Die Amplitude der Oszillationen kann sich dabei über einige Perioden des Potentials erstrecken. Für solche Oszillationen gibt es in der klassischen Physik kein Analogon. Sie entstehen durch wiederholte Bragg-Reflexion der Wellenfunktionen der Atome. Das Anlegen eines linearen Potentials entspricht einem Kippen des periodischen Potentials. Ersteinmal wird dadurch das oben beschriebene „Blochtunneln“ unterbunden, wodurch es zur Lokalisierung der Teilchen in den Mulden kommt. Gleichzeitig tritt dann ein weiterer Tunnelprozess (Landau-Zener-Tunneln) in Kraft [3, 4], der zu Übergängen zwischen den Energiebändern führt. Dazu reicht schon eine beliebig kleine Kraft aus. In der klassischen Physik hingegen gibt es eine minimale Kraft, die nötig ist, damit die Atome nicht mehr in den Mulden gefangen sind. Diese Kraft ist dadurch gekennzeichnet, dass das gekippte periodische Potential keine Minima mehr aufweist. Landau-Zener-Tunneln spielt in den unterschiedlichsten Fragestellungen der Physik eine wichtige Rolle [5, 6, 7, 8]. Es liefert zum Beispiel auch eine Erklärung für die Strom-Spannungs-Kennlinie einer Zener-Diode [9].

Die Energiezustände in solchen gekippten Potentialen bestehen aus Leitern von Eigenwerten [10]. Jedes Band spaltet in eine solche Leiter auf. Dies ist analog zum Aufspalten entarteter Zustände beim Stark-Effekt. Da fortwährendes Landau-Zener-Tunneln möglich ist, kann ein Teilchen in einem solchen Potential schließlich nach unendlich entweichen. Dadurch erhalten die Zustände eine Breite. Es handelt sich also um eine Leiter von instabilen Zuständen. Die Existenz dieser Zustände war lange umstritten und es gab in der Literatur eine ausführliche Diskusion darüber [10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17]. Zum einen fehlte lange Zeit eine mathematisch exakte Beschreibung der Resonanzzustände, andererseits war es auch experimentell nicht möglich viele der vorhergesagten Phänomene zu messen. Die Ursache dafür liegt vor allem darin, dass in einem Festkörper nie die beschriebenen idealen Verhältnisse vorliegen.

Mit der stark verbesserten Experimentiertechnik, war es dann in den 1980er Jahren erstmals möglich Wannier-Stark-Leitern mit Hilfe von optischen Absorptionsexperimenten nachzuweisen [18]. Jedoch wurden diese nicht an Festkörpern gemessen, sondern es wurden hierzu sogenannte Übergitterstrukturen gebaut. Diese Übergitter bestehen aus einer periodischen Abfolge von Halbleitermaterial. Häufig werden GaAs und AlGaAs benutzt. Eine Schichtfolge aus diesen Substanzen bildet ein periodisches Potential für die Leitungselektronen mit einer Gitterkonstante von ungefähr 10 nm. In den genannten Experimenten konnten Bloch-Oszillationen nachgewiesen werden. Auch bei der theoretischen Betrachtung spielen solche Übergitterstrukturen eine größere Rolle [19, 20].

Die rasante Entwicklung der Laserkühlung von Atomen in den letzten Jahren erlaubt es Experimente mit Atomen in Lichtpotentialen durchzuführen. So kann man durch zwei gegenläufige Laser eine stehende Welle erzeugen. Die stehende Welle bildet ein periodisches Potential für die kalten Atome. Verstimmt man die Laser noch zusätzlich, so kann man auch laufende oder beschleunigt laufende Wellen erzeugen. Im mitbewegten Bezugssystem entsprechen die beschleunigt laufenden Wellen einem gekippten periodischen Potential. Die Experimente mit den Atomen in Lichtpotentialen haben den Vorteil, dass hierbei ein besonders reines periodisches Potential gegeben ist und verschiedene Parameter, wie die Stärke des Potentials und der Anfangszustand, in weiten Grenzen variiert werden können. Damit eignen sich solche Systeme hervorragend, um das Verhalten von quantenmechanischen Teilchen in periodischen Potentialen zu studieren. In den Experimenten war es möglich, die Bloch-Oszillationen direkt zu messen [21]. Andere Experimente haben die Landau-Zener-Rate für das Tunneln der Atome aus dem untersten Energieband heraus bestimmt [22]. Ein Ziel dieser Arbeit ist es, diese Experimente zu beschreiben und ihre Ergebnisse mit den theoretischen Vorhersagen zu vergleichen. Dabei wollen wir unter anderem die beobachteten Abweichungen der Tunnelrate von der Landau-Zener-Theorie erklären.

Neben den Größen die nur das Langzeitverhalten bestimmen, können solche Systeme auch genutzt werden, um das Zeitverhalten für beliebige Zeiten bei Tunnelprozessen zu studieren [23]. Hier interessiert vor allem das kohärente Verhalten der Atome beim Tunneln für kurze Zeiten. Für lange Zeiten erwartet man für die instabilen Zustände der Wannier-Leitern, dass sie durch ein exponentielles Zerfallsgesetz beschrieben werden können. Von besonderem Interesse ist, bis zu welcher Zeit kohärentes Verhalten gemessen werden kann, und wodurch diese Zeit bestimmt ist. Die Experimente mit den Atomen in beschleunigten Lichtfeldern haben erstmals die kohärente Anfangsphase des Tunnelprozesses nachweisen können [24]. Diese Fragestellungen sollen in der vorliegenden Arbeit ebenso erörtert werden.

Neben den Experimenten mit „einzelnen“ Atomen ist es seit kurzer Zeit auch möglich ähnliche Experimente mit Bose-Kondensaten durchzuführen [25]. In den Bose-Kondensaten spielt die Wechselwirkung der Atome untereinander die Rolle eines zusätzlichen Potentials. Daneben wird auch der Einfluss der Fallen, in denen die Bose-Kondensate erzeugt werden, auf die Dynamik der Kondensate untersucht werden.

Mit Hilfe der Bose-Kondensate ist es möglich sogenannte Atom-Laser zu konstruieren [26]. Hierbei wird das Bose-Kondensat gezielt aus einer Falle ausgekoppelt. Die Wechselwirkung zwischen den ausgekoppelten Atomen und Licht kann man nutzen, um zum Beispiel Wellenleiter für die Kondensate zu bauen. Laufende Lichtwellen, so wie sie hier untersucht werden, lassen sich als eine Art Förderband für das Bose-Kondensat verwenden.

Diese Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: Im zweiten Kapitel werden zunächst die theoretischen Grundlagen zusammengefasst und ein kurzer Überblick über einige der Experimente gegeben. Am Anfang steht dabei die Wechselwirkung von Atomen mit Licht. Danach werden wir vorallem auf die Quantenmechanik von Teilchen im periodischen Potential eingehen. Im dritten Kapitel werden wir dann studieren, wie sich ein beschleunigtes Lichtfeld auf die Dynamik der Atome auswirkt. Wir werden die Abweichungen der Tunnelrate von der Landau-Zener-Theorie und die zeitliche Entwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im untersten Energieband betrachten. Zum Abschluß des dritten Kapitels werden die theoretischen Vorhersagen mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Im vierten Kapitel stellen wir uns die Frage, welchen Einfluss die Wechselwirkung der Atome auf das bisher gesagte hat. Wir werden dies anhand von Bose-Einstein-Kondensaten betrachten. Dabei wird außerdem noch eine zusätzliche Falle eingeführt. Der Grundzustand der Bose-Kondensate in einem von einer parabolischen Falle überlagertem Lichtfeld nimmt im vierten Kapitel einen weiten Raum ein. Danach untersuchen wir anhand von numerischen Simulationen die Dynamik solcher Kondensate. Den Abschluss dieses Kapitel bildet eine Betrachtung der Quantenmechanik eines Teilchens in einem Potential, welches aus parabolischer Falle und periodischem Lichtfeld zusammengesetz ist. Im fünften Kapitel wird die verwendete Numerik beschrieben. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf einer recht neuen Methode zur Berechnung komplexer Eigenwerte. Den Abschluss dieser Arbeit bildet dann eine Zusammenfassung der Ergebnisse und eine kurze Diskusion der offengebliebenen Fragestellungen.

2. Theoretische und Experimentelle Grundlagen

In diesem Kapitel werden die für das Folgende wichtigen Grundlagen zusammengefasst und die Experimente beschrieben, welche die Fragestellung der Arbeit inspiriert haben.

Als erstes wird die Wechselwirkung von Atomen mit Licht skizziert, wobei besonderes Augenmerk auf Zwei-Niveau-Atome im nichtresonanten Laserfeld liegt. Die Wechselwirkung wird dann durch ein induziertes Dipolmoment des Atoms verursacht. Diese Dipolwechselwirkung kann unter anderem genutzt werden, um Atome mit Hilfe von Licht einzufangen. Damit eröffnet sich die Möglichkeit für viele interessante Experimente, wie zum Beispiel die Untersuchung des Verhaltens von Atomen im periodischen Potential.

Die Dipolwechselwirkung von Atomen mit Licht erlaubt es, Lichtfelder auch als Fallen für neutrale Atome zu benutzen. Einige Eigenschaften dieser Dipolfallen sind Gegenstand eines weiteren Abschnittes.

Die quantenmechanische Beschreibung eines Teilchens im periodischen Potential nimmt dann einen weiten Raum ein. Dabei werden auch viele der später benötigten Gleichungen erarbeitet.

Als letztes werden die Experimente vorgestellt, welche den Fragestellungen dieser Arbeit zugrunde liegen. Es werden die wichtigsten Ergebnisse dargestellt und eine qualitative Erklärung gegeben. Gleichzeitig dient dieser Abschnitt dazu, die in Abschnitt 2.1 gemachten Näherungen zu verifizieren.

2.1 Atome in einem Lichtfeld

Der Hamiltonoperator, der die Wechselwirkung zwischen einem Atom und einem Strahlungsfeld beschreibt, hat die Form

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + H_\mathrm{A} + H_\mathrm{S} + H_\mathrm{WW}\,. \tag{2.1}$$

Dabei ist $\mathbf{p}$ der Schwerpunktimpuls des Atoms und m dessen Masse, $H_\mathrm{A} = \sum_j \varepsilon_j a_j^\dagger a_j$ ist der Atomhamiltonoperator mit den fermionischen Erzeuger- und Vernichteroperatoren $a_j^\dagger$, a_j und den Energieniveaus ε_j. $H_\mathrm{S} = \sum_j \hbar\omega_j b_j^\dagger b_j$ ist der Hamiltonoperator des Strahlungsfeldes mit den bosonischen Erzeuger- und Vernichteroperatoren $b_j^\dagger$, b_j und den Frequenzen ω_j. Der Wechselwirkungshamiltonoperator H_WW setzt sich aus drei Termen zusammen

$$\begin{aligned} H_\mathrm{WW} &= -\frac{e}{m_\mathrm{el}} \sum_j \mathbf{q}_j \mathbf{A}(\mathbf{r}+\mathbf{s}_j,t) + \frac{e^2}{2m_\mathrm{el}} \sum_j \mathbf{A}^2(\mathbf{r}+\mathbf{s}_j,t) \\ &\quad -\frac{e}{m_\mathrm{el}} \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}+\mathbf{s}_j,t) \\ &= H_\mathrm{l} + H_\mathrm{q} + H_\mathrm{B} \end{aligned} \tag{2.2}$$

wobei $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ das Vektorpotential in Coulombeichung, $\mathbf{r}$ die Schwerpunktkoordinate des Atoms, $\mathbf{s}_j$ der Abstand des j-ten Elektrons zum Schwerpunkt, $\mathbf{q}_j$ dessen Impuls, m_el dessen Masse und e die Elementarladung ist.

Die Wechselwirkung, welche in der Ankopplung des Elektronenspins $\mathbf{S}_j$ an das Magnetfeld $\mathbf{B}(\mathbf{r}+\mathbf{s}_j,t)$ begründet ist, kann im Weiteren unberücksichtigt bleiben, da $H_\mathrm{B}/H_\mathrm{l} \sim a_0/\lambda$ ist [27], und der Bohrsche Radius a_0 viel kleiner als die in den Experimenten benutzte Lichtwellenlänge λ ist.

Der Beitrag quadratisch in $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ beschreibt Zweiphotonen-Prozesse und trägt nur bei hoher Intensität des Lichtes bei. Dieser Term soll ebenso vernachlässigt werden. Um Schreibarbeit zu sparen, lassen wir die Indizierung der Elektronen ebenfalls weg. Entwickelt man das Vektorpotential nach den Eigenmoden $\mathbf{u}_k(\mathbf{r})$ des elektromagnetischen Feldes so gilt [28]

$$\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \sum_k \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k\epsilon_0}} \left(\mathbf{u}_k(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_k t} b_k + \mathbf{u}_k^*(\mathbf{r}) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_k t} b_k^\dagger \right) . \tag{2.3}$$

Der Wechselwirkungsterm in den elektronischen Feldoperatoren nimmt dann folgende Form an

$$H_\mathrm{WW} = \hbar \sum_{jkl} a_j^\dagger a_k \left(g_{ljk} b_l + g_{ljk}^* b_l^\dagger \right) , \tag{2.4}$$

mit den Koeffizienten

$$g_{ljk} = -\frac{e}{m_\mathrm{el}} \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_l\epsilon_0}} \int \mathrm{d}^3 s\, \phi_j^*(\mathbf{s}) \mathbf{u}_l(\mathbf{r}+\mathbf{s}) \mathbf{q} \phi_k(\mathbf{s}) \, . \tag{2.5}$$

Die $\phi_k(\mathbf{s})$ sind dabei die elektronischen Wellenfunktionen. Da die Lichtwellenlänge viel größer als atomare Abstände ist, kann in Gleichung (2.5) die Variation der $\mathbf{u}_l$ innerhalb des Atoms vernachlässigt werden, so dass gilt

$$\begin{aligned} g_{ljk} &= -\mathbf{u}_l(\mathbf{r})\frac{e}{m_{\mathrm{el}}}\frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_l\epsilon_0}}\int \mathrm{d}^3 s\phi_j^*(\mathbf{s})\mathbf{q}\phi_k(\mathbf{s}) && (2.6)\\ &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2\hbar\omega_l\epsilon_0}}\mathbf{u}_l(\mathbf{r})(\varepsilon_j-\varepsilon_k)\mathbf{d}_{jk} && (2.7)\\ \mathbf{d}_{jk} &= \int \mathrm{d}^3 s\,\phi_j^*(\mathbf{s})e\mathbf{s}\phi_k(\mathbf{s})\,. && (2.8) \end{aligned}$$

Hier wurde das Dipolmatrixelement $\mathbf{d}_{jk}$ eingeführt. Im nächsten Schritt wird mit Hilfe der *rotating wave* Approximation der Wechselwirkungsbeitrag weiter vereinfacht. Dazu geht man ins Wechselwirkungsbild über. Der ungestörte Hamiltonoperator ist dabei $H_{\mathrm{S}} + H_{\mathrm{A}}$. Im Wechselwirkungshamiltonoperator bekommen dadurch die Erzeuger bzw. Vernichter zeitabhängige Phasenfaktoren. Mit $\hbar\omega_{kj} = \varepsilon_k - \varepsilon_j$ erhält man

$$\tilde{H}_{\mathrm{WW}} = \hbar\sum_{jkl} a_j^\dagger a_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{kj}t}\left(g_{ljk}b_l\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_l t} + g_{ljk}^* b_l^\dagger \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_l t}\right)\,. \tag{2.9}$$

Im Hamiltonoperator treten Terme mit Faktoren der Form

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{kj}+\omega_l)t} \quad \text{und} \quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_{kj}-\omega_l)t}$$

auf. Im Folgenden wollen wir nur Lichtfelder betrachten für die $\omega_{kj} - \omega_l \ll \omega_{kj} + \omega_l$ gilt. Die stark oszillierenden Beiträge (links) können dann im Folgenden vernachlässigt werden, *rotating wave* Approximation, sie gehören zu nichtenergieerhaltenden Prozessen, wie zum Beispiel der Anregung eines Atoms bei gleichzeitiger Emission eines Photons.

Für die in den Experimenten vorliegenden Bedingungen reicht es völlig aus, die Atome als Zwei-Niveau-Systeme zu beschreiben. Außerdem kann das Lichtfeld klassisch behandelt werden, siehe Abschnitt 2.5. Wählt man als Energienullpunkt die atomare Grundzustandsenergie und wechselt wieder in ein Wechselwirkungsbild, wobei diesmal der ungestörte Hamiltonoperator nur H_{S} ist, so ergibt sich für ein Zwei-Niveau-Atom in einem Lichtfeld folgender Hamiltonoperator

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \hbar\omega_{10}a_1^\dagger a_1 - \mathbf{d}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\mathrm{L}}t}a_0^\dagger a_1 - \mathbf{d}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{\mathrm{L}}t}a_1^\dagger a_0\,, \tag{2.10}$$

mit dem elektrischen Feld $E(\mathbf{r},t)$. Hier wurde verwendet, dass in Coulombeichung

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},\mathbf{t}) = -\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r},\mathbf{t}) \tag{2.11}$$

gilt. Mit dem Zustandsvektor

$$|\Psi(\mathbf{r},t)\rangle = \psi_0(\mathbf{r},t)|0\rangle + \psi_1(\mathbf{r},t)\mathrm{e}^{-i\omega_\mathrm{L}t}|1\rangle \tag{2.12}$$

erhält man als Schrödinger-Gleichung

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1(\mathbf{r},t)\\ \psi_0(\mathbf{r},t)\end{pmatrix} &= \begin{pmatrix}\mathbf{p}^2/2m+\hbar\delta_\mathrm{L} & -\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\\ -\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t) & \mathbf{p}^2/2m\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi_1(\mathbf{r},t)\\ \psi_0(\mathbf{r},t)\end{pmatrix}\\ &= H_\mathrm{ZN}\begin{pmatrix}\psi_1(\mathbf{r},t)\\ \psi_0(\mathbf{r},t)\end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.13}$$

Es ist $\delta_\mathrm{L} = \omega_{10} - \omega_\mathrm{L}$ die Verstimmung des Lasers gegenüber der atomaren Übergangsfrequenz.

Als Lichtfeld dienen in den Experimenten aus Abschnitt 2.5 zwei gegenläufige Laserstrahlen. Im Bereich der Wechselwirkung zwischen den Atomen und dem Licht können diese als ebene Wellen betrachtet werden. Somit reicht es, sich auf eine Raumdimension zu beschränken. Allerdings soll es eine zeitabhängige Phasendifferenz $\alpha(t) = at^2/2$ zwischen den Lasern geben. Damit erhält man

$$\mathbf{d}\cdot\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = dE(x,t) = dE_0\cos\left(k_\mathrm{L}\left(x+\alpha\right)\right) = \frac{\hbar\Omega}{2}\cos\left(k_\mathrm{L}\left(x+\alpha\right)\right), \tag{2.14}$$

wobei $\Omega = dE_0/\hbar$ die Rabifrequenz ist.

Im mitbewegten Bezugssystem erhält man mit Hilfe von Anhang B

$$\hat{H}_\mathrm{ZN} = H_\mathrm{ZN}|_{\alpha=0} - m\ddot{\alpha}x\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}. \tag{2.15}$$

Im Weiteren wird das ˆ zur Kennzeichnung des mitbewegten Bezugssystems weggelassen, da aus dem Zusammenhang unmittelbar klar ist, ob es sich um das Laborsystem oder das mitbewegte System handelt.

Ist die Verstimmung groß, so kann der angeregte Zustand adiabatisch eliminiert werden. Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Atom vom Grundzustand in den angeregten Zustand übergeht

$$W_{0\to1}(t) = |\langle 1|\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H_\mathrm{ZN}t}|0\rangle|^2, \tag{2.16}$$

ergibt sich mit Hilfe von Anhang A.2 zu

$$W_{0\rightarrow 1}(t) = \frac{1}{2}\frac{\Omega^2\cos^2(k_\mathrm{L}x)}{\delta_\mathrm{L}^2+\Omega^2\cos^2(k_\mathrm{L}x)}\{1-\cos(\delta_\mathrm{L}t)\}\,. \tag{2.17}$$

Wenn die Verstimmung des Lasers viel größer als die Rabifrequenz ist, $\delta_\mathrm{L} \gg \Omega$, kann die Anregung des Atoms und damit ebenfalls Spontanemission vernachlässigt werden. In den Gleichungen (2.13) kann dann $\partial\psi_1/\partial t \approx 0$ gesetzt werden. Die kinetische Energie des Atoms kann durch die Rückstoßenergie $E_\mathrm{R} = \hbar^2 k_\mathrm{L}^2/2m$ genähert werden. Sie ist viel kleiner als $\hbar\delta_\mathrm{L}$ (siehe Tabelle 2.1 auf Seite 18) und kann damit auch vernachlässigt werden. Mit Hilfe dieser Näherungen kann die Wechselwirkung eines Atoms mit einem Lichtfeld durch ein konservatives Dipolpotential beschrieben werden

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_0(x,t) = \frac{p^2}{2m}\psi_0(x,t) - \frac{\hbar\Omega^2}{8\delta_\mathrm{L}}\left(1+\cos\left(2k_\mathrm{L}\left(x+\alpha\right)\right)\right)\psi_0(x,t)\,. \tag{2.18}$$

Im mitbewegten Bezugssystem erhält man entsprechend

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_0(x,t) = \frac{p^2}{2m}\psi_0(x,t) - \frac{\hbar\Omega^2}{8\delta_\mathrm{L}}\left(1+\cos\left(2k_\mathrm{L}x\right)\right)\psi_0(x,t) - m\ddot{a}x\psi_0(x,t)\,. \tag{2.19}$$

Im Folgenden ist $V_0 = -\hbar\Omega^2/8\delta_\mathrm{L}$.

Die Bewegung eines Atoms im beschleunigten periodischen Potential hat also Ähnlichkeiten zu der von Elektronen im Festkörper unter dem Einfluss eines konstanten elektrischen Feldes (Gleichstrom). Darauf wollen wir noch einmal kurz am Ende von Abschnitt 2.5 eingehen.

2.2 Dipolfallen

Bevor wir uns weiter mit dem Verhalten von Atomen in beschleunigten periodischen Potentialen beschäftigen, möchten wir hier einige allgemeine Eigenschaften von Dipolfallen zusammenfassen. Als Dipolfallen bezeichnet man diejenigen Atomfallen, welche mit Hilfe der im vorigen Abschnitt beschriebenen Dipolwechselwirkung, durch geschickte Wahl des Lichtfeldes, Atome in einem Raumgebiet festhalten können [29].

Außer den Dipolfallen gibt es noch noch zwei andere Möglichkeiten neutrale Atome mit Licht einzufangen.

- Strahlungsdruckfallen: Diese benutzen fastresontantes Licht. Durch die große Dissipation können sie thermische Atome einfangen und auf einige 10μK abkühlen. Die starke optische Wechselwirkung begrenzt jedoch auch die Zeitdauer, in der Atome gefangen bleiben, auf die Größenordnung von Mikrosekunden.
- Magnetische Fallen: Sie benutzen, dass eine Kraft in einem inhomogen Magnetfeld auf ein magnetisches Dipolmoment wirkt. Diese Kraft ist abhängig vom atomaren Zustand und begrenzt die Brauchbarkeit der Fallen auf einige Spezialfälle. Die möglichen Fallengeometrien sind durch die verwendeten Spulen bzw. Permanentmagnete beschränkt.

Auf diese beiden Arten von Fallen wollen wir jedoch im Folgenden nicht weiter eingehen.

Gleichung (2.18) zeigt, dass das Dipolpotential proportional zur Intensität des Lichtes ist. Die Verstimmung des Lasers bestimmt das Vorzeichen des Potentials

$$V(\mathrm{r}) \sim -\frac{I(\mathbf{r})}{\delta_{\mathrm{L}}}\,. \tag{2.20}$$

Entsprechend der Verstimmung unterscheidet man zwei Arten der Dipolfallen.

Bei den *rot verstimmten Dipolfallen*, $\delta_{\mathrm{L}} > 0$, ist das Potential negativ, und die Atome werden in den Bereich hoher Intensität gezogen. Anwendung finden vor allem fokussierte Laserstrahlen, gekreuzte Laserstahlen und, hier von besonderem Interesse, stehende bzw. laufende Lichtwellen. Mit Hilfe von gekreuzten Lasern können auch Lichtgitter aufgebaut werden.

Die *blau verstimmten Dipolfallen*, $\delta_{\mathrm{L}} > 0$, verdrängen die Atome aus dem Bereich hoher Intensität. Die Fallen bestehen hier aus Lichtwänden, welche um ein „dunkles“ Gebiet angeordnet sind. Dies ist experimentell meist schwerer zu verwirklichen als rot verstimmte Fallen. Blau verstimmte Laser lassen sich auch als „Spiegel“ für Atome einsetzen.

Werden die Atome in den Fallen angeregt und gehen durch Emission eines Photons wieder in den Grundzustand zurück, so bekommen sie durch den Rückstoß genügend Energie, um die Falle zu verlassen. Nach Gleichung (2.17) ist die Rate für diesen Prozeß im Falle großer Verstimmung

$$\Gamma_{spontan} \sim \frac{V(\mathrm{r})}{\delta_{\mathrm{L}}}\,. \tag{2.21}$$

Um diesen Verlustmechanismus zu minimieren, muss δ_{L} möglichst groß gewählt werden. Gleichzeitig verlangt Gleichung (2.20), dass die Lichtintensität sehr groß sein muss. Dipolfallen arbeiten also am besten bei hoher Lichtintensität und großer Verstimmung.

2.3 Atome im periodischen Potential

In diesem Abschnitt wollen wir uns ausführlich mit der Quantenmechanik eines Teilchens im eindimensionalen periodischen Potential beschäftigen. Soweit nicht besonders darauf hingewiesen wird, gelten alle Aussagen für beliebige periodische Potentiale $V(x) = V(x+d)$. Als Beispiel dient jedoch immer $V(x) = V_0(1+\cos(2k_\mathrm{L}x))$. Die stationäre Schrödinger-Gleichung

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = H_\mathrm{B}\psi(x) \tag{2.22}$$

hat die Form einer Hill'schen Differentialgleichung [30]. Für das Kosinus-Potential ergibt sich als Spezialfall die Mathieu-Gleichung [31]. Lösungen der Gleichung (2.22) kann man immer in der Form

$$\psi_{n,k}(x) = \mathrm{e}^{ikx}u_{nk}(x)\,, \qquad\qquad u_{nk}(x+d) = u_{nk}(x) \tag{2.23}$$

schreiben, n heißt Bandindex und k ist der Wellenvektor. Zu den Lösungen gehören die Eigenwerte $E_n(k)$, die Blochbänder. Das ist der Inhalt des Blochtheorems [1]. Ebene Wellen, die sich als Lösung bei verschwindendem Potential ergäben, werden moduliert, und zwar durch eine Blochfunktion $u_{nk}(x)$, welche die gleiche Periodizität wie das Potential besitzt.

Bei fest vorgegebenen E und $V(x)$ erhält man Lösungen von Gleichung (2.22) mit reellem oder imaginärem k. In den Bereichen mit imaginärem k sind die Lösungen nicht beschränkt und daher keine physikalischen Lösungen. Die Größe der Bereiche mit reellem k hängt von der speziellen Form und vom Betrag des Potentials ab. Für das Kosinus-Potential sind sie in Abhängigkeit von der Amplitude V_0 in Abbildung 2.1(a) schattiert dargestellt. Man erkennt, dass mit zunehmendem Betrag der Amplitude die Bänder immer schmaler werden. Für festes V_0 werden die Bänder mit zunehmender Energie breiter und die Lücken zwischen den Bändern schmaler. Dies sind jedoch spezielle Eigenschaften des Kosinus-Potentials. Beim Kronig-Penney-Modell zum Beispiel nimmt die Lücke zwischen den Bändern asymptotisch einen konstanten Wert ungleich Null an.

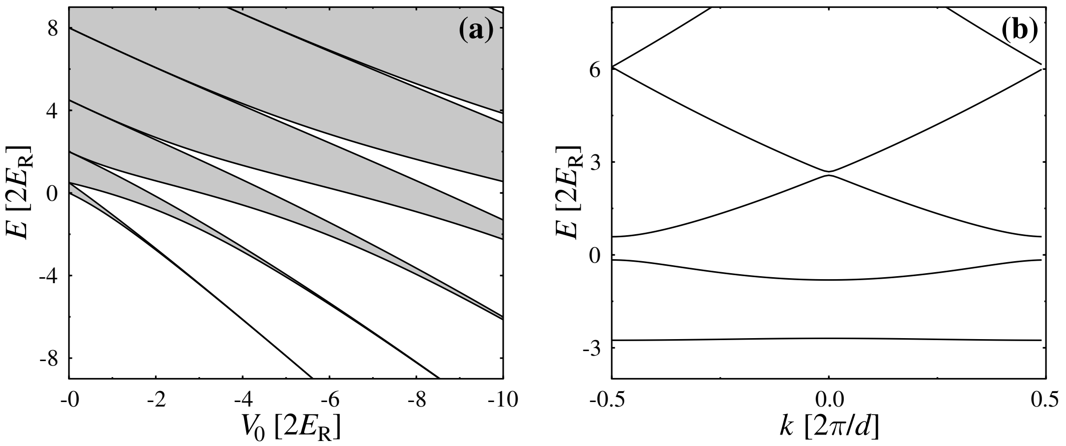

Abb. 2.1: **(a)** Stabilitätsbereiche der Lösung der Mathieu-Gleichung in Abhängigkeit von E und V_0. Die Gebiete mit stabilen Lösungen sind schattiert. **(b)** Bandstruktur für $V_0 = 4E_\mathrm{R}$

Setzt man die Lösungen (2.23) in Gleichung (2.22) ein, so ergibt sich

$$E_n(k)c_n(k) = \epsilon_n^0(k)c_n(k) + \sum_l V_{l-n}c_l(k)\,. \tag{2.24}$$

Dabei wurde die Fourierdarstellung des Potentials $V(x) = \sum_l V_l \exp(il2\pi x/d)$, und der Blochfunktion $u_{nk}(x) = \sum_l c_l(k)\exp(il2\pi x/d)$ benutzt. Die Diagonalelemente sind

$$\epsilon_n^0(k) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k - n\frac{2\pi}{d}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k - K_n\right)^2\,. \tag{2.25}$$

Die Gleichung (2.24) eignet sich besonders für numerische Untersuchungen und ist Ausgangspunkt bei der störungstheoretischen Behandlung für kleine $|V(x)|$. Die Ergebnisse der Störungstheorie sind in Anhang A zusammengefasst.

Beschränken wir uns erst einmal auf reelle k. Bei festem $V(x)$ erhält man für jedes k ein Eigenwertspektrum. Im Fall der Mathieu-Gleichung ist dieses Spektrum vollständig diskret und nichtentartet, d.h. der Abstand $|E_n(k) - E_{n-1}(k)|$ zweier benachbarter Bänder wird nie Null. Man sagt alle Bandlücken sind offen. Als Funktion von k sind die Eigenwerte periodisch, $E_n(k) = E_n(k + 2\pi/d)$. Diese Bandstruktur ist für das Kosinus-Potential in Abbildung 2.1(b) dargestellt. Es genügt somit sich auf k's aus dem Intervall $[0...2\pi/d)$, die 1. Brillouinzone, zu beschränken.

Ein Beispiel für ein Potential bei dem nur endlich viele offene Bandlücken auftreten ist das Lamé-Potential [30]

$$V(x) = \frac{\hbar^2 t^2 l(l+1)}{2m} sn^2(x). \tag{2.26}$$

Es ist $sn(x)$ die Jacobische Elliptische Funktion

$$x = \int_0^{sn(x)} \frac{\mathrm{d}y}{\sqrt{(1-y^2)(1-t^2y^2)}} . \tag{2.27}$$

Die Periode von $sn(x)$ ist gegeben durch

$$d = 2 \int_0^{\pi/2} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-t^2\sin^2(x)}} , \tag{2.28}$$

t nennt man Modul von $sn(x)$. Falls l ganzzahlig und positiv ist, hat das Spektrum l Lücken [30].

Die Bandfunktionen $E_n(k)$ können im Allgemeinen, so auch beim Kosinus-Potential, analytisch nicht angegeben werden. Es läßt sich jedoch eine implizite Gleichung dafür hinschreiben. Sind $\psi_1(x;E)$ und $\psi_2(x;E)$ zwei Lösungen von Gleichung (2.22) mit

$$\begin{aligned} \psi_1(0;E) &= 1, \qquad & \psi_1'(0;E) &= 0 \\ \psi_2(0;E) &= 0, \qquad & \psi_2'(0;E) &= 1 \, , \end{aligned} \tag{2.29}$$

so läßt sich jede Lösung der Gleichung (2.22) als $\psi(x) = \psi(0)\psi_1(x;E) + \psi'(0)\psi_2(x;E)$ schreiben. Zusammen mit dem Blochtheorem ergibt sich daraus eine Eigenwertgleichung für die Blochphasen

$$\det \begin{pmatrix} \psi_1(d;E) - \mathrm{e}^{\mathrm{i}kd} & \psi_2(d;E) \\ \psi_1'(d;E) & \psi_2'(d;E) - \mathrm{e}^{\mathrm{i}kd} \end{pmatrix} = 0 \, . \tag{2.30}$$

Damit erhält man als Bedingungsgleichung für die Eigenwerte E

$$\cos(kd) = \frac{1}{2} \left(\psi_1(d;E) + \psi_2'(d;E) \right) . \tag{2.31}$$

Diese Gleichung ist eher von theoretischem Interesse und eignet sich weniger zur Berechnung der Bandstruktur.

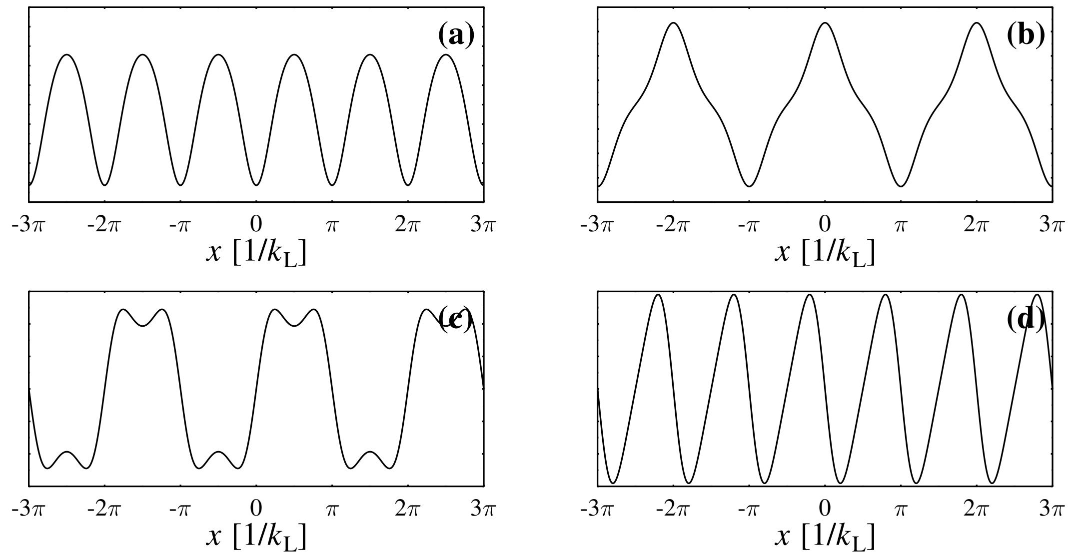

Abb. 2.2: Eigenfunktionen des Hamiltonoperators (in willkürlichen Einheiten) an den Bandkanten der untersten zwei Bänder, **(a)** $\Re\psi_{0,0}(x)$, **(b)** $\Re\psi_{0,\pi/d}(x)$, **(c)**$\Im\psi_{1,\pi/d}(x)$,**(d)** $\Im\psi_{1,0}(x)$ für $V_0 = 2E_{\mathrm{R}}$. Die nicht gezeichneten Real-, bzw. Imaginärteile sind jeweils Null.

In der komplexen Ebene ist $E(k)$ eine mehrdeutige analytische Funktion. Sie kann auf einer Riemannschen Fläche mit unendlich vielen Blättern dargestellt werden. Die Einschränkung von $E(k)$ auf das Blatt S_n für reelle k ist dann wieder die bekannte Bandfunktion $E_n(k)$. Jedes Blatt S_n ist mit den Blättern S_{n-1} und S_{n+1} an einem Verzweigungspunkt 1. Ordnung verbunden. Das heißt also, in der komplexen Ebene ist ein kontinuierlicher Übergang zwischen den einzelnen Bändern möglich [32]. Ist die Lücke zwischen zwei Bändern exakt Null, so liegt der Verzweigungspunkt auf der reellen Achse.

An den Grenzen der Stabilitätsbereiche (Bandminima bzw. Bandmaxima) gilt $k = l\pi/d$, $n = 0, 1, 2 \ldots$. Damit ist die Lösung $\psi_{nk}(x)$ von Gleichung (2.22) periodisch. Für l gerade ist $\psi_{nk}(x)$ d-periodisch und für l ungerade $2d$-periodisch. Die Wellenfunktionen an den Bandkanten der untersten 2 Bänder sind in Abbildung 2.2 dargestellt.

An dieser Stelle wollen wir noch einmal zum Zwei-Niveau-Atom zurückkehren. Da die spezielle Form des Potentials bisher nicht in die Betrachtungen einging, ist alles bisher Gesagte natürlich auch für das Zwei-Niveau-Atom gültig. Die Bandstruktur für das Zwei-Niveau-Atom ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Da die Periode des

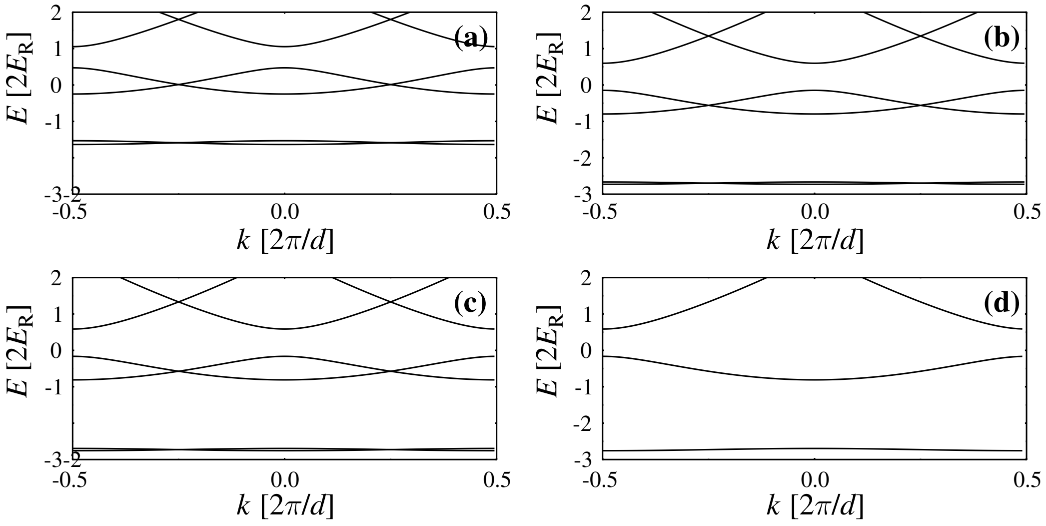

Abb. 2.3: Vergleich der Bandstruktur des Zwei-Niveau-Atoms mit der Bandstruktur nach adiabatischer Elimination **(a)** $\delta_{\mathrm{L}} = \Omega$, **(b)** $\delta_{\mathrm{L}} = 10\Omega$, **(c)** $\delta_{\mathrm{L}} = 100\Omega$, **(d)** nach adiabatischer Elimination $V_0 = 4E_{\mathrm{R}}$

Zwei-Niveau-Atom Hamiltonoperators doppelt so groß wie die Periode des Dipol-Hamiltonoperators ist, ist die Periode der Bandstruktur des Zwei-Niveau-Atom gegenüber der des Dipol-Hamiltonoperators halbiert. Beim Kosinus-Potential erhält man zwei Bandstrukturen, die durch Verschiebung um $k = \pi/d$ auseinander hervor gehen. Die Ursache dafür liegt in einer Symmetrie des Hamiltonoperators

$$H = \begin{pmatrix} \frac{p^2}{2m} + \hbar\delta_{\mathrm{L}} & 0 \\ 0 & \frac{p^2}{2m} \end{pmatrix} - \frac{\hbar\Omega}{2}\cos\left(k_{\mathrm{L}}x\right)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{2.32}$$

In diesem Spezialfall wird Gleichung (2.24) zu

$$\begin{aligned} E_n(k)c_n^1(k) &= \left(\epsilon_n^0(k) + \hbar\delta_{\mathrm{L}}\right)c_n^1(k) - \frac{\hbar\Omega}{4}\left(c_{n-1}^0(k) + c_{n+1}^0(k)\right) \\ E_n(k)c_n^0(k) &= \epsilon_n^0(k)c_n^0(k) - \frac{\hbar\Omega}{4}\left(c_{n-1}^1(k) + c_{n+1}^1(k)\right) . \end{aligned} \tag{2.33}$$

Diese gekoppelten Gleichungen werden mit

$$d_n^{\pm}(k) = \begin{cases} c_n^{0,1}(k) & n \text{ gerade,} \\ c_n^{1,0}(k) & n \text{ ungerade} \end{cases}$$

entkoppelt [33]. Die entkoppelten Gleichungen lauten

$$E_n(k)d_n^{\pm}(k) = \epsilon_n^0(k)d_n^{\pm}(k) + \frac{\hbar\delta_{\mathrm{L}}}{2}\left(1 \pm (-1)^n\right)d_n^{\pm}(k) - \frac{\hbar\Omega}{4}\left(d_{n-1}^{\pm}(k) + d_{n+1}^{\pm}(k)\right)\,. \tag{2.34}$$

Die beiden verschobenen Bandspektren gehören jeweils zu einer dieser entkoppelten Gleichungssysteme.

2.4 Wannier-Stark-Hamiltonoperator

Der Einfluss einer konstanten Kraft auf Atome im periodischen Potential bildet das Kernstück von Kapitel 3. Hier wollen wir nun noch die dafür benötigten Gleichungen bereitstellen.
Im mitbewegten Bezugssystem

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) - max = H_{\mathrm{B}} + Fx \tag{2.35}$$

kann man die Lösung nach den Eigenfunktionen von Gleichung (2.23) entwickeln

$$\Psi(x,t) = \sum_n \int\limits_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}k\, \phi_n(k,t)\psi_{nk}(x)\,. \tag{2.36}$$

H_B ist dann bereits diagonal. Die Schrödinger-Gleichung lautet somit

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_n(k,t) &= E_n(k)\phi_n(k,t) \qquad (2.37)\\ &\quad + F\sum_l \int\limits_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}k'\phi_l(k',t)\int \mathrm{d}x\, \psi_{nk}^*(x)x\psi_{lk'}(x)\,. \end{aligned}$$

Das Ortsintegral kann weiter bearbeitet werden

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}x\, x\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k'-k)x}u_{nk}^*(x)u_{lk'}(x) &= -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial k'}\delta(k'-k)\delta_{nl} \\ &\quad + \mathrm{i}\delta(k'-k)\int \mathrm{d}x\, u_{nk}^*(x)\frac{\partial}{\partial k'}u_{lk'}(x)\,. \qquad (2.38) \end{aligned}$$

Eingesetzt in Gleichung (2.37) erhält man schließlich

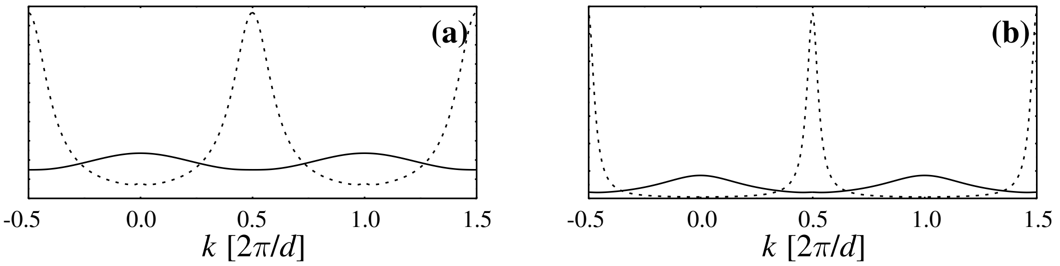

Abb. 2.4: Betrag der Übergangsmatrixelemente (in willkürlichen Einheiten) zwischen dem ersten und zweiten Band durchgezogene Linie, und zwischen dem zweiten und dritten Band gestrichelte Linie **(a)** $V_0 = 2E_\mathrm{R}$, **(b)** $V_0 = 4E_\mathrm{R}$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_n(k,t) = \left(E_n(k) - \mathrm{i}F\frac{\partial}{\partial k}\right)\phi_n(k,t) + F\sum_l W_{n,l}(k)\phi_l(k,t)\,, \tag{2.39}$$

mit dem Bandübergangsmatrixelement

$$W_{n,l}(k) = \mathrm{i}\int \mathrm{d}x\, u^*_{nk}(x)\frac{\partial}{\partial k}u_{lk}(x)\,. \tag{2.40}$$

Für das Übergangsmatrixelement gilt $W^*_{n,l}(k) = W_{l,n}(k)$. Es ist in Abbildung 2.4 dargestellt. Man erkennt, dass das Übergangsmatrixelement zwischen zwei Bändern durch den Abstand der Bänder bestimmt ist, und das es beim minimalen Bandabstand am größten ist. Das Intrabandmatrixelement $W_{n,n}(k)$ kann mit Hilfe einer Eichtransformation zum Verschwinden gebracht werden. Dazu benutzen wir, dass die Blochfunktionen nur bis auf einen von k abhängigen Phasenfaktor eindeutig festgelegt sind. Mit der Transformation $u_{nk}(x) \to \mathrm{e}^{i\int_0^k W_{n,n}(k')dk'}u_{nk}(x)$ wird

$$\begin{aligned} W_{n,l}(k) &= \mathrm{i}\int \mathrm{d}x\, u^*_{nk}(x)\mathrm{e}^{-i\int_0^k W_{n,n}(k')dk'}\frac{\partial}{\partial k}u_{lk}(x)\mathrm{e}^{i\int_0^k W_{l,l}(k')dk'} \\ &= W_{n,l}(k) - W_{l,l}(k)\delta_{n,l}\,. \end{aligned} \tag{2.41}$$

Alle anderen Beiträge zu Gleichung (2.39) bleiben unter dieser Transformation unverändert, und sie wird somit zu

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_n(k,t) = \left(E_n(k) - \mathrm{i}F\frac{\partial}{\partial k}\right)\phi_n(k,t) + F\sum_{l\neq n} W_{n,l}(k)\phi_l(k,t)\,. \tag{2.42}$$

	Cäsium	Natrium
Übergang	$6S_{1/2} \to 6P_{3/2}$	$3S_{1/2} \to 3P_{3/2}$
Verstimmung $\hbar\delta_\mathrm{L}/E_\mathrm{R}$	$1.5\,10^7$	$1.6\ 10^6$
Rabifrequenz $\hbar\Omega/E_\mathrm{R}$	$25\ 10^3$	$5.6\ 10^3$
Potential V_0/E_R	5	2.5
Beschleunigung $\mathrm{m/s^2}$	0.83	5000

Tab. 2.1: Typische experimentelle Größen in den Experimenten

2.5 Experimentelles

In diesem Abschnitt werden einige Experimente vorgestellt, in denen das Verhalten von Atomen in beschleunigten periodischen Potentialen untersucht wurde. Wir wollen hier die experimentellen Ergebnisse zusammenfassen und für die Beobachtungen auch eine qualitative Erklärung geben. Die Grundlage für die Experimente bildet der riesige Fortschritt, welcher bei der Kühlung von atomaren Gasen in den letzten Jahren erreicht wurde.

Die Experimente mit Atomen in beschleunigten periodischen Potentialen lassen sich, je nach benutzter Atomsorte, in zwei Gruppen einteilen. Es wurden Natriumatome [22, 34, 35, 36, 37] bzw. Cäsiumatome [21, 38, 39] verwendet. Typische experimentelle Größen sind in Tabelle 2.1 zusammengestellt.

Cs-Atome: Zu Beginn der Experimente wird das atomare Gas in einer Magneto-Optischen-Falle vorgekühlt. Dies geschieht durch Doppler-Kühlung im sogenannten optischen Sirup. Dabei werden die Atome mit, gegenüber einer atomaren Übergangsfrequenz, rotverstimmten Lasern bestrahlt. Durch die Doppler-Verschiebung sind die Atome, die sich entgegen dem Laserstrahl bewegen, in Resonanz, können leicht Photonen absorbieren und nehmen dabei Impuls auf, wodurch sie abgebremst werden. Die angeregten Atome gehen durch Spontanemission wieder in ihren Grundzustand über, wobei sie ein Photon emittieren. Dabei wird wieder Impuls übertragen. Da diese Emission ungerichtet ist, wird das Atom durch die Spontanemission im Mittel weder beschleunigt noch gebremst. Das Verfahren insgesamt führt somit zum Abbremsen, d.h. Abkühlen, der Atome. Die Kraft auf die Atome ist geschwindigkeitsabhängig, also eine Art Reibungskraft. Die damit erreichten minimalen Temperaturen sind proportional zur natürlichen Linienbreite $k_B T_\mathrm{D} \sim \hbar\Gamma$ für den benutzten

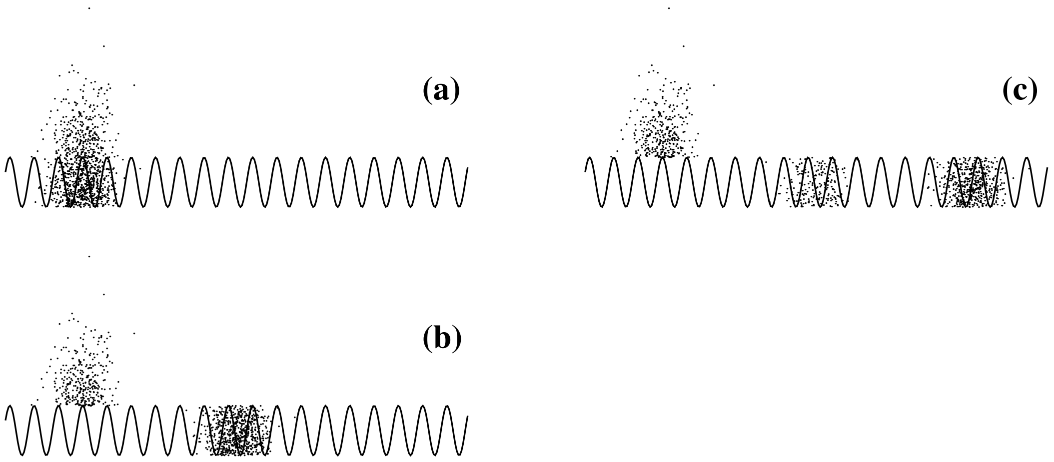

Abb. 2.5: Experiment mit Na-Atomen: **(a)** Beginn des Experiments, **(b)** nach der Trennung der gefangenen Atome von den nicht gefangenen Atomen, **(c)** am Ende des Experiments nach der Trennung der getunnelten Atome von den gefangenen Atomen

Übergang und betragen bei Cs $125\mu K$ [40].
Die Temperatur des atomaren Gases wird dann weiter mittels Raman-Kühlung gesenkt. Dabei wird von links und rechts je ein Laser eingestrahlt. Die Frequenzen sind so, dass sie zu keinem atomaren Übergang resonant sind. Die Frequenzdifferenz der beiden Laser ist fastresonant zur Übergangsfrequenz. Damit sind die beiden Niveaus über einen Zweiphotonen-Raman Prozeß miteinander gekoppelt [41]. Wenn nun die Differenz rotverstimmt ist, so bewirkt die Doppler-Verschiebung wieder, dass Atome mit positiver Geschwindigkeit ein solches Photon absorbieren und stimuliert wieder emittieren. Damit werden die Atome durch einen Impulsübertrag von $2k_{\mathrm{L}}$ abgebremst. Atome, die in die entgegengesetzte Richtung fliegen, werden entsprechend durch umgekehrte Strahlrichtungen abgebremst. Die damit erreichten Temperaturen sind so klein ($/sim10$ nK), dass die Breite der Impulsverteilung kleiner als die Ausdehnung der 1. Brillouinzone $2k_{\mathrm{L}}$ ist. Dies entspricht einer Kohärenzlänge von einigen Perioden des Potentials. Damit spüren die Atome wirklich ein periodisches Potential und nicht nur einzelne Potentialmulden.
Nach dem Kühlvorgang wird das Potential adiabatisch durch lineare Erhöhung der Intensität der Laser eingeschaltet. Dadurch wird ein statistisches Gemisch von Blochzuständen erzeugt. Das periodische Potential erhält man, indem man einen Laser mit Hilfe eines Strahlteilers teilt. Beide Teilstrahlen durchlaufen Akusto-Optische-

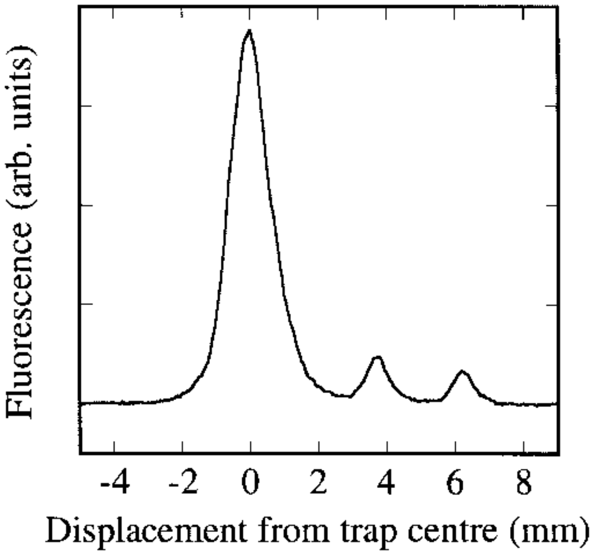

Abb. 2.6: Verteilung der Natriumatomen nach einem im Text beschriebenen Dreistufenexperiment. Die kleine Beschleunigung war jeweils 1500 m/s^2. Die starke Beschleunigung betrug 7000 m/s^2 für die Dauer von 34μs. Die Amplitude des periodischen Potentials war $V_0 = 3.2E_\mathrm{R}$ (aus [24]).

Modulatoren. Dort kann man die Frequenz der Strahlen variieren. So wird die Verstimmung des Lasers gegenüber dem $6S_{1/2} \rightarrow 6P_{3/2}$ Übergang eingestellt. Alle weiteren Übergänge liegen noch viel weiter von der verwendeten Frequenz entfernt, so dass das Atom als Zwei-Niveau-Atom betrachtet werden kann. Danach läßt man beide Strahlen gegeneinanderlaufen. Ist der Frequenzunterschied Null, so kommt es zu einer stehenden Welle. Bei konstanter Frequenzdifferenz ungleich Null erhält man eine laufende Welle, während eine linear anwachsende Frequenzdifferenz zu einer beschleunigten Welle führt.

Nach der Präparation des Anfangszustandes wird das beschleunigte Potential für verschiedene Zeiten angelegt. Danach wird es plötzlich abgeschaltet und die Impulsverteilung der Atome gemessen. Als Ergebnis erhält man eine in der Zeit periodische Impulsverteilung, die in Abbildung 3.15 auf Seite 47 zu sehen ist. Diese Bloch-Oszillationen sind mit Hilfe der Bandstruktur (Abbildung 2.1 (b)) leicht zu verstehen. Ein Atom bewegt sich durch die konstante Kraft entlang der Brillouinzone mit $k(t) = k(0) + Ft/\hbar$. Vernachlässigt man Bandübergänge, so folgt aus der Periodizität der Dispersionsrelation die Periodizität von $k(t)$ in der Zeit.

Na-Atome: Zum Experimentieren werden auch die Na-Atome in einer Magneto-

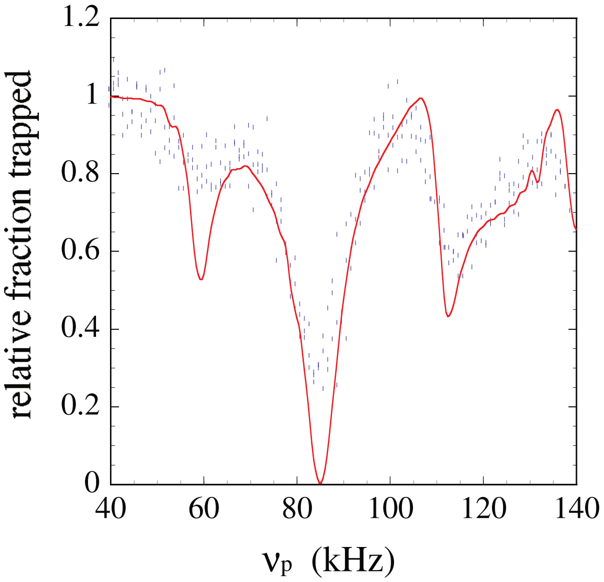

Abb. 2.7: Anzahl der gefangenen Na-Atome als Funktion der Frequenz ν_p eines zeitlich periodischen Potentials. Jeder Punkt gehört zu einem Experiment. Die Amplitude des Lichtpotentials beträgt $V_0 = 3E_{\mathrm{R}}$, die Beschleunigung ist $a = 1570\mathrm{m/s}^2$. Die durchgezogene Linie stellt eine numerische Simulation dar (aus [22]).

optischen Falle gesammelt und dann gekühlt. Dabei benutzt man die $\sigma_+ - \sigma_-$ Konfiguration [40]. Die gegenläufigen Lichtstrahlen sind unterschiedlich polarisiert (rechts- bzw. linkszirkular). Bei diesem Verfahren muss der Grundzustand ($|0,0\rangle$) aus einem Zeemann-Singulett bestehen, während der angeregte Zustand in ein Zeemann-Triplett ($|1,+\rangle, |1,0\rangle, |1,-\rangle$) aufspaltet. Drehimpulserhaltung bewirkt, dass die σ_+-Welle nur die $|0,0\rangle \leftrightarrow |1,+\rangle$ Übergänge anregen kann, während die σ_--Welle nur die $|0,0\rangle \leftrightarrow |1,-\rangle$ Übergänge anregt. Die Drehimpulserhaltung verhindert somit die Umverteilung von Photonen zwischen der σ_+-Welle und der σ_--Welle. Dadurch erhält man eine geschwindigkeitsabhängige Kraft. Bei rotverstimmten Lasern ist das immer eine Reibung [40]. Das periodische Potential wird dann, wie bei den Cs-Atomen beschrieben, unter Verwendung des $3S_{1/2} \rightarrow 3P_{3/2}$ Übergangs erzeugt.

Die Experimente mit Na-Atomen, siehe Abbildung 2.5, beginnen mit einer geringen Beschleunigung. Dadurch werden die nichtgefangen (zu heißen) Atome von den gefangenen getrennt (Abbildung 2.5 (b)). In einem zweiten Schritt wird dann die Beschleunigung erhöht. Die meisten Atome werden vom Potential mitgerissen, je-

	Cäsium	Natrium	Metall
Gitterperiode d [nm]	426	295	≈ 0.1
Kraft [eV/m]	$1.2\ 10^{-6}$	10^{-3}	1
Blochperiode [μs]	8300	14	41

Tab. 2.2: Vergleich wichtiger Größen zwischen den optischen Experimenten und Festkörpern

doch bleiben einige durch Tunneln zurück (Abbildung 2.5 (c)). In einer dritten Stufe, mit wiederum sehr geringer Beschleunigung, werden die vom Potential mitgenommenen und die zurückgebliebenen (getunnelten) Atome getrennt. Es wird dann, in Abhängigkeit von der Dauer der Beschleunigung, der Anteil der getunnelten Atome bestimmt, indem man mit Resonanzfluoreszenz die Ortsverteilung misst. Ein typisches Resultat eines solchen Experiments ist in Abbildung 2.6 dargestellt.

Für sehr kurze Zeiten beobachtet man so für die Zahl der getunnelten Atome nichtexponentielles Verhalten, während das Langzeitverhalten exponentiellen Charakter trägt. Die Zerfallskonstante kann bestimmt und mit dem Landau-Zener-Resultat verglichen werden, siehe Abschnitte 3.2 und 3.5. Man findet, dass die gemessene Rate um das Landau-Zener-Ergebnis oszilliert.

In einem weiteren Experiment mit Natrium konnten auch Wannier-Stark-Leitern gemessen werden, Abschnitte 3.1 und 3.5. Sie sind das energetische Pendant zu den Bloch-Oszillationen. Zum Vermessen des Abstandes der Eigenwerte einer Leiter wird die Frequenzdifferenz der gegenläufigen Laserstrahlen zusätzlich periodisch moduliert. Die konstante Kraft ist hier so klein, dass Landau-Zener-Tunneln vernachlässigt werden kann. Durch die zusätzliche periodische Modulation können resonante Übergänge in ein höheres Band induziert werden. Atome im zweiten Band haben so viel Energie, dass sie nicht mehr gefangen sind. Sie werden also nicht weiter beschleunigt und von den anderen Atomen getrennt. So kann man messen, bei welcher Modulationsfrequenz die meisten Atome in ein höheres Band übergehen. Man findet eine Resonanzfrequenz mit zwei Nebenmaxima, siehe Abbildung 2.7 . Der Abstand der Resonanzen nimmt linear mit der Kraft zu (Abbildung 3.16, Seite 48). Dieses lässt sich zwanglos mit Hilfe der Wannier-Leitern erklären.

Die Dynamik von Atomen in einem beschleunigten periodischen Potential entspricht im mitbewegten Bezugssystem der Dynamik von Elektronen in einem Festkörper bei angelegter äußerer Spannung (Gleichstrom). In Tabelle 2.2 werden einige der

Parameter der optischen Experimente mit denen der Festkörperphysik verglichen. Bloch-Oszillationen konnten bei Elektronen noch nicht gemessen werden, da die Relaxationszeit für Stöße mit Phononen und Gitterfehlern nur einige Femtosekunden beträgt. Deshalb kann im Festkörper nur die Drift der Elektronen bestimmt werden. Ein weiterer Vorteil der Experimente ist die explizit mögliche Präparation des Anfangszustandes, so wie die Möglichkeit viele Größen, wie zu Beispiel die Potentialhöhe, zu variieren.

3. Landau-Zener-Tunneln

In diesem Kapitel wollen wir den Einfluss der Kopplung zwischen den Bändern auf das Eigenwertspektrum studieren. Wir werden zeigen, dass es völlig ausreicht sich auf L-periodische Bänder zu beschränken, wobei die restlichen Bänder als eine Art Reservoir betrachtet werden können, in das Atome hineinlaufen aus dem aber keine in die unteren Bänder zurückkehren können. Dieser Verlustmechanismus kann durch einen Imaginärteil im Eigenwert beschrieben werden. Die Untersuchung der Abhängigkeit des Imaginärteils der Energie von der Kraft F nimmt in diesem Kapitel einen weiten Raum ein. Daneben soll das Zeitverhalten der Atome noch näher untersucht werden. Während in den ersten Abschnitten des Kapitels die Langzeitdynamik im Vordergrund steht, soll im letzten Abschnitt vor allen die Kurzzeitdynamik beschrieben werden. Dabei geht es unter anderem darum den Übergang zwischen dem kohärenten Anfangsverhalten und dem exponentiellem Langzeitverhalten zu untersuchen.

3.1 Bloch-Oszillationen und Wannier-Stark-Leitern

Als Erstes wollen wir zeigen, dass das Kippen des periodischen Potentials dazu führt, dass sich ein im Potential befindendes Wellenpaket periodisch bewegt.
Multipliziert man Gleichung (2.42) mit $\phi_n^*(k,t)$, subtrahiert davon die konjugiert komplexe Gleichung und summiert über alle n, so erhält man

$$\begin{aligned}\left(\hbar\frac{\partial}{\partial t}+F\frac{\partial}{\partial k}\right)\sum_n|\phi_n(k,t)|^2 &= F\sum_{n,l}\Big(W_{n,l}(k)\phi_l(k,t)\phi_n^*(k,t)\\ &\qquad -W_{n,l}^*(k)\phi_l^*(k,t)\phi_n(k,t)\Big)\\ &= 0\,. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Dabei haben wir benutzt, dass $W_{n,l}^*(k)=W_{l,n}(k)$ gilt. Jede differenzierbare Funktion

$$G\left(k-\frac{Ft}{\hbar}\right)=\sum_n|\phi_n(k,t)|^2 \tag{3.2}$$

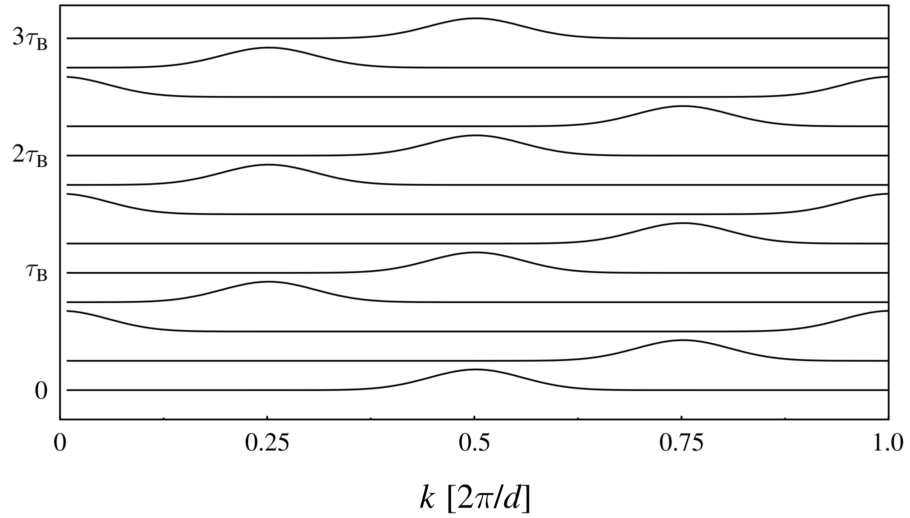

Abb. 3.1: Bloch-Oszillationen eines Wellenpakets im k-Raum. Es ist $\sum_n |\phi_n(k,t)|^2$ zu verschiedenen Zeiten dargestellt. Das Wellenpaket bewegt sich auf Grund der Kraft $F = E_\mathrm{R} k_\mathrm{L}/10$ durch die Brillouinzone. Es gilt $\hbar k = \hbar k(t=0) + Ft$ und $V_0 = 0.5 E_\mathrm{R}$

.

löst dann die Gleichung (3.1). Da weiterhin $\phi_n(k,t) = \phi_n(k + 2\pi/d, t)$ gilt, ist $G\left(k - Ft/\hbar\right)$ als Funktion der Zeit t periodisch mit der Blochperiode $\tau_\mathrm{B} = 2\pi\hbar/dF$. Daraus ergibt sich als Blochfrequenz $\omega_\mathrm{B} = dF/\hbar$. In Abbildung 3.1 ist $\sum_n |\phi_n(k,t)|^2$ zu verschiedenen Zeiten dargestellt. Neben der Periodizität erkennt man auch deutlich, dass sich das Wellenpaket im k-Raum, einem Torus, mit einer konstanten Geschwindigkeit bewegt.

Vernachlässigt man Bandübergänge $W_{n,l}(k) = 0$, was bei kleinen Kräften in guter Näherung zulässig ist, so gilt obiges Ergebnis für jedes $|\phi_n(k,t)|^2$ einzeln, und nicht nur für deren Summe. Falls die Kopplung nicht zu stark ist, sind die Bloch-Oszillationen in den einzelnen Bandwellenfunktionen $\phi_n(k,t)$ zu sehen, jedoch variiert die Amplitude der Wellenfunktion. Bei zu starker Kopplung wird ein Atom innerhalb einer Blochperiode vollständig aus dem Band in ein höheres Band übergehen. Die Bloch-Oszillationen zeigen sich ebenfalls in den Erwartungswerten von Ort und Impuls (Abbildung 3.2). Es gilt zum Beispiel

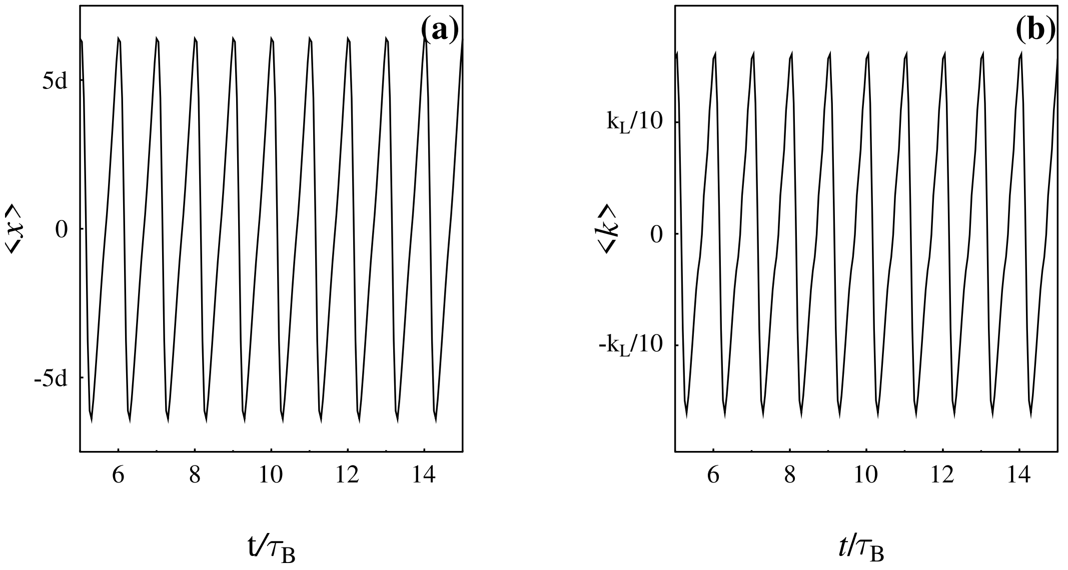

Abb. 3.2: Oszillationen der Erwartungswerte für **(a)** Ort und **(b)** Impuls. Die Parameter wurden so gewählt, dass $V_0 = 0.5E_\mathrm{R}$ und $F = E_\mathrm{R}k_\mathrm{L}/10$ ist. Für kleiner als den hier gezeigten Zeiten erkennt man Einschwingverhalten.

$$\begin{aligned} \langle k(t)\rangle &= \int\limits_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}k k G\left(k - Ft/\hbar\right) \\ &= \langle k(t=0)\rangle + Ft/\hbar \qquad (3.3) \end{aligned}$$

In der obigen Gleichung muss man jedoch bedenken, dass k nur modulo $2\pi/d$ definiert ist.

Eng verbunden mit den Bloch-Oszillationen sind die Wannier-Stark-Leitern. Die periodische Bewegung im k-Raum entspricht einer Leiter von Eigenwerten. Vernachlässigen wir in Gleichung (2.42) die Bandkopplung $W_{n,l}(k) \approx 0$, so wird daraus

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi_n^0(k,t) = \left(E_n(k) - \mathrm{i}F\frac{\partial}{\partial k}\right)\phi_n^0(k,t)\,. \qquad (3.4)$$

Mit dem Ansatz $\phi_{n,\nu}^0(k,t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_{n,\nu}t/\hbar}\varphi_{n,\nu}^0(k)$ sind die Lösungen der Gleichung (3.4)

$$\varphi_{n,\nu}^0(k) = \sqrt{\frac{d}{2\pi}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{F}\int\limits_0^k \mathrm{d}q(E_n(q)-E_{n,\nu})}\,, \qquad (3.5)$$

wobei $E_n(q)$ die Bandfunktion im n-ten Band ist. Die Eigenwerte $E_{n,\nu}$ sind dabei durch die Forderung nach Eindeutigkeit der Wellenfunktion $\varphi_{n,\nu}^0(k) = \varphi_{n,\nu}^0(k+2\pi/d)$

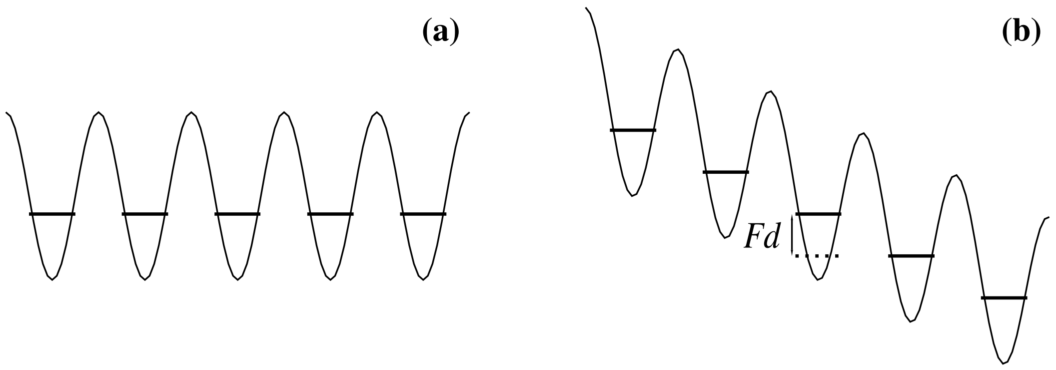

Abb. 3.3: Das Potential **(a)** $F = 0$, die waagerechten Linien sind die Eigenwerte, wenn man Tunneln vernachlässigt. **(b)** $F \neq 0$ auch hier sind die Eigenwerte bei vernachlässigen von Tunnelphänomenen eingezeichnet.

als

$$\begin{aligned} E_{n,\nu} &= \bar{\epsilon}_n + \nu d F \,, \\ \bar{\epsilon}_n &= \frac{2\pi}{d} \int\limits_0^{2\pi/d} \mathrm{d}q E_n(q) \,, \end{aligned} \tag{3.6}$$

festgelegt. Jedes Band spaltet also in eine Leiter mit unendlich vielen Eigenwerten auf. Der Abstand benachbarter Eigenwerte innerhalb der selben Leiter ist dF. Die Übergangsfrequenz zwischen zwei Leitersprossen derselben Wannier-Leiter ist damit gleich der Blochfrequenz, $E_{n,\nu+1} - E_{n,\nu} = \hbar\omega_\mathrm{B}$.

Um die Bedeutung der Wannier-Leitern noch etwas zu verdeutlichen, betrachten wir folgendes Modell: Ein periodisches Potential, Abbildung 3.3 (a), bei dem die Barrieren zwischen den Potentialmulden so hoch sein sollen, dass man Tunneln (zumindest für die untersten Zustände) zwischen den einzelnen Mulden vernachlässigen kann. Die Eigenwerte sind dann die der einzelnen Mulden und ∞-fach entartet. Legt man nun noch eine konstante Kraft an, so sind die Spektren der verschieden Mulden um genau $E = Fd$, dem Wannier-Leiter-Abstand, verschoben (Abbildung 3.3 (b)). Anhand der Abbildung sieht man auch, dass die Wannier-Leitern nicht stabil sein können. Gestattet man wieder Tunneln, so würden die Zustände zerfallen. Bei den Leiter-Zuständen handelt es sich also um Resonanzen. Als Resonanzen wollen wir im Folgenden Lösungen der stationären Schrödinger-Gleichung mit komplexwertigen Eigenwerten verstehen. Die Instabilität der hier betrachteten Resonanzen lässt sich auch im Energiebandbild sehr gut verstehen. Durch die Kraft bewegen sich die Atome mit konstanter Geschwindigkeit durch ein Energieband. Die Kopplung führt zu Übergängen zwischen den Bändern, wobei die Übergangswahrscheinlichkeit am minimalen Bandabstand am größten ist (siehe Abbildung 2.4). Wenn nun die Bandlücken mit wachsender Energie immer kleiner werden, wie beim Kosinus-Potential, so „steigen“ die Atome in den Bändern immer höher und entziehen sich so dem Einfluss des Potentials. Die Ursache dafür liegt darin, dass die Wahrscheinlichkeit in ein anderes Band zu wechseln mit abnehmender Bandlücke zunimmt. Daher gibt es in so einem Potential keine stationären Zustände. Im Gegensatz dazu steht ein Potential aus periodisch angeordneten $\delta'(x)$ Potentialen. Hier werden die Lücken mit wachsender Energie immer größer, so dass sich stationäre Zustände ausbilden können [14].

Betrachtet man n-Zustände (Bänder), so entstehen n-Leitern. Für gewisse F werden diese Leitern entarten. Ein Teilchen findet dann auf der anderen Seite der Barriere einen Zustand, wodurch das Tunneln erleichtert wird. Eine größere Kraft F, d.h. eine stärkere Kippung des periodischen Potentials, führt daher nicht zwangsläufig zu einer größeren Instabilität (Breite) der Resonanzen. Wie sich die Kopplung der Leitern qualitativ und quantitativ auswirkt, wird in den nächsten Abschnitten diskutiert.

3.2 Landau-Zener-Übergang

Wird, wie im vorigen Abschnitt angedeutet, der Kopplungsterm in Gleichung (2.42) nicht mehr vernachlässigt, so kommt es zu Übergängen zwischen den verschiedenen Bändern. Im Laborsystem heißt das für die Atome, dass diese Übergänge in andere Bänder machen können. Speziell für Atome im untersten Band bedeutet das, dass sie in ein höheres Band übergehen können. Dort spüren sie, wie in Abschnitt 2.5 geschildert, das periodische Potential nicht mehr. Sie werden also vom beschleunigten Potential nicht mehr weiter mitgerissen.

Zur Bestimmung der Rate, mit der die Übergänge stattfinden, kann man Fermis goldene Regel anwenden. Dazu benutzen wir vorübergehend Stark-Leitern mit $2N+1$ Sprossen, wobei N erst einmal beliebig sein soll. Die ungestörten Zustände sind dann die umnormierten Leiterzustände $\tilde{\varphi}^0_{m,\mu}(k) = \varphi^0_{m,\mu}(k)/\sqrt{2N+1}$. Durch diese

Normierung wird erreicht, dass

$$\sum_{\mu=-N}^{N} \int_{0}^{2\pi/d} \mathrm{d}k |\tilde{\varphi}_{m,\mu}(k)|^2 = 1 \tag{3.7}$$

ist. Für die Übergangswahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit $T_{m\mu,n\nu}$ von der Sprosse μ der Leiter m zur Sprosse ν der Leiter n gilt dann

$$\begin{aligned} T_{m\mu,n\nu} &= \frac{2\pi F^2}{\hbar} |\tilde{M}_{m\mu,n\nu}|^2 \delta(E_{m,\mu} - E_{n,\nu}) \,, \qquad (3.8) \\ \tilde{M}_{m\mu,n\nu} &= \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}k \, \tilde{\varphi}^{0*}_{m,\mu}(k) W_{m,n}(k) \tilde{\varphi}^{0}_{n,\nu}(k) \\ &= \frac{1}{2N+1} M_{m\mu,n\nu} \,. \end{aligned}$$

Da die Eigenwerte $E_{m,\mu}$ und $E_{n,\nu}$ nur als Differenz in der Phase von $M_{m\mu,n\nu}$ auftreten, ist $M_{m\mu,n\nu}$, wegen der Deltafunktion in Gleichung (3.8), unabhängig von μ und ν. Im folgenden wird deshalb nur noch $M_{m,n}$ benutzt. Die Übergangswahrscheinlichkeit $T_{m,n}$ vom Band m zum Band n erhält man durch Summation über alle Paare von Eigenwerten

$$T_{m,n} = \sum_{\mu,\nu=-N}^{N} T_{m\mu,n\nu} = \frac{2\pi F^2}{\hbar(2N+1)^2} |M_{m,n}|^2 \sum_{\mu,\nu=-N}^{N} \delta(Fd(\mu-\nu) + \bar{\epsilon}_m - \bar{\epsilon}_n) \,. \tag{3.9}$$

Für $N = \infty$ lässt sich diese mit Hilfe der Poissonschen Summenformel auf folgende Form bringen

$$\begin{aligned} T_{m,n} &= \lim_{N\to\infty} \frac{2\pi|F|}{d\hbar(2N+1)} |M_{m,n}|^2 \sum_{\eta=-N}^{N} \cos(2\pi\eta \frac{\bar{\epsilon}_m - \bar{\epsilon}_n}{dF}) \\ &= \begin{cases} \frac{2\pi|F|}{d\hbar} |M_{m,n}|^2 & \text{falls } \; d|F| = \bar{\epsilon}_m - \bar{\epsilon}_n \\ 0 & \text{sonst} \,. \end{cases} \qquad (3.10) \end{aligned}$$

Für das Kosinus-Potential wird, wie in Abschnitt 2.3 beschrieben, die Bandlücke zwischen den Bändern mit steigender Energie sehr schnell kleiner, so dass es ausreicht L offene Bandlücken zu betrachten. Man hat dann L periodische Bänder und ein nichtperiodisches Band. Für große $|k|$ verhalten sich die Atome im nichtperiodischen (obersten) Band quasi wie freie Teilchen. Für die Dispersionsrelation gilt deshalb

$$E(k) \sim k^2 \qquad \text{für} \qquad |k| \to \infty. \tag{3.11}$$

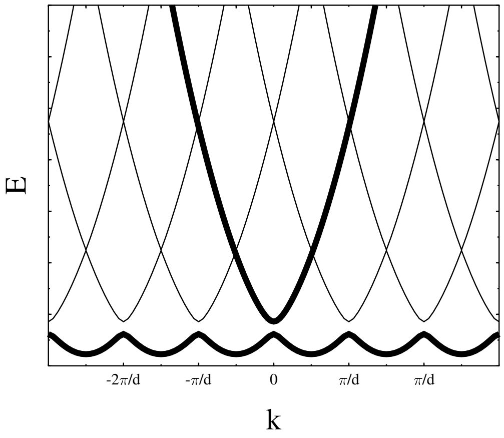

Abb. 3.4: Bandstruktur für das Kosinus-Potential, fett gezeichnet sind die Bänder des Zweibandmodells.

Das nichtperiodische Band ist, wie in Abbildung 3.4 dargestellt, die Vereinigung aller Bänder größer oder gleich $L+1$. Die ungestörten Zustände sind hier keine Leitern. Das Spektrum ist kontinuierlich. Damit kann die Energieerhaltung in Gleichung (3.8) für alle F erfüllt werden. Die Einschränkung in Gleichung (3.10) fällt weg, und man erhält

$$T_{m,L+1} = \frac{2\pi|F|}{d\hbar}|M_{m,L+1}|^2 \,. \tag{3.12}$$

Ein einmal in das oberste Band getunneltes Atom kann ohne „Behinderung“ durch Lücken im Spektrum nach unendlich entweichen. Die Zahl der im Potential gefangen Atome nimmt daher kontinuierlich ab. Dieses Verhalten kann man durch einen Imaginärteil in der Energie beschreiben. Die Leitereigenwerte werden also durch die Kopplung zu Resonanzen. Für den Imaginärteil der Energie gilt

$$-2\Im E = \hbar\Gamma \,. \tag{3.13}$$

Dabei ist die Zerfallskonstante Γ durch

$$\text{Anzahl der gefangenen Atome} \sim \mathrm{e}^{-\Gamma t}$$

für $t \to \infty$ definiert. Für den Fall $L = 1$ ist $\Gamma = T_{1,2}$ (goldene Regel). Bei mehr als einem periodischen Band kann man, wegen der Kopplung zwischen den Leitern, keine so einfache Aussage mehr treffen. Das wollen wir am Ende dieses Abschnittes ausführlich diskutieren. Im Folgenden soll $\Gamma_n = T_{n,L+1}$ bedeuten.

Zur Bestimmung der $M_{m,n}$ benutzen wir das Zweibandmodell aus Anhang A.2. Hierbei vernachlässigen wir auch noch vollständig die Struktur des untersten Bandes und berücksichtigen nur die Bandlücke und die Krümmung der Bänder an der Lücke. Man erhält mit $W_{1,2}(k)$ aus Gleichung (A.13)

$$M_{1,2} = \mathrm{i}\frac{d}{2} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, \frac{1}{k^2+1} \exp\left(-\mathrm{i}\frac{mdV_0^2}{2\pi\hbar^2|F|} \int\limits_{0}^{k} \mathrm{d}q \sqrt{q^2+1} \right) . \tag{3.14}$$

Das Integral lässt sich für kleine F mit Hilfe der Methode der stationären Phase bestimmen. Allerdings muss man beachten, dass am stationäre Phase Punkt der Integrand einen Pol und einen Verzweigungspunkt besitzt. Als Ergebnis erhält man die Landau-Zener-Übergangsrate [4, 17]

$$\Gamma = \frac{2\pi d|F|}{\hbar} \left(\frac{\pi}{3}\right)^2 \exp\left(-\frac{V_0^2 md}{4\hbar^2|F|} \right) . \tag{3.15}$$

In der Literatur wurde der Vorfaktor lange diskutiert [42, 43]. Eine mathematisch stringentere Beschreibung liefert, dass die $\pi/3$ in Gleichung (3.15) nur der erste Term in einer Reihenentwicklung sind [42]. Es wird dabei die Resolvente in einer geometrischen Reihe dargestellt. Es zeigt sich, dass alle Summanden die gleiche exponentielle Abhängigkeit wie das Landau-Zener-Ergebnis haben. Die Vorfaktoren lassen sich aufsummieren. Im exakten Resultat ist $\pi/3$ durch 1 zu ersetzen. Ein ähnliches Phänomen tritt auch in einem semiklassischen Streuproblem [44] auf.

Vergleicht man das Landau-Zener-Ergebnis mit numerischen oder experimentellen Werten, so zeigt sich, dass die Landau-Zener-Theorie nur das mittlere Verhalten richtig wiedergibt. Wie man in der Abbildung 3.5 sehen kann, oszilliert die inverse Zerfallskonstante um das Landau-Zener-Resultat. Die Ursache für diese Oszillationen ist die Kopplung zwischen den Bändern [13].

Um die Auswirkungen der Leiterwechselwirkung zu verstehen, betrachten wir wieder L Leitern, die untereinander und an ein Kontinuum gekoppelt sind. Die Kopplung der Leitern an das Kontinuum führt gemäß Gleichung (3.12) zu einem Imaginärteil in den Eigenwerten

$$E_{n,\nu} \to E_{n,\nu} - \mathrm{i}\frac{\hbar\Gamma_n}{2} . \tag{3.16}$$

Als erstes wollen wir den Fall $L = 2$ betrachten. Eine Verallgemeinerung für beliebige L kann dann leicht vollzogen werden. Ändert man F, so bewegen sich die Leitern

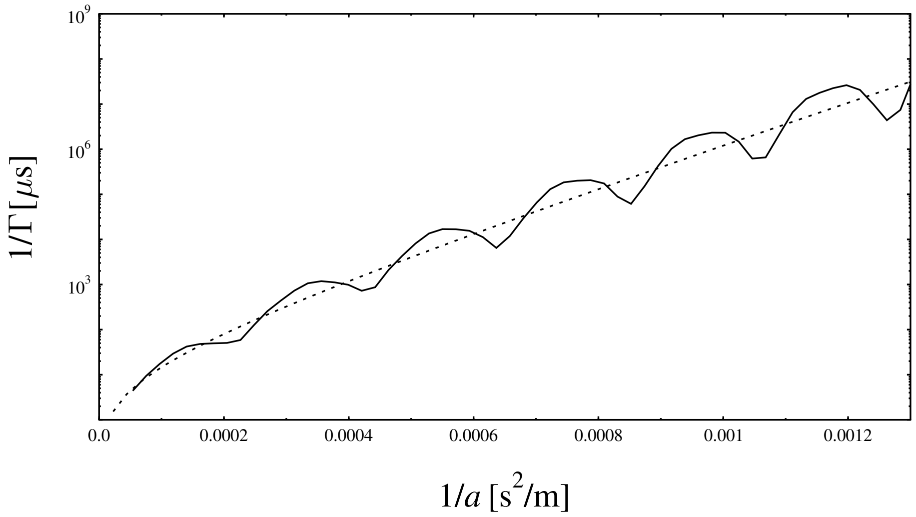

Abb. 3.5: Vergleich der Landau-Zener-Rate (gepunktet) mit der numerisch bestimmten Rate, a ist die Beschleunigung, die Amplitude des Potentials beträgt $V_0 = 2.4E_\mathrm{R}$. Experimentell ist nur ein viel kleinere Bereich zugänglich ($a = 3000...10000\mathrm{m/s}^2$).

aneinander vorbei. Dabei kommt es immer wieder zu Überkreuzungen der Leitereigenwerte (Realteile). Diese Überkreuzungen treten als Funktion von $1/F$ periodisch auf. Die Wechselwirkung der Leitern führt zu einer Abstoßung der Eigenwerte. Wie weiter unten erläutert, findet man die Abstoßung im Real- oder Imaginärteil der Energie. Die ungekoppelten Leitern sind in Abbildung 3.6 dargestellt. Dort erkennt man die periodische Abfolge der Kreuzungen als Funktion von $1/F$. In der Nähe der Überkreuzungen kann man wieder auf ein Zwei-Niveau-Modell zurückgreifen. Der Hamiltonoperator ist dann

$$H = \begin{pmatrix} E_{1,\nu} - \mathrm{i}\frac{\hbar\Gamma_1}{2} & FM_{1,2} \\ FM_{2,1} & E_{2,\mu} - \mathrm{i}\frac{\hbar\Gamma_2}{2} \end{pmatrix}, \tag{3.17}$$

mit den Eigenwerten

$$\begin{aligned} \eta_{1,2} &= \frac{E_{1,\nu}+E_{2,\mu}}{2} - \mathrm{i}\frac{\hbar\Gamma_1+\hbar\Gamma_2}{4} \\ &\pm\frac{1}{2}\sqrt{\left(E_{1,\nu}-E_{2,\mu}-\frac{\mathrm{i}}{2}(\hbar\Gamma_1-\hbar\Gamma_2)\right)^2+4|FM_{2,1}|^2}\,. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Da die Kopplung des ersten Bandes an das Kontinuum (drittes Band) viel schwächer als die Kopplung des zweiten Bandes an das Kontinuum ist, gilt $\Gamma_1 \ll \Gamma_2$. Am Kreu-

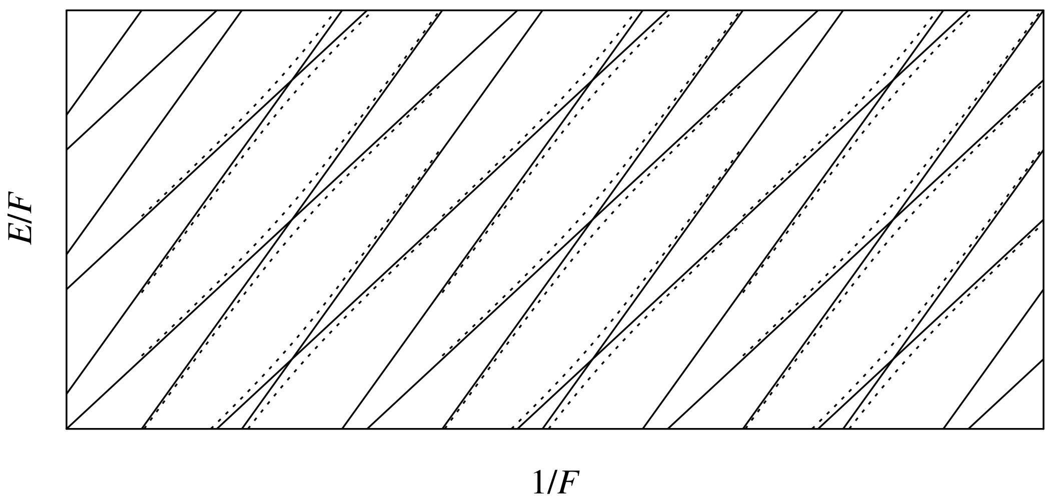

Abb. 3.6: Die Eigenwerte (Realteile) zweier Wannier-Leitern in Abhängigkeit von 1/F. Die Steigungen sind durch $\bar{\epsilon}_n$ festgelegt. Die gepunktete Linie deutet an, dass die Wechselwirkung der Leitern zu vermiedenen Kreuzungen führen kann.

zungspunkt gilt $E_{1,\nu} - E_{2,\mu} = 0$. Für das Verhalten der Eigenwerte $\eta_{1,2}$ unterscheidet man zwei Fälle:

- $\hbar|\Gamma_2 - \Gamma_1| < 4|FM_{2,1}|$, d.h. die Kopplung zwischen dem ersten Band und dem zweiten Band ist stärker als die Kopplung zwischen dem zweiten und dem dritten Band. Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass die Atome einige Male zwischen den Bändern hin- und heroszillieren, bevor sie ins dritte Band entweichen können. Dieser Fall erfordert, dass die zweite Bandlücke größer als die erste ist.
  Die Kreuzung im Realteil wird vermieden. Im Imaginärteil ist sie es nicht (Abbildung 3.7 (a)+(b)). Der Imaginärteil wird also bei jeder Kreuzung zwischen den Eigenwerten „ausgetauscht“.

- $\hbar|\Gamma_2 - \Gamma_1| > 4|FM_{2,1}|$, d.h die Kopplung zwischen dem ersten Band und dem zweiten Band ist schwächer als die Kopplung zwischen zweitem und drittem Band. Die Atome oszillieren nicht zwischen dem ersten und dem zweiten Band, sondern entweichen direkt nach dem Übergang ins zweite Band ins Kontinuum.
  Die Kreuzung im Imaginärteil ist vermieden, im Realteil ist sie es nicht (Ab-

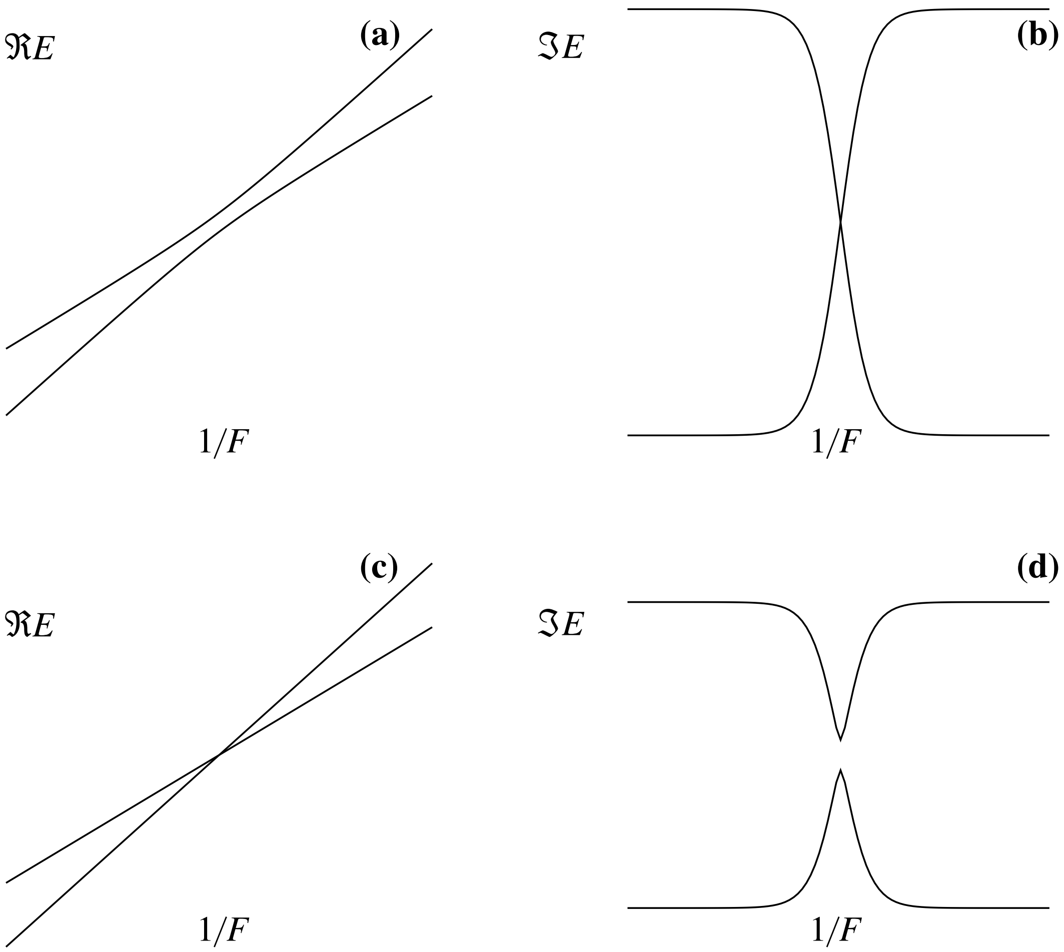

Abb. 3.7: In Abhängigkeit von der Kopplung kommt es zu vermiedenen Kreuzungen der Eigenwerte im Real- oder Imaginärteil. **(a)+(b)** $\hbar|\Gamma_2 - \Gamma_1| < 4|FM_{2,1}|$, **(c)+(d)** $\hbar|\Gamma_2 - \Gamma_1| > 4|FM_{2,1}|$

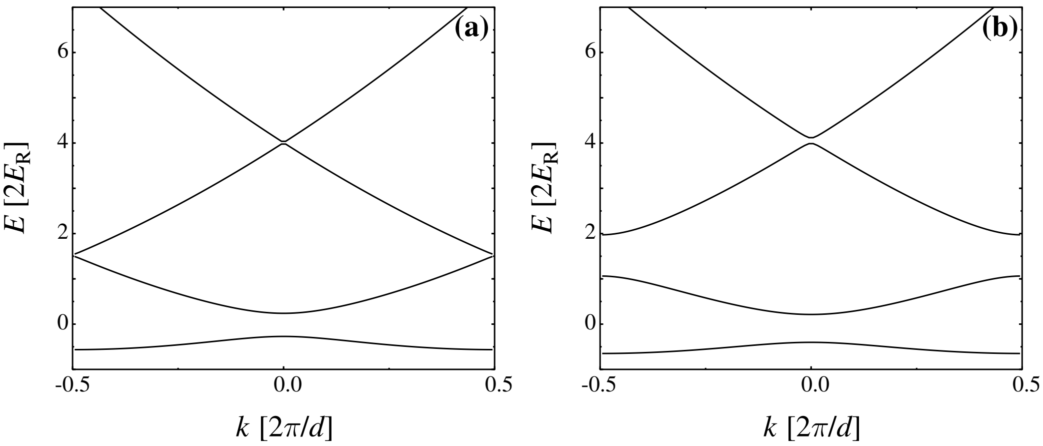

Abb. 3.8: Bandstruktur für folgende Potentials aus Gleichung (3.19), **(a)** $V_1 = E_\mathrm{R}$ und $V_2 = 0.2E_\mathrm{R}$, **(b)** $V_1 = E_\mathrm{R}$ und $V_2 = 2E_\mathrm{R}$

bildung 3.7 (c)+(d)). Hier ändert sich der Imaginärteil nur in der Nähe der Kreuzung. Er zeigt dort eine Ein- bzw. Ausbuchtung.

Bei $L \geq 2$ Leitern kommt es für alle möglichen Paare von Wannier-Leitern zu dem beschriebenem oszillatorischen Verhalten des Imaginärteils der Energie. Insgesamt tritt dann also eine komplizierte Abfolge von Ein- bzw. Ausbuchtung und Wechseln des Imaginärteils auf.

Der in Abbildung 3.5 dargestellte Verlauf des Imaginärteils deutet darauf hin, dass nur die zwei untersten Bandlücken relevant sind, wobei die erste Bandlücke größer als die zweite ist. Dies deckt sich sehr gut mit der Bandstruktur für die hier benutzten Parameter (Abbildung 2.1 (a), $V_0 = 2.4E_\mathrm{R}$).

Um das eben Gesagte noch an einem Beispiel zu illustrieren, wollen wir unser Potential etwas abändern

$$V(x) = V_0 + V_1 \cos(2k_\mathrm{L}x) + V_2 \cos(4k_\mathrm{L}x)\,. \tag{3.19}$$

Mit diesem Potential kann man leicht das Verhältnis der Bandlücken $\delta\epsilon_i$ einstellen. Wie aus Anhang A.2 folgt, gilt

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_1 &= V_1\,, \\ \delta\epsilon_2 &= V_2\,. \end{aligned} \tag{3.20}$$

Die Bandstruktur für dieses Potential ist in Abbildung 3.8 dargestellt, die dazugehörigen Imaginärteile der Eigenwerte in Abbildung 3.9. Wie oben diskutiert kann man die zwei verschiedenen Fälle gut unterscheiden.

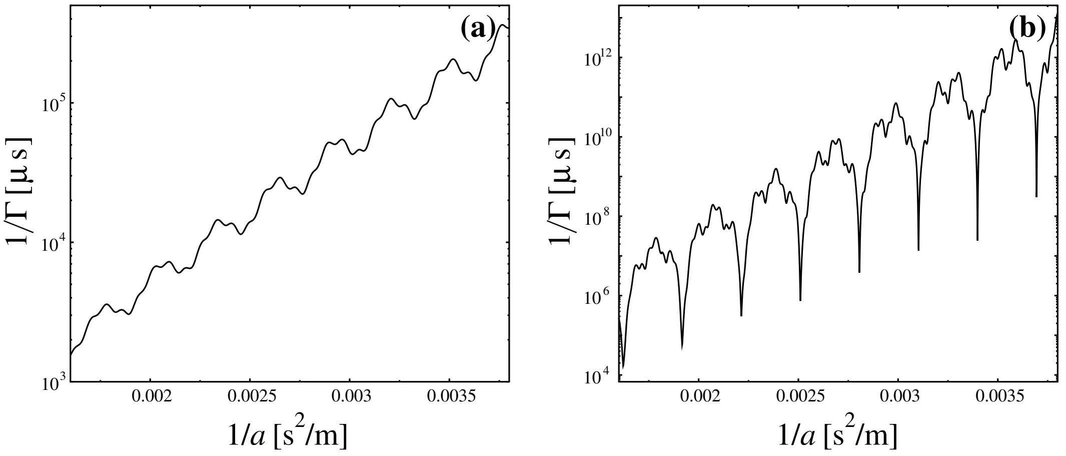

Abb. 3.9: Zerfallskonstante (a) $V_1 = E_\mathrm{R}$ und $V_2 = 0.2E_\mathrm{R}$, (b) $V_1 = E_\mathrm{R}$ und $V_2 = 2E_\mathrm{R}$. Man erkennt deutlich den im Text beschriebenen qualitativen Unterschied zwischen (a)$\hbar|\Gamma_2 - \Gamma_1| < 4|FM_{2,1}|$ und (b) $\hbar|\Gamma_2 - \Gamma_1| > 4|FM_{2,1}|$

3.3 Modell gekickter Atome

Nachdem wir die Ursache für die Oszillationen der Zerfallsrate qualitativ verstanden haben, soll uns ein Modell ermöglichen, auch quantitative Aussagen zu machen. Diese Modell beruht auf der Beobachtung, dass die Übergangsrate zwischen zwei Bändern, außer am minimalen Bandabstand, vernachlässigt werden kann (siehe Abbildung 2.4).

In unserem Modell, Abbildung 3.10, bewegt sich ein Atom auf Grund der Kraft F frei durch das Band. An den Stellen minimalen Bandabstands, und nur da, gibt es eine Amplitude dafür, von dem Band in das benachbarte zu wechseln. Danach bewegt sich das Atom frei weiter. Wir betrachten wieder L-periodische Bänder. Die Kopplung des L-ten Bandes an das Kontinuum (($L+1$)-tes Band) sei durch einen Imaginärteil in der Energie beschrieben. Der Imaginärteil ist dabei durch die Landau-Zener-Rate bestimmt. Auch die Übergangsmatrixelemente werden mit Hilfe des Landau-Zener-Modells nach Gleichung (3.14) bestimmt. Der Propagator über

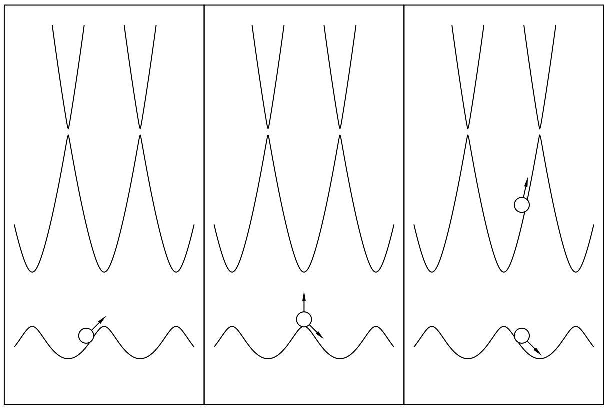

Abb. 3.10: Wie im Text beschrieben bewegen sich die Atome frei in den Bändern. Beim minimalen Bandabstand, kann das Atom von einem Band in ein anderes wechseln.

eine Blochperiode lautet somit

$$U(T_\mathrm{B}) \;=\; \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0T_\mathrm{B}/2\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}K_1}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0T_\mathrm{B}/2\hbar}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}K_2} \tag{3.21}$$

$$H_0 \;=\; \begin{pmatrix} \bar{\epsilon}_1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \bar{\epsilon}_2 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \bar{\epsilon}_L - \mathrm{i}\hbar\Gamma_L/2 \end{pmatrix}$$

$$K_1 \;=\; \begin{pmatrix} 0 & |M_{12}| & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ |M_{21}| & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |M_{34}| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |M_{43}| & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

$$K_2 \;=\; \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & |M_{23}| & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & |M_{32}| & 0 & 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & |M_{45}| & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |M_{54}| & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

Die Matrizen weisen alle eine Blockstruktur auf, wobei der größte Block eine 2 × 2 Matrix darstellt, so dass die Exponentialfunktion explizit angegeben werden kann

$$\exp\left(-i\begin{pmatrix} 0 & |M_{n,m}| \\ |M_{m,n}| & 0 \end{pmatrix}\right) = \begin{pmatrix} \cos(|M_{m,n}|) & -\mathrm{i}\sin(|M_{m,n}|) \\ -\mathrm{i}\sin(|M_{m,n}|) & \cos(|M_{m,n}|) \end{pmatrix} \tag{3.22}$$

Für $L = 1$ erhält man das bekannte Landau-Zener-Ergebnis. Der erste nichttriviale Fall ist $L = 2$. Hier lassen sich die Eigenwerte $\lambda_{1,2}$ des Zeitentwicklungsoperator explizit angeben. Mit den Abkürzungen

$$\theta_{1,2} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}2\pi(\bar{\epsilon}_{1,2}-\mathrm{i}\hbar\Gamma_{1,2}/2)/dF}, \tag{3.23}$$

wobei $\Gamma_1 = 0$ ist, gilt

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= \frac{\cos(|M_{1,2}|)}{2}(\theta_1+\theta_2) \\ &\pm\frac{1}{2}\sqrt{\cos^2(|M_{1,2}|)(\theta_1+\theta_2)^2 - 4\theta_1\theta_2} \end{aligned} \tag{3.24}$$

Für die Energieeigenwerte gilt somit

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= -\frac{\mathrm{i}dF}{2\pi}\ln(\lambda_{1,2}) \\ &= \frac{dF}{2\pi}arg(\lambda_{1,2}) + dFl - \frac{\mathrm{i}dF}{2\pi}\ln(|\lambda_{1,2}|), \end{aligned} \tag{3.25}$$

$l = \ldots, -1, 0, 1, \ldots$. Man findet also eine Leiter von Eigenwerten, die in die komplexe Ebene verschoben wurde. Dabei oszilliert der Imaginärteil des Eigenwertes als Funktion von $1/F$.

In Abbildung 3.11 sind die Imaginärteile der zwei stabilsten numerisch gefundenen Eigenwerte (siehe Kapitel 5.2) mit den zwei Imaginärteilen aus unserem Modell verglichen. Man sieht, dass das gekickte Modell den Verlauf des Imaginärteils des stabilsten Eigenwertes (a) sehr gut wiedergibt. Für kleine Beschleunigung a wird die Näherung schlechter, da sich dann die Atome nicht mehr schnell genug durch das Band bewegen. Dadurch ist dann die Annahme eines gekickten Übergangs nicht mehr gerechtfertigt. Der zweitstabilste Eigenwert (b) zeigt ebenfalls Oszillationen, diese werden im Zweibandmodell nicht wiedergegeben. Die Ursache für diese Oszillationen ist die nichtverschwindende 2. Bandlücke. Dies wird im Zweibandmodell nicht berücksichtigt. Es ist einfach das Modell auf drei und mehr Bänder auszudehnen. Allerdings ist es dann nicht mehr möglich (außer bei 3 Bändern), die Eigenwerte analytisch anzugeben. Die Anzahl der wechselwirkenden Leitern ist durch die Zahl der

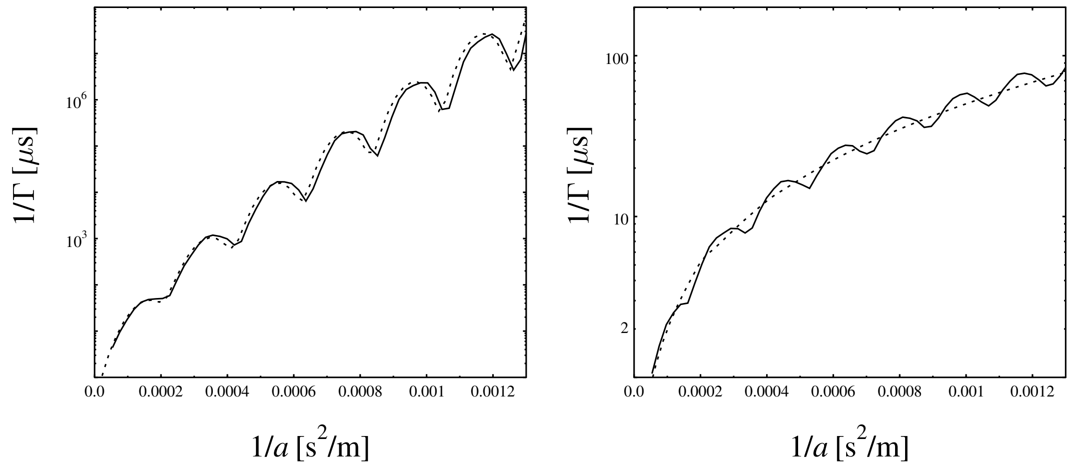

Abb. 3.11: Imaginärteile der Energieeigenwerte, durchgezogene Linie exakt, gestrichelte Linie gekicktes Modell **(a)** Stabilster Eigenwert, **(b)** zweit stabilster Eigenwert. Die Amplitude des Potentials ist $V_0 = 2.4 E_{\mathrm{R}}$.

offen Bandlücken gegeben. Man kann deshalb durch Vergrößern von V_0 die Anzahl der wechselwirkenden Leitern erhöhen [45]. Dabei muß man dann im Landau-Zener-Modell die numerisch bestimmten Energielücken benutzen, da bei zu großem V_0 die einfachen Näherungen für die Energielücke ungültig werden. Eine andere Möglichkeit die Leiterwechselwirkung zu studieren, besteht im Hinzufügen von weiteren Termen zu unserem Potential aus Gleichung (3.19)

$$V(x) = \sum_{n=1}^{N} V_n \cos(2nk_{\mathrm{L}}x)\,. \tag{3.26}$$

Wählt man alle V_n klein genug, so gilt für die n-te Bandlücke $\delta\epsilon_n = V_n$. Die V_n können wir wieder so wählen, dass wir L periodische und ein ausgedehntes Band haben.

3.4 Zeitverhalten beim Landau-Zener-Tunneln

Einen ersten Eindruck von der Dynamik liefert das Modell der gekickten Atome aus dem vorangegangenen Abschnitt. Betrachten wir insbesondere die Wahrscheinlichkeit ein Atom im untersten Band zu finden, wenn es zur Zeit $t = 0$ im untersten

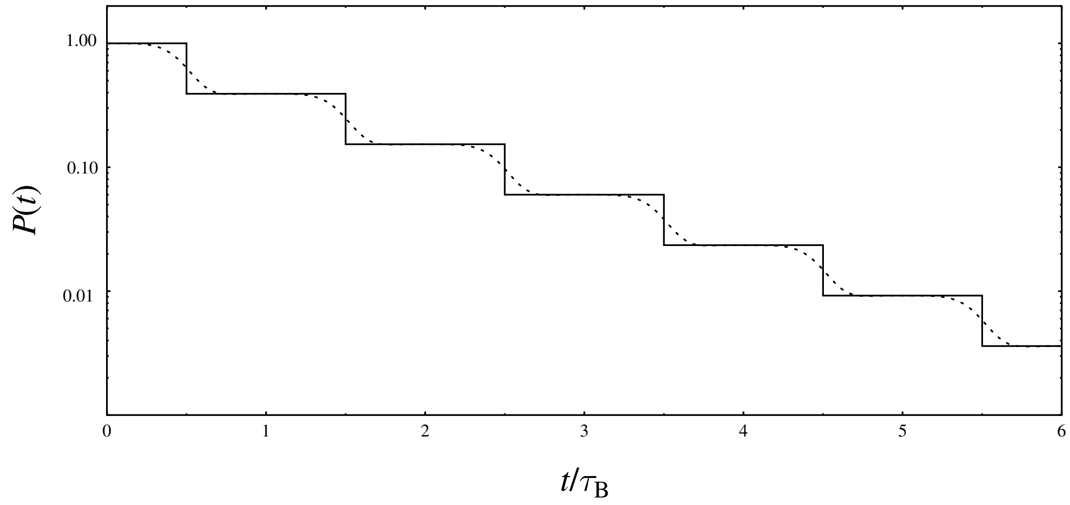

Abb. 3.12: Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeit ein Atom in untersten Band zu finden, wenn es zur Zeit $t = 0$ im untersten Band war. Das numerische Resultat ist gepunktet dargestellt. Die durchgezogene Linie ist das Modell gemäß Gleichung (3.27) für ein Zweibandmodell ($L = 1$). Es ist $V_0 = 0.5E_\mathrm{R}$.

Band war, so ergibt sich mit Hilfe des Propagators aus Gleichung (3.22)

$$P(t) = |\langle\Psi_0|U(n\tau_\mathrm{B})|\Psi_0\rangle|^2 \qquad \begin{cases} t \geq 0 \\ (n - \frac{1}{2})\tau_\mathrm{B} < t \leq (n + \frac{1}{2})\tau_\mathrm{B}\,. \end{cases} \tag{3.27}$$

Die Wahrscheinlichkeit ändert sich in diesem Modell stufenweise. Die Anzahl der Bänder, die bei der Berechnung des Propagators $U(\tau_\mathrm{B})$ berücksichtigt werden müssen, ist, wie im vorigen Abschnitt beschrieben, von der Stärke des Potentials abhängig. In Abbildung 3.12 wird Gleichung (3.27) mit einem numerischen Resultat verglichen. In der Numerik wurde ein Atom mit festem Anfangsimpuls ($k = 0$) propagiert. Man sieht, dass die Näherung, außer in der Nähe der Übergangszeiten, wie erwartet sehr gut ist. Es wurde ein periodisches Band berücksichtigt. Das bedeutet nichts anderes, als dass nach jeder Blochperiode die Wahrscheinlichkeit mit einem konstanten Faktor multipliziert wird.

Bevor wir die Wahrscheinlichkeit dafür, dass die Atome vom beschleunigten Potential mitgerissen werden, als Funktion der Zeit bestimmen, sollen erst noch einmal einige wichtige Erkenntnisse über instabile Zustände zusammengefasst werden [46]. Die Wahrscheinlichkeit dafür ein System zur Zeit t im Zustand $|\Psi\rangle$ zu finden, wenn es zur Zeit $t = 0$ im Zustand $|\Psi\rangle$ war, ist

$$P(t) = |\langle\Psi|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}|\Psi\rangle|^2 \,. \tag{3.28}$$

Es gilt $P(0) = 1$ und $P(t) \leq 1$ für $t \neq 0$. Für kleine Zeiten, kann man die Exponentialfunktion entwickeln und man erhält

$$P(t) \approx 1 - \frac{\langle(\langle H\rangle - H)^2\rangle}{\hbar^2}t^2 \approx \exp(-\frac{\langle(\langle H\rangle - H)^2\rangle}{\hbar^2}t^2) \,. \tag{3.29}$$

Die Erwartungswerte sind mit dem Zustand $|\Psi\rangle$ zu nehmen. Für kleine Zeiten gibt es also keinen exponentiellen Zerfall der Wahrscheinlichkeit. Eine sehr interessante Fragestellung ist, wie groß das Zeitintervall ist, in dem nichtexponentielles Verhalten gemessen werden kann [47]. Die Experimente in [24] waren die Ersten, in denen solch ein Abweichen für kurze Zeiten direkt beobachtet wurde.

Das Verhalten für große Zeiten hängt davon ab, ob das Spektrum von H eine untere Grenze hat oder nicht. Ist das Spektrum nach unten begrenzt, so gilt [46]

$$P(t) = \mathrm{e}^{-ct^q} \,, \qquad q < 1 \,,\; c > 0 \,. \tag{3.30}$$

Der Zerfall ist also langsamer als im exponentiellen Fall. Das Spektrum für das Stark-Problem ist nicht begrenzt, deshalb kommt es hier zu einem exponentiellen Verlauf von $P(t)$ für große t. In den Experimenten gilt streng genommen nicht, dass das Spektrum unbegrenzt ist, da die endliche Ausdehnung des Potentials nur endlich viele Mulden und damit Leitersprossen zulässt. Die Dauer der Experimente ist jedoch so kurz, dass die Atome den Rand nicht erreichen. Der Übergang von der durch quadratische Zeitabhängigkeit gekennzeichneten Kurzzeitdynamik zur Langzeitdynamik soll unter anderem hier studiert werden.

Um die Zeitentwicklung eines Atoms im gekippten periodischen Potential zu beschreiben, wollen wir von den Leiterzuständen ausgehen. Wir benutzen wieder das Modell mit den L-periodischen Bändern und einem nichtperiodischen Band, wobei wir wiederum hauptsächlich den Fall $L = 1$ diskutieren.

Die Wellenfunktion des n-ten Bandes ($n \leq L$) ist gegeben durch

$$\psi_n(k,t) = \sum_l c_{n,l}(t)\phi^0_{n,l}(k,t) \,. \tag{3.31}$$

Für das $(L+1)$-te Band gilt formal $d \to 0$ (Die Periodizität des Bandes, und damit auch die Brillouin-Zone, ist unendlich.). Mit $s := ld$ und $c_{L+1}(s,t) := c_{N+1,l}(t)/\sqrt{d}$

wird aus Gleichung (3.31)

$$\psi_{L+1}(k,t) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}s\, c_{L+1}(s,t)\phi_{L+1}(s,k,t). \tag{3.32}$$

Benutzt man Gleichungen (3.31), (3.32) und (2.42) so erhält man die Bestimmungsgleichungen für die Entwicklungskoeffizienten $c_{n,l}(t)$ und $c_{L+1}(s,t)$

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\dot{c}_{n,\nu}(t) &= F\sum_{m\neq n}\sum_{\mu} X^{\nu,\mu}_{n,m}(t)c_{m,\mu}(t) + F\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s\, X^{\nu,s}_{n,L+1}(t)c_{L+1}(s,t) \\ \mathrm{i}\hbar\dot{c}_{L+1}(s,t) &= F\sum_{m}\sum_{\mu} X^{s,\mu}_{L+1,m}(t)c_{m,\mu}(t), \end{aligned} \tag{3.33}$$

mit

$$\begin{aligned} X^{\nu,\mu}_{n,m}(t) &= \int\limits_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}k\phi^{0*}_{n,\nu}(k,t)W_{n,m}(k)\phi^{0}_{m,\mu}(k,t)\,, \\ X^{s,\mu}_{L+1,m}(t) &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\phi^{0*}_{L+1}(s,k,t)W_{L+1,m}(k)\phi^{0}_{m,\mu}(k,t)\,, \\ X^{\nu,s}_{n,L+1}(t) &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\phi^{0*}_{n,\nu}(k,t)W_{n,L+1}(k)\phi^{0}_{L+1}(s,k,t)\,. \end{aligned} \tag{3.34}$$

Als einfachsten Fall mit Bandkopplung betrachten wir wieder ein Zweibandmodell. Löst man die zweite Gleichung in (3.33) und setzt diese in die erste Gleichung ein so ergibt sich

$$\dot{c}_{1,m}(t) = -\frac{F^2}{\hbar^2}\sum_{l}\int\limits_{0}^{t}\mathrm{d}\tau\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s X^{m,s}_{1,2}(t)X^{s,l}_{2,1}(\tau)c_{1,l}(\tau). \tag{3.35}$$

Für eine kleine Kraft ist die rechte Seite von Gleichung (3.35) klein, so dass $c_{1,l}(\tau) \approx c_{1,l}(t)$ gilt. Das Integral über s läßt sich noch weiter auswerten und man erhält

$$\dot{c}_{1,m}(t) = -\frac{F^2}{\hbar^2}\sum_{l}\int\limits_{0}^{t}\mathrm{d}\tau g_{m,l}(t,\tau)c_{1,l}(t), \tag{3.36}$$

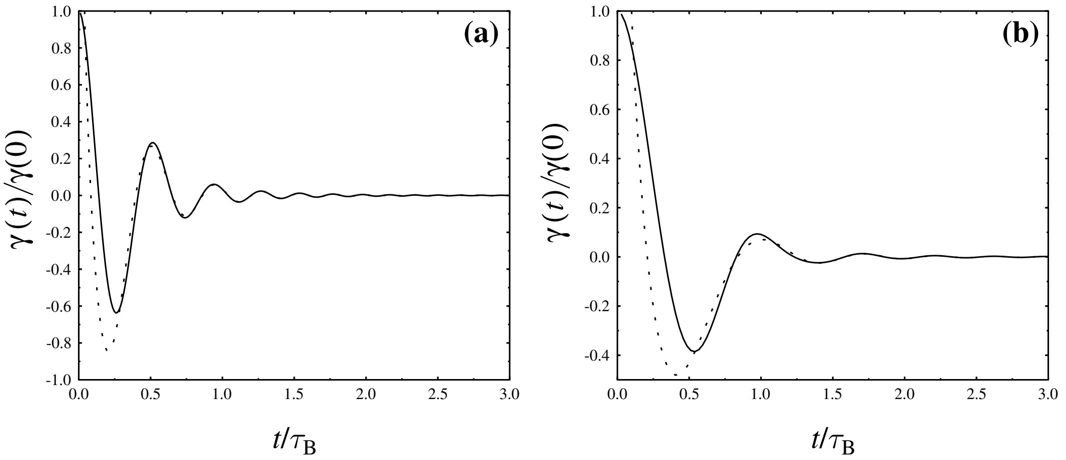

Abb. 3.13: Der Exponent $\gamma(t)$. Durchgezogene Linie exaktes Resultat. Die gestrichelte Linie stellt die Näherung aus Gleichung (3.47) dar. $\gamma(0)$ ist durch Gleichung (3.48) definiert. Die Potentialstärke ist $V_0 = 2.4E_\mathrm{R}$. Die Beschleunigung ist **(a)** $a = 2500m/s^2$ und **(b)** $a = 5000m/s^2$.

mit

$$\begin{aligned} g_{m,l}(t,\tau) &= \exp\left(\mathrm{i}\frac{dF}{2\hbar}(t+\tau)(m-l)\right)\Omega_{m,l}(t-\tau) \qquad (3.37)\\ \Omega_{m,l}(t) &= \frac{d}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\,\mathcal{G}(k,v)\mathrm{e}^{\mathrm{i}dk(m-l)}\\ \mathcal{G}(k,v) &= W_{1,2}(k-v)W_{2,1}(k+v)\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{F}\int\limits_{k-v}^{k+v}\mathrm{d}qE_{2,1}(q)\right) \end{aligned}$$

wobei $\hbar v = 1/2Ft$ und $E_{2,1}(k) = E_2(k) - E_1(k)$ ist. An diesem Punkt können wir nun zur Frage zurückkehren wie sich die Anzahl der Atome im 1. Band mit der Zeit ändert. Die Änderung der Anzahl ist gegeben durch

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P(t) &= \sum_m \dot{c}_{1,m}(t)c^*_{1,m}(t) + \dot{c}^*_{1,m}(t)c_{1,m}(t) \\ &= -\frac{F^2}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}\tau\,(\Omega^*(t-\tau)+\Omega(t-\tau))\,P(t) \qquad (3.38)\\ &\quad -\frac{F^2}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}\tau \sum_{m,l\neq 0}\Big(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{dF}{2\hbar}(t+\tau)l}\Omega_{m,m+l}(t-\tau)c_{1,m+l}(t)c^*_{1,m}(t) \\ &\quad + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{dF}{2\hbar}(t+\tau)l}\Omega^*_{m,m+l}(t-\tau)c^*_{1,m+l}(t)c_{1,m}(t)\Big)\,,\end{aligned}$$

mit $\Omega(t) = \Omega_{m,m}(t)$. Die Beiträge zum Verlust lassen sich in zwei Klassen einteilen. Einmal der Fall $l = 0$, hier ergibt sich eine Größe proportional zur Übergangswahrscheinlichkeit. Für $l \neq 0$ mischen sich Beiträge verschiedener Leitersprossen. Die Beiträge für große $|l|$ können, wenn $\mathcal{G}(k,v)$ glatt genug ist, vernachlässigt werden. Dann gilt nämlich

$$\begin{aligned}\Omega_{m,m+l}(t-\tau) &= \frac{d}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\,\mathcal{G}(k,v)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}dkl} && (3.39)\\ &\approx \frac{d}{2\pi}\sum_n \mathcal{G}(\frac{2\pi n}{dl},v)\int_{2\pi(n-\frac{1}{2})/dl}^{2\pi(n+\frac{1}{2})/dl}\mathrm{d}k\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}dkl} && (3.40)\\ &= 0. && (3.41)\end{aligned}$$

Mit dieser Näherung lässt sich Gleichung (3.38) leicht lösen

$$P(t) = \exp\left(-\frac{F^2}{\hbar^2}\int_0^t \mathrm{d}\tau\,(\Omega^*(t-\tau)+\Omega(t-\tau))\right) \qquad (3.42)$$

Betrachten wir nun wieder das Zweibandmodell aus Anhang A.2, so kann man sich auf den Fall $\Omega_{m,l} = 0$ für $l \neq m$ beschränken, da auch das untere Band ein kontinuierliches Spektrum besitzt. Für diesen Fall werden wir nun den Exponenten in Gleichung (3.42) ausführlich diskutieren [48]. Da

$$\int_0^t \mathrm{d}\tau\,(\Omega^*(t-\tau)+\Omega(t-\tau)) = \int_0^t \mathrm{d}\tau\,(t-\tau)(\Omega^*(\tau)+\Omega(\tau)) \qquad (3.43)$$

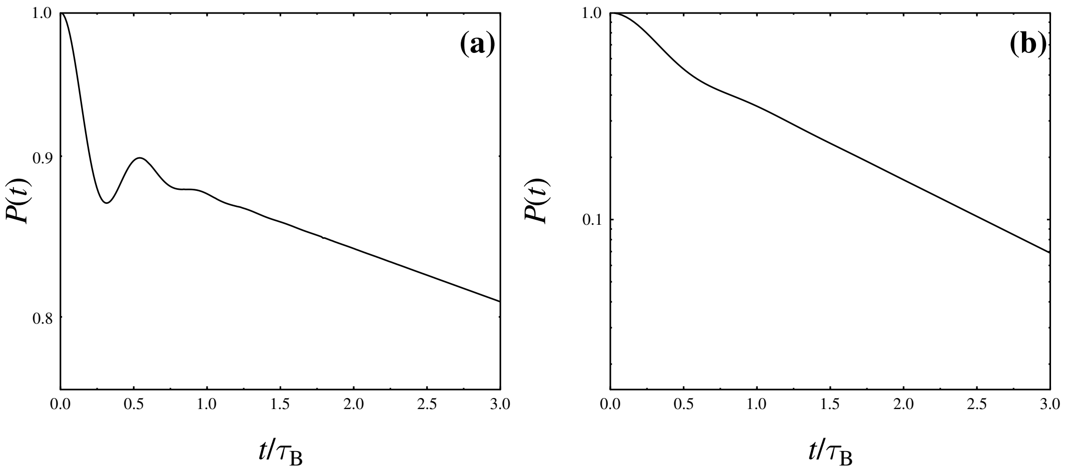

Abb. 3.14: Wahrscheinlichkeit $P(t)$ ein Atom im untersten Band zu finden. Die Parameter sind wie in Abbildung 3.13.

ist, folgt für kleine t der erwartete quadratische Verlauf des Exponenten

$$P(t) = \exp(-\frac{F^2}{\hbar^2}\gamma(0)t^2)\,, \tag{3.44}$$

wobei $\gamma(t) = 2\Re(\Omega(t))$ ist.
Im Limes sehr großer Zeiten hingegen läßt sich

$$P(t) = \mathrm{e}^{-\Gamma t + \Gamma_0} P(0) \tag{3.45}$$

schreiben. Es ist $\Gamma = \int_0^\infty \mathrm{d}t \gamma(t)$ und $\Gamma_0 = \int_0^\infty \mathrm{d}t\, t\gamma(t)$ ist. Γ ist durch Gleichung (3.15) bestimmt. Hier findet man also den exponentiellen Zerfall für große Zeiten. In unserem Zweibandmodell A.2 gilt

$$\gamma(t) = \frac{\hbar^2}{2mV_0}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}q}{((q-\tilde{v})^2+1)((q+\tilde{v})^2+1)}\cos\left(\frac{mdV_0^2}{2\pi\hbar^2 F}\int\limits_{q-\tilde{v}}^{q+\tilde{v}}\mathrm{d}q'\sqrt{q'^2+1}\right)\,, \tag{3.46}$$

mit $\tilde{v} = 2\pi\hbar^2 v/mdV_0$. Dieses Integral kann mit Hilfe der Methode der stationären Phase berechnet werden [49] und man erhält

$$\gamma(t) = \frac{\pi V_0^2\hbar^2}{m}\sqrt{\frac{2}{t}}\frac{1}{\left((\frac{\pi\hbar^2 F}{md}t)^2+V_0^2\right)^{7/4}}\cos\left(\frac{\pi}{4}+\frac{V_0}{F}\int\limits_{-Ft/2}^{Ft/2}\mathrm{d}q\sqrt{\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mdV_0}q\right)^2+1}\right)\,. \tag{3.47}$$

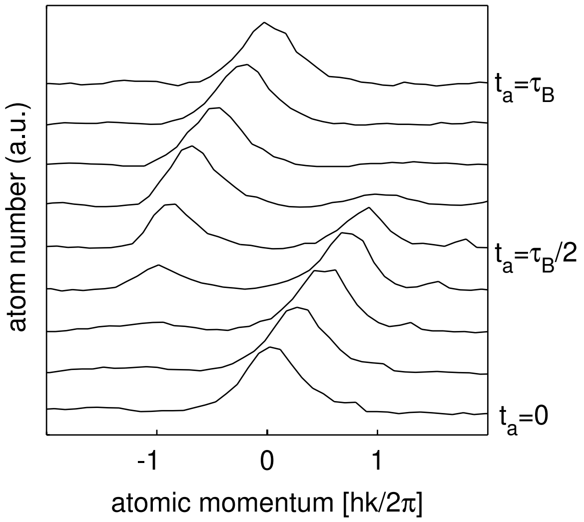

Abb. 3.15: Impulsverteilung der Atome im untersten Band im mitbewegten Bezugssystem für gleiche Abstände der Beschleunigungsdauer t$_a$. Die Amplitude des Lichtpotentials beträgt $2.3E_{\mathrm{R}}$. Die Beschleunigung ist $|a| = 0.85m/s^2$ (aus [21]).

In Abbildung 3.13 wird der exakte Exponent $\gamma(t)$ mit dem stationäre Phase Ergebnis für zwei verschiedene F verglichen. Die anderen Parameter entsprechen denen in den Experimenten. Man sieht, dass $\gamma(t)$ oszilliert und für große t verschwindet. Die Zeitskala auf der $\gamma(t)$ abfällt, ist durch V_0/F bestimmt. Zeiten kleiner als $t_{\mathrm{k}} = V_0 md/\pi\hbar F$ sind durch kohärentes Verhalten gekennzeichnet. Diese Zeit ist in der gleichen Größenordnung wie τ_{B}. In Einheiten von τ_{B} ist diese Zeitspanne unabhängig von F. Das ist in Abbildung 3.13 gut zu erkennen. Für $t = 0$ folgt aus Gleichung (3.46)

$$\gamma(0) = \frac{\pi\hbar^2}{4mV_0}\,. \tag{3.48}$$

Mit Hilfe von $\gamma(t)$ kann man nun leicht die Mitnahmewahrscheinlichkeit bestimmen. In Abbildung 3.14 ist $P(t)$ für die beiden Fälle aus Abbildung 3.13 dargestellt. Für Zeiten kleiner t_{k} sieht man ein deutliches Abweichen vom exponentiellen Zerfallsgesetz. Für kleinere F sind diese Abweichungen stärker ausgeprägt.

Im Gegensatz zur Abbildung 3.12 betrachten wir hier kein Atom mit einem festen Impuls sondern ein Ensemblemittel über alle k.

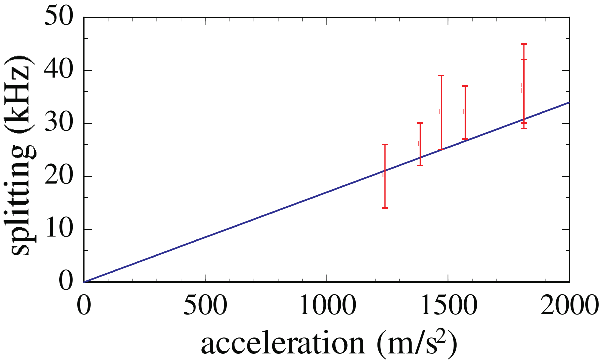

Abb. 3.16: Abstand der der Wannier-Stark-Eigenwerte innerhalb einer Leiter als Funktion der Beschleunigung. Die theoretische Vorhersage nach Gleichung (3.7) ist die durchgezogene Linie (aus [22]).

3.5 Vergleich der theoretischen Ergebnisse mit experimentellen Daten

Hier wollen wir die Resultate aus den vorangegangen Abschnitten mit den Ergebnissen der in Abschnitt 2.5 vorgestellten Experimente vergleichen. Unser Hauptaugenmerk liegt dabei auf den Experimenten [22, 24]. Bevor wir aber diese mit den in den Abschnitten 3.2-3.4 gemachten Bertrachtungen vergleichen, wollen wir die Bloch-Oszillationen zeigen, wie sie in den Experimenten mit Cs-Atomen beobachtet wurden (Abbildung 3.15).

Ein zentrales Resultat der vorangegangenen Betrachtung war, dass die Energiebänder eines periodischen Potentials beim Anlegen einer konstanten Kraft in Leitern von (komplexen) Eigenwerten aufspalten. Der Abstand des Realteils zweier Eigenwerte einer Leiter wächst linear mit der Kraft F. Die Existenz der Leiterzustände wurde wie schon erwähnt lange bestritten. Neben dem mathematischen Beweis ihrer Existenz, konnten sie nun auch vermessen werden [22]. Dazu wurde wie in Abschnitt 2.5 beschrieben mit Hilfe eines zusätzlichen zeitlich periodischen Potentials der Abstand der Eigenwerte einer Leiter vermessen und mit den theoretischen Vorhersagen verglichen. Im Rahmen der experimentellen Genauigkeit konnten die Vorhersagen bestätigt werden (siehe Abbildung 3.16).

Desweiteren haben wir gezeigt, dass die Landau-Zener-Rate die Beschleunigungsabhängigkeit der Verlustrate nur im Mittel beschreiben kann. Die Oszillationen dieser Rate um das Landau-Zener-Ergebnis konnte durch die Wechselwirkung der

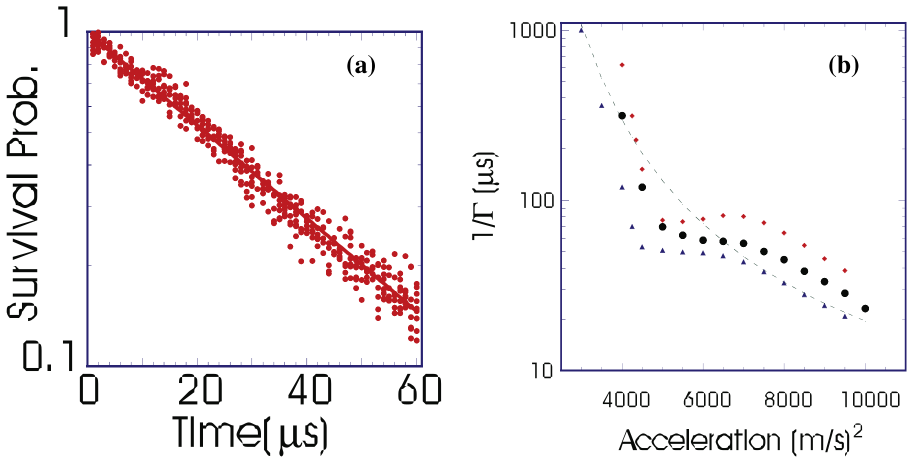

Abb. 3.17: **(a)** Experimentell gemessene Wahrscheinlichkeit im Potential gefangen zu sein ($a = 4500\mathrm{m/s}^2$) und ($V_0 = 2E_\mathrm{R}$). **(b)** Inverse Zerfallskonstante als Funktion der Beschleunigung a für $V_0 = 2.9E_\mathrm{R}$ (Punkte). Dreiecke (Rhomben) sind das Ergebnis einer numerischen Simulation für $V_0 = 2.4E_\mathrm{R}$ ($V_0 = 2.9E_\mathrm{R}$). Die Linie stellt die Landau-Zener-Vorhersage für $V_0 = 2.6E_\mathrm{R}$ dar (aus [22]).

Bänder erklärt werden. Diese Oszillationen zeigen sich auch in den experimentellen Ergebnissen. In Abbildung 3.17 (a) ist die relative Anzahl der gefangenen Atome als Funktion der Zeit dargestellt. Die daraus ermittelte Zerfallskonstante entspricht einem Punkt in Abbildung 3.17 (b). Die Oszillationen um das Landau-Zener-Resultat sind gut zu erkennen.

Auch die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeit wurde experimentell untersucht [24]. So konnten insbesondere die Abweichungen vom exponentiellen Zerfallsgesetz für kurze Zeiten gemessen werden. Qualitativ stimmen die gemessenen Resultate sehr gut mit der Theorie überein. Allerdings zeigen die theoretischen Ergebnisse einen etwas stärkeren Anfangsverlust der Wahrscheinlichkeit. Die Ursache dafür liegt darin, dass die theoretischen Berechnungen von einem Grundzustand des periodischen Potentials ausgehen, während im Experiment zur Trennung der Atome im untersten Band vom Rest schon eine Vorbeschleunigung benutzt wurde.

Ein weiteres Experiment, welches das Verhalten von Atomen in gekippten periodischen Potentialen untersucht wurde mit Hilfe von Bose-Einstein-Kondensaten durchgeführt [25]. Bose-Kondensate lassen sich mit Hilfe einer nichtlinearen Schrödinger-Gleichung beschreiben. Dies wird in Abschnitt 4.1 näher erläutert. Die Nichtlinea-

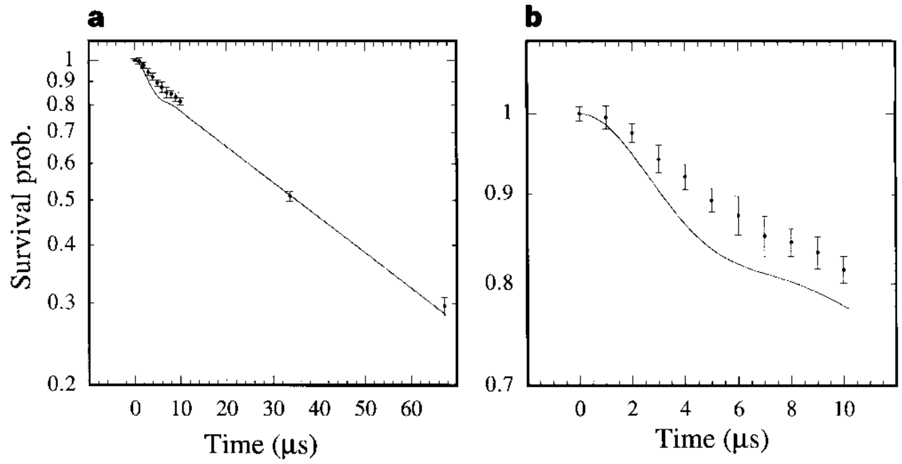

Abb. 3.18: Gemessene Mitnahmewahrscheinlichkeit $P(t)$ für eine Beschleunigung von $a = 7000\text{m/s}^2$ und eine Potentialstärke von $V_0 = (3.4 \pm 0.34)E_\text{R}$. Die durchgezogene Linie ist $P(t)$ aus Gleichung (3.42) für $V_0 = 3E_\text{R}$ (aus [24]).

rität ist aber im betrachteten Experiment so klein, dass die normale Schrödinger-Gleichung ausreicht, um das Experiment richtig zu beschreiben.

Nach der Herstellung des Kondensates aus Rubidiumatomen wurde dieses in eine senkrechte stehende Lichtwelle gebracht. Diese stehende Lichtwelle bildet das periodische Potential und hat eine Periode von $\lambda/2$, wobei $\lambda = 850\text{nm}$ die Lichtwellenlänge ist. Die Erdanziehung führt zu der konstanten Kraft $F = mg$ auf das Bose-Kondensat. Die Intensität des Lichtfeldes ist wieder so gewählt, dass die maximale Energie des untersten Bandes kleiner als die Amplitude des periodischen Potentials ist. Durch die konstante Kraft können die Atome nun wieder aus dem Potential heraustunneln. Anders als in den bisher beschriebenen Experimenten wurden hier die herausgetunnelten Atome untersucht. Man findet, dass sich eine Sequenz von Pulsen ausbildet. Das Ergebnis des Experiments ist in Abbildung 3.19 dargestellt. Die Ausbildung von Pulsen kann man nun folgendermaßen verstehen: Jedes Potentialminimum dient als Quelle für eine ebene Welle. Außerhalb des Bereichs, in dem die gefangenen Atome sich befinden gilt somit [25]

$$\psi(z,t) = \sum_n^N A_n(t) \exp\left(\mathrm{i}\int \mathrm{d}z k_n(z) - \mathrm{i}\omega_n t + \mathrm{i}\varsigma_n\right) \qquad (3.49)$$

Dabei ist $\hbar k_n(z) = m\sqrt{2g|z - z_n|}$ der Impuls, $\hbar\omega_n = mgz_n$ die Energie und ς_n ein

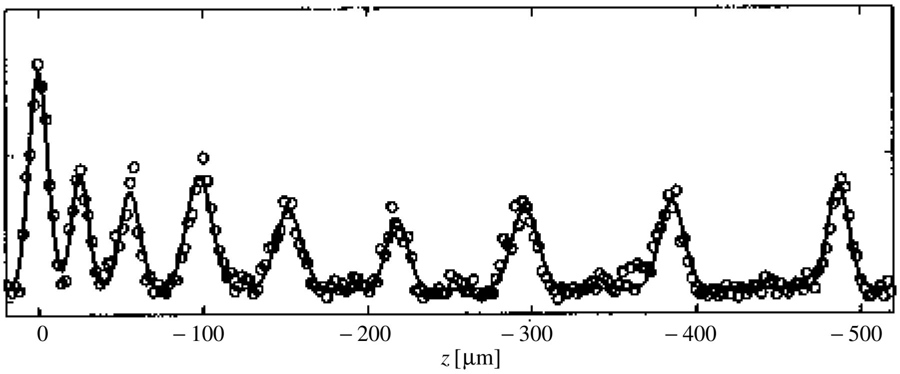

Abb. 3.19: Integriertes Dichtprofil nach 10 ms. Die durchgezogene Linie ist ein Fit an die experimentellen Daten (aus [25]).

beliebige Anfangsphase. Die Fallenminima z_n haben einen konstanten Abstand. Mit entsprechender Wahl des Koordinatenursprungs gilt $z_n = n\lambda/2$. Wenn die Anfangsphasen ς_n alle gleich sind, so ist $|\psi(z,t)|^2$ aufgrund der konstanten Phasendifferenz der Teilwellen $\omega_\mathrm{d} = \omega_{n+1} - \omega_n$ eine zeitlich periodische Funktion mit der Periode $T = 2\pi/\omega_\mathrm{d} = 4\pi\hbar/mg\lambda$. Sind die Anfangsphasen der Teilkondensate in den einzelnen Potentialtöpfen zufällig verteilt, so verschwindent dieses Interferenzmuster. Diese zwei Fälle sind in Abbildung 3.20 dargestellt. Wegen der beschleunigten Bewegung der Teilkondensate nimmt der Abstand der einzelnen Maxima quadratisch in der Zeit (und damit auch im Ort) zu. Man kann das Experiment auch mit Hilfe der oben betrachteten Bloch-Oszillationen verstehen. Das Kondensat oszilliert im untersten Band des periodischen Potentials. Wie im Modell der gekickten Atome beschrieben, tunnelt dann ein Teil an den Stellen des kleinsten Bandabstands in das nächste Band. Daraus resultiert ein periodischer Verlust, der sich in einer zeitlich periodischen Pulsfolge bemerkbar macht. Die Periode T ist dabei gleich der Blochperiode τ_B.

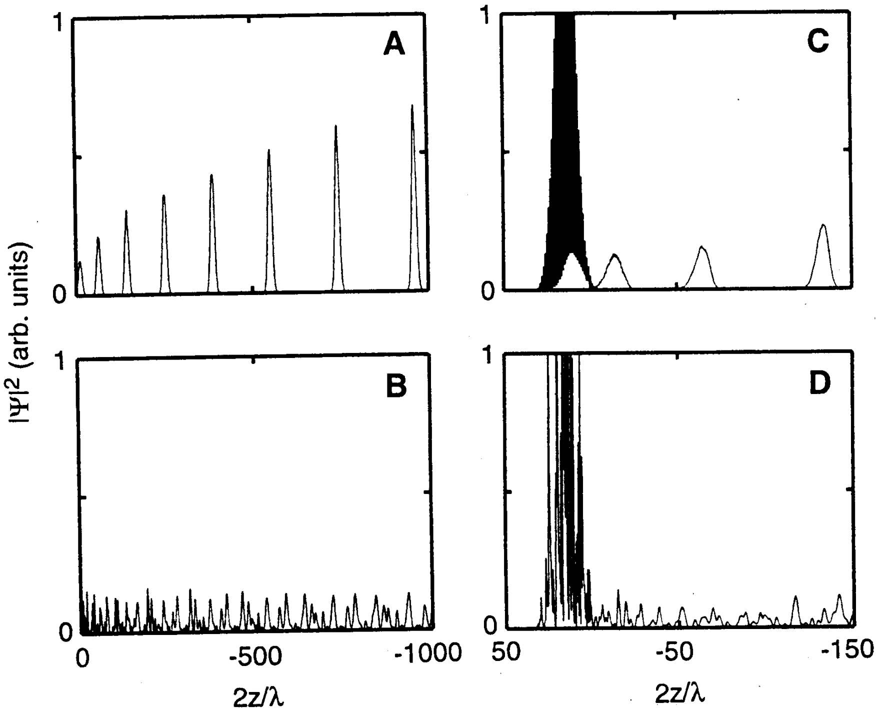

Abb. 3.20: In **(A)** und **(C)** ist $|\psi(z,t)|^2$ für t=10ms nach Gleichung (3.49) dargestellt. Die $A_n(t)$ wurden dabei als zeitunabhängig angenommen, und für die Belegung der Minima wurde eine gaußsche Verteilung mit einer Breite von 15 Minima benutzt. In **(A)** sind alle Phasen ς_n gleich und **(B)** sind sie zufällig verteilt. In **(C)** und **(D)** sind numerische Lösungen der Schrödinger-Gleichung dargestellt, wobei der Anfangszustand aus gaußschen Wellenpaketen bestand, die in den Minima lokalisiert waren. Auch hier wurde wieder einmal mit konstanter Anfangsphase **(C)** und zufälliger Anfangsphase **(D)** gerechnet (aus [25]).

4. Bose-Kondensate

In den vorangegangenen zwei Kapiteln sind fast ausschließlich einzelne Atome betrachtet worden. Die beschriebenen Experimente wurden jedoch nicht mit Einzelobjekten gemacht, sondern immer mit (wenn auch relativ kleinen) Ensemblen von Atomen. Die Wechselwirkung zwischen den Atomen war in den Experimenten immer vernachlässigbar, so dass die Einzelatombeschreibung gerechtfertigt war. Es stellt sich nun die Frage, was passiert, wenn die Dichte der Atomwolken so groß wird, dass die Wechselwirkung der Atome untereinander nicht mehr vernachlässigbar ist. Ein Studienobjekt für solche Fragestellungen sind Bose-Einstein-Kondensate. Wie am Ende von Abschnitt 3.5 dargestellt, werden solche Kondensate auch genutzt, um das Verhalten von quantenmechanischen Teilchen in gekippten periodischen Potentialen zu studieren. Bose-Einstein-Kondensation wurden mit Alkaliatomen das erste Mal 1995 realisiert [50, 51]. Seither wurde das Verhalten von Bose-Kondensaten in Lichtfeldern ausgiebig untersucht [52, 53, 54, 55]. Dabei wurde auch auf den Einfluss eines zusätzlichen Fallenpotentials eingegangen [52, 53].
Wir wollen nun hier den Grundzustand solcher Kondensate in Lichtfeldern betrachten [53]. Desweiteren wollen wir die Dynamik von Bose-Kondensaten in bewegten Lichtfeldern mit Hilfe von numerischen Simulationen studieren.
Im Unterschied zu den Experimenten mit wechselwirkungsfreien Atomen werden die Bose-Kondensate in Fallen erzeugt. Damit hat man kein periodisches Potential mehr, sondern immer eine Überlagerung von periodischem Potential und Fallenpotential. Die gebrochene Translationssymmetrie führt unter anderem dazu, dass man, um eine Kraft auf ein solches Kondensat auszuüben, kein beschleunigtes Lichtfeld mehr braucht. Es reicht schon eine mit konstanter Geschwindigkeit laufende Welle.

4.1 Die Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die Atome in einem Bose-Einstein-Kondensat wechselwirken durch Zweierstöße miteinander. Stöße von mehr als zwei Atomen gleichzeitig können vernachlässigt werden, da die Kondensate eine sehr niedrige Dichte haben. Bei den verwendeten Temperaturen wird die Wechselwirkung der Atome sehr gut durch zentrale Stöße zwischen harten Kugeln beschrieben (s-Wellenstreuung). Dadurch spüren alle Atome im Kondensat ein zusätzliches Potential, welches proportional zur mittleren Dichte der Atome ist. Diese *mean-field* Beschreibung führt zur Gross-Pitaevskii-Gleichung (GPE) [56]

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)=\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r},t)+\frac{4\pi\hbar^2a_\mathrm{s}}{m}|\psi(\mathbf{r},t)|^2\psi(\mathbf{r},t)\,, \tag{4.1}$$

mit

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3r|\psi(\mathbf{r},t)|^2=N\,.$$

a_s ist die s-Wellenstreulänge und N die Anzahl der Atome im Kondensat. Die GPE ist eine Bewegungsgleichung für den Erwartungswert der Vielteilchenwellenfunktion eines Gases von wechselwirkenden Bosonen in einem externen Potential $V(\mathbf{r})$. Ihr Betragsquadrat gibt die Dichte des Kondensates an. Sie hat die Struktur einer nichtlinearen Schrödinger-Gleichung. Das Materiefeld, welches die GPE beschreibt, ist jedoch ein klassisches Feld. Die Gültigkeit der GPE beschränkt sich auf Fragestellungen, bei denen der mittlere Teilchenabstand viel größer als die s-Wellenstreulänge und die Anzahl der Atome viel größer als 1 ist [56]

$$a_\mathrm{s}\ll(\Omega/N)^{1/3}\,,\qquad N\gg 1\,. \tag{4.2}$$

Ω ist das Volumen des Kondensates.

Auch in diesem Kapitel wollen wir uns wieder auf eindimensionale Fragestellungen beschränken. Das bedeutet wir betrachten zigarrenförmige Kondensate. Das Profil des Kondensates in Querrichtung soll durch die Fallen eingefroren sein. Die Querrichtung kann dann ausintegriert werden, was zu einer Reskalierung der Parameter führt [57]. Die eindimensionale Gross-Pitaevskii-Gleichung lautet dann

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\left(\frac{p^2}{2m}+V_\mathrm{F}(x)+V(x)\right)\psi(x,t)+\kappa|\psi(x,t)|^2\psi(x,t)\,. \tag{4.3}$$

Es ist $V_\mathrm{F}=m\omega^2x^2/2$ das Fallenpotential und $V(x)=V(x+d)$ soll wieder das periodische Potential sein. Die Wechselwirkungstärke

$$\kappa=\sqrt{\frac{V_0}{2E_\mathrm{R}}}\frac{r_\mathrm{B}k_\mathrm{L}}{2\pi}\frac{4\pi\hbar^2a_\mathrm{s}}{m} \tag{4.4}$$

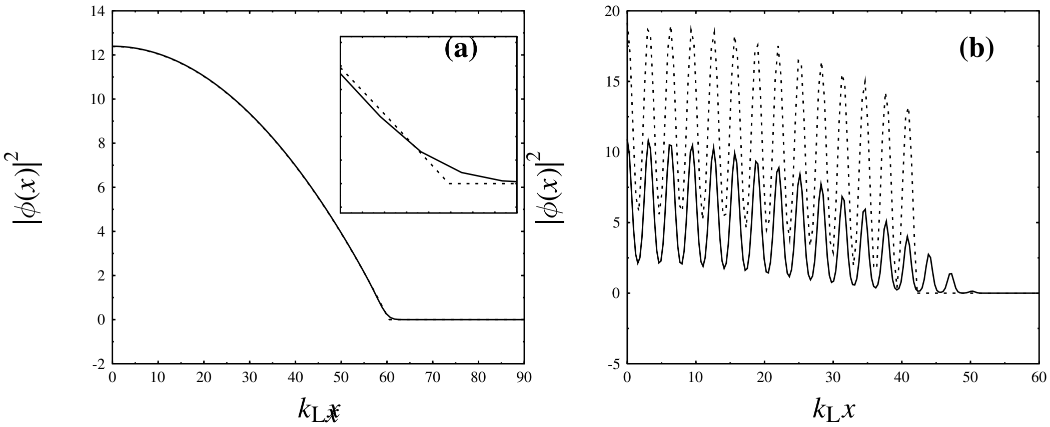

Abb. 4.1: Grundzustand der GPE (durchgezogene Linie) für ein harmonisches Potential **(a)**. Der Einschub zeigt eine Vergrößerung des Randgebietes. Dort ist die Thomas-Fermi-Näherung (gestrichelte Linie) nicht mehr gültig. In **(b)** wird der Grundzustand der GPE (durchgezogene Linie) mit der Thomas-Fermi-Lösung (gestrichelte Linie) verglichen. Hier besteht das Potential aus einem harmonischen und einem periodischen Anteil. Die Parameter sind $\mu = 9.2E_\mathrm{R}$ (1000 Atome), $\kappa = 0.74E_\mathrm{R}k_\mathrm{L}$, $V_0 = 5E_\mathrm{R}$ und $\hbar\omega = 0.016E_\mathrm{R}$.

ist die reskalierte Wechselwirkungsstärke der dreidimensionalen GPE. V_0 ist die Amplitude des periodischen Potentials, und r_B ist die Breite des Lichtpotentials in Querrichtung, wobei $V(\mathbf{r}) \sim \exp(-(y^2+z^2)/r_\mathrm{B})$ gilt.

Wie bei der Schrödinger-Gleichung kann man auch hier den stationären Fall betrachten. Dazu benutzt man den Ansatz $\psi(x,t) = \exp(-\mathrm{i}\mu t/\hbar)\phi(x)$, mit dem chemischen Potential μ. Die stationäre GPE ist dann

$$\mu\phi(x) = \left(\frac{p^2}{2m} + V_\mathrm{F}(x) + V(x)\right)\phi(x) + \kappa|\phi(x)|^2\phi(x)\,. \tag{4.5}$$

Im Gegensatz zur Schrödinger-Gleichung hat die GPE für alle μ eine Lösung. Sie ist keine Eigenwertgleichung.

Der Grundzustand für N wechselwirkungsfreie Atome in einer harmonischen Falle ist durch eine Gaußfunktion gegeben. Für die GPE weicht der Grundzustand umso stärker von der gaußschen Form ab, je größer die Wechselwirkung der Atome (also je größer κ oder N) ist. Für den hier ausschliesslich betrachteten Fall $\kappa > 0$ ist die Wechselwirkung abstoßend. Die Atome werden aus dem Fallenzentrum herausgedrängt. Der Grundzustand ist dann breiter und flacher als der Grundzustand des wechselwirkungsfreien Systems. Bei anziehender Wechselwirkung $\kappa < 0$ kann es nur in Fallen zur Bose-Einstein Kondensation kommen. Dort wirkt die Nullpunktenergie einem Kollaps der Wellenfunktion entgegen [58]. Allerdings darf die Zahl der Atome nicht zu groß sein.

Um sich einen ersten Eindruck von den Lösungen der GPE zu machen, betrachten wir die Thomas-Fermi-Näherung. Dabei wird die kinetische Energie in Gleichung (4.5) vernachlässigt $\partial^2\phi(x)/\partial x^2 \approx 0$. Diese Näherung ist gültig für große Kondensate $Na_\mathrm{s}/a_\mathrm{ho} \gg 1$ [56]. a_ho ist die Oszillatorlänge der Falle

$$a_\mathrm{ho} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,. \tag{4.6}$$

Die Näherung gilt nicht in der Nähe des Randes des Kondensates, da dort die räumliche Ableitung nicht vernachlässigt werden kann. Die Thomas-Fermi-Lösung ist

$$|\phi_\mathrm{TF}(x)|^2 = \begin{cases} \frac{\mu - V(x) - V_\mathrm{F}(x)}{\kappa}\,, & |x| < x_\mathrm{TF} \\ 0\,, & \text{sonst}\,. \end{cases} \tag{4.7}$$

x_TF ist der Thomas-Fermi-Radius. Ist $V(x) = 0$, so ist der Thomas-Fermi-Radius durch $\mu - V_\mathrm{F}(x_\mathrm{TF}) = 0$ definiert. Ist das periodische Potential $V(x) \neq 0$, so kann die Bedingung mehrere Lösungen haben. Das Kondensat besteht dann aus mehreren Teilen. Diese Teilkondensate sind nicht miteinander verbunden, so dass sie streng genommen als verschiedene Kondensate betrachtet werden müssen. Dies kann sich zum Beispiel in einer unterschiedlichen Phase äußern. Man muss aber sicherstellen, dass diese Trennung kein Artefakt der Thomas-Fermi-Lösung ist. Mit Hilfe der Thomas-Fermi-Näherung lässt sich angeben, wie die Anzahl der Atome in der Falle vom chemischen Potential abhängt. Ohne periodischen Anteil im Potential $V(x) = 0$ erhält man

$$N = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x |\phi_\mathrm{TF}(x)|^2 = \frac{4}{3}\sqrt{\frac{2}{m}}\frac{\mu^{3/2}}{\omega\kappa}\,. \tag{4.8}$$

In drei Dimensionen gilt $N \sim \mu^{5/2}$.

In Abbildung 4.1 wird die Thomas-Fermi-Näherung mit dem exakten Grundzustand verglichen. Für harmonische Potentiale $V(x) = 0$ stimmen beide bis auf die Randbereiche gut überein (a). Wird das harmonische Fallenpotential noch von einem periodischen Potential überlagert $V(x) \neq 0$, so ist die Näherung nicht mehr gültig (b). Als Beispiel haben wir Natrium-Atome gewählt ($a_\mathrm{s} = 2.65\mathrm{nm}$). Die Nichtlinearität wurde dabei nicht reskaliert. Die entspricht hier einem Querradius, welcher nur etwas größer als die Periode des Potentials ist $r_\mathrm{B} \geq d$. Die Amplitude des periodischen Potentials ist so gewählt, dass sie einen in den Landau-Zener Experimenten (Kapitel 2.5) zugänglichen Wert annimmt. Das Fallenpotential ist steifer als in typischen Experimenten mit Bose-Kondensaten. Dadurch ist die Ausdehnung hier nur $x_\mathrm{TF} \approx 5.7\mu m$. Im Vergleich dazu sind typische Kondensate circa einen Faktor 10 größer. Die Berechnung solch großer Kondensate erfordert eine große Computerkapazität. Da es für die flacheren Potentiale qualitativ keine anderen Ergebnisse gibt haben wir auf deren Berechnung verzichtet.

Eine besser Methode, den Grundzustand der GPE für solche Potentiale analytisch zu beschreiben, soll im Folgenden zusammengefasst werden [53].

Entwickelt man die Wellenfunktion nach den Blochwellenfunktionen $\psi_{n,k}(x)$ aus Gleichung (2.23)

$$\psi(x,t) = \sum_n \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}k A_n(k,t)\psi_{n,k}(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(k)t/\hbar} \tag{4.9}$$

und setzt dieses in die GPE ein, so erhält man einen Satz gekoppelter Gleichungen für die Amplituden $A_n(k,t)$. Dieses Verfahren ist jedoch nicht sehr hilfreich wenn man endliche Systeme beschreiben will, da dann eine sehr große Anzahl der $A_n(k,t)$ von Nöten ist. Eine bessere Methode ist es den oszillatorischen Anteil durch die Blochfunktionen zu beschreiben, während die durch die Falle gegebene Lokalisierung durch eine Einhüllende $f_{n,k_0}(x,t)$ beschrieben wird. Die Wellenfunktion lautet dann

$$\psi(x,t) = \sum_n f_{n,k_0}(x,t)\psi_{n,k_0}(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n(k_0)t/\hbar}\,. \tag{4.10}$$

Mit diesem Ansatz beschränken wir uns auf einen Wellenvektor. Um die Gültigkeit dieses Ansatzes zu zeigen, kann man die Methode der effektiven Masse [59] (siehe Anhang C) benutzen. In der GPE (4.3) betrachten wir nun sowohl das Fallenpotential als auch den nichtlinearen Term als Störung. Eine notwendige Bedingung für die Gültigkeit der effektiven Masse-Näherung ist, das eine typische Länge, auf der sich das Fallenpotential ändert, viel größer als die Periode des periodischen Potentials ist. Für den nichtlinearen Term muss desweiteren gelten, dass er im Vergleich zum Bandabstand klein ist. Man findet, dass es ausreicht, sich auf einen beliebigen aber festen Wellenvektor k_0 zu beschränken. Die Wahl von k_0 ist dann von der zu betrachtenden Fragestellung abhängig. Bei der Berechnung des Grundzustandes ist es günstig $k_0 = 0$ zu wählen. Wir möchten hier darauf hinweisen, dass wir im Gegensatz zu Kapitel 2 die erste Brillouin-Zone so gewählt haben, dass für $k = 0$ der kleinste Eigenwert angenommen wird. Die effektive Masse $\tilde{m}$ kann man dann noch mit Hilfe der Störungstheorie (siehe Anhang C) berechnen. Mit diesen Näherungen erhält man eine Gleichung für die Einhüllende $f_{n,k_0}(x,t)$

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}f_{n,k_0}(x,t) + \frac{\hbar k_0}{m}\frac{\partial}{\partial x}f_{n,k_0}(x,t)\right) &= -\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}f_{n,k_0}(x,t) + V_{\mathrm{F}}(x)f_{n,k_0}(x,t) \\ &\quad +\tilde{\kappa}|f_{n,k_0}(x,t)|^2 f_{n,k_0}(x,t)\,. \end{aligned} \tag{4.11}$$

Es ist

$$\frac{1}{\tilde{m}} = \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2}\sum_{l\neq n}\frac{|\langle nk_0|p|lk_0\rangle|^2}{E_n(k_0) - E_l(k_0)} \tag{4.12}$$

und

$$\tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{d}\int\limits_{-d/2}^{d/2} \mathrm{d}x|u_{n,k_0}(x)|^4\,. \tag{4.13}$$

Neben den Näherungen die zur Beschreibung des Systems mittels der effektiven Masse gemacht wurden (siehe Anhang C), haben wir uns hier noch auf eine Einbandbeschreibung beschränkt. Sie ist dann ausreichend, wenn

$$\max_x\left(\tilde{\kappa}|f_{n,k_0}(x,t)|^2\right) \ll (E_n(k_0) - E_l(k_0))$$

für alle $l \neq n$ gilt. Ist dies nicht der Fall so muss man N gekoppelte Gleichungen betrachten. Im Allgemeinen ist die effektive Masse ein Tensor. Die Kopplung zwischen den Einhüllenden der verschiedenen Bänder wird dann durch den effektive Masse-Tensor vermittelt.

Die Einhüllende $f_{n,k_0}(x,t)$ genügt einer GPE, in der das periodische Potential nicht mehr auftritt. Zusätzlich sind die Masse und die Kopplung reskaliert. Die effektive Masse $\tilde{m}$ hängt sehr stark von der Amplitude V_0 des periodischen Potentials ab. Für die reskalierte Kopplung $\tilde{\kappa}$ ist diese Abhängigkeit weniger stark ausgeprägt. Die Abhängigkeit der effektiven Masse $\tilde{m}$ und der reskalierten Kopplung $\tilde{\kappa}$ von der Amplitude V_0 sind in Abbildung 4.2 dargestellt. Wir möchten nocheinmal darauf

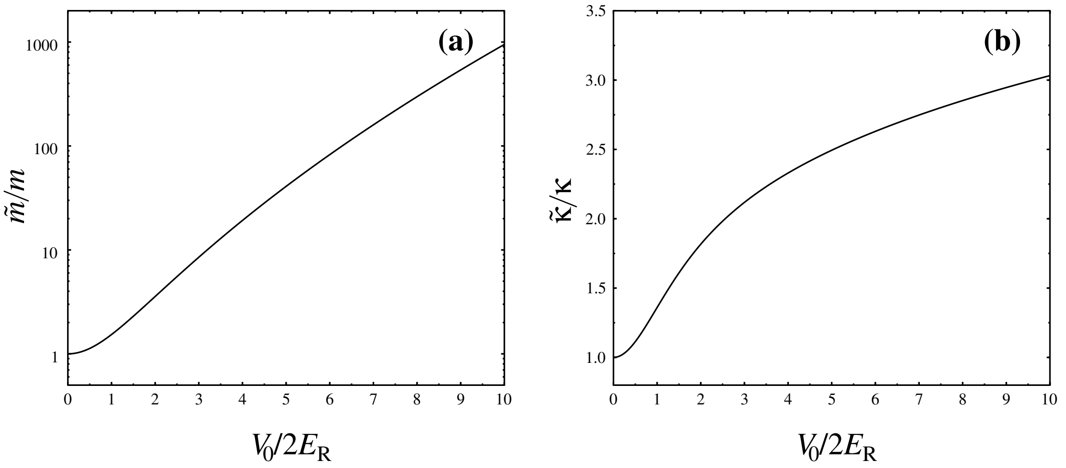

Abb. 4.2: **(a)** Verhältnis von effektiver Masse zur Masse als Funktion der Amplitude des periodischen Potentials gemäß Gleichung (4.12). **(b)** Verhältnis von reskalierter Kopplung zur Kopplung gemäß Gleichung (4.13).

hinweisen, dass die Beschreibung mit Hilfe einer Einhüllenden nur gut ist, wenn diese über viele Perioden des periodischen Potentials ausgedehnt ist. Damit erhält man gleichzeitig, dass im k-Raum die Einhüllende um k_0 lokalisiert ist. Der Wellenvektor muss also so gewählt werden, dass er der Dynamik der Einhüllenden im k-Raum gerecht wird.

Zur Bestimmung des Grundzustandes kann man für die Einhüllende die Thomas-Fermi-Näherung benutzen, oder man kann den Grundzustand des Bose-Kondensates mit Hilfe von Gleichung (4.11) numerisch berechnen. Da die effektive Masse mit der Amplitude des periodischen Potentials sehr stark zunimmt, ist die Thomas-Fermi-Näherung für die Einhüllende bei großem V_0 eine sehr gute Näherung. Im Vergleich zur numerischen Bestimmung des Grundzustandes der Wellenfunktion $\phi(x,t)$ ist die numerische Berechnung des Grundzustandes der Einhüllenden (vor allem für dreidimensionale Kondensate) viel weniger aufwendig, da nun nicht mehr zwei verschiedene Längenskalen auftreten. Es reicht dann ein viel kleineres räumliches Gitter zur Darstellung der Funktion aus.

Benutzen wir nun zur Beschreibung des Grundzustandes nur das unterste Band so gilt für die Wellenfunktion

$$\psi(x,t) = f_{0,0}(x,t)\psi_{0,0}(x)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_0(0)t/\hbar}\,. \tag{4.14}$$

Für $\psi(x,t)$ machen wir wiederum den Ansatz $\psi(x,t) = \exp(-\mathrm{i}\mu t/\hbar)h(x)\psi_{0,0}(x)$. Die

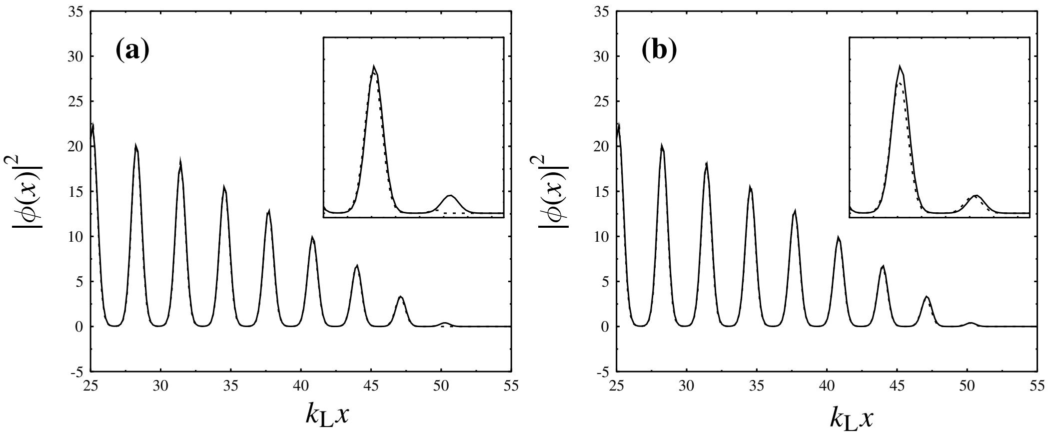

Abb. 4.3: Vergleich des exakten Grundzustandes der GPE (durchgezogene Linie) mit dem Grundzustand nach der effektiven Masse-Näherung (gestrichelte Linie). In **(a)** ist für die Einhüllende die Thomas-Fermi-Näherung benutzt worden. Der Einschub zeigt eine Vergrößerung des Randgebietes. Dort ist die Thomas-Fermi-Näherung (gestrichelte Linie) nicht mehr gültig. In **(b)** wurde die Einhüllende numerisch bestimmt. Die Parameter sind $\mu = 4.8E_\mathrm{R}$, $\kappa = 0.074E_\mathrm{R}k_\mathrm{L}$, $V_0 = 10E_\mathrm{R}$ und $\hbar\omega = 0.08E_\mathrm{R}$.

Einhüllende erfüllt dann die Gleichung

$$(\mu - E_0(0))h(x) = -\frac{\hbar^2}{2\tilde{m}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}h(x) + V_\mathrm{F}(x)h(x) + \tilde{\kappa}|h(x)|^2h(x)\,. \tag{4.15}$$

In Thomas-Fermi-Näherung ergibt sich damit für die Einhüllende

$$|h(x)|^2 = \begin{cases} \frac{\mu - E_0(0) - V_\mathrm{F}(x)}{\tilde{\kappa}}\,, & |x| < x_\mathrm{TF} \\ 0\,, & \text{sonst}\,. \end{cases} \tag{4.16}$$

Anders als bei der gewöhnlichen Thomas-Fermi-Näherung wird bei der Thomas-Fermi-Näherung für die Einhüllende nicht die gesamte kinetische Energie vernachlässigt, sonder nur der Teil, der mit der Einhüllenden verknüpft ist. In Abbildung 4.3 wird der exakte Grundzustand mit dem Grundzustand, der mit Hilfe der effektiven Masse-Näherung berechnet wurde, verglichen. In (a) haben wir für die Einhüllende die Thomas-Fermi-Näherung benutzt, und in (b) ist die Einhüllende numerisch bestimmt worden. Die Parameter sind hier wieder ähnlich denen in Abbildung 4.1. Die Breite der Querrichtung ist hier etwa $r_\mathrm{B} \approx 10d$. Auch ist die Amplitude des

Potentials größer gewählt, um die Gültigkeit der effektiven Masse-Näherung zu gewährleisten [53]. Man sieht, dass mit Hilfe der effektiven Masse-Näherung der Grundzustand eines Bose-Kondensats sehr gut beschrieben werden kann. Damit haben wir gezeigt, dass sich Bose-Kondensate in Fallen so präparieren lassen, dass sie dem Grundzustand in einem periodischen Potential sehr nahe kommen. Da sie außerdem noch eine größere Breite als vergleichbare Wellenfunktionen einzelner Atome haben, sind sie zur Präpartion eines Grundzustandes für Experimente von Atomen im periodischen Potential sehr gut geeignet. Nach dem Abschalten der Falle wird das Wechselwirkungspotential der Atome noch dafür sorgen, dass das Kondensat ausdünnt (abstoßende Wechselwirkung), so dass man diese Wechselwirkung dann vernachlässigen kann.

In typischen experimentellen Realisierungen von Bose-Einstein-Kondensation ist das Fallenpotential meist weniger steif ($\omega_{\mathrm{Exp}} < \omega$) als in unseren numerischen Betrachtungen. Da sich qualitativ für noch kleinere ω nichts ändert, der Rechenaufwand aber mit der Ausdehnung des Potentials stark zunimmt, haben wir auf eine weitere Verkleinerung von ω verzichtet.

4.2 Simulation der Dynamik von Bose-Kondensaten in harmonischen Fallen mit einem zusätzlichen bewegten periodischen Potential

Ausgehend vom, im vorangegangenen Abschnitt bestimmten, Grundzustand wollen wir jetzt die Dynamik des Bose-Kondensates in Potentialen der Form

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 + V_0\left[1 + \cos\left(2k_{\mathrm{L}}\left(x + \alpha(t)\right)\right)\right] \tag{4.17}$$

anhand von numerischen Simulationen beschreiben. Im Gegensatz zu Kapitel 2 reicht nun schon eine lineare Phasendifferenz der das periodische Potential erzeugenden gegenläufigen Laser aus, um eine Kraft auf das Kondensat auszuüben. Wir werden im Folgenden zwei Fälle genauer untersuchen. Zum einen wählen wir eine konstante Phasendifferenz $\alpha(t) \sim t$ und zum anderen sei $\alpha(t)$ eine periodische Funktion der Zeit.

Für den Vergleich mit den in Kapitel 3 gemachten Betrachtungen wäre es nötig gewesen die Falle abzuschalten, und das Kondensat in einem zusätzlichen konstanten Feld zu betrachten. Für wenige Atome im Kondensat kann man die Wechselwirkung der Atome vernachlässigen. Damit ergibt sich qualitativ keine Änderung zu den in

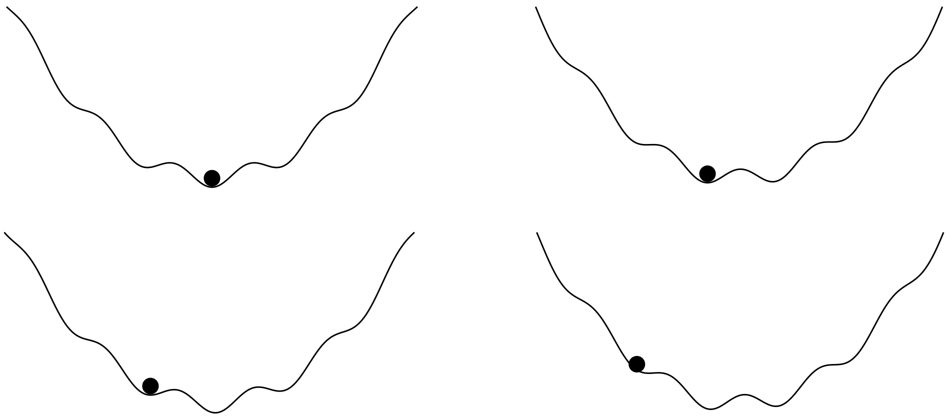

Abb. 4.4: Klassische Teilchen im Potential der Gleichung (4.17) für $\alpha(t) \sim t$. Die Zeit nimmt von **(a)-(d)** in gleichen Schritten zu. Man beachte, dass $V_0 < 0$ gilt.

Kapitel 3 studierten Größen. Für die Kurzzeitdynamik wird es auf Grund der Abstoßung der Atome und des anderen Anfangszustandes zu einem stärkeren Abfall der Wahrscheinlichkeit $P(t)$ (Gleichung (3.42))kommen. Die gleichen Aussagen treffen sicher auch für ein Kondensat aus vielen Atomen zu, wobei hier der Einfluss der Atom-Atom Wechselwirkung sicher stärker auffällt. Numerische Simulationen dieser Fragestellungen scheitern jedoch an der zur Verfügung stehenden Rechnerkapazität. Man müsste das räumliche Gitter noch um einiges vergrößern, um das durch die nichtlinerare Wechselwirkung verursachte Auseinanderlaufen des Kondensates richtig erfassen zu können.

4.2.1 Konstante Phasendifferenz

Als Erstes wollen wir den Fall einer mit konstanter Geschwindigkeit laufenden Lichtwelle durch ein Bose-Kondensat in einer harmonischen Falle betrachten $\alpha(t) = vt$. Die Dynamik klassischer Teilchen in einem solchen Potential ist sehr leicht zu verstehen. Betrachten wir dazu Abbildung 4.4. Ein Atom in einer Potentialmulde wird von dem Lichtfeld solange mitgenommen (siehe Abbildung 4.4 (b) und (c)) bis die Barriere, auf Grund der nach außen immer größer werdenden Steigung des Fallenpotentials, verschwunden ist (Abbildung 4.4 (d)). Danach wird es noch soweit nach außen laufen, bis sein Impuls aufgebraucht ist. Nun bewegt es sich wieder in Richtung Fallenmitte. Die Trajektorie eines solchen klassischen Teilchens ist für zwei

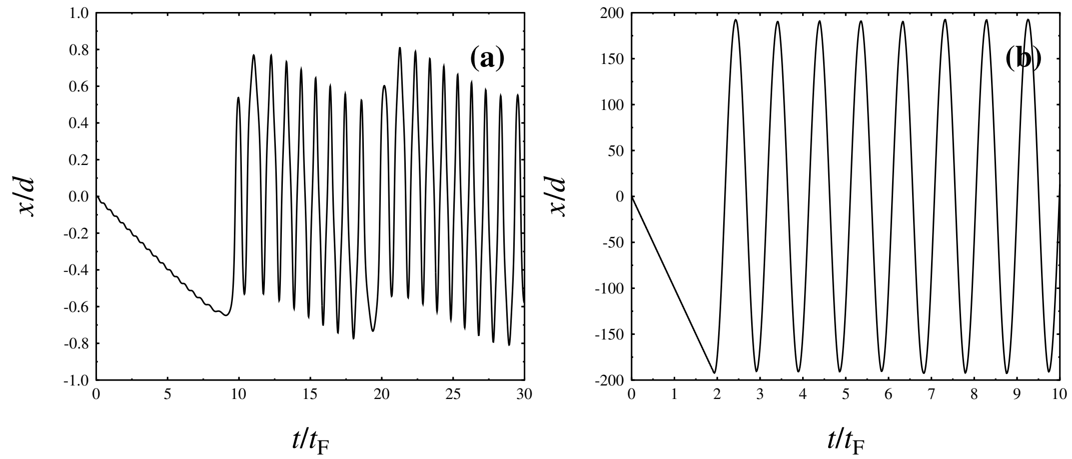

Abb. 4.5: Klassische Dynamik eines Teilchens, das zum Zeitpunkt $t = 0$ im Zentrum des Potentials Gleichung (4.17) ruht. Die Zeit ist in Einheiten der Fallenperiode t_F gemessen und der Ort x in Einheiten der Periode d des periodischen Potentials. Die Parameter sind: **(a)** $v = 0.1\hbar k_\mathrm{L}/m$, $V_0 = 2E_\mathrm{R}$ und $\hbar\omega = 2E_\mathrm{R}$, sowie **(b)** $v = 5\hbar k_\mathrm{L}/m$, $V_0 = 5E_\mathrm{R}$ und $\hbar\omega = 0.1E_\mathrm{R}$.

unterschiedliche Parametersätze in Abbildung 4.5 zu sehen. Man sieht, dass nach anfänglicher Auslenkung des Teilchens aus dem Fallenzentrum heraus, die Dynamik von der Oszillation des Teilchens in der Falle dominiert wird. $t_F = 2\pi/\omega$ ist die Oszillationsperiode eines Teilchens im harmonischen Oszillator.

Ein Bose-Kondensat zeigt, wie in Abbildung 4.6 dargestellt, ein ganz ähnliches Verhalten. Ein Teil des Kondensates wird von der Lichtwelle mitgenommen und fließt dann wieder zur Fallenmitte zurück. Dabei kommt es zu Interferenzen mit anderen Teilen des Kondensates.

4.2.2 Periodische Phasendifferenz

Hier wollen wir mit Hilfe der unitären Transformationen (Kapitel B) zeigen, wie man durch periodische Modulation der Phasendifferenz $\alpha(t)$ erreichen kann, dass man im mitbewegten Bezugssystem eine Verschiebung des Ursprungs der harmonischen Falle erhält. Das bedeutet man kann durch geschickte Wahl von $\alpha(t)$ das Potential „kippen“. Dazu betrachten wir wieder Gleichung (B.8). Im mitbewegten

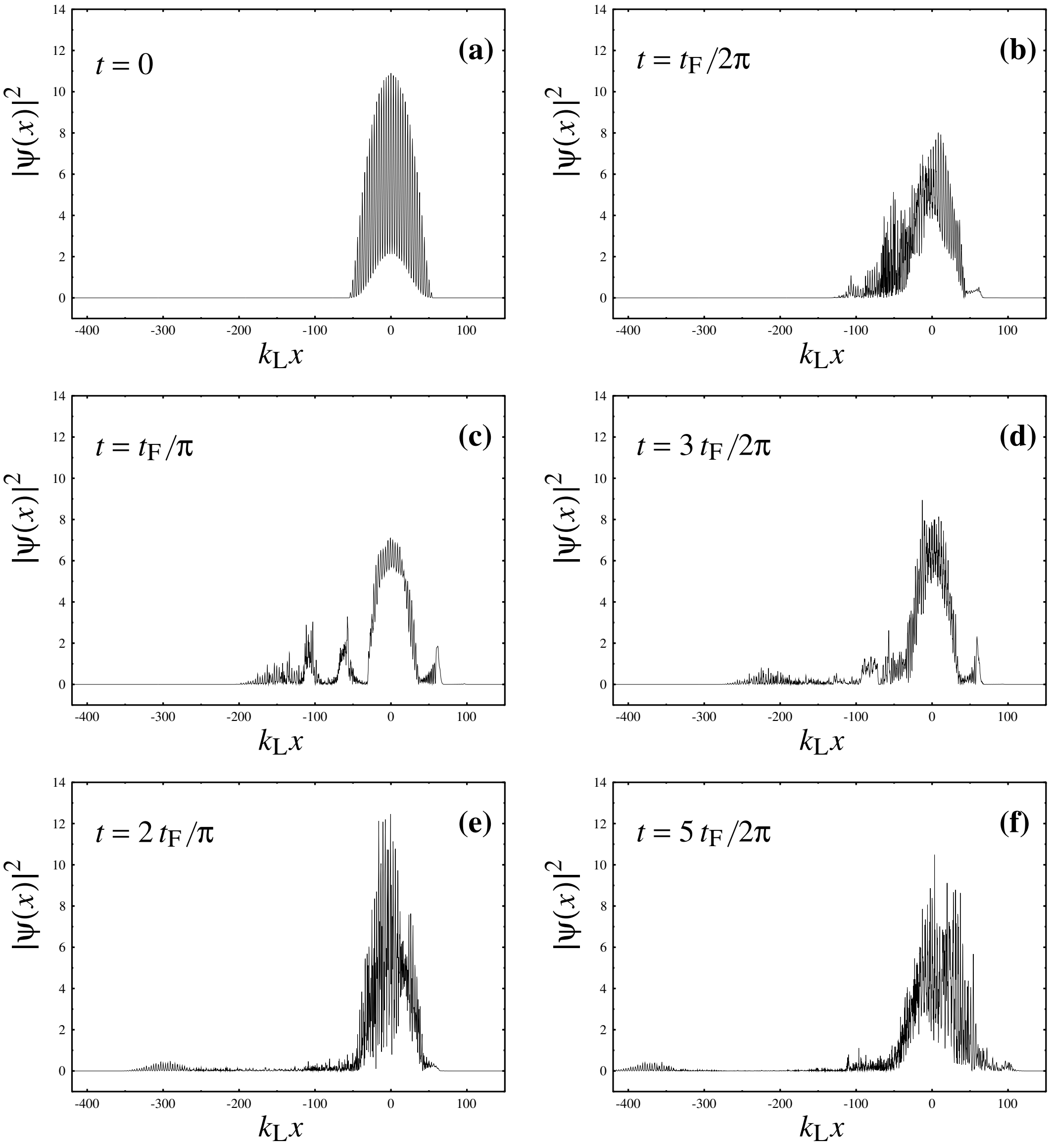

Abb. 4.6: Zeitentwicklung eines Bose-Kondensates in einer Falle, die mit einer laufenden Lichtwelle kombiniert ist. Die verwendeten Parameter sind: $v = 10\hbar k_{\mathrm{L}}/m$, $V_0 = 10E_{\mathrm{R}}$, $\mu = 8.6E_{\mathrm{R}}$, $\kappa = 0.74E_{\mathrm{R}}k_{\mathrm{L}}$ und $\hbar\omega = 0.1E_{\mathrm{R}}$.

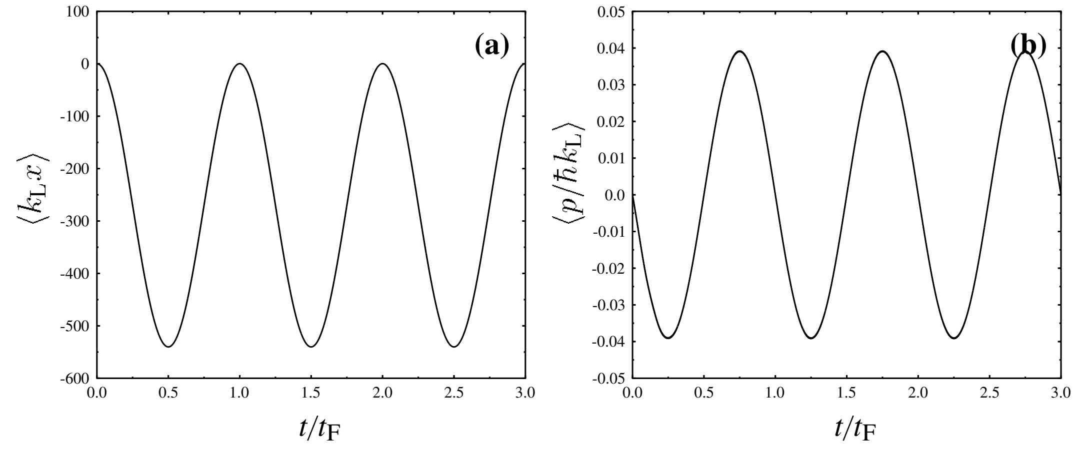

Abb. 4.7: Erwartungswert für Ort und Impuls des Bose-Kondensates.

Bezugssystem gilt

$$\tilde{H} = \frac{p^2}{2m} + V(x - \alpha(t)) - \dot{\beta}(t)x \,.$$

Für unser Potential erhält man damit

$$\tilde{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + V_0 \left[1 + \cos\left(2k_{\mathrm{L}}x\right)\right] - m\left[\ddot{\alpha}(t) + \omega^2\right] x \,. \tag{4.18}$$

Dabei haben wir noch die Transformation so gewählt, dass der Term proportional zu $\alpha^2(t)$ noch in der zeitabhängigen Phase der Transformation absorbiert wird (siehe Kapitel B). Eine konstante Kraft F erfordert dann

$$\ddot{\alpha}(t) + \omega^2 \alpha(t) = F/m \,, \tag{4.19}$$

mit der Lösung

$$\alpha(t) = \frac{F}{m\omega^2} + A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t) \,. \tag{4.20}$$

Für unsere numerischen Untersuchungen haben wir $\alpha(0) = 0$ und $\dot{\alpha}(0) = 0$ gewählt. Somit gilt

$$\alpha(t) = \frac{F}{m\omega^2}\left[1 - \cos(\omega t)\right] \,. \tag{4.21}$$

Die zeitliche Entwicklung eines Bose-Kondensates in solch einem Potential ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Die Zeit nimmt in gleichen Schritten der Größe $\Delta t =$

$0.16t_\mathrm{F}$ von (a) bis (h) zu. Die verwendeten Parameter sind: $V_0 = 8E_\mathrm{R}$, $\mu = 3E_\mathrm{R}$, $\kappa = 0.074E_\mathrm{R}k_\mathrm{L}$ und $\hbar\omega = 0.02E_\mathrm{R}$. Das Kondensat oszilliert also nur mit der Fallenfrequenz in der Falle. Das kann man auch recht deutlich an der Abbildung 4.7 erkennen. Dort sind die Erwartungswerte für Ort $\langle k_\mathrm{L}x\rangle$ und Impuls $\langle p/\hbar k_\mathrm{L}\rangle$ für die in Abbildung 4.8 gezeigte Dynamik dargestellt.

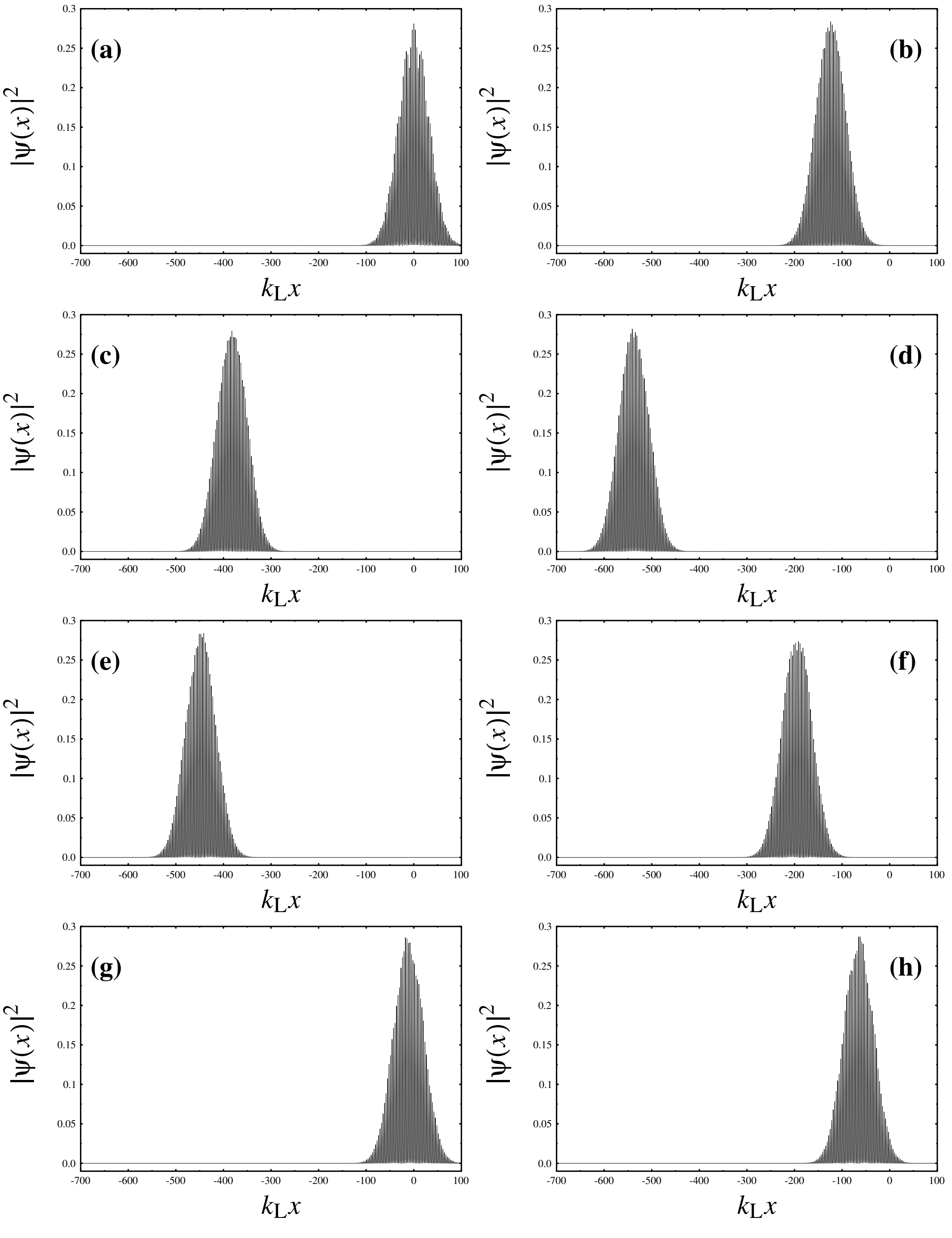

Abb. 4.8: Zeitentwicklung eines Bose-Kondensates in einer harmonischen Falle mit einem zusätzlichen Lichtpotential (Parameter siehe Text)

4.3 Falle und periodisches Potential

Numerische Tests haben gezeigt, dass die Wechselwirkung der Atome in den Simulationen des vorangegangenen Abschnitts nur bei der Bestimmung des Grundzustandes eine wichtige Rolle spielt. Vernachlässigt man die Wechselwirkung in der GPE, so wird daraus eine Schrödinger-Gleichung. Die Wellenfunktion, die damit beschrieben wird, ist dabei jedoch die des Kondensates. Wie wollen nun dieses Kapitel nutzen, um die Quantenmechanik eines Teilchen in einem Potential der Form (4.17) zu beschreiben. Für dieses Potential sind die zwei Grenzwerte $\omega \to 0$ und $V_0 \to 0$ bekannt. Im ersten Fall bekommen wir wieder das periodische Potential, und damit das Verhalten, welches in den Kapiteln 2 und 3 ausführlich diskutiert wurde. Im zweiten Fall erhalten wir einen harmonischen Oszillator. Wir interessieren uns hier jetzt vor allem für die beiden Fälle $\alpha(t) = 0$ (stehende Welle) und $\alpha(t) = vt$ (laufende Welle).

Betrachtet man die Zeit als einen Parameter, so kann die Wellenfunktion in Eigenfunktionen des harmonischen Oszillators $\phi_\nu(x)$ mit zeitabhängigen Koeffizienten entwickelt werden

$$\psi_t(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} c_\nu(t)\phi_\nu(x)\,. \tag{4.22}$$

Das periodische Potential aus Gleichung (4.17) kann mit Hilfe eines Additionstheorems für den Kosinus noch umgeschrieben werden

$$\cos\left(2k_\mathrm{L}\left(x+\alpha(t)\right)\right) = \cos\left(2k_\mathrm{L}x\right)\cos\left(2k_\mathrm{L}\alpha(t)\right) - \sin\left(2k_\mathrm{L}x\right)\sin\left(2k_\mathrm{L}\alpha(t)\right)\,. \tag{4.23}$$

Die Matrixelemente des periodischen Potentials können explizit angegeben werden

$$\begin{aligned} C_{\mu,\nu} &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\phi_\mu^*(x)\cos(2k_\mathrm{L}x)\phi_\nu(x) && (4.24)\\ &= \begin{cases} 0 & \nu+\mu \text{ ungerade}\\ \left(\frac{-2\hbar k_\mathrm{L}^2}{m\omega}\right)^{\frac{\mu-\nu}{2}}\sqrt{\frac{\nu!}{\mu!}}\mathrm{e}^{-\frac{\hbar k_\mathrm{L}^2}{m\omega}}L_\nu^{\mu-\nu}\left(\frac{2\hbar k_\mathrm{L}^2}{m\omega}\right) & \nu+\mu \text{ gerade,}\end{cases} && (4.25)\\ S_{\mu,\nu} &= \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\phi_\mu^*(x)\sin(2k_\mathrm{L}x)\phi_\nu(x) && (4.26)\\ &= \begin{cases} 0 & \nu+\mu \text{ gerade}\\ \left(\frac{-2\hbar k_\mathrm{L}^2}{m\omega}\right)^{\frac{\mu-\nu-1}{2}}\sqrt{\frac{\nu!}{\mu!}}\sqrt{\frac{4k_\mathrm{L}^2\hbar}{m\omega}}\mathrm{e}^{-\frac{\hbar k_\mathrm{L}^2}{m\omega}}L_\nu^{\mu-\nu}\left(\frac{2\hbar k_\mathrm{L}^2}{m\omega}\right) & \nu+\mu \text{ ungerade.}\end{cases} && (4.27) \end{aligned}$$

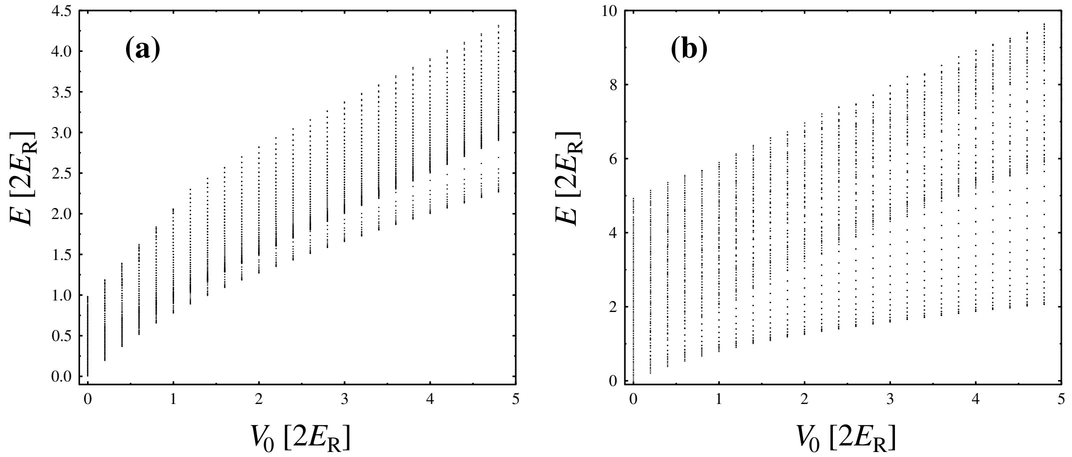

Abb. 4.9: Die 100 niedrigsten Eigenwerte für das Potential (4.17) als Funktion von V_0. In **(a)** ist $\omega = 0.02E_\mathrm{R}$ und in **(b)** $\omega = 0.42E_\mathrm{R}$.

Die $L_\nu^\mu(x)$ sind die generalisierten Laguerre Polynome.

Im Gegensatz zum Bandspektrum im periodischen Fall ist das Spektrum für das hier betrachtete Potential diskret. Ist $\alpha(t) = n\pi$, so ist das Potential symmetrisch bezüglich des Ursprungs $x = 0$. Dann lassen sich die Eigenfunktionen und die dazugehörigen Eigenwerte entsprechend ihrer Symmetrie charakterisieren.

In Abbildung 4.9 sind die kleinsten Eigenwerte in Abhängigkeit von der Amplitude des periodischen Potentials dargestellt. Es wurden die 100 untersten Eigenwerte für verschiedene V_0 bestimmt. Man kann noch „Reste“ der Bandstruktur erkennen. Diese zeichnen sich durch eine höhere Dichte der Eigenwerte aus. Für kleinere ω sollte dies stärker zum Ausdruck kommen. Allerdings wird hier der Abstand benachbarter Eigenwerte so klein, dass eine Unmenge von Eigenwerten berechnet werden muss. Das ist aber im betrachteten Fall nicht mehr mit ausreichender Genauigkeit möglich.

In Abbildung 4.10 sind einige Eigenfunktionen dargestellt. Man erkennt deutlich den Unterschied zwischen großem und kleinem ω. Für große ω dominiert das Fallenpotential und die Eigenfunktionen sind fast die des harmonischen Oszillators. Für kleine ω ist die Wellenfunktion ausgedehnt und ihr Umriss ist deutlich vom periodischen Potential geprägt.

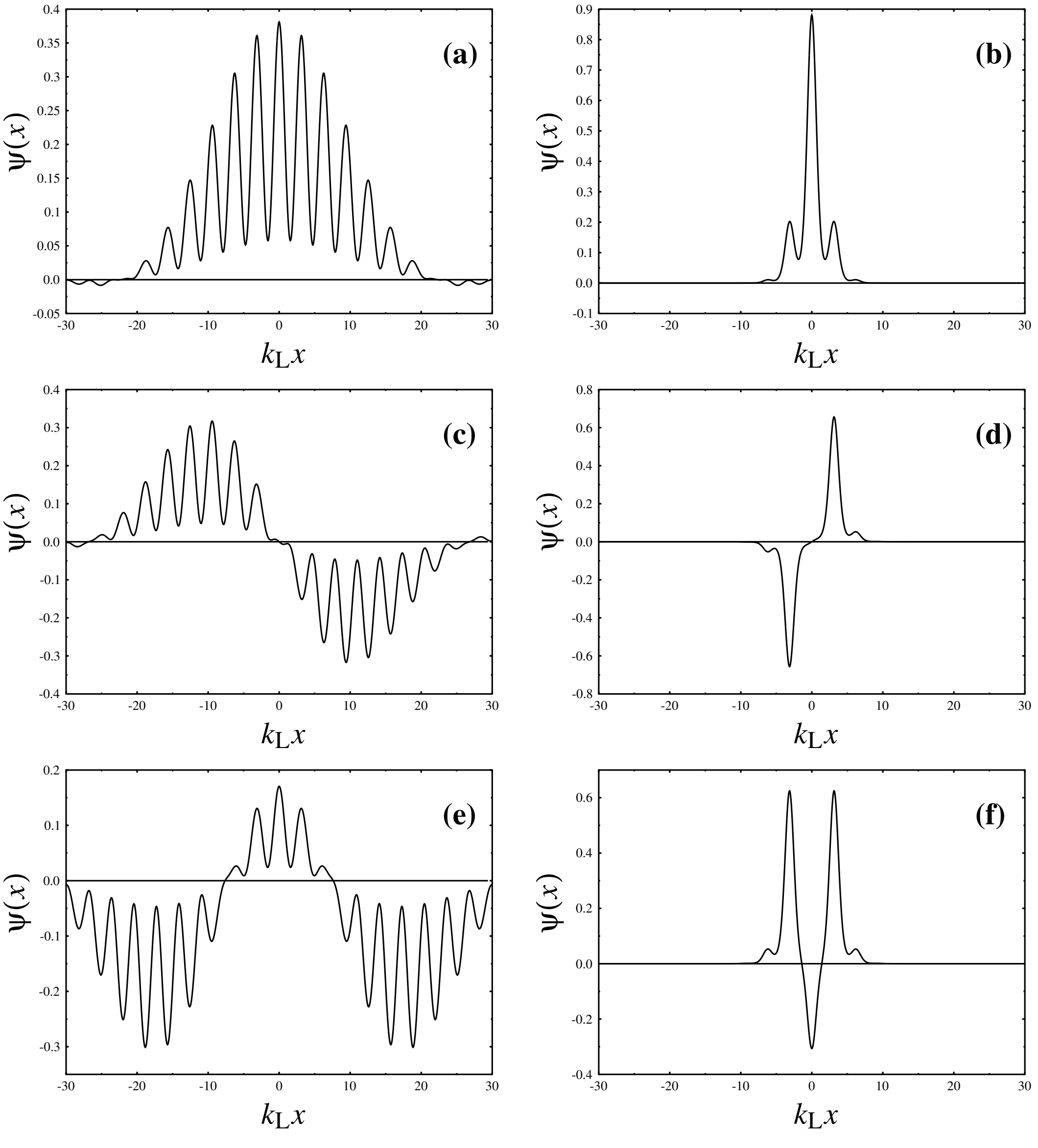

Abb. 4.10: Eigenfunktionen zu den drei kleinsten Eigenwerten für das Potential (4.17) mit $V_0 = 4E_\mathrm{R}$, $\alpha(t) = 0$ und $\hbar\omega = 0.02E_\mathrm{R}$ **(a)**, **(c)**, **(e)** sowie $\hbar\omega = 0.22E_\mathrm{R}$ **(b)**, **(d)**, **(f)**.

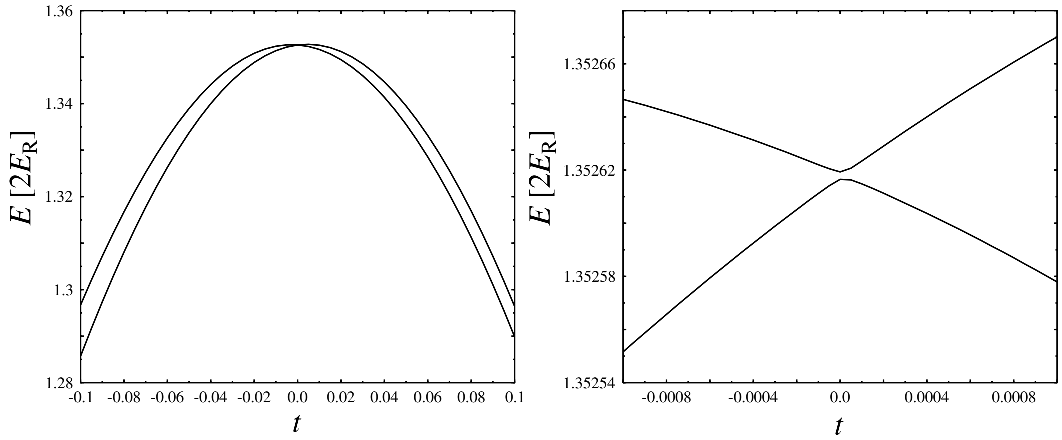

Abb. 4.11: Vermiedene Kreuzung für ein ausgewähltes Paar von Eigenwerten. Die verwendeten Parameter sind $V_0 = 4E_{\mathrm{R}}$, $\hbar\omega = 0.22E_{\mathrm{R}}$. Das rechte Bild ist eine Vergrößerung des Bereichs nahe $t = 0$.

Die Eigenwerte lassen sich, besonders für große V_0 in zwei Klassen aufteilen. Einige Eigenwerte gehören zu in den Mininima lokalisierten Eigenfunktionen und andere erstrecken sich über mehrere Mulden des Potentials. Im symmetrischen Fall bilden solche Paare von lokalisierten Wellenfunktionen, ähnlich wie beim Doppelmuldenpotential, Doubletts von fastentarteten Eigenwerten. Variiert man t, d.h bricht man die Symmetrie, so kann man das Verhalten der Eigenwerte als Funktion von t beobachten. Im Spektrum treten dann für solche Paare im Fall $t = 0$ vermiedene Kreuzungen auf. Dies ist in Abbildung 4.11 dargestellt. Die Wellenfunktionen des Doubletts und die dazu korrespondierenden Wellenfunktionen bei gebrochener Symmetrie sind in Abbildung 4.12 dargestellt.

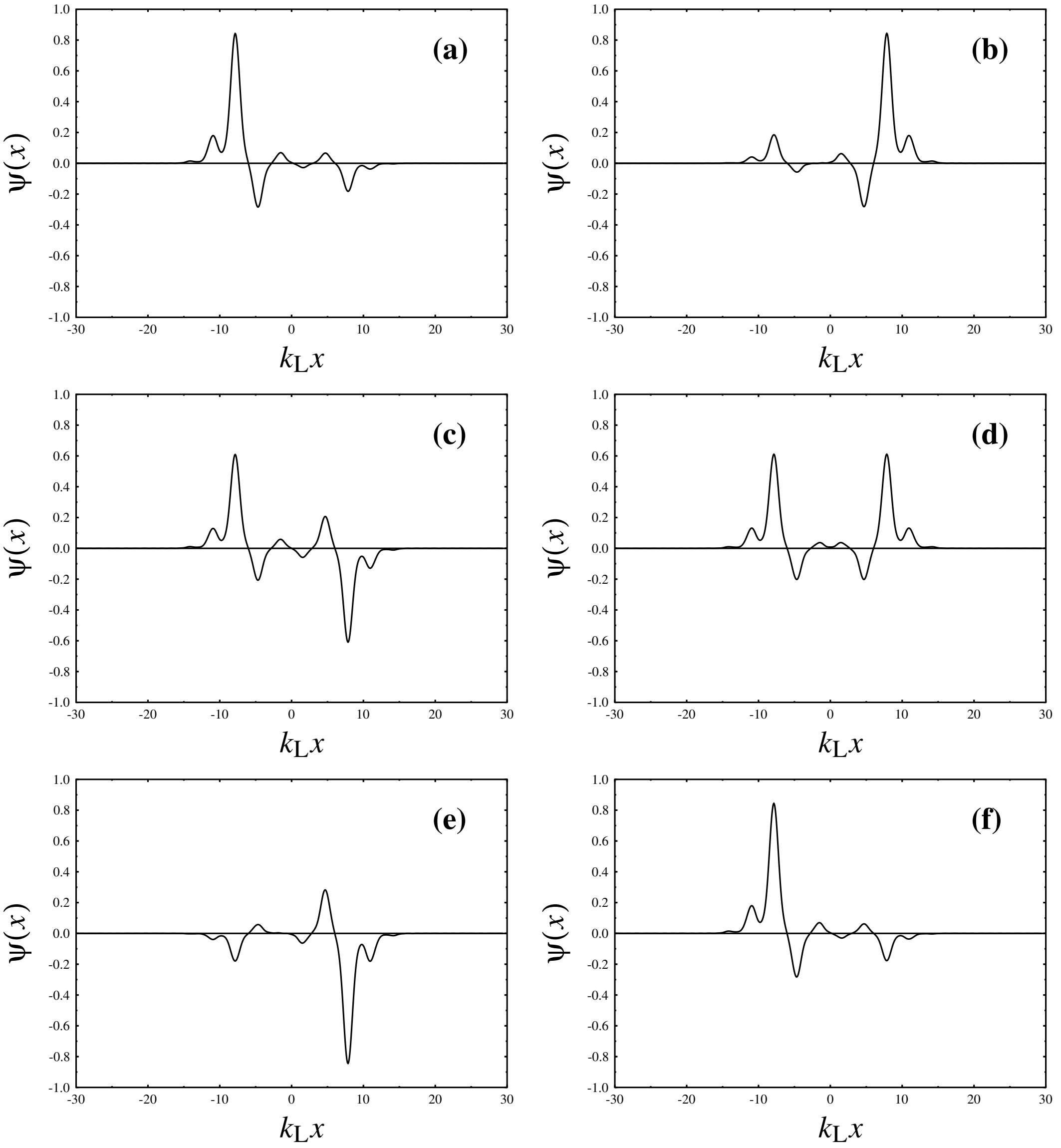

Abb. 4.12: Eigenfunktionen des Tunneldoubletts für $t = -0.01$ **(a)** und **(b)**, $t = 0$ **(c)** und **(d)** und $t = 0.01$ **(e)** und **(f)** links ist jeweils die Eigenfunktion zum kleineren Eigenwert.

5. Numerische Methoden

In diesem Kapitel wollen wir die beiden wichtigsten numerischen Methoden vorstellen, die in den vorangegangenen Kapiteln benutzt wurden. Zum einen soll dargestellt werden wie man bei gegebener Anfangswellenfunktion die Zeitentwicklung gemäß der Schrödinger- oder Gross-Pitaevskii-Gleichung mit einem sehr effizienten Verfahren bestimmt. Dieses Verfahren kann bei leichter Modifikation auch benutzt werden, um den Grundzustand von Bose-Kondensaten zu bestimmen. Desweiteren soll die Methode dargestellt werden, mit der wir die komplexen Eigenwerte des Stark-Problems bestimmt haben. Sie ist auch die Grundlage zur Bestimmung der Resonanzeigenfunktionen.

5.1 Propagation

Um die zeitliche Entwicklung einer gegebenen Wellenfunktion $|\psi(t_1)\rangle$ zu berechnen, muss man das Produkt $|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle$ bestimmen. $U(t_2, t_1)$ ist der Zeitentwicklungsoperator oder Propagator. Da weiterhin $U(t_2, t_1) = U(t_2, t)U(t, t_1)$ gilt, reicht es aus den Kurzzeitpropagator $U(t+dt, t)$ zu bestimmen. Für zeitunabhängige Hamiltonoperatoren gilt

$$U(t + dt, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H dt\right) . \tag{5.1}$$

Für zeitabhängige Hamiltonoperatoren hat man

$$U(t + dt, t) = T \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int\limits_{t}^{t+dt} H(t')\mathrm{d}t'\right) \approx \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t) dt\right) . \tag{5.2}$$

T ist hier der Zeitordnungsoperator. Die Näherung wird exakt für $dt \to 0$. Für Hamiltonoperatoren der Form $H = p^2/2m + V(x,t)$ erhält man

$$U(t + dt, t) \approx \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{4m} dt\right) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} V(x,t) dt\right) \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{4m} dt\right) . \tag{5.3}$$

Das Ergebnis wird exakt für $dt \to 0$. Der Fehler ist von 3.Ordnung in dt. Bei einer Aufteilung des Propagators in nur zwei Faktoren (kinetische und potentielle Energie) wäre der Fehler 2.Ordnung in dt. Wählt man dt klein genug, so ist durch Gleichung (5.3) eine sehr gute Approximation des Propagators gegeben.
Die Wellenfunktionen und die Propagatoren werden auf einem räumlichen Gitter approximiert, wobei die Größe des Gitters sich nach der Problemstellung richtet. Die Anzahl der Gitterpunkte muss so groß gewählt werden, dass die räumliche Variation des Potentials gut genug aufgelöst wird.
In Impulsdarstellung ist das Anwenden von $\exp\left(-\mathrm{i}p^2 dt/\hbar 4m\right)$ auf $|\psi(t)\rangle$ nur eine Multiplikation. Für den Potentialteil gilt Entsprechendes für die Ortsdarstellung. Die zwei Darstellungen gehen durch Fouriertransformation ineinander über. Die Zeitentwicklung einer Wellenfunktion für N Zeitschritte berechnet sich dann nach folgendem Algorithmus:

- $\psi(x)$ Startwellenfunktion festlegen
- $\psi(p) = FFT[\psi(x)]$
- $\psi(p) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{4m}dt\right)\psi(p)$
- Wiederhole $N-1$ Mal
    - ◇ $\psi(x) = FFT^{-}1[\psi(p)]$
    - ◇ $\psi(x) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x,t)dt\right)\psi(x)$
    - ◇ $\psi(p) = FFT[\psi(x)]$
    - ◇ $\psi(p) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2m}dt\right)\psi(p)$
- $\psi(x) = FFT^{-}1[\psi(p)]$
- $\psi(x) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}V(x,t)dt\right)\psi(x)$
- $\psi(x) = FFT^{-}1[\psi(p)]$
- $\psi(p) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{4m}dt\right)\psi(p)$

FFT ist die Fast-Fourier-Transformation. In Abbildung 5.1 ist das Ergebnis einer Propagation der Schrödinger-Gleichung mit gekipptem periodischen Potential dargestellt.

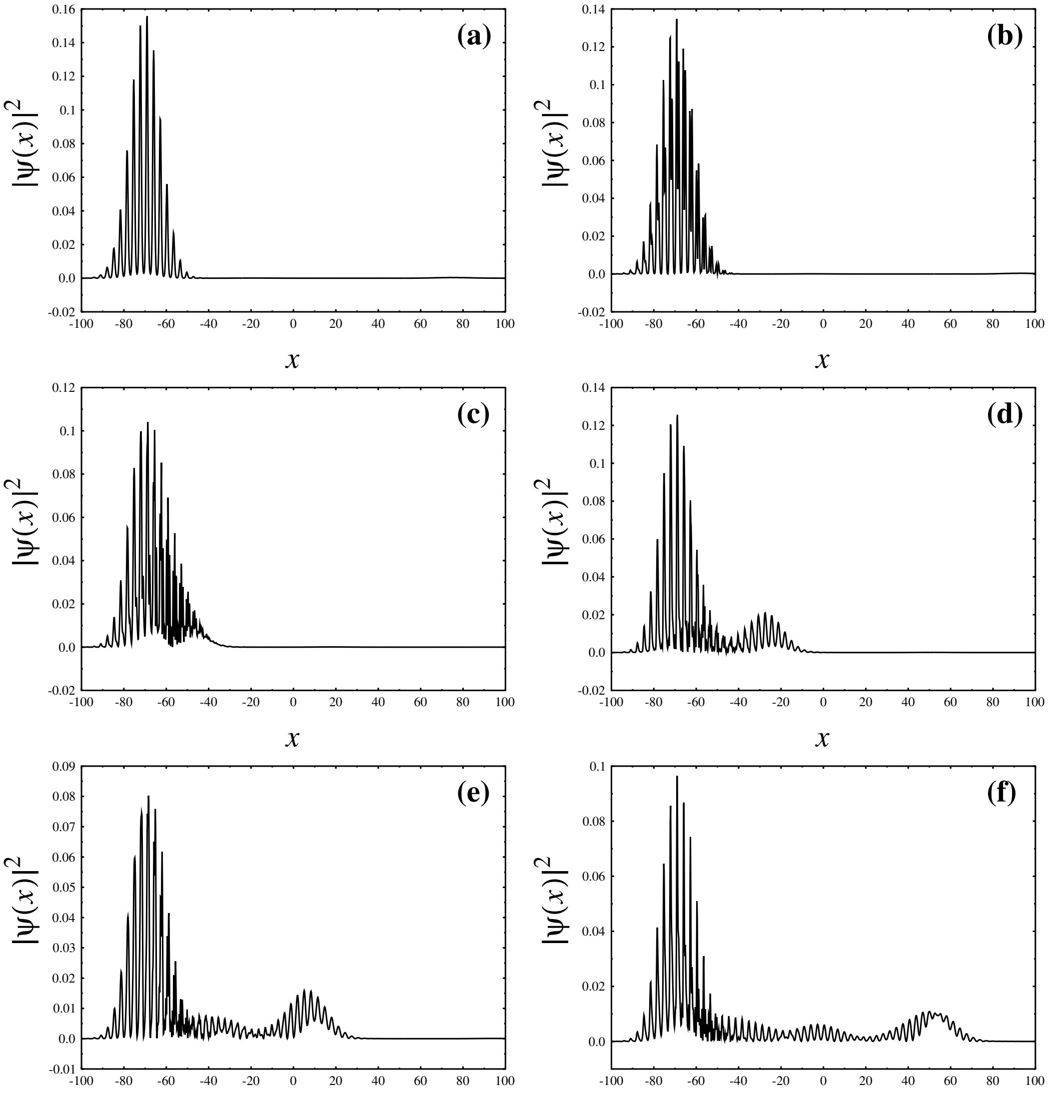

Abb. 5.1: Zeitentwicklung eines Wellenpakets im gekippten periodischen Potential. Die Zeit nimmt von **(a)** bis **(f)** in gleichen Abständen zu. Die Periodizität des Potentials ist π.

Mit dem selben Verfahren kann man auch die Gross-Pitaevskii-Gleichung (4.3) propagieren. Es ist dann nur $V(x,t)$ durch $V(x,t) + \kappa|\psi(x,t)|^2$ zu ersetzen. Außerdem lässt sich so auch der Grundzustand des Bose-Kondensats numerisch bestimmen. Dazu ersetzt man idt durch dt (Imaginärzeitpropagation) und $p^2/4m$ durch $p^2/4m - \mu/2$, wobei μ das chemische Potential ist. Nun propagiert man nicht N Schritte, sondern so lange bis $\int |\psi(x,t+dt)|^2 \mathrm{d}x - \int |\psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x = 0$ ist. In Abbildung 5.2 ist die Entwicklung eines Gaußschen Wellenpakets zum Grundzustand der Gross-Pitaevski Gleichung mit parabolischer Falle dargestellt. Als Startfunktion kann man eine beliebige Funktion wählen, jedoch sollte man sich auf hinreichned glatte Funktionen beschränken, da sonst bei der *FFT* zu hohe Impulse angeregt werden. Wir wollen hier noch darauf hinweisen, dass dieses Verfahren nur bei nichtlinearen Schrödinger-Gleichungen funktioniert, da diese für jede Energie (chemisches Potential) eine Lösung haben. Für lineare Schrödinger-Gleichungen ist das Verfahren wenig praktikabel, da man den Eigenwert exakt kennen müsste. Die kleinste Abweichung vom exakten Eigenwert führt zu einem exponentiellem Anwachsen oder Abfallen der Norm der Wellenfunktion, so dass die Wellenfunktion entweder verschwindet oder aber „explodiert“.

5.2 *Truncated shift-operator* Methode

Die *truncated shift-operator* Technik ist eine neue und numerisch sehr effiziente Methode zur Berechnung von komplexen Energieeigenwerten [60, 61] in Stark-Problemen. Zur Beschreibung der Methode beginnen wir mit dem Hamiltonoperator Gleichung (2.35)

$$H = H_\mathrm{B} + Fx\,.$$

Der Zeitentwicklungsoperator über eine Blochperiode hat dann die Form

$$U(\tau_\mathrm{B}, 0) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(H_\mathrm{B}\tau_\mathrm{B} + Fx\tau_\mathrm{B}\right)\right)\,. \tag{5.4}$$

Mit Hilfe einer Eichtransformation (siehe Anhang B) kann die konstante Kraft in einen zeitabhängigen Impuls transformiert werden

$$\bar{H} = \frac{(p - Ft)^2}{2m} + V(x)\,. \tag{5.5}$$

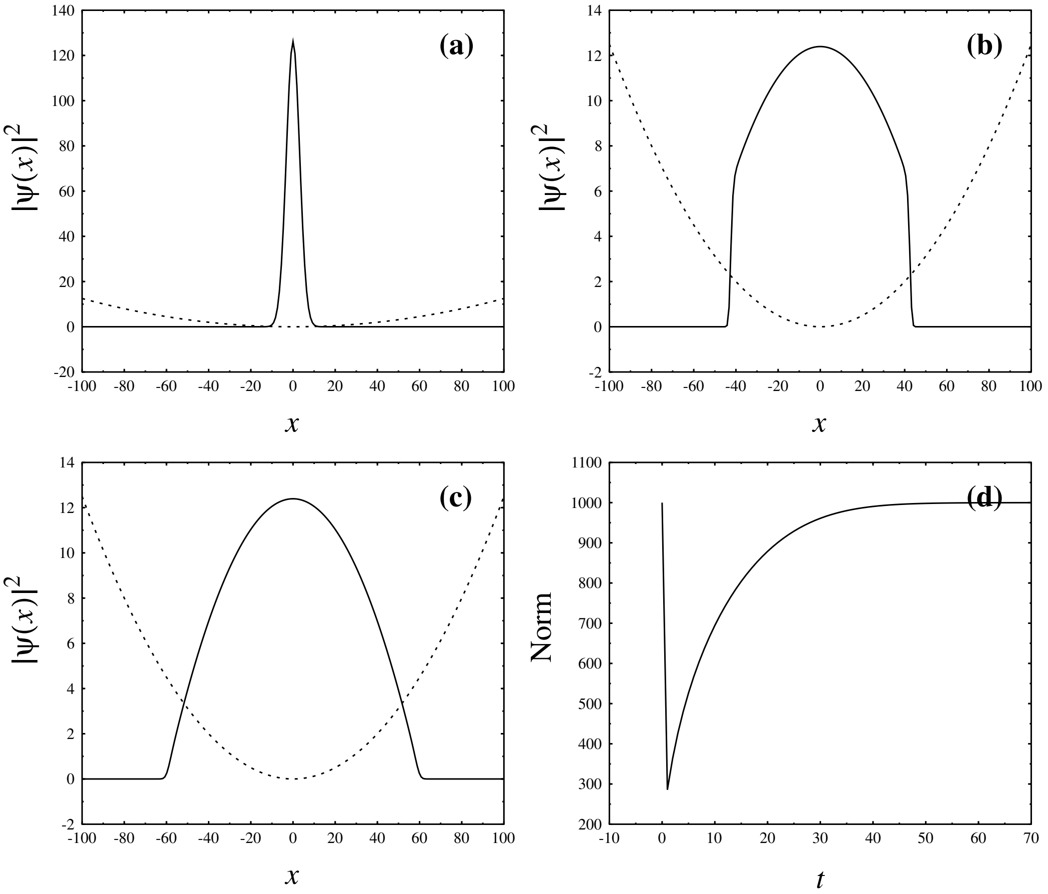

Abb. 5.2: Entwicklung des Grundzustandes der Gross-Pitaevskii-Gleichung aus dem Grundzustand des Harmonischen Oszillators **(a)** -**(c)** für 1000 Atome. Die gestrichelte Linie stellt das harmonische Potential dar. In **(d)** ist gezeigt, wie sich während der Berechnung die Norm entwickelt.

Die Wellenfunktionen gehen dabei gemäß

$$\psi(x,t) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Fxt\right)\bar{\psi}(x,t) = S(t)\bar{\psi}(x,t) \tag{5.6}$$

in einander über. Im Impulsraum wirkt $S(t)$ wie ein Verschiebungsoperator. Es gilt

$$S(t)|p\rangle = |p - Ft\rangle\,. \tag{5.7}$$

Für den zeitabhängigen Hamiltonoperator ist der Propagator dann durch

$$\bar{U}(\tau_{\mathrm{B}},0) = T\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int\limits_0^{\tau_{\mathrm{B}}}\mathrm{d}t\bar{H}(t)\right)\,. \tag{5.8}$$

gegeben. Hier soll T der Zeitordnungsoperator sein. Die beiden Propagatoren sind über

$$U(\tau_{\mathrm{B}},0) = S(\tau_{\mathrm{B}})\bar{U}(\tau_{\mathrm{B}},0) \tag{5.9}$$

miteinander verknüpft. Die Eigenwertgleichung für den Zeitentwicklungsoperator wird dann

$$U(\tau_{\mathrm{B}},0)\psi(x) = \exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n\tau_{\mathrm{B}}\right)\psi(x)\,. \tag{5.10}$$

E_n ist dabei die komplexe Eigenenergie.
Zur numerischen Bestimmung der Eigenwerte benutzt man als Basis ebene Wellen in der Impulsdarstellung

$$\langle x|\nu\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\nu\Delta kx} \qquad \nu = -N,\ldots,-1,0,1,\ldots,N \tag{5.11}$$

mit

$$\Delta k = F\tau_{\mathrm{B}}/\hbar = 2\pi/d\,. \tag{5.12}$$

In dieser Basis nimmt der Verschiebungsoperator eine besonders einfache Form an

$$\langle\mu|S(\tau_{\mathrm{B}})|\nu\rangle = \delta_{\mu,\nu-1}\,. \tag{5.13}$$

Der Propagator $\bar{U}(\tau_{\mathrm{B}},0)$ kann als Produkt von Kurzeitpropagatoren genähert werden

$$\bar{U}(\tau_{\mathrm{B}},0) \approx \prod_{j=1}^{J}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\bar{H}(t_j - \Delta t/2)\Delta t\right)\,, \tag{5.14}$$

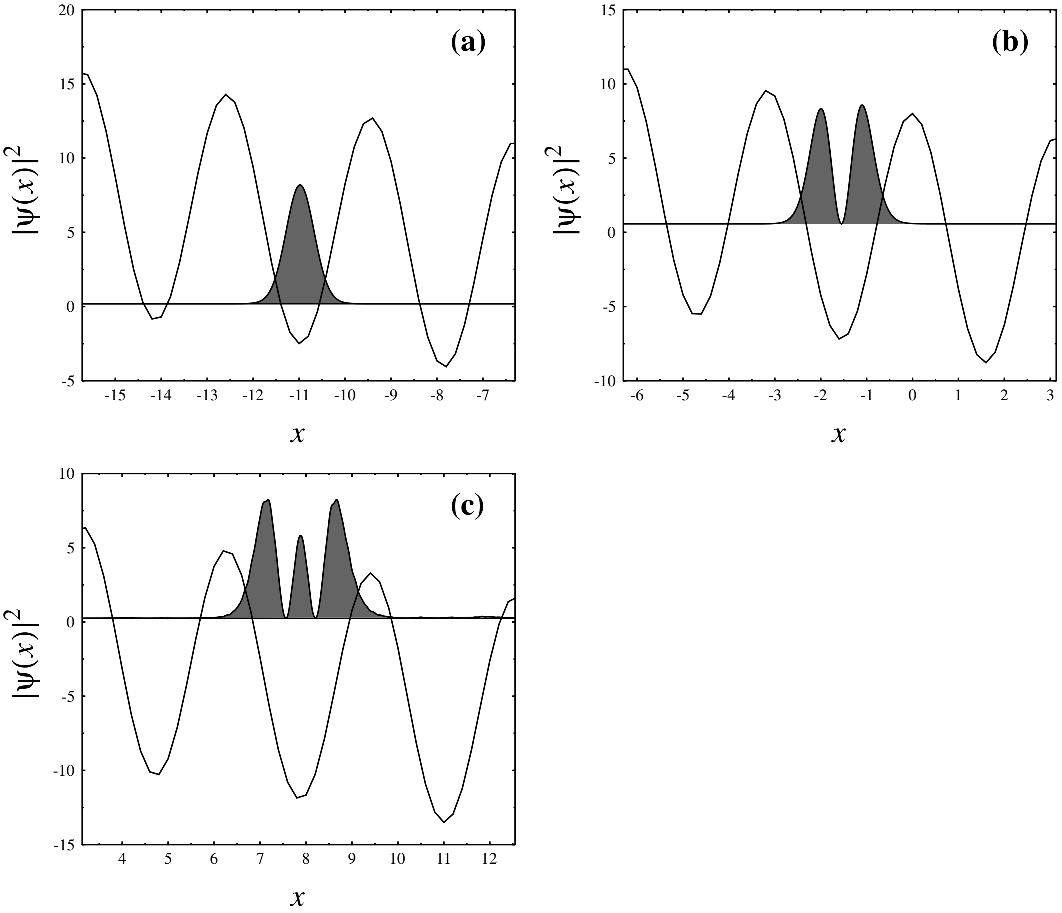

Abb. 5.3: Die Wellenfunktionen der drei stabilsten Resonanzen für $V_0 = 16E_{\mathrm{R}}$ und $a = 4600\mathrm{m/s}^2$. Bei experimentellen zugänglichen Parametern (z.B. $V_0 = 4E_{\mathrm{R}}$) ist nur die stabilste Resonanz lokalisiert.

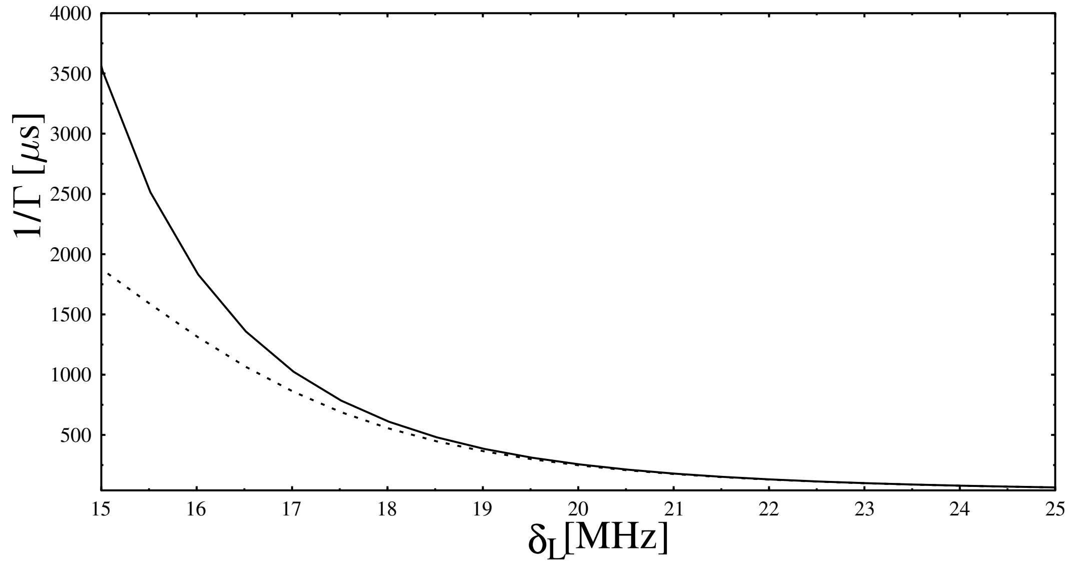

Abb. 5.4: Inverse Breite der stabilsten Stark-Resonanz als Funktion der Verstimmung für ein Zwei-Niveau-Atom (siehe Gleichung 2.15). Die durchgezogene Linie stellt das Ergebnis ohne Berücksichtigung der Spontanemission dar, während die gestrichelte Linie Spontanemission berücksichtigt.

wobei $t_j = j\tau_{\mathrm{B}}/J$ und $\Delta t = t_{j+1} - t_j$ ist. Für das von uns benutzte Kosinuspotential ist

$$\langle\mu|\bar{H}(t)|\nu\rangle = \left(\frac{(\nu\hbar\Delta k - Ft)^2}{2m} + V_0\right)\delta_{\mu,\nu} + \frac{V_0}{2}(\delta_{\mu,\nu+1} + \delta_{\mu,\nu-1}) \tag{5.15}$$

eine tridiagonale Matrix. Die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren ist ein Standardproblem, für welches numerische Routinen zur Verfügung stehen. Der Propagator $\bar{U}(\tau_{\mathrm{B}}, 0)$ kann somit leicht bestimmt werden. Nun müssen nur noch die Eigenwerte numerisch berechnet werden. Die Größe der Basis, d.h. die Zahl der Eigenfunktionen N muss groß genug gewählt werden. Es hat sich gezeigt, dass für die gezeigten Berechnungen $N = 51$ völlig ausreichend war. Die Anzahl der Zeitschritte ist abhängig von der Kraft ($\tau_{\mathrm{B}} \sim 1/F$). $\Delta t \leq 0.1$ hat sich als ausreichend klein erwiesen. Wir möchten noch darauf hinweisen, dass wir nur die stabilsten Eigenwerte benötigt haben. Um noch instabiler Eigenwerte zu berechnen, muss die Zahl der Basisfunktionen bzw. die Anzahl der Zeitschritte erhöht werden.

Dieses Verfahren kann man auch benutzten, um die Resonanzeigenfunktionen zu

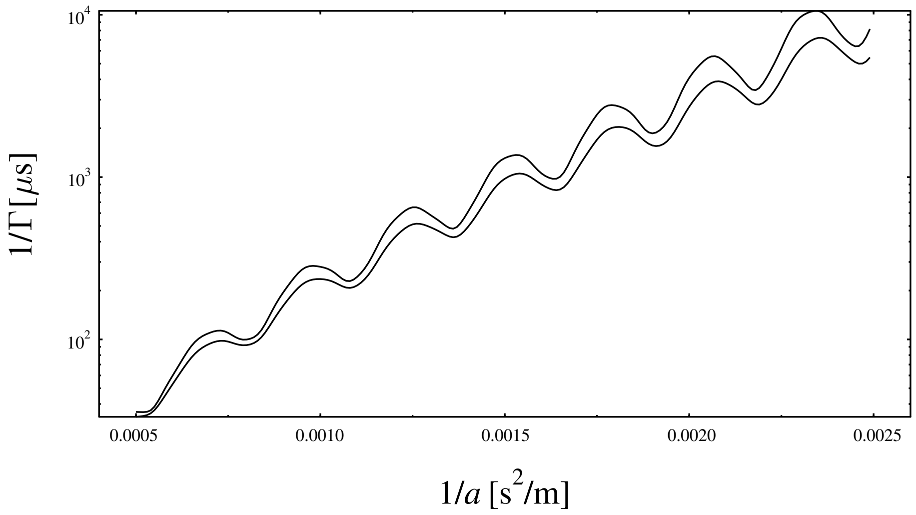

Abb. 5.5: Der inverse Imaginärteil der Eigenwerte der zwei stabilsten Stark-Resonanzen für das Zwei-Niveau-Atom im gekippten periodischen Potential. Die Parameter sind: Rabifrequenz $\hbar\Omega = 56000 E_\mathrm{R}$ und Verstimmung $\hbar\delta_\mathrm{L} = 400000 E_\mathrm{R}$.

bestimmen. Die Resonanzeigenfunktion muss neben der Schrödinger-Gleichung auch

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\psi(x,0) \tag{5.16}$$

erfüllen. Für

$$\psi(x,t) = \int\limits_0^{\tau_\mathrm{B}} \mathrm{d}t' \mathrm{e}^{\mathrm{i}E_n t'/\hbar} U(t+t',0)\bar{\psi}(x,0) \tag{5.17}$$

sind diese Bedingungen erfüllt. Die Resonanzeigenfunktion kann also als Integral über die instantanen Eigenfunktionen des zeitabhängigen Hamiltonoperators geschrieben werden

$$\psi(x,0) = \int\limits_0^{\tau_\mathrm{B}} \mathrm{d}t' \bar{\psi}(x,t')\,. \tag{5.18}$$

In Abbildung 5.3 sind die Eigenfunktionen der drei stabilsten Resonanzen dargestellt.

Das Verfahren läßt sich ohne Schwierigkeiten auf N-gekoppelte Schrödinger-Gleichungen erweitern. Die *truncated-shift*-Operator Technik kann somit genutzt werden, um die Gültigkeit der adiabatischen Näherung vom Ende von Kapitel 2.1 zu

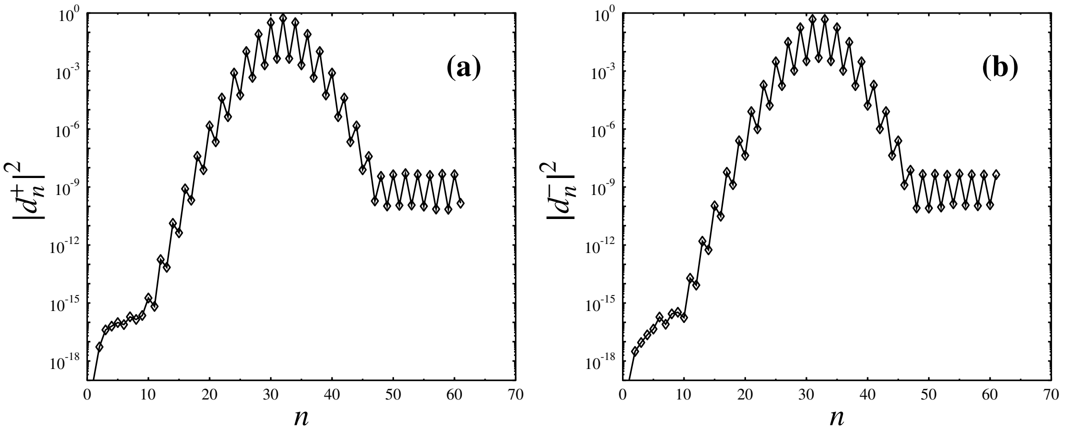

Abb. 5.6: Die Koeffizienten der Wellenfunktionen für das entkoppelte Zwei-Niveau-Atom (Gleichung (2.34)) im gekippten periodischen Potential für den stabilsten Eigenwert. Die Parameter sind: Rabifrequenz $\hbar\Omega = 56000 E_{\mathrm{R}}$, Verstimmung $\hbar\delta_{\mathrm{L}} = 400000 E_{\mathrm{R}}$ (siehe auch Tabelle 2.1) und $a = 4600\mathrm{m/s}^2$.

testen. Außerdem kann man überprüfen welchen Einfluss die Berücksichtigung der Spontanemission bei Zwei-Niveau-Atomen auf den Imaginärteil der Stark-Resonanz hat. Dazu muss man dem oberen Niveau eine Breite entsprechend der Spontanemissionsrate geben. Wir haben dazu die experimentell bestimmt Breite benutzt [62]. In Abbildung 5.4 ist die inverse Zerfallsrate der Resonanzen des Stark-Problems dargestellt. Für Verstimmungen $\delta_{\mathrm{L}} \leq 20\mathrm{MHz}$ sieht man deutlich den Einfluss der Spontanemission auf den Imaginärteil. Für kleine Verstimmungen bestimmt Spontanemissionsrate die Stabilität der Resonanz. Physikalisch wird dann der Impulsübertrag durch sukzessive Spontanemissionen auf das Atom so groß, dass das periodische Potential zu schwach ist, um die Atome noch weiter festzuhalten. Die Experimente, sowie die Untersuchungen in dieser Arbeit wurden alle Verstimmungen $\delta_{\mathrm{L}} \geq 20\mathrm{MHz}$ gewählt. Die Spontanemission kann somit vernachlässigt werden. Die Gültigkeit der adiabatischen Näherung ist somit nocheinmal verifiziert.

Zum Abschluss dieses Kapitels wollen wir demonstrieren, wie sich der Imaginärteil der Energie beim Stark-Problem für ein Zwei-Niveau-Atom verhält. Wir benutzen nun eine Verstimmung δ_{L} in Gleichung (2.13), die nur 25% des in den Experimenten benutzten Wertes besitzt. Dann ist die Reduktion auf ein effektives Ein-Niveau-Atom nicht mehr gültig. In Abbildung 5.5 sieht man, dass die Zerfallskonstante in zwei Kurven aufspaltet. (Für die experimentell realisierten Parameter entarten beide Kurven.) Dies kann man verstehen, wenn man in erster Näherung wieder eine adiabatische Näherung durchführt. Dann erhält man sowohl für das untere als auch für das obere Niveau eine effektives Ein-Niveau-Problem (mit der jeweils gleichen Bandstruktur), das in den Abschnitten 3.2 und 3.3 gut verstanden wurde. Durch die Kopplung beeinflussen sich die Bandstrukturen beider Niveaus, so dass die niedrigste Bandlücke nicht mehr gleich ist. Dadurch erhält man zwei verschiedene Imaginärteile. Die Abbildung 5.6 zeigt die Wellenfunktionen für eine Resonanz des mit Hilfe von Gleichung (2.34) entkoppelten Systems. Bei d_n^+ in Abbildung 5.6 (a) dominieren immer die geraden Koeffizienten, während bei den d_n^- (b) die ungeraden Koeffizienten dominieren. Dies bedeutet, dass die $\psi^\pm(x,t)$ vor allem aus dem Grundzustand der Atome bestehen. Die starke Dominanz des Grundzustandes in der Gesamtwellenfunktion ist ein Ausdruck dafür, dass die Kopplung der Niveaus recht schwach ist (große Verstimmung).

6. Zusammenfassung

In dieser Arbeit haben wir das Verhalten von Atomen in beschleunigten Lichtfeldern untersucht. Dabei ging es vorallem darum, bereits durchgeführte Experimente zu verstehen. Die Lichtfelder werden durch zwei gegenläufige Laserstrahlen aufgebaut. Diese sind so stark gegenüber atomaren Übergangsfrequenzen verstimmt, dass die Wechselwirkung zwischen Licht und Atomen durch eine Dipolwechelwirkung beschrieben werden kann. Bei gleicher Frequenz der beiden Laserstrahlen formen diese eine stehende Welle. Das Potential ist dann kosinusförmig, wobei die Amplitude von der Lichtintensität und der Verstimmung der Laser gegenüber den Übergangsfrequenzen bestimmt ist. Durch eine zeitabhängige Verstimmung der Laser gegeneinander lassen sich laufende Wellen erzeugen. In den Experimenten wurde eine quadratisch mit der Zeit zunehmende Phasendifferenz benutzt. Man erhält so ein sich beschleunigt bewegendes periodisches Potential. Im mitbewegten Bezugssystem wird dieses Potential durch ein gekipptes periodisches Potential beschrieben. Der Winkel, um den das Potential verkippt ist, wird durch die Beschleunigung des Potentials festgelegt.

Das Eigenwertspektrum von Atomen in einem periodischen Potential ist ein Bandspektrum. Die Energie der Atome im untersten Band des Spektrums ist in den betrachteten Fällen stets kleiner als die Amplitude des periodischen Potentials. Die Atome im untersten Band sind somit im Potential gefangen. Die Bänder weisen eine periodische Dispersionsrelation auf. Die Dynamik der Atome in einem beschleunigten periodischen Potential ist geprägt durch die Bewegung der Atome durch ein periodische Band. Die Dauer zum Durchlaufen einer Periode wird Blochperiode genannt und ist proportional zur inversen Beschleunigung. Die Beschleunigung bewirkt eine Kopplung der Bänder, so dass es zusätzlich zu Übergängen zwischen den Bändern kommt. Es reicht aus, sich die Übergänge ausschließlich an den Stellen des geringsten Bandabstandes vorzustellen. Solche Übergänge zwischen den Bändern werden Landau-Zener-Tunneln genannt. Atome, die sich ursprünglich im untersten Band befunden haben, sind nach dem Landau-Zener-Tunneln nicht mehr im Potential gefangen. Es hat sich gezeigt, dass die Rate, mit welcher die Atome aus dem untersten Band heraustunneln, nicht allein durch die Landau-Zener-Rate für den Übergang zwischen dem untersten und dem nächsten Band gegeben ist. Die Ursache dafür liegt darin, dass die zweite Bandlücke, auch wenn sie viel kleiner als die erste Bandlücke ist, nicht vernachlässigt werden kann. Diese zweite Lücke verhindert einen vollständigen Übergang vom zweiten in das dritte Band an der nächsten Bandlücke. Ein vollständiger Übergang entspräche der Bewegung von freien Atomen. Die Lücke im Spektrum führt so zu Interferenzen zwischen verschiedenen Übergängen vom untersten in nächste Band. Diese Interferenzen zeigen sich in einer größeren oder kleineren Rate, als von der Landau-Zener-Theorie vorhergesagt wurde. Als Funktion der inversen Beschleunigung oszilliert die inverse Zerfallsrate um das Landau-Zener-Resultat.

In solch einem System gibt es zwar keine stationären Zustände, (Streu-)Resonanzen kommen jedoch vor. Die Resonanzzustände lassen sich berechnen, und man findet das sie in den Minima des gekippten Potentials lokalisiert sind. Die Resonanzen bilden Leitern von Zuständen. Die Realteile der Leitern sind dabei äquidistant, während jede Leiter den gleichen Imaginärteil besitzt. Aus jedem Band des periodischen Potentials geht eine solche Leiter hervor. Die Breite der Resonanz (ihr Imaginärteil) wird dabei mit wachsender Energie des ihr zu Grunde liegenden Bandes immer größer. In diesem Bild können die Oszillationen dadurch verstanden werden, dass die Leitern bei Veränderung der Beschleunigung aneinander vorbei gleiten. Tunneln wird erleichtert, wenn sich auf der anderen Seite der Barriere ebenfalls ein Zustand befindet. Dieses Vorbeigleiten verursacht genau das oszillatorische Verhalten der Tunnelrate.

Daneben haben wir die Zeitabhängigkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Atome im untersten Band für eine gegebene Beschleunigung des Lichtfeldes untersucht. Hier zeigt sich für lange Zeiten ein exponentielles Zerfallsgesetz. Die Zerfallskonstante ist dabei durch die Tunnelrate bestimmt. Für kurze Zeiten hingegen findet man ein kohärentes Verhalten. In Abhängigkeit von der Beschleunigung und der Amplitude des periodischen Potentials kann es zu mehrmaliger Oszillation der Aufenthaltswahrscheinlichkeit kommen. Die Kohärenzzeit ist von der gleichen Größenordnung wie die Blochperiode. Die kleinen Abweichungen der theoretischen Ergebnisse von den experimentell beobachteten lassen sich leicht verstehen. Man kann sie durch die etwas unterschiedlichen Anfangszustände gut erklären. Für kurze Zeiten tritt beim theoretischen Ergebnis zum Beispiel ein etwas stärkerer Verlust an Wahrscheinlichkeit auf.

Ein weiterer Punkt unserer Betrachtungen war das Verhalten von Bose-Kondensaten in Lichtfeldern. Anders als bei den Atomen werden die Bose-Kondensate in Fallen erzeugt. Daneben weisen sie noch eine Wechselwirkung zwischen den Atomen auf. Hier ging es ersteinmal darum, den Grundzustand des Kondensates in einem Potential, bestehend aus Falle und Lichtfeld zu, bestimmen. Wenn die typische Längenskala des Lichtpotentials viel kleiner als die des Fallenpotentials ist, so kann der Grundzustand mit Hilfe einer Einhüllenden beschrieben werden, die durch eine periodische Funktion moduliert wird. Die Form der Einhüllenden wird dabei ausschließlich von der Falle bestimmt, während die periodische Funktion durch eine Eigenfunktion des periodischen Potentials dargestellt werden kann.

Außerdem haben wir noch das Verhalten der Bose-Kondensate in Fallen bei einem zusätzlichen zeitabhängigen periodischen Potential mit numerischen Methoden untersucht. Einerseits haben wir gezeigt, wie eine laufende Lichtwelle Teile des Kondensates aus der Fallenmitte mitnimmt, und dass das Zurückfließen dieser Teile zu Interferenzerscheinungen führt. Mit einer anderen Konfiguration ist es möglich ein Kondensat in einer gekippten Falle zu untersuchen. Die Dynamik wird in diesem Fall durch eine einfache Oszillation des Kondensates in der Falle bestimmt.

Weiterhin haben wir gezeigt, wie sich das Eigenwertspektrum von Atomen in periodischen Potentialen ändert, wenn man eine Falle einschaltet. Für schwache Fallenpotentiale sind dabei noch Reste der Bandstruktur im Eigenwertspektrum zu erkennen. Diese Reste zeigen sich in einander abwechselnden Bereichen höherer und niedriger Eigenwertdichte.

Bei den Bose-Kondensaten konnte nicht das gleiche System wie bei den Atomen untersucht werden. Für die numerische Untersuchung von Bose-Kondensaten in beschleunigten Potentialen benötigt man eine größere Computerkapazität, um die Wellenfunktion in ausreichender Genauigkeit darstellen zu können. Das Problem sind die beiden unterschiedlichen Längenskalen auf denen die Dynamik abläuft und die abstoßende Wechselwirkung der Atome im Kondensat. Diese Wechselwirkung vergrößert ständig die räumliche Ausdehnung des Kondensates. Daher haben wir uns auf die Dynamik in Fallen beschränkt. Die Untersuchung von Bose-Kondensaten in gekippten periodischen Potentialen, und vor allem ihr Vergleich mit den Ergebnissen bei wechselwirkungsfreien Atomen, wäre von großem Interesse.

Eine interessante Fragestellung ist zum Beispiel, inwiefern sich die Veränderungen des Verhaltens bei Bose-Kondensaten gegenüber dem Verhalten wechselwirkungsfreier Atome als Funktion der Wechselwirkung darstellen lassen. Gerade für kleine Zeiten wird sich die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im untersten Band zwischen Bose-Kondensaten und einzelnen Atomen unterscheiden. Durch die zusätzlich Abstoßung der Atome des Kondensates wird die Wahrscheinlichkeit wohl mit größerer Atomzahl am Anfang stärker abfallen. Für lange Zeiten kommt es zu so starker Verdünnung des Kondensates, dass sich kein Unterschied zu dem Verhalten einzelner Atome zeigen wird.

Auch offen, sowohl für Bose-Kondensate als auch für nichtwechselwirkende Atome, ist die Abhängigkeit der Aufenthaltswahrscheinlichkeit im untersten Band vom Anfangszustand. Dies ließe sich zum Beispiel mit Hilfe verschiedener Fallenkonfigurationen, in denen das Bose-Kondensat hergestellt wird, untersuchen.

Anhang A

Störungstheorie und Zweibandmodell

In diesem Anhang soll die Störungstheorie für Hamiltonoperatoren mit periodischem Potential skizziert werden [63]. Vor allem wollen wir dabei auf das Kosinus-Potential eingehen und die Eigenwerte, die Eigenfunktionen sowie die Übergangsmatrixelemente in der Nähe des minimalen Bandabstandes bestimmen.

A.1 Störungstheorie für periodische Potentiale

Die stationäre Schrödinger-Gleichung für ein Atom im periodischen Potential $V(x) = \sum_l V_l \exp(il2\pi x/d)$, wobei $V_0 = 0$ gewählt werden kann, da dies nur eine Verschiebung des Energienullpunktes entspricht, lautet

$$E c_n(k) = \epsilon_n^0(k) c_n(k) + \sum_l V_{l-n} c_l(k) \,, \tag{A.1}$$

mit

$$\epsilon_n^0(k) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k + (2n+1)\frac{\pi}{d}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k - K_n\right)^2 \,. \tag{A.2}$$

In 0.-ter Näherung soll $V_l = 0$ für alle l gelten. Die Periodizität des Hamiltonoperators soll aber weiterhin gefordert werden. Die Dispersionsrelation ist dann durch einen Satz von Parabeln gegeben, Abbildung A.1. Die Eigenfunktionen sind ebene Wellen $\langle \epsilon_n^0(k)|x\rangle \sim \exp\left(\mathrm{i}\left(k + (2n+1)\pi/d\right)x\right)$. Um den Einfluss des periodischen Potentials zu verstehen betrachten wir zwei Fälle

Erstens: k sei so gewählt, dass $|\epsilon_n^0(k) - \epsilon_m^0(k)| \gg V$ ist. Dann kann man Nichtentartete Störungstheorie verwenden

$$E_n(k) = \langle \epsilon_n^0(k)|V|\epsilon_n^0(k)\rangle + \sum_m \frac{|\langle \epsilon_n^0(k)|V|\epsilon_n^0(k)\rangle|^2}{\epsilon_n^0(k) - \epsilon_m^0(k)} + O(V^3) \,. \tag{A.3}$$

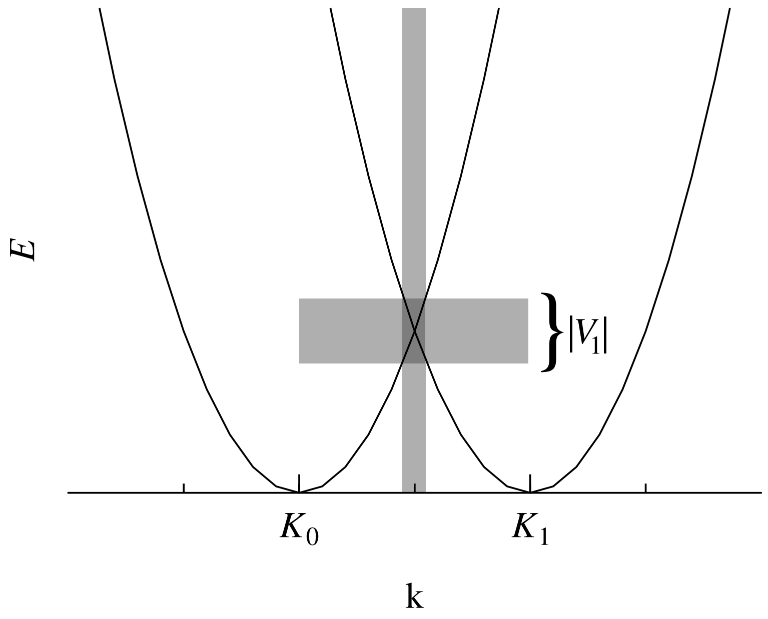

Abb. A.1: Im schattierten Bereich weichen die exakten Energieeigenwerte um V_1 von denen des freien Atoms ab.

Da $V_0 = 0$ ist, verschwindet die erste Ordnung. Die Korrektur ist also quadratisch im Potential.

Zweitens: Hier sei k so gewählt, dass $|\epsilon^0_{n_1}(k) - \epsilon^0_{n_2}(k)| \approx V$, während für alle anderen m $|\epsilon^0_m(k) - |\epsilon^0_{n_i}(k)| \gg V$ gilt. Gleichung (A.1) kann nun folgendermassen umgeschrieben werden

$$\left(E - \epsilon^0_n(k)\right) c_n(k) = \sum_{i=1,2} V_{n_i - n} c_{n_i}(k) + \sum_{l \neq n_i} V_{l-n} c_l(k)\,, \tag{A.4}$$

Sucht man Korrekturen zu den (fast) entarteten Eigenwerten, so ist auch $|E - \epsilon^0_n(k)| \gg V$ falls $n \neq n_i$, und man kann für diese Koeffizienten

$$c_n(k) = \frac{1}{E - \epsilon^0_n(k)} \left(\sum_{i=1,2} V_{n_i - n} c_{n_i}(k) + \sum_{l \neq n_i} V_{l-n} c_l(k) \right) \tag{A.5}$$

schreiben. Eingesetzt in Gleichung (A.4) ergibt sich bis zu zweiter Ordnung in V

$$\left(E - \epsilon^0_n(k)\right) c_n(k) = \sum_{i=1,2} V_{n_i - n} c_{n_i}(k) + \sum_{i=1,2} \sum_{l \neq n_i} \frac{V_{l-n} V_{n_i - l}}{E - \epsilon^0_l(k)} c_{n_i}(k)\,. \tag{A.6}$$

Im Allgemeinen verschwindet die erste Ordnung nicht. Die Korrekturen der Energieeigenwerte sind von 1. Ordnung in V.

A.2 Zweibandnäherung

Wie eben gesehen ergibt sich in der Nähe des minimalen Bandabstandes in sehr guter Näherung eine Zweibandbeschreibung. Der Hamiltonoperator hat dann folgende Form

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon^0_{n_1}(k) & V_{n_1-n_2} \\ V_{n_2-n_1} & \epsilon^0_{n_2}(k) \end{pmatrix} , \tag{A.7}$$

mit den Eigenwerten

$$E_{1,2} = \frac{\epsilon^0_{n_1}(k) + \epsilon^0_{n_2}(k)}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(\epsilon^0_{n_1}(k) - \epsilon^0_{n_2}(k))^2 + 4V_{n_1-n_2}V_{n_2-n_1}} . \tag{A.8}$$

Im hermiteschen Fall gilt außerdem $V_{n_1-n_2} = V^*_{n_2-n_1}$. Die $|n_1 - n_2|$-te Energielücke wird also nur vom $|n_1 - n_2|$-ten Fourierkoeffizienten des periodischen Potentials festgelegt, $\delta\epsilon_{|n_1-n_2|} = 2|V_{n_1-n_2}|$. Die Eigenfunktionen sind gegeben durch

$$\begin{aligned} |E_1(k)\rangle &= \cos\left(\frac{\theta(k)}{2}\right) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \sin\left(\frac{\theta(k)}{2}\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \qquad (A.9) \\ |E_2(k)\rangle &= -\sin\left(\frac{\theta(k)}{2}\right) \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} + \cos\left(\frac{\theta(k)}{2}\right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} . \qquad (A.10) \end{aligned}$$

Dabei gilt

$$\begin{aligned} \theta(k) &= \arctan\left(\frac{2|V_{n_1-n_2}|}{\epsilon^0_{n_1}(k) - \epsilon^0_{n_2}(k)}\right) , \qquad (A.11) \\ \mathrm{e}^{i\phi} &= \frac{V_{n_1-n_2}}{|V_{n_1-n_2}|} . \qquad (A.12) \end{aligned}$$

Für die Übergangsmatrixelemente errechnet man daraus

$$\begin{aligned} W_{1,1}(k) = \mathrm{i}\langle E_1(k)|E_1'(k)\rangle &= \mathrm{i}\langle E_2(k)|E_2'(k)\rangle = W_{2,2}(k) \qquad (A.13) \\ &= 0 , \qquad (A.14) \\ W_{1,2}(k) = \mathrm{i}\langle E_1(k)|E_2'(k)\rangle &= \mathrm{i}\langle E_2(k)|E_1'(k)\rangle = -W_{2,1}(k) \qquad (A.15) \\ &= \frac{\mathrm{i}|V_{n_1-n_2}|(\epsilon^0_{n_1}(k) - \epsilon^0_{n_2}(k))'}{(\epsilon^0_{n_1}(k) - \epsilon^0_{n_2}(k))^2 + 4|V_{n_1-n_2}|^2} . \qquad (A.16) \end{aligned}$$

Hier soll $'$ die Ableitung nach k bedeuten. Mit den $\epsilon^0_n(k)$ aus Gleichung (A.2) lässt sich das noch weiter vereinfachen

$$\langle E_1(k)|E_2'(k)\rangle = \frac{\frac{2\pi\hbar^2}{md}(n_1 - n_2)|V_{n_1-n_2}|}{(\frac{2\pi\hbar^2}{md})^2(n_1 - n_2)^2 \left(k + \frac{\pi}{d}(n_1 + n_2 + 1)\right)^2 + 4|V_{n_1-n_2}|^2} . \tag{A.17}$$

Für das Kosinus-Potential $V_l = V_0(\delta_{l,-1}+\delta_{l,+1})/2$ bekommt man somit, dass in erster Ordnung Störungstheorie nur die erste Energielücke auftritt und $\delta\epsilon_1 = V_0$ ist. Das Übergangsmatrixelement wird zu

$$\langle E_1(k)|E_2'(k)\rangle = \frac{\pm\frac{\pi\hbar^2}{md}|V_0|}{(\frac{2\pi\hbar^2}{md})^2\left(k+\frac{2\pi}{d}(n_{1/2}+1)\right)^2+|V_0|^2}\,, \tag{A.18}$$

je nach dem, ob $n_1 - n_2 = 1$ oder $n_2 - n_1 = 1$ ist.

A.3 Bandlücken beim Kosinus-Potential

Zur Berechnung des Verlaufs der Bänder in der Nähe der höheren Bandlücken kann man auf die Gleichung (A.4) und (A.5) zurückgreifen. Beim Kosinus-Potential muß man aber für die höheren Bandlücken immer höhere Ordnungen der Störungstheorie berechnen. Eine einfachere Vorgehensweise ist nun, in der Nähe der Kreuzung wieder einen Hamiltonoperator der Form (A.7) anzusetzen, wobei für die n-te Überkreuzung $V_{n_1-n_2}$ durch die halbe n-te Bandlücke $\delta\epsilon_n/2$ zu ersetzten ist.

Die Bandlücke kann man bestimmen, in dem man die Kurven berechnet, welche die Lösungen mit reellen k von den Lösungen mit komplexem k trennt (siehe Abbildung 2.1). Diese Lösungen sind periodische Funktionen mit der Periode d oder $2d$. Es gilt also

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_n A_n\cos\left(2n\frac{\pi}{d}x\right)+B_n\sin\left(2n\frac{\pi}{d}x\right)\,,\\ \psi(x) &= \sum_n A_n\cos\left((2n+1)\frac{\pi}{d}x\right)+B_n\sin\left((2n+1)\frac{\pi}{d}x\right)\,,\end{aligned} \tag{A.19}$$

Setzt man das in Gleichung (2.24) ein, so bekommt man für die Koeffizienten eine Rekursionsformel [31]. Für die A_n's der d periodischen Lösung erhält man zum Beispiel

$$\bar{V}_0\frac{A_{n-2}}{A_n}+2(\bar{E}-n^2)+\bar{V}_0\frac{A_{n+2}}{A_n}=0\,. \tag{A.20}$$

mit $\bar{V}_0 = V_0/E_\mathrm{R}$ und $\bar{E} = (E - V_0)/E_\mathrm{R}$. Diese Rekursionsformel kann man nutzen, um mit Hilfe einer Kettenbruchentwicklung eine implizite Gleichung für $E(V_0)$ zu erhalten. Die Kurve die den niedrigsten Eigenwert festlegt startet für $V_0 = 0$ mit

$E = 0$. Somit erhält man

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \frac{\bar{V}_0^2}{2(\bar{E}-4) - \dfrac{\bar{V}_0^2}{2(\bar{E}-16) - \ldots}} \\ &\approx -\frac{\bar{V}_0^2}{8} \,. \end{aligned} \tag{A.21}$$

Die anderen Kurven bekommt man entsprechend. In jeweils niedrigster Ordnung in V_0 erhält man so für die Bandlücke

$$\delta\epsilon_n \sim \bar{V}_0^n \tag{A.22}$$

Für die ersten Bandlücken erhält man

$$\begin{aligned}\delta\epsilon_n &= \bar{V}_0 \\ \delta\epsilon_2 &= \frac{1}{4}\bar{V}_0^2 \\ \delta\epsilon_3 &= \frac{1}{64}\bar{V}_0^3 \,. \end{aligned} \tag{A.23}$$

Anhang B

Unitäre Transformationen

In dieser Arbeit wurden drei verschiedene Versionen des Hamiltonoperators verwendet. Wir wollen nun zeigen, wie diese verschiedenen Versionen mit Hilfe von zeitabhängigen unitären Transformationen ineinander überführt werden können.
Die Schrödinger-Gleichung für $\phi(x,t)$

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\phi(x,t) &= H\phi(x,t) \\ &= \left(\frac{p^2}{2m}+V(x,t)\right)\phi(x,t) \end{aligned} \tag{B.1}$$

geht durch die zeitabhängige Eichtransformation $\psi(x,t)=U(t)\phi(x,t)$ in

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \tilde{H}\psi(x,t) \tag{B.2}$$

über. Der transformierte Hamiltonoperator $\tilde{H}$ ist dabei durch

$$\tilde{H} = UHU^\dagger - \mathrm{i}\hbar U\dot{U}^\dagger \tag{B.3}$$

gegeben.
Der Ausgangspunkt unsere Betrachtungen sei das Laborsystem. Dort habe das Potential die Form $V(x,t)=V(x+\alpha(t))$. Im Fall des von den gegenläufigen Laserwellen erzeugten Potentials (siehe Gleichung (2.18)) ist

$$V(x,t) = V_0\left(1+\cos(2k_{\mathrm{L}}(x+\alpha(t)))\right)\ . \tag{B.4}$$

Es ist $\alpha(t)=at^2/2$ die Phasendifferenz der Laser und a die Beschleunigung. Im mitbewegten Bezugssystem gilt

$$\begin{aligned} x &\rightarrow x-\alpha(t) \\ p &\rightarrow p-\beta(t) = p-m\dot{\alpha}(t)\,, \end{aligned} \tag{B.5}$$

mit der Masse m. Für die Transformation wählen wir als Ansatz eine Verknüpfung des Verschiebeoperators für den Impuls mit dem Verschiebeoperator für den Ort

$$U(t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\alpha(t)p}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\beta(t)x}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\gamma(t)}\,, \tag{B.6}$$

dabei ist $\gamma(t)$ eine noch zu bestimmende Funktion. Diese Transformation liefert genau das gewünschte Resultat, es gilt nämlich

$$\begin{aligned} UxU^\dagger &= x - \alpha(t) \\ UpU^\dagger &= p - \beta(t)\,. \end{aligned} \tag{B.7}$$

Damit erhält man für den transformierten Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \frac{(p-\beta(t))^2}{2m} + V(x-\alpha(t),t) \\ &\quad + \dot{\alpha}(t)p - \dot{\beta}(t)x + \dot{\gamma}(t) + \alpha(t)\dot{\beta}(t) \\ &= \frac{p^2}{2m} + V(x-\alpha(t),t) - \dot{\beta}(t)x \end{aligned} \tag{B.8}$$

Dabei wurde noch $\gamma(t)$ so gewählt, dass alle Terme ohne x und p Abhängigkeit verschwinden. Für das beschleunigte Potential Gleichung (B.4) erhält man somit

$$\tilde{H} = \frac{p^2}{2m} + V_0\left(1+\cos(2k_\mathrm{L}x)\right) - max\,. \tag{B.9}$$

Um die dritte benutzte Form zu erhalten, kann man eine aus der Elektrodynamik bekannte Transformation verwenden. Das skalare Potential lässt sich durch entsprechende Eichung des Vektorpotentials in diesem absorbieren. Es ist

$$U(t) = \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}matx} \tag{B.10}$$

Mit $\psi(x,t) = U\chi(x,t)$ und

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\chi(x,t) = \bar{H}\chi(x,t) \tag{B.11}$$

folgt aus Gleichung (B.2) folgender Hamiltonoperator

$$\bar{H} = \frac{(p+mat)^2}{2m} + V_0\left(1+\cos(2k_\mathrm{L}x)\right)\,. \tag{B.12}$$

Es ist wichtig zu betonen, dass die Gleichungen zwar äquivalent sind, aber bisher noch nichts über die Randbedingungen gesagt wurde. So gelten für Gleichung (B.9)

$\psi(x,t) = 0$ für $x \to \infty$ und $\psi(x,t) \sim \exp(ikx)$ für $x \to -\infty$, diese Randbedingungen sind nicht äquivalent zu periodischen Randbedingungen in Gleichung (B.12). Vielmehr korrespondieren die periodischen Randbedingungen in Gleichung (B.12) zu zeitabhängigen Randbedingungen in Gleichung (B.9). Da apriori nicht klar ist, welchen Einfluss die verschiedenen Randbedingungen auf die unterschiedliche Größen haben, muß man sehr sorgfältig prüfen wie die Randbedingungen das Ergebnis beeinflussen [64].

Anhang C

Die effektive Masse Näherung

In diesem Anhang wollen wir die effektive Masse Näherung darstellen [59, 65]. Das Ziel ist, die Gültigkeit von Gleichung (4.12) zu zeigen. Beginnen wir mit einem Hamiltonoperator der Form

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} + V(x) + V_{\mathrm{F}}(x) \\ &= H_{\mathrm{B}} + V_{\mathrm{F}}(x)\,, \end{aligned} \tag{C.1}$$

mit dem periodischen Potential $V(x) = V(x+d)$ und einem im Vergleich zur Periode d des periodischen Potentials langsam veränderlichen Fallenpotential $V_{\mathrm{F}}(x)$. Den nichtlinearen Term in der GPE werden wir am Ende des Abschnittes gesondert behandeln.

Wir entwickeln die Wellenfunktion nach ebenen Wellen, die mit einer Blochfunktion $u_{n,k}(x)$ (siehe Gleichung (2.23)) mit festem $k = k_0$ moduliert ist [59, 65]

$$\psi(x,t) = \sum_n \int \mathrm{d}k B_n(k,t) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} u_{n,k_0}(x)\,. \tag{C.2}$$

Die Entwicklung der Wellenfunktion nach solch einem Funktionensatz ist möglich, da diese Funktionen eine vollständige orthogonale Basis bilden [59]. Die Wahl der k_0 ist erst einmal willkürlich. Die Matrixelemente für den Bloch-Hamiltonoperator sind in dieser Entwicklung nicht diagonal. Es gilt

$$\begin{aligned} \langle ql|H_{\mathrm{B}}|nk\rangle &= \int \mathrm{d}x\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx} u^*_{l,k_0}(x) H_{\mathrm{B}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} u_{n,k_0}(x) \\ &= \left(E_n(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_0^2) \right) \delta_{l,n} \delta(k-q) \\ &\quad + \frac{\hbar}{m}(k-k_0) p_{l,n} \delta(k-q)\,. \end{aligned} \tag{C.3}$$

Die Impulsmatrixelemente $p_{l,n}$ sind durch

$$p_{l,n} = \frac{2\pi}{d} \int\limits_{-d/2}^{d/2} \mathrm{d}x \, u^*_{l,k_0}(x) p u_{n,k_0}(x) \tag{C.4}$$

gegeben. Um die Matrixelemente des Fallenpotentials zu bestimmen, benutzt man die Periodizität des Produktes $u^*_{l,k_0}(x)u_{n,k_0}(x)$, indem dieses als Fourierreihe entwickelt wird

$$\begin{aligned} \int \mathrm{d}x \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}qx} u^*_{l,k_0}(x) V_\mathrm{F}(x) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} u_{n,k_0}(x) &= \sum_\nu b_{l,n}(\frac{2\pi}{d}\nu) \int \mathrm{d}x \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-q+\frac{2\pi}{d}\nu)x} V_\mathrm{F}(x) \\ &= \sum_\nu b_{l,n}(\frac{2\pi}{d}\nu) V_\nu(k-q) \, . \end{aligned} \tag{C.5}$$

Wenn das Potential $V_\mathrm{F}(x)$ genügend langsam abfällt, so reicht es aus, nur die nullte Fourierkomponente zu berücksichtigen, wobei $b_{l,n}(0) = \delta_{l,n}/2\pi$ gilt. Für ein Fallenpotential der Form

$$V_\mathrm{F} = U_0(1 - \mathrm{e}^{-a^2x^2}) \, , \tag{C.6}$$

welches für kleine x einer parabolischen Falle entspricht, ergibt sich zum Beispiel

$$\begin{aligned} V_\nu(k-q) &= U_0 \left(2\pi\delta(k-q+\frac{2\pi}{d}\nu) - \frac{\sqrt{\pi}}{a} \exp(-\frac{(k-q+\frac{2\pi}{d}\nu)^2}{4a^2}) \right) \\ &\approx U_0 \delta_{\nu,0} \left(2\pi\delta(k-q) - \frac{\sqrt{\pi}}{a} \exp(-\frac{(k-q)^2}{4a^2}) \right) \, . \end{aligned} \tag{C.7}$$

Die Näherung ist dann besonders gut, wenn a sehr klein ist.
Der Hamiltonoperator besteht somit aus drei Teilen

$$H = H_1 + H_2 + H_3 \, . \tag{C.8}$$

Es gibt einen diagonalen Beitrag

$$\langle ql|H_1|nk\rangle = \left(E_n(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_0^2) \right) \delta_{l,n}\delta(k-q) \, . \tag{C.9}$$

Der Teilhamiltonoperator H_2 ist diagonal in den Impulsen, aber nicht in den Bändern

$$\langle ql|H_2|nk\rangle = \frac{\hbar}{m}(k-k_0) p_{l,n} \delta(k-q) \, . \tag{C.10}$$

Der Beitrag des zusätzlichen Fallenpotentials H_3 ist diagonal in den Bändern. jedoch nicht in den Impulsen

$$\langle ql|H_3|nk\rangle = V(k-q)\delta_{l,n}\,. \tag{C.11}$$

Wir haben hier $V(k-q) = V_0(k-q)/2\pi$ benutzt.
Wir suchen nun eine Transformation, so dass H_2 verschwindet. Das Ziel ist also die Kopplung der Bänder wegzutransformieren. Dies gelingt nicht vollständig. Ein neuer Term der die Bänder koppelt wird hinzukommen. Allerdings hat dieser im Vergleich zu H_2 eine reskalierte Kopplungsstärke, die es besser erlaubt abzuschätzen, wann die Kopplung wichtig ist und wann nicht. Dazu machen wir den Ansatz

$$\tilde{H} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}S} H \mathrm{e}^{\mathrm{i}S}\,, \qquad \tilde{\psi}(x,t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}S}\psi(x,t)\,. \tag{C.12}$$

S ist ein noch zu bestimmender Operator, von dem wir aber fordern wollen, dass seine Norm klein ist $||S|| \ll 1$, so dass wir die Exponentialfunktion entwickeln können. Der transformierte Hamiltonoperator ist dann

$$\begin{aligned}\tilde{H} &\approx (1-\mathrm{i}S-\frac{1}{2}S^2)H(1+\mathrm{i}S-\frac{1}{2}S^2)\\ &= H_1+H_2+H_3+\mathrm{i}[H_1,S]+\mathrm{i}[H_2,S]+\mathrm{i}[H_3,S]\\ &\quad -\frac{1}{2}[[H_1,S],S]-\frac{1}{2}[[H_2,S],S]-\frac{1}{2}[[H_3,S],S]\,.\end{aligned} \tag{C.13}$$

Es ist $[,]$ der Kommutator. Mit dem Ansatz $\mathrm{i}[H_1,S] = -H_2$ können wir die Forderung nach dem Verschwinden von H_2 erfüllen. Gleichzeitig erhalten wir so eine Bestimmungsgleichung für S

$$\langle ql|S|nk\rangle = \begin{cases} \frac{\hbar}{m}\frac{(k-k_0)p_{l,n}}{E_l(k_0)-E_n(k_0)}\delta(k-q) & l \neq n \\ 0 & l = n\,. \end{cases} \tag{C.14}$$

Die nächste Näherung ist nun die Kommutatoren mit H_3 zu vernachlässigen

$$\langle ql|[H_3,S]|nk\rangle \sim \frac{V(k-q)}{E_l(k_0)-E_n(k_0)} \approx 0\,, \tag{C.15}$$

$$\langle ql|[[H_3,S],S]|nk\rangle \sim \frac{V(k-q)}{(E_l(k_0)-E_n(k_0))^2} \approx 0\,. \tag{C.16}$$

Dies Näherung bedeutet, dass das Fallenpotential nicht zu stark sein darf. Für unser obiges Beispiel bedeutet dies, dass $U_0 \ll |E_l(k_0)-E_n(k_0)|$ erfüllt sein muss.

Da $[[H_2, S], S]$ dritter Ordnung in S ist bleibt nur noch ein Kommutator zu bestimmen

$$\begin{aligned}\langle ql|[H_1, S]|nk\rangle &= -\mathrm{i}\left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 (q-k_0)(k-k_0)\delta(k-q) \\ & \sum_j p_{l,j}p_{j,n}\left(\frac{1}{E_l(k_0)-E_j(k_0)}+\frac{1}{E_n(k_0)-E_j(k_0)}\right). \end{aligned} \tag{C.17}$$

Der transformierte Hamiltonoperator ist somit

$$\tilde{H} = H_0 + \frac{\mathrm{i}}{2}[H_1, S] + H_3\,. \tag{C.18}$$

Die Schrödinger-Gleichung für die transformierten Amplituden nimmt damit folgende Form an

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\dot{\tilde{B}}_n(q,t) &= E_n(k_0)\tilde{B}_n(q,t) + \frac{\hbar^2}{m}k_0(q-k_0)\tilde{B}_n(q,t) \qquad \text{(C.19)} \\ & +\frac{\hbar^2(q-k_0)^2}{2}\sum_l\left(\frac{1}{M}\right)_{n,l}\tilde{B}_l(q,t) + \int \mathrm{d}k\, V(k-q)\tilde{B}_n(k,t)\,. \end{aligned}$$

Dabei haben wir den inversen effektive Masse-Tensor eingeführt

$$\left(\frac{1}{M}\right)_{n,l} = \frac{\delta_{n,l}}{m} + \frac{1}{m^2}\sum_j p_{l,j}p_{j,n}\left(\frac{1}{E_l(k_0)-E_j(k_0)}+\frac{1}{E_n(k_0)-E_j(k_0)}\right)\,. \tag{C.20}$$

Transformiert man die Gleichung (C.19) mit

$$F_{n,k_0}(x,t) = \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}q \mathrm{e}^{\mathrm{i}(q-k_0)x}\tilde{B}_n(q,t) \tag{C.21}$$

in die Ortsdarstellung zurück, so gilt dort

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial t}F_{n,k_0}(x,t) + \frac{\hbar k_0}{m}\frac{\partial}{\partial x}F_{n,k_0}(x,t)\right) &= E_n(k_0)F_{n,k_0}(x,t) + V_{\mathrm{F}}(x)F_{n,k_0}(x,t) \\ & -\frac{\hbar^2}{2}\sum_l\left(\frac{1}{M}\right)_{n,l}\frac{\partial^2}{\partial x^2}F_{l,k_0}(x,t) \end{aligned} \tag{C.22}$$

Zieht man aus den Amplituden $F_{l,k_0}(x,t)$ noch einen Phasenfaktor heraus

$$f_{n,k_0}(x,t) = F_{n,k_0}(x,t)\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_n(k_0)t/\hbar} \tag{C.23}$$

und benutzt, dass in führender Ordnung $\tilde{B}_n(q,t) \approx B_n(q,t)$ ist, so hat man den Ansatz Gleichung (4.10) verifiziert. Die Amplituden f_{n,k_0} sind proportional zu ebenen Wellen mit einem Impuls $\hbar k_0$. Im k-Raum ist f_{n,k_0} um k_0 lokalisiert. Damit erhält man ein Kriterium dafür, wie k_0 zu wählen ist

$$k_0 = \int \mathrm{d}x\, \psi^*(x,t) k \psi(x,t) \tag{C.24}$$

Im Grundzustand bewegt sich die die Einhüllende f_{n,k_0} nicht, also gilt $k_0 = 0$. Für ein konstantes Potential $V_{\mathrm{F}} = Fx$. bewegt sich die Einhüllende durch ein Band. Daher gilt $k_0 = k_0(t=0) + Ft/\hbar$ (siehe auch Gleichung (3.3)).

Um die Gültigkeit der Gleichung (4.12) zu zeigen, müssen wir nur noch das Resultat auf eine Einband-Näherung beschränken und den nichtlinearen Anteil betrachten. Die Reduktion auf ein Einbandmodell erfordert, dass die Kopplungsmatrixelemente $(1/M)_{l,n}$ klein gegenüber dem Bandabstand sind. Außer am minimalen Bandabstand ist dies sicher gut erfüllt.

Um den nichtlinearen Term zu beschreiben, gehen wir genau die gleichen Schritte wie oben noch einmal durch und erhalten

$$\begin{aligned} \kappa|\psi(x,t)|^2\psi(x,t) \quad &\rightarrow \quad \frac{1}{d}\sum_{l_1,l_2,l_3} F_{l_1}(x,t)F_{l_2}(x,t)F^*_{l_3}(x,t) \\ &\qquad \int \mathrm{d}x\, u_{l_1,k_o}(x,t)u_{l_2,k_0}(x,t)u^*_{l_3,k_0}(x,t)u^*_{n,k_0}(x,t)\,. \end{aligned} \tag{C.25}$$

Falls nun

$$\frac{g}{d}\int\limits_{-d/2}^{d/2} \mathrm{d}x\, u_{l_1,k_o}(x,t)u_{l_2,k_0}(x,t)u^*_{l_3,k_0}(x,t)u^*_{n,k_0}(x,t) \ll |E_n(k_0) - E_{l_1}(k_0)| \tag{C.26}$$

ist, kann man sich auf $n = l_1 = l_2 = l_3$ beschränken, und man erhält so auch die reskalierte Kopplungskonstante

$$\tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{d}\int\limits_{-d/2}^{d/2} |u_{n,k_0}(x,t)|^4\,. \tag{C.27}$$

Literaturverzeichnis

[1] F. Bloch, Z. Phys. **52**, 555 (1928).

[2] F. Hund, Z. Phys. **40**, 742 (1927).

[3] L. Landau, Sov. Phys. **1**, 89 (1932).

[4] G. Zener, Proc. R. Soc. Londo, Ser. A **137**, 696 (1932).

[5] R. Hübner und G. Graham, Phys. Rev. B **53**, 4870 (1996).

[6] G. Blatter und D. A. Browne, Phys. Rev. B **37**, 3856 (1988).

[7] P. Ao und J. Rammer, Phys. Rev. B **43**, 5397 (1991).

[8] C. Zhu und H. Nakamura, J. Chem. Phys. **101**, 10630 (1994), und die darin enthaltenen Referenzen.

[9] E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids **12**, 181 (1959).

[10] G. H. Wannier, Phys. Rev. **117**, 432 (1960).

[11] G. Eilenberger, Z. Phys. **164**, 59 (1961).

[12] J. W. Avron, Phys. Rev. Lett. **37**, 1568 (1976), und die darin enthaltenen Referenzen.

[13] J. W. Avron, Ann. Phys. **143**, 33 (1982).

[14] J. W. Avron, P. Exner und Y. Last, Phys. Rev. Lett **72**, 896 (1994).

[15] J. M. Combes und P. D. Hislop, J. Phys. A **23**, 1501 (1990).

[16] J. B. Krieger und G. J. Iafrate, Phys. Rev. B **33**, 5494 (1986).

[17] V. Grecchi und A. Sacchetti, Ann. Phys. **241**, 258 (1995).

[18] E. E. Mendez und G. Bastard, Physics Today 34 (1993).

[19] J. Rotvig, A.-P. Jauho und H. Smith, Phys. Rev. Lett. **74**, 1831 (1995).

[20] P. Ao und J. Rammer, Phys. Rev. B **44**, 11494 (1991).

[21] E. Peik, M. B. Dahan, I. Bouchoule, Y. Castin und C. Salomon, Appl. Phys. B **65**, 685 (1997).

[22] K. W. Madison, C. F. Bharucha, P. R. Morrow, S. R. Wilkinson, Q. Niu, B. Sundaram und M. G. Raizen, Appl. Phys. B **65**, 693 (1997).

[23] K. Mullen, E. Ben-Jakob, Y. Gefen und Z. Schuss, Phys. Rev. Lett. **62**, 2543 (1989).

[24] S. R. Wilkinson *et al.*, Nature **387**, 575 (1997).

[25] B. P. Anderson und M. A. Kasevich, Science **282**, 1686 (1998).

[26] M.-O. Mewes, M. R. Andrews, D. M. Kurn, D. S. Durfee, C. G. Townsend und W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **78**, 585 (1997).

[27] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc und G. Grynberg, *Photons and Atoms* (Wiley, New York, 1989).

[28] D. F. Walls und G. J. Milburn, *Quantum Optics* (Springer, Berlin Heidelberg New York, 1995).

[29] R. Grimm, M. Weidenmüller und Y. B. Ovchinnikov, Advances in Atomic Molecular and Optical Physics **42**, 95 (2000).

[30] W. Magnus und S. Winkler, *Hill's Equation* (Wiley, New York, 1966).

[31] Abramowitz und Stegun, *Pocketbook of Mathematical Functions* (Harri Deutsch, Frankfurt/Main, 1984).

[32] W. Kohn, Phys. Rev. **115**, 809 (1959).

[33] R. Graham und S. Miyazaki, Phys. Rev. A **53**, 2683 (1996).

[34] Q. Niu, X.-G. Zhao, G. A. Georgakis und M. G. Raizen, Phys. Rev. Lett **76**, 4504 (1996).

[35] S. R. Wilkinson, C. F. Bharucha, K. W. Madison, Q. Niu und M. G. Raizen, Phys. Rev. Lett **76**, 4512 (1996).

[36] C. F. Bharucha, K. W. Madison, P. R. Morrow, S. R. Wilkinson, B. Sundaram und M. G. Raizen, Phys. Rev. A **55**, R857 (1997).

[37] M. C. Fischer, K. W. Madison, Q. Niu und M. G. Raizen, Phys. Rev. A **58**, R2648 (1998).

[38] M. B. Dahan, E. Peik, J. Reichel, Y. Castin und C. Salomon, Phys. Rev. Lett. **76**, 4508 (1996).

[39] E. Peik, M. B. Dahan, I. Bouchoule, Y. Castin und C. Salomon, Phys. Rev. A **55**, 2989 (1997).

[40] C. Cohen-Tannoudji, in *Les Houches, Session LIII, 1990, Fundamental Systems in Quantum Optics*, herausgegeben von S. Reynaud, E. Giacobino und J. Zinn-Justin (Elsevier, Amsterdam, 1992).

[41] M. Kasevich und S. Chu, Phys. Rev. Lett. **69**, 1741 (1992).

[42] V. Grecchi und A. Sacchetti, Commun. Math. Phys. **185**, 359 (1997).

[43] V. Grecchi und A. Sacchetti, Phys. Rev. Lett. **78**, 4474 (1997).

[44] M. Berry und K. Mount, Rep. Prog. Phys. **35**, 315 (1972).

[45] M. Glück, A. R. Kolovsky und J. Korsch, J. of Optics B , eingereicht.

[46] L. Fonda, G. C. Ghirardi und A. Rimini, Rep. Prog. Phys. **41**, 587 (1978).

[47] P. T. Greenland, Nature **335**, 298 (1988).

[48] Q. Niu und M. G. Raizen, Phys. Rev. Lett. **80**, 3491 (1998).

[49] L. D. Landau und E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik Bd. 3* (Akademie-Verlag, Berlin, 1979).

[50] M. H. Anderson, J. R. Enscher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell, Science **269**, 198 (1995).

[51] K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).

[52] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner und P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998).

[53] M. J. Steel und W. Zhang, cond-mat/9810284 .

[54] D.-I. Choi und Q. Niu, Phys. Rev. Lett. **82**, 2022 (1999).

[55] A. V. Taichenachev, A. M. Tumaikin und V. I. Yudin, physics/9902045 , submitted to Phys. Rev. A.

[56] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii und S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **71**, 463 (1999).

[57] M. L. Chiofalo und M. P. Tosi, cond-mat/0003363 .

[58] F. Dalfovo und S. Stringari, Phys. Rev. A **53**, 2477 (1996).

[59] J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State* (Academic Press, New York, 1974).

[60] M. Glück, A. R. Kolovsky und J. Korsch, J. Phys. A **32**, L49 (1999).

[61] M. Glück, A. Kolovsky, H. Korsch und N. Moiseyev, Eur. Phys. J. D **4**, 239 (1998).

[62] C. A. Radzig und B. M. Smirnov, *Reference Data on Atoms, Molecules, and Ions* (Springer, Berlin Heidelberg, 1985).

[63] N. W. Ashcroft und N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders, Philadelphia, 1976).

[64] K. Mullen, D. Loss und H. T. C. Stoof, Phys. Rev. B **47**, 2689 (1993).

[65] J. M. Luttinger und W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).

Danksagungen

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Robert Graham für die Betreuung meiner Promotion und für die große Freiheit, die er mir bei dieser Arbeit überließ.

Herrn Prof. Dr. Fritz Haake danke ich für die freundliche Übernahme des Mitberichts.

Herrn Prof. Dr. Hans-Friedrich Döbele danke ich dafür, dass er den Prüfungsvorsitz übernommen hat.

Bei meiner Frau, meinem Sohn und meinen Eltern möchte ich mich für die ständige Unterstützung und das mir entgegengebrachte Verständnis in den letzten Jahren bedanken.

Für viele Diskussionen und Anregungen und ihre stete Hilfsbereitschaft bei den verschiedensten physikalischen und rechentechnischen Problemen bedanke ich mich sehr herzlich bei Walter Strunz, Jürgen Reidl, Jens-Uwe Sedler, Andreas Hamm, Jens Eggers, Martin Fliesser und allen wissenschaftlichen Mitarbeitern in der theoretischen Physik.

Für das kritische Lesen dieser Arbeit danke ich Jürgen Reidl und Jens-Uwe Sedler.

Für die Unterstützung in organisatorischen Fragen danke ich Frau Ira Terwyen und Frau M. Motzko.