

Institut für Theoretische Physik

Universität zu Köln

**Streuung in periodisch getriebenen
Quantensystemen**



Bachelorarbeit

Erstprüfer Prof. Dr. Achim Rosch
Zweitprüfer apl. Prof. Dr. Ralf Bulla

Eingereicht von Matthias Pukrop
Matrikelnummer 5704855

Juni 2016, Köln

Zusammenfassung

Unser Ziel in der folgenden Arbeit ist es, eindimensionale Streuprozesse zweier Teilchen in einem periodisch getriebenen System zu untersuchen. Dieses ist ein räumlich versetztes periodisches Potential, wie es zum Beispiel durch Überlagerung zweier stehender Laserwellen mit $\lambda_1 = 2\lambda_2$ realisiert werden kann. In solchen periodisch zeitabhängigen Systemen gilt die Energieerhaltung nur noch modulo der treibenden Frequenz. Zunächst gilt es sich mit der Beschreibung von Teilchen in solchen Systemen vertraut zu machen, vor allem mit der Struktur des Floquet-Formalismus. Dann werden wir das eigentliche Streuprobblem mit Hilfe eines entsprechenden Streuansatzes lösen und stellen fest, dass es propagierende und exponentiell abfallende Lösungen geben kann. Um tatsächlich Werte für bestimmte Parametersätze auszuwerten, ist es notwendig mit Hilfe von `mathematica` einen Algorithmus zur numerischen Lösung des Streuproblems zu schreiben. Anschließend schauen wir uns für den Fall, dass beide Teilchen gleiche Parameter haben, an, wie sich die Streuanteile der propagierenden Kanäle mit Variation der Wechselwirkungsstärke verhalten. Dabei werden wir auf Resonanzen stoßen, die auf quasigebundene Zustände im Floquetraum zurückzuführen sind. Außerdem sind die Streuanteile der Kanäle, in denen die Energie nicht erhalten ist, stark unterdrückt. Für den Fall doublon-holon betrachten wir, für welche einlaufenden Impulse es überhaupt möglich ist, in Kanäle mit geänderter Energie zu streuen und werden die Anteile dieser inelastischen Prozesse als Funktion der einlaufenden Impulse darstellen.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	7
1.1. Motivation	7
1.2. Grundlagen der Festkörperphysik	7
1.3. Ultrakalte Quantengase in optischen Gittern	8
1.4. Bose-Hubbard Modell	9
1.5. Floquet Theorie	9
2. Zeitunabhängiges System	11
2.1. Einteilchensystem	11
2.1.1. Periodisches Potential	11
2.1.2. Versetztes periodisches Potential	12
2.2. Zweiteilchensystem	15
2.2.1. Beschreibung in Relativ- und Schwerpunktkoordinaten	15
2.2.2. Streuprozess	18
3. Zeitabhängiges System	23
3.1. Einteilchensystem	23
3.2. Zweiteilchensystem	25
3.3. Streuprozesse	26
3.3.1. Variation der Wechselwirkungsstärke für gleiche Parameter	27
3.3.2. Anteile der Energieerhaltungsverletzung für doublon-holon Parameter	30
4. Zusammenfassung und Ausblick	35
A. Anhang	37
A.1. Hamiltonian Ortsdarstellung in Relativkoordinaten	37
A.2. Berechnung der Geschwindigkeiten	39
A.3. Verteilung der gefundenen Impulse für $k = 0$	40

1. Einleitung

1.1. Motivation

Eine lange Zeit nach Entwicklung der Quantenmechanik vor ungefähr 100 Jahren war man größtenteils bemüht in der Natur vorkommende Quantensysteme zu beschreiben und nachzuvollziehen. Mit dem technischen Fortschritt und einhergehender Realisierungsmöglichkeit verschiedener Experimente wuchs das Interesse an künstlichen Quantensystemen. Statt reiner Beschreibung der Natur geht es heute vielmehr darum, eigene Systeme zu entwickeln und zu untersuchen, mit dem Ziel theoretische Modelle zu überprüfen oder der direkten Anwendung, wie zum Beispiel dem berühmten "Quantencomputer". Eine vielversprechende Richtung sind dabei ultrakalte Gase in optischen Gittern, mit denen sich verschiedenste Systeme simulieren lassen. Der große Vorteil dabei ist die einfache Zugänglichkeit und hohe Variationsmöglichkeit der Parameter. Eine weitere Möglichkeit besteht darin, diese Parameter eines solchen Systems periodisch in der Zeit zu variieren [1–3]. Aktuell werden auch verstärkt Wechselwirkungseffekte in periodisch getriebenen Systemen untersucht [4–6]. In diesem Bereich ist auch die vorliegende Arbeit angesiedelt; darin untersuchen wir die eindimensionale Streuung zweier Teilchen in einem periodisch getriebenen Potential. Wir beginnen mit der Beschreibung eines einzelnen Teilchens in einem zeitlich stationären und räumlich periodisch versetzten Potential, gehen über zum Zweiteilchensystem und lösen das zeitunabhängige Streuproblem. Schließlich untersuchen wir das zeitabhängige System mit Hilfe des Floquet-Formalismus.

1.2. Grundlagen der Festkörperphysik

Wir werden kurz die thematisch relevanten Grundlagen der Festkörperphysik wiederholen. Diese wurden mit Hilfe von [7] und [8] erarbeitet. Im Drude-Sommerfeld-Modell des freien Elektronengases werden die Elektronen im Kristallgitter als frei angenommen, was bedeutet, dass sie nicht miteinander wechselwirken und kein Potential der Atomrümpfe erfahren. Sie werden dementsprechend durch die freie Schrödingergleichung

$$E\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

beschrieben, dessen Lösungen ebene Wellen $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ sind mit Ortskoordinate $\mathbf{r}$ und Wellenvektor $\mathbf{k}$ und dessen Dispersionsrelationen durch $E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ gegeben sind.

Im Blochschen Modell nehmen wir zusätzlich ein räumlich periodisches Potential $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} +$

$\mathbf{R}$) an, wobei $\mathbf{R}$ ein Gittervektor ist. Die Lösungen der Schrödingergleichung mit Potential

$$E\psi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

sind gegeben durch die sogenannten Bloch-Wellen

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (1.3)$$

wobei $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ gitterperiodisch ist. Für die Bloch-Wellen gilt $\psi_{\mathbf{k}+n\mathbf{G}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, wobei $n \in \mathbb{Z}$ und $\mathbf{G}$ ein reziproker Gittervektor ist. Das bedeutet einerseits, dass man sich immer auf $\mathbf{k}$ aus der 1. Brillouin-Zone $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ mit Gitterkonstante a beschränken kann, andererseits gilt Impulserhaltung nur noch bis auf Addition von $n\mathbf{G}$. Außerdem folgt für die Dispersionsrelation eine Bandstruktur $E_n(\mathbf{k})$ mit getrennten Energiebändern, die wiederum invariant unter Verschiebung um reziproke Gittervektoren sind [7, S.341-345].

In der tight-binding Näherung gehen wir davon aus, dass die kinetische Energie der Elektronen viel kleiner ist als das Potential. Sie sind also jeweils stark am Ort der Atomrümpfe lokalisiert. Um solche Zustände zu beschreiben bedient man sich der Wannier-Zustände

$$w_{nj}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

wobei $j = 1, \dots, N$ die Einheitszellen des Kristallgitters nummeriert und $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ eine Bloch-Welle ist. Diese Wannier-Zustände bilden für ein Band n eine orthonormale Basis und sind im Ortsraum nur am jeweiligen Gitterplatz stark lokalisiert.

1.3. Ultrakalte Quantengase in optischen Gittern

Kühlt man ein System soweit ab, dass die de Broglie Wellenlänge der Atome in der Größenordnung des mittleren Abstands liegt, machen sich die Quanteneigenschaften bemerkbar und im Falle von Bosonen kann ein makroskopischer Quantenzustand erreicht werden, bei dem sich der Großteil aller Teilchen im niedrigsten Energiezustand befindet. Dieses sogenannte Bose-Einstein-Kondensat wurde von den Namensgebern theoretisch vorhergesagt und 1995 experimentell realisiert [9], was 2001 mit dem Nobelpreis geehrt wurde.

Optische Gitter bieten eine sehr gute Möglichkeit das periodische Potential eines Festkörpers zu simulieren, während die Parameter wie zum Beispiel Gitterkonstante, Potentialhöhe und deren zeitliche Abhängigkeiten komplett variabel bleiben. Dies kann experimentell ausgenutzt werden, zum Beispiel zur Untersuchung von gerichtetem Teilchenstrom in sogenannten Quantum Ratchets [3] oder Quantum Pumps [10]. Realisiert werden optische Gitter durch Interferenz von gegenläufig stehenden Laserwellen. Ultrakalte Gase bestehend aus neutralen Atomen können in so ein Gitter eingesetzt werden. Dabei induziert das elektrische Feld $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ des Lasers ein Dipolmoment $\mathbf{d}$ im Atom, dass wiederum mit dem elektrischen Feld wechselwirkt und zu einem bindenden Potential führt [11] $V(\mathbf{r}) = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r})$, was in einer Dimension zu der Form $V(x) = V_0 \sin^2(k_{\text{Laser}}x)$ führt.

1.4. Bose-Hubbard Modell

Beschreiben wir solche Systeme in der tight-binding Näherung, gehen wir jeweils von stark lokalisierten Wannierzuständen an den jeweiligen Gitterplätzen m aus. Die Energien der Teilchen sind viel kleiner als die Höhe der Potentialtöpfe, sodass die Wellenfunktionen nur noch auf den nächsten benachbarten Gitterplätzen $m - 1$ und $m + 1$ nicht verschwindende Werte annimmt. Wir können dann von einer kontinuierlichen zu einer diskreten Beschreibung übergehen, sodass ein verdünntes Gas kalter Bosonen in einem optisches Gitter durch das Bose-Hubbard Modell mit Hamiltonian [12]

$$H_{\text{BH}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + \sum_i V_i \hat{n}_i + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) \quad (1.5)$$

beschrieben werden kann. Eine Herleitung findet sich zum Beispiel in [13]. Dabei sind $\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_i$ die bosonischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren am Gitterplatz i und $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ der entsprechende Besetzungszahloperator. Der erste Term beschreibt die Summe der kinetischen Energie beim Wechsel von Gitterplatz i nach j charakterisiert durch Energie J , der zweite Term die Summe der potentiellen Energie jeweils gegeben durch Potential V_i und der letzte Term die Wechselwirkung beschrieben durch Wechselwirkungsenergie U . In [14] ist gezeigt, dass sich im Fall eines verdünnten Gases kalter Bosonen mit Hilfe der Molekularfeldnäherung das zeitabhängige Bose-Hubbard Modell schreiben lässt als:

$$i\partial_t \psi_j = -J(\psi_{j-1} + \psi_{j+1}) + V_j \psi_j + U|\psi_j|^2 \psi_j \quad (1.6)$$

wobei ψ_j komplexe Wellenfunktionen sind. Außerdem setzten wir hier und im Folgenden $\hbar = a = 1$.

1.5. Floquet Theorie

Die Darstellungen in diesem Kapitel richten sich nach [15]. Die Floquet Theorie beruht auf einem mathematischen Satz [16, S.178] von Gaston Floquet (1847-1920), welcher auch die Grundlage für das Blochtheorem ist, dass die Lösungen in einem räumlich periodischen Potential angibt; die oben genannten Bloch-Wellen (1.3). Die Floquet Theorie wird es uns ermöglichen ein periodisches zeitabhängiges Problem auf ein zeitunabhängiges Eigenwertproblem abzubilden, für dessen Lösung wir dann bekannte Verfahren einsetzen können. Wir betrachten ein Potential, dass periodisch in der Zeit ist. Der Hamiltonian eines solchen Systems ist von der Form $H(t) = H(t+T)$, wobei T die Periodendauer ist. Die Kernaussage ist, dass die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung $i\partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle$ von der Form sind

$$|\psi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\varepsilon_\alpha t} |\phi_\alpha(t)\rangle, \quad (1.7)$$

wobei für die sogenannten Floquetzustände gilt: $|\phi_\alpha(t+T)\rangle = |\phi_\alpha(t)\rangle$. Setzen wir diesen Ansatz ein, erhalten wir:

$$\varepsilon_\alpha |\phi_\alpha(t)\rangle = (H(t) - i\partial_t) |\phi_\alpha(t)\rangle \quad (1.8)$$

Mit dem sogenannten Floquet Hamiltonian $H_F = H(t) - i\partial_t$ können wir die Floquetzustände $|\phi_\alpha(t)\rangle$ als Lösungen der floquetartigen Schrödingergleichung zu den Quasienergien ε_α auffassen:

$$H_F |\phi_\alpha(t)\rangle = \varepsilon_\alpha |\phi_\alpha(t)\rangle \quad (1.9)$$

Für ein gegebenes Paar $(\varepsilon_\alpha, |\phi_\alpha(t)\rangle)$ existiert eine unendliche Menge äquivalenter Paare $\{(\varepsilon_\alpha + n\Omega, e^{in\Omega t} |\phi_\alpha(t)\rangle)\}_{n \in \mathbb{Z}}$ mit $\Omega = \frac{2\pi}{T}$, die zur selben Lösung $|\psi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\varepsilon_\alpha t} |\phi_\alpha(t)\rangle$ führen. Das heißt, dass jedes Energieband einer Klasse von Lösungen, charakterisiert durch den Index α , in eine sogenannte Floquet-Zone der Breite Ω abgebildet werden kann. In solchen Systemen gilt die Energieerhaltung nur modulo Ω . Außerdem können wir die Floquetzustände fouriertransformieren:

$$|\phi_\alpha(t)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{in\Omega t} |\phi_{\alpha,n}\rangle \quad (1.10)$$

Der Zeitentwicklungsoperator lautet in der Basis der Floquetzustände

$$U(t) = \sum_{\alpha} e^{-i\varepsilon_\alpha t} |\phi_\alpha(t)\rangle \langle \phi_\alpha(t)| \quad (1.11)$$

und die Zeitentwicklung eines beliebigen Anfangszustands $|\psi(t=0)\rangle$ lässt sich somit schreiben als:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \sum_{\alpha \in \text{1.FZ}} \langle \phi_\alpha(t=0) | \psi(t=0) \rangle e^{-i\varepsilon_\alpha t} e^{-in\Omega t} |\phi_{\alpha,n}\rangle \quad (1.12)$$

2. Zeitunabhängiges System

2.1. Einteilchensystem

2.1.1. Periodisches Potential

Um die grundlegenden Ideen und Konzepte der eindimensionalen Streuung zweier Teilchen in periodisch getriebenen Systeme kennenzulernen, lohnt es sich, zunächst nur ein einzelnes Teilchen zu studieren. Dabei erfahren wir bereits viel über die Eigenschaften und Symmetrien des Systems, die schließlich bei der Beschreibung des Zweiteilchensystems erneut auftauchen werden. Wir betrachten also ein Teilchen in einem eindimensionalen periodischen Potential, das an den Gitterplätzen jeweils den Wert V annimmt (siehe Abb.2.1).

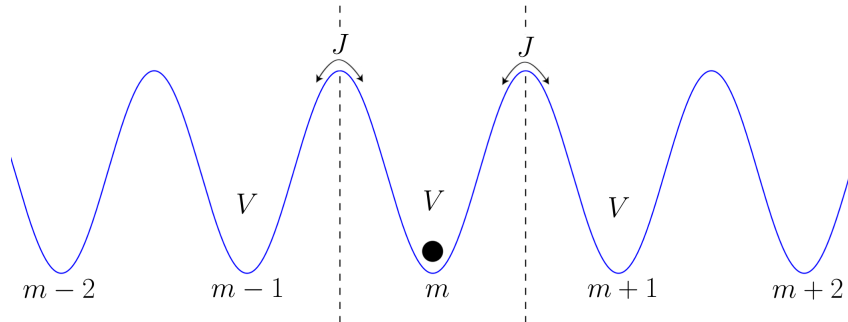


Abbildung 2.1. Ein Teilchen im periodischen Potential im Zustand ψ_m

Wie in der Einleitung 1.4 erläutert, machen wir die Annahme, dass die Energie des Teilchens viel kleiner ist als die Höhe der Potentialtöpfe und dass die zugehörige Wellenfunktion $\psi(x)$ so stark an einem Gitterplatz m lokalisiert ist, dass sie nur noch auf den nächsten benachbarten Gitterplätzen $m-1$ und $m+1$ nicht verschwindende Werte annimmt. Wir gehen dann von einer kontinuierlichen zu einer diskreten Beschreibung über, d.h. $\psi(x) \rightarrow \psi_m$ mit $m \in \mathbb{Z}$ (siehe Abb. 2.1) und der Hamiltonian dieses Einteilchenproblems ohne Wechselwirkung lässt sich wie in (1.6) schreiben als

$$H\psi_m = -J(\psi_{m-1} + \psi_{m+1}) + V\psi_m \quad (2.1)$$

und ist der Ausgangspunkt für die weiteren Betrachtungen. Die kinetische Energie entspricht dem "Hüpfen" des Teilchens zu den benachbarten Gitterplätzen und wird durch den sogenannten Hüpfparsparameter J charakterisiert. Die potentielle Energie ist durch das jeweilige Potential V am

Ort m gegeben. Der Hamiltonian nimmt im Ortsraum also die folgende Form an:

$$H = \begin{pmatrix} \dots & & & & \\ & -J & V & -J & 0 & 0 \\ & 0 & -J & V & -J & 0 \\ & 0 & 0 & -J & V & -J \\ & & & & & \dots \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Zwei benachbarte Gitterplätze an denen jeweils das Potential V vorliegt sind durch die Nebendiagonalelemente $-J$ miteinander gekoppelt. Dieses System ist offensichtlich translationsinvariant bezüglich der diskreten Ortskoordinate m . Eine Fouriertransformation bezüglich dieser führt uns auf:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_m(H\psi_m)(k) &= -J(e^{-ik}\tilde{\psi}_k + e^{ik}\tilde{\psi}_k) + V\tilde{\psi}_k \\ \tilde{H}\tilde{\psi}_k &= -J(e^{-ik} + e^{ik})\tilde{\psi}_k + V\tilde{\psi}_k \\ &= (V - 2J\cos(k))\tilde{\psi}_k \end{aligned} \quad (2.3)$$

Der Hamiltonian ist also diagonal im Impulsraum mit den Eigenenergien:

$$\epsilon(k) = V - 2J\cos(k) \quad (2.4)$$

Aufgrund der 2π Periodizität im Impulsraum, können wir uns im Folgenden immer auf die 1. Brioullin-Zone $k \in [-\pi, \pi)$ beschränken.

2.1.2. Versetztes periodisches Potential

Betrachten wir nun den allgemeineren Fall des versetzten periodischen Potentials. An den diskreten Gitterplätzen herrscht abwechselnd das Potential V_1 bzw. V_2 und ein Teilchen hat nun 2 verschiedene Hüpfparameter J_1 und J_2 . Nummerieren wir die Gitterplätze erneut mit m , lässt sich der Hamiltonian schreiben als:

$$H\psi_m = \begin{cases} -J_1\psi_{m-1} - J_2\psi_{m+1} + V_1\psi_m & , m \text{ ungerade} \\ -J_2\psi_{m-1} - J_1\psi_{m+1} + V_2\psi_m & , m \text{ gerade} \end{cases} \quad (2.5)$$

Im Ortsraum hat der Hamiltonian also wieder eine tridiagonale Form mit den jeweiligen Potentialen auf der Diagonalen und den jeweiligen Hüpfparametern auf den Nebendiagonalen, die die Kopplung zweier Gitterplätze beschreiben:

$$H = \begin{pmatrix} \dots & & & & \\ & -J_1 & V_1 & -J_2 & 0 & 0 \\ & 0 & -J_2 & V_2 & -J_1 & 0 \\ & 0 & 0 & -J_1 & V_1 & -J_2 \\ & & & & & \dots \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

Das System ist nun offensichtlich nicht länger translationsinvariant bezüglich der Koordinate m . Verdoppeln wir hingegen die Einheitszelle, nummerieren diese mit n und führen wir eine zwei-

teilige Unterstruktur j ein, erhalten wir die Translationsvarianz der Koordinate n (siehe Abb. 2.2). Dabei gibt $j = 1, 2$ an, auf welchem der beiden möglichen Gitterplätze innerhalb einer Einheitszelle sich das Teilchen befindet. Diese alternative Beschreibung ist allerdings keine "echte" Verdoppelung der Einheitszelle, da diese nun nur noch an die nächstliegenden Hälften der beiden benachbarten Zellen gekoppelt ist. Diese Tatsache werden wir beim Streuprobblem ausnutzen. Da wir uns im Folgenden nur noch für das versetzte periodische Potential interessieren, setzen wir der Einfachheit halber ab hier die Größe der neuen Einheitszelle auf $2a = 1$.

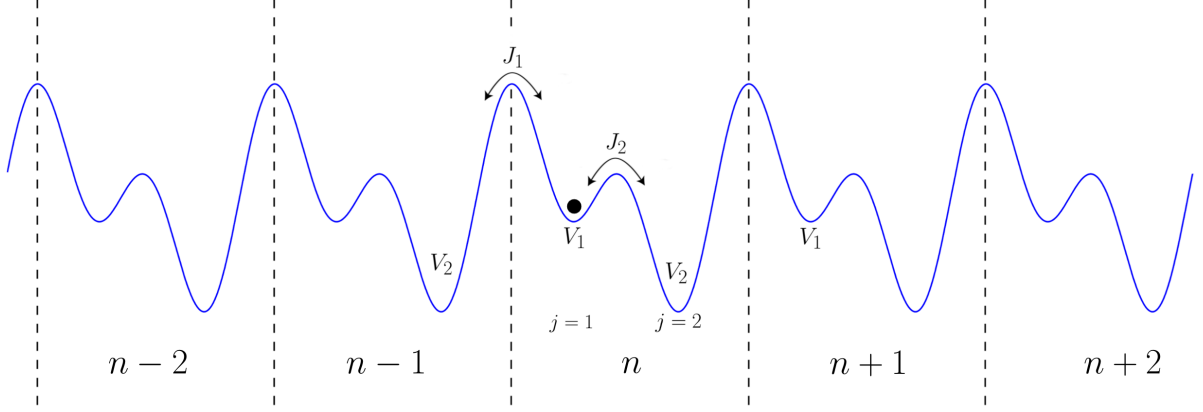


Abbildung 2.2. Ein Teilchen im versetzten periodischen Potential im Zustand $\psi_{n,j=1}$

Ein Zustand in diesem System wird nun durch die Indizes $n \in \mathbb{Z}$ und $j \in \{1, 2\}$ beschrieben und der Hamiltonian lautet:

$$H\psi_{n,j} = \begin{cases} -J_1\psi_{n-1,j+1} - J_2\psi_{n,j+1} + V_j\psi_{n,j} & , j = 1 \\ -J_1\psi_{n+1,j-1} - J_2\psi_{n,j-1} + V_j\psi_{n,j} & , j = 2 \end{cases} \quad (2.7)$$

Dies lässt sich per Fouriertransformation bezüglich der Koordinate n in die folgende Form bringen:

$$\mathcal{F}_n(H\psi_{n,j})(k) = \begin{cases} -J_1e^{-ik}\tilde{\psi}_{k,j+1} - J_2\tilde{\psi}_{k,j+1} + V_1\tilde{\psi}_{k,j} & , j = 1 \\ -J_1e^{ik}\tilde{\psi}_{k,j-1} - J_2\tilde{\psi}_{k,j-1} + V_2\tilde{\psi}_{k,j} & , j = 2 \end{cases} \quad (2.8)$$

Im Impulsraum ist der Hamiltonian also blockdiagonal mit den folgenden Blöcken in der Basis der Unterstruktur $j = 1, 2$:

$$\tilde{H}(k) = \begin{pmatrix} V_1 & -J_1e^{-ik} - J_2 \\ -J_1e^{ik} - J_2 & V_2 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

Die Eigenwerte lassen sich nun analytisch als Nullstellen des charakteristischen Polynoms bestimmen, d.h. $\det(\tilde{H} - \epsilon \cdot \mathbb{1}) \stackrel{!}{=} 0$. Durch das Einführen der Unterstruktur j konnte wir also die verbliebene räumliche Symmetrie des Systems nutzen, um zu einer Diagonalmatrix im Impulsraum zu gelangen mit den Eigenenergien

$$\epsilon_{\pm}(k) = \frac{V_1 + V_2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{V_1 - V_2}{2}\right)^2 + J_1^2 + J_2^2 + 2J_1J_2\cos(k)}, \quad (2.10)$$

welche in Abbildung 2.3 zu sehen sind. Die Bandbreite wird durch die Hüpfparameter J bestimmt und die Potentiale bewirken eine konstante Verschiebung des Spektrums.

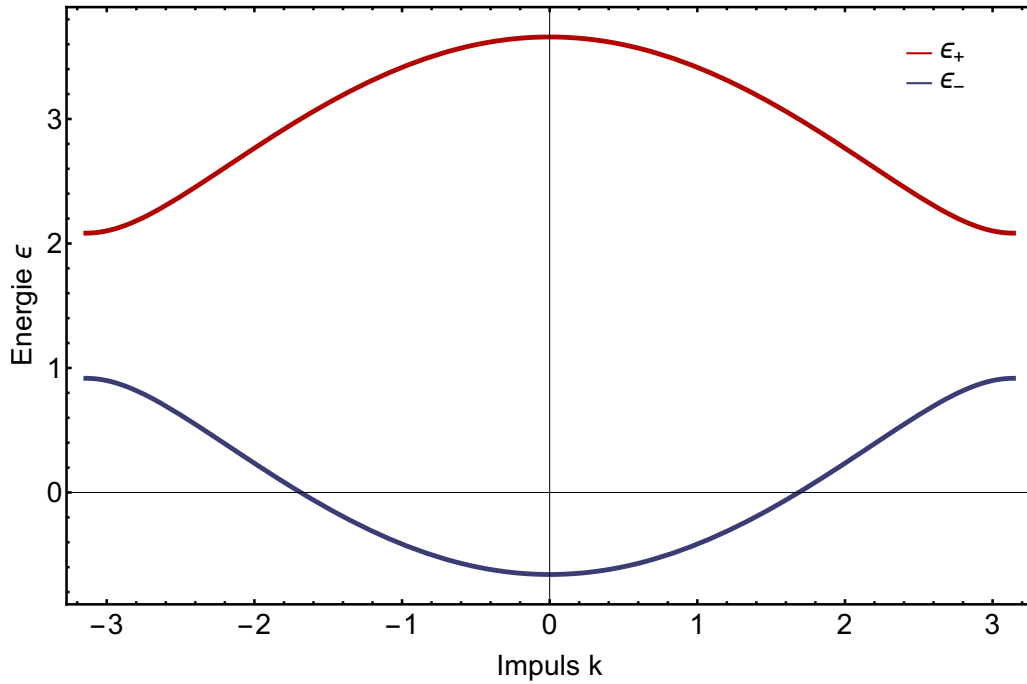


Abbildung 2.3. Energiebänder im versetzten periodischen Potential für Parameter $V_1 = 1$, $V_2 = 2$, $J_1 = 0.9$, $J_2 = 1.2$

Der Zustandsraum eines Teilchens in diesem System ist nun zweidimensional, das heißt ein Zustand kann durch einen zweidimensionalen Vektor $\psi_n = (\psi_{n,1}, \psi_{n,2})^T$ beschrieben werden. Die stationären Zustände des Systems sind die Energieeigenzustände, die wir als Lösungen der Schrödingergleichung $H\psi = E\psi$ erhalten. In Ortsdarstellung lautet diese:

$$E\psi_n = \begin{pmatrix} 0 & -J_1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \psi_{n-1} + \begin{pmatrix} V_1 & -J_2 \\ -J_2 & V_2 \end{pmatrix} \psi_n + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -J_1 & 0 \end{pmatrix} \psi_{n+1} \quad (2.11)$$

Setzen wir den Ansatz $\psi_n(k) = u_{\pm}(k)e^{ikn}$ mit $u_{\pm}(k) \in \mathbb{C}^2$ ein und verzichten auf Nennung des Arguments k , folgt:

$$\begin{aligned} E_{\pm} u_{\pm} e^{ikn} &= \begin{pmatrix} 0 & -J_1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} u_{\pm} e^{ik(n-1)} + \begin{pmatrix} V_1 & -J_2 \\ -J_2 & V_2 \end{pmatrix} u_{\pm} e^{ikn} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -J_1 & 0 \end{pmatrix} u_{\pm} e^{ik(n+1)} \\ \Leftrightarrow E_{\pm} u_{\pm} &= \left[\begin{pmatrix} 0 & -J_1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-ik} + \begin{pmatrix} V_1 & -J_2 \\ -J_2 & V_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -J_1 & 0 \end{pmatrix} e^{ik} \right] u_{\pm} \\ &\stackrel{(2.9)}{\Leftrightarrow} \epsilon_{\pm} u_{\pm} = \tilde{H} u_{\pm} \end{aligned} \quad (2.12)$$

Unser Ansatz löst also die Schrödingergleichung, wobei wir $u_{\pm}(k)$ als Eigenvektoren zu den Eigenenergien $\epsilon_{\pm}(k)$ des Hamiltonians (2.9) identifiziert haben.

2.2. Zweiteilchensystem

2.2.1. Beschreibung in Relativ- und Schwerpunktkoordinaten

Mit diesem Wissen können wir uns nun dem Zweiteilchensystem widmen, in dem sich zwei einzelne Teilchen in dem versetzten periodischen Potential (siehe Abb. 2.2) befinden. Wir nehmen an, dass die Teilchen nur dann wechselwirken, wenn sich beide in der gleichen Zelle n und auf der gleichen Unterposition j befinden. Andernfalls ist das Problem separabel und entspricht der Kombination zweier Einteilchensysteme. Der zugehörige Hamiltonian lässt sich also schreiben als

$$H = H_1 + H_2 + H_{\text{int}}, \quad (2.13)$$

wobei $H_1 \equiv H_1 \otimes \mathbb{1}_2$ und $H_2 \equiv \mathbb{1}_1 \otimes H_2$ auf das jeweilige Teilchen mit dem Einteilchen-Hamiltonian (2.7) wirken und auf das andere mit dem Einsoperator. Daher lässt sich im nicht-wechselwirkenden Fall ($H_{\text{int}} = 0$) die Gesamtwellenfunktion als Produkt der Einteilchen Wellenfunktionen schreiben, d.h. $\psi_{k_1, \alpha_1, k_2, \alpha_2}(n_1, j_1, n_2, j_2) = \psi_{k_1, \alpha_1}(n_1, j_1) \otimes \psi_{k_2, \alpha_2}(n_2, j_2)$. Mit den bereits bekannten Lösungen $(u_{k, \alpha}, \epsilon_{k, \alpha})$, wobei α von nun an der Bandindex ist, können wir die Zweiteilchenlösungen im nicht wechselwirkenden Fall konstruieren. Möglichst allgemein nehmen wir unterscheidbare Teilchen an, die unterschiedliche Potential erfahren und unterschiedliche Hüpfparameter haben. Die Eigenschaft der Unterscheidbarkeit nehmen wir auch dann an, wenn die Parameter beider Teilchen gleichsetzen. Im Folgenden nummeriert der erste Index immer das Teilchen und der zweite die Unterposition; z.B. ist $V_{1,2}$ das Potential, was Teilchen 1 auf Unterposition 2 erfährt. Für das Teilchen i kennen wir bereits den Satz Lösungen $(u_{k_i, \alpha_i} = (u_{k_i, \alpha_i}^{j_i=1}, u_{k_i, \alpha_i}^{j_i=2})^T, \epsilon_{k_i, \alpha_i})$. Damit folgt für unsere Zweiteilchenlösung in der Basis der Unterpositionen $\{(j_1 = 1, j_2 = 1), (j_1 = 1, j_2 = 2), (j_1 = 2, j_2 = 1), (j_1 = 2, j_2 = 2)\}$

$$\psi_{k_1, \alpha_1, k_2, \alpha_2}(n_1, j_1, n_2, j_2) = \begin{pmatrix} u_{k_1, \alpha_1}^1 \cdot u_{k_2, \alpha_2}^1 \\ u_{k_1, \alpha_1}^1 \cdot u_{k_2, \alpha_2}^2 \\ u_{k_1, \alpha_1}^2 \cdot u_{k_2, \alpha_2}^1 \\ u_{k_1, \alpha_1}^2 \cdot u_{k_2, \alpha_2}^2 \end{pmatrix} e^{ik_1 n_1} e^{ik_2 n_2} \quad \text{und} \quad E_{k_1 k_2}^{\alpha_1 \alpha_2} = \epsilon_{k_1}^{\alpha_1} + \epsilon_{k_2}^{\alpha_2} \quad (2.14)$$

Mit der Vorarbeit des vorherigen Kapitels 2.1 haben wir das Zweiteilchenproblem ohne Wechselwirkung also bereits gelöst. Um uns nun dem tatsächlichen Streuproblem zu nähern, gehen wir zunächst einen Schritt zurück und beschäftigen uns mit der Ortsdarstellung der stationären Schrödingergleichung. Anschließend führen wir Relativkoordinaten ein, um das Problem als effektive Einteilchenstreuung an einem Wechselwirkungspotential zu formulieren. Seien (n_1, j_1) und (n_2, j_2) die Positionen der beiden Teilchen, dann definieren wir die Schwerpunkt- und Relativkoordinate:

$$\bar{n} = \frac{n_1 + n_2}{2} \quad \text{und} \quad \Delta = n_2 - n_1 \quad (2.15)$$

Mit der eindeutigen Zuordnung $n_1 = \bar{n} - \frac{\Delta}{2}$ und $n_2 = \bar{n} + \frac{\Delta}{2}$ sind die beiden Beschreibungen $\psi(n_1, n_2, j_1, j_2)$ und $\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2)$ äquivalent. Die Wechselwirkung hat in dieser Formulierung die Form $H_{\text{int}} = U \cdot \delta_{\Delta, 0} \cdot \delta_{j_1, j_2} \cdot \mathbb{1}$. Dabei charakterisiert U die Stärke der Wechselwirkung. Diese

lässt sich nun wieder in der Basis der Unterpositionen j_1, j_2 als folgende Matrix schreiben.

$$H_{\text{int}} = \begin{pmatrix} U & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & U \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

Im Anhang (siehe A.1) ist ausgeführt wie die einzelnen Summanden des Hamiltonians (2.13) auf die Gesamtwellenfunktion in Relativ- und Schwerpunktbeschreibung wirken. Dies funktioniert ganz analog zum in Kapitel 2.1 ausgeführten Fall, nur dass wir bei der Fallunterscheidung die möglichen Unterpositionen beider Teilchen berücksichtigen. Außerdem müssen wir uns überlegen, wie sich die einzelnen Impulse k_1 und k_2 in Relativ- und Schwerpunktimпульs transformieren. Dazu nutzen wir aus, dass die beiden Darstellungen $\psi(n_1, n_2, j_1, j_2)$ und $\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2)$ äquivalent sind und setzen eine Fouriertransformation der einzelnen Koordinaten n_1 und n_2 an. Diese schreiben wir mit Hilfe von (2.15) um und können dadurch den Schwerpunkt- und Relativimpuls identifizieren:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{n_1, n_2}(\psi(n_1, n_2, j_1, j_2))(k_1, k_2) &= \sum_{n_1} \sum_{n_2} e^{ik_1 n_1} e^{ik_2 n_2} \psi(n_1, n_2, j_1, j_2) \\ &\stackrel{(2.15)}{=} \sum_{\bar{n}} \sum_{\Delta} e^{ik_1(\bar{n} - \frac{\Delta}{2})} e^{ik_2(\bar{n} + \frac{\Delta}{2})} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ &= \sum_{\bar{n}} \sum_{\Delta} e^{i(k_1 + k_2)\bar{n}} e^{i(\frac{k_2 - k_1}{2})\Delta} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ &\equiv \sum_{\bar{n}} \sum_{\Delta} e^{ik\bar{n}} e^{iq\Delta} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ &= \mathcal{F}_{\bar{n}, \Delta}(\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k, q) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Wir lesen daraus den Schwerpunktimпульs k und den Relativimpuls q ab:

$$k = k_1 + k_2 \quad \text{und} \quad q = \frac{k_2 - k_1}{2} \quad (2.18)$$

Die Fouriertransformation bezüglich der Schwerpunktkoordinate $\bar{n} \rightarrow k$ (siehe A.1) führt in der Basis der Unterpositionen j_1, j_2 auf folgende Matrixdarstellung des Hamiltonians:

$$\begin{aligned}
 H\psi_k(\Delta) = & \begin{pmatrix} 0 & -J_{2,1}e^{-i\frac{k}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -J_{1,1}e^{i\frac{k}{2}} & 0 & 0 & -J_{2,1}e^{-i\frac{k}{2}} \\ 0 & -J_{1,1}e^{i\frac{k}{2}} & 0 & 0 \end{pmatrix} \psi_k(\Delta - 1) \\
 & + \begin{pmatrix} V_{1,1} + V_{2,1} + U\delta_{\Delta,0} & -J_{2,2} & -J_{1,2} & 0 \\ -J_{2,2} & V_{1,1} + V_{2,2} & 0 & -J_{1,2} \\ -J_{1,2} & 0 & V_{1,2} + V_{2,1} & -J_{2,2} \\ 0 & -J_{1,2} & -J_{2,2} & V_{1,2} + V_{2,2} + U\delta_{\Delta,0} \end{pmatrix} \psi_k(\Delta) \\
 & + \begin{pmatrix} 0 & 0 & -J_{1,1}e^{-i\frac{k}{2}} & 0 \\ -J_{2,1}e^{i\frac{k}{2}} & 0 & 0 & -J_{1,1}e^{-i\frac{k}{2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -J_{2,1}e^{i\frac{k}{2}} & 0 \end{pmatrix} \psi_k(\Delta + 1) \\
 \equiv & M_1\psi_k(\Delta - 1) + M_2\psi_k(\Delta) + M_3\psi_k(\Delta + 1)
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

Wir wissen bereits, dass die Lösungen der stationären Schrödingergleichung für $\Delta \neq 0$ von der Form sind:

$$\psi_k(q, \Delta) = u_k(q)e^{iq\Delta} \tag{2.20}$$

Setzen wir diesen Ansatz ein, folgt:

$$\begin{aligned}
 E \cdot u_k(q)e^{iq\Delta} &= M_1 \cdot u_k(q)e^{iq(\Delta-1)} + M_2 \cdot u_k(q)e^{iq\Delta} + M_3 \cdot u_k(q)e^{iq(\Delta+1)} \\
 E \cdot u_k(q) &= \underbrace{[M_1e^{-iq} + M_2 + M_3e^{iq}]}_{\equiv M} \cdot u_k(q)
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

D.h. $u_k(q) \in \mathbb{C}^4$ sind gerade die Eigenvektoren der folgenden Matrix:

$$M = \begin{pmatrix} V_{1,1} + V_{2,1} & -J_{2,1}e^{-i(\frac{k}{2}+q)} - J_{2,2} & -J_{1,1}e^{-i(\frac{k}{2}-q)} - J_{1,2} & 0 \\ -J_{2,1}e^{i(\frac{k}{2}+q)} - J_{2,2} & V_{1,1} + V_{2,2} & 0 & -J_{1,1}e^{-i(\frac{k}{2}-q)} - J_{1,2} \\ -J_{1,1}e^{i(\frac{k}{2}-q)} - J_{1,2} & 0 & V_{1,2} + V_{2,1} & -J_{2,1}e^{-i(\frac{k}{2}+q)} - J_{2,2} \\ 0 & -J_{1,1}e^{i(\frac{k}{2}-q)} - J_{1,2} & -J_{2,1}e^{i(\frac{k}{2}+q)} - J_{2,2} & V_{1,2} + V_{2,2} \end{pmatrix}$$

Außerdem wissen wir bereits, wie sich die Eigenwerte des Zweiteilchenproblems, also die Eigenwerte der Matrix M , für den Fall $\Delta \neq 0$ zusammensetzen und können somit die bereits analytisch gefundenen Eigenwerte des Einteilchenproblems nutzen, um die vier Energiebänder anzugeben:

$$(2.10) \Rightarrow E_{k/2-q, k/2+q}^{\alpha_1, \alpha_2} = \epsilon_{k/2-q}^{\alpha_1} + \epsilon_{k/2+q}^{\alpha_2} \tag{2.22}$$

mit

$$\epsilon_{k/2-q}^{\alpha_1} = \frac{V_{1,1} + V_{1,2}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{V_{1,1} + V_{1,2}}{2}\right)^2 + J_{1,1}^2 + J_{1,2}^2 + 2J_{1,1}J_{1,2}\cos(\frac{k}{2} - q)} \quad (2.23)$$

$$\epsilon_{k/2+q}^{\alpha_2} = \frac{V_{2,1} + V_{2,2}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{V_{2,1} + V_{2,2}}{2}\right)^2 + J_{2,1}^2 + J_{2,2}^2 + 2J_{2,1}J_{2,2}\cos(\frac{k}{2} + q)} \quad (2.24)$$

In Abbildung 2.4 sehen wir die Energiebänder für einen festen Schwerpunktimпульs $k = 2$ in Abhängigkeit des Relativimpuls q geplottet. Für unterschiedliche Parametersätze der beiden Teilchen sind die Bänder für $k \neq 0$ nicht symmetrisch in q . Die Symmetrie der Einteilchenbänder ist erhalten und entspricht in diesem Bild $k \rightarrow -k$, $q \rightarrow -q \Leftrightarrow k_1 \rightarrow -k_1$, $k_2 \rightarrow -k_2$.

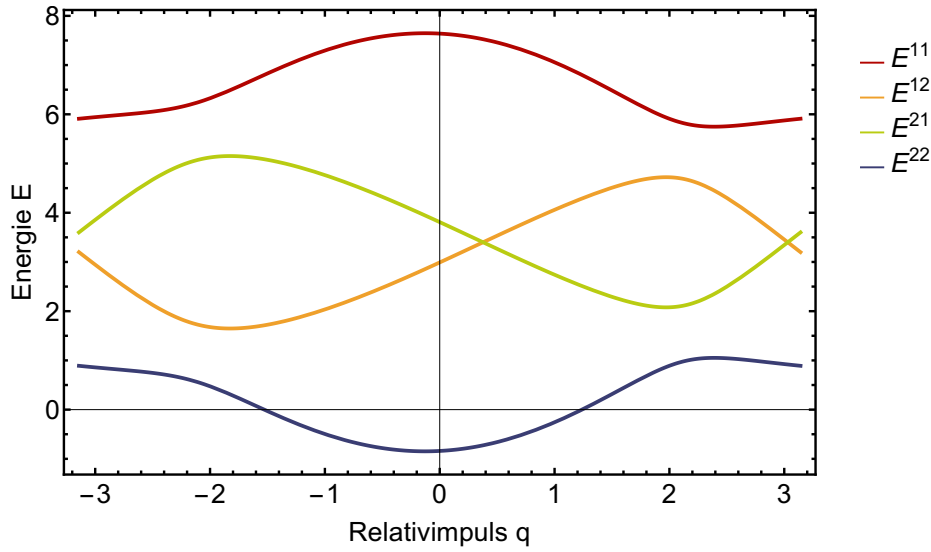


Abbildung 2.4. Energiebänder des Zweiteilchensystems mit den Parametern $k = 2$, $J_{1,1} = 0.9$, $J_{1,2} = 1.2$, $V_{1,1} = 1$, $V_{1,2} = 2$, $J_{2,1} = 1.1$, $J_{2,2} = 1.5$, $V_{2,1} = 1.5$, $V_{2,2} = 2.3$

2.2.2. Streuprozess

Für den Streuprozess nehmen wir die in Abbildung 2.5 dargestellte Situation an. Wir wissen, bei $\Delta = 0$ findet die Wechselwirkung mit dem Potential U statt und wir kennen bereits die Lösungen für die Bereiche $\Delta < 0$ und $\Delta > 0$. Daher wählen wir einen allgemeinen Streuansatz mit einfallender, reflektierter und transmittierter Welle und die stationäre Schrödingergleichung (2.19), jeweils aufgestellt für $\Delta \in \{-1, 0, 1\}$, liefert uns die Anschlussbedingungen. Wie bereits in Kapitel 2.1 erwähnt, sind jeweils nur die Hälften der doppelten Einheitszellen an die nächstliegenden Hälften der benachbarten Zellen gekoppelt. Dies hat zur Folge, dass aufgrund unserer

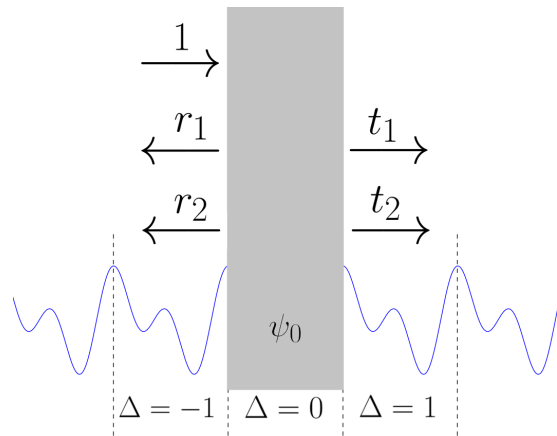


Abbildung 2.5. Illustration Streuansatz

4-komponentigen Struktur, die Verbindungen $-1 \leftrightarrow 0$ und $0 \leftrightarrow 1$ auf 8 effektive Gleichungen führen, die in den 12 Gleichungen enthalten sind, die wir aus der Schrödingergleichung erhalten. Dies korrespondiert mit der Tatsache, dass die Matrizen M_1 und M_3 , die die Kopplung beschreiben, jeweils nur Rang 2 haben. Die Wellenfunktion bei $\Delta = 0$ liefert uns 4 Unbekannte $(\psi_{0,1}, \psi_{0,2}, \psi_{0,3}, \psi_{0,4})^T$. Damit das Gleichungssystem ausreichend bestimmt ist, wählen wir folgenden Streuansatz, bei dem wir ein von links einlaufendes Teilchen mit Energie E_{in} und Impuls q_{in} annehmen:

$$\psi_k(\Delta) = \begin{cases} 1 \cdot u_{k,\text{in}}(q_{\text{in}}) \cdot e^{iq_{\text{in}}\Delta} + r_1 \cdot u_{k,r_1}(q_{r_1}) \cdot e^{iq_{r_1}\Delta} + r_2 \cdot u_{k,r_2}(q_{r_2}) \cdot e^{iq_{r_2}\Delta} & , \Delta < 0 \\ (\psi_{0,1}, \psi_{0,2}, \psi_{0,3}, \psi_{0,4})^T & , \Delta = 0 \\ t_1 \cdot u_{k,t_1}(q_{t_1}) \cdot e^{iq_{t_1}\Delta} + t_2 \cdot u_{k,t_2}(q_{t_2}) \cdot e^{iq_{t_2}\Delta} & , \Delta > 0 \end{cases} \quad (2.25)$$

Wir nehmen also jeweils zwei reflektierte und zwei transmittierte Wellen an, wobei $q_{\text{in}} = q_{t_1}$ und ordnen der einfallenden Welle den Koeffizienten "1" zu. Dabei benutzen wir den Ansatz (2.20) aus dem vorherigen Kapitel. Innerhalb des gesamten Energiebereichs (siehe Abb.2.4), den die Bänder des Zweiteilchensystems abdecken, finden wir zu jeder beliebigen Energie E_{in} , ausgenommen spezielle Punkte wie Extrema und Entartung, vier Impulse $q_1, q_2, q_3, q_4 \in \mathbb{C}$, sodass gilt:

$$E_{\text{in}} = E_{k/2-q_1, k/2+q_1}^{1,1} = E_{k/2-q_2, k/2+q_2}^{1,2} = E_{k/2-q_3, k/2+q_3}^{2,1} = E_{k/2-q_4, k/2+q_4}^{2,2} \quad (2.26)$$

Dabei führen Impulse mit nicht verschwindenden Imaginärteil zu exponentiell abfallenden und rein reelle zu propagierenden Lösungen, da gilt:

$$e^{iq\Delta} = e^{i(\Re(q)+i\Im(q))\Delta} = e^{i\Re(q)\Delta} e^{-\Im(q)\Delta} \longrightarrow 0 \quad \text{für } \Delta \rightarrow \infty \text{ und } \Im(q) > 0 \quad (2.27)$$

Bereits in Abbildung 2.4 sehen wir, dass wir entweder 4 reelle Impulse, 4 mit endlichem Imaginärteil oder jeweils 2 davon finden. Im Folgenden gehen wir aber davon aus, dass sich das einfallende Teilchen in einem Energieeigenzustand des Systems befindet und folglich eine Energie auf den Bändern besetzt. Die gesuchten Impulse zu einer vorgegebenen Energie E_{in} finden wir numerisch mit Hilfe eines `mathematica` Codes. Die Zuordnung der Impulse zu den reflektierten und transmittierten Lösungen geschieht über das Vorzeichen der Geschwindigkeiten. Im Anhang A.2 ist gezeigt, dass wir diese über $v(q) = \frac{\partial E}{\partial q} = u^*(q) \cdot \frac{\partial H}{\partial q} \cdot u(q)$ berechnen können. Mit Hilfe eines weiteren `mathematica` Codes lösen wir anschließend das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} E_{\text{in}}\psi_k(-1) &= M_1\psi_k(-2) + M_2\psi_k(-1) + M_3\psi_k(0) \\ E_{\text{in}}\psi_k(0) &= M_1\psi_k(-1) + M_2\psi_k(0) + M_3\psi_k(1) \\ E_{\text{in}}\psi_k(1) &= M_1\psi_k(0) + M_2\psi_k(1) + M_3\psi_k(2) \end{aligned} \quad (2.28)$$

und damit das zeitunabhängige Streuproblem zweier Teilchen im versetzten periodischen Potential. Die numerisch gefundenen Streuanteile $|r_i|^2$, $|t_i|^2$ überprüfen wir innerhalb des Codes auf Wahrscheinlichkeitserhaltung. Dabei muss gelten, dass die Summe der Anteile der propagierenden Lösungen, gewichtet mit den jeweiligen Geschwindigkeiten, gleich der Geschwindigkeit der

einlaufenden Welle ist. In Abbildung 2.6 sehen wir die Verteilung der gefundenen Impulse in der komplexen Zahlenebene für einen diskreten Scan des Energiebereichs aus Abbildung 2.4 in Schritten von 0.2. Als Beispiel ist das gefundene Quartett zu Energie $E_{\text{in}} = 6.5$ in rot markiert, das aus 2 reellen Impulsen und 2 mit endlichem Imaginärteil besteht. Für $k = 0$ liegen alle gefundenen Impulse auf den Achsen und auf um π zur imaginären Achse verschobenen Ästen (siehe Anhang A.3). Dabei bilden die Reellen und die Imaginären jeweils symmetrische Pärchen $\pm q$. Bei Schwerpunktimpulsen $k \neq 0$ verschieben und verformen sich die Äste, wie in Abbildung 2.6 zu sehen.

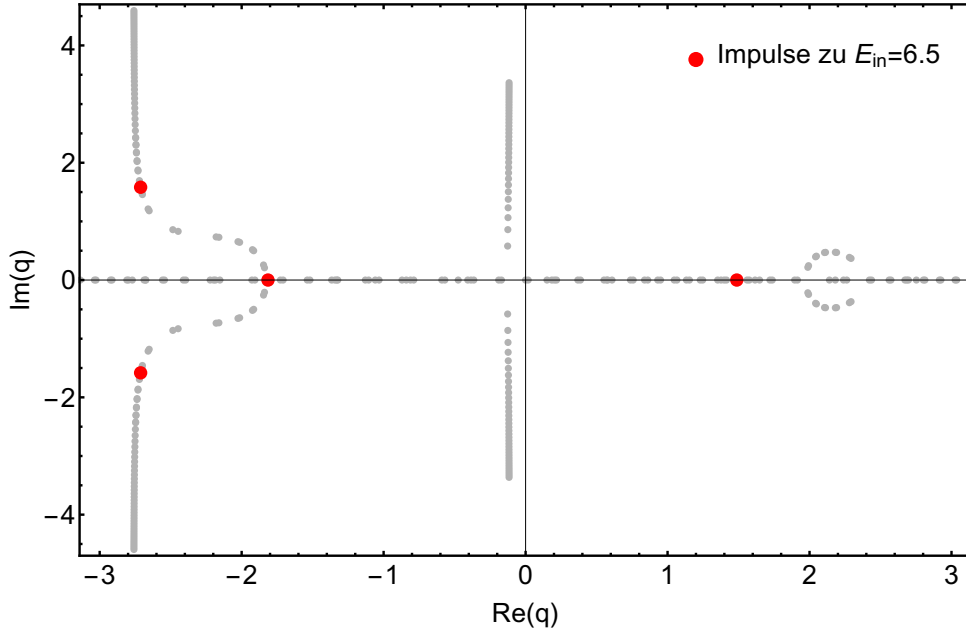


Abbildung 2.6. Verteilung der Impulse in der komplexen Ebene für gesamten Bandbereich bei $k = 2$ (siehe Abb. 2.4)

Bei diesen Streuprozessen im zeitunabhängigen System gilt Energie- und Schwerpunktimpulserhaltung. Die möglichen Streuungen in propagierende Kanäle sind durch die reellen Schnittpunkte der Bänder mit der einlaufenden Energie E_{in} gegeben. Im Fall $k = 0$ gilt $k_1 = -k_2$ und es gibt im oberen und unteren Band, also $\alpha_1 = \alpha_2$, nur die trivialen Möglichkeiten der Streuung $k'_1 = k_1$, $k'_2 = k_2$ und $k'_1 = -k_1$, $k'_2 = -k_2$ mit jeweils mit $\alpha'_1 = \alpha_1$, $\alpha'_2 = \alpha_2$. Für den Bereich $\alpha_1 \neq \alpha_2$ kommen noch nichttriviale Impulsänderungen $k'_i \neq \pm k_i$ sowie Änderung der Bänder $\alpha'_i \neq \alpha_i$ hinzu. Zur Veranschaulichung betrachten wir den oben bereits dargestellten Fall mit $k = 2$ und stellen die möglichen Streuungen im Zweiteilchenbild mit Relativimpuls q den entsprechenden Prozessen im Einteilchenbild gegenüber. Dabei gilt es zu beachten, dass die 3 Bilder jeweils unterschiedliche Energieskalen haben.

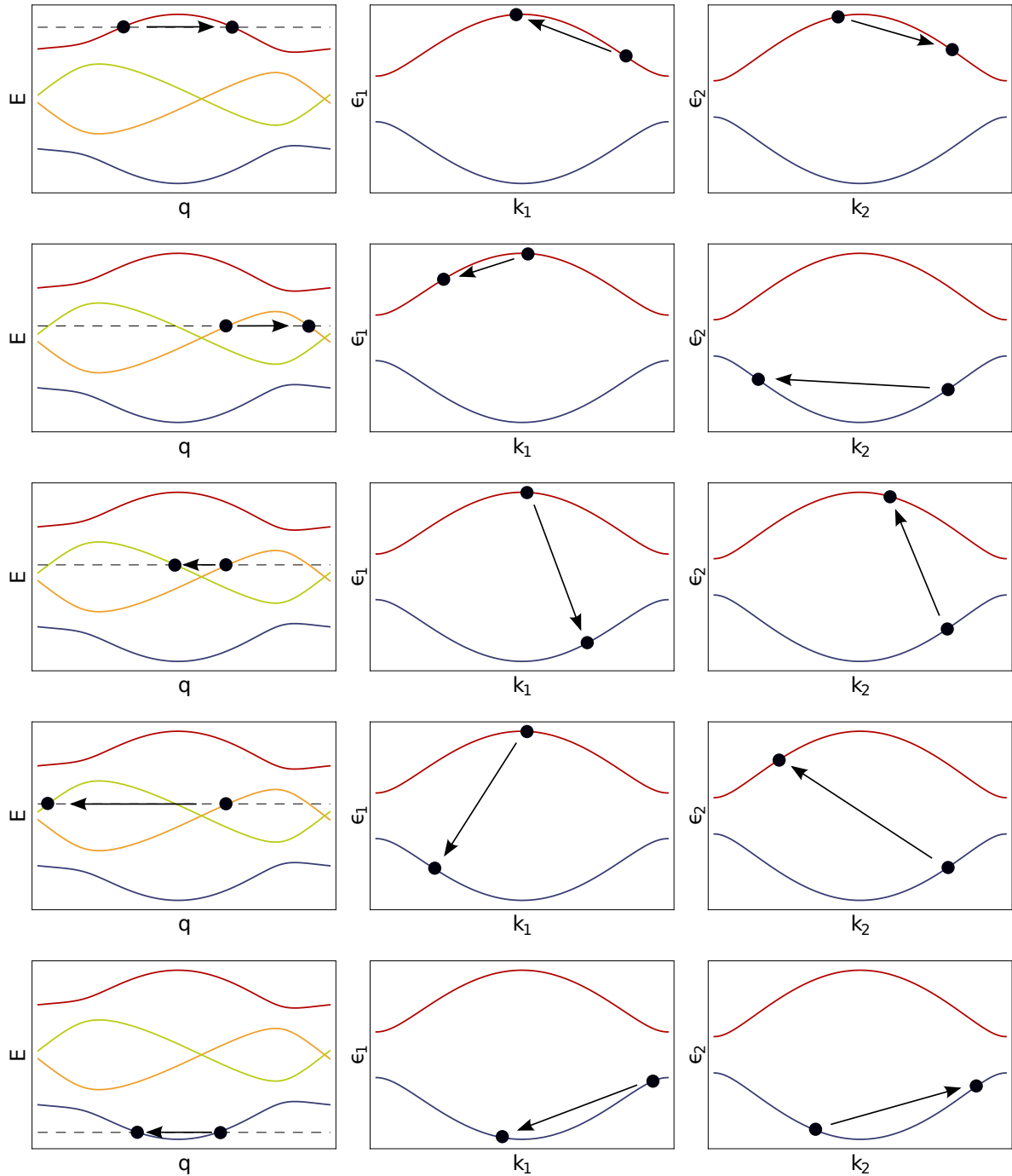


Abbildung 2.7. Illustration der möglichen Streuprozesse jeweils im Zweiteilchen- und Einteilchenbild zeilenweise. Impulse innerhalb der 1. Brillouin-Zone, aber Energieskalen unterschiedlich. Gestrichelte Linie kennzeichnet jeweils E_{in} . Erste und letzte Zeile: 2 reelle Schnittpunkte und $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha'_1 = \alpha'_2$. Dazwischen: 4 reelle Schnittpunkte.

Exemplarisch schauen wir uns die Streuanteile der propagierenden Lösungen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U an. Dabei nehmen wir ein von links einfallendes Teilchen mit Energie $E_{\text{in}} = 4$ und Schwerpunktimпульs $k = 2$ an. In Abbildung 2.7 entspricht das den mittleren 3 Situationen. Da es 2 reflektierende und 2 transmittierende Kanäle gibt, haben wir eine Wahlfreiheit für das einlaufende Teilchen und entscheiden uns für das mit positiver Geschwindigkeit

und betraglich kleinsten Impuls. Für $U = 0$ ist der Anteil der Transmission mit gleichem Impuls $q' = q_{\text{in}}$ gleich $|t_1|^2 = 1$ und nimmt dann stark ab, wobei der Anteil der Reflektion, bei der die Teilchen in Einteilchenbild ihre Zustände und damit die Richtungen tauschen, gleichermaßen zunimmt. Für große U dominiert dieser Kanal und führt im Limes $U \rightarrow \infty$ zur Totalreflektion. Außerdem sehen wir, dass die Transmissions- bzw. Reflektionsanteile der beiden anderen Kanäle ein bis zwei Größenordnung kleiner sind.

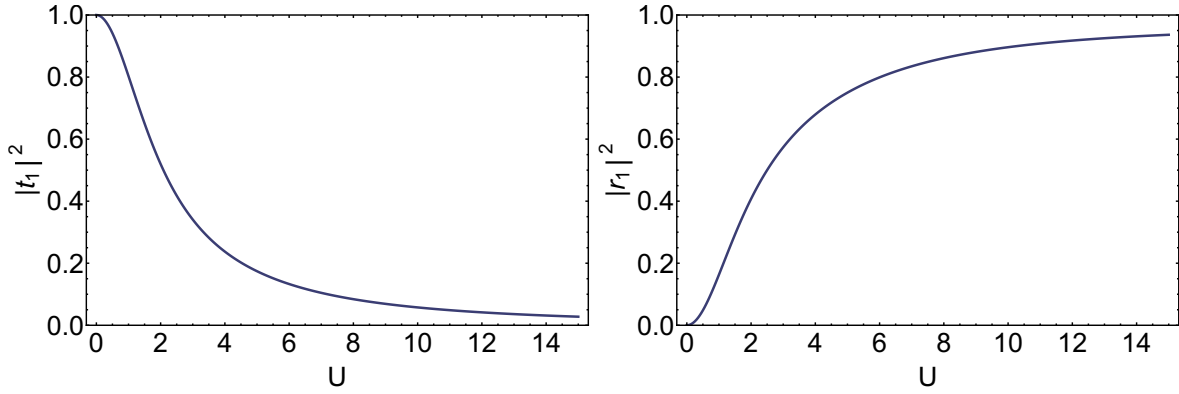


Abbildung 2.8. Transmissions- und Reflektionsanteile für einlaufenden und getauschten Zustand

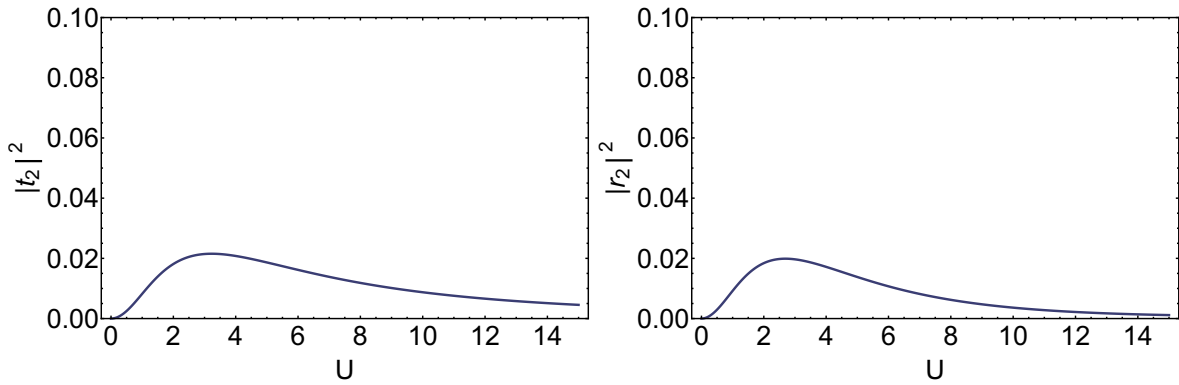


Abbildung 2.9. Transmissions- und Reflektionsanteile für 2 weitere Zustände

3. Zeitabhängiges System

3.1. Einteilchensystem

Ausgangspunkt ist die zeitabhängige Schrödingergleichung des Einteilchensystems

$$i\partial_t\psi(k,t) = \tilde{H}(k,t)\psi(k,t) \quad (3.1)$$

mit dem Hamiltonian (2.9):

$$\tilde{H}(k,t) = \begin{pmatrix} V_1(t) & -J_1(t)e^{-ik} - J_2(t) \\ -J_1(t)e^{ik} - J_2 & V_2(t) \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

wobei alle Parameter nun zeitabhängig mit Periode $T = \frac{2\pi}{\Omega}$ sind und relativer Phasenverschiebung $\varphi \in \mathbb{R}$:

$$\begin{aligned} J_1(t) &= J_1^0 + J_1^1 \cos(\Omega t) & V_1(t) &= V_1^0 + V_1^1 \cos(\Omega t + \varphi) \\ J_2(t) &= J_2^0 + J_2^1 \cos(\Omega t) & V_2(t) &= V_2^0 + V_2^1 \cos(\Omega t + \varphi) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Wie in Kapitel 1.5 dargestellt, sind die Lösungen von der Form $\psi_\alpha(k,t) = e^{-i\varepsilon_\alpha(k)t} \sum_n e^{in\Omega t} \phi_{\alpha,n}(k)$, wobei wir den Index α auf eine Floquet-Zone der Breite Ω beschränken können. Eingesetzt erhalten wir:

$$\sum_n \varepsilon_\alpha(k) e^{in\Omega t} \phi_{\alpha,n}(k) = (\tilde{H}(k,t) - i\partial_t) \sum_n e^{in\Omega t} \phi_{\alpha,n}(k) \quad (3.4)$$

Um zur Darstellung dieser Schrödingergleichung im Raum der T periodischen Funktionen zu gelangen, der durch die Menge $\{e^{in\Omega t}\}_{n \in \mathbb{Z}}$ aufgespannt wird und auf dem wir folgendes Skalarprodukt definieren können

$$\langle f|g \rangle := \frac{1}{T} \int_0^T dt f^*(t)g(t) \quad (3.5)$$

nutzen wir die Relation (wobei $|n\rangle \equiv (\dots, 0, \underbrace{1}_n, 0, \dots)^T$ und $\langle t|n\rangle \equiv e^{in\Omega t}$)

$$\langle m|n\rangle = \underbrace{\langle m| \left(\frac{1}{T} \int_0^T |t\rangle \langle t| \right) |n\rangle}_1 = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{-i(m-n)\Omega t} = \delta_{mn} \quad (3.6)$$

und projizieren auf einen Vektor $|m\rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{-im\Omega t} \sum_n \varepsilon_\alpha(k) e^{in\Omega t} \phi_{\alpha,n}(k) &= \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{-im\Omega t} (\tilde{H}(k, t) - i\partial_t) \sum_n e^{in\Omega t} \phi_{\alpha,n}(k) \\ \varepsilon_\alpha(k) \phi_{\alpha,m}(k) &= \sum_n \left(\frac{1}{T} \int_0^T dt e^{-i(m-n)\Omega t} \tilde{H}(k, t) + n\Omega \delta_{mn} \cdot \mathbb{1} \right) \phi_{\alpha,n}(k) \\ \varepsilon_\alpha(k) \phi_{\alpha,m}(k) &= \sum_n (H_F(k))_{mn} \phi_{\alpha,n}(k) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Die Matricelemente des Floquet Hamiltonians sind also gegeben durch:

$$(H_F(k))_{mn} = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{-i(m-n)\Omega t} \tilde{H}(k, t) + n\Omega \delta_{mn} \cdot \mathbb{1} \quad (3.8)$$

und mit (3.2) lassen sich diese nun explizit berechnen

$$\begin{aligned} ((H_F(k))_{mn})_{11} &= (V_1^0 + n\Omega) \delta_{mn} + \frac{1}{2} V_1^1 e^{i\varphi} \delta_{mn-1} + \frac{1}{2} V_1^1 e^{-i\varphi} \delta_{mn+1} \\ ((H_F(k))_{mn})_{12} &= (-J_1^0 e^{-ik} - J_2^0) \delta_{mn} + (-\frac{1}{2} J_1^1 e^{-ik} - J_2^1) (\delta_{mn-1} + \delta_{mn+1}) \\ ((H_F(k))_{mn})_{21} &= (-J_1^0 e^{ik} - J_2^0) \delta_{mn} + (-\frac{1}{2} J_1^1 e^{ik} - J_2^1) (\delta_{mn-1} + \delta_{mn+1}) \\ ((H_F(k))_{mn})_{22} &= (V_2^0 + n\Omega) \delta_{mn} + \frac{1}{2} V_2^1 e^{i\varphi} \delta_{mn-1} + \frac{1}{2} V_2^1 e^{-i\varphi} \delta_{mn+1} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Im Folgenden werden wir auch die vereinfachte Notation verwenden in der $H_F(k)$ die gesamte Floquet Matrix bezeichnet und $\phi_\alpha(k) = (\dots, \phi_{\alpha,n-2}(k), \phi_{\alpha,n-1}(k), \phi_{\alpha,n}(k), \phi_{\alpha,n+1}(k), \phi_{\alpha,n+2}(k), \dots)^T$ ein Spaltenvektor ist, sodass sich die Floquet Eigenwertgleichung schreiben lässt als:

$$\varepsilon_\alpha(k) \phi_\alpha(k) = H_F(k) \phi_\alpha(k) \quad (3.10)$$

Mit Hilfe des Floquet Formalismus haben wir es geschafft, das periodisch zeitabhängige Problem auf ein zeitunabhängiges Eigenwertproblem abzubilden, dass wir theoretisch durch Diagonalisieren der Matrix lösen können. Hier wird aber direkt die Schwierigkeit deutlich, da der durch (3.8) definierte Floquet Hamiltonian eine unendlich große Matrix ist, deren Einträge die in (3.9) berechneten 2×2 Blöcke sind. In der Praxis können wir uns auf eine endliche Anzahl N von Floquet-Moden beschränken, da wir einerseits wissen, dass wir das gesamte Spektrum aus der Information einer Floquet-Zone der Breite Ω aufbauen können durch Verschieben um ganzzahlige Vielfache von Ω . Dabei bauen wir die beschränkte Floquet Matrix symmetrisch auf, d.h. von $-N$ bis N , und definieren die 1. Floquet-Zone $\left[-\frac{\Omega}{2} + (V_1^0 + V_2^0), \frac{\Omega}{2} + (V_1^0 + V_2^0)\right)$ gerade in der Mitte des Spektrums, so dass diese am wenigsten von der Beschränkung beeinflusst wird. Andererseits nach (3.7) steigen bzw. fallen die Eigenwerte der Floquet Matrix mit steigenden bzw. fallenden Moden n linear in Ω . Das bedeutet, dass in der Eigenwertgleichung der 1. Floquet-Zone $\varepsilon_\alpha(k) \phi_{\alpha,0}(k) = \sum_n (H_F(k))_{0n} \phi_{\alpha,n}(k)$ Beiträge von großen $|n|$ stark unterdrückt sind, abhängig von den Parametern des Systems. Das Eigensystem der endlichen Matrix können wir numerisch bestimmen. Für eine gewählte Anzahl der Floquet-Moden N und einen d -dimensionalen Zustandsraum ist der zugehörige Floquetraum $d \cdot (2N + 1)$ -dimensional. In Abbildung 3.1 sehen wir das Spektrum der Floquet Matrix für $N = 3$ und $\Omega = 8$ und $\Omega = 2$. Dabei verwenden

wir für die stationären Parameter dieselben wie im vorherigen Kapitel in Abbildung 2.4 und die zeitabhängigen Parameter wählen wir jeweils halb so groß wie ihre stationären Partner. Die gestrichelte Linie kennzeichnet die gewählte 1. Floquet-Zone.

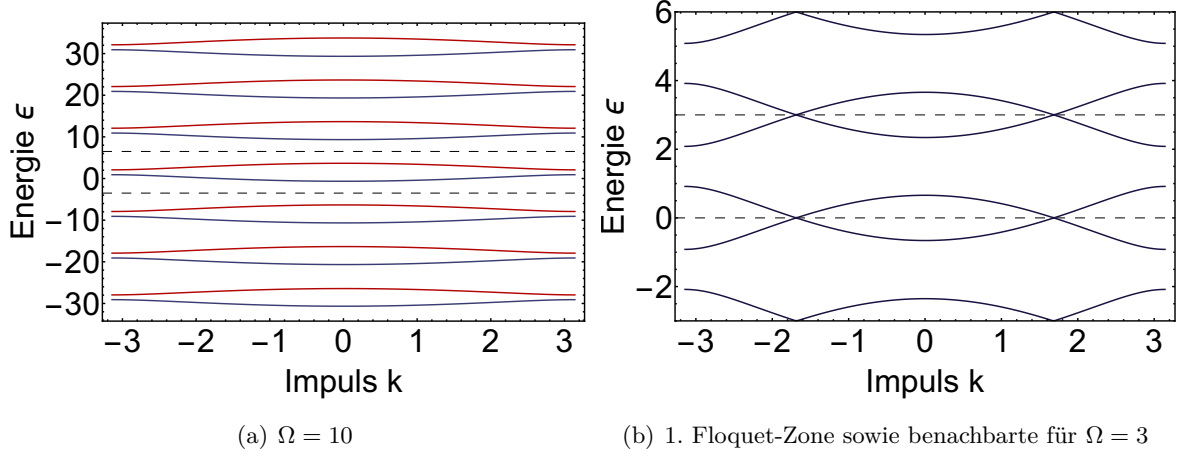


Abbildung 3.1. Einteilchen-Floquetspektrum mit den Parametern $J_{1,1}^0 = 2J_{1,1}^1 = 0.9$, $J_{1,2}^0 = 2J_{1,2}^1 = 1.2$, $V_{1,1}^0 = 2V_{1,1}^1 = 1$, $V_{1,2}^0 = 2V_{1,2}^1 = 2$. Farben in (a) sind mit Bezug zum zeitunabhängigen Fall gewählt.

Für große Ω entkoppeln die Floquet-Moden, wohingegen für immer kleinere Ω mehr Bänder benachbarter Zonen in die 1. Floquet-Zone überlappen und wir daher unsere Beschränkung der Floquet Matrix auf endliches N größer wählen müssen. Da die Bandbreite des Systems durch die Hüpfparameter J charakterisiert ist und die Breite der Floquet-Zonen durch Ω , ist die Anzahl der Moden N , auf die wir uns beschränken, proportional dem Verhältnis J/Ω anzupassen.

3.2. Zweiteilchensystem

Die Anwendung des Floquet-Formalismus auf das Zweiteilchensystem erfolgt ganz analog zum vorherigen Kapitel 3.1. Dabei nehmen wir für das Zweiteilchensystem folgende zeitabhängige Parameter an mit 3 relativen Phasen $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$:

$$\begin{aligned}
 J_{1,1}(t) &= J_{1,1}^0 + J_{1,1}^1 \cos(\Omega t) & V_{1,1}(t) &= V_{1,1}^0 + V_{1,1}^1 \cos(\Omega t + \varphi_2) \\
 J_{1,2}(t) &= J_{1,2}^0 + J_{1,2}^1 \cos(\Omega t) & V_{1,2}(t) &= V_{1,2}^0 + V_{1,2}^1 \cos(\Omega t + \varphi_2) \\
 J_{2,1}(t) &= J_{2,1}^0 + J_{2,1}^1 \cos(\Omega t + \varphi_1) & V_{2,1}(t) &= V_{2,1}^0 + V_{2,1}^1 \cos(\Omega t + \varphi_3) \\
 J_{2,2}(t) &= J_{2,2}^0 + J_{2,2}^1 \cos(\Omega t + \varphi_1) & V_{2,2}(t) &= V_{2,2}^0 + V_{2,2}^1 \cos(\Omega t + \varphi_3)
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

Dies führt zu einer Floquet Matrix bestehend aus 4×4 Blöcken. Das Eigensystem besteht nun aus $4 \cdot (2N + 1)$ Eigenwerte und $4 \cdot (2N + 1)$ Eigenvektoren der Dimension $4 \cdot (2N + 1)$. In Abbildung 3.2 sehen wir das Spektrum der Floquet Matrix für $N = 3$ und $\Omega = 10$ und $\Omega = 3$. Die gestrichelte Linie kennzeichnet die 1. Floquet-Zone. Da das Zweiteilchensystem ursprünglich 4 Bänder hat, liegen diese bei gleicher Bandbreite dichter und bei gleichem Ω gibt es also mehr mögliche zurückgefaltete Bänder innerhalb einer Floquet-Zone.

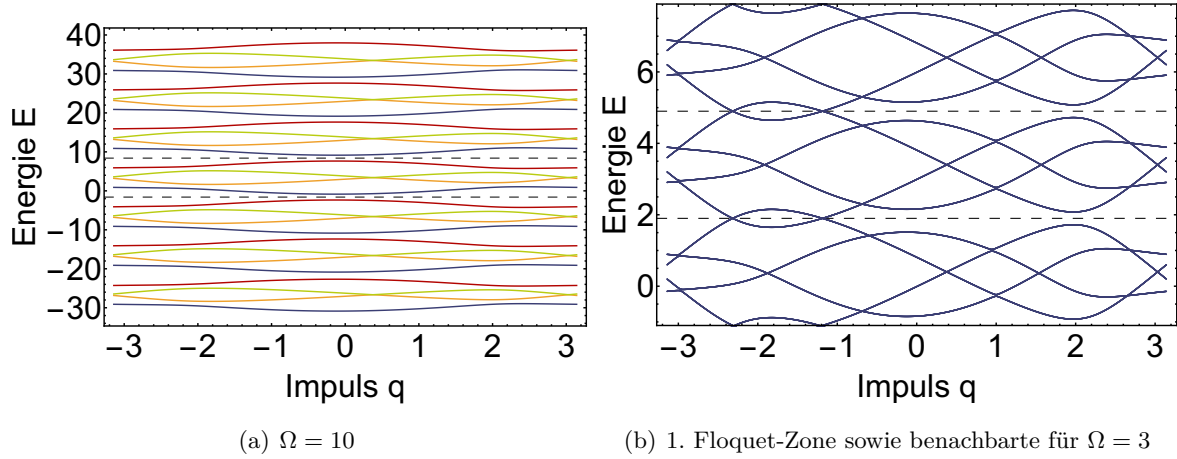


Abbildung 3.2. Zweiteilchen-Floquetspektrum mit den Parametern

$k = 2$, $\varphi_1 = \varphi_2 = \varphi_3 = 0$, $J_{1,1}^0 = 2J_{1,1}^1 = 0.9$, $J_{1,2}^0 = 2J_{1,2}^1 = 1.2$, $V_{1,1}^0 = 2V_{1,1}^1 = 1$, $V_{1,2}^0 = 2V_{1,2}^1 = 2$, $J_{2,1}^0 = 2J_{2,1}^1 = 1.1$, $J_{2,2}^0 = 2J_{2,2}^1 = 1.5$, $V_{2,1}^0 = 2V_{2,1}^1 = 1.5$, $V_{2,2}^0 = 2V_{2,2}^1 = 2.3$. Farben in (a) sind mit Bezug zum zeitunabhängigen Fall gewählt.

3.3. Streuprozesse

Das zeitabhängige Streuproblem lässt sich nun als zeitunabhängiges Eigenwertproblem im Floquetraum formulieren. Dabei hat unsere Beschreibung in Relativkoordinaten Δ , q aus Kapitel 2.2 weiter bestand. Das heißt unser Ansatzpunkt ist wieder die Schrödingergleichung, diesmal jedoch zeitabhängig:

$$i\partial_t \psi_k(\Delta, t) = M_1(t)\psi_k(\Delta - 1, t) + M_2(t)\psi_k(\Delta, t) + M_3(t)\psi_k(\Delta + 1, t) \quad (3.12)$$

Setzen wir den Floquetansatz ein, folgt die floquetartige Schrödingergleichung in Ortsdarstellung für ein festes k :

$$\begin{aligned} \varepsilon_\alpha \phi_{\alpha,m}(\Delta) &= \sum_n (M_{1,F})_{mn} \phi_{\alpha,n}(\Delta - 1) + \sum_n (M_{2,F})_{mn} \phi_{\alpha,n}(\Delta) + \sum_n (M_{3,F})_{mn} \phi_{\alpha,n}(\Delta + 1) \\ &\Leftrightarrow \\ \varepsilon_\alpha \phi_\alpha(\Delta) &= M_{1,F} \phi_\alpha(\Delta - 1) + M_{2,F} \phi_\alpha(\Delta) + M_{3,F} \phi_\alpha(\Delta + 1) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Für die Floquetzustände machen wir erneut den Ansatz: $\phi_{k,\alpha}(q, \Delta) = u_{k,\alpha}(q) e^{iq\Delta}$, wobei $u_{k,\alpha}(q) \in \mathbb{C}^{4(2N+1)}$ die Eigenvektoren der Matrix $M_F = [M_{1,F} e^{-iq} + M_{2,F} + M_{3,F} e^{iq}]$ zu den Eigenwerten $\varepsilon_{k,\alpha}$ sind. Der Streuansatz verläuft nun ganz analog zu Kapitel 2.2.2. Zu jeder Floquet-Mode m nehmen wir jeweils 2 transmittierte und 2 reflektierte Kanäle an. Wir wählen im Folgenden die einlaufende Energie E_{in} immer innerhalb der 1. Floquet-Zone bei $m = 0$. Für ein fest gewähltes N gibt es also zu jedem $m = -N, -N + 1, \dots, 0, \dots, N - 1, N$ 2 transmittierte und 2 reflektierte Wellen mit jeweils Energie $E_{\text{in}} + m\Omega$. Korrespondierend dazu finden wir zu jedem m 4 Impulse $q_{m,1}, q_{m,2}, q_{m,3}, q_{m,4} \in \mathbb{C}$, sodass:

$$E_{\text{in}} + m\Omega = \varepsilon_{\alpha_i}(q_{m,i}) \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (3.14)$$

Das heißt bei Streuprozessen im Floquetraum ist die Energie nicht erhalten bzw. erhalten modulo Ω . Es gilt nun wieder zu unterscheiden welche $q_{m,i}$ zu propagierenden und welche zu exponentiell abfallenden Lösungen führen. Um die Streuanteile zu ermitteln gilt es wieder das Gleichungssystem zu lösen, dass sich aus den Schrödingergleichungen an den Stellen $\Delta \in \{-1, 0, 1\}$ ergibt. Dabei entstehen $12 \cdot (2N + 1)$ Gleichungen, die effektiv wieder nur $8 \cdot (2N + 1)$ Gleichungen sind. Der Ansatz enthält $4 \cdot (2N + 1)$ unbekannte Koeffizienten r_i, t_i sowie $4 \cdot (2N + 1)$ unbekannte Komponenten der Wellenfunktion ψ_0 an der Stelle $\Delta = 0$. In Bezug auf Energieerhaltungsverletzung interessieren wir uns im Folgenden nur für die propagierenden Lösungen. Die Impulssuche und das Lösen des Gleichungssystems geschieht wieder numerisch mit Hilfe unseres `mathematica` Codes aus 2.2.2, der auf den Fall des Floquetspektrums erweitert wurde. Hier und im Folgenden werden wir den Algorithmus umformulieren. Statt einen Schwerpunktimpuls und eine Energie vorzugeben und gestreute Relativimpulse zu erhalten, können wir stattdessen auch $k_1, k_2, \alpha_1, \alpha_2$ vorgeben und $k'_1, k'_2, \alpha'_1, \alpha'_2, E_{\text{out}}$ erhalten.

3.3.1. Variation der Wechselwirkungsstärke für gleiche Parameter

In diesem Kapitel untersuchen wir den Fall, dass beide Teilchen die folgenden gleichen Parameter haben, aber unterscheidbar bleiben:

$$\begin{aligned}
 J_{1,1}^0 &= J_{2,1}^0 = 0.9 & V_{1,1}^0 &= V_{2,1}^0 = 1 \\
 J_{1,2}^0 &= J_{2,2}^0 = 1.2 & V_{1,2}^0 &= V_{2,2}^0 = 2 \\
 J_{1,1}^1 &= J_{2,1}^1 = 0.5 & V_{1,1}^1 &= V_{2,1}^1 = 0.5 \\
 J_{1,2}^1 &= J_{2,2}^1 = 0.6 & V_{1,2}^1 &= V_{2,2}^1 = 1 \\
 \varphi_1 &= \varphi_2 = \varphi_3 = 0
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

Die treibende Frequenz wählen wir so, dass die Floquet-Zonen der Einteilchenbänder (siehe Abb. 3.1) gerade entkoppeln, also innerhalb einer Zone glatte Funktionen in k_1 bzw. k_2 sind. Für den gegebenen Parametersatz ist das für $\Omega = 4.5$ der Fall. Nun möchten wir die Änderung der Streuraten bei Variation der Wechselwirkungsstärke U studieren. Dazu nehmen wir folgende beliebige Situation an:

$$k_1 = -0.3 \quad \alpha_1 = 2 \quad k_2 = 2.3 \quad \alpha_2 = 1 \tag{3.16}$$

Das legt den Schwerpunktimpuls $k = 2$, den Relativimpuls $q_{\text{in}} = 1.3$ und die Energie $E_{\text{in}} = E_{k_1, k_2}^{\alpha_1, \alpha_2} \approx 4.106$ fest. Zur Veranschaulichung betrachten wir die Situation im Zweiteilchenbild (siehe Abbildung 3.3).

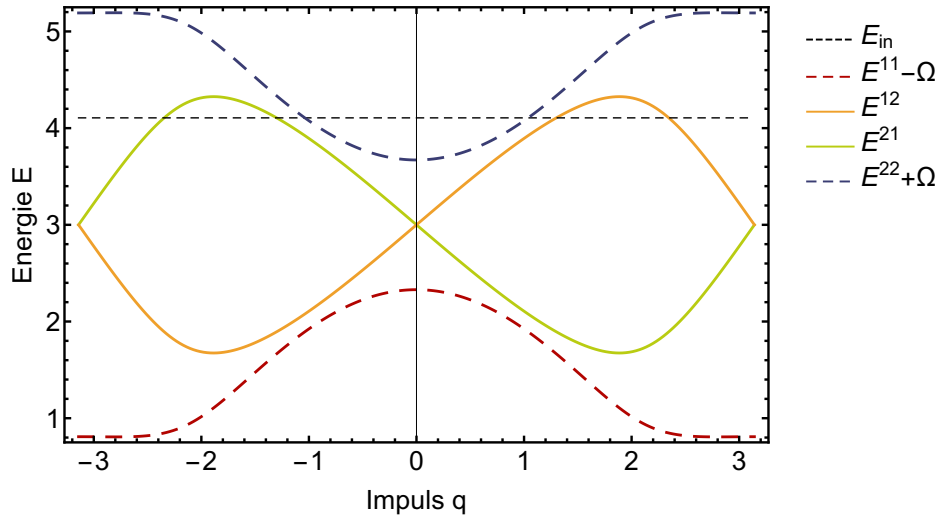


Abbildung 3.3. 1. Floquet-Zone für die in (3.15) definierten Parameter. Gestrichelte Linien kennzeichnen Bänder mit Floquet-Moden $n \neq 0$.

Wir sehen bereits, dass es 4 mögliche Kanäle gibt, bei denen die Energie erhalten bleibt. Davon entsprechen 2 einem Bänderwechsel im Einteilchenbild und 2 gleich bleibenden Bändern. Außerdem gibt es 2 Kanäle, bei denen die Energie nicht erhalten ist, sondern sich um $+\Omega$ ändert. In den Abbildungen 3.4, 3.5, 3.6 sehen wir die Transmissions- und Reflektionsanteile der propagierenden Lösungen in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U .

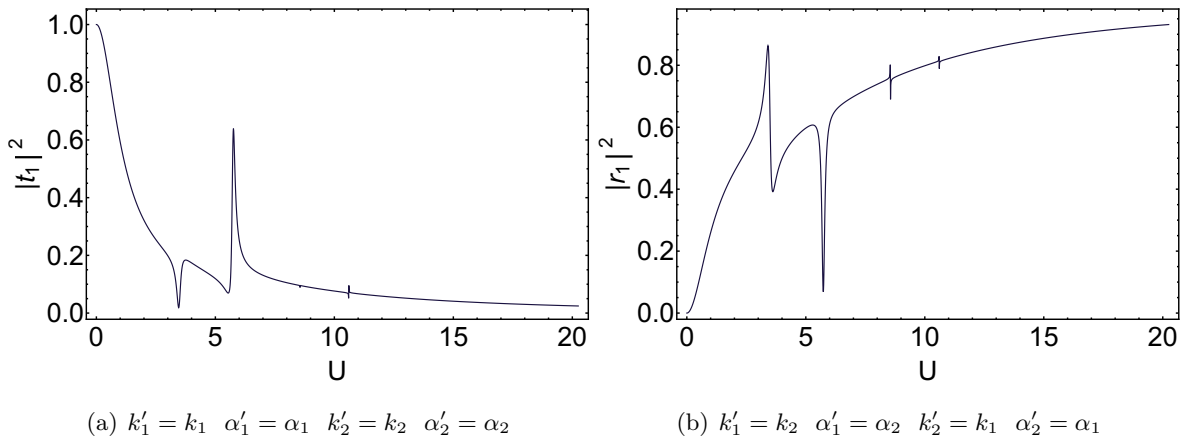


Abbildung 3.4. Anteile der Kanäle mit $\pm q_{in}$ und Energieerhaltung

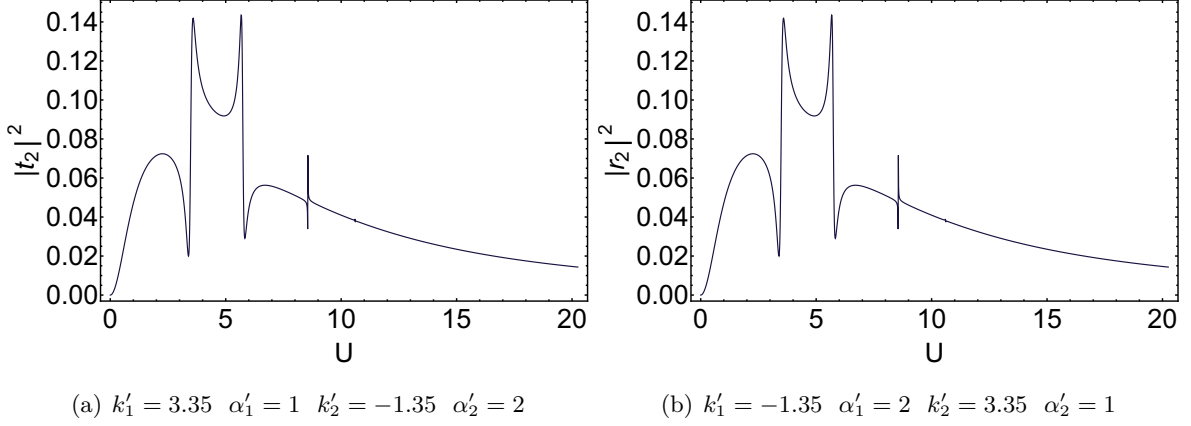


Abbildung 3.5. Anteile der Kanäle mit nichttrivialer Impulsänderung und Energieerhaltung

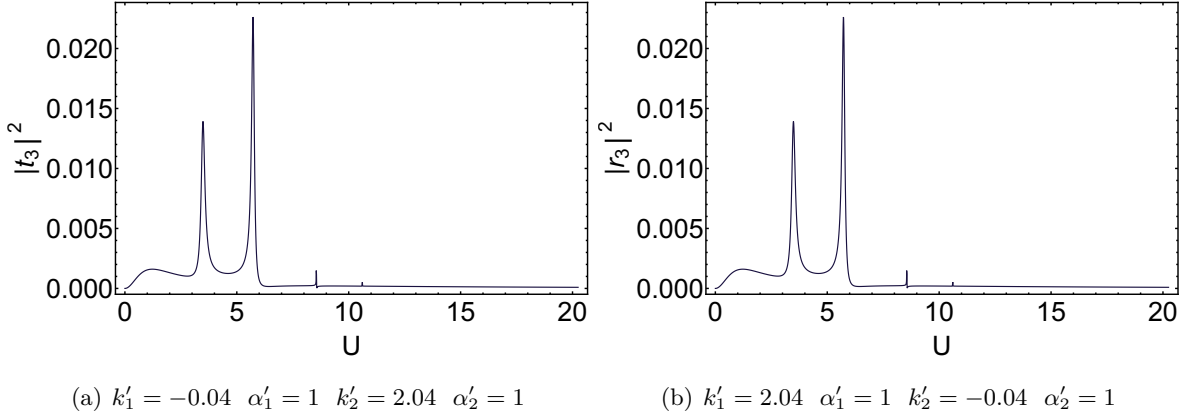


Abbildung 3.6. Anteile der Kanäle mit nichttrivialer Impulsänderung und keiner Energieerhaltung

Wie im zeitunabhängigen Fall erhalten wir im Bereich kleiner U fast vollständige Transmission im Kanal q_{in} . Für große U findet Totalreflektion im Kanal $-q_{\text{in}}$ statt. Aufgrund gleicher Parameter und einhergehender Symmetrie der Bandstruktur haben die Streuanteile $|r_i|^2$ und $|t_i|^2$ zu den nichttrivialen Impulsänderungen $\pm q_i$ die gleiche Form und sind auch hier relativ eine Größenordnung kleiner. Außerdem sehen wir, dass bei bestimmten Werten für U scharfe Resonanzen auftreten. Der Grund dafür ist, dass bei diesen Wechselwirkungsstärken die Energie des Teilchens bei $\Delta = 0$ der eines quasigebundenen Floquetzustands entspricht und die Transmission begünstigt ist. Schauen wir uns das Gewicht der Komponenten der Wellenfunktion ψ_0 bei $\Delta = 0$ bei einem resonanten $U = 10.6$ an (siehe Abb. 3.7), sehen wir eine starke Lokalisierung im Block $n = -2$ bei $j_1 = j_2 = 1$. Ein quasigebundener Zustand im Floquetraum hat bei $j_1 = j_2 = j$ näherungsweise die Energie $E_{\text{res}} \approx U + V_{1,j}^0 + V_{2,j}^0 + n\Omega$.

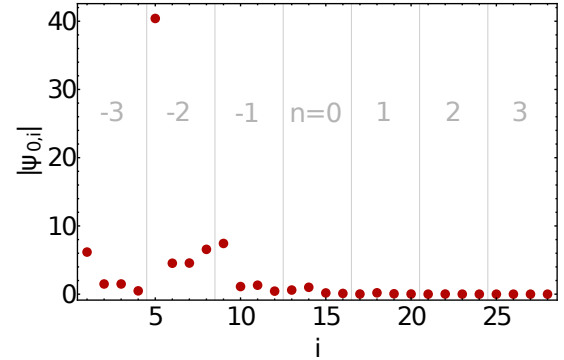


Abbildung 3.7. Betrag der Komponenten der Wellenfunktion ψ_0 bei $U = 10.6$

Hinzu kommen Korrekturen, da es noch endliche Anteile in den anderen Komponenten gibt. Im Beispiel $U = 10.6$ tritt also eine Resonanz im Block $n = -2$ bei $j_1 = j_2 = 1$ auf, wobei gilt $E_{\text{in}} \approx E_{\text{res}}$. Hier sei noch erwähnt, dass auch im Ortsraum aufgrund von quasigebundenen Zuständen Resonanzen auftreten können. Diese Eigenschaft ist ganz allgemein und nicht auf den zeitabhängigen Fall beschränkt.

3.3.2. Anteile der Energieerhaltungsverletzung für doublon-holon Parameter

In diesem Kapitel untersuchen wir den Fall, bei dem sich die Potentiale der beiden Teilchen um das Vorzeichen und die Hüpfparameter um Faktor 2 unterscheiden. Diese Situation lässt sich interpretieren als zwei Quasiteilchen "Doppelt besetzter Gitterplatz" (doublon) und "Leerer Gitterplatz" (holon) in einem Gitter, wo an jeder Stelle bereits ein Teilchen sitzt. Das doublon und holon sind die energetisch ersten Anregungen dieses sogenannten Mott-Isolators [1], der den Grenzfall schwacher Wechselwirkung, d.h. das Verhältnis U/J ist kleiner als ein bestimmter Grenzwert, eines ultrakalten Gases im periodischen Potential darstellt. Im gegenteiligen Fall der Superfluid Phase sind die Teilchen über das gesamte Gitter delokalisiert und das Anregungsspektrum weist keine Bandlücke auf. Die beiden Teilchen werden nun durch die folgenden Parameter charakterisiert:

$$\begin{aligned}
J_{1,1}^0 &= 0.5 \cdot J_{2,1}^0 = 0.9 & V_{1,1}^0 &= -V_{2,1}^0 = 1.0 \\
J_{1,2}^0 &= 0.5 \cdot J_{2,2}^0 = 1.2 & V_{1,2}^0 &= -V_{2,2}^0 = 2.0 \\
J_{1,1}^1 &= 0.5 \cdot J_{2,1}^1 = 0.5 & V_{1,1}^1 &= -V_{2,1}^1 = 0.5 \\
J_{1,2}^1 &= 0.5 \cdot J_{2,2}^1 = 0.6 & V_{1,2}^1 &= -V_{2,2}^1 = 0.5 \\
\varphi_1 &= \varphi_2 = \varphi_3 = 0
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Die treibende Frequenz wählen wir erneut so, dass die Floquet-Zonen der Einteilchenbänder (siehe Abb. 3.1) gerade entkoppeln, also innerhalb einer Zone glatte Funktionen in k_i sind. Für den gegebenen Parametersatz ist das für $\Omega = 8.7$ der Fall. Außerdem gehen wir in diesem Kapitel davon aus, dass sich beide Teilchen jeweils im unteren Band $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ befinden. Zunächst werden wir untersuchen, für welche Impulse k_1, k_2 alleine aus Gründen der Schwerpunktimpulserhaltung und Energieerhaltung modulo Ω überhaupt energieerhaltungsverletzende Streuprozesse möglich sind. Dazu erstellen wir eine zweidimensionale Karte, auf der wir in jedem Punkt abfragen, ob die fixierte Energie E_{in} in einem Bereich eines Bands mit Floquetindex $n \neq 0$ liegt. Nur dann sind energieerhaltungsverletzende Streuprozesse, im Folgenden auch als inelastische Streuprozesse bezeichnet, möglich. Dies wird durch die grüne Fläche gekennzeichnet; andernfalls ist sie rot.

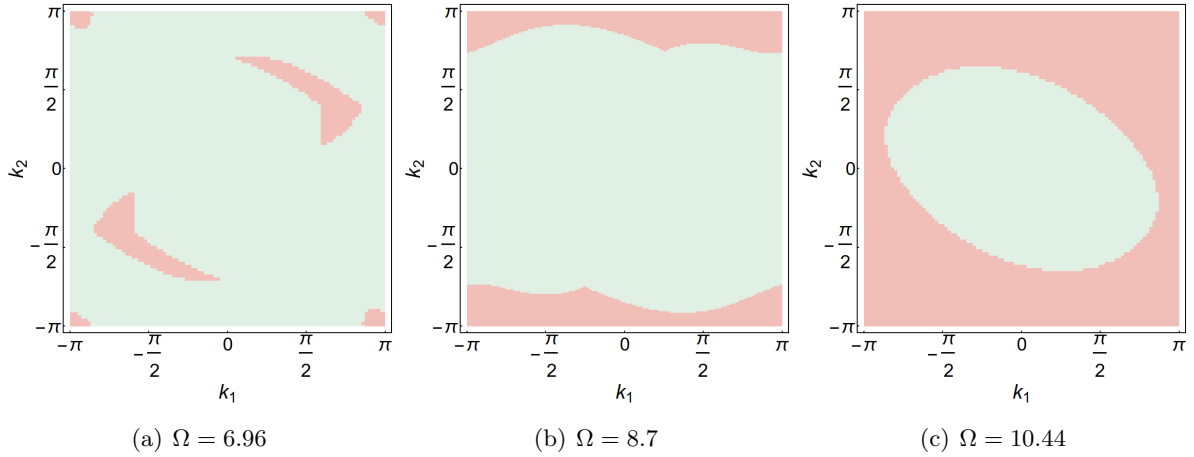


Abbildung 3.8. Nur in den grünen Bereichen sind inelastische Streuprozesse möglich

In den Abbildungen 3.8 sehen wir den erwarteten Trend, dass für immer kleiner werdende Ω mehr inelastische Prozesse möglich sind, da immer mehr Bänder in die 1. Floquet-Zone zurückgefaltet werden. Dabei können trotzdem für bestimmte Frequenzbereiche sich wieder rote Inseln bilden, wenn E_{in} gerade in einer Bandlücke eines anderen Floquetblocks liegt. Andererseits sehen wir, dass für größer werdende Frequenzen sich die grüne Fläche zum Ursprung hin verkleinert. Dies rührt daher, dass die ursprüngliche Bandstruktur Maximum und Minimum bei $k_1 = k_2 = 0$ hat und diese Umgebung den letztmöglichen Überlapp mit Bändern mit $n \neq 0$ darstellt. Wir erkennen außerdem die Symmetrie der Einteilchenenergien in der Punktsymmetrie zum Ursprung in den Abbildungen 3.8 wieder. Um etwas über die Struktur zu lernen, betrachten wir die tatsächlichen Anteile inelastischer Streuprozesse entlang zweier Wege, die wir mit Hilfe von Buchstaben in Abbildung 3.9 definieren.

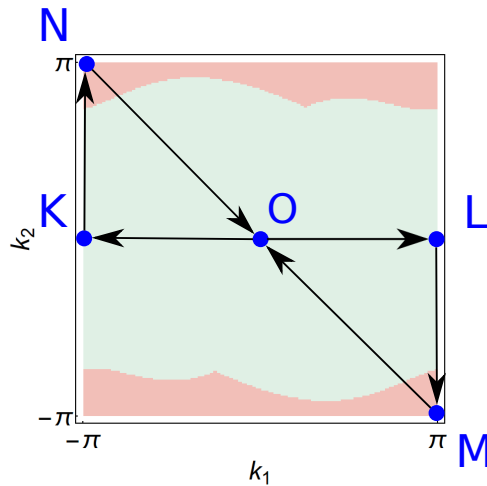


Abbildung 3.9. Definition zweier geschlossener Wege OLMO und OKNO

In den Abbildungen 3.10, 3.11, 3.12 sehen wir die Anteile entlang der Wege OLMO und OKNO für 3 verschiedene Wechselwirkungsstärken U . Dabei sind die roten Punkte die tatsächlich berechneten Werte und die Linie dient als optische Hilfe.

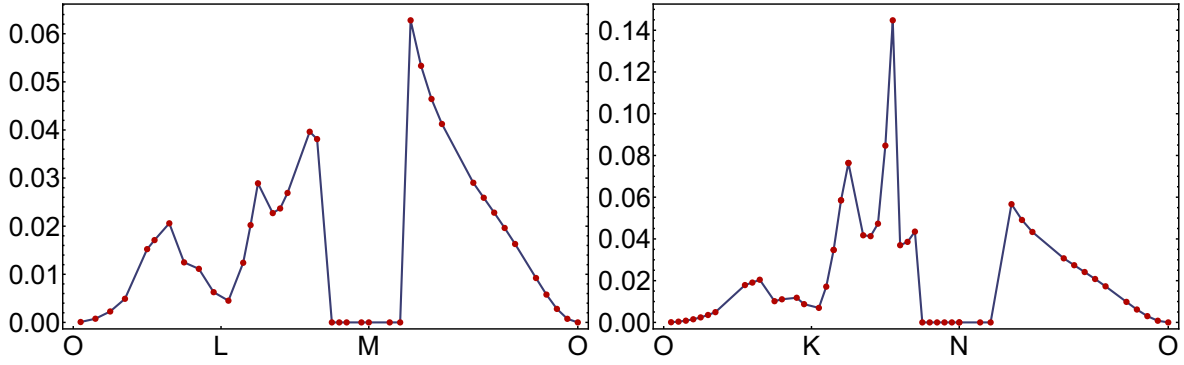


Abbildung 3.10. Anteile inelastischer Streuprozesse für $U = 0.5 \Omega$

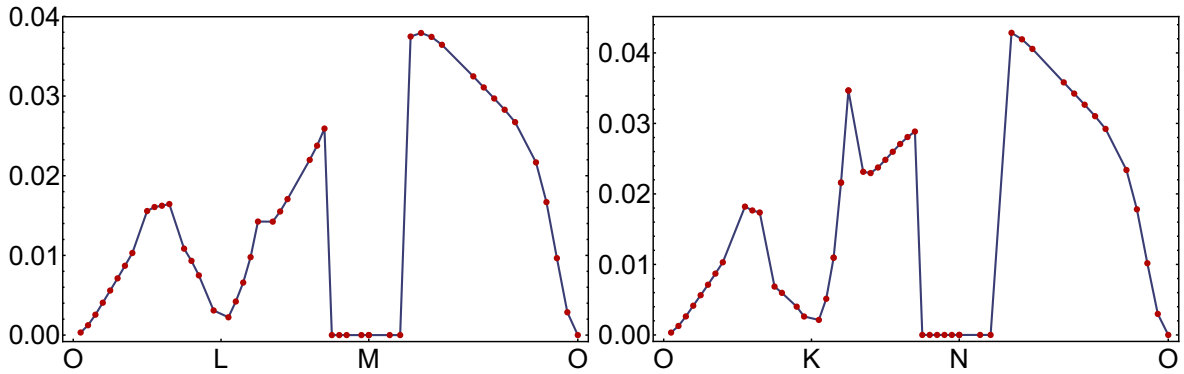


Abbildung 3.11. Anteile inelastischer Streuprozesse für $U = \Omega$

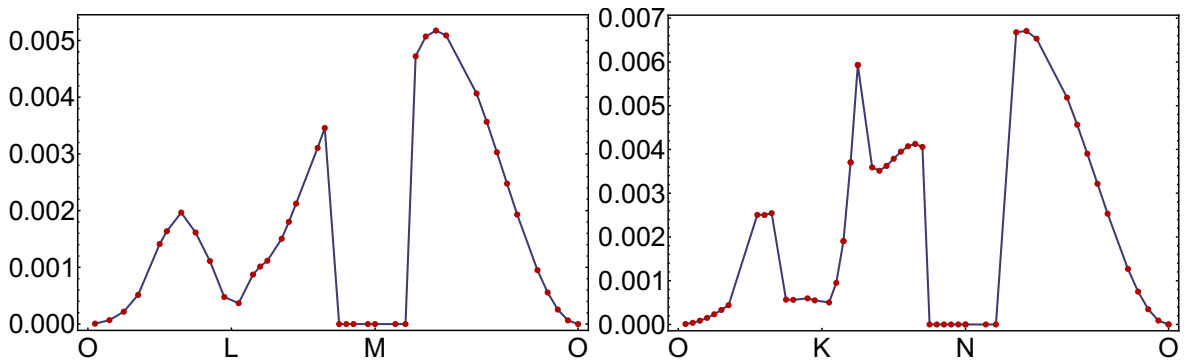


Abbildung 3.12. Anteile inelastischer Streuprozesse für $U = 2 \Omega$

Die Ergebnisse zeigen, dass für die Umgebung $k_1 = k_2 = 0$ die Anteile gegen 0 gehen. Die Geschwindigkeiten sind in diesem Bereich so klein, dass alle Kanäle bis auf Totalreflektion stark unterdrückt sind. Wir sehen außerdem, dass die Punktsymmetrie zum Ursprung teilweise verloren geht. Das ist darauf zurückzuführen, dass es im wechselwirkenden Fall einen Unterschied macht, welches Teilchen rechts und welches links laufend ist, da die Spiegelsymmetrie im Ort durch das versetzte periodische Potential gebrochen ist. Außerdem sinken die Anteile insgesamt mit wachsendem U ; beim Übergang $U = \Omega \rightarrow 2 \Omega$ um Faktor 10. Für genauere Betrachtungen sind weitere berechnete Punkte notwendig, was zunächst eine Verbesserung der Stabilität und

Effizienz unseres numerischen Algorithmus der Impulssuche voraussetzt, da dieser eindeutig das Nadelöhr aller numerischen Rechnungen war.

4. Zusammenfassung und Ausblick

Wir haben gelernt, Teilchen in einem zeitlich periodisch getriebenen System zu beschreiben und einen Weg aufgezeigt, Zweiteilchen-Streuprozesse in solchen Systemen zu untersuchen. Der dabei entwickelte Formalismus sowie numerische Implementierung zur Lösung des Streuproblems kann symbolisch wie folgt zusammengefasst werden:

$$k_1, k_2, \alpha_1, \alpha_2 \longrightarrow k'_1, k'_2, \alpha'_1, \alpha'_2, n \quad (4.1)$$

wobei die rechte Seite den ganzen Satz möglicher Streukanäle symbolisiert und n die diskrete Änderung der Energie in Quanta Ω beschreibt.

An zwei Beispielsystemen haben wir die Variation der Wechselwirkungsstärke und einlaufenden Impulse studiert. Dabei haben wir gesehen, dass für Ω in der Größenordnung der Energieskala des Systems die Energie beim Streuprozess näherungsweise doch erhalten ist bzw. die Streuannteile in energieerhaltungsverletzende Kanäle stark unterdrückt sind. Es können aber, wenn die einlaufende Energie der eines quasigebundenen Zustands im Floquetraum entspricht, scharfe Resonanzen auftreten. Außerdem haben wir untersucht, für welche gegebenen Einteilchen-Impulse kinematisch überhaupt inelastische Streuung möglich ist und die tatsächlichen Anteile entlang zweier geschlossener Wege betrachtet. Darüber hinaus könnte man weitere Parameter, wie zum Beispiel die treibende Frequenz Ω oder die relativen Phasen φ zur Brechung der Zeittranslationsinvarianz, variieren.

Im Rahmen dieser Bachelorthesis haben wir Zweiteilchensysteme studiert, sind aber allgemeiner daran interessiert, wie man periodisch getriebene Vielteilchensysteme beschreibt. Im Fall verdünnter Systeme, für die eine semiklassische Näherung sinnvoll ist, hoffen wir, dass unser Apparat (4.1) direkt in der Floquet-Boltzmann Gleichung [6] Anwendung findet, oder in Modellen, wo bei Stoßprozessen das Ergebnis zufällig aber gewichtet mit den Streuraten bestimmt wird und die Dynamik dazwischen klassisch beschrieben wird [17].

In dem Sinne sind wir überzeugt, dass unsere Betrachtungen weitere Möglichkeiten eröffnen, periodisch getriebene Quantensysteme zu studieren und in bereits bestehende Arbeiten Anwendung finden.

A. Anhang

A.1. Hamiltonian Ortsdarstellung in Relativkoordinaten

Ausgehend von dem Einteilchen-Hamiltonian ((2.7)) konstruieren wir die Wirkung der Summanden des Gesamt-Hamiltonians $H = H_1 + H_2 + H_{\text{int}}$ in Schwerpunkts- und Relativkoordinaten.

$$j_1 = 1, j_2 = 1 :$$

$$\begin{aligned} H_1 \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= -J_{1,1} \psi(\bar{n} - \frac{1}{2}, \Delta + 1, j_1 + 1, j_2) - J_{1,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1 + 1, j_2) + V_{1,1} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ H_2 \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= -J_{2,1} \psi(\bar{n} - \frac{1}{2}, \Delta - 1, j_1, j_2 + 1) - J_{2,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2 + 1) + V_{2,1} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ H_{\text{int}} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= U \delta_{\Delta,0} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \end{aligned}$$

$$j_1 = 1, j_2 = 2 :$$

$$\begin{aligned} H_1 \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= -J_{1,1} \psi(\bar{n} - \frac{1}{2}, \Delta + 1, j_1 + 1, j_2) - J_{1,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1 + 1, j_2) + V_{1,1} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ H_2 \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= -J_{2,1} \psi(\bar{n} + \frac{1}{2}, \Delta + 1, j_1, j_2 - 1) - J_{2,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2 - 1) + V_{2,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ H_{\text{int}} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= 0 \end{aligned}$$

$$j_1 = 2, j_2 = 1 :$$

$$\begin{aligned} H_1 \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= -J_{1,1} \psi(\bar{n} + \frac{1}{2}, \Delta - 1, j_1 - 1, j_2) - J_{1,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1 - 1, j_2) + V_{1,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ H_2 \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= -J_{2,1} \psi(\bar{n} - \frac{1}{2}, \Delta - 1, j_1, j_2 + 1) - J_{2,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2 + 1) + V_{2,1} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ H_{\text{int}} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= 0 \end{aligned}$$

$$j_1 = 2, j_2 = 2$$

$$\begin{aligned} H_1 \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= -J_{1,1} \psi(\bar{n} + \frac{1}{2}, \Delta - 1, j_1 - 1, j_2) - J_{1,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1 - 1, j_2) + V_{1,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ H_2 \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= -J_{2,1} \psi(\bar{n} + \frac{1}{2}, \Delta + 1, j_1, j_2 - 1) - J_{2,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2 - 1) + V_{2,2} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \\ H_{\text{int}} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) &= U \delta_{\Delta,0} \psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2) \end{aligned}$$

Anschließend fouriertransformieren wir bezüglich der Schwerpunktskoordinate.

$$j_1 = 1, j_2 = 1 :$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_1\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) \\ &= -J_{1,1}e^{-i\frac{k}{2}}\psi(k, \Delta + 1, j_1 + 1, j_2) - J_{1,2}\psi(k, \Delta, j_1 + 1, j_2) + V_{1,1}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \\ & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_2\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) \\ &= -J_{2,1}e^{-i\frac{k}{2}}\psi(k, \Delta - 1, j_1, j_2 + 1) - J_{2,2}\psi(k, \Delta, j_1, j_2 + 1) + V_{2,1}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \\ & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_{\text{int}}\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) = U\delta_{\Delta,0}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \end{aligned}$$

$$j_1 = 1, j_2 = 2 :$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_1\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) \\ &= -J_{1,1}e^{-i\frac{k}{2}}\psi(k, \Delta + 1, j_1 + 1, j_2) - J_{1,2}\psi(k, \Delta, j_1 + 1, j_2) + V_{1,1}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \\ & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_2\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) \\ &= -J_{2,1}e^{i\frac{k}{2}}\psi(k, \Delta + 1, j_1, j_2 - 1) - J_{2,2}\psi(k, \Delta, j_1, j_2 - 1) + V_{2,2}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \\ & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_{\text{int}}\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) = 0 \end{aligned}$$

$$j_1 = 2, j_2 = 1 :$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_1\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) \\ &= -J_{1,1}e^{i\frac{k}{2}}\psi(k, \Delta - 1, j_1 - 1, j_2) - J_{1,2}\psi(k, \Delta, j_1 - 1, j_2) + V_{1,2}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \\ & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_2\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) \\ &= -J_{2,1}e^{-i\frac{k}{2}}\psi(k, \Delta - 1, j_1, j_2 + 1) - J_{2,2}\psi(k, \Delta, j_1, j_2 + 1) + V_{2,1}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \\ & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_{\text{int}}\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) = 0 \end{aligned}$$

$$j_1 = 2, j_2 = 2 :$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_1\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) \\ &= -J_{1,1}e^{i\frac{k}{2}}\psi(k, \Delta - 1, j_1 - 1, j_2) - J_{1,2}\psi(k, \Delta, j_1 - 1, j_2) + V_{1,2}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \\ & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_2\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) \\ &= -J_{2,1}e^{i\frac{k}{2}}\psi(k, \Delta + 1, j_1, j_2 - 1) - J_{2,2}\psi(k, \Delta, j_1, j_2 - 1) + V_{2,2}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \\ & \mathcal{F}_{\bar{n}}(H_{\text{int}}\psi(\bar{n}, \Delta, j_1, j_2))(k) = U\delta_{\Delta,0}\psi(k, \Delta, j_1, j_2) \end{aligned}$$

A.2. Berechnung der Geschwindigkeiten

Für die Geschwindigkeit gilt:

$$v_q = \frac{\partial E}{\partial q} = \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{E(q + \Delta q) - E(q)}{\Delta q} = \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \frac{\Delta E}{\Delta q}$$

Betrachten wir einen Hamiltonian $H(q)$ mit kleiner Störung Δq , dann:

$$H(q + \Delta q) \approx H(q) + \Delta q \frac{\partial H(q)}{\partial q} = H_0 + \Delta H$$

Die Energiekorrektur ist nach Störungstheorie erster Ordnung gegeben durch:

$$\Delta E = \langle u | \Delta H | u \rangle$$

wobei u Eigenzustand des ungestörten Systems ist. Aus allem folgt nun die Relation:

$$v_q = \langle u | \frac{\partial H}{\partial q} | u \rangle$$

A.3. Verteilung der gefundenen Impulse für $k = 0$

In Abbildung A.1 sind die Energiebänder des zeitunabhängigen Zweiteilchensystems für einen Schwerpunktsimpuls von $k = 0$ dargestellt und dazu in Abbildung A.2 die gefundenen Impulse für einen diskreten Scan des Energiebereichs. In rot ist das gefundene Quartett zu $E_{\text{in}} = 6.5$ markiert.

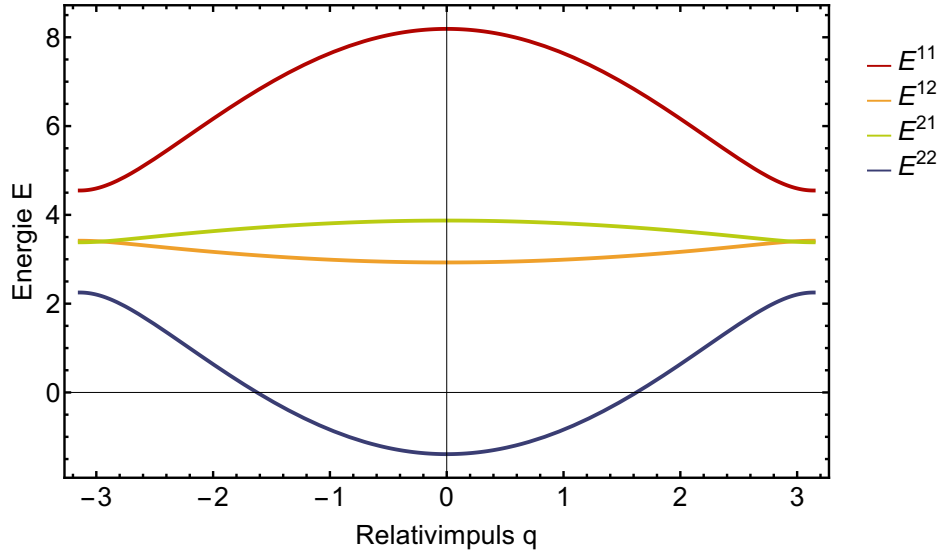


Abbildung A.1. Energiebänder des Zweiteilchensystems mit den Parametern $k = 0$, $J_{1,1} = 0.9$, $J_{1,2} = 1.2$, $V_{1,1} = 1$, $V_{1,2} = 2$, $J_{2,1} = 1.1$, $J_{2,2} = 1.5$, $V_{2,1} = 1.5$, $V_{2,2} = 2.3$

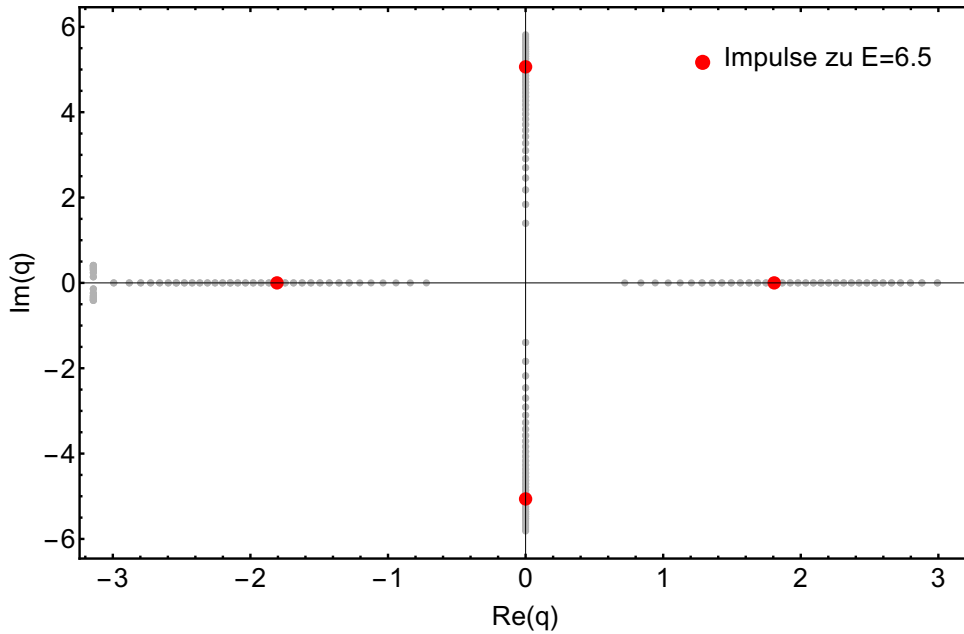


Abbildung A.2. Verteilung der Impulse in der komplexen Ebene für gesamten Bandbereich bei $k = 0$

Literaturverzeichnis

- [1] Greiner Markus, Mandel Olaf, Esslinger Tilman, Hansch Theodor W., and Bloch Immanuel. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(6867):39–44, jan 2002. 10.1038/415039a.
- [2] H. Lignier, C. Sias, D. Ciampini, Y. Singh, A. Zenesini, O. Morsch, and E. Arimondo. Dynamical control of matter-wave tunneling in periodic potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 99:220403, Nov 2007.
- [3] Tobias Salger, Sebastian Kling, Carsten Hecking, Tim und Geckeler, Luis Morales-Molina, and Martin Weitz. Directed transport of atoms in a hamiltonian quantum ratchet. *Science*, 326(5957):1241–1243, 2009.
- [4] Maximilian Genske and Achim Rosch. Directed motion of doublons and holes in periodically driven mott insulators. *Phys. Rev. A*, 90:043637, Oct 2014.
- [5] Thomas Bilitewski and Nigel R. Cooper. Scattering theory for floquet-bloch states. *Phys. Rev. A*, 91:033601, Mar 2015.
- [6] Maximilian Genske and Achim Rosch. Floquet-boltzmann equation for periodically driven fermi systems. *Phys. Rev. A*, 92:062108, Dec 2015.
- [7] Gross, R. and Marx, A. *Festkörperphysik*. Oldenbourg München, 2012.
- [8] Kittel, C. *Einführung in die Festkörperphysik*. Oldenbourg München; Auflage: 14, 2005.
- [9] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, and W. Ketterle. Bose-einstein condensation in a gas of sodium atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 75:3969–3973, Nov 1995.
- [10] Lohse M., Schweizer C., Zilberberg O., Aidelsburger M., and Bloch I. A Thouless quantum pump with ultracold bosonic atoms in an optical superlattice. *Nat Phys*, 12(4):350–354, apr 2016.
- [11] I. Bloch. Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nature*, 1:23 – 30, 2005.
- [12] Dieter Jaksch, Ch Bruder, Juan Ignacio Cirac, Crispin W Gardiner, and Peter Zoller. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Physical Review Letters*, 81(15):3108, 1998.
- [13] A. Hoffmann. *Bosonen im optischen Gitter, Diplomarbeit*. Freie Universität Berlin, 2007.
- [14] S. Wolff. *Quantum Ratchets, Bachelorthesis*. Universität zu Köln, 2012.

- [15] P. Hänggi et al. *Quantum transport and dissipation*. Wiley-VCH, 1998.
- [16] W. Forst and D. Hoffmann. *Gewöhnliche Differentialgleichungen: Theorie und Praxis - vertieft und visualisiert mit Maple®*. Springer Berlin Heidelberg, 2013.
- [17] Jonathan Lux and Achim Rosch. Quench dynamics and statistics of measurements for a line of quantum spins in two dimensions. *Phys. Rev. A*, 91:023617, Feb 2015.

Danksagung und Selbstständigkeitserklärung

Ich bedanke mich bei Prof. Achim Rosch, der mir dieses interessante Thema vorschlug und mich bei der Bearbeitung stets unterstützte. Weiterhin bedanke ich mich bei Maximilian Genske für die intensive Betreuung.

Hiermit versichere ich an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig und ohne die Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten und nicht veröffentlichten Schriften entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit ist in gleicher oder ähnlicher Form oder auszugsweise im Rahmen einer anderen Prüfung noch nicht vorgelegt worden. Ich versichere, dass die eingereichte elektronische Fassung der eingereichten Druckfassung vollständig entspricht.

Köln, 28. Juni 2016

.....

Matthias Pukrop

