SEKTION PHYSIK DER LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN

Der Leitwert von Atomen

Diplomarbeit von Sandro Marcel Wimberger

November 2000

SEKTION PHYSIK DER LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN

Der Leitwert von Atomen

Diplomarbeit von Sandro Marcel Wimberger

Angefertigt am
MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PHYSIK KOMPLEXER SYSTEME
Dresden
und am
WEIZMANN INSTITUTE OF SCIENCE
Rehovot (Israel)

Aufgabensteller: PRIV. DOZ. DR. ANDREAS BUCHLEITNER
Zweitgutachter: PROF. DR. WILHELM ZWERGER

Eingereicht am 14. November 2000

Danksagung

Ich möchte all denen danken, die zur erfolgreichen Fertigstellung meiner Arbeit beigetragen haben:

Meinen Eltern, die mich auf meinem Lebens- und Studienweg stets mit all ihrer Kraft und Liebe unterstützt haben,

Herrn Professor Detlef Dürr, Herrn Professor Herbert Walther und Herrn Professor Hermann Wolter für ihre hervorragende Betreuung während meiner Studienzeit in München,

Herrn Professor Uzy Smilansky, der mir einen Aufenthalt am Weizmann Institut in Israel ermöglichte,

Herrn Professor Italo Guarneri für seine kritische Stellungnahme und die fachlichen Anregungen,

den Mitgliedern meiner Dresdner Arbeitsgruppe: Herrn Klaus Hornberger und Herrn Thomas Wellens für die rettenden Kaffeepausen, Herrn Andreas Krug für die mehrfache freundliche Aufnahme in München, Herrn Cord-Axel Müller und Herrn Peter Schlagheck für die lehrreichen Diskussionen.

Mein ganz besonderer Dank gilt meinem wissenschaftlichen Betreuer Herrn Andreas Buchleitner, dessen Engagement und Humor mir stets zur Seite standen. Gern denke ich an das mit ihm an den verschiedensten Orten verbrachte Jahr zurück, das nicht nur in physikalischer Hinsicht lehrreich, sondern auch von der menschlichen Seite von außerordentlichem Gewinn für mich war.

Se non è vero, è molto ben trovato.

Giordano Bruno

Zusammenfassung

Gegenstand der Arbeit ist die Analogie zwischen dem durch ein elektromagnetisches Feld induzierten Ionisationsprozess eines Wasserstoff-Rydbergatoms und dem elektronischen Ladungstransport in ungeordneten Festkörpern. Diese Analogie zwischen dynamischer Lokalisierung im Atom und Anderson-Lokalisierung im Festkörper ist bisher lediglich formal bzw. nur durch indirekte experimentelle Befunde belegt. Wir geben eine streutheoretische Motivation des *atomaren Leitwertes* im Sinne einer Landauer-Formel. Ausgehend von der Skalierungstheorie, welche das Lokalisierungsverhalten der elektronischen Wellenfunktion in mesoskopischen Proben beschreibt, soll für das Wasserstoffsystem getestet werden, ob ein einzelner Lokalisierungsparameter – wie im Festkörperproblem das Verhältnis von Lokalisierungslänge zu Probenlänge – das statistische Verhalten des atomaren Leitwertes universell determiniert. Atomare Leitwertfluktuationen werden in einem großen Parameterregime im numerischen Experiment beobachtet. Dadurch wird erstmals in umfangreichen numerischen Untersuchungen die qualitative Übereinstimmung zwischen den statistischen Eigenschaften des atomaren Transportproblems und des Ladungstransports durch mesoskopische Proben im Anderson-lokalisierten Bereich bestätigt. Das Verhalten des Atoms im Feld unterscheidet sich jedoch vom Festkörper darin, dass die betrachteten statistischen Variablen explizit vom Anfangszustand des Atoms und damit von der effektiven atomaren Probenlänge abhängen.

Abstract

This thesis presents a numerical and theoretical investigation of the analogy between the driven ionization process in hydrogen Rydberg atoms and the problem of charge transport in disordered solids. Up to now, this analogy between dynamical localization in atoms and Anderson localization in solid states has only formally been proven by theory, and only confirmed indirectly by laboratory experiments. We motivate the *atomic conductance* on the grounds of a scattering theoretical argument in the spirit of Landauer's formula. Starting from the predictions of the scaling theory of localization, we test whether there exists a single localization parameter for the hydrogenic system – such as the ratio of localization length to sample length in the case of mesoscopic systems – which in a universal sense determines the statistical properties of the atomic conductance. Atomic conductance fluctuations are numerically observed in a wide regime in the parameter space. We present for the first time comprehensive numerical evidence of the qualitative agreement between the statistical properties of the atomic transport problem, and the charge transport through mesoscopic samples in the Anderson-localized regime. The results for hydrogen atoms deviate from the predictions made for solid states in the sense that the investigated statistical variables explicitly depend on the initial atomic state, i. e., on the effective atomic sample length.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einführung

1.1 Hintergrund und Fragestellung

Die exponentielle Lokalisierung der elektronischen Wellenfunktion entlang eindimensionaler Festkörper mit Unordnung wurde erstmals von Anderson [1, 2] vorhergesagt. Quantenmechanische Interferenz der verschiedenen Transmissionsamplituden durch die Probe unterdrückt den elektronischen Transport und damit die Leitfähigkeit, vorausgesetzt die Ausdehnung der Probe ist groß gegenüber der sie charakterisierenden Lokalisierungslänge.

Der Andersonsche Ansatz beschreibt den Transport auf einem Gitter, das durch Unordnung in den lokalen Energien an den Gitterplätzen bzw. in den diese koppelnden Übergangsmatrixelementen gekennzeichnet ist. Die konzeptionelle Einfachheit des Modells erlaubt dessen Anwendung nicht nur in ungeordneten Festkörpern, sondern in einer großen Klasse quantenmechanischer Transportprobleme. Die dabei betrachteten Systeme sind im Allgemeinen aufgrund der statistisch zu beschreibenden Unordnung oder wegen der auftretenden chaotischen Dynamik sehr komplex. So findet man Lokalisierung im Andersonschen Sinne über das Festkörperproblem hinaus etwa in der Anregungsrelaxation von Molekülen [3, 4], bei optisch angeregtem Energietransfer in Polymeren („molekularen Drähten") [5, 6] oder auch in dielektrischen Mikrostrukturen [7, 8].

In der Festkörperphysik wird nach der Skalierungstheorie der Lokalisierung [9] die Transmission eines Ensembles von Proben endlicher Länge durch das Verhältnis der Lokalisierungslänge zur Probenlänge determiniert [10]. Dies ist jedoch nur in statistischem Sinne zu verstehen: Der real gemessene Leitwert fluktuiert von Probe zu Probe unter Umständen über mehrere Größenordnungen [11, 12].

Eine ganz ähnliche Situation werden wir in dieser Arbeit für ein einfaches atomares System unter periodischem äußeren Antrieb [13–15] antreffen. Wasserstoff-Rydbergatome zeigen im Bereich der *dynamischen Lokalisierung* [16, 17] der Wellenfunktion auf der Energieachse (analog zur entlang des Festkörpergitters lokalisierten elektronischen Wellenfunktion) eine gegenüber diffusivem Phasenraumtransport stark verminderte Ionisationswahrscheinlichkeit (analog der Transmissionswahrscheinlichkeit durch mesoskopische Proben). Die Ionisationswahrscheinlichkeit wird nach der Theorie der dynamischen Lokalisierung [16, 17] ebenfalls durch das Verhältnis von Lokalisierungslänge zu Probenlänge bestimmt. Letztere ist im atomaren System durch das Ionisationspotential des Anfangszustandes in Vielfachen der Photonenenergie gegeben. Entsprechend wurde in [15] ein *atomarer Leitwert* definiert, der aber – wie im Festkörper – bei verschiedenen Realisierungen des atomaren Transportproblems erratisch fluktuiert.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist nun, die bereits in der Terminologie („Anderson-Lokalisierung“ bzw. „dynamische Lokalisierung“) nahegelegte Analogie zwischen dem atomaren Ionisationsprozess und dem elektronischen Ladungstransport in ungeordenten Festkörpern durch eine **quantitative** Untersuchung der statistischen Eigenschaften des atomaren Leitwertes kritisch zu würdigen. Neben den ebenso beeindruckenden wie überraschenden, quantitativen Belegen für diese Analogie, die erstmals in [15] geliefert wurden und hier durch zusätzliche Daten in einem wesentlich erweiterten Parameterbereich gestützt werden, beschreiben wir auch deutliche Abweichungen vom Festkörperszenario. Diese Abweichungen, die in [15] vollkommen unberücksichtigt blieben, sind letztlich auf die endliche Größe von $\hbar$ zurückzuführen. Eine streutheoretische Formulierung des Ionisationsprozesses ermöglicht schließlich die Interpretation des atomaren Leitwertes als einem verallgemeinerten Landauer-Leitwert [18].

1.2 Gliederung

In **Kapitel 2** wird das atomare Problem vorgestellt und auf den Einfluss der klassischen auf die quantenmechanische Dynamik eingegangen.

Kapitel 3 gibt eine Übersicht über die mathematischen Hilfsmittel, mit denen das Wasserstoffatom im Mikrowellenfeld näherungsfrei beschrieben und die Ionisationsraten **exakt** berechnet werden können. In Anlehnung an gängige Methoden zur Behandlung von Elektronenstreuung an Atomen in Gegenwart eines elektromagnetischen Feldes wird eine streutheoretische Beschreibung des atomaren Transportprozesses gegeben.

Kapitel 4 ist dem Ionisationsverhalten von Wasserstoff im Mikrowellenfeld und dabei vor allem dem Phänomen der dynamischen Lokalisierung gewidmet.

Kapitel 5 referiert die für die Prüfung der Analogie zwischen Atom und Festkörper relevanten Konzepte aus der mesoskopischen Physik. Insbesondere werden hierbei die unterschiedlichen Zugänge von Landauer und Thouless zum Ladungstransport herangezogen.

Kapitel 6 präsentiert die zentralen numerischen Resultate der Arbeit. Die statistischen Eigenschaften des atomaren Leitwertes als Funktion der Feldparameter und des atomaren Anfangszustandes werden den Vorhersagen für ungeordnete Festkörperproben gegenübergestellt. Dadurch wird erstmals ein umfangreicher quantitativer Vergleich der a priori sehr unterschiedlichen Systeme im lokalisierten Regime ermöglicht.

Die Arbeit schließt mit einem Resümee der Ergebnisse und einem Ausblick auf weiterführende Fragestellungen in **Kapitel 7**.

Kapitel 2

Rydbergzustände im Mikrowellenfeld

2.1 Hamiltonoperator des Problems

Wir betrachten ein hochangeregtes Wasserstoffatom in einem äußeren, linear polarisierten, monochromatischen Mikrowellenfeld. Das Feld sei rein klassischer Natur und werde beschrieben durch ein skalares Potential $\phi(\vec{r},t)$ und ein Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r},t)$. Unter Vernachlässigung relativistischer Effekte und unter der Annahme eines unendlich schweren Atomkerns erhalten wir in SI-Einheiten folgenden Hamiltonoperator:

$$\mathrm{H}_{\mathrm{sys}} = \frac{1}{2m}\left(\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right)^2 - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + q\phi(\vec{r},t). \tag{2.1}$$

Zur weiteren Vereinfachung benutzen wir atomare Einheiten ($m \equiv |q| \equiv \hbar \equiv 4\pi\epsilon_0 \equiv 1$) und vernachlässigen die ponderomotive Energieverschiebung, die durch den quadratischen Term in $\vec{A}(\vec{r},t)$ verursacht wird. Letzterer kann durch eine geeignete Eichtransformation der Wellenfunktion beseitigt werden, was zu einem unwesentlichen Phasenfaktor führt [19]. Ferner beschränken wir uns in der Dipolnäherung [20] auf ein räumlich konstantes Feld mit harmonischer Zeitabhängigkeit $\vec{F} = F\cos(\omega t)\vec{e}_z$. Dies setzt voraus, dass die Wellenlänge des Feldes viel größer als die Ausdehnung des Atoms bleibt, was bei den betrachteten Frequenzen im Mikrowellenbereich erfüllt ist.

Die vorliegende Arbeit beschränkt sich außerdem auf den Fall eines eindimensionalen Konfigurationsraumes für das Elektron entlang der Feldpolarisationsachse. Dies ist gerechtfertigt, weil unser Modellatom dann bereits die wesentlichen Eigenschaften zeigt, die für die quantenmechanisch bedingte *dynamische Lokalisierung* (s. Abschnitt 4.2) entscheidend sind [16, 21, 22]. Das Verhalten von dreidimensionalen Atomen in sogenannten extremal parabolischen Zuständen ist darüber hinaus dem des eindimensionalen Falles sehr ähnlich [22, 23]. Diese hauptsächlich entlang der Polarisationsachse des äußeren Feldes lokalisierten Zustände sind im Laborexperiment realisierbar [24, 25]. Ein direkter Vergleich mit dem theoretischen Modell und „numerischen Experimenten“ ist somit möglich. Die einzige unter Umständen relevante Näherung steckt in der Annahme, dass das Mikrowellenfeld instantan in voller Stärke mit dem Atom wechselwirkt [26]. Die Näherung des plötzlichen Einschaltvorgangs mit zeitlich konstanter Feldamplitude $F(t) = F$ ist jedoch für den Test der Analogie zum Festkörperproblem zunächst unerheblich [21].

Unter obigen Voraussetzungen erhalten wir in der Längeneichung (im Anhang A sind die gebräuchlichen Eichungen zusammengefasst) folgenden vereinfachten Hamiltonoperator:

$$\begin{aligned} \mathrm{H}_{\mathrm{sys}} &= \frac{1}{2}p^2 + V(z) + Fz\cos(\omega t), \\ \text{mit} \quad V(z) &= \begin{cases} -\frac{1}{z} & : \quad z > 0 \\ \infty & : \quad z \leq 0. \end{cases} \end{aligned} \tag{2.2}$$

2.2 Klassische Dynamik

Gleichung (2.2) kann auch als Hamiltonfunktion gelesen werden, welche uns die rein klassischen Bewegungsgleichungen für das Atom liefert. Wegen der Singularität des Coulombpotentials werden in der Regel semiparabolische Koordinaten eingeführt [27], welche die durch die Hamiltonfunktion induzierten Bewegungsgleichungen regularisieren:

$$u := \sqrt{2z}, \qquad\qquad p_u := up. \tag{2.3}$$

Weiterhin wird eine neue Zeitvariable τ definiert durch:

$$dt =: u^2 d\tau = 2z d\tau. \tag{2.4}$$

Die Oszillatorzeit τ (der Name leitet sich von der Tatsache ab, dass die Bewegungsgleichungen ohne Feld in diesen Variablen denen eines harmonischen Oszillators entsprechen [27]) vergeht in der unmittelbaren Nähe des Atomkerns schneller als die reale Zeit t, dagegen langsamer weit entfernt vom atomaren Zentrum. Die transformierte Hamiltonfunktion

$$\mathrm{H}_{\mathrm{sys}} = \frac{1}{2}\left(\frac{p_u}{u}\right)^2 - \frac{2}{u^2} + \frac{1}{2}Fu^2\cos(\omega t) \tag{2.5}$$

führt auf folgende Bewegungsgleichungen:

$$\begin{aligned} \frac{du}{d\tau} &= p_u & \frac{dt}{d\tau} &= u^2 \\ \frac{dp_u}{d\tau} &= 2u(\mathrm{H}_{\mathrm{sys}} - Fu^2\cos(\omega t)) & \frac{d\mathrm{H}_{\mathrm{sys}}}{d\tau} &= -\frac{1}{2}\omega F u^4 \sin(\omega t). \end{aligned} \tag{2.6}$$

In ihnen tritt die reale Zeit t als zusätzliche dynamische Variable auf. Diese Gleichungen lassen sich z. B. mittels verbesserter Runge-Kutta-Verfahren [28, 29] numerisch integrieren. Die klassische Dynamik kann dann mit Hilfe von stroboskopischen Phasenraumaufnahmen anschaulich verfolgt werden. Zum besseren Vergleich zwischen der klassischen und der quantenmechanischen Zeitentwicklung transformiert man dazu häufig auf die kanonischen Winkel- und Wirkungsvariablen (Θ, I) des ungestörten Wasserstoffatoms [30]:

$$\Theta := \begin{cases} 2\eta - \sin(2\eta) & : \quad p \geq 0 \\ 2\pi - 2\eta + \sin(2\eta) & : \quad p < 0 \end{cases}$$
$$I := \sqrt{-\frac{1}{2E}}. \tag{2.7}$$

Dabei bezeichnet E die Energie, p den Impuls des Elektrons und $\eta := \arcsin\left(\sqrt{-Ez}\right)$ die exzentrische Anomalie [31].

Ohne äußeres Feld $(F = 0)$ ist das System integrabel, d. h. exakt lösbar. Die Trajektorien im Phasenraum liegen auf invarianten Tori, da die Energie eine Erhaltungsgröße darstellt, und somit die Bewegung auf die Energieschale eingeschränkt ist. Resonante Tori, bei denen die treibende Frequenz ω ein ganzzahliges Vielfaches der Keplerfrequenz ω_K ist, bilden bei endlichem Feld $F \neq 0$ hyperbolische (instabile) und elliptische (stabile) Fixpunkte aus [32, 33], deren Anzahl nach dem Poincaré-Birkhoff-Theorem [34, 35] für resonante Tori gleich sein muss. Die Hauptresonanz oder Eins-Eins-Resonanz $(\omega/\omega_K = 1)$ umgibt den elliptischen Fixpunkt erster Ordnung und nimmt dabei ein relativ großes Phasenraumvolumen ein. Ihr hyperbolischer Fixpunkt führt auf eine Separatrixkurve, welche die Hauptresonanz umschließt. Entsprechend mehr Fixpunkte mit kleineren elliptischen Inseln entstehen um invariante Tori höherer Frequenzverhältnisse ω/ω_K. Nichtresonante Tori werden mit wachsender Störung deformiert und lösen sich schließlich erst nach und nach unter dem Einfluss des äußeren Felds entsprechend dem Kolmogoroff-Arnold-Moser-Theorem (KAM-Theorem) [36, 37] auf. Sie werden zu Cantori oder vagen Tori [38–41] (mit Cantormengen ähnlicher, fraktaler Struktur) und damit teilweise durchlässig für den Phasenraumfluss.

Die Abbildung 2.1 zeigt den Phasenraumbereich um die Hauptresonanz für eine wachsende Amplitude F_0 des in Einheiten des Coulombfeldes zwischen Kern und Elektron skalierten äußeren Feldes (vgl. Abschnitt 2.3). Für schwache Felder sind die irregulären Trajektorien, die zunächst bevorzugt in der Umgebung der Separatrix entstehen, noch durch die verbleibenden KAM-Tori höherer Wirkung begrenzt. Mit zunehmender Störung lösen sich diese nichtresonanten Tori allerdings auf, so dass nun Trajektorien, die tief unterhalb der Hauptresonanz starten, in Bereiche großer Wirkung vordringen können. Dieses Vordringen führt schließlich zur klassischen Ionisation des Elektrons [42]. Wird die Feldamplitude zu groß, bleibt im Allgemeinen nur die Hauptresonanz als geschlossene Struktur erhalten, bevor auch sie sich mit weiter wachsender Störung auflöst [43]. In diesem Gebiet, das von den tiefer liegenden Wirkungen der stark gebunde-

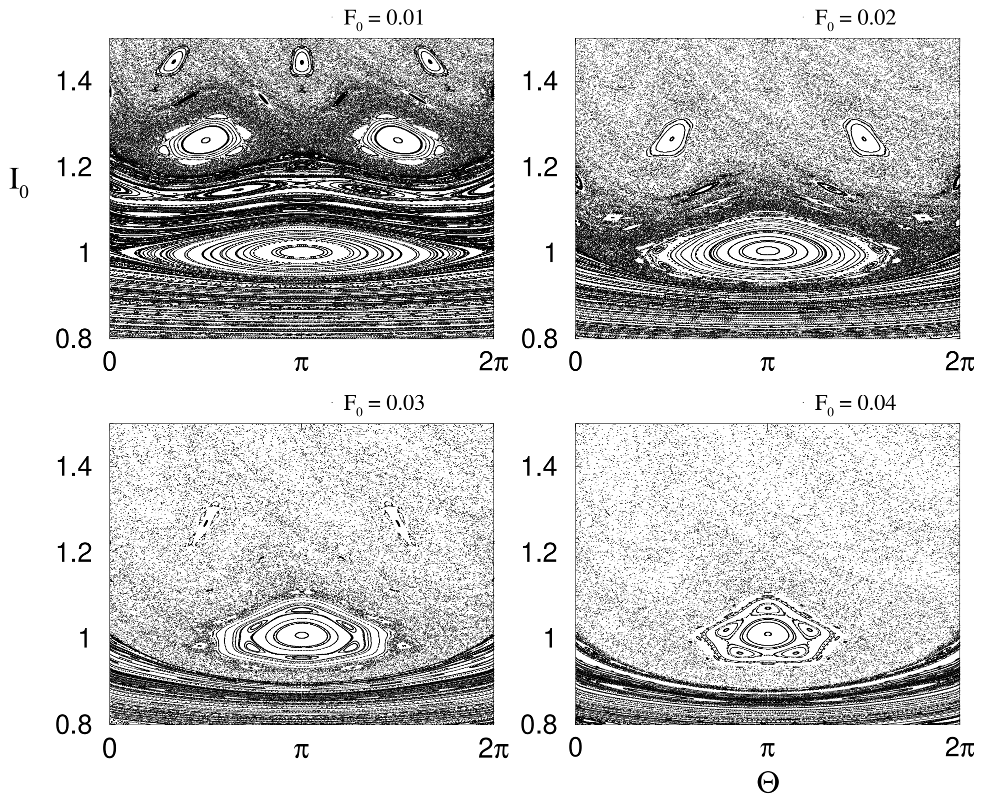

Abb. 2.1: Poincaré-Schnitte durch den Phasenraum der durch die Gleichungen (2.6) beschriebenen Dynamik zu fester Phase $\omega t = 0$ des treibenden Feldes. Aufgetragen sind die Winkelvariable Θ und die Wirkungsvariable I aus (2.7). Die Wirkungen $I_0 = I/n_0$ sind auf den Anfangszustand mit $E_0 = -1/(2n_0^2)$ normiert. Die Feldfrequenz in Einheiten der Keplerfrequenz des Elektrons mit Anfangsenergie E_0 beträgt $\omega_0 = 1.0$. Die Feldamplitude relativ zur Coulombfeldstärke wächst von $F_0 = 0.01$ (oben links) auf $F_0 = 0.04$ (unten rechts), wobei sich mit zunehmender Störung immer mehr Tori auflösen.

nen, wenig gestörten Bahnen deutlich durch einen Bereich irregulärer Dynamik getrennt ist, bleibt das System dann zunächst lokal integrabel.

Die beschriebene Phasenraumstruktur zeigt universellen Charakter in dem Sinne, dass sie nicht nur für eine spezielle Wahl der Feldparameter F und ω auftritt. Die klassische Dynamik ist vielmehr durch eine Skalierungseigenschaft gekennzeichnet, die aus der Homogenität der Hamiltonfunktion (2.2) folgt und im nächsten Abschnitt näher erläutert wird.

2.3 Klassische Skalierungseigenschaften

Eine Skalentransformation, welche die in Tabelle 2.1 aufgeführten Größen auf die Skala der ungestörten klassischen Bewegung des Rydbergelektrons im Zustand $n_0 = 1$ normiert, lässt die klassischen Bewegungsgleichungen unseres Problems invariant. Unter einer derartigen Transformation bleibt der klassische Phasenraum isomorph. Das heißt, dass unterschiedliche Anfangsbedingungen mit verschiedenen elektronischen Anfangszuständen n_0 in den skalierten Variablen (z_0, p_0, t_0) zu genau der gleichen, klassischen Dynamik führen [27, 44, 45].
Skalierte Variablen stellen die Grundlage für den Vergleich der klassischen

$z \to z_0 := z/n_0^2$	$p \to p_0 := pn_0$	$t \to t_0 := t/n_0^3$
$F \to F_0 := Fn_0^4$	$\omega \to \omega_0 := \omega n_0^3$	$\mathrm{H_{sys}} \to \mathrm{H_{sys_0}} := \mathrm{H_{sys}} n_0^2$

Tab. 2.1: Skalentransformation, wobei n_0 eine beliebige positive Zahl sein kann. Hier sei n_0 stets mit der Hauptquantenzahl des atomaren Anfangszustandes identifiziert.

und der quantenmechanischen Dynamik im Sinne des Korrespondenzprinzips dar. Die Operatoren der Quantenmechanik genügen denselben Skalierungseigenschaften wie die klassischen Observablen. Es gilt jedoch für die Kommutatorrelation von Orts- und Impulsoperator:

$$i\hbar = [z, p] \to \left[\frac{z}{n_0^2}, pn_0\right] = i\frac{\hbar}{n_0}, \tag{2.8}$$

was zu der Definition eines effektiven Wirkungsquantums $\hbar_{\text{eff}} := \hbar/n_0$ führt. Damit wird auch die Schrödingergleichung formal unabhängig vom atomaren Anfangszustand n_0. Dennoch steckt im endlichen $\hbar_{\text{eff}}$ die Information über den Ausgangszustand. Anschaulich bedeutet die Einführung einer effektiven Planckschen Konstante, dass für hohe atomare Anregungen das Unschärfeprodukt im Sinne Heisenbergs bezüglich des fest skalierten Phasenraums kleiner wird. Die atomare Wellenfunktion kann mit wachsendem n_0 die klassischen Phasenraumstrukturen immer besser auflösen und sollte im semiklassischen Limes ($\hbar_{\text{eff}} \to 0$) die klassische Wahrscheinlichkeitsverteilung widerspiegeln.

Dass die Eigenfunktionen des quantisierten Problems klassische Phasenraumstrukturen im Rahmen der Unschärferelation nachahmen, wurde für verschiedene zeitunabhängige Systeme gezeigt [32, 46–48]. Entsprechendes gilt für periodisch zeitabhängige Probleme. Insbesondere finden sich für nichtlineare Systeme Quasienergiefunktionen (dieser Begriff wird im nächsten Kapitel erläutert), welche auf lokal integrablen Resonanzinseln lokalisiert sind [49, 50]. Unter anderem wurde auch die Existenz nichtdispergierender Wellenpakete nachgewiesen, die im Ortsraum scharf lokalisierte Dichtepakete darstellen, welche der klassischen Trajektorie des elliptischen Fixpunktes ohne jede Dispersion folgen [45, 51–55].

Es zeigt sich ferner, dass die klassische Phasenraumstruktur Spuren in der quantenmechanischen Zeitentwicklung hinterlassen kann [56]. Cantori als Reste integrabler Dynamik im klassischen Phasenraum sind insbesondere in der Lage, den quantenmechanischen Phasenraumtransport [32, 57] und gegebenenfalls die Ionisationsraten [51, 58, 59] empfindlich zu beeinflussen. Es bestehen somit Korrelationen zwischen den Lebensdauern der Rydbergzustände im Mikrowellenfeld und den Lokalisierungseigenschaften der Elektronendichte im klassischen Phasenraum. Dennoch erlauben diese Korrelationen nur statistische Vorhersagen über die Ionisationsraten einzelner quantenmechanischer Eigenzustände. Buchleitner und Delande [59] geben ein konkretes Beispiel zweier Wellenfunktionen an, von denen die im Phasenraum stärker lokalisierte die kürzere (!) Lebensdauer hat.

Unser Ziel ist nun, das Ionisationsverhalten von Wasserstoff im Mikrowellenfeld im Vergleich zum Ladungstransport in ungeordneten Festkörpern genau zu untersuchen. Zur eleganten Berechnung der quantenmechanischen Eigenenergien des Hamiltonoperators H_{sys} (2.2) und damit der Ionisationswahrscheinlichkeiten des Wasserstoffatoms bedarf es aber zunächst einiger mathematischer Hilfsmittel, die im Folgenden vorgestellt werden.

Kapitel 3

Mathematische Hilfsmittel

Dieses Kapitel stellt die Techniken vor, mit deren Hilfe sich periodisch getriebene Systeme, die an Zerfallskanäle gekoppelt sind, **exakt** beschreiben lassen. Die zeitliche Periodizität erlaubt unter Verwendung des *Floquet-Theorems* die Überführung in ein zeitunabhängiges Problem. Den Ionisationszerfall von Atomen in äußeren Feldern kann man ohne zusätzliche Näherungsannahmen mit der Methode der *komplexen Skalierung* sehr gut handhaben.
Die formale Analogie des Ionisationsprozesses mit der Streuung von Elektronen an Atomen in Gegenwart eines Strahlungsfeldes führt schließlich auf eine streutheoretische Definition des *atomaren Leitwertes*.

3.1 Floquet-Theorie

Das Floquet-Theorem ermöglicht es, für zeitlich periodische Hamiltonoperatoren die Schrödingergleichung auf ein stationäres Problem zu reduzieren. Das von Floquet zunächst für endlichdimensionale Räume aufgestellte Theorem [60] kann auf unendlichdimensionale Hilberträume erweitert werden [61, 62]. Es besagt, dass die Lösung der Schrödingergleichung mit einem Hamiltonoperator

$$\mathrm{H}(t+T) = \mathrm{H}(t) \qquad (T = 2\pi/\omega) \tag{3.1}$$

in der Form

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_{\epsilon} c_\epsilon e^{-i\epsilon t}\,|\epsilon(t)\rangle, \\ \text{mit} \quad |\epsilon(t)\rangle &= |\epsilon(t+T)\rangle \qquad (\epsilon \in \mathbb{R}), \end{aligned} \tag{3.2}$$

geschrieben werden kann, wobei die $c_\epsilon \in \mathbb{C}$ zeitunabhängige Entwicklungskoeffizienten sind. Die ϵ heißen *Quasienergien.* Entsprechend nennt man die Zustände $|\epsilon(t)\rangle$ *Quasienergiefunktionen.* Nach Einsetzen von (3.2) in die zeitabhängige

Schrödingergleichung erhält man für jeden der einzelnen Summanden:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\left[e^{-i\epsilon t}\,|\epsilon(t)\rangle\right] = H(t)e^{-i\epsilon t}\,|\epsilon(t)\rangle \tag{3.3}$$

$$\Rightarrow \quad (H(t) - i\partial_t - \epsilon\,|\epsilon(t)\rangle) = 0. \tag{3.4}$$

Die Einführung des Floquet-Hamiltonoperators auf dem durch die auf dem Kreis $\mathbb{T}_\omega := \mathbb{R}\backslash(2\pi/\omega)$ quadratintegrierbaren Funktionen ($\mathcal{L}^2(\mathbb{T}_\omega)$) erweiterten Hilbertraum $\mathcal{L}^2_H$

$$\mathcal{H} : \mathcal{L}^2_H \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{T}_\omega) \to \mathcal{L}^2_H \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{T}_\omega), \qquad \mathcal{H} := \mathrm{H}(t) - i\partial_t, \tag{3.5}$$

liefert ferner eine Eigenwertgleichung, die formal der zeitunabhängigen Schrödingergleichung ähnelt:

$$\mathcal{H}\,|\epsilon(t)\rangle = \epsilon\,|\epsilon(t)\rangle. \tag{3.6}$$

Dies ist eine partielle Differentialgleichung in Ort und Zeit, welche im Allgemeinen schwer zu lösen ist. Die Periodizität erlaubt jedoch eine weitere Vereinfachung. Zunächst sei angemerkt, dass die Lösungsfunktionen von (3.6) in Äquivalenzklassen zerfallen: mit $|\epsilon(t)\rangle$ (Eigenwert ϵ) ist auch

$$e^{ik\omega t}\,|\epsilon(t)\rangle = \,|(\epsilon + k\omega)(t)\rangle \qquad (k \in \mathbb{Z}) \tag{3.7}$$

eine Lösung von (3.6) zu dem Energieeigenwert $\epsilon + k\omega$. Das Spektrum des Floquet-Operators wiederholt sich daher periodisch in Einheiten der Frequenz ω des äußeren Feldes. Folglich genügt es für die Berechnung der Quasienergien, sich auf eine dieser *Floquet-Zonen* zu beschränken. Das Blochsche Theorem [63] aus der Festkörperphysik ist ein Spezialfall des allgemeineren Floquet-Theorems. Nur ist das Problem eines Elektrons in einem räumlich periodischen Potential von Natur aus zeitlich stationär beschreibbar. Das Pendant einer Brillouinzone [64,65] für periodische Potentiale im Impulsraum ist die Floquet-Zone der Breite ω im Energieraum. Wie sich in Abschnitt 5.1 zeigen wird, ist diese Analogie von Zeit- und Impulsraum bzw. Energie- und Ortsraum die Basis der formalen Äquivalenz periodisch getriebener Systeme und Anderson-lokalisierter Festkörper.

3.2 Eigenwertproblem im erweiterten Hilbertraum

Wir wenden nun das Floquet-Theorem auf den Hamiltonoperator des Rydbergatoms im Mikrowellenfeld an. Der Hamiltonoperator (2.2) lässt sich mit Hilfe der Eulerschen Formel [66] schreiben als:

$$\begin{aligned} \mathrm{H}_{\mathrm{sys}} &= \mathrm{H}_{\mathrm{at}} + \frac{1}{2}Fz\left(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}\right), \\ \text{mit} \quad \mathrm{H}_{\mathrm{at}} &:= \frac{1}{2}p^2 + V(z). \end{aligned} \tag{3.8}$$

Unter Ausnutzung ihrer zeitlichen Periodizität können wir die Quasienergiefunktionen in eine Fourierreihe entwickeln

$$|\epsilon(t)\rangle = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\omega t}\, |\epsilon_k\rangle, \tag{3.9}$$

mit zeitunabhängigen Fourierkomponenten $|\epsilon_k\rangle$ aus dem Lösungsraum von H_{at}. Setzt man diese Entwicklung in die Floquet-Eigenwertgleichung (3.6) ein und benutzt die Vollständigkeit der Entwicklungsfunktionen, erhält man das folgende gekoppelte Differentialgleichungssystem im Hilbertraum von H_{at}:

$$(\mathrm{H}_{\mathrm{at}} - k\omega - \epsilon)\, |\epsilon_k\rangle = \frac{1}{2} F z \left(|\epsilon_{k+1}\rangle + |\epsilon_{k-1}\rangle \right) \quad (k \in \mathbb{Z}). \tag{3.10}$$

Somit haben wir unser erstes Ziel erreicht: Das zeitabhängige Problem ist auf zeitunabhängige Gleichungen zurückgeführt, wobei wegen der harmonischen (monochromatischen!) externen Anregung nur benachbarte Fourierkomponenten direkt miteinander koppeln. Die Gestalt der Gleichungen erinnert an die Tight-Binding-Struktur, die als einfaches Modell zur Beschreibung der Elektronenbewegung in Festkörpern dient [64, 65] und in Abschnitt 5.1 im Zusammenhang mit der Andersonschen Lokalisierungstheorie vorgestellt wird.

Die Schwierigkeit liegt nunmehr darin, dass das Spektrum von H_{at} nicht diskret, sondern rein kontinuierlich ist [67]. Im Limes $F \to 0$ entkoppeln obige Gleichungen, und jede der Fourierkomponenten $|\epsilon_k\rangle$ löst eine zeitunabhängige Schrödingergleichung zum Energieeigenwert $\epsilon + k\omega$, wobei für die Energien $\epsilon + k\omega = -1/(2n_0^2)$ gebundene Zustände und für $\epsilon + k\omega > 0$ asymptotisch „freie Coulombwellen“ vorliegen [68, 69]. Diese Situation wird durch die in Abbildung 3.1 skizzierten Energieleitern zu dem jeweiligen Quantenindex k veranschaulicht. Jene gebundenen Zustände, die weniger als ω von der Ionisationsschwelle entfernt sind, koppeln bei endlicher Störung ($F \neq 0$) an das benachbarte Kontinuum. Die ungestörten atomaren Zustände werden durch die Kopplung der verschiedenen Photonenkanäle k zu den Floquet-Zuständen, welche die „dressed states“ [70] des Atoms im Feld repräsentieren. Das Elektron kann nun durch Absorption von Photonen aus dem externen Feld Energie gewinnen und schließlich ionisieren. Für die hier betrachteten Mikrowellenfrequenzen beträgt der Abstand des gebundenen Anfangszustands zur Ionisationsschwelle allerdings ein Vielfaches der Photonenenergie ω. An dem Multiphotonenprozess, der zur Ionisation führt, sind dann wenigstens N Fourierkomponenten beteiligt, wobei sich N leicht über den Energieabstand ΔE_{n_0} zwischen dem Anfangszustand und dem Kontinuum abschätzen lässt:

$$\Delta E_{n_0} = 0 - \left(-\frac{1}{2n_0^2} \right) \quad \Rightarrow \quad N \gtrsim N_0 = \frac{\Delta E_{n_0}}{\omega} \overset{\text{Tab.2.1}}{=} \frac{n_0}{2\omega_0}. \tag{3.11}$$

Wir verwenden für unsere Berechnungen atomare Anfangszustände n_0 zwischen 40 und 100 und skalierte Frequenzen von etwa $\omega_0 \simeq 2$, woraus sich für N Werte zwischen 10 und 25 ergeben.

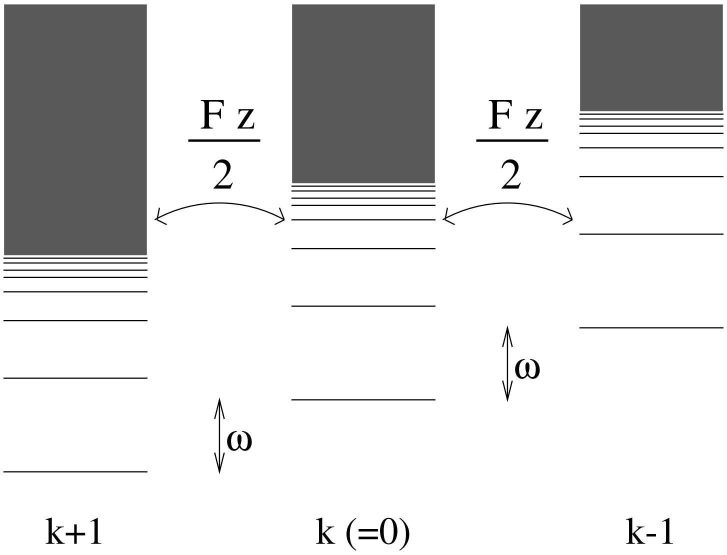

Abb. 3.1: Das äußere Feld koppelt über den Dipoloperator z die gebundenen Wasserstoffzustände (waagerechte Linien) an das atomare Kontinuum (schraffierte Flächen). k bezeichnet den Photonenindex. Die Skizze veranschaulicht die Struktur der Gleichung (3.10).

Im Grenzfall $F \to 0$ sind somit die diskreten atomaren Eigenwerte vollständig in das kontinuierliche Spektrum eingebettet. Für $F \neq 0$ verschwindet dieser diskrete Anteil des Floquet-Hamiltonoperators [67,71], d. h. es existiert im Hilbertraum der quadratintegrierbaren Funktionen $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{T}_\omega)$ kein Zustand, der die Floquet-Eigenwertgleichung (3.6) löst. Um nun den Zerfall des anfänglich gebundenen Rydbergatoms im Feld zu beschreiben, kann man rein auslaufende (Siegert-)Randbedingungen an die Lösungsfunktion stellen [72]. Damit werden die Quasienergiefunktionen des „halben“ Streuvorgangs zu exponentiell divergenten Wellen, und die Eigenwertgleichung lässt sich nur zu komplexen, aber diskreten Eigenenergien lösen.

Im Folgenden wird eine Methode vorgestellt, mit der sich diese komplexen Eigenwerte für zerfallende Systeme **exakt** gewinnen lassen. Die Zerfallsrate ist dabei durch den Imaginärteil der komplexen Eigenenergien gegeben.

3.3 Komplexe Skalierung

Für endliche Feldstärken werden die Quasienergiefunktionen des feldfreien Falls zu Resonanzen eines formalen Streuproblems (vgl. Abschnitt 3.5), die durch die Polstellen der Streumatrix definiert sind [73]. Ein solcher Pol tritt als Funktion der komplexen Energien oder äquivalent als Funktion komplexer Wellenzahlen auf und entspricht anschaulich einer Situation, in der das Verhältnis der

Amplituden von ein- zu auslaufender Welle singulär ist [74]. Rein auslaufende Randbedingungen führen auf eine Situation, die im Rahmen von Streuproblemen in der Kernphysik schon 1939 von Siegert [72] formuliert wurde. Anstelle der Streumatrix lässt sich der Resolventenoperator (die Greensche Funktion) des Problems betrachten. Die Polstellen der Streumatrix stimmen mit denen der Resolvente auf dem zweiten Riemannschen Blatt überein [73]. Die Matrixelemente der Resolvente $G(z) = (z{-}\mathrm{H})^{-1}$ sind außerhalb des Spektrums des zugehörigen Hamiltonoperators H in der komplexen Ebene analytisch. Auf der reellen Achse haben sie an den Stellen diskreter Eigenwerte von H Polstellen. In jenen Bereichen der reellen Achse, die zum kontinuierlichen Spektrum gehören, treten „Schlitze" auf, an denen die Resolvente als Funktion der komplexen Variable z nicht analytisch von der oberen in die untere Halbebene fortsetzbar ist. Um die Eindeutigkeit zu wahren, führt man weitere Gaußsche Zahlenebenen (Argand-Diagramme [66]) ein, die man als höhere Riemannsche Blätter bezeichnet, auf welche die Greensche Funktion über den Schlitz hinweg analytisch fortgesetzt wird [75].

Mithin ergibt sich ein anschauliches Bild für die Entstehung von Resonanzen aus ursprünglich gebundenen Eigenzuständen: Die entsprechenden Pole der Greenschen Funktion auf der reellen Achse „rutschen" unter dem Einfluss der äußeren Störung $Fz\cos(\omega t)$ auf das zweite Riemannsche Blatt [71,76]. Die diskreten Singularitäten auf der reellen Achse verschwinden, und es bleiben nur die Schlitze übrig. Die Pole beeinflussen weiterhin das System – im Allgemeinen um so dominanter, je näher sie an der Realteilachse liegen [75]. Der Grund, weshalb der Zeitentwicklungsoperator eines Resonanzproblems trotz seines kontinuierlichen Spektrums als eine Summe über diskrete Zustände geschrieben werden kann, liegt in seiner Integraldarstellung mittels der Greenschen Funktion. Dabei lässt sich der Integrationspfad in der komplexen Ebene so wählen, dass (bis auf Randterme) nur die Summe der Residuen der Pole auf dem zweiten Riemannschen Blatt beiträgt [77].

Die Bedeutung der komplexen Energien der Streuzustände wird klar, wenn man ihre energieabhängigen Phasenfaktoren $\exp(-i\epsilon t) = \exp(-i\mathrm{Re}(\epsilon)t)\exp(\mathrm{Im}(\epsilon)t)$ betrachtet. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines rein auslaufenden Zustandes in einem gegebenen Raumvolumen muss zeitlich exponentiell abnehmen. Die Forderung nach auslaufenden Randbedingungen führt somit unweigerlich zu Energieeigenwerten in der unteren komplexen Halbebene ($\Gamma_\epsilon := -2\mathrm{Im}(\epsilon) > 0$). In der Ortsdarstellung entspricht dies der Asymptotik einer auslaufenden ebenen Welle $\psi(z)$, die nicht in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ liegt:

$$\psi(z) \overset{z\to\infty}{\longrightarrow} e^{ikz} \quad \text{mit} \quad k = |k|e^{i\gamma},\ \gamma := \frac{1}{2}\arg(\mathrm{Re}(\epsilon) - i\frac{\Gamma_\epsilon}{2}) < 0. \tag{3.12}$$

Eine Möglichkeit, diese unhandlichen, nicht quadratintegrierbaren Wellenfunktionen in normierbare zu transformieren, gibt uns die Methode der *komplexen Skalierung* (komplexen Dilatation, komplexen Rotation). Die mathematischen Grundlagen dafür basieren auf streng bewiesenen Sätzen der Funktionalanalysis und Operatortheorie [67, 71, 77, 78].

Die komplexe Rotation besteht in folgender komplexer Skalierung der Koordinaten in (2.2):

$$\begin{aligned} &z \to z e^{i\theta} \\ &p \to p e^{-i\theta}, \quad \text{mit} \quad 0 < \theta < \frac{\pi}{4}. \end{aligned} \tag{3.13}$$

Der Dilatationsoperator

$$R(\theta) := e^{-\frac{1}{2}(zp + pz)\theta} \tag{3.14}$$

leistet die entsprechende **nichtunitäre** Ähnlichkeitstransformation. Eine Anwendung dieser Transformation auf eine Wellenfunktion mit rein auslaufender Asymptotik liefert eine Funktion in $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, vorausgesetzt, der Rotationswinkel θ wurde hinreichend groß gewählt. Der Vergleich mit der Wellenfunktion (3.12) zeigt, dass $\theta > -\gamma$ gelten muss. Die komplexen Streuresonanzen ergeben sich aus den Eigenzuständen $|\epsilon_\theta\rangle$ des komplex rotierten Floquet-Hamiltonoperators (vgl. (3.5))

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\Theta := & R(\theta)\mathcal{H}R(-\theta) \\ = & \frac{1}{2}p^2 e^{-2i\theta} + V(ze^{i\theta}) + Fze^{i\theta}\cos(\omega t) - i\partial_t, \end{aligned} \tag{3.15}$$

mit der Eigenwertgleichung

$$\mathcal{H}_\Theta\,|\epsilon_\theta\rangle = \epsilon\,|\epsilon_\theta\rangle, \qquad |\epsilon_\theta\rangle \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{T}_\omega), \tag{3.16}$$

im erweiterten Hilbertraum.

Das Spektrum des dilatierten Floquet-Hamiltonoperators $\mathcal{H}_\Theta$ lässt sich nun folgendermaßen charakterisieren [67, 71, 77]:

1. Der rotierte Hamiltonoperator (3.15) ist komplex-symmetrisch (nicht hermitesch!), was aus der Nichtunitarität der Ähnlichkeitstransformation $R(\theta)$ folgt. In Matrixdarstellung sind linke und rechte Eigenvektoren identisch in dem Sinne, dass sie durch Transposition des Ortsanteils (nicht durch zusätzliche komplexe Konjugation!) ineinander übergehen. Nur der Zeitanteil der Eigenfunktionen wird dabei komplex konjugiert, da er nicht von der komplexen Skalierung betroffen ist.

2. Das Spektrum wiederholt sich mit der Periode ω. Der kontinuierliche Anteil besteht aus Halbgeraden, die, ausgehend von den Kontinuumskanten auf der reellen Achse, unter dem Winkel 2θ in die untere Hälfte des Argand-Diagramms laufen. Das Kontinuum von Eigenwerten hat somit die Form $\epsilon_\theta^k = m\omega + \mu e^{-2i\theta}$ ($\mu \in \mathbb{R}^+$, $k \in \mathbb{Z}$). Diese Kontinua entsprechen im Wesentlichen dem strukturlosen, „glatten“ Kontinuumsanteil des unskalierten Floquet-Hamiltonoperators.

3. Die diskreten Eigenwerte $\epsilon = \mathrm{Re}(\epsilon) - i\Gamma_\epsilon/2$ mit negativem Imaginärteil ($\Gamma_\epsilon > 0$) repräsentieren (für hinreichend großes θ) die photoionisierenden Resonanzzustände des unrotierten Problems. Die Realteile stimmen mit den reellen Eigenenergien, ihre Imaginärteile betragsmäßig mit den halben Ionisationsbreiten der Resonanzzustände überein. Die dazugehörigen Eigenfunktionen sind quadratintegrabel. Weiterhin sind die diskreten Eigenwerte unabhängig vom Rotationswinkel $\theta > -\gamma$.

Abbildung 3.2 verdeutlicht nochmals die Wirkung der komplexen Skalierung. Sie dreht die Schlitze, die den Kontinua entsprechen, in die untere komplexe Halbebene und legt damit die Resonanzpole frei, die durch die Wechselwirkung mit dem äußeren Feld aus den gebundenen atomaren Zuständen im zweiten Riemannschen Blatt entstehen. Dabei muss der Rotationswinkel θ genügend groß gewählt werden, um alle Pole aufzudecken.

Die Lösungsfunktionen der Eigenwertgleichung (3.16) können wie im unrotierten Fall durch ihre Fourierreihe dargestellt werden:

$$|\epsilon_\theta\rangle = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-ik\omega t}\,|\epsilon_\theta^k\rangle. \tag{3.17}$$

Die zeitunabhängigen Fourierkomponenten $|\epsilon_\theta^k\rangle$ lassen sich in der Ortsdarstellung in einem vollständigen und diskreten Satz von Funktionen entwickeln, wie er z. B. durch die Sturmschen Funktionen gegeben ist (vgl. Anhang B). Um explizit nochmals darauf hinzuweisen, dass beim Übergang vom rechten zum linken Eigenvektor nur der Zeitanteil zu konjugieren ist, markiert man oft die linken Eigenvektoren mit einem Balken:

$$\langle\overline{\epsilon_\theta(t)}|\,\mathcal{H}_\Theta = \epsilon\langle\overline{\epsilon_\theta(t)}|\,. \tag{3.18}$$

Unsere komplex-symmetrische Basis erfüllt wie im hermiteschen Falle eine Orthogonalitäts- und Vollständigkeitsrelation. Die verschiedenen $|\epsilon_\theta^k\rangle$ bilden einen biorthogonalen Basissatz [79], und es gilt somit:

$$\begin{aligned}
\langle\overline{\epsilon_\theta(t)}|\,\epsilon'_\theta(t)\rangle &= \delta_{\epsilon,\epsilon'} && \text{für alle } t,\\
\sum_{k,\Delta k} e^{i\Delta k\omega t}\langle\overline{\epsilon_\theta^{k+\Delta k}}|\,\epsilon'^{k}_\theta\rangle &= \delta_{\epsilon,\epsilon'} && \text{für alle } t,\\
\sum_{k}\langle\overline{\epsilon_\theta^{k+\Delta k}}|\,\epsilon'^{k}_\theta\rangle &= \delta_{\epsilon,\epsilon'}\delta_{\Delta k,0}. &&
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Die Vollständigkeitsrelation lautet schließlich:

$$\sum_{\epsilon,k,k'} e^{-i(k'-k)\omega t}\,|\epsilon_\theta^{k'}\rangle\langle\overline{\epsilon_\theta^k}| = \mathrm{id}, \tag{3.20}$$

wobei ϵ als Index der Zustände nur über eine Floquet-Zone läuft. Insbesondere gilt für $t = 0$:

$$\sum_{\epsilon,k,k'} |\epsilon_\theta^{k'}\rangle\langle\overline{\epsilon_\theta^k}| = \mathrm{id}. \tag{3.21}$$

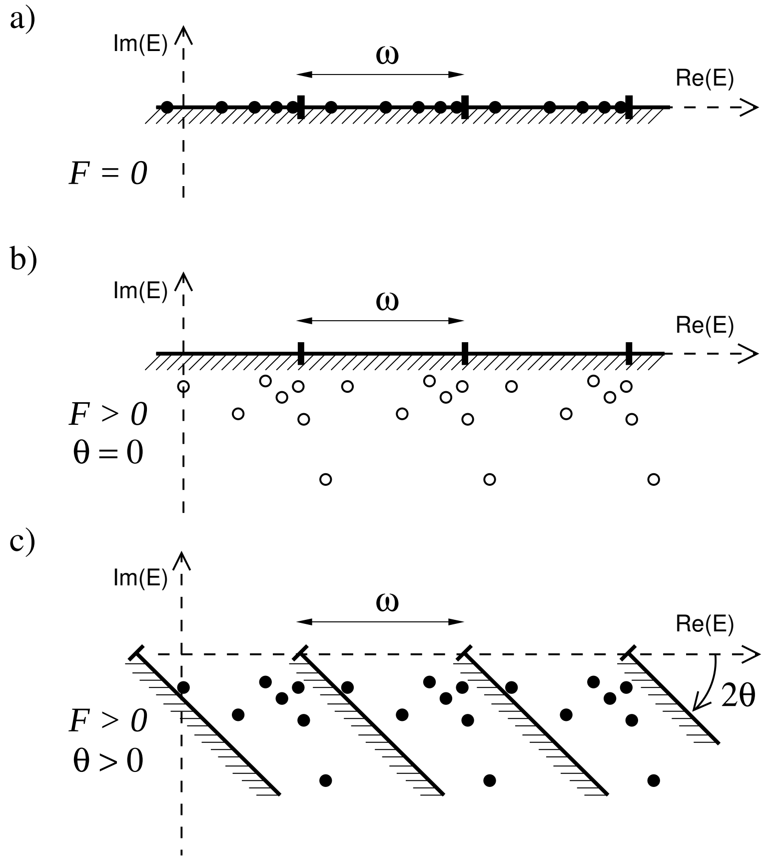

Abb. 3.2: Skizze des periodischen Spektrums des Floquet-Hamiltonoperators (3.5) bzw. (3.15) (mit Periode ω) im Argand-Diagramm: **a)** Grenzfall verschwindender Feldstärke: Auf der reellen Achse liegen die Pole, die den diskreten Eigenwerten entsprechen, und die Anteile des kontinuierlichen Spektrums. **b)** Unrotierter Fall mit endlicher Feldstärke: Im „physikalischen Blatt“ verschwinden die Polstellen. Auf der reellen Achse liegen nur noch Kontinuumszustände, und die Resonanzpole finden sich nach der analytischen Fortsetzung über den Schlitz der reellen Achse hinaus auf dem zweiten Riemannschen Blatt. Von dort aus üben die nahe an der Energieachse liegenden („dominanten“) Pole bestimmenden Einfluss aus [75]. **c)** Komplex rotierter Fall: Die atomaren Kontinua sind um den Winkel 2θ in die untere Halbebene gedreht, wodurch die Resonanzpole als komplexe Energieeigenwerte des dilatierten Floquet-Hamiltonoperators freigelegt werden.

Damit ist auch das zweite Ziel dieses mathematischen Exkurses erreicht: Die Berechnung der Quasienergien und ihrer Resonanzbreiten kann auf ein diskretes, zeitunabhängiges Eigenwertproblem im Raum quadratintegrabler Funktionen zurückgeführt werden. Das Einsetzen der Entwicklung (3.17) in die komplex rotierte Floquet-Eigenwertgleichung ergibt eine der Gleichung (3.10) analoge Beziehung, welche durch ein numerisches Diagonalisierungsverfahren auf einem diskreten, endlichdimensionalen Unterraum gelöst werden kann (vgl. Anhang B). Auf diese Weise lässt sich das Multiphotonenproblem ohne Zuhilfenahme störungstheoretischer Methoden im Rahmen numerischer Genauigkeit **exakt** behandeln.

3.4 Darstellung des Zeitentwicklungsoperators

Mit Hilfe der gewonnenen Eigenbasis kann nun der Zeitentwicklungsoperator auf dem Raum $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ explizit angegeben werden. Die zugehörige komplex rotierte Schrödingergleichung lautet:

$$i\partial_t \,|\psi_\theta(t)\rangle = \mathrm{H}_\theta \,|\psi_\theta(t)\rangle, \tag{3.22}$$

und unter Verwendung der Eigenzustände des rotierten Floquet-Hamiltonoperators $\mathcal{H}_\Theta$ ergibt sich für den dilatierten Zeitentwicklungsoperator folgender Ausdruck [21, 74]:

$$\mathrm{U}_\theta(t_2, t_1) = \sum_{\epsilon,k,k'} e^{-i\epsilon(t_2-t_1)} e^{-ik'\omega t_2} e^{ik\omega t_1} \,|\epsilon_\theta^{k'}\rangle\langle\overline{\epsilon_\theta^{k}}| \qquad (t_2 \geq t_1). \tag{3.23}$$

Wie schon erwähnt, benutzt man zur Ableitung die Tatsache, dass für endliche Kernabstände des Elektrons der komplex rotierte Hamiltonoperator auf eine analytische Fortsetzung der Greenschen Funktion und über eine Laplace-Integraltransformation [70] schließlich auf U_θ führt.

Für den späteren Gebrauch sei noch der entsprechende unrotierte Zeitentwicklungsoperator [21] angegeben, der auf beliebige Zustände im $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ angewendet werden kann:

$$\mathrm{U}(t_2, t_1) = \sum_{\epsilon,k,k'} e^{-i\epsilon(t_2-t_1)} e^{-ik'\omega t_2} e^{ik\omega t_1} R(-\theta) \,|\epsilon_\theta^{k'}\rangle\langle\overline{\epsilon_\theta^{k}}|\, R(\theta) \qquad (t_2 \geq t_1),$$

$$\text{mit} \quad \epsilon = \mathrm{Re}(\epsilon) - i\frac{\Gamma_\epsilon}{2}. \tag{3.24}$$

Dieser Operator ist im Gegensatz zu der unitären Dynamik, die durch hermitesche Hamiltonoperatoren nach dem Stoneschen Theorem [80] induziert wird, nicht unitär. Das rührt daher, dass der Ausdruck (3.24) im Definitions- und Wertebereich auf den Raum der quadratintegrablen Funktionen beschränkt ist, die formale Eigenbasis des Floquet-Hamiltonoperators aber ausschließlich aus Streuzuständen besteht. Betrachtet man ein beliebig großes endliches Volumen um den Atomkern, so geht durch dessen Oberfläche stets ein endlicher Wahrscheinlichkeitsfluss. Dafür sind die negativen Imaginärteile der Resonanzenergien verantwortlich [81]. Die Verletzung der Normerhaltung auf jedem endlichen Gebiet (mit kompaktem Träger) spiegelt die Nichtunitarität des Zeitentwicklungsoperators wider.

3.5 Streutheoretische Formulierung des Ionisationsproblems

Man kann die Ionisation als halben Streuprozess auffassen, in dem der Anfangszustand $|n_0\rangle$ durch die über den Zeitentwicklungsoperator $\mathrm{U}(t_2, t_1)$ (3.24) determinierte Dynamik in Kontinuumszustände überführt wird. Dabei ist der Zeitpunkt des Beginns der Wechselwirkung zwischen dem Rydbergatom und dem Mikrowellenfeld $t = t_2 - t_1 = 0$ ausgezeichnet. Nach Ablauf einer vermöge (3.24) von den Raten Γ_ϵ abhängigen Zerfallszeit ionisiert schließlich das Elektron. Folgen wir [75,81], kann der Ionisationsvorgang analog der Streuung eines anfänglich freien Elektrons (mit positiver Energie) am Atomkern in Gegenwart eines Strahlungsfeldes beschrieben werden.

Betrachten wir einen Floquet-Zustand $|\epsilon(t)\rangle$ mit Quasienergie ϵ: Die Wellenfunktion eines ionisierten Elektrons lässt sich weit entfernt vom atomaren Zentrum als Überlagerung ebener Wellen zu rein auslaufenden (Siegert-)Randbedingungen (vgl. 3.12) darstellen. Im mit dem äußeren Feld oszillierenden Bezugssystem des Elektrons (Kramers-Henneberger-Bild, s. Anhang A) vereinfacht sich die Beschreibung erheblich. Die asymptotische Form der Fourierkomponenten $|\epsilon_m\rangle$ von $|\epsilon(t)\rangle$ (vgl. die Entwicklung (3.9)) in den auslaufenden Kanälen lautet dann in der Ortsdarstellung [81]:

$$\langle z\,|\epsilon_m\rangle = \psi_m(z) \quad \overset{z\to\infty}{\longrightarrow} \quad f_m e^{i[k_m z - \kappa_m \ln(2k_m z)]}. \tag{3.25}$$

κ_m ist ein Vorfaktor, der durch die Wellenzahl, die sich mittels $k_m^2/2 := \epsilon + m\omega$ definiert, bestimmt ist. Der logarithmische Anteil im Exponenten von (3.25) berücksichtigt die langreichweitige Coulombanziehung zwischen Atomkern und Elektron [81,82]. Die Darstellung (3.25) gilt nur für Floquet-Komponenten $|\epsilon_m\rangle$ mit

$$\mathrm{Re}(\epsilon) + m\omega > 0, \tag{3.26}$$

d. h. für diejenigen Anteile, für welche die Gesamtenergie des Photoelektrons durch Absorption einer ausreichenden Zahl m von Photonen aus dem Feld positiv wird. Mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung für die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte des Zustandes $|\epsilon(t)\rangle$ zeigt [81], dass sich die Zerfallsraten Γ_ϵ im Grenzfall $z \to \infty$ durch die Streuamplituden f_m ausdrücken lassen:

$$\Gamma_\epsilon \simeq \sum_{m > N_{\min}(\epsilon)} \Gamma_m := \sum_{m > N_{\min}(\epsilon)} \mathrm{Re}(k_m)\,|f_m|^2\,. \tag{3.27}$$

$N_{\min}(\epsilon)$ ist dabei die kleinste Anzahl von Photonen, die (3.26) erfüllt.

Die gesamte Transferrate vom gebundenen Anfangszustand $|n_0\rangle$ ins atomare Kontinuum erhält man, wenn die Beiträge aller Floquet-Zustände zu den Quasienergien ϵ entsprechend gewichtet mit der Projektion w_ϵ (s. Gl. (4.2) in Abschnitt 4.1) auf den anfänglichen Rydbergzustand berücksichtigt werden:

$$G := \sum_\epsilon \Gamma_\epsilon w_\epsilon. \tag{3.28}$$

Die Reskalierung der Resonanzbreiten Γ_ϵ auf eine geeignete Energieskala, die auf natürliche Weise durch den mittleren Abstand Δ der Energieniveaus im Floquet-Spektrum gegeben ist, führt schließlich auf den dimensionslosen *atomaren Leitwert*

$$g := \frac{G}{\Delta} = \frac{1}{\Delta} \sum_\epsilon \Gamma_\epsilon w_\epsilon, \tag{3.29}$$

der in [15] aufgrund von heuristischen Argumenten eingeführt wurde.

Im tatsächlichen Streuproblem, bei dem ein mit positiver Energie einfallendes Elektron mit dem Atomkern wechselwirkt, erfüllen die Fourierkomponenten der gestreuten Wellenfunktion eine Lippmann-Schwinger-Gleichung [79, 83], die in der Ortsdarstellung im Kramers-Henneberger-Bild folgende Gestalt annimmt [19, 81]:

$$\lim_{z\to\infty} \Psi_m(z) = \Psi_{\mathrm{ein}}\delta_{m0} + f_m e^{i[k_m z - \kappa_m \ln(2k_m z)]}. \tag{3.30}$$

Die Streuamplituden f_m lassen sich mit energie- bzw. impulsabhängigen Übergangs- oder T-Matrixelementen der Streutheorie [73, 79] identifizieren. In der asymptotischen Entwicklung (3.25) der ionisierenden Fourierkomponenten fehlt im Vergleich zu (3.30) der einlaufende Zustand Ψ_{ein}. Das ist gerade der Gehalt der Siegert-Randbedingungen [72]. Die dadurch bedingte Unitaritätsverletzung im Ionisationsproblem erfordert die Fortsetzung der Streumatrix zu komplexen Energien – mit entsprechenden Polen an den Stellen der Resonanzenergien $\epsilon = \mathrm{Re}(\epsilon) - i\Gamma_\epsilon/2 \pmod{m\omega}$ [75, 81]. Die Streuamplituden bleiben an den komplexen Polen der Streumatrix jedoch endlich und behalten deshalb ihre physikalische Deutung [79, 81].

In unserem atomaren Problem bestimmen somit die Ionisationsbreiten Γ_ϵ den Wahrscheinlichkeitsverlust in das Kontinuum und damit den atomaren Leitwert im Sinne eines „Transmissionsprozesses" zu komplexen Energien. Wegen der Beziehung (3.27) kann der atomare Leitwert (3.29) als Summe über Betragsquadrate von T-Matrixelementen zu Siegert-Randbedingungen verstanden werden und hat daher formal – bis auf die Tatsache, dass die Matrixelemente bei komplexen Energien auszuwerten sind – dieselbe Gestalt wie der Leitwert für Festkörperproben nach Landauer [84] (s. Abschnitt 5.2.1).

Kapitel 4

Ionisation im Mikrowellenfeld

Ausgestattet mit dem im vorhergehenden Kapitel bereitgestellten Rüstzeug wenden wir uns nun der für die weitere Diskussion relevanten Observablen, der Ionisationwahrscheinlichkeit des Atoms im Mikrowellenfeld, zu. In dem von uns gewählten Parameterbereich der atomaren Anfangszustände und der Feldgrößen wird die quantenmechanische Ionisation durch die *dynamische Lokalisierung* [16, 17] der Wellenfunktion auf der Energieachse unterdrückt. Analog zum elektronischen Transport durch ungeordnete, Anderson-lokalisierte Festkörper hängt dann aber der Ionisationsstrom sensitiv von den etwa durch die Feldfrequenz kontrollierten Randbedingungen an das atomare Transportproblem ab. Die wesentlichen Charakteristika dieses Szenarios wollen wir jetzt vorstellen.

4.1 Ionisationswahrscheinlichkeiten

Mit Hilfe der in Kapitel 3 skizzierten Methoden lassen sich – wie in Anhang B beschrieben – die komplexen Eigenwerte des rotierten Floquet-Hamiltonoperators gewinnen. Die Darstellung des Zeitentwicklungsoperators (3.24) ermöglicht schließlich die Berechnung der Ionisationswahrscheinlichkeit zu gegebenen Feldparametern und für einen festen atomaren Anfangszustand $|n_0\rangle$.

Die Wahrscheinlichkeit, dass das Elektron trotz der Wechselwirkung mit dem externen Feld gebunden bleibt, ergibt sich aus der Projektion des propagierten Anfangszustandes $|n_0\rangle$ auf den Unterraum aller gebundenen Zustände $|\chi\rangle$:

$$P_{\text{gebunden}} = \sum_{\chi} |\langle\chi|\, \mathrm{U}(t_2, t_1)\, |n_0\rangle|^2 \,. \tag{4.1}$$

Da sich $P_{\text{gebunden}}(t)$ und die Ionisationswahrscheinlichkeit $P_{\text{Ion}}(t)$ zu eins addieren, erhält man unter Verwendung der Gleichung (3.24) für die Ionisationswahr-

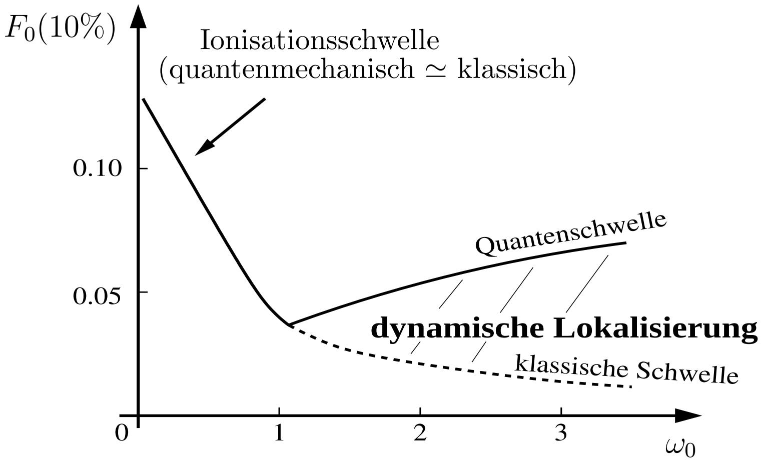

Abb. 4.1: Schematischer Verlauf der klassischen und quantenmechanischen Ionisationsschwelle $F_0(10\%)$ als Funktion der skalierten Frequenz des äußeren Feldes ω_0 [17] (hinreichend lange Wechselwirkungszeiten t vorausgesetzt [85]). Das Regime der dynamischen Lokalisierung befindet sich oberhalb der klassischen und unterhalb der quantenmechanischen Schwelle für $\omega_0 > 1$. Im Bereich $\omega_0 < 1$ stimmt die quantenmechanische mit der klassischen Schwelle dagegen im Wesentlichen überein [86].

scheinlichkeit aus dem atomaren Anfangszustand $|n_0\rangle$ folgenden Ausdruck [21]:

$$\begin{aligned} P_{\text{Ion}}(t) &= 1 - P_{\text{gebunden}}(t) \\ &= 1 - \sum_{\epsilon} e^{-\Gamma_\epsilon t} \sum_k \text{Re}\left(\langle \overline{\epsilon_\theta^k} |\, R(\theta)\, |n_0\rangle^2 \right) \\ &=: 1 - \sum_{\epsilon} e^{-\Gamma_\epsilon t} w_\epsilon. \end{aligned} \tag{4.2}$$

Dabei wurden Anfangszeitpunkt t_1 und Endzeitpunkt t_2 der Wechselwirkung bei festgehaltener Wechselwirkungszeit $t := t_2 - t_1 (> 0)$ über eine Feldperiode $T = 2\pi/\omega$ gemittelt. Dies entspricht einer Mittelung über die Anfangsphase des Feldes [61, 70], die im Laborexperiment im Allgemeinen nicht fixiert ist. Die Ionisationswahrscheinlichkeit ist somit als Summe über die einzelnen Floquet-Zustände gegeben, die durch den Überlapp w_ϵ mit dem Anfangszustand $|n_0\rangle$ gewichtet werden. Dabei ist zu beachten, dass die Gewichte w_ϵ nur das Quadrat der Projektion enthalten, nicht deren Betragsquadrat. Dies liegt an dem in Abschnitt 3.3 beschriebenen Übergang vom rechten zum linken Eigenvektor durch Transposition statt durch komplexe Konjugation.

Aus der Messung von P_{Ion} für verschiedene Feldamplituden F, aber feste Werte von t, ω und n_0, wird im Laborexperiment [86–89] jene Feldstärke ermittelt, bei der gerade zehn Prozent der Atome ionisieren. In skalierten Einheiten (vgl. Tabelle 2.1) liegt dieser Ionisationsschwellenwert typischerweise zwischen $F_0(10\%) \simeq 0.02$ und $F_0(10\%) \simeq 0.10$ für $\omega_0 \in [0.5; 2.5]$. Sein schematischer Verlauf als Funktion der über die Hauptquantenzahl n_0 variierten Feldfrequenz

ω_0 ist in Abbildung 4.1 dem Resultat einer auf klassischen Argumenten beruhenden Abschätzung gegenübergestellt. Für $\omega_0 > 1$ erweist sich das reale quantenmechanische Rydbergelektron der Ionisation gegenüber stabiler als sein klassisches Analogon. Dieses in Experimenten an atomarem Wasserstoff [87,88] und Rubidium [89] erstmals bestätigte Verhalten kennzeichnet das Phänomen der *dynamischen Lokalisierung* [16, 90].

4.2 Dynamische Lokalisierung

Die dynamische Lokalisierung ist eine der herausragendsten Eigenschaften eines Quantensystems, dessen klassisches Pendant chaotische, diffusive Dynamik aufweist. Als ein explizit zeitabhängiges Phänomen zeigt sie sich darin, dass nach einer gewissen systemtypischen Zeit („break time") [45, 91, 92] die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte nicht mehr der klassischen, diffusiven Dynamik folgt, sondern als quasistationäre Verteilung „einfriert". Dies wurde zum ersten Mal 1979 für das Modell des gekickten Rotors [93] theoretisch vorhergesagt und später auf ein vereinfachtes eindimensionales Modell [16, 17] des hier betrachteten Wasserstoffproblems übertragen. 1993 wurde das beschriebene Lokalisierungsphänomen auch für das dreidimensionale System des periodisch getriebenen Wasserstoffatoms numerisch exakt bestätigt [94].

Auf unser eindimensionales Ionisationsproblem übertragen, hat die dynamische Lokalisierung folgende Konsequenzen: Bei geeigneter Wahl der skalierten Feldparameter F_0 und ω_0 stellt sich – nach Ablauf einer charakteristischen Zeit, deren Größenordnung durch den inversen mittleren Abstand der Energieniveaus festgelegt ist [17] – im Energieraum um die Energie des ungestörten Anfangszustandes $E_0 = -1/(2n_0^2)$ eine quasistationäre Verteilung der elektronischen Population ein. Die Ionisation kann im Vergleich zur klassischen Entwicklung danach erheblich reduziert sein [16].

Die über mehrere Mikrowellenperioden gemittelte Verteilung um den atomaren Anfangszustand $|n_0\rangle$ lässt sich den Autoren von [17] folgend im Bereich $\omega_0 > 1$ anschaulich im **Photonenbild** ausdrücken

$$\overline{f}(k) \simeq \frac{1}{2\xi}\left(1 + \frac{2|k|}{\xi}\right) e^{-2|k|/\xi}, \tag{4.3}$$

wobei k für die Anzahl der vom Wasserstoffatom absorbierten (oder emittierten) Photonen steht. Für die Lokalisierungslänge, gemessen in Vielfachen der Photonenenergie, findet sich in [17] folgende Abschätzung:

$$\xi \simeq 3.33F^2\omega^{-10/3} = 3.33F_0^2\omega_0^{-10/3}n_0^2. \tag{4.4}$$

Die experimentellen Bedingungen erfordern die Einführung einer effektiven Ionisationsschwelle n_c, oberhalb derer auch gebundene Zustände wegen unvermeidlicher Streufelder ionisieren und daher dem Kontinuum zugeschlagen werden (vgl. die entsprechende Diskussion in Anhang B). Die Feldamplitude $F_0(10\%)$ ergibt sich somit mittels (4.4) durch Integration über die Verteilung (4.3) vom festgelegten „cut-off" n_c bis weit in das atomare Kontinuum ($k \to \infty$):

$$\int_{N_c}^{\infty} \overline{f}(k)dk = 10\%. \tag{4.5}$$

Die Anzahl N_c der Photonen, die das System absorbieren muss, um die Ionisationsschwelle $n \geq n_c$ zu erreichen, ist nach (3.11) und obigen Überlegungen durch

$$N_c = \frac{1}{2\omega}\left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n_c^2}\right) = \frac{n_0}{2\omega_0}\left(1 - \frac{n_0^2}{n_c^2}\right) \tag{4.6}$$

gegeben. Der zweite Faktor des rechten Ausdrucks in (4.6) berücksichtigt die Korrektur aufgrund des endlichen Wertes von n_c.

Mit Hilfe der angeführten Abschätzungen lässt sich die Feldamplitude gewinnen, bei der im Mittel zehn Prozent der Atome ionisieren [13]:

$$F_0(10\%, \omega_0) \simeq \left(\frac{\omega_0^{7/6}}{\sqrt{8n_0}}\sqrt{1 - \frac{n_0^2}{n_c^2}}\right). \tag{4.7}$$

Die Lokalisierungslänge ξ misst die Breite der exponentiell lokalisierten Verteilung der gebundenen Zustände um den Anfangszustand $|n_0\rangle$ in Einheiten der Photonenenergien ω des Feldes. Die vorgestellte Lokalisierungstheorie [16, 17] ist im Bereich $\omega_0 > 1$ näherungsweise gültig, wenn die Lokalisierungslänge im Vergleich zur Anzahl der Photonen N_c, die das Atom zur Ionisation absorbieren muss, klein ist. Die Theorie, die auf die Gleichungen (4.3) bis (4.7) führt, basiert nämlich auf groben, ihre **quantitative** Gültigkeit sehr stark einschränkenden Näherungen [95]. Ferner sei erwähnt, dass man insbesondere die Abschätzungen für die Lokalisierungslänge (4.4) und für die Ionisationsschwelle (4.7) in der Literatur [13, 16, 17, 90, 96] mit leicht unterschiedlichen numerischen Vorfaktoren findet (vgl. hierzu die Diskussion in [85]). Im Folgenden dienen uns deshalb die Vorhersagen der Lokalisierungstheorie nur als qualitativer Leitfaden.

Aus der Formel (4.3) für die Besetzungsverteilung um den atomaren Anfangszustand ist unter Berücksichtigung von (4.5) ersichtlich, dass die $F_0(10\%)$ bestimmende Größe das Verhältnis der Lokalisierungslänge ξ zur „photonischen Probenlänge" N_c ist. Wir definieren daher den Lokalisierungsparameter [15]:

$$\ell := \frac{\xi}{N_c} = \frac{6.66 F_0^2 n_0}{\omega_0^{7/3}}\left(1 - \frac{n_0^2}{n_c^2}\right)^{-1}. \tag{4.8}$$

Abbildung 4.2 skizziert die durch ℓ fixierte Besetzungsverteilung auf der in Vielfachen der Photonenenergie skalierten Energieachse. Man erkennt, dass für den Populationstransport in das atomare Kontinuum die Besetzungswahrscheinlichkeit der gemäß (4.3) exponentiell abnehmenden Verteilung im letzten gebundenen Zustand unmittelbar unterhalb der Kontinuumsgrenze entscheidend ist.

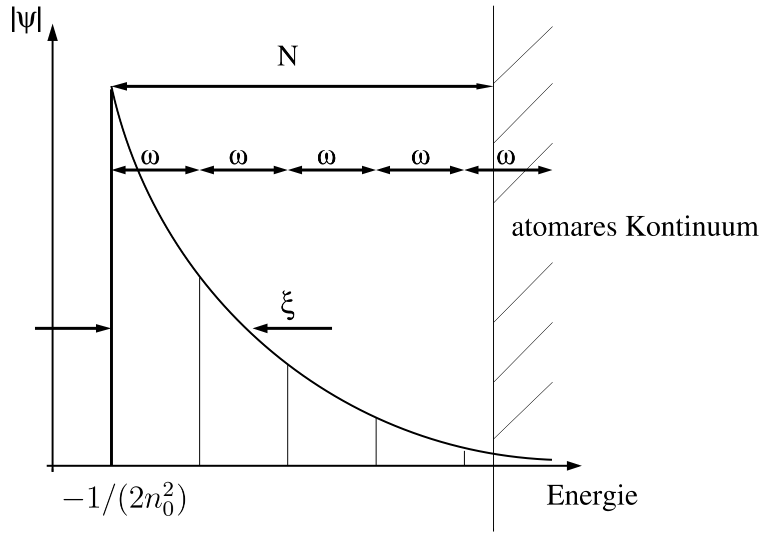

Abb. 4.2: Schematische Darstellung der dynamisch lokalisierten und durch den Zustand $|\psi\rangle$ repräsentierten elektronischen Besetzungsamplitude in der Umgebung des Anfangszustands $|n_0\rangle$ [16,17]. Der Populationstransport in das Kontinuum wird in diesem Bild durch die Dynamik im Raum der gebundenen Zustände bestimmt (s. Gleichungen (4.3) und (4.5)). Das atomare Kontinuum spielt dabei die Rolle der „Leitung“ beim elektronischen Transport durch eine mesoskopische Festkörperprobe (s. Kapitel 5).

Mit anderen Worten wird die Gesamtionisation durch die elektronische Aufenthaltswahrscheinlichkeit nahe dem effektiven Kontinuum (s. (4.6)) bestimmt, d. h. durch die Besetzung desjenigen Zustandes, der durch einen Einphotonenübergang direkt an das Kontinuum gekoppelt ist:

$$|\psi|^2\Big|_{\text{Kontinuum}} \sim e^{-2N_c/\xi} = e^{-2/\ell}. \tag{4.9}$$

Mit den in Kapitel 3 bereitgestellten Hilfsmitteln lassen sich die Ionisationswahrscheinlichkeiten (4.2) unter den durch die Beziehungen (4.3) bis (4.9) charakterisierten Bedingungen auswerten. Wir wählen im Laborexperiment [86] übliche Hauptquantenzahlen und variieren – bei festem Lokalisierungsparameter ℓ – die skalierte Frequenz ω_0 im Intervall $[2.0; 2.5]$ in 500 äquidistanten Schritten. Ferner betrachten wir wie in [86] eine Wechselwirkungszeit von 300 Feldzyklen ($t = 300 \times T$). Abbildung 4.3 zeigt große Schwankungen der gewonnenen Ionisationswahrscheinlichkeiten als Funktion von ω_0. Bei festem Anfangszustand n_0 und festem Lokalisierungsparameter ($\ell = 0.20$ in 4.3) bewirkt eine kleine Änderung der Feldfrequenz vermöge der Beziehung $N_c \sim 1/\omega_0$ (4.6) eine Verschiebung der effektiven Kontinuumsschwelle in Figur 4.2. Die sensitive Abhängigkeit des atomaren Transportprozesses von den somit durch die Frequenz kontrollierten Randbedingungen nimmt mit steigender Hauptquantenzahl n_0 zu. Während dabei jedoch die Ionisationswahrscheinlichkeit $P_{\text{Ion}}(\omega_0)$ im Mittel abnimmt, wird die Frequenzskala $\delta\omega_0(n_0)$, auf der die erratischen Fluk-

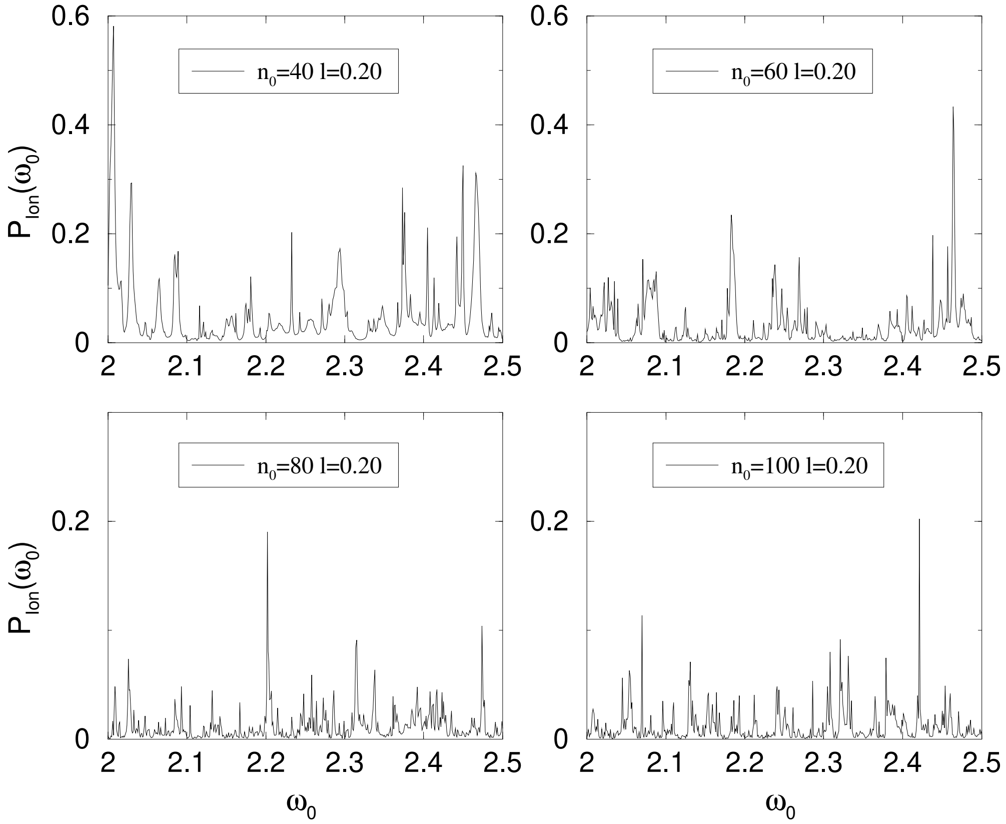

Abb. 4.3: Ionisationswahrscheinlichkeiten als Funktion der skalierten Frequenz für die Hauptquantenzahlen $n_0 = 40, 60, 80, 100$ des atomaren Anfangszustandes $|n_0\rangle$. Als Lokalisierungsparameter wurde $\ell = 0.20$ gewählt, wobei die Wechselwirkungszeit wie in [86] 300 Feldzyklen ($t = 300 \times T$ mit $T = 2\pi/\omega$) betrug. Man beachte den im Vergleich zu $n_0 = 40, 60$ um einen Faktor zwei vergrößerten Maßstab der Ordinate in den beiden unteren Graphen! Mit zunehmendem n_0 nehmen die Ionisationswahrscheinlichkeiten im Mittel ab, während die Skala, auf der die erratischen Fluktuationen auftreten, feiner wird.

tuationen beobachtbar sind, feiner. $\delta\omega_0$ liegt etwa zwischen 10^{-4} für $n_0 = 100$ und 10^{-3} für $n_0 = 40$. Abbildung 4.4 zeigt dies nochmals für 500 äquidistante Proben aus dem Intervall $\omega_0 \in [2.20; 2.25]$. $\delta\omega_0$ nimmt mit wachsendem n_0 und kleiner werdendem $\hbar_{\text{eff}} \sim 1/n_0$ ab, da der mittlere Abstand der quantenmechanischen Energieniveaus entsprechend kleiner wird, demzufolge die Zahl der Niveaus, die in Figur 4.2 quasiresonant angeregt werden können, wächst.

Das sensitive Verhalten der Ionisationswahrscheinlichkeit P_{Ion} als Funktion der skalierten Feldfrequenz zeigt, dass die Vorhersagen der Theorie der dynamischen Lokalisierung (Gl. (4.3)-(4.9)) nur im Mittel für ein atomares Probenensemble gelten. Eine einzelne Probe wird dabei durch das Parametertripel (n_0, ω_0, F_0) repräsentiert. Um den im Wesentlichen durch den Lokalisierungsparameter ℓ (4.8) bestimmten Mittelwert der Observablen P_{Ion} und $F_0(10\%)$

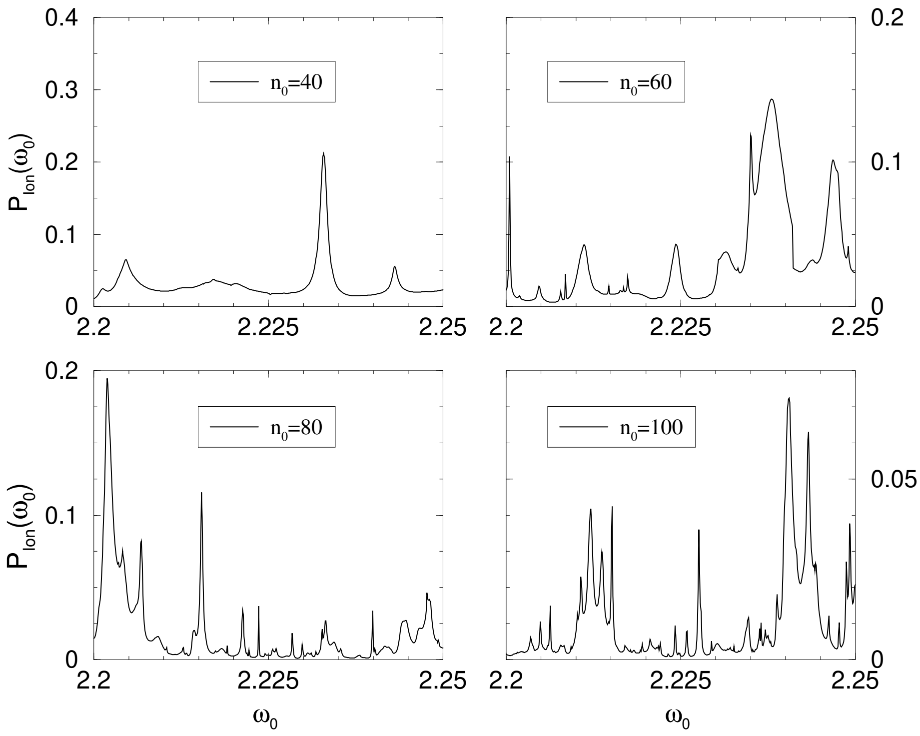

Abb. 4.4: Ionisationswahrscheinlichkeiten als Funktion der skalierten Frequenz für die Hauptquantenzahlen $n_0 = 40, 60, 80, 100$ und für $\ell = 0.20$ bei einer Wechselwirkungszeit von 300 Feldzyklen. Bei der gleichen Anzahl von Schritten wie in Abbildung 4.3 wird ein kleineres Frequenzintervall betrachtet. In der um den Faktor zehn verbesserten Auflösung ist deutlich zu erkennen, dass mit zunehmendem $n_0 \sim 1/\hbar_{\text{eff}}$ die Skala, auf der die Fluktuationen von $P_{\text{Ion}}(\omega_0)$ beobachtbar sind, feiner wird.

treten allerdings starke Fluktuationen auf [59], deren Verlauf zumindest im oben betrachteten Falle von P_{Ion} – auch bei festem Lokalisierungsparameter – explizit von dem anfänglichen Rydbergzustand n_0 und damit von der effektiven Größe $\hbar_{\text{eff}} = \hbar/n_0$ (2.8) abhängt. Diese den atomaren Transportprozess charakterisierenden Fluktuationen erinneren sehr an das Verhalten Anderson-lokalisierter Festkörper [14]. Neben den im Laborexperiment direkt zugänglichen Ionisationswahrscheinlichkeiten, deren Abhängigkeit von den Parametern (n_0, ω_0, F_0) traditionellerweise studiert wird, werden wir in Kapitel 6 die statistischen Eigenschaften des atomaren Leitwertes (3.29) untersuchen. Der Leitwert ist der zentrale Begriff zur Beschreibung der Transporteigenschaften mesoskopischer Proben [10]. Er wird im Folgenden neben anderen – in Bezug auf unsere Analogiebetrachtung – relevanten Konzepten aus der Festkörpertheorie vorgestellt.

Kapitel 5

Konzepte aus der Festkörpertheorie

5.1 Anderson-Lokalisierung

Das Theorem von Floquet für zeitlich periodische Potentiale ermöglichte es in Kapitel 3, die Zeitabhängigkeit zu separieren und dadurch die Beschreibung des getriebenen Wasserstoffatoms auf ein stationäres Problem zurückzuführen.

Analog dazu liefert das Blochsche Theorem [20, 65] die Wellenfunktion eines Elektrons in einem räumlich periodischen Gitterpotential. Für ein eindimensionales regelmäßiges Kristallgitter mit einer Gitterkonstanten a gilt: $V(x) = V(x - na)$ $(n \in \mathbb{Z})$. Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$H = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{5.1}$$

Zur Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung kann man zur Vereinfachung annehmen, dass das Elektron zu einer festen Zeit nur mit einem Gitteratom stark wechselwirke, während die Kopplung mit allen anderen Gitterpunkten schwach sei. Das ist der Inhalt der Tight-Binding-Näherung nicht untereinander wechselwirkender Elektronen in der Festkörperphysik [64,65]. Die elektronische Wellenfunktion lässt sich somit als Überlagerung von einatomigen Wellenfunktionen $\langle x|\, n\rangle = \psi_0(x - na)$ ausdrücken, wobei $n \in \mathbb{Z}$ den jeweiligen Gitterplatz bezeichnet:

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \psi_0(x - na). \tag{5.2}$$

Unter der Annahme eines vernachlässigbaren Überlapps der Wellenfunktionen benachbarter Plätze sowie nach Einführung der „potentiellen“ Energien je Platz

$E_n^0 = \langle n| H |n\rangle$ und der nichtdiagonalen „kinetischen“ Anteile $W_{nm} = \langle n| H |m\rangle$ ergibt sich nach Einsetzen des Ansatzes (5.2) in die Schrödingergleichung folgendes Eigenwertproblem für die Entwicklungskoeffizienten aus (5.2):

$$\sum_{m \neq n} W_{nm} c_m + E_n^0 c_n = E c_n. \tag{5.3}$$

Für periodische Potentiale $V(x) = V(x - na)$ ist nun E_n^0 unabhängig vom Gitterplatzindex n und für die Wechselwirkungsanteile gilt $W_{nm} = W_{n-m}$, d. h. sie sind wegen Translationsinvarianz vollständig durch die Differenz $n - m$ bestimmt. In diesem Fall ergeben sich als Lösungen die wohlbekannten Blochschen Funktionen

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x) \quad \text{mit} \quad u_k(x - na) = u_k(x) \quad (n \in \mathbb{Z}), \tag{5.4}$$

zu der Wellenzahl k des reziproken Kristallgitters als „guter“ Quantenzahl.

Die Gleichung (5.3) beschreibt das *Andersonsche Modell* [1] für den Fall, dass die Periodizität des ursprünglichen Gitters gestört wird. Dies kann auf zwei Arten geschehen: Entweder die Wechselwirkungsterme W_{nm} sind statistisch verteilt, wobei die potentiellen Anteile $E_n^0 \equiv E^0$ fest sind, oder letztere sind durch Zufallsvariable bei konstanten Kopplungsmatrixelementen $W_{nm} \equiv W$ gegeben. Anderson nahm in seiner Originalarbeit von 1958 [1] eine vollkommen zufällige Wahrscheinlichkeitsverteilung der Platzenergien E_n^0 an, womit er zeigen konnte, dass unter bestimmten Umständen eine exponentielle Lokalisierung der elektronischen Wellenfunktion um den anfänglichen Gitterplatz auftritt. Dieses Phänomen kann die Elektronendiffusion im Festkörper unterbinden und somit die Leitfähigkeit eines Materials erheblich herabsetzen.

In eindimensionalen Gittersystemen sind die elektronischen Wellenfunktionen bei beliebig kleiner, aber nicht verschwindender Unordnung **immer** lokalisiert [97–100]. Die Lokalisierung ist Folge der destruktiven Interferenz der quantenmechanischen Streuamplituden bei der kohärenten Streuung an den Störstellen, die in dem vorgeführten Modell durch die zufällig verteilten Platzenergien simuliert werden. Die durch die Störstellen bewirkte Unordnung im Kristall hebt die Energieentartung auf, die im Falle der Blochschen Welle vorliegt. Dadurch verliert die Wellenzahl k ihre Eigenschaft, eine gute Quantenzahl zu sein. Die Zufälligkeit der Unordnung ist dabei essentiell, da sonst Quasiperiodizitäten vorliegen können, die zu ausgedehnten Elektronenverteilungen (vgl. die Blochwellen im rein periodischen Gitter aus (5.4)) führen.

Die in Abschnitt 4.2 behandelte dynamische Lokalisierung im getriebenen Wasserstoffatom, die ebenfalls durch die Interferenz aller möglichen „Pfade“ der Multiphotonenanregung zustande kommt, ist konzeptionell mit der gerade vorgestellten Anderson-Lokalisierung verwandt. Fishman, Grempel und Prange zeigten 1982 [101] die formale Analogie der beiden physikalischen Probleme auf, indem sie die quantenmechanische Dynamik für das Modellsystem des periodisch gekickten Rotors [93] im Floquet-Bild auf eine Gleichung (Gl. (3) in [101])

umschrieben, welche der Tight-Binding-Beziehung (5.3) exakt entspricht. Die im Andersonschen Modell von vorneherein angenommene Zufallsverteilung der Platzenergien ist für die entsprechenden Größen im Rotorproblem nicht gegeben [14, 102]. Zahlreiche numerische Untersuchungen zeigen jedoch, dass die pseudozufälligen Folgen, die durch die komplexe Dynamik des gekickten Rotors im klassisch chaotischen Bereich entstehen, ebenfalls zu der beschriebenen Lokalisierung führen [103–106]. Unser in Kapitel 2 vorgestelltes Problem des Wasserstoffatoms im Mikrowellenfeld ist über mehrere Approximationsstufen, darunter die Quanten-Kepler-Abbildung [13, 17], auf den gekickten Rotor reduzierbar [14, 17].
Damit besteht eine interessante Analogie zwischen einem nichtintegrablen, zeitabhängigen System mit Diffusion im klassischen Phasenraum und dem zeitunabhängigen Problem der räumlichen Elektronendiffusion im Festkörper. In beiden Systemen tritt aufgrund von quantenmechanischen Interferenzeffekten unter geeigneten Bedingungen eine exponentielle Lokalisierung der Wellenfunktion im Energieraum einerseits, im Ortsraum andererseits auf.

Die Lokalisierung der elektronischen Wellenfunktion in ungeordneten Festkörpern vermindert die Leitfähigkeit des betrachteten Kristalls. Die Leitfähigkeit selbst ist weniger gut zur Beschreibung des Elektronentransportes in Proben endlicher Länge geeignet [10]. Der zentrale Begriff zur Charakterisierung der Transporteigenschaften von Festkörperproben ist der *Leitwert* [10], der im Folgenden vorgestellt wird.

5.2 Der Leitwert: Thouless- und Landauer-Formalismus

Quantenphänomene treten im Festkörper umso deutlicher in Erscheinung, je größer die Kohärenzlänge der Probe ist. Darunter versteht man die Wegstrecke, die Elektronen zurücklegen können, ohne ihre Phasenkohärenz zu verlieren.
Mesoskopische Systeme sind dadurch definiert, dass ihre Längenausdehnung L kleiner als ihre Kohärenzlänge L_ϕ ist. Inelastische Prozesse, wie Wechselwirkungen zwischen Elektronen oder Gitterschwingungen, sind für eine endliche Kohärenzlänge verantwortlich. Da diese Prozesse stark temperaturabhängig sind, nimmt L_ϕ mit wachsender Temperatur ab. Bei absoluten Temperaturen $T \leq 1K$ liegt L_ϕ typischerweise im Mikrometerbereich [84, 107]. Die im Folgenden vorgestellten Modelle gehen stets von der Annahme aus, dass die Elektronen untereinander nicht wechselwirken und die Probe mesoskopisch ist, d. h. außer der Streuung an den Störstellen keine weiteren Wechselwirkungen im Elektronentransport auftreten. Dies ist dann der Fall, wenn der Grenzfall $T \to 0$ mit einer unendlichen Kohärenzlänge vorliegt. Das Leitverhalten einer mesoskopischen Probe wird nun üblicherweise durch ihre Transmissionseigenschaften oder durch die Empfindlichkeit der elektronischen Wellenfunktionen gegenüber den Randbedingungen an den Enden der Probe charakterisiert [107–110].

5.2.1 Der Leitwert nach Landauer

Landauers Idee [18, 84] bestand darin, den Leitwert einer Festkörperprobe über ihre Transparenz für elektronische Wellen zu definieren. Betrachtet werde ein ungeordneter Draht mit zwei idealleitenden Zuleitungen. Die Zuleitungen liegen auf konstanten Potentialen, deren Differenz ΔV den Elektronenstrom durch die Probe erzeugt. Für dieses offene System ist der dimensionslose Leitwert nach Landauer durch die Wahrscheinlichkeit T_L gegeben, dass die Elektronen durch das System transmittiert werden:

$$\mathfrak{g}_L := T_L. \tag{5.5}$$

Dies gilt für den einfachsten Fall einer eindimensionalen Probe mit zwei Zuleitungen. Bei nichtverschwindender Querausdehnung sind mehrere Moden (oder Kanäle) für die elektronische Wellenfunktion zugänglich. Die Multikanal-Landauer-Formel lautet dann allgemeiner [111]

$$\mathfrak{g}_L := \sum_{i,j} |t_{ij}|^2 , \tag{5.6}$$

mit den Elementen t_{ij} der Transmissionsmatrix t. Die Indizes stehen für die verschiedenen Querkanäle in den beiden Zuleitungen. Die Streueigenschaften der Probe werden durch die unitäre Streumatrix S beschrieben [107]:

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}, \tag{5.7}$$

mit den Untermatrizen für die Reflexion r, r' und Transmission t, t'. Die Streumatrix verbindet vermöge der Beziehung

$$S \begin{pmatrix} I_l \\ I_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O_l \\ O_r \end{pmatrix} \tag{5.8}$$

die einfallenden und die auslaufenden Amplituden $I_{l,r}$ bzw. $O_{l,r}$ der elektronischen Wellenfunktionen, wie die Abbildung 5.1 veranschaulicht. Dies ist analog zu dem aus der geometrischen Optik bekannten Formalismus der Transformationsmatrizen, welche jeweils den Strahlengang durch optische Komponenten (z. B. Linsen) eindeutig festlegen [112, 113].

Damit wird die Elektronenleitung im Formalismus von Landauer explizit als Streuproblem betrachtet: Elektronen werden von den Zuleitungen reflektiert oder durch diese transmittiert. Die Transmissionswahrscheinlichkeit charakterisiert die Güte des Leitverhaltens. Die Mehrkanalformel (5.6) lässt sich mittels der aus der linearen Antwortheorie gewonnenen Kubo-Greenwood-Formel ableiten [84, 111, 114, 115]. Diese Formel setzt die Elektronenstromdichte mit der lokalen Leitfähigkeit als eine Art verallgemeinertes, nichtlokales Ohmsches Gesetz in Beziehung. Mit der Methode Landauers vereinfacht sich die Betrachtung der Transporteigenschaften erheblich, da anstelle komplizierter

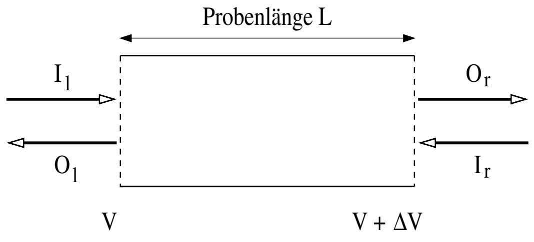

Abb. 5.1: Schematische Darstellung der ein- und auslaufenden Amplituden $I_{l,r}$ bzw. $O_{l,r}$, die durch die Streumatrix nach Gleichung (5.8) miteinander zusammenhängen.

Strommatrixelemente der Kubo-Greenwood-Formel lediglich quantenmechanische Transmissions- bzw. Reflexionsamplituden zu berechnen sind.

Tatsächlich lässt sich zeigen [84], dass der in (5.6) definierte dimensionslose Leitwert nichts anderes als der in Einheiten von $2e^2/h$ (mit dem Planckschen Wirkungsquantum h und der Elementarladung e) skalierte inverse Widerstand ist. Für den Strom $\mathcal{I}$ durch die Probe und die Zuleitungen ergibt sich somit [84]:

$$\mathcal{I} = \mathfrak{G}_L \Delta V := \mathfrak{g}_L \frac{2e^2}{h} \Delta V. \tag{5.9}$$

5.2.2 Der Leitwert nach Thouless

Thouless' Zugang [100, 116, 117] basiert auf dem Gedanken, zwischen räumlich ausgedehnten und lokalisierten Elektronenzuständen mit Hilfe ihrer Empfindlichkeit gegenüber den an die Wellenfunktion gestellten Randbedingungen (s. dazu in anderem Zusammenhang [118]) zu unterscheiden. Im Falle einer stark lokalisierten Wellenfunktion wird eine Änderung der Randbedingungen an den Enden der Probe das System wenig beeinflussen, da die Wellenfunktion am Rand der Probe schon exponentiell abgefallen ist. Dagegen reagieren die ausgedehnten Zustände, z. B. im Extremfall die ebenen Blochwellen, sehr empfindlich auf eine Variation der Randbedingungen. Ändert man diese von periodisch $\psi(x+L) = \psi(x)$ zu antiperiodisch $\psi(x+L) = e^{i\pi}\psi(x)$ (d. h. die Phase $e^{i\phi}$ der Welle ändert sich von $\phi = 0$ auf $\phi = \pi$) dann ergibt sich eine mittlere Verschiebung der Energieeigenwerte des Systems [117] um

$$\Delta E(\phi : 0 \to \pi) = \Delta E \simeq \frac{\hbar}{\tau_L}. \tag{5.10}$$

$\tau_L = L^2/D$ gibt die Diffusionszeit an, die ein Elektron im Mittel benötigt, um die Probe der Länge L zu durchqueren, wobei D die Diffusionskonstante des klassischen Transportproblems unter der Annahme eines „random walk"-Prozesses für die Bewegung ist. Treten Lokalisierungseffekte auf, nimmt D mit der Länge L ab [119]. Die Abschätzung $\hbar/\tau_L$ für die Energieverschiebung wird Thouless-Energie genannt [84, 110].

Der Leitwert nach Thouless oder die Thouless-Zahl ist nun durch

$$\mathfrak{g}_T := \frac{\Delta E}{\Delta} \tag{5.11}$$

definiert [100, 117], wobei Δ den mittleren Abstand benachbarter Energieniveaus bezeichnet. Im Falle einer um die Streuzentren exponentiell lokalisierten Wellenfunktion erfahren die Energieniveaus durch die Variation der Randbedingungen nur eine kleine Verschiebung $\Delta E \ll \Delta$, und $\mathfrak{g}_T$ bleibt bei wachsender Probenlänge L annähernd konstant. Eine weit ausgedehnte Wellenfunktion reagiert dagegen empfindlich auf die Randbedingungen. Die resultierende Niveauverschiebung $\Delta E \geq \Delta$ und der Leitwert $\mathfrak{g}_T$ werden daher groß sein.

Die Verschiebung der elektronischen Eigenniveaus lässt sich durch den Mittelwert ihrer Krümmung als Funktion der Phasenverschiebung $\frac{\partial^2 E(\phi)}{\partial \phi^2}$ an der Stelle $\phi = 0$ ausdrücken, was zu der Thouless-Formel [100, 116, 120] führt:

$$\mathfrak{g}_T = \frac{1}{\Delta} \left\langle \left. \frac{\partial^2 E(\phi)}{\partial \phi^2} \right|_{\phi=0} \right\rangle . \tag{5.12}$$

Die spitzen Klammern bedeuten, dass über verschiedene Konfigurationen der Unordnung und über verschiedene Energieeigenwerte gemittelt wird. Dass diese Formel mit dem Resultat übereinstimmt, welches aus dem Formalismus der linearen Antwortheorie für den elektronischen Transport in Festkörpern folgt, ist wie im Falle der Landauer-Formel (5.6) unter gewissen Annahmen bewiesen [120]. Denkt man sich nun mehrere Proben der Länge L aneinandergefügt, beschreibt die Thouless-Zahl die Kopplung der Teilstücke an deren Rändern, die durch die Größe $\Delta E \simeq \hbar/\tau_L$ bestimmt wird [117]. Diese Tatsache stellt einen möglichen Zugang zu der Skalierungstheorie dar, die im nächsten Abschnitt diskutiert wird.

Die Frage, ob die hiermit vorgestellten Leitwert-Begriffe von Landauer und Thouless äquivalent sind, ist ein subtiles theoretisches Problem, da sich die physikalischen Ansätze stark unterscheiden. Man geht jedoch davon aus, dass der Leitwert nach Landauer $\mathfrak{g}_L$ und der nach Thouless $\mathfrak{g}_T$ bei genauer Definition der Problemstellung eine äquivalente Beschreibung liefern [119, 121].

In Abschnitt 3.5 wurde vorgeführt, wie sich die Ionisationsbreiten Γ_ϵ atomaren Wasserstoffs in einem äußeren Feld als Summe über Streuamplituden verstehen lassen. Sieht man von dem konzeptionellen Unterschied zwischen dem halben Streuproblem des Zerfallsprozesses und dem Transmissionsproblem im Festkörpersystem ab, lässt sich nun der atomare Leitwert im Sinne der Landauer-Formel (5.6) interpretieren. Jedenfalls hat der Ausdruck (3.29) unter Berücksichtigung von (3.27) formal dieselbe Gestalt wie Gleichung (5.6).

5.3 Skalierungstheorie der Lokalisierung

Das Phänomen der Anderson-Lokalisierung hängt stark von der Dimensionalität des Problems ab [1,97]. Dies kann am einfachsten im Rahmen eines Skalierungsargumentes verstanden werden, das auf dem Leitwertbegriff von Thouless [9] basiert. Eine Möglichkeit, eine *Skalierungstheorie der Lokalisierung* auch im Rahmen des Landauer-Formalismus einzuführen, wird in [122] vorgeschlagen. Hier soll nur ersterer Zugang dargelegt werden. Dessen zentrale Idee besteht in der Annahme, dass die Transporteigenschaften einer d-dimensionalen kubischen Probe mit Volumen $(2L)^d$ sich aus denen einer Probe der Abmessungen L^d ergeben. Die Eigenzustände der ersteren werden durch eine Linearkombination der Zustände der 2^d Teilproben der Größe L^d beschrieben. Die Mischung dieser Zustände ist durch den Überlapp der Wellenfunktionen an den Schnittstellen gegeben, der wiederum von der Empfindlichkeit der Probe gegenüber einer Änderung der Randbedingungen abhängt. Nach Thouless bestimmt nun ein einzelner dimensionsloser Parameter, die Thouless-Zahl (5.12), die Natur der Eigenwerte, wenn sich die Probengröße verdoppelt (s. die Diskussion im vorhergehenden Abschnitt).

Man betrachtet also den Thouless-Leitwert als Funktion der Probenlänge L:

$$\mathfrak{g}_T(L) := \frac{\Delta E(L)}{\Delta(L)}, \tag{5.13}$$

und geht von den folgenden Annahmen [9] aus: Die Thouless-Zahl sei die einzige relevante Größe, welche die Änderung der Energieeigenwerte beschreibt, wenn man Proben der Länge L aneinanderfügt. Ferner ergebe sich der Leitwert eines Systems der Länge nL als Funktion von n und $\mathfrak{g}_T(L) = \mathfrak{g}(L)$:

$$\mathfrak{g}(nL) = f\left(n, \mathfrak{g}(L)\right). \tag{5.14}$$

Der Parameter, der nun das Lokalisierungsverhalten eindeutig beschreiben soll, wird definiert als

$$\beta\left(\mathfrak{g}(L)\right) := \frac{d\,\ln \mathfrak{g}(L)}{d\,\ln L}. \tag{5.15}$$

Weiterhin wird aus dem asymptotischen Verhalten der Funktion $\beta(\mathfrak{g})$ ihr Gesamtverhalten interpoliert. Dabei geht man von der Stetigkeit von $\beta(\mathfrak{g})$ aus, was sinnvoll ist, wenn man bedenkt, dass diese Funktion für endliche Probenlängen L bestimmt wird. Ferner kann man annehmen, $\beta(\mathfrak{g})$ wächst monoton mit $\mathfrak{g}$, da ein größeres Verhältnis $\Delta E(L)/\Delta(L)$ stets auf eine schwächere Lokalisierung hinweist [9]. Die beiden relevanten Grenzfälle sind zum einen der Fall starker Lokalisierung der Elektronenwellenfunktion $\psi(x)$, zum anderen der Fall metallischer Leiter. Für ersteren gilt: Der Leitwert fällt für große Längen L exponentiell ab:

$$|\psi(x = L)|^2 \sim \mathfrak{g} \simeq \mathfrak{g}_0 e^{-2L/\xi_L}. \tag{5.16}$$

Weiterhin erhält man im lokalisierten Grenzfall [9, 123]:

$$\lim_{\mathfrak{g}\to 0} \beta(\mathfrak{g}) = \ln(\mathfrak{g}/\mathfrak{g}_0) \sim \ln(\mathfrak{g}), \tag{5.17}$$

d. h. β ist negativ für $L \gg \xi_L$.
Im Falle der metallischen Leitung ist der Leitwert dagegen groß. Für $\mathfrak{g} \to \infty$ kann man ein Ergebnis der klassischen makroskopischen Transporttheorie verwenden, welches für die Leitfähigkeit σ lautet [84, 108]:

$$\mathfrak{G}(L) = \sigma L^{d-2} \quad \overset{(5.9)}{\Longrightarrow} \quad \mathfrak{g} = \frac{h}{2e^2}\sigma L^{d-2}. \tag{5.18}$$

Hieraus folgt für den Grenzfall stark ausgedehnter Wellenfunktionen:

$$\lim_{\mathfrak{g}\to\infty} \beta(\mathfrak{g}) = d - 2. \tag{5.19}$$

In einem dreidimensionalen System (d=3) kann der Parameter β demnach positiv werden. Beim kritischen Wert $\mathfrak{g} = \mathfrak{g}_c$ mit $\beta(\mathfrak{g}_c) = 0$, der die „Mobilitätsgrenze“ [9] festlegt, geht das System vom lokalisierten in den ausgedehnten Zustand über.

Im eindimensionalen Fall (d=1) bleibt die Wellenfunktion nach (5.19) dagegen immer lokalisiert. Dies deckt sich mit den Ergebnissen in [98–100]. Auch zweidimensionale Proben zeigen nach der vorgestellten Skalierungstheorie kein rein metallisches Leitverhalten. Die Abbildung 5.2 fasst den Verlauf des Skalierungsparameters β als Funktion des Logarithmus von $\mathfrak{g}$ nochmals zusammen.

Die entscheidende Aussage der Skalierungstheorie der Lokalisierung ist nach (5.15) und (5.16), dass nicht die reale (endliche) Länge einer Festkörperprobe das Transportverhalten bestimmt, sondern das Verhältnis ℓ der Lokalisierungslänge zu L die relevante Größe ist. Falls eine Funktion $\beta(\mathfrak{g})$ mit den obigen Eigenschaften existiert, ist dies äquivalent zu der Aussage, dass der Leitwert allein eine Funktion von ℓ ist [99, 125]:

$$\ell = \frac{\xi_\infty}{L}, \quad \text{wobei} \quad \frac{1}{\xi_\infty} = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{\xi_L}. \tag{5.20}$$

Details zur genauen Definition der hier verwendeten Lokalisierungslängen finden sich in [125]. Dort wird unter anderem die Gültigkeit der Skalierungstheorie im eindimensionalen Fall näher untersucht und gezeigt, dass unterschiedliche Proben endlicher Länge Fluktuationen im Leitverhalten zeigen. Eine leicht unterschiedliche Realisierung der Unordnung kann die Transmission des Systems erheblich beeinflussen, was zu starken Fluktuationen des Leitwertes von Probe zu Probe führt. Die Skalierungstheorie lässt demnach keine Aussage über den tatsächlichen Betrag des Leitwertes einer Probe endlicher Länge zu, erlaubt jedoch eindeutige Vorhersagen über die statistischen Eigenschaften der Leitwertverteilung vieler Einzelproben.

Genauso wie der Leitwert einer Festkörperprobe nach der Skalierungstheorie – zumindest im statistischen Sinne – durch das Verhältnis ξ_∞/L vollständig

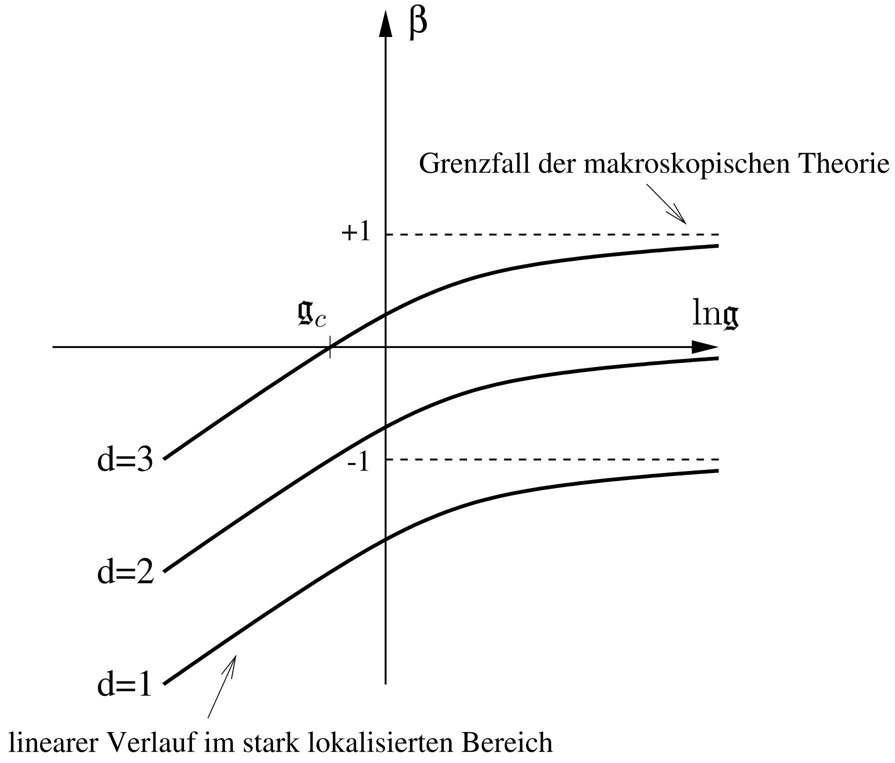

Abb. 5.2: Gezeigt ist der Verlauf der Skalierungsfunktion β zwischen den Grenzfällen starker Lokalisierung (lineares Verhalten $\beta \sim \ln \mathfrak{g}$, s. (5.17)) und makroskopischen Transports ($\beta \rightarrow d-2$ =konst., s. (5.19)). d gibt die Dimension der Festkörperprobe an. Nach [9, 124].

charakterisiert wird [126], ist das Verhalten eines Wasserstoffatoms im Mikrowellenfeld nach der Theorie der dynamischen Lokalisierung (vgl. Abschnitt 4.2) eindeutig durch den Lokalisierungsparameter ξ/N_c aus (4.8) bestimmt. Letzterer kann vermöge (4.8) durch verschiedene Wahlen von ω_0, F_0 und n_0 realisiert werden, was – in präziser Analogie zum Festkörperproblem – eine statistische Analyse des atomaren Leitwertss erlaubt.

5.4 Leitwertfluktuationen

Schwankungen des Festkörper-Leitwertes bei Variation der Probeneigenschaften durch Änderung der Fermienergie oder Anlegen verschiedener Magnetfelder, aber auch Schwankungen von Probe zu Probe, bedingt durch eine (leicht) unterschiedliche Störstellenverteilung, werden im metallischen Regime [12, 127, 128] und im Falle starker Lokalisierung [11, 129–131] beobachtet. In beiden Fällen sind Interferenzeffekte der Vielfachstreuung an den Störstellen die Ursache. Eine Diskussion möglicher weiterer Einflüsse in Isolatoren findet sich in [131–133]. Die Interferenzen hängen sehr empfindlich von der speziellen Realisierung der Unordnung ab und führen zu einer Fluktuation der Amplituden der elektronischen Wellenfunktion auf den verschiedenen Längenskalen beider Regime. Damit sind die Leitwertschwankungen Ausdruck der mesoskopischen Struktur ungeordneter Festkörper mit endlichen Abmessungen. Vorliegende Diskussion beschränkt sich auf den Fall am absoluten Nullpunkt ($T = 0\,K$) und auf Systeme ohne Spineffekte.

5.4.1 Universelle Leitwertfluktuationen im metallischen Regime

Im metallischen Regime, in dem die Probenlänge zwischen der mittleren freien Weglänge λ und der Lokalisierungslänge ξ liegt ($\lambda < L < \xi$), spricht man von *universellen Leitwertfluktuationen*. Die Schwankungen im Leitwert können als fundamentale Eigenschaft des Quantentransports in ungeordneten Festkörpern betrachtet werden [134]. Sie sind, solange $\lambda < L < \xi$ erfüllt bleibt, unabhängig von der Probenausdehnung L (vgl. Abschnitt 5.3 zur Skalierungstheorie) und in guter Näherung unabhängig von der Art und dem Grad der Unordnung im Material [134–136]. Die Universalität manifestiert sich in der Charakterisierung der Verteilungen des Leitwertes, der als Zufallsvariable betrachtet wird. Die Varianz der Wahrscheinlichkeitsverteilung ist, unabhängig vom speziellen System, eine universelle Konstante von der Größenordnung eins: $\mathrm{Var}(\mathfrak{g}) \simeq O(1)$. Die Fluktuationen sind für ein festgewähltes Probenensemble reproduzierbar. Zur Erklärung der Leitwertschwankungen werden Konzepte aus der Theorie der Zufallsmatrizen [137, 138] verwendet. Zufallsmatrizen simulieren die Transporteigenschaften durch kleine Elemente der Probe und liefern Aussagen über Korrelationen in den Eigenwertspektren, die für das universelle Verhalten der

Leitwertfluktuationen verantwortlich sind [125, 136]. In [126] wird ein Modell entwickelt, welches unter anderem eine Normalverteilung des Leitwertes im metallischen Regime mit $\mathrm{Var}(\mathfrak{g}) \simeq O(1)$ vorhersagt, und auch Aussagen über dessen statistische Eigenschaften im lokalisierten Fall macht.

5.4.2 Leitwertfluktuationen im stark lokalisierten Bereich

Im lokalisierten Regime ($L \gg \xi$) treten insbesondere in quasi-eindimensionalen Proben starke Schwankungen des Leitwertes auf, die sich über mehrere Größenordnungen erstrecken [11, 129–131]. Die ebenfalls empfindliche Abhängigkeit der Ionisationswahrscheinlichkeiten eines Wasserstoffatoms von den Feldparametern (vgl. Abbildung 4.3) kann als erster Hinweis für das Auftreten von *atomaren Leitwertfluktuationen* verstanden werden. Wie wir im nächsten Kapitel sehen werden, übertragen sich diese Fluktuationen schließlich auch auf den atomaren Leitwert.

Ausgehend von dem Zugang, der von Landauer vorgeschlagen wurde (s. Abschnitt 5.2.1), zeigt [126], dass im stark lokalisierten Regime mit

$$\mathfrak{g} \simeq \mathfrak{g}_0 e^{-2L/\xi_\infty} \tag{5.21}$$

der Logarithmus des Leitwertes $\ln \mathfrak{g}$ durch eine Normalverteilung charakterisiert ist. Ferner ergibt sich nach [126] für die Varianz folgende wichtige Beziehung:

$$\mathrm{Var}(\ln \mathfrak{g}) \sim -\ln \mathfrak{g} \sim -2\frac{L}{\xi_\infty}. \tag{5.22}$$

Wegen der extrem starken Fluktuationen führt man den Logarithmus des Leitwertes als Zufallsvariable ein, da eine Normalverteilung von $\ln \mathfrak{g}$ insbesondere die Divergenz der Varianz und höherer Momente von $\mathfrak{g}$ mit zunehmender Probenlänge impliziert [10].

Die physikalische Begründung für die Betrachtung von $\ln \mathfrak{g}$ anstelle von $\mathfrak{g}$ ist, dass $\ln \mathfrak{g}$ eine additive Größe darstellt. Wenn man sich die Probe der Länge L in viele kleinere Stücke mit einer Ausdehnung, die etwa der Lokalisierungslänge entspricht, zerlegt denkt, zeigen die Teilstücke ($L_{\mathrm{Teil}} \simeq \xi_\infty$) statistisch unabhängige Fluktuationen mit $\mathfrak{g}_{\mathrm{Teil}} \simeq 1$ und $\mathrm{Var}(\mathfrak{g}_{\mathrm{Teil}}) \simeq O(1)$. Mit Hilfe eines Skalierungsargumentes [122] erhält man dann für den Fall eindimensionaler Proben die Beziehung (5.22) [126]. Die Beiträge der Segmente zum Leitwert der Gesamtprobe sind ebenfalls statistisch unabhängig, woraus im Limes für große Gesamtprobenlängen $L/\xi_\infty \to \infty$ folgt, dass der Logarithmus des Leitwertes der gesamten Probe normalverteilt ist [126, 136].

In zahlreichen Arbeiten (z. B. in [139, 140]) wurde vorgeschlagen, die statistischen Eigenschaften des Leitwertes mit Hilfe von Zufallsmatrizen mit Bandstruktur zu beschreiben. Die Matrizen haben außer einem engen Bereich um

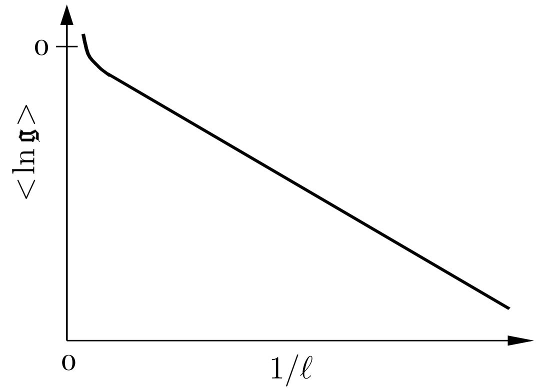

Abb. 5.3: Casati et al. [140] finden in Übereinstimmung mit (5.16) im lokalisierten Regime eines Bandmatrizen-Zufallsensembles einen linearen Zusammenhang zwischen dem Logarithmus des Leitwertes und dem inversen Lokalisierungsparameter $\ell^{-1} = L/\xi$. Abweichungen treten im Falle sehr großer Werte von ℓ auf.

die Diagonale nur Nulleinträge. Die Ausdehnung des Bereiches wird durch eine Lokalisierungslänge ξ charakterisiert.
Mit diesem Modell lassen sich die multiplikativen Transfermatrizen, welche den Transport durch die Gesamtprobe im Rahmen des Landauer-Formalismus beschreiben [125, 126, 136], simulieren. Das Verhalten der Energieeigenwerte bei einem Wechsel der Randbedingungen à la Thouless kann ebenfalls untersucht werden. Auch die Lokalisierung der Wellenfunktion kann mit Hilfe dieser Bandmatrizen einfach interpretiert werden [141]: So wie im Tight-Binding-Modell das Elektron nur an nah benachbarte Gitterplätze wesentlich gekoppelt ist, gewährleistet die Bandstruktur der betrachteten Matrizen, dass nur Wechselwirkungen mit Elementen nahe der Diagonalen erlaubt sind. Die Autoren von [140] erhalten im lokalisierten Fall eine Bestätigung der Beziehung (5.22) und einen linearen Zusammenhang zwischen dem gemittelten Logarithmus des Leitwertes $<\ln \mathfrak{g}>$ und dem inversen Lokalisierungsparameter $\ell^{-1} = L/\xi$. Diese Beziehung, die man nach Gleichung (5.16) auch erwartet, ist in Abbildung 5.3 skizziert.

5.5 Übersicht über die relevanten Konzepte aus der Festkörpertheorie

Die zentralen Modelle aus der Theorie mesoskopischer Systeme, die uns bei der Betrachtung des Ionisationsverhaltens von Wasserstoff im äußeren Feld als Leitfaden dienen, fasst das abschließende Schema 5.4 noch einmal zusammen. Im nächsten Kapitel wird dann das Konzept des Leitwertes auf das atomare Problem angewandt und die enge Analogie dieses Systems zum Festkörper untersucht.

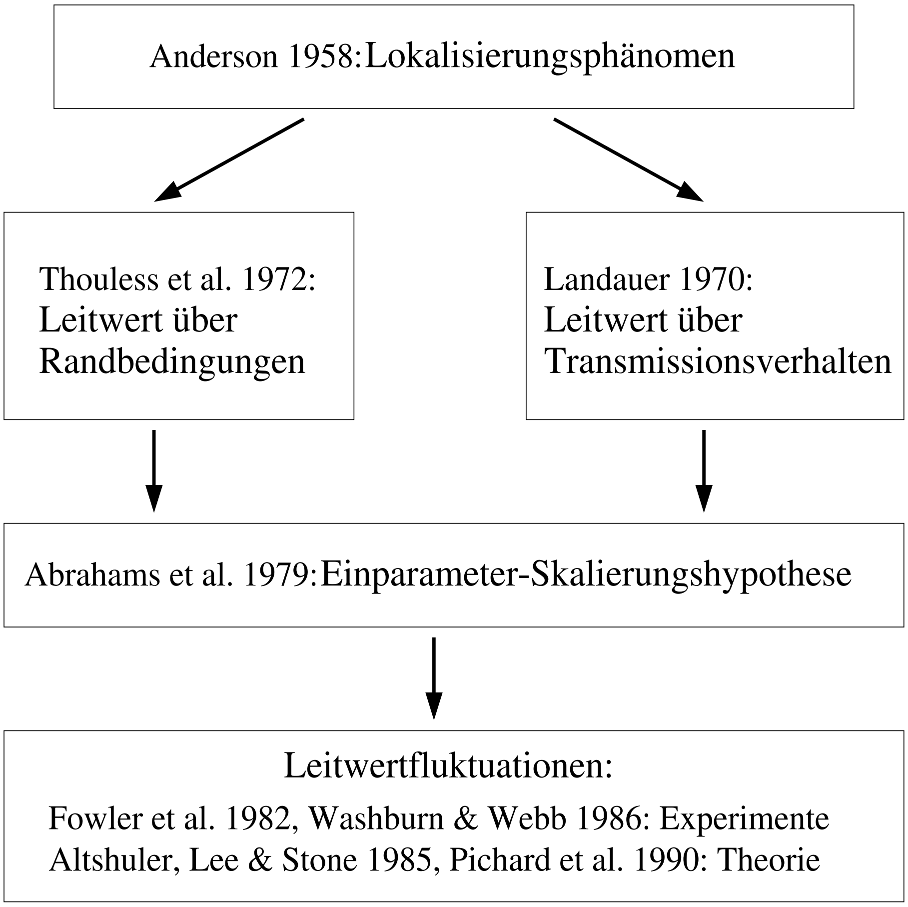

Abb. 5.4: Abschließende Übersicht über die Konzepte [1, 9, 11, 12, 18, 116, 126, 134, 135], die in Bezug auf die Analogie zwischen dem atomaren Problem und dem Ladungstransport in Festkörpern von Bedeutung sind.

Kapitel 6

Der atomare Leitwert

Nachdem das vorige Kapitel fast ausschließlich der Diskussion der Eigenschaften ungeordneter Festkörper gewidmet war, wenden wir uns nun wieder dem Wasserstoffatom im Mikrowellenfeld zu. Ziel dieses Kapitels ist es, das Konzept des in Gleichung (3.29) definierten atomaren Leitwertes g für das Ionisationsproblem kurz zu motivieren und anhand umfangreicher Untersuchungen seines Verhaltens als Funktion der Systemparameter einen tieferen Einblick in die statistischen Eigenschaften des komplexen Ionisationsprozesses zu gewinnen. Die quantitativ zu prüfende Analogie zum Leitwert der Festkörpertheorie soll dabei unser zentraler Leitfaden sein.

6.1 Motivation des atomaren Leitwertes

Der Vergleich mit der Formel (4.2) für die Ionisationswahrscheinlichkeit $P_{\mathrm{Ion}}(t)$ zeigt, dass der in (3.29) definierte atomare Leitwert auch als Ableitung der Ionisationswahrscheinlichkeit nach der Zeit geschrieben werden kann:

$$g = \frac{1}{\Delta}\frac{\partial}{\partial t}P_{\mathrm{Ion}}(t)\bigg|_{t=0} = \frac{1}{\Delta}\sum_{\epsilon}\Gamma_\epsilon w_\epsilon. \tag{6.1}$$

Somit lässt sich also der Leitwert als Ladungsfluss pro Zeiteinheit interpretieren. Die Ionisationsrate wird zum Zeitpunkt $t = 0$ berechnet, da im Ionisationsprozess nur ein Elektron pro Atom vorhanden ist und nicht wie im Falle der Festkörperprobe durch die Zuleitungen Elektronen bei konstanter Potentialdifferenz nachgeliefert werden. Wie in Abschnitt 3.5 vorgeführt, kann man den Ionisationszerfall des Atoms als halben Streuprozess betrachten, in dem der Anfangszustand $|n_0\rangle$ unter der durch den Zeitentwicklungsoperator $\mathrm{U}(t_2, t_1)$ (3.24) determinierten Dynamik in Kontinuumszustände überführt wird. Durch die Beziehung (6.1) begründet sich die Wahl der relevanten Gewichtsfaktoren w_ϵ in den Definitionen (3.28) und (3.29).

Der mittlere Niveauabstand Δ in (3.29) lässt sich durch die Anzahl der effektiven Resonanzen in einer Floquet-Zone der Breite ω abschätzen:

$$\Delta \simeq \frac{\omega}{N} = 2\omega^2 n_0^2 = 2\frac{\omega_0^2}{n_0^4}. \tag{6.2}$$

N zählt entsprechend Gleichung (3.11) den Abstand vom Anfangszustand bis zum atomaren Kontinuum in Photonen. Eine andere Methode zur Berechnung des mittleren Niveauabstandes verwendet die Shannon-Entropie [142]:

$$H_{\text{Shannon}} := -\sum_{\epsilon} w_\epsilon \ln(w_\epsilon). \tag{6.3}$$

In dem hier betrachteten Ionisationsprozess gibt $\exp(H_{\text{Shannon}})$ ein Maß für die effektive Anzahl der koppelnden Floquet-Zustände [143, 144], und man erhält durch

$$\Delta \simeq \omega / \exp(H_{\text{Shannon}}) \tag{6.4}$$

einen genäherten Wert für Δ. Ein Vergleich der mit (6.2) und (6.4) berechneten Niveauabstände zeigt, dass sie für eine Probe jeweils in derselben Größenordnung liegen. Im ersten Fall wächst Δ nach Gleichung (6.2) mit zunehmendem ω_0 ($\omega_0 \in [2.0; 2.5]$), während die zweite Methode Werte liefert, die aufgrund der Exponentialfunktion der Shannon-Entropie im Nenner Schwankungen aufweisen. Tendenziell sind die mit Hilfe der Beziehung (6.2) gewonnenen Werte kleiner, da mehr Zustände im Energieintervall der Breite ω gezählt werden. Einen Vergleich der so gewonnenen mittleren Niveauabstände ermöglicht Abbildung 6.1. Hier sind für die Anfangszustände $n_0 = 40, 60, 70$ und 100 und denselben Lokalisierungsparameter $\ell = 0.20$, der schon in Abschnitt 4.2 verwendet wurde, die Werte für Δ als Funktion der skalierten Frequenz ω_0 gegenübergestellt. Betrachtet man den Logarithmus des atomaren Leitwertes, bewirkt ein Unterschied im Niveauabstand lediglich eine Verschiebung des Absolutwertes. Die statistischen Eigenschaften des Leitwertes bleiben davon unbeeinflusst (vgl. Abbildung 6.15 in Abschnitt 6.2.3). In der weiteren Betrachtung wird zur Berechnung von Δ ansonsten stets die Abschätzung (6.2) verwendet. Wie wir im nächsten Abschnitt 6.2 sehen werden, ist – analog dem Fall der Fluktuationen der Ionisationswahrscheinlichkeiten $P_{\text{Ion}}(\omega_0)$ – für die atomaren Leitwertschwankungen das Verhalten der Resonanzbreiten Γ_ϵ bzw. der Gewichte w_ϵ entscheidend.

6.2 Atomare Leitwertfluktuationen

Erste Hinweise dafür, dass die statistischen Verteilungen des atomaren Leitwertes g im lokalisierten Bereich den Vorhersagen aus [126] für ungeordnete Festkörperproben entsprechen, wurden in [15] für einen eingeschränkten Parameterbereich gefunden, insbesondere für die atomaren Anfangszustände $n_0 = 60$ und $n_0 = 70$. In der vorliegenden Arbeit wird ein weit größerer Bereich

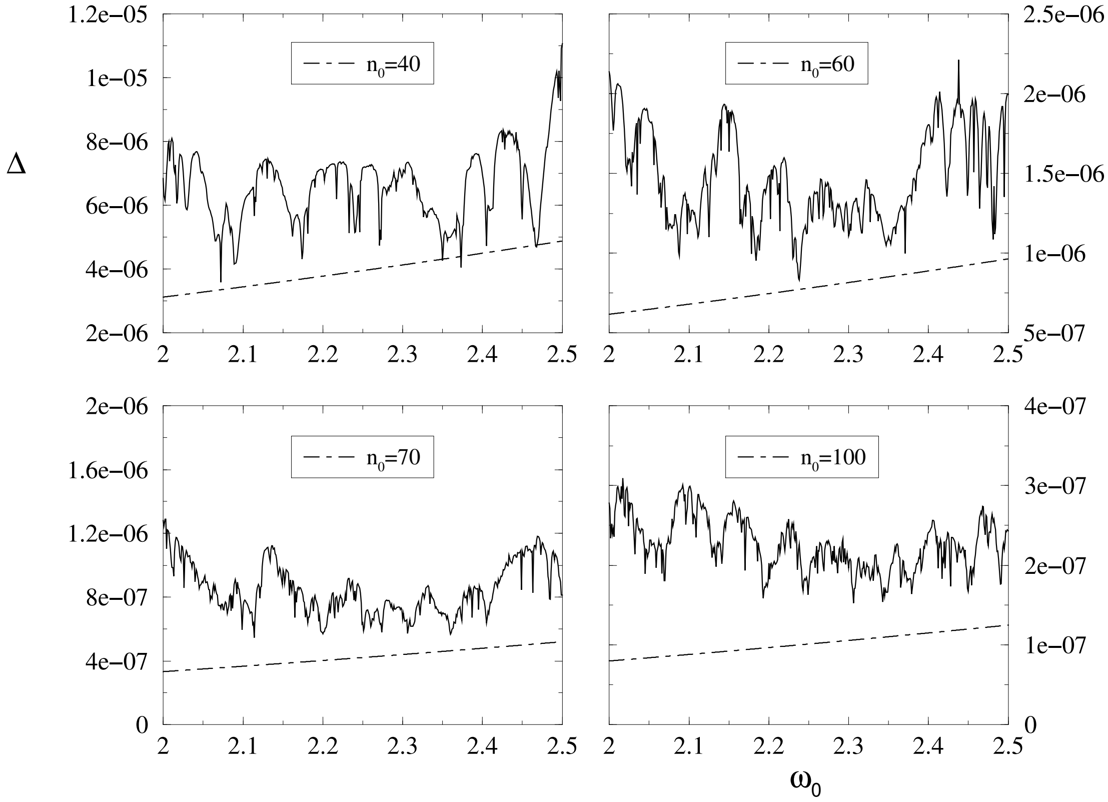

Abb. 6.1: Gezeigt sind die nach der Gleichung (6.2) (strichpunktierte Kurven) und mit Hilfe der Shannon-Entropie (6.4) (ausgezogene Linien) gewonnenen Abschätzungen für den mittleren Niveauabstand Δ des Floquet-Spektrums als Funktion der skalierten Frequenz ω_0. n_0 bezeichnet jeweils den atomaren Anfangszustand. Der Absolutwert der Niveauabstände nimmt mit wachsender Quantenzahl ab (unterschiedliche Maßstäbe!). Die relativen Fluktuationen der mittels der Shannon-Entropie berechneten Werte bleiben aber in derselben Größenordnung, sind also weitgehend unabhängig von n_0. Als Lokalisierungsparameter wurde wie in den Abbildungen 4.3 und 4.4 $\ell = 0.20$ gewählt.

von Anfangszuständen und auch der Kontrollparameter ω_0 und F_0 des äußeren Feldes betrachtet, um die statistischen Eigenschaften der Größe g umfassend charakterisieren zu können. Aufgrund der Beziehungen (4.6) und (4.8) steht mit $n_0 \sim 1/\hbar_{\text{eff}}$ (s.(2.8)) ein weiterer wesentlicher Parameter zur Verfügung, der im Rahmen der Diskussion Anderson-lokalisierter Festkörper keine unmittelbare Entsprechung hat. Dieser, wie sich zeigen wird, zentrale Aspekt blieb in [15] weitgehend unberücksichtigt.

6.2.1 Algorithmus zur Gewinnung der Datensätze

Ziel ist es, verschiedene Proben für das vorgestellte Ionisationsproblem zu simulieren. Dies geschieht durch eine geeignete Variation der freien Parameter n_0, ω_0 und F_0. Ein festes Tripel (n_0, ω_0, F_0) repräsentiert dann eine einzelne Probe. Sofern die in Abschnitt 4.2 vorgestellte Theorie der dynamischen Lokalisierung für den realen Ionisationsprozess zumindest qualitativ gültig bleibt und insbesondere auch die Analogie zum Andersonschen Modell trägt, sollte der Lokalisierungsparameter aus Gleichung (4.8) die statistischen Eigenschaften des Lokalisierungsproblems vollständig charakterisieren. Ein Probenensemble wird gewonnen, indem wir für festes n_0 einen Wert von ℓ auswählen, der dann unter abgestimmter Variation der skalierten Feldfrequenz und der skalierten Feldstärke konstant gehalten wird.

Betrachtet wurde der weite Bereich atomarer Anfangszustände zwischen $n_0 = 40$ und $n_0 = 100$. Um den Übergang vom lokalisierten zum delokalisierten Regime beobachten zu können, wurden vor allem Lokalisierungsparameter zwischen $\ell = 0.10$ und $\ell = 2.0$ verwendet. Zum Vergleich mit den in [15] gewonnenen Ergebnissen lassen wir ω_0 jeweils 500 äquidistante Werte zwischen 2.0 und 2.5 annehmen. Die resultierende Schrittweite in ω_0 genügt, um sicherzustellen, dass die so erhaltenen 500 Realisierungen der atomaren Probe statistisch unkorreliert sind.

Als nächsten Schritt bestimmt man nun zu einem festen Parametertripel (n_0, ω_0, F_0) die exakten Ionisationsbreiten Γ_ϵ und die Gewichte w_ϵ nach der in Anhang B beschriebenen Methode. Da die für die numerische Rechnung verwendete Floquet-Basis endlich gewählt werden muss, addieren sich die einzelnen Gewichte w_ϵ nicht exakt zu eins. Die Unsicherheit beträgt etwa $\delta w_\epsilon \simeq 10^{-5}$. Daher werden aus der großen Anzahl numerisch gewonnener Zustände nur die Breiten berücksichtigt, deren Gewicht größer oder gleich 10^{-4} ist. Diese Diskriminierung durch den Überlapp mit dem Startzustand n_0 schließt erfahrungsgemäß auch die Beträge der gedrehten Kontinuumszustände (vgl. Abbildung 3.2c) aus.

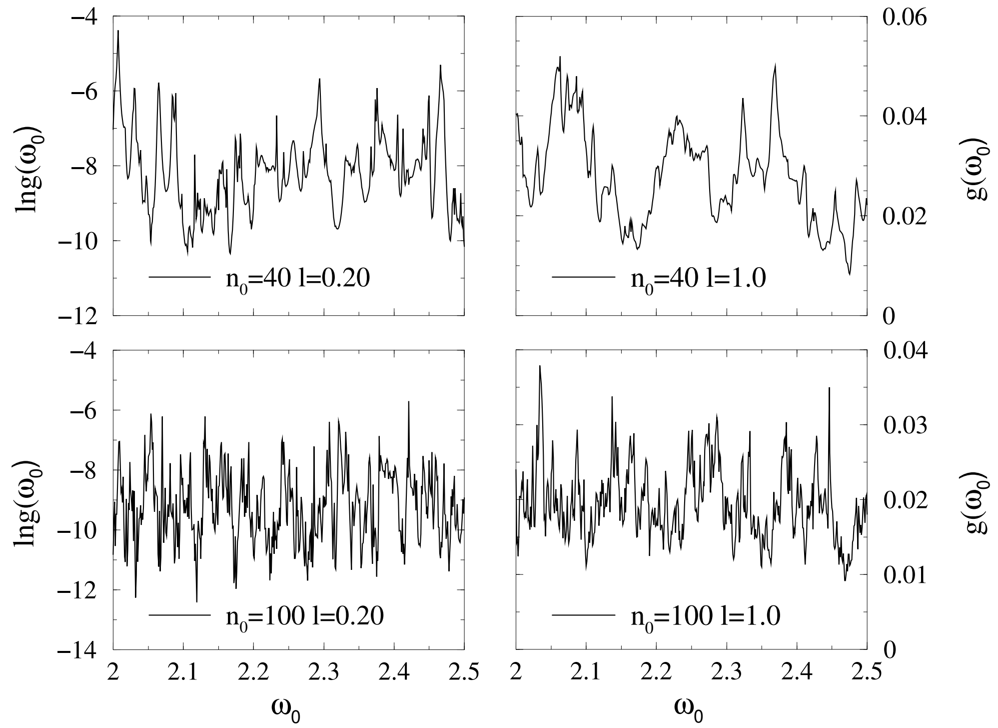

Abb. 6.2: Der atomare Leitwert g als Funktion der skalierten Frequenz ω_0 für die Lokalisierungsparameter $\ell = 0.20, 1.0$ und die Anfangszustände $n_0 = 40, 100$. Wegen der starken Fluktuationen über mehrere Größenordnungen im Falle $\ell = 0.20$ ist im linken Teil jeweils der Logarithmus $\ln g$ aufgetragen. Für den hohen Wert $\ell = 1.0$ in den rechten Segmenten sind dagegen die Fluktuationen deutlich schwächer (hier g statt $\ln g$).

6.2.2 Numerische Resultate

Der atomare Leitwert selbst zeigt extreme Fluktuationen, die dem erratischen Verlauf der Ionisationswahrscheinlichkeiten in Abbildung 4.4 ähneln. In Figur 6.2 ist der Leitwert $g(\omega_0)$ als Funktion der skalierten Frequenz für die beiden Lokalisierungsparameter $\ell = 0.20$ bzw. $\ell = 1.0$ und die Anfangszustände $n_0 = 40$ bzw. $n_0 = 100$ aufgetragen. Wegen der Fluktuationen des Leitwertes über mehrere Größenordnungen im Bereich $\ell < 0.5$ untersuchen wir dort hauptsächlich die Verteilungen seines natürlichen Logarithmus $\ln g$. Im delokalisierten Bereich sind die relativen Schwankungen $\delta g / < g >$ dagegen geringer, was eine Betrachtung des Verhaltens von g für Lokalisierungsparameter $\ell \geq 0.75$ sinnvoll macht.

Für Lokalisierungsparameter $\ell = 0.1$ bis $\ell \simeq 0.5$ erhalten wir, dass $\ln g$ gut einer Normalverteilung folgt. Die aus den jeweils 500 Proben gewonnenen Histogramme werden für wachsende Werte des anfänglichen Rydbergzustandes n_0 immer besser durch Gaußsche Verteilungen approximiert. Die folgenden Darstellungen 6.3, 6.4 und 6.5 zeigen die Gaußschen Fit-Kurven an die aus den Daten gewon-

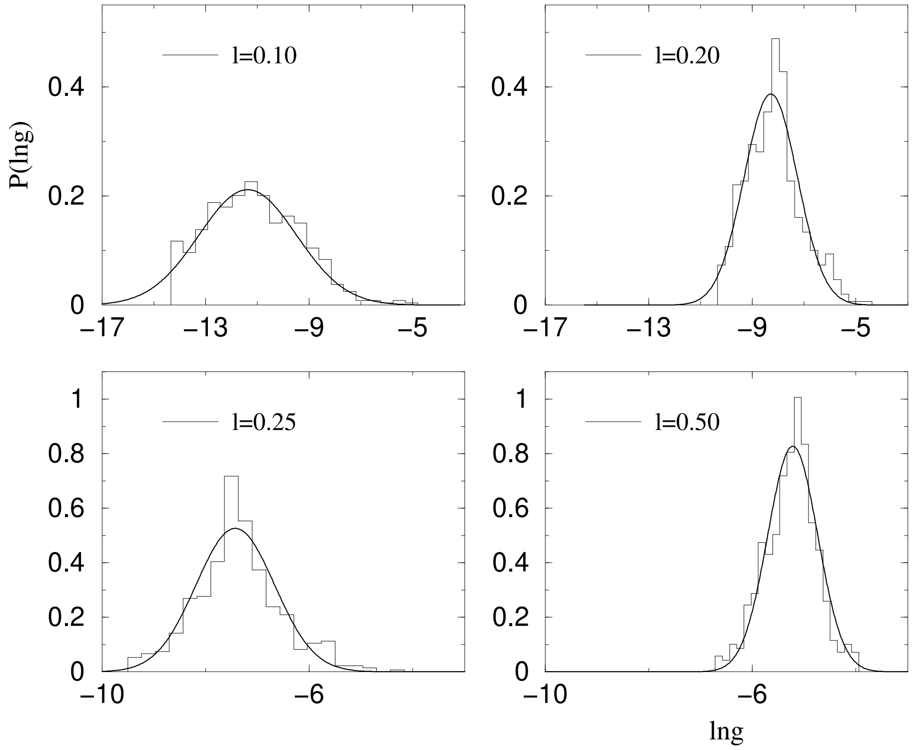

Abb. 6.3: Histogramme der Verteilungen des Logarithmus des atomaren Leitwertes $\ln g$ (aus je 500 Proben mit $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$) für den anfänglichen Rydberg-Zustand $n_0 = 40$ und vier verschiedene Lokalisierungsparameter $\ell = 0.10, 0.20, 0.25, 0.50$. Die dicken Linien geben die Normalverteilungen an, die an die Daten gefittet wurden. Man beachte den auf beiden Achsen veränderten Maßstab der unteren im Vergleich zu den oberen Graphen. Die Verteilungen wandern mit wachsendem ℓ zu höheren Werten $\ln g$ und werden schmaler. Für die kleinste hier untersuchte Hauptquantenzahl $n_0 = 40$ zeigen sich deutliche Abweichungen von der Normalverteilung.

nenen Histogramme für verschiedene Anfangszustände n_0 und für jeweils vier Werte des Lokalisierungsparameters ℓ.

Die Abbildung 6.6 erlaubt nochmals einen direkten Vergleich der Qualität der Fits für einen festen Lokalisierungsparameter ($\ell = 0.20$) und vier verschiedene atomare Anfangszustände ($n_0 = 40, 60, 80, 100$). Die Qualität der Gaußschen Fits an die Histogramme wurde mit Hilfe von Signifikanztests wie dem Kolmogoroff-Smirnoff-Test und dem χ^2-Verfahren [28] untersucht. Diese Tests stützen die Aussage, dass die Verteilungen umso besser durch eine Gaußsche Kurve approximiert werden, je größer der anfängliche Rydbergzustand n_0 ist. Die Approximation wird deutlich schlechter, je weiter man in den delokalisierten Bereich $\ell > 0.5$ vordringt. Tabelle 6.1 stellt die Qualität der Gaußschen Approximationen zu verschiedenen Hauptquantenzahlen n_0 für den Lokalisierungsparameter $\ell = 0.20$ einander gegenüber. Angegeben ist jeweils die Erfolgswahrscheinlichkeit für den Nachweis, dass die Werte $\ln g$ normal verteilt sind.

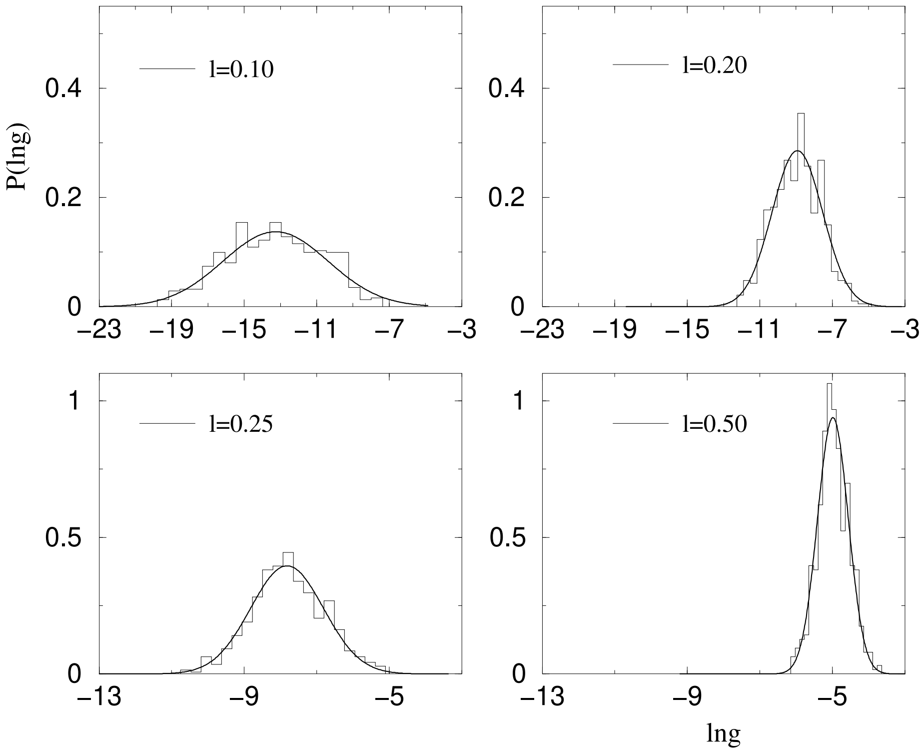

Abb. 6.4: Histogramme und Gaußsche Fits für $n_0 = 70$ bei gleich gewählten Lokalisierungsparametern und gleichem Frequenzintervall wie in Abbildung 6.3. Zu erkennen ist eine deutliche Verbesserung der Approximation im Vergleich zu $n_0 = 40$.

n_0	P_{χ^2}	P_{KS}
40	1.747×10^{-6}	6.342×10^{-2}
50	4.573×10^{-7}	0.1231
60	0.6081×10^{-3}	0.1240
70	0.1063	0.8755
80	0.2322	0.9233
90	0.2639	0.4177
100	0.8920	0.9011

Tab. 6.1: Zusammenstellung der Wahrscheinlichkeiten für den Nachweis, dass die Größen $\ln g$ normalverteilt sind. P_{χ^2} bzw. P_{KS} bezeichnen die Erfolgswahrscheinlichkeit des χ^2-Tests und des Komogorff-Smirnoff-Signifikanztests. Die Verteilungen werden tendenziell durch eine Gaußkurve umso besser approximiert, je größer n_0 ist. Die angegebenen Werte wurden jeweils für $\ell = 0.20$ und $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$ berechnet. Ähnliche Ergebnisse erhält man für die anderen betrachteten Lokalisierungsparameter $\ell < 0.5$.

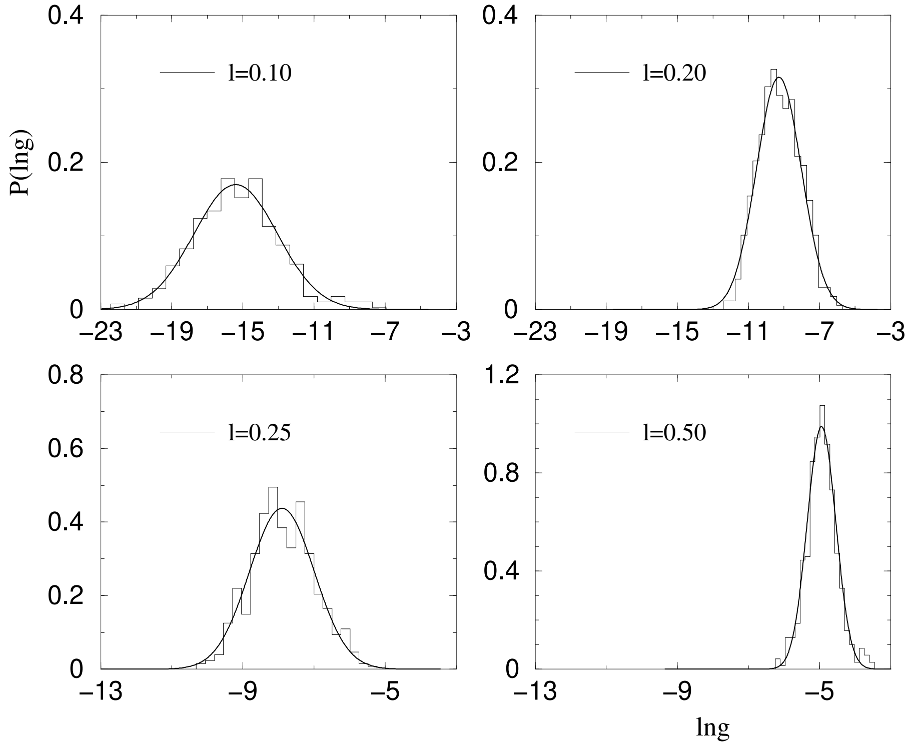

Abb. 6.5: Histogramme und Gaußsche Fits für $n_0 = 100$ bei gleich gewählten Lokalisierungsparametern und demselben Frequenzintervall wie in den Abbildungen 6.3 bzw. 6.4. Mit zunehmendem ℓ, d. h. für wachsende Feldstärke F_0, verschiebt sich wie im Falle $n_0 = 40, 70$ (Abbildungen 6.3 und 6.4) der Schwerpunkt zu höheren Werten $\ln g$, und die Verteilung wird schmaler. Die Approximation durch die Normalverteilungen ist für den höchsten hier betrachteten Rydbergzustand $n_0 = 100$ erstaunlich gut.

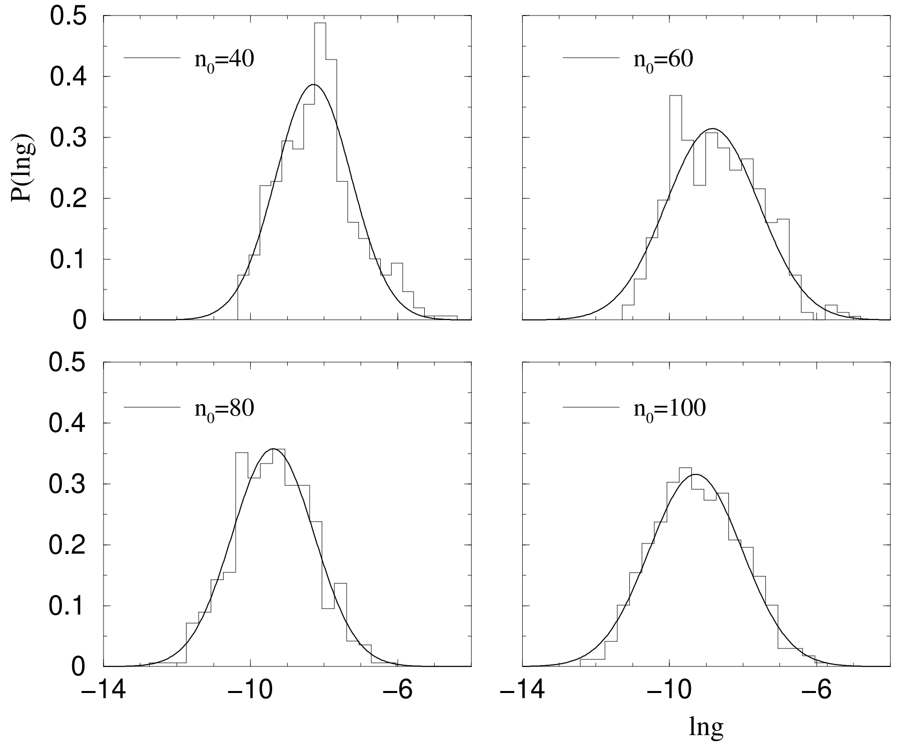

Abb. 6.6: Direkte Gegenüberstellung der Verteilungen von $\ln g$ und der zugehörigen Gaußschen Fits für die Anfangszustände $n_0 = 40, 60, 80$ und $n_0 = 100$. Der Lokalisierungsparameter ist jeweils $\ell = 0.20$. Mit wachsender Hauptquantenzahl verbessert sich sichtlich die Qualität der Gaußschen Approximationen. Gleiches gilt für die anderen im Bereich $\ell < 0.50$ betrachteten Werte von ℓ.

n_0	n_c	N_c
40	80	7.5
60	120	11.25
80	160	15
100	200	18.75

Tab. 6.2: Zusammenstellung der Anzahl von Photonen N_c, die den Abstand vom Anfangszustand n_0 bis zur effektiven Ionisationsschwelle $n_c = 2n_0$ (vgl. Anhang B) mißt. Die Werte wurden für die Anfangszustände n_0 aus Abbildung 6.6 und die Frequenz $\omega_0 = 2.0$ berechnet.

Man sieht also, dass die Verteilungen für zunehmendes n_0 tendenziell besser der Normalverteilung folgen. Repräsentativ für andere Parameterwahlen sind in Tabelle 6.2 die Werte von N_c zusammengestellt, die für die vier verschiedenen Anfangszustände aus Abbildung 6.6 und für $\omega_0 = 2.0$ und $n_c = 2n_0$ mittels Gleichung (4.6) berechnet worden sind. Somit tragen bei kleineren n_0-Werten weniger Zustände zum Ionisationsprozess bei. Die effektive, endliche (!) Probenlänge – repräsentiert durch die Zahl $N_c \sim n_0$ (s. Gl. (4.6)) – und die quantenmechanische Niveaudichte, die wie der inverse mittlere Niveauabstand skaliert, nimmt mit n_0 ab. Im Bereich niedriger atomarer Anregungen induziert somit die quantenmechanische „Grobkörnung“ des Transportprozesses charakteristische Korrekturen. In der Sprache des Andersonschen Modells aus der Festkörperphysik entspricht N_c der effektiven Anzahl der Gitterplätze und die Lokalisierungslänge ξ der Anzahl der Plätze, die wesentlich besetzt sind. Im Falle zu kleiner Proben und daher – bei festem ℓ – zu kleiner Lokalisierungslängen $\xi \simeq 1$ kann man aber weder im Festkörper noch im atomaren Problem sinnvoll von einer Lokalisierung auf einem diskreten Gitter mit einer auf eins normierten Gitterkonstante sprechen [125, 140].

Trägt man nun den Mittelwert des Logarithmus von g gegen den inversen Lokalisierungsparameter $1/\ell$ auf, erhält man, zumindest für große Werte von n_0, einen annähernd linearen Zusammenhang. Abbildung 6.7 zeigt dies für den Anfangszustand $n_0 = 100$ sehr schön. Bei kleineren Werten von n_0 weicht das Verhalten vom durch die Gleichung (4.9) nahegelegten geradlinigen Verlauf ab, und zwar umso früher, je kleiner n_0 ist. Dies ist ein weiterer Beleg für die beschriebene „Körnung“ des Transportprozesses. Die Abweichung erfolgt systematisch bei Werten von ℓ, die nach Gleichung (4.8) einer Lokalisierungslänge von etwa $\xi \leq 2$ entsprechen. Mit anderen Worten: Es koppeln nur ein bis zwei Zustände stark miteinander, und der Grenzfall kontinuierlich liegender „Gitterplätze“ ist keineswegs gegeben, was die statistischen Eigenschaften des Leitwertes beeinträchtigt. Dagegen geht man bei Betrachtung Anderson-lokalisierter Festkörper üblicherweise von der Annahme aus, dass die Lokalisierungslänge weit größer als die Gitterkonstante a bleibt [125, 140].

Die Proportionalität zwischen dem Mittelwert $< \ln g >$ und dem inversen Lokalisierungsparameter ℓ rechtfertigt die schon früher verwendete Abschätzung (4.9). Ferner stimmt dieses Ergebnis mit der für ungeordnete Festkörper im lokalisierten Regime vorhergesagten Beziehung (5.21) überein [140]. Diese Beziehung hatten wir in Abschnitt 5.4.2 vorgestellt. Man kann nun die Abbildungen 6.7 und 5.3 direkt miteinander vergleichen, wodurch die Analogie zwischen dem Ionisationsproblem und dem Quantentransport in ungeordneten Festkörperproben zusätzlich gestützt wird.

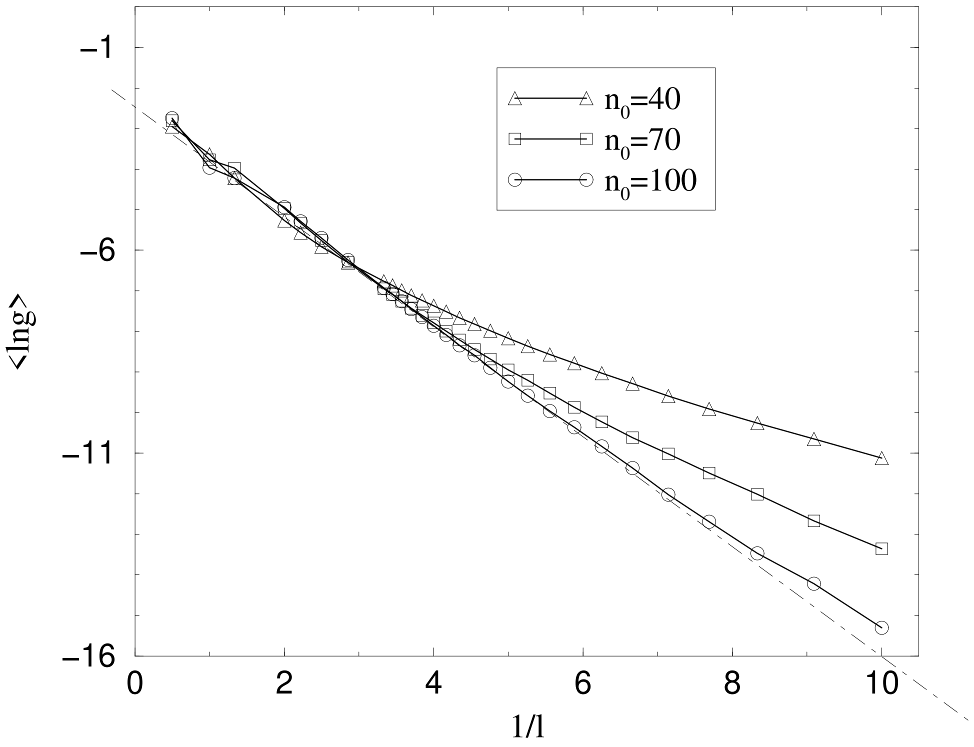

Abb. 6.7: Mittelwerte des natürlichen Logarithmus des atomaren Leitwertes g als Funktion des inversen Skalierungsparameters $1/\ell$ für die Anfangszustände $n_0 = 40, 70$, 100 und $\ell = 0.10 - 2.00$. Die Proben wurden durch Variation von ω_0 in äquidistanten Schritten zwischen 2.0 und 2.5 gewonnen. Für $n_0 = 100$ ergibt sich ein weitgehend linearer Verlauf entlang der strichpunktiert eingezeichneten Geraden.

Wie bereits in Abschnitt 2.3 kurz diskutiert wurde, können klassische Phasenraumstrukturen Einfluss auf den quantenmechanischen Ionisationsprozess haben. Das effektive Wirkungsquantum $\hbar_{\text{eff}} = h/n_0$ nimmt mit wachsendem n_0 ab, und Reste elliptischer Inseln werden für verschiedene n_0 von der Quantendynamik unterschiedlich aufgelöst. Die Quantenmechanik gehorcht also nicht (exakt) der klassischen Skaleninvarianz des Phasenraums. So können Phasenraumstrukturen im klassischen, gemischt regulär-chaotischen System eine lokale Stabilität gegenüber der Ionisation im Parameterraum (n_0, ω_0, F_0) bewirken [21]. Es stellt sich die Frage, ob dies Auswirkungen auf die gewonnenen Leitwertverteilungen hat. Zur Untersuchung eines möglichen Einflusses wurden höhere Frequenzen $(\omega_0 \geq 3.5)$ verwendet, um Reste klassischer Inseln im Phasenraum oberhalb von

Wirkungen, welche dem Anfangszustand n_0 entsprechen, auszuschließen. Eine systematische Abhängigkeit der Verteilungen des Logarithmus des Leitwertes $\ln g$ von der konkreten Phasenraumstruktur konnte dabei aber nicht festgestellt werden. Dagegen werden die Korrekturen durch die wegen der höheren Werte von ω_0 kleineren „Probenlängen" N_c noch deutlicher sichtbar als für die Verteilungen mit $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$ (vgl. die Abbildungen 6.13, 6.14 und die weitere Diskussion im folgenden Abschnitt 6.2.3).

Betrachtet man nochmals die Histogramme des Logarithmus des atomaren Leitwertes aus den Abbildungen 6.3, 6.4 und 6.5, dann sieht man, dass die Verteilungen für wachsende Lokalisierungsparameter ℓ schmaler werden und dabei auf der Abszisse nach rechts wandern. Darin manifestieren sich die mit zunehmender Feldstärke F_0 höher werdenden Ionisationsraten. Der Leitwert g wächst tendenziell mit ℓ (vgl. Abbildung 6.2), d. h. sein Logarithmus $\ln g$ wächst ebenfalls in Richtung der positiven Halbachse. Die Abbildung 6.8 zeigt die Histogramme und die zugehörigen optimalen Gaußschen Fits für den Anfangszustand $n_0 = 100$ und die Lokalisierungsparameter $\ell = 0.50 - 2.0$. Die Verteilungen werden mit abnehmender Lokalisierung enger. Ab $\ell = 0.5$ treten Abweichungen von der Normalverteilung auf, die im Falle $\ell = 2.0$ selbst bei sehr großem n_0 deutlich sichtbar sind.

Ein weiteres zentrales Ergebnis, welches aus der Auswertung der gewonnenen Datensätze folgt, betrifft die Standardabweichungen bzw. deren Quadrat, die Varianzen der Verteilungen von $\ln g$ im stark lokalisierten Bereich. Für Lokalisierungsparameter $\ell \leq 0.2$ ist ein linearer Verlauf der Varianzen mit dem Mittelwert $<\ln g>$ der Verteilungen – in Analogie zum Festkörperbefund (5.22) – mit den numerischen Resultaten zumindest verträglich [15]. Der globale Verlauf von $\mathrm{Var}(\ln g)$ mit $<\ln g>$ scheint freilich durch ein Polynom niedriger Ordnung besser beschrieben zu werden.

Abbildung 6.9 zeigt die gewonnenen Kurven für verschiedene atomare Anfangszustände n_0. In der nachfolgenden Figur 6.10 sind zur besseren Orientierung für die Werte $n_0 = 70$ und $n_0 = 100$ Geraden eingezogen. Mit Ausnahme des ersten Punktes ($\ell = 0.10$) ergibt sich näherungsweise eine lineare Beziehung bis zu einem Skalierungsparameter von $\ell \leq 0.20$, der in Abbildung 6.9 etwa einem Wert von $<\ln g>\simeq -9$ entspricht. Für $n_0 = 100$ finden sich zusätzlich Fehlerbalken. Die numerischen Fehler sind durch die Tatsache bedingt, dass die Wahrscheinlichkeiten der einzelnen Gewichte w_ϵ sich nicht exakt zu eins addieren. Wie bereits erwähnt, führt dies zu einem absoluten Fehler der Gewichte von $\delta w_\epsilon \simeq 10^{-5}$.

Im stark lokalisierten Regime lässt sich also für die Varianzen der Leitwertverteilungen näherungsweise folgender Zusammenhang angeben:

$$\mathrm{Var}(\ln g) \simeq b(n_0) - d(n_0) <\ln g> . \tag{6.5}$$

Die Koeffizienten b und d hängen beide vom Anfangszustand n_0 ab. Damit zeigt sich keine direkte Universalität der hier gewonnenen Ergebnisse, wie man

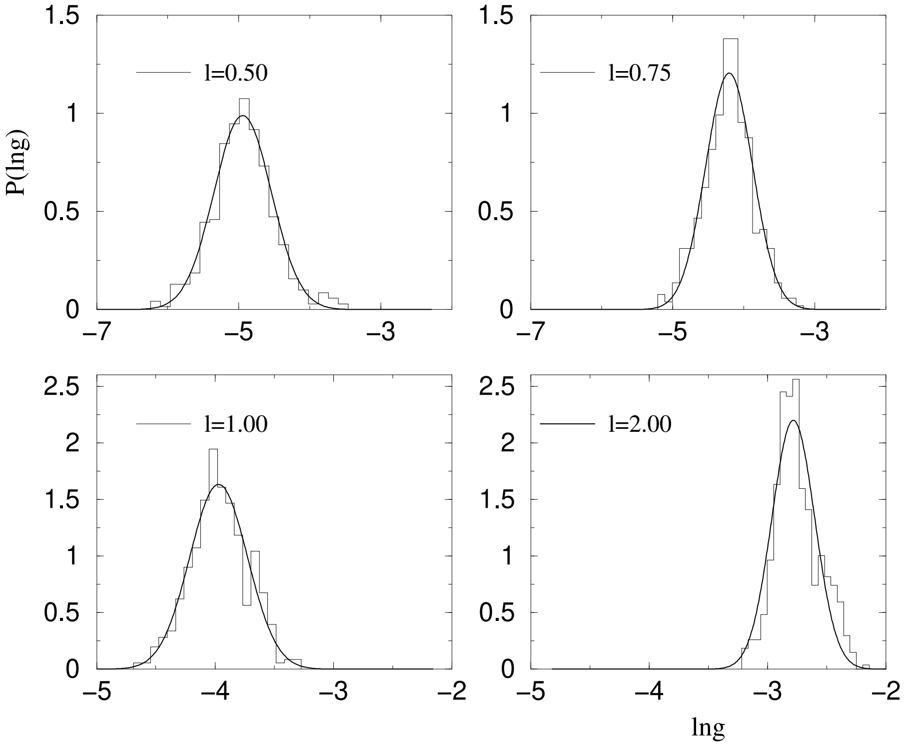

Abb. 6.8: Verteilungen des Logarithmus des Leitwertes für die Hauptquantenzahl $n_0 = 100$ und große Lokalisierungsparameter $\ell = 0.50 - 2.0$. Beachtet man die sich ändernden Maßstäbe, erkennt man eine Verschiebung der Mittelwerte nach rechts und eine Abnahme der Breite der Verteilungen mit zunehmendem ℓ, also mit Abnahme der Lokalisierung. Bei $\ell = 2.0$ weicht die Leitwertstatistik von der Log-Normalverteilung ab, worin sich der allmähliche Übergang in den delokalisierten Bereich zeigt.

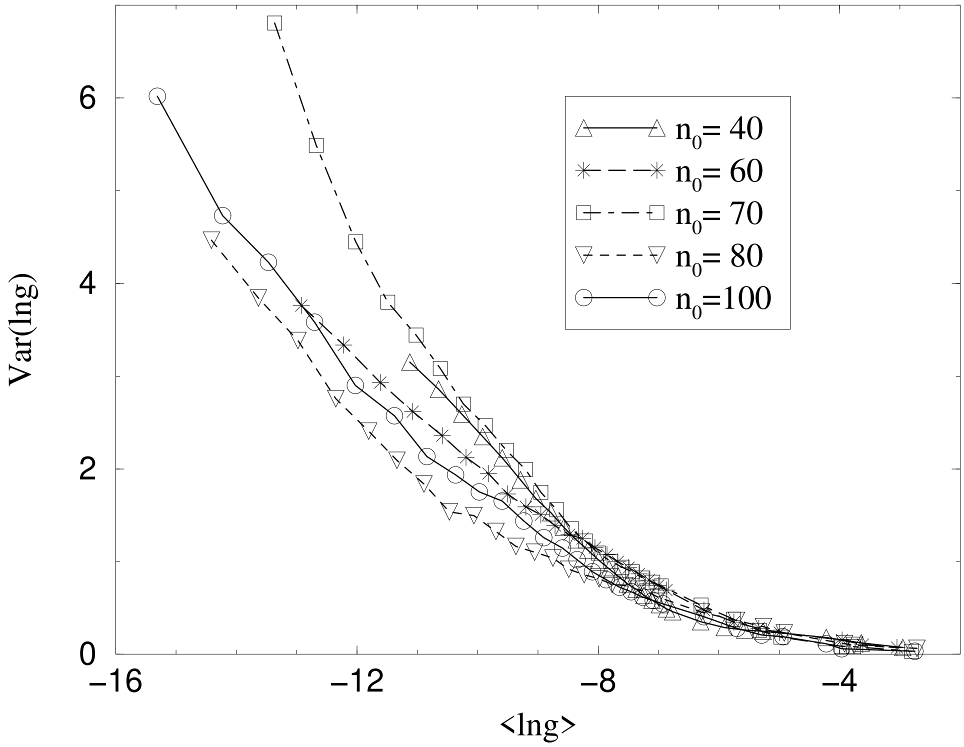

Abb. 6.9: Aufgetragen sind die Varianzen der „Zufallsvariable" $\ln g$ als Funktion des Mittelwertes des Logarithmus des atomaren Leitwertes für die anfänglichen Rydbergzustände $n_0 = 40, 60, 70, 80$ und 100. Der Lokalisierungsparameter ℓ nimmt je Kurve von links nach rechts wachsend die Werte 0.10 bis 2.0 an, wobei ω_0 stets zwischen 2.0 und 2.5 variiert wurde.

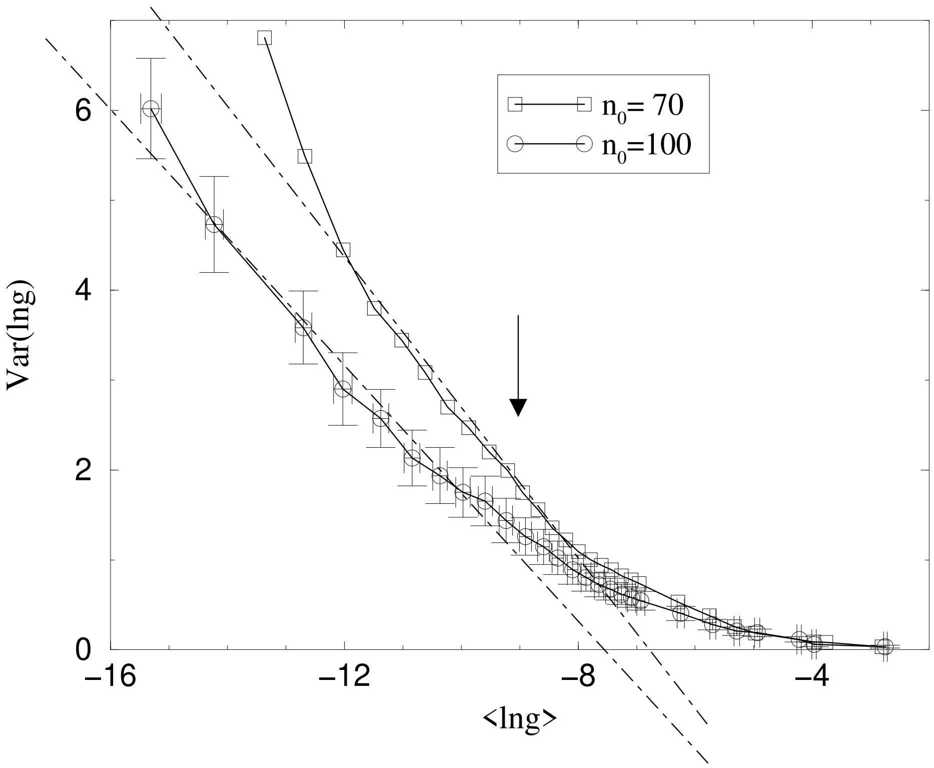

Abb. 6.10: Gezeigt sind nochmals die Varianzen Var($\ln g$) als Funktion von $<\ln g>$ für $n_0 = 70$ und $n_0 = 100$ aus der vorhergehenden Abbildung 6.9. Die strichpunktierten Geraden fitten einen näherungsweise linearen Zusammenhang beider Größen im Bereich links des eingezeichneten Pfeils ($\ell \leq 0.20$). Für $n_0 = 100$ sind die numerischen Fehler in beiden Achsenrichtungen durch die entsprechenden Balken angedeutet.

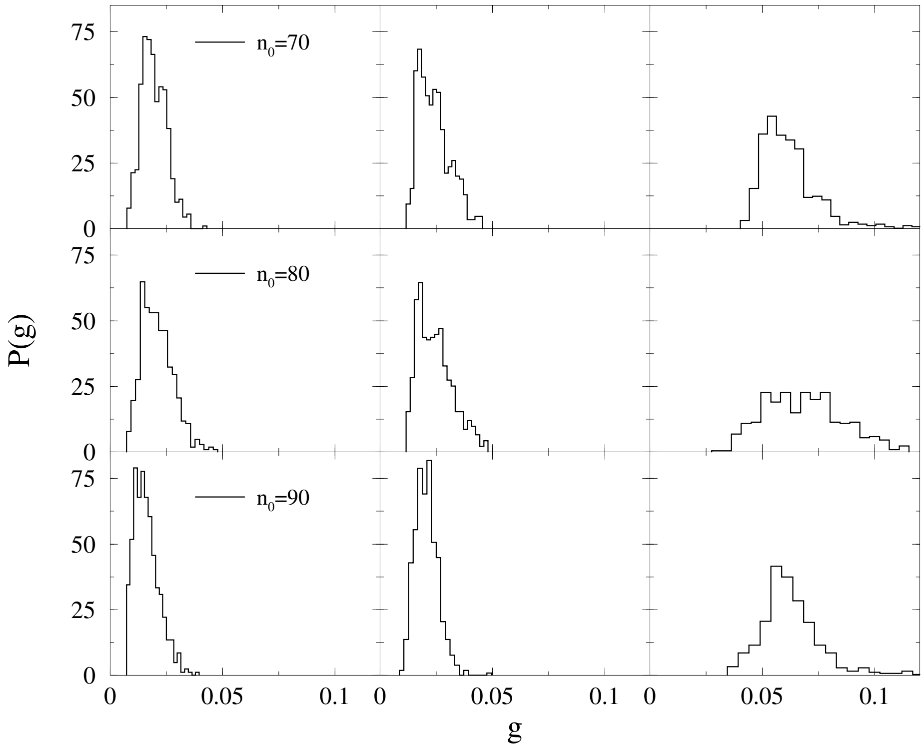

Abb. 6.11: Verteilungen des atomaren Leitwertes g für die Hauptquantenzahlen des Anfangszustandes $n_0 = 70$ (obere Zeile), $n_0 = 80$ (mittlere Zeile) und $n_0 = 90$ (untere Zeile). Die Histogramme wurden für jeweils 500 Proben mit $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$ gewonnen. Der Lokalisierungsparameter ist $\ell = 0.75$ in der linken, $\ell = 1.0$ in der mittleren und $\ell = 2.0$ in der rechten Spalte. Die Verteilungen wandern mit wachsendem ℓ zu höheren Leitwerten und werden im Gegensatz zu den Verteilungen von $\ln g$ breiter.

sie nach den Vorhersagen für den lokalisierten Bereich im Festkörper erwarten würde [126, 139, 140]. Die Verteilungen des Logarithmus des Leitwertes und die zugehörigen Standardabweichungen verhalten sich leicht unterschiedlich für verschiedene n_0. Dennoch liegen die Varianzkurven für die Anfangswerte $n_0 \geq 60$ im Rahmen der Fehlergrenzen aufeinander. Bei $n_0 = 70$ sind die Abweichungen größer. Analoges gilt für die benachbarten Werte $n_0 = 69$ und $n_0 = 71$, deren Varianzkurven denen von $n_0 = 70$ sehr nahe sind. Die Ursache für diese Abweichung für $n_0 \simeq 70$ konnte bisher nicht geklärt werden.

Weiter entnimmt man den Abbildungen 6.9 und 6.10, dass der Wert der Varianzen $\mathrm{Var}(\ln g)$ monoton gegen Null strebt, wenn ℓ erhöht wird. Ab einem Lokalisierungsparameter $\ell \geq 0.30$ werden die Verteilungen deutlich schmaler und die Varianzen fangen an zu sättigen. Oberhalb von $\ell \simeq 0.75$ sind sie bereits unter 0.1 abgefallen (vgl. Abbildung 6.9). $\ell \simeq 0.75$ entspricht einem gemittelten logarithmischen Leitwert von $<\ln g> \simeq -4.2$.

Bisher lag unser Fokus auf den Verteilungen des Logarithmus des atomaren

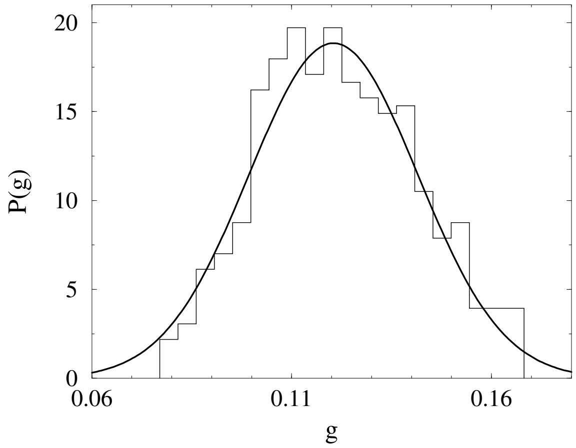

Abb. 6.12: Verteilung des atomaren Leitwertes g für $n_0 = 70$ und einem Lokalisierungsparameter $\ell = 3.0$ ($\omega_0 \in [2.0; 2.5]$, Histogramm). Der Fit durch eine Normalverteilung (fette Kurve) deutet eine Tendenz zu diffusivem Transport im Bereich großer Werte von ℓ an.

Leitwertes g. Im stark lokalisierten Fall ist dies, wie oben erwähnt, wegen der divergierenden höheren Momente der Zufallsvariablen g selbst sinnvoll. Wählt man jedoch größere Lokalisierungsparameter $\ell \geq 0.75$, erwartet man aus der Sicht der Festkörperphysik, dass sich der allmähliche Übergang in das delokalisierte Regime auch in den Verteilungen niederschlägt (vgl. auch Figur 6.2). Abbildung 6.11 zeigt für $n_0 = 70, 80$ und 90 die Histogramme der Verteilungen des Leitwertes g. Man erkennt, dass die Verteilungen von g, wie schon jene von $\ln g$ in Abbildung 6.8, mit wachsendem Lokalisierungsparameter ($\ell = 0.75 - 2.0$ in Figur 6.11) ihren Charakter ändern. Sie verschieben sich nach rechts, werden aber im Gegensatz zu den Verteilungen von $\ln g$ breiter. Die Anhäufung in der Nähe sehr kleiner Werte von g verschwindet zusehends. Da die numerischen Rechnungen für höhere Anregungszustände n_0 bei $\ell > 2.0$ zunehmend aufwendiger werden, berücksichtigt Abbildung 6.12 nur erste Ergebnisse für $n_0 = 70$. Sie zeigt die Verteilung des atomaren Leitwertes für $\ell = 3.0$. Das Histogramm wurde wieder durch 500 Proben mit $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$ gewonnen. Ferner ist ein Gaußscher Fit an die Verteilung gelegt. Dieser suggeriert nun auch im delokalisierten Bereich, dass der atomare Leitwert dem Verhalten mesoskopischer Systeme folgt, für welche in den meisten theoretischen Publikationen approximativ eine Normalverteilung des Leitwertes vorhergesagt wird [126, 139, 145].

6.2.3 Weitere Diskussion der Ergebnisse

Ähnliches wie für das Frequenzintervall $\omega_0 = 2.0 - 2.5$ gilt für die Ergebnisse, die für größere skalierte Frequenzen aus der Idee gewonnen wurden, Strukturen im Phasenraum mit einer Ausdehnung $\Delta y \geq \hbar_{\text{eff}} \sim 1/n_0$ oberhalb der Hauptresonanz auszuschließen. Figur 6.13 zeigt die Varianzen $\text{Var}(\ln g)$ eben-

falls als Funktion von $<\ln g>$ für die Angfangszustände $n_0 = 40, 60, 80$ und $n_0 = 100$, wobei für jeden Zustand n_0 ein anderes, aber gleich großes Intervall in ω_0 gewählt wurde. Die Intervalle sind in der Abbildung angegeben. Der Lokalisierungsparameter ℓ variiert zwischen 0.10 und 2.0. Man findet qualitativ dasselbe Verhalten wie bei den Resultaten zu festem Probenbereich $\omega_0 = 2.0 - 2.5$, die im vorhergehenden Abschnitt vorgestellt wurden.
Für wachsende skalierte Frequenzen ω_0 steigt aber nach der Gleichung (4.8) auch die skalierte Feldstärke. Damit werden die Rechnungen zur Gewinnung der Ionisationsbreiten Γ_ϵ numerisch aufwendiger. Trotz der Verwendung des gleichen Bereichs des Lokalisierungsparameters ($\ell = 0.10 - 2.0$) sind, wie man an den Varianzkurven in Abbildung 6.13 sieht, die Fluktuationen geringer und die Leitwerte im Mittel höher als in den Graphen für $\omega_0 = 2.0 - 2.5$ (s. Figur 6.9). Abbildung 6.14 verdeutlicht die Tatsache, dass der natürliche Logarithmus des Leitwertes in den höheren Frequenzbereichen weit schlechter als bei niedrigeren Frequenzen (vgl. Abbildung 6.6) einer Normalverteilung gehorcht. Darin manifestiert sich die im Falle $\omega_0 \geq 3.5$ noch gröbere Körnung des Quantentransports – aufgrund der im Vergleich zu den Verteilungen mit $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$ kleineren Werte von N_c und ξ (s. (4.6) und (4.8)).

Der atomare Leitwert und seine statistischen Eigenschaften hängen also über die Breiten Γ_ϵ und die Gewichte w_ϵ von dem Parametertripel (n_0, ω_0, F_0) ab. Die Parameterabhängigkeit des mittleren Niveauabstandes Δ, für dessen Abschätzung wir in 6.1 zwei Methoden vorstellten, spielt dabei keine wesentliche Rolle. Betrachtet man nämlich die Varianzen $\mathrm{Var}(\ln g)$ für beide Abschätzungen (6.2) und (6.4), bestätigt sich die oben vorweggenommene Aussage, dass der unterschiedlich gewonnene Niveauabstand lediglich eine Verschiebung im Absolutwert $<\ln g>$ zur Folge hat. Die Steigungen und der sonstige Verlauf der Kurven bleiben unverändert, wie sich aus Abbildung 6.15 gut erkennen lässt.

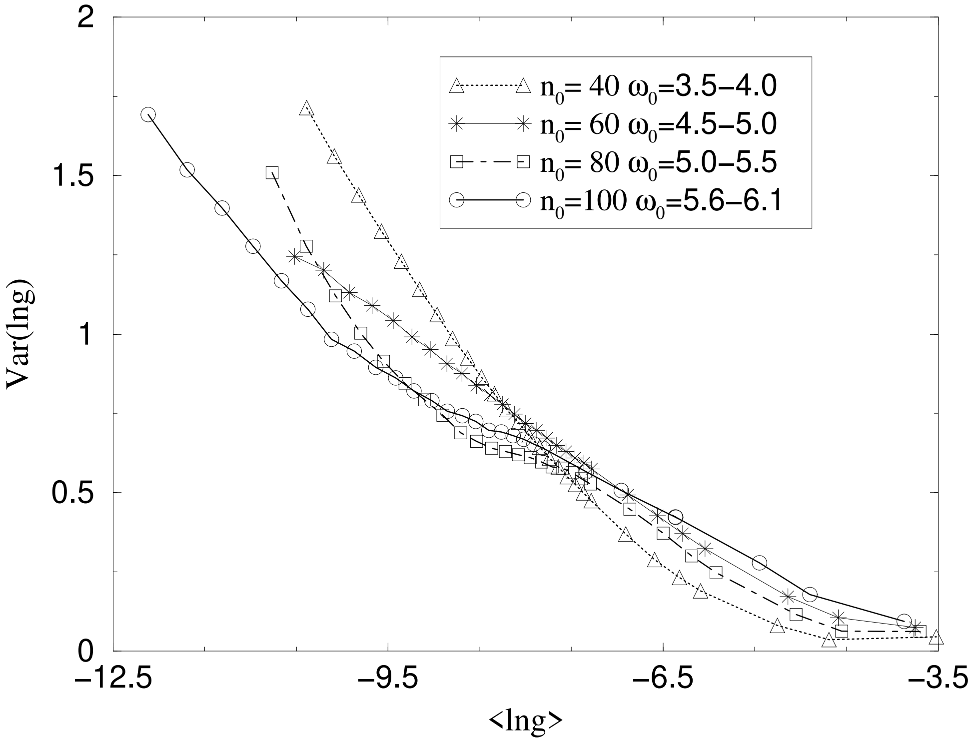

Abb. 6.13: Varianzen des Logarithmus des atomaren Leitwertes als Funktion des Mittelwertes $<\ln g>$ für die Anfangszustände $n_0 = 40, 60, 80$ und 100. Die Frequenzintervalle wurden mit wachsendem n_0 höher gewählt, um zu gewährleisten, dass im jeweiligen klassischen Phasenraum keine regulären Gebiete oberhalb der Hauptresonanz vorliegen, deren Ausdehnung im Vergleich zu $\hbar_{\mathrm{eff}} \sim 1/n_0$ groß ist. Die Variationsbereiche sind in der Legende angegeben. Man beachte den größeren Maßstab im Vergleich zu Abbildung 6.9.

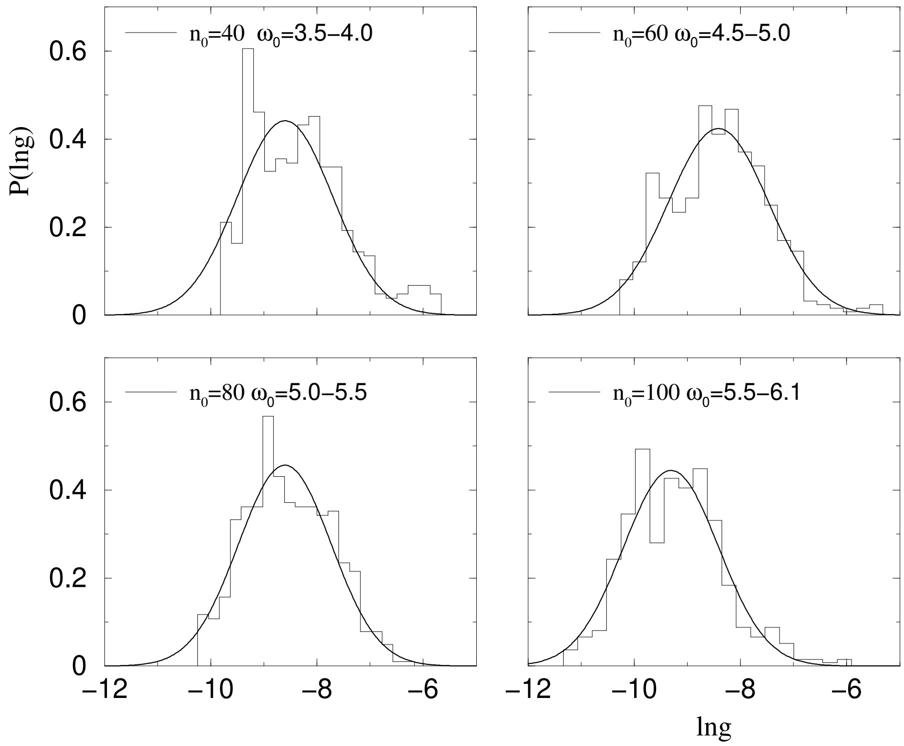

Abb. 6.14: Verteilungen des logarithmischen Leitwertes für den Lokalisierungsparameter $\ell = 0.20$ und die Hauptquantenzahlen des atomaren Anfangszustands $n_0 = 40, 60, 80$ und 100. Wie in Abbildung 6.13 wurden die Frequenzintervalle mit wachsendem n_0 höher gewählt. Die Qualität der Approximation durch die Gaußschen Fits ist bedeutend schlechter als für die Verteilungen mit $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$ in Abbildung 6.6. Da die „Probenlänge" nach Gleichung (4.6) indirekt proportional ω_0 ist, zeigt sich somit deutlich der Einfluss der quantenmechanischen Grobkörnung.

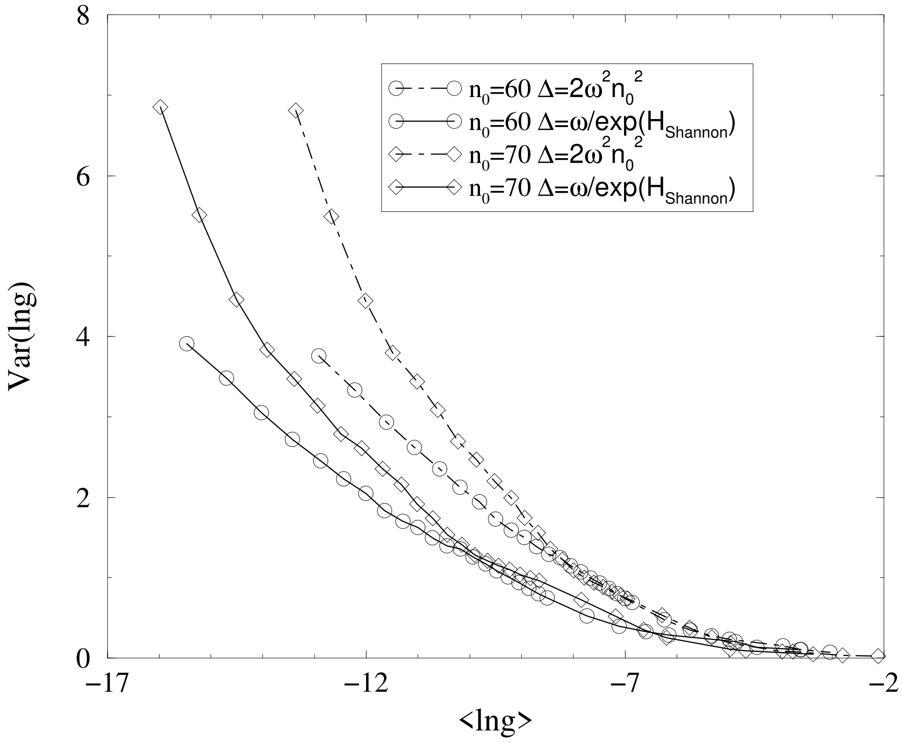

Abb. 6.15: Vergleich der Varianzen Var($\ln g$) als Funktion von $<\ln g>$ für die Niveauabstände Δ (s. Abschnitt 6.1), die einerseits aus der Abschätzung (6.2) (strichpunktierte Kurven) und andererseits mit Hilfe der Shannon-Entropie (6.4) (durchgezogene Kurven) gewonnen wurden. Da im ersteren Falle die Werte für Δ systematisch kleiner sind, ergibt sich lediglich eine Verschiebung der Kurven, die sich vor allem bei kleinen Lokalisierungsparametern bzw. kleinen Werten von $<\ln g>$ bemerkbar macht. $n_0 = 60$, $n_0 = 70$; $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$.

Kapitel 7

Resümee und Ausblick

Diese Arbeit führte eine Vielzahl von Konzepten und Methoden zusammen. Ausgangspunkt war die **exakte** numerische Beschreibung des Ionisationsproblems von Wasserstoff in einem externen, zeitlich periodischen Feld mit Hilfe der kombinierten Anwendung von Floquet-Theorie und komplexer Skalierung. Der atomare Leitwert wurde im Sinne einer Landauer-Formel streutheoretisch motiviert. Nach der Darstellung der Theorie der *dynamischen Lokalisierung* für das atomare Problem und ihres Pendants, der Lokalisierungstheorie für ungeordnete Festkörperproben, untersuchten wir, ob sich die Vorhersagen aus der Theorie mesoskopischer Systeme **quantitativ** auf den *atomaren Leitwert* übertragen lassen. Diese Frage kann nur zum Teil bejaht werden: Der atomare Leitwert zeigt statistische Eigenschaften, die stark an das Verhalten von mesoskopischen Proben erinnern. Im lokalisierten Regime ist sein Logarithmus normalverteilt, und die Varianzen $\mathrm{Var}(\ln g)$ verhalten sich näherungsweise linear zum Mittelwert $<\ln g>$. Außerdem gilt für hohe atomare Anregungen n_0, dass $<\ln g>$ dem inversen Lokalisierungsparameter $1/\ell$ nahezu perfekt proportional ist. Dennoch induziert im Bereich (der typischerweise im Laborexperiment verwendeten [86]) mittleren Hauptquantenzahlen des atomaren Anfangszustandes $|n_0\rangle$ das quantenmechanische „coarse graining“ charakteristische Korrekturen zu den Vorhersagen der Festkörperphysik. Nur im Limes großer Probenlängen $N_c \sim n_0$ (s. Gl. (4.6)) stimmen unsere Resultate qualitativ und quantitativ mit den Aussagen der Skalierungstheorie für Anderson-lokalisierte Festkörper überein.

Eine interessante Perspektive böte die systematische Analyse des statistischen Verhaltens des atomaren Leitwertes für Anfangszustände, die über $n_0 = 100$ hinausgehen. Des Weiteren ließe sich das atomare Transportverhalten im stark delokalisierten Bereich genauer unter die Lupe nehmen. Da dafür jedoch Lokalisierungsparameter $\ell \geq 3$ ins Spiel kommen, werden diese Untersuchungen in Bezug auf die benötigte Rechenzeit und die Konvergenz der numerischen Diagonalisierung erheblich aufwendiger, als dies bei der Gewinnung der hier vorgestellten Resultate der Fall war.

Neben der Untersuchung des Leitwertes bieten neueste Vorhersagen über die Verteilung der ungewichteten, dimensionslosen Breiten Γ/Δ in verschiedenen Tight-Binding-Modellen mit Unordnung [146] einen interessanten Anknüpfungspunkt für das weitere Studium der Ionisationsdynamik des realen und experimentell zugänglichen atomaren Systems. Der in [146] beobachtete algebraische Zerfall der Verteilung der Breiten im Regime $\exp(-2/\ell) < \Gamma/\Delta < 1/L$ – wobei L die Probenlänge bzw. die Anzahl der Gitterplätze im diskreten Tight-Binding-Modell bezeichnet – ist in der Tat ebenso für das Wasserstoffatom im Feld sichtbar. Abbildung 7.1 stellt die Verteilung der mit dem mittleren Niveauabstand Δ skalierten, dimensionslosen Ionisationsbreiten Γ_ϵ/Δ für $n_0 = 100$ dar. Das betrachtete Ensemble besteht aus den Breiten der jeweiligen Floquet-Basis für 500 Werte der skalierten Frequenz $\omega_0 \in [2.0; 2.5]$, wobei nur jene Ionisationsraten berücksichtig wurden, deren Überlapp w_ϵ mit dem Anfangszustand wenigstens 10^{-4} betrug (vgl. die Diskussion in 6.2.1). Man erkennt für die Lokalisierungsparameter $\ell = 0.25, 0.50, 0.75$ und 1.0 jeweils zwei Bereiche mit einem unterschiedlichen algebraischen Abfall der Wahrscheinlichkeitsverteilungen:

$$P\left(\frac{\Gamma_\epsilon}{\Delta}\right) \sim \left(\frac{\Gamma_\epsilon}{\Delta}\right)^{-\nu}. \tag{7.1}$$

Die Absolutwerte der Steigungen ν betragen in der doppelt logarithmischen Auftragung in Abbildung 7.1 im ersten Bereich etwa $\nu \simeq 1$ und im zweiten Bereich weiter rechts $\nu \simeq 3 - 5$. Mit wachsendem Lokalisierungsparameter ℓ verschieben sich die skalierten Ionisationsraten Γ_ϵ/Δ immer mehr zu größeren Werten. Für $\ell = 1.0$ ist die Verteilung über vier Dekaden hinweg durch eine Steigung $\nu \simeq 1$ charakterisiert. Anschließend fällt sie mit $\nu \simeq 3$ innerhalb von etwa eineinhalb Dekaden allmählich auf null ab.

Nachdem in dieser Arbeit ausschließlich das eindimensionale Wasserstoffsystem betrachtet wurde, sind das dreidimensionale Wasserstoffatom oder Alkaliatome bezüglich ihres „Leitverhaltens“ zu testen. Labor- wie auch numerische Experimente liefern für Alkali-Rydbergatome z. B. im Bereich $\omega_0 \geq 1$ ähnliche skalierte Ionisationsschwellen, wie sie in Abbildung 4.1 schematisch angedeutet sind [147], im Bereich $\omega_0 < 1$ dagegen zeigen sich drastische Unterschiede. Ob hier zusätzliche, etwa durch den atomaren Mehrelektronenrumpf induzierte Effekte [148] bei der Betrachtung ihrer Leitwertstatistiken eine Rolle spielen, wäre schließlich eine interessante Frage, insbesondere da die in Analogie zum Festkörper vorhergesagten [13] und in Abschnitt 4.2 gezeigten starken Fluktuationen der Ionisationswahrscheinlichkeiten in Laborexperimenten mit Rubidiumatomen [149] nicht direkt beobachtet werden konnten.

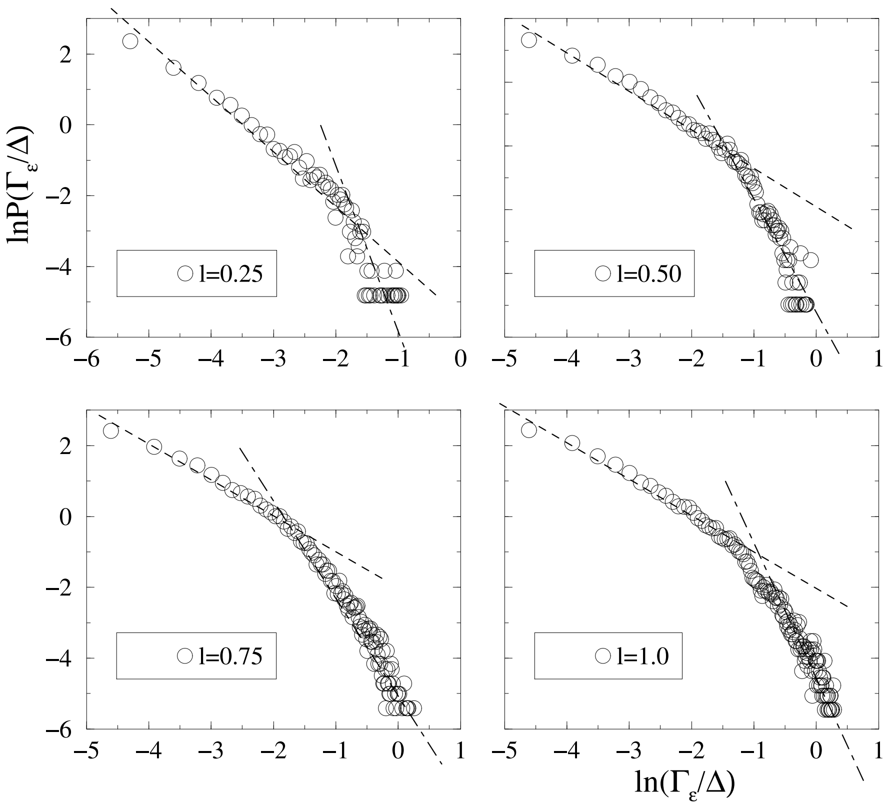

Abb. 7.1: Aus dem vollständigen Floquet-Spektrum gewonnene Verteilungen der ungewichtigen, dimensionslosen Ionisationsraten Γ_ϵ/Δ in einer doppelt logarithmischen Auftragung. Die Atom-Feld-Wechselwirkung ist durch die Hauptquantenzahl $n_0 = 100$ und Lokalisierungsparameter $\ell = 0.25$ (links oben) bis $\ell = 1.0$ (rechts unten) charakterisiert. Der unterschiedliche geradlinige Verlauf im Bereich kleiner und großer Breiten ist durch die gestrichelte bzw. die strichpunktierte Linie hervorgehoben. Die Absolutwerte der Steigungen betragen im ersten Bereich (jeweils links) etwa $\nu \simeq 1$, im zweiten Bereich (jeweils rechts) dagegen $\nu \simeq 3 - 5$. Mit abnehmender Lokalisierung, d. h. mit wachsendem ℓ, verschieben sich die skalierten Breiten zu größeren Werten. Ein ähnlicher algebraischer Zerfall wird für verschiedene Tight-Binding-Modelle des Festkörpertransports vorhergesagt [146].

Anhang A

Gebräuchliche Eichungen für das Atom-Feld-Problem

Da die zumeist verwendeten Eichungen für atomare Systeme, die einem externen elektromagnetischen Feld ausgesetzt sind, in der Literatur bereits ausführlich dokumentiert sind (z. B. in [19, 79, 81]), werden wir hier nur kurz auf die zentralen Punkte eingehen.

Ausgehend vom Hamiltonoperator (2.1) und der bekannten Eichfreiheit für die elektrodynamischen Potentiale $\phi(\vec{r},t)$ und $\vec{A}(\vec{r},t)$ [150] kann man die Wellenfunktion und den Hamiltonoperator mittels einer geeigneten unitären Transformation umeichen. Dabei bleiben die Schrödingergleichung und die quantenmechanische Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. der Wahrscheinlichkeitsstrom invariant [19].

Für die Dipolwechselwirkung ist häufig eine Eichung vorzuziehen, in der das Vektorpotential gleich null gesetzt wird. Das skalare Potential lautet dann $\phi(\vec{r},t) = -\vec{F}(t) \cdot \vec{r}$. Falls man nur noch eindimensionale Probleme betrachtet, was wir von nun an tun wollen, führt diese *Längeneichung* auf den Hamiltonoperator (2.2).

Eine Transformation der Wellenfunktion $\psi(z,t)$ der Form [19, 79]

$$\psi_G(z,t) = U_1 \psi(z,t) := \exp(izA(t))\psi(z,t), \tag{A.1}$$

mit einer Eichfunktion $\chi(t) = zA(t)$ für die elektrodynamischen Potentiale, liefert uns folgenden Hamiltonoperator in der *Geschwindigkeitseichung*:

$$\mathrm{H}_{\mathrm{sys}} = \frac{1}{2}\left(p - A(z,t)\right)^2 - \frac{1}{z} \quad \text{für} \quad z > 0. \tag{A.2}$$

Eine weitere Transformation der Wellenfunktion [19, 79]

$$\psi_{KH}(z,t) = U_2\psi_G(z,t) := \exp\left(i\int_0^t dt'\left[-A(t')p + A^2(t')/2\right]\right)\psi_G(z,t)$$
$$\text{mit} \quad T = \frac{2\pi}{\omega} \quad \text{(A.3)}$$

entfernt einerseits den quadratischen Term in $A(t)$ und entspricht außerdem einer Galileitransformation für die klassische Elektronenbahn von z auf $z+\alpha(t)$ mit

$$\alpha(t) := -\int_0^t dt' A(t'). \quad \text{(A.4)}$$

Im somit erhaltenen *Kramers-Henneberger-Bild* [151] (oder in der *Beschleunigungseichung*) nimmt der Hamiltonoperator eine besonders einfache Gestalt an:

$$\mathrm{H}_{\mathrm{sys}} = \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{z+\alpha(t)} \quad z > 0. \quad \text{(A.5)}$$

Da wir in Abschnitt 2.1 von einer zeitlich konstanten Feldamplitude ausgingen, ist das Potential $V(z+\alpha(t)) = -1/(z+\alpha(t))$ periodisch mit der Periode des Feldes $T = 2\pi/\omega$. Daher lässt es sich in eine Fourierreihe entwickeln:

$$V(z+\alpha(t)) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} V_k \exp(-ik\omega t). \quad \text{(A.6)}$$

Zusammen mit der Entwicklung der Quasienergiefunktionen (3.9) erhalten wir schließlich folgendes Pendant zu Gleichung (3.10) [19]:

$$\left(\frac{1}{2}p^2 - k\omega - \epsilon\right)|\epsilon_k\rangle = -\sum_{k'=-\infty}^{\infty} V_{k-k'}\,|\epsilon_{k'}\rangle. \quad \text{(A.7)}$$

Die ionisierten Zustände lassen sich als Superposition auslaufender ebener Wellen mit positiven Energien darstellen. Die Floquet-Fourierkomponenten $|\epsilon_k\rangle$ haben dann in der Ortsdarstellung die in Gleichung (3.25) angegebene asymptotische Form. Wie in [81] ausführlich diskutiert wird, können die auslaufenden Randbedingungen (3.25) nur für komplexe Energien mit Imaginärteil $-\Gamma_\epsilon/2 < 0$ erfüllt werden. Der entscheidende Vorteil der Betrachtung des Ionisationszerfalls im Kramers-Henneberger-Bild liegt darin, dass in der asymptotischen Entwicklung (3.25) keine Kreuzterme (vgl. [152]) in f_m beitragen und die Entwicklung durch die Transformation in das oszillierende Bezugssytem unabhängig von $\alpha(t)$ ist [19, 81].

Anhang B

Diagonalisierung des rotierten Floquet-Hamiltonoperators

Um die Ionisationsraten Γ_ϵ und die Ionisationswahrscheinlichkeit $P_{\rm Ion}(t)$ zu gewinnen, muss der komplex-rotierte Floquet-Hamiltonoperator (3.15) in einer Floquet-Zone diagonalisiert werden. Das dilatierte, zeitunabhängige Eigenwertproblem (vgl. Gleichung (3.10)) lautet:

$$\begin{aligned}\left(\mathrm{H}_{\rm at}^{\theta} - k\omega - \epsilon\right) |\epsilon_\theta^k\rangle =& \frac{1}{2} F z e^{i\theta} \left(|\epsilon_\theta^{k+1}\rangle + |\epsilon_\theta^{k-1}\rangle \right) \quad (k \in \mathbb{Z}) \\ \text{mit} \quad \mathrm{H}_{\rm at}^{\theta} :=& \frac{1}{2} e^{-2i\theta} p^2 + V(z e^{i\theta}). \end{aligned} \tag{B.1}$$

Für die praktische Lösung dieses Systems gekoppelter Differentialgleichungen ist eine Basis des Ortsanteils des verallgemeinerten Hilbertraums (s. Abschnitt 3.1) nötig. Die Sturmschen Funktionen [153] bilden eine vollständige Basis der quadratintegrierbaren Funktionen $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ und spiegeln die internen Symmetrien des atomaren Hamiltonoperators $\mathrm{H}_{\rm at}^{\theta}$ ideal wider [154, 155]. Hintergrund derartiger Symmetriebetrachtungen ist die gruppentheoretische Äquivalenz unseres eindimensionalen Coulomb-Problems mit einem isotropen, zweidimensionalen harmonischen Oszillator [27, 154, 156].

Die Sturmschen Funktionen bieten zahlreiche Vorteile. Sie bilden einen **diskreten**, vollständigen (jedoch nicht orthogonalen) Basissatz des $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ einschließlich des kontinuierlichen Spektralanteils. Die zugehörigen Matrixelemente von $\mathrm{H}_{\rm at}^{\theta}$ und des Dipoloperators gehorchen starken Auswahlregeln, was die numerische Diagonalisierung von (B.1) erheblich vereinfacht bzw. – bei hohen Quantenzahlen – aus Speicherplatzgründen überhaupt erst realistisch werden lässt.
Die Sturmschen Funktionen des eindimensionalen Coulomb-Problems zur Quantenzahl $n \geq 1$ lauten:

$$S_n^\alpha(z) := \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\frac{2z}{\alpha}\right) e^{-z/\alpha} L_{n-1}^1 \left(\frac{2z}{\alpha}\right). \tag{B.2}$$

L_{n-l-1}^{2l+1} sind die zugeordneten Laguerre-Polynome [157], wobei im eindimensionalen Fall die Drehimpulsquantenzahl l fest und gleich Null ist. Für positive Skalierungsparameter α sind die Sturmschen Funktionen vollständig, aber nicht orthonormiert. Durch α kann die Basis so angepasst werden, dass ein Energieabschnitt um eine spezielle Wasserstoffeigenfunktion besonders effektiv repräsentiert wird. Für $\alpha = n$ erhält man die zu dem jeweiligen Wert n gehörigen „radialen“ gebundenen Lösungsfunktionen des ungestörten Wasserstoffproblems.

Die Sturmschen Funktionen sind nicht bezüglich des gewöhnlichen Skalarproduktes, sondern bezüglich eines Skalarproduktes mit einem Gewichtsfaktor $1/z$ orthogonal. Dies hat zur Folge, dass die gekoppelten Gleichungen (B.1) keinem gewöhnlichen, sondern einem verallgemeinerten Eigenwertproblem der Form

$$(\mathcal{A} - \lambda\mathcal{B}) \cdot \vec{x} = 0, \tag{B.3}$$

mit zwei komplex-symmetrischen Matrizen $\mathcal{A}$ und $\mathcal{B}$ und dem verallgemeinerten Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ zum Eigenvektor $\vec{x}$ entsprechen. Wegen der erwähnten restriktiven Auswahlregeln sind diese unendlichdimensionalen Matrizen nur schwach besetzt und haben Bandstruktur.

Die Wahl der Basislänge hängt entscheidend vom atomaren Anfangszustand n_0 ab. Je größer n_0, desto mehr Zustände müssen mitgenommen werden. Zur Berechnung der in Kapitel 6 benötigten Ionisationsraten wurde stets eine Basis von $n_{\mathrm{sup}} := 4n_0$ Zuständen verwendet. Wie Streufelder in Laborexperimenten [86, 87, 89] induziert die endliche Basislänge im numerischen Experiment eine endliche Auflösung der Zustandsdichte nahe der Kontinuumsgrenze. In vollkommener Analogie zum realen Experiment wird daher eine effektive, durch den „cut-off“-Wert n_c der Hauptquantenzahl definierte Kontinuumsschwelle eingeführt [21], die sich durch

$$n_c := \sqrt{n_{\mathrm{sup}}\alpha} = \sqrt{4n_0\alpha} \tag{B.4}$$

abschätzen lässt. In den Rechnungen der vorliegenden Arbeit wurde mit $n_{\mathrm{sup}} = 4n_0$ und $\alpha \simeq n_0$ immer $n_c \simeq 2n_0$ gewählt.

Für die Basislänge im Fourierraum, d. h. in der zweiten Quantenzahl k, kann man sich an dem notwendigen und auch einsichtigen Kriterium orientieren, dass man wenigstens so viele Photonen mitnehmen muss, wie zur Ionisation nötig sind. Nach den Gleichungen (3.11) und (4.6) sind dies etwa

$$k_{\max} \gtrsim 2N_c = 2\frac{n_0}{2\omega_0}\left(1 - \left(\frac{n_0}{n_c}\right)^2\right) \tag{B.5}$$

Fourierkomponenten (Faktor 2 wegen Absorptions- und Emissionsprozessen).

Mit Hilfe des so gewonnenen, diskreten und endlichdimensionalen Basissatzes lässt sich nun das Eigenwertproblem (B.1) mit Hilfe des Lanczos-Algorithmus [158, 159] numerisch bis auf Maschinengenauigkeit lösen [21].

Die numerische Stabilität des Verfahrens kann durch die Wahl der Basislänge ($n_{\rm sup}$ und $k_{\max}$), aber auch durch Variation des Sturmschen Parameters α und des komplexen Rotationswinkels θ getestet werden [21, 51]. Der Rotationswinkel soll, wie in Abschnitt 3.3 betont, einerseits groß genug sein, um alle Resonanzen aufzudecken, andererseits nicht zu groß gewählt werden, da sonst die Diagonalisierung numerisch instabil werden kann. Je nach atomarem Anfangszustand n_0 wurden in unseren Berechnungen Winkel zwischen etwa 0.01 rad und 0.1 rad verwendet. Bei optimaler Wahl der Parameterfamilie $(n_{\rm sup}, k_{\max}, \alpha, \theta)$ kann eine Konvergenz der Ionisationsraten Γ_ϵ bis auf Maschinengenauigkeit $\simeq 10^{-15}$ erreicht werden. Durch die endliche Basislänge ist dagegen die Wahrscheinlichkeitsnorm, die Summe aller Gewichte der Zustände w_ϵ, nur bis auf die vierte Stelle ($\simeq 10^{-4}$) genau. Dies ist aber die einzige grundlegende Beschränkung des verwendeten Verfahrens. Sie macht sich z. B. bei der Berechnung der zeitabhängigen Ionisationswahrscheinlichkeiten bemerkbar, die wegen der endlichen Genauigkeit der Norm nur bis $P_{\rm Ion}(t) > 10^{-5}$ zuverlässig angegeben werden können.

Literaturverzeichnis

[1] P. W. Anderson, *Absence of Diffusion in Certain Random Lattices*, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).

[2] P. W. Anderson, *Local moments and localized states*, Rev. Mod. Phys. **50**, 191 (1978).

[3] D. E. Logan and P. G. Wolynes, *Quantum localization and energy flow in many-dimensional Fermi resonant systems*, J. Chem. Phys. **93**, 4994 (1990).

[4] D. M. Leitner and P. G. Wolynes, *Intramolecular energy flow in the condensed phase: effects of dephasing on localization in the quantum stochastical pump model*, Chem. Phys. Lett. **276**, 289 (1997).

[5] B. Mollay and H. F. Kauffmann, *Optical excitation dynamics in polymers – spectrum of eigenvalues and analysis: a numerical study*, Chem. Phys. **177**, 645 (1993).

[6] B. Mollay and H. F. Kauffmann, in *Disordered Effects on Relaxational Processes*, edited by R. Richert and A. Blumen (Springer-Verlag, Berlin, 1994), p. 509.

[7] S. John, *Localization of Light*, Physics Today **44**, 32 (1991).

[8] Q. A. Starykh, P. R. Jacquod, E. E. Narimanov, and A. D. Stone, *Signature of dynamical localization in the resonance width distribution of wave-chaotic dielectric cavities*, Phys. Rev. E **62**, 2078 (2000).

[9] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, *Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).

[10] B. Kramers and A. MacKinnon, *Localization: theory and experiment*, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).

[11] A. B. Fowler, A. Hartstein, and R. A. Webb, *Conductance in Restricted-Dimensionality Accumulation Layers*, Phys. Rev. Lett. **48**, 196 (1982).

[12] S. Washburn and R. A. Webb, *Aharonov-Bohm effect in normal metal Quantum coherence and transport*, Adv. Phys. **35**, 375 (1986).

[13] G. Casati, I. Guarneri, and D. L. Shepelyansky, *Classical chaos, quantum localization and fluctuations: A unified view*, Physica A **163**, 205 (1990).

[14] G. Casati, in *Chaos and quantum physics*, Vol. Session **LII** of *Les Houches Lectures, 1989*, edited by M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1991), p. 761.

[15] A. Buchleitner, I. Guarneri, and J. Zakrzewski, *Conductance fluctuations in microwave-driven Rydberg atoms*, Europhys. Lett. **44**, 162 (1998).

[16] G. Casati, V. Chirikov, D. L. Shepelyansky, and I. Guarneri, *Relevance of classical chaos in quantum mechanics: The hydrogen atom in a monochromatic field*, Phys. Rep. **154**, 77 (1987).

[17] G. Casati, I. Guarneri, and D. L. Shepelyansky, *Hydrogen Atom in Monochromatic Field: Chaos and Dynamical Photonic Localization*, IEEE J. Quantum Electron. **24**, 1420 (1988).

[18] R. Landauer, *Electrical Resistance of Disordered One-dimensional Lattices*, Philos. Mag. **21**, 863 (1970).

[19] M. Gavrila, in *Collision Theory for Atoms and Molecules*, Vol. 196 of *NATO ASI Series B*, edited by F. A. Gianturco (Plenum Press, New York, 1989), p. 139.

[20] J. J. Sakurai, in *Modern Quantum Mechanics*, edited by S. F. Tuan (Addison Wesley, Reading, 1994).

[21] A. Buchleitner, D. Delande, and J.-C. Gay, *Microwave ionization of three-dimensional hydrogen atoms in a realistic numerical experiment*, J. Opt. Soc. Am. B **12**, 505 (1995).

[22] A. Buchleitner and D. Delande, *Secular motion of three-dimensional Rydberg states in a microwave field*, Phys. Rev. A **55**, R1585 (1997).

[23] D. L. Shepelyansky, in *Chaotic Behavior in Quantum Systems*, Vol. 120 of *NATO ASI Series B*, edited by G. Casati (Plenum Press, New York, 1985), p. 187.

[24] J. E. Bayfield and L. A. Pinnaduwage, *Diffusivelike Aspects of Multiphoton Absorption in Electrically Polarized Highly Excited Hydrogen Atoms*, Phys. Rev. Lett. **54**, 313 (1985).

[25] J. N. Bardsley, B. Sundram, L. A. Pinnaduwage, and J. E. Bayfiled, *Quantum Dynamics for Driven Weakly Bound Electrons near the Threshold for Classical Chaos*, Phys. Rev. Lett. **56**, 1007 (1986).

[26] H. P. Breuer, K. Dietz, and M. Holthaus, *Highly excited hydrogen atoms in strong microwave fields*, Z. Phys. D **18**, 239 (1991).

[27] D. Delande, in *Chaos and quantum physics*, Vol. Session **LII** of *Les Houches Lectures, 1989*, edited by M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1991), p. 665.

[28] W. H. Press, S. A. Teulosky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in FORTRAN: the art of scientific computing*, 2 ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1994).

[29] Bayfield, *Quantum Evolution: An Introduction to Time-Dependent Quantum Mechanics*, 1 ed. (John Wiley & Sons, New York, 1999).

[30] R. V. Jensen, *Stochastic ionization of surface-state electrons: Classical theory*, Phys. Rev. A **30**, 386 (1984).

[31] J. B. Marion, *Classical Dynamics of Particles and Systems*, 2 ed. (Academic Press, Orlando, 1970).

[32] T. Geisel, G. Radons, and J. Rubner, *Kolmogorov-Arnold-Moser barriers in the quantum dynamics of chaotic systems*, Phys. Rev. Lett. **57**, 2883 (1986).

[33] E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1993).

[34] G. D. Birkhoff, *On the Periodic Motions of Dynamical Systems*, Acta Mathematica **50**, 359 (1927).

[35] R. S. MacKay and J. D. Meiss, *Hamiltonian Dynamical Systems: A Reprint Selection* (Adam Hilger, Bristol, 1987).

[36] V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Vol. 60 of *Graduate Texts in Mathematics*, 2 ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1989).

[37] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Vol. 1 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*, 1 ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1990).

[38] R. B. Shirts and W. P. Reinhardt, *Approximate constants of motion for classically chaotic vibrational dynamics: Vague tori, semiclassical quantization, and classical intramolecular energy flow*, J. Chem. Phys. **77**, 5204 (1982).

[39] R. S. MacKay, J. D. Meiss, and I. C. Percival, *Stochasticity and Transport in Hamiltonian Systems*, Phys. Rev. Lett. **52**, 697 (1984).

[40] I. C. Percival, in *Chaos and quantum physics*, Vol. Session **LII** of *Les Houches Lectures, 1989*, edited by M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1991), p. 11.

[41] Y.-C. Lai, C. Grebogi, R. Bümel, and M. Ding, *Algebraic decay and phase-space metamorphoses in microwave ionization of hydrogen Rydberg atoms*, Phys. Rev. A **45**, 8284 (1992).

[42] R. Blümel and U. Smilansky, *Ionization of Excited Hydrogen Atoms by Microwave Fields: A Test Case for Quantum Chaos*, Physica Scripta **40**, 386 (1989).

[43] J. Zakrzewski, A. Buchleitner, and D. Delande, *Nondispersive wave packets as solitonic solutions of level dynamics*, Z. Phys. B **103**, 115 (1997).

[44] J. Leopold and I. C. Percival, *Microwave Ionization and Excitation of Rydberg Atoms*, Phys. Rev. Lett. **41**, 944 (1978).

[45] D. Delande and A. Buchleitner, *Classical and quantum chaos in atomic systems*, Adv. At. Mol. Phys. **34**, 85 (1994).

[46] E. J. Heller, *Bound-State Eigenfunctions of Classically Chaotic Hamiltonian Systems: Scars of Periodic Orbits*, Phys. Rev. Lett. **53**, 1515 (1984).

[47] W. Schweizer, M. Schaich, W. Jans, and H. Ruder, *Classical chaos and quantal Wigner distributions for the diamagnetic H atom*, Phys. Lett. A **189**, 64 (1994).

[48] O. Bohigas, S. Tomsovic, and D. Ullmo, *Manifestation of classical phase space structure in quantum mechanics*, Phys. Rep. **223**, 43 (1993).

[49] G. P. Bergman and G. M. Zaslavsky, *Theory of quantum nonlinear resonance*, Phys. Lett. A **61**, 295 (1977).

[50] H. P. Breuer and M. Holthaus, *A semiclassical theory of quasienergies and Floquet wave functions*, Ann. Phys. (New York) **211**, 249 (1991).

[51] A. Buchleitner, *Atomes de Rydberg en champ micro-onde: régularité et chaos*, Thèse de Doctorate, Université Pierre et Marie Curie, Paris (1993).

[52] I. Bialynicki-Birula, M. Kaliński, and J. H. Eberly, *Lagrange Equilibrium Points in Celestial Mechanics and Nonspreading Wave Packets for Strongly Driven Rydberg Electrons*, Phys. Rev. Lett. **73**, 1777 (1994).

[53] A. Buchleitner and D. Delande, *Nondispersive electronic wave packets in multiphoton processes*, Phys. Rev. Lett. **75**, 1487 (1995).

[54] A. F. Brunello, T. Uzer, and D. Farrelly, *Nonstationary, Nondispersive Wave Packets in a Rydberg Atom*, Phys. Rev. Lett. **76**, 2874 (1996).

[55] K. Hornberger and A. Buchleitner, *Radiative decay of nondispersive wave packets*, Europhys. Lett. **41**, 383 (1998).

[56] B. Eckardt, *Quantum mechanics of classically non-integrable systems*, Phys. Rep. **163**, 205 (1988).

[57] R. S. MacKay and J. D. Meiss, *Relation between quantum and classical thresholds for multiphoton ionization of excited atoms*, Phys. Rev. E **37**, 4702 (1988).

[58] J. Zakrzewski, D. Delande, and A. Buchleitner, *Nonspreading Electronic Wave Packets and Conductance Fluctuations*, Phys. Rev. Lett. **75**, 4015 (1995).

[59] A. Buchleitner and D. Delande, *Spectral Aspects of the Microwave Ionization of Atomic Rydberg States*, Chaos, Solitons & Fractals **5**, 1125 (1995).

[60] M. G. Floquet, *Équations différentielles linéaires a coefficients périodiques*, Ann. École Norm. Sup. **12**, 47 (1883).

[61] J. H. Shirley, *Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time*, Phys. Rev. **138**, B979 (1965).

[62] Y. B. Zel'dovich, *The quasienergy of a quantum-mechanical system subjected to a periodic action*, Sov. Phys. JETP **24**, 1006 (1967).

[63] S. Flügge, *Rechenmethoden der Quantentheorie*, 5 ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1993).

[64] J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, 1 ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1964).

[65] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, Fort Worth, 1976), college Edition.

[66] M. R. Spiegel, *Theory and Problems of Complex Variables*, Schaum's outline series (McGraw-Hill, New York, 1964).

[67] K. Yajima, *Resonances for the AC-Stark Effect*, Commun. Math. Phys. **87**, 331 (1982).

[68] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum mechanics of one- and two electron atoms* (Plenum Press, New York, 1977).

[69] H. Friedrich, *Theoretische Atomphysik*, 2 ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1990).

[70] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg, *Atom-Photon Interactions, Basic Processes and Applications* (John Wiley & Sons, New York, 1992).

[71] S. Graffi, V. Grecchi, and H. J. Silverstone, *Resonances and convergence of perturbation theory for N-body atomic systems in external AC-electric field*, Ann. Inst. Henri Poincaré **42**, 215 (1985).

[72] A. J. F. Siegert, *On the Derivation of the Dispersion Formula for Nuclear Reactions*, Phys. Rev. **56**, 750 (1939).

[73] M. L. Goldberger and K. M. Watson, *Scattering Theory*, 1 ed. (John Wiley & Sons, New York, 1964).

[74] B. R. Johnson and W. P. Reinhardt, *L^2 discretization and complex coordinates in the calculation of bound-free amplitudes in the presence of long-range forces*, Phys. Rev. A **28**, 1930 (1983).

[75] M. Pont and R. Shakeshaft, *Analytic structure of the ac quasienergy in the complex field plane*, Phys. Rev. A **43**, 3764 (1991).

[76] A. Maquet, S. Chu, and W. Reinhardt, *Stark ionization in dc and ac fields: An L^2 complex-coordinate approach*, Phys. Rev. A **27**, 2946 (1983).

[77] B. Simon, *Resonances in n-body quantum systems with dilatation analytic potentials and the foundations of time-dependent perturbation theory*, Ann. Math. **97**, 247 (1973).

[78] E. Baslev and J. M. Combes, *Spectral Properties of Many-Body Schrödinger Operators with Dilatation-analytic Interactions*, Commun. Math. Phys. **22**, 280 (1971).

[79] F. H. M. Faisal, *Theory of multiphoton processes*, *Physics of atoms and molecules* (Plenum Press, New York, 1987).

[80] M. Reed and B. Simon, *Functional analysis*, Vol. I of *Methods of modern mathematical physics*, 2 ed. (Academic Press, San Diego, 1980).

[81] M. Gavrila, in *Atoms in Intense Laser Fields*, Vol. 1 of *Advances in atomic, molecular, and optical physics,* supplements, edited by M. Gavrila (Academic Press, Boston, 1992), p. 435.

[82] L. Landau and E. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik*, 9 ed. (Akademie-Verlag, Berlin, 1979), Vol. III, Quantenmechanik.

[83] N. J. Klystra and C. J. Joachain, *Double poles of the S matrix in laser-assisted electron-atom scattering*, Phys. Rev. E **57**, 412 (1998).

[84] T. Dittrich, P. Hänggi, G.-L. Ingold, B. Kramer, G. Schön, and W. Zwerger, *Quantum Transport and Dissipation*, 1 ed. (Wiley-VCH, Weinheim, 1998).

[85] O. Benson, A. Buchleitner, G. Raither, M. Arndt, R. N. Mantegna, and H. Walther, *From coherent to noise-induced microwave ionization of Rydberg atoms*, Phys. Rev. A **51**, 4862 (1995).

[86] P. Koch and K. van Leeuwen, *The importance of resonances in microwave 'ionization' of excited hydrogen atoms*, Phys. Rep. **255**, 289 (1995).

[87] E. J. Galvez, J. E. Sauer, L. Moorman, P. M. Koch, and D. Richards, *Microwave Ionization of H Atoms: Breakdown of Classical Dynamics for High Fequencies*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2011 (1988).

[88] J. E. Bayfield, G. Casati, I. Guarneri, and D. W. Sokol, *Localization of Classically Chaotic Diffusion for Hydrogen Atoms in Microwave Fields*, Phys. Rev. Lett. **63**, 364 (1989).

[89] M. Arndt, A. Buchleitner, R. N. Mantegna, and H. Walther, *Experimental Studies of Quantum and Classical Limits in Microwave Ionization of Rubidium Rydberg Atoms*, Phys. Rev. Lett. **67**, 2435 (1991).

[90] G. Casati, V. Chirikov, and D. L. Shepelyansky, *Quantum Limitations for Chaotic Excitation of the Hydrogen Atom in a Monochromatic Field*, Phys. Rev. Lett. **53**, 2525 (1984).

[91] R. Blümel, A. Buchleitner, R. Graham, L. Sirko, U. Smilansky, and H. Walther, *Dynamical localization in the microwave interaction of Rydberg atoms: The influence of noise*, Phys. Rev. A **44**, 4521 (1991).

[92] F. L. Moore, J. C. Robinson, C. F. Bharucha, B. Sundaram, and M. G. Raizen, *Atom Optics Realization of the Quantum δ-Kicked Rotor*, Phys. Rev. Lett. **75**, 4598 (1995).

[93] G. Casati, B. V. Chirikov, J. Ford, and F. M. Izrailev, in *Stochastic Behavior in Classical and Quantum Hamiltonian Systems*, Vol. 93 of *Lecture Notes in Physics*, edited by G. Casati and J. Ford (Springer-Verlag, Berlin, 1979), p. 334.

[94] A. Buchleitner and D. Delande, *Dynamical Localization in More Than One Dimension*, Phys. Rev. Lett. **70**, 33 (1993).

[95] J. Leopold and D. Richards, *On the quantum Kepler map*, J. Phys. B **23**, 2911 (1990).

[96] G. Casati, V. Chirikov, I. Guarneri, and D. L. Shepelyansky, *Dynamical Stability of Quantum "Chaotic" Motion in a Hydrogen Atom*, Phys. Rev. Lett. **56**, 2437 (1986).

[97] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Disordered electronic systems*, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).

[98] N. F. Mott and W. D. Twose, *The Theory of Impurity Conduction*, Adv. Phys. **10**, 107 (1961).

[99] K. Ishii, *Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System*, Suppl. Prog. Theor. Phys. **53**, 77 (1973).

[100] D. J. Thouless, *Electrons in disordered systems and the theory of localization*, Phys. Rep. **13**, 93 (1974).

[101] S. Fishman, D. R. Grempel, and R. E. Prange, *Chaos, Quantum Recurrences, and Anderson Localization*, Phys. Rev. Lett. **49**, 509 (1982).

[102] A. Altland and M. Zirnbauer, *Field Theory of the Quantum Kicked Rotor*, Phys. Rev. Lett. **77**, 4536 (1996).

[103] D. R. Grempel, R. E. Prange, and S. Fishman, *Quantum dynamics of a nonintegrable system*, Phys. Rev. A **29**, 1639 (1984).

[104] M. Griniasty and S. Fishman, *Localization by Pseudorandom Potentials in One Dimension*, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988).

[105] D. J. Thouless, *Localization by a Potential with Slowly Varying Period*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2141 (1988).

[106] S. Fishman, R. E. Prange, and M. Griniasty, *Scaling theory for the localization length of the kicked rotor*, Phys. Rev. A **39**, 1628 (1989).

[107] D. K. Ferry and S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures*, Vol. 6 of *Cambridge studies in semiconductor physics and microelectronic engineering*, 1 ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).

[108] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, Vol. 3 of *Cambridge studies in semiconductor physics and microelectronic engineering*, 1 ed. (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).

[109] P. Sheng, *Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena* (Academic Press, San Diego, 1995).

[110] *Mesoscopic Physics and Electronics*, *NanoScience and Technology*, 1 ed., edited by T. Ando, Y. Arakawa, K. Furuya, S. Komiyama, and H. Nakashima (Springer-Verlag, Berlin, 1998).

[111] M. Büttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, *Generalized many-channel conductance formula with application to small rings*, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).

[112] J. Flügge, *Studienbuch zur technischen Optik* (Vanderhoeck & Ruprecht, Göttingen, 1976).

[113] W. Demtröder, *Elektrizität und Optik*, Vol. 2 of *Experimentalphysik* (Springer-Verlag, Berlin, 1995).

[114] D. S. Fisher and P. A. Lee, *Relation between conductivity and transmission matrix*, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981).

[115] P. A. Lee and D. S. Fisher, *Anderson Localization in Two Dimensions*, Phys. Rev. Lett. **47**, 882 (1981).

[116] J. T. Edwards and D. J. Thouless, *Numerical studies of localization in disordered systems*, J. Phys. C **5**, 807 (1972).

[117] D. J. Thouless, *Maximum Metallic Resistance in Thin Wires*, Phys. Rev. Lett. **39**, 1167 (1977).

[118] K. Hornberger and U. Smilansky, *The boundary integral method for magnetic billiards*, J. Phys. A **33**, 2829 (2000).

[119] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Vol. 1 of *Mesoscopic Physics and Nanotechnology*, 1 ed. (Oxford University Press, Oxford, 1997).

[120] E. Akkermans and G. Montambaux, *Conductance and Statistical Properties of Metallic Spectra*, Phys. Rev. Lett. **68**, 642 (1992).

[121] Y. Imry, private Mitteilung, 2000.

[122] P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, and D. S. Fisher, *New method for a scaling theory of localization*, Phys. Rev. B **22**, 3519 (1980).

[123] B. L. Altshuler and B. D. Simsons, in *Mesoscopic quantum physics*, Vol. Session **LXI** of *Les Houches Lectures, 1994*, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J.-L. Pichard, and J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1995), p. 1.

[124] E. N. Economou, *Mathematics and Fundamental Applications*, Vol. 20 of *Series of Scientific Monographies Erasmus* (Foundation for Research and Technology, Greece, 1991).

[125] J.-L. Pichard, *The one-dimensional Anderson model: scaling and resonances revisited*, J. Phys. C **19**, 1519 (1986).

[126] J.-L. Pichard, N. Zanon, Y. Imry, and A. D. Stone, *Theory of random multiplicative transfer matrices and its implications for quantum transport*, J. Phys. (Paris) **51**, 587 (1990).

[127] C. P. Umbach, S. Washburn, R. B. Laibowitz, and R. A. Webb, *Magnetoresistance of small, quasi-one-dimensional, normal-metal rings and lines*, Phys. Rev. B **30**, 4048 (1984).

[128] J. C. Licini, D. J. Bishop, M. A. Kastner, and J. Melngailis, *Aperiodic Magnetoresistance Oscillations in Narrow Inversion Layers in Si*, Phys. Rev. Lett. **55**, 2987 (1985).

[129] F. P. Milliken and Z. Ovadyahu, *Ovservation of Conductance Fluctuation in Large In_2O_{3-x} Films*, Phys. Rev. Lett. **65**, 911 (1990).

[130] D. Popovic, A. B. Fowler, S. Washburn, and P. J. Stiles, *Conductance fluctuations in large metal-oxide-semiconductor structures in the variable-range hopping regime*, Phys. Rev. B **42**, 1759 (1990).

[131] F. Ladieu, D. Mailly, and M. Sanquer, *Conductance statistics in small insulating GaAs:Si wires at low temperature. II: expermental study*, J. Phys. I (Paris) **3**, 2321 (1993).

[132] F. Ladieu and J.-P. Bouchaud, *Conductance statistics in small insulating GaAs:Si wires at low temperature. I: Theoretical analysis: truncated quantum fluctuations in insulating wires*, J. Phys. I (Paris) **3**, 2311 (1993).

[133] F. Ladieu and M. Sanquer, in *Mesoscopic quantum physics*, Vol. Session **LXI** of *Les Houches Lectures, 1994*, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J.-L. Pichard, and J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1995), p. 259.

[134] P. A. Lee and A. D. Stone, *Universal Conductance Fluctuations in Metals*, Phys. Rev. Lett. **55**, 1622 (1985).

[135] B. L. Al'tshuler, *Fluctuations in the extrinsic conductivity of disordered conductors*, JETP Lett. **41**, 648 (1985).

[136] Y. Imry, *Active Transmission Channels and Universal Conductance Fluctuations*, Europhys. Lett. **1**, 249 (1986).

[137] M. L. Mehta, *Random Matrices*, 2 ed. (Academic Press, Boston, 1991).

[138] T. Guhr, A. Müller-Groeling, and H. A. Weidenmüller, *Random-matrix theories in quantum physics: common concepts*, Phys. Rep. **299**, 189 (1998).

[139] G. Casati, I. Guarneri, F. M. Izrailev, L. Molinari, and K. Życzkowski, *Periodic Band Random Matrices, Curvature, and Conductance in Disordered Media*, Phys. Rev. Lett. **72**, 2697 (1994).

[140] G. Casati, I. Guarneri, and G. Maspero, *Landauer and Thouless Conductance: a Band Random Matrix Approach*, J. Phys. I (Paris) **7**, 729 (1997).

[141] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos*, Vol. 54 of *Springer Series in Synergetics*, 1 ed. (Springer-Verlag, Berlin, 1991).

[142] C. E. Shannon, *Mathematical Theory of Communication* (University of Illinois Press, Chicago, 1963).

[143] R. Blümel and U. Smilansky, *Quantum Mechanical Suppression of Classical Stochasticity in the Dynamics of Periodically Perturbed Surface-State Electrons*, Phys. Rev. Lett. **52**, 137 (1984).

[144] R. Blümel and U. Smilansky, *Localization of Floquet States in the rf Excitation of Rydberg Atoms*, Phys. Rev. Lett. **58**, 2531 (1987).

[145] W. J. Beenakker, *Random-matrix theory of quantum transport*, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997).

[146] M. Terraneo and I. Guarneri, *Distribution of resonance widths in localized tight-binding models*, 2000, erscheint in Eur. Phys. J. B.

[147] A. Krug, 2000, private Mitteilung.

[148] A. Krug and A. Buchleitner, *Residual symmetries in the spectrum of periodically driven alkali Rydberg states*, Euro. Phys. Lett. **49**, 176 (2000).

[149] L. Sirko, M. Arndt, P. M. Koch, and H. Walther, *Microwave ionization of Rb Rydberg atoms: Frequency dependence*, Phys. Rev. A **49**, 3831 (1994).

[150] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 2 ed. (John Wiley & Sons, New York, 1975).

[151] W. C. Henneberger, *Perturbation method for atoms in intense light beams*, Phys. Rev. Lett. **21**, 838 (1968).

[152] R. M. Potvliege and R. Shakeshaft, *Movement and interplay of the bound state, resonance, and shadow poles of the scattering amplitude in multiphoton processes*, Phys. Rev. A **38**, 6190 (1988).

[153] M. Rotenberg, *Application of Sturmian functions to the Schrödinger three-body problem: Elastic e^+-H scattering*, Ann. Phys. **19**, 262 (1962).

[154] D. Delande and J. C. Gay, *Group theory applied to the hydrogen atom in a strong magnetic field. Derivation of the effective diamagnetic Hamiltonian*, J. Phys. B **17**, L335 (1984).

[155] D. Delande, A. Bommier, and J. C. Gay, *Positiv-Energy Spectrum of the Hydrogen Atom in a Magnetic Field*, Phys. Rev. Lett. **66**, 141 (1991).

[156] D. Delande and J. C. Gay, *Quantum Chaos and Statistical Properties of Energy Levels: Numerical Study of the Hydrogen Atom in a Magnetic Field*, Phys. Rev. Lett. **57**, 2006 (1986).

[157] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions* (Dover, New York, 1972).

[158] C. Lanczos, *An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators.*, J. Res. Nat. Bur. Standards, Sect. B **45**, 225 (1950).

[159] T. Ericsson and A. Ruhe, *The Spectral Transformation Lanczos Method for the Numerical Solution of Sparse Generalized Symmetric Eigenvalue Problems*, Math. Comput. **35**, 1251 (1980).

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und nur die im Literaturverzeichnis angeführten Quellen verwendet habe.

Dresden, den 10. November 2000

(Sandro Wimberger)