

Quantendynamik in starken Feldern

H. J. Korsch

Fachbereich Physik, Universität Kaiserslautern

67653 Kaiserslautern

e-mail: korsch@physik.uni-kl.de

23. Oktober 2008

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	7
2	Quantendynamik – Grundlagen	11
2.1	Elementare Quantenmechanik	11
2.1.1	Autokorrelationsfunktion	12
2.1.2	Erwartungswerte	13
2.2	Kohärente Zustände	14
2.3	Quantenmechanik im Phasenraum	17
2.3.1	Die Husimi-Dichte	18
2.3.2	Die Wigner-Dichte	21
2.4	Resonanzzustände und ‘Komplexe Skalierung’	23
3	Zeitabhängige Hamilton Operatoren	27
3.1	Der angetriebene harmonische Oszillator	28
3.2	Das angetriebene Zweizustandssystem	30
4	Zeitperiodische Systeme	35
4.1	Floquet–Theorie und Quasienergie	35
4.2	Parameterabhängigkeit	39
4.3	Der periodisch getriebene harmonische Oszillator	41
4.4	Periodisch getriebene Zweizustandssysteme	44
5	Numerische Methoden	51
5.1	Floquet Matrix	51
5.2	Die Split–Operator–Methode	53
5.3	Die (t,t') –Methode	53
5.4	Spektrale Methoden	54
5.4.1	Fourier–Transformation	54
5.4.2	Matrixdiagonalisierung	56
5.4.3	Filter Diagonalisierung	56

6	Der getriebene anharmonischer Oszillator	59
6.1	Chaotische Dynamik	60
6.1.1	Klassisches Chaos	60
6.1.2	Quantenchaos	63
6.2	Der getriebene quartische Oszillator	63
6.2.1	Wellenpaketdynamik	66
6.2.2	Phasenraumentropie	68
6.2.3	Langzeitmittelwerte	70
6.2.4	Kohärenzzerstörung	72
6.3	Quasienergiezustände	73
7	Quantenchaos und Zufallsmodelle	77
7.1	Statistische Modelle	77
7.1.1	Statistik der Quasienergie-Spektren	77
7.1.2	Statistik der Vektorkomponenten	81
7.2	Modellstudie: Der angetriebene Rotor	82
7.2.1	Chaotische und reguläre Zustände	84
7.2.2	Klassische und Quantendynamik	88
8	Zerfallsprozesse in starken Feldern: ATI	95
8.1	Above Threshold Ionization (ATI)	95
8.2	Eine Modellstudie für ATI Prozesse	97
8.2.1	Floquet Resonanzen und ATI Spektren	97
8.2.2	Wellenpaketpropagation	101
8.2.3	Ein Zweizustandsmodell	103
9	Erzeugung hoher Harmonischer (HHG)	107
9.1	Das Rückstreu-Modell	110
9.2	Ein Modellsystem	111
9.3	HHG Spektren und Floquet Resonanzen	113
10	Kontrolle von Quantenprozessen	115
10.1	Zwei-Niveau Systeme: π -Pulse	116
10.2	Optimale Pulse	117
10.3	Kontrolliertes Tunneln	120
10.4	Stückelberg-Oszillationen bei Pulsexperimenten	123

Vorwort

Der vorliegende Text baut auf der Mitschrift einer Vorlesung über *Quantendynamik in starken Feldern* auf, die ich am Fachbereich Physik der Universität Kaiserslautern im Wintersemester 1997/98 und 2001/02 gehalten habe.

Danken möchte ich an dieser Stelle allen Studenten an der Universität Kaiserslautern, die an dieser Vorlesung teilgenommen haben. Mit konstruktiver Kritik und vielen Verbesserungsvorschlägen haben sie zum Entstehen dieses Vorlesungsskriptes beigetragen. Besonders hervorheben möchte ich hier die Unterstützung von Steffen Conrad, Stefan Dilthey, Frank Keck, Helmut Klamm, Thorsten Leonhardt und Wolfgang Leyes.

Das vorliegende Skript ist in vielfacher Hinsicht noch verbesserungsbedürftig, deshalb freue ich mich über jeden Vorschlag und über Hinweise auf sicherlich noch vorhandene Fehler (möglichst an die unten angegebene e-mail Adresse).

Kaiserslautern,
Oktober 2008

H.J. Korsch
FB Physik, Technische Universität Kaiserslautern,
67653 Kaiserslautern
e-mail: korsch@physik.uni-kl.de

Kapitel 1

Einführung

In den letzten Jahrzehnten fand eine fast explosionsartige Entwicklung in der Quantenphysik statt, die sich in zunehmendem Maß mit *zeitabhängigen* Quantenphänomenen befasst, eigentlich ein zentraler Gegenstand der Quantenmechanik, der aber in den meisten Textbüchern und Vorlesungen nur peripher behandelt wird.

Der Grund für das erneuerte Interesse liegt u.A. in den neuartigen experimentellen Möglichkeiten: Femtosekunden-Laser, Halbleiter-Übergitter und Strukturen, Quanten-Punkt- und Quanten-Trog-Systeme, Erzeugung ultrakalter Atome in den unterschiedlichsten Fallen usw. Ein Ziel ist hierbei – neben einem vertieften Verständnis der Quantenwelt durch zeitaufgelöste *Beobachtung* von Quantenprozessen – auch eine *Kontrolle* solcher Prozesse.

Wir interessieren uns hier für die *Quantendynamik in starken Feldern*, dabei soll das externe Feld stark sein gegenüber den inneren, was eine störungstheoretische Behandlung in aller Regel unmöglich macht. Die Felder sollen aber noch klassisch beschreibbar sein, d.h. nicht quantisiert. Dabei beschränken wir uns auf nicht-relativistische Systeme mit (meist) wenig Freiheitsgraden oder Teilchen.

Die folgende – zugegebenermaßen willkürlich ausgewählte — Liste soll eine erste Übersicht über die Systeme und Prozesse geben, die in dieser Vorlesung (voraussichtlich) behandelt werden, wenn auch sicher nicht in dieser Reihenfolge:

- **Above Threshold Ionization (ATI):** Bei der Multiphotonionisation von Atomen in starken Laserfeldern (Laserfrequenz ω) zeigen Elektronenspektren eine ausgeprägte Peakstruktur, wobei die Peaks einen Abstand $\hbar\omega$ haben, gradeso als ob das emittierte Elektron beim Herauslaufen noch weitere Laserphotonen absorbiert hat.
- **High Harmonic Generation (HHG):** In Experimenten mit Gasen, die mit intensiven Laserfeldern einer Frequenz ω wechselwirken, hat man die Emission von Strahlung mit wesentlich kürzeren Wellenlängen beobachtet, also die *Erzeugung Höherer Harmonischer*.

- **Semiklassische Quantisierung:** Der Zusammenhang zwischen quantisierten Eigenzuständen und den periodischen Bahnen der klassischen Physik wurde neu überdacht. In einer Vielzahl von Systemen konnte hier eine direkte Korrespondenz gezeigt werden. Ein charakteristisches Beispiel sind die Spektren von Wasserstoff-Atomen in starken magnetischen Feldern.
- **Zeitaufgelöste molekulare Prozesse:** In einem Pump–Probe Experimente wird ein Molekül mit einem Pump–Laser angeregt und die Dynamik des entstehenden Zustands durch einen um einen um eine Zeit τ versetzten Probe–Laser abgefragt. Durch Variation von τ erhält man Aufschluss über die Zeitdynamik,
- **Aktive Kontrolle von Quantenprozessen:** Als Beispiel betrachten wir ein Molekül ABC mit zwei möglichen Zerfallskanälen $AB + B$ und $A + BC$. Durch ein geeignet geformtes Laserfeld lässt sich der erwünschte Zerfallsprozess maximieren. Dabei kann man durch Rückkopplung zwischen einem Detektor der Produkte und einem Pulsformer mittels numerischer Optimierungsverfahren bewirken, dass das System selbst den geeigneten Laserpuls generiert.
- **Quantenchaos:** Die klassische Dynamik ist typischerweise nichtlinear und daher chaotisch. Die Quantendynamik ist linear, also auf den ersten (und zweiten!) Blick regulär, d.h. nicht-chaotisch. Der Zusammenhang zwischen quantenmechanischer und klassischer Dynamik ist trotz intensiver Forschungsarbeit und vielen Einzelresultaten noch immer in Grundsatz unverstanden. Die Dynamik von Quantensystemen liefert hier eine Fülle von interessanten Modellsystemen zur theoretischen und experimentellen Untersuchung zum Thema Quantenchaos. Von Interesse sind dabei auch neuartige Phänomene, wie zum Beispiel Tunnelprozesse durch dynamische Barrieren, wie sie zwischen Bereichen mit klassisch regulärer Dynamik auftreten, die durch chaotische getrennt sind (Stichwort: 'chaos-assisted tunneling').
- **Dynamik von Bose–Einstein–Kondensaten.** Von besonderem aktuellen Interesse ist das Verhalten von Bose–Einstein–Kondensaten in äußern Feldern. Solche Quantensysteme sind schon (fast) makroskopisch und trotzdem kohärent. Interessante Phänomene wurden hier gezeigt, wie zum Beispiel das kohärente Tunneln durch Systeme von Barrieren; die Emission gepulster kohärenter Atomstrahlen etc.

Literatur:

Als grundlegende Textbücher werden empfohlen

- J. E. Bayfield: *Quantum Evolution — An Introduction to Time-Dependent Quantum Mechanics* (John Wiley, 1999) Frank Großmann: "Theoretical Femtosecond Physics: Atoms and Molecules in Strong Laser Fields" (Springer 2008)

Die Vorlesung stützt sich außerdem – ohne dass dies jeweils angegeben ist – auf die folgenden Texte:

- R. Blümel, W. P. Reinhardt: *Chaos in Atomic Physics* (Cambridge Univ. Press, 1997)

- T. Dittrich, P. Hänggi, G.-L. Ingold, B. Kramer, G. Schön, W. Zwerger: *Quantum Transport and Dissipation* (Wiley-VCH, Weinheim, 1998); hauptsächlich Kapitel 5: *Driven Quantum Systems*
- M. Grifoni, P. Hänggi: *Driven Quantum Tunneling*, Physics Reports 304, 229 (1998)
- M. Holthaus: *Periodisch angetriebene Quantensysteme: Konzepte und Perspektiven*, Habilitationsschrift, Fachbereich Physik, Universität Marburg, 1996
- E. Schöll, Ed., *Theory of Transport Properties of Semiconductor Nanostructures* (Chapman & Hall, 1998)
- B. W. Shore: *The Theory of Coherent Atomic Excitation. Vol. I, II* (John Wiley, 1990)

Aufgabe 1.1

Was haben Sie in der Quantenmechanik (Vorlesung oder Lieblingstextbuch) bisher über das Zeitverhalten von Quantensystemen gelernt?

Aufgabe 1.2

Wer oder was sind Esaki und Mosfet ?

Aufgabe 1.3

Lesen sie das Vorwort in dem oben angegebenen Buch von Bayfield (Semesterapparat, Standnummer 360/154; Achtung: Preis 105 \$!)

Kapitel 2

Quantendynamik – Grundlagen

2.1 Elementare Quantenmechanik

Für den Fall, dass der Hamilton Operator \hat{H} des Systems nicht explizit von der Zeit abhängt, kann man die Zeitevolution eines Zustandsvektors gemäß der Schrödingergleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = \hat{H} |\psi\rangle \quad (2.1)$$

oder den Zeitentwicklungsoperator

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle \quad (2.2)$$

durch die Eigenzustände

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle \quad (2.3)$$

ausdrücken (die Formeln hier sind für den einfachen Fall eines diskreten Spektrums aufgeschrieben). Meist (aber nicht immer!) ist \hat{H} hermitesch ($\hat{H}^\dagger = \hat{H}$) und \hat{U} unitär ($\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{1}$).

Wir notieren, dass die E_n reell sind (\hat{H} hermitesch), sowie die Orthonormalität und die Vollständigkeit der Eigenzustände:

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \quad , \quad \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| = \hat{1}. \quad (2.4)$$

Ein Vektor $|\psi\rangle$ lässt sich daher in der Basis der Eigenzustände $|\varphi_n\rangle$ darstellen:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle. \quad (2.5)$$

mit den Koeffizienten

$$c_n = \langle \varphi_n | \psi(0) \rangle. \quad (2.6)$$

Der Zustand entwickelt sich zeitlich wie

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle, \quad (2.7)$$

und der Zeitentwicklungsoperator kann als

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \tilde{H}t} = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| \quad (2.8)$$

geschrieben werden.

Als ‘Trivialität’ sei angemerkt, dass das Skalarprodukt zweier beliebiger Zustände zeitlich konstant ist,

$$\langle \psi_2(t) | \psi_1(t) \rangle = \langle \psi_2(0) | U^\dagger(t) \hat{U}(t) | \psi_1(0) \rangle = \langle \psi_2(0) | \psi_1(0) \rangle, \quad (2.9)$$

solange ihre Zeitevolution durch denselben Hamilton Operator erfolgt. Mit anderen Worten: man hat eine Vielzahl von ‘Erhaltungsgrößen’.

2.1.1 Autokorrelationsfunktion

Die Autokorrelationsfunktion ist definiert als die Projektion eines Zustandsvektors auf seinen Anfangswert zur Zeit $t = 0$. Entwickelt man in Eigenzustände $|\varphi_n\rangle$, so erhält man mit $p_n = |\langle n | \psi(0) \rangle|^2$

$$C(t) = \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} p_n. \quad (2.10)$$

Das Betragsquadrat liefert die Wahrscheinlichkeit, dass zur Zeit t der Anfangszustand wieder erreicht wird, die Rekurrenzwahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} p_R(t) = |C(t)|^2 &= \sum_{n,m} p_n p_m e^{-\frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) t} \\ &= \sum_n p_n^2 + 2 \sum_{n \neq m} p_n p_m \cos\left(\frac{1}{\hbar} (E_n - E_m) t\right). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Im Langzeitmittel verschwindet der oszillierende \cos -Term (es sei der Fall ohne Entartung, $E_n \neq E_m$ für $n \neq m$, angenommen) und es ergibt sich

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T |C(t)|^2 dt = \sum_n p_n^2. \quad (2.12)$$

Aus der Autokorrelationsfunktion, die man z.B. durch numerische Zeitpropagation eines Zustands erhalten kann, lässt sich durch Fourier-Transformation das Spektrum berechnen. Mit $C(-t) = C^*(t)$ erhält man

$$\begin{aligned} C(E) &= 2 \operatorname{Re} \int_0^\infty C(t) e^{\frac{i}{\hbar} E t} dt \\ &= \int_0^\infty \left\{ C(t) e^{\frac{i}{\hbar} E t} + C^*(t) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \right\} dt = \int_{-\infty}^\infty C(t) e^{\frac{i}{\hbar} E t} dt \\ &= \sum_n p_n \int_{-\infty}^\infty e^{\frac{i}{\hbar} (E - E_n) t} dt = 2\pi\hbar \sum_n p_n \delta(E - E_n). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Wir erhalten also eine Sequenz von Delta-Spikes an den Positionen der Energieeigenwerte E_n mit Gewichten p_n , die durch den Anfangszustand vor der Zeitpropagation bestimmt sind. (Im der Praxis kann man allerdings nur über endliche Zeiten propagieren, was zu einer Aufweichung der Deltafunktionen in endliche Maxima führt. Aber hierzu existieren ‘Tricks’, die zu einer wesentlichen Verkürzung der notwendigen numerischen Propagationszeiten führen.)

2.1.2 Erwartungswerte

Im dem Heisenbergbild bewegen sich die Operatoren nach

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}. \quad (2.14)$$

und die Zustände sind zeitlich konstant. Für die Erwartungswerte ergibt sich dann (falls \hat{A} nicht explizit von der Zeit abhängt)

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \langle \dot{\hat{A}} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle. \quad (2.15)$$

Speziell für den Orts- und Impulserwartungswert findet man mit $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{q})$ für $[\hat{p}, \hat{q}] = \hbar/i$

$$\frac{d\langle \hat{q} \rangle}{dt} = \frac{i}{2m\hbar} \langle [\hat{p}^2, \hat{q}] \rangle = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle \quad (2.16)$$

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{V}(q), \hat{p}] \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial q} \right\rangle. \quad (2.17)$$

Dies ist das *Theorem von Ehrenfest*

$$\frac{d\langle \hat{q} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle \quad , \quad \frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial q} \right\rangle \quad (2.18)$$

in direkter Analogie zu den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m} \quad , \quad \frac{dp}{dt} = - \frac{\partial V}{\partial q} \quad (2.19)$$

wenn man die quantenmechanischen Erwartungswerte mit den (scharfen) klassischen Werten vergleicht. Da aber generell gilt $\langle \partial V / \partial q \rangle \neq \partial V / \partial \langle q \rangle$ ist diese Ähnlichkeit nur formal. Eine wichtige Ausnahme bildet der harmonische Oszillator. Hier ist der Kraft $-\partial V / \partial q$ linear in q und die quantenmechanische Zeitevolution der Erwartungswerte von Ort und Impuls ist identisch mit der klassischen.

2.2 Kohärente Zustände

Die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren

$$\hat{a} = \frac{\omega\hat{q} + i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar\omega}}, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\omega\hat{q} - i\hat{p}}{\sqrt{2\hbar\omega}} \quad (2.20)$$

mit Vertauschungsrelation

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \quad (2.21)$$

erlauben eine bequeme algebraische Behandlung des harmonischen Oszillators

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \omega^2 \hat{q}^2) = \hbar\omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2) \quad (2.22)$$

(die Masse wurde gleich eins gesetzt). Es ist Standardstoff jeder Quantenmechanik Vorlesung über die Leitereigenschaften

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad \hat{a} |n+1\rangle = \sqrt{n+1} |n\rangle \quad (2.23)$$

die Eigenwertrelation

$$\hat{H} |n\rangle = \hbar\omega(n+1/2) |n\rangle \quad (2.24)$$

herzuleiten.

Aufgabe 2.1 Als kleine Übung kann man die folgenden nützlichen(!) Matrix-Darstellungen für den Orts- und Impulsoperator in der harmonischen Oszillatorbasis beweisen, also für die Matrizen \mathbf{q} und \mathbf{p} mit den Matrixelementen $\langle m|\hat{q}|n\rangle$ bzw. $\langle m|\hat{p}|n\rangle$:

$$\mathbf{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

Diese diskreten Darstellungen erlauben einfache numerische Berechnungen¹

Die wichtigen *kohärenten Zustände* (oder Glauberzustände) $|\alpha\rangle$ sind Eigenzustände des Operators \hat{a} :

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \quad (2.26)$$

zum komplexen Eigenwert α , dessen Real- und Imaginärteile man bequemerweise als

$$\alpha = \frac{\omega q + ip}{\sqrt{2\hbar\omega}} \quad (2.27)$$

¹siehe H. J. Korsch, M. Glück: *Computing quantum eigenvalues made easy*, Eur. J. Phys. 23 (2002) 413.

parametrisiert. Man schreibt auch $|\alpha\rangle = |p, q\rangle$. Wir normieren gemäß $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ und notieren die Vollständigkeit der Zustände

$$\int \frac{dp dq}{h} |p, q\rangle\langle p, q| = \int \frac{d^2\alpha}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{1} \quad (2.28)$$

mit $h = 2\pi\hbar$ und $d^2\alpha = d\operatorname{Re}(\alpha) d\operatorname{Im}(\alpha)$.

Die Erwartungswerte von Impuls und Ort sind für einen kohärenten Zustand sehr einfach zu berechnen:

$$\langle\hat{p}\rangle = \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\langle\alpha|(\hat{a}^\dagger - \hat{a})|\alpha\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}(\alpha^* - \alpha) = p \quad (2.29)$$

und

$$\langle\hat{q}\rangle = \langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}(\alpha^* + \alpha) = q. \quad (2.30)$$

Für die Erwartungswerte von \hat{p}^2 und \hat{q}^2 findet man mit Hilfe von $(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2 = \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^2 = \hat{a}^{\dagger 2} - 2\hat{a}^\dagger\hat{a} - 1 + \hat{a}^2$

$$\langle\hat{p}^2\rangle = -\frac{\hbar\omega}{2}\langle\alpha|(\hat{a}^\dagger - \hat{a})^2|\alpha\rangle = -\frac{\hbar\omega}{2}(\alpha^{*2} - 2|\alpha|^2 - 1 + \alpha^2) \quad (2.31)$$

und damit

$$\Delta p^2 = \langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \quad (2.32)$$

sowie ganz analog

$$\Delta q^2 = \langle\hat{q}^2\rangle - \langle\hat{q}\rangle^2 = \frac{\hbar}{2\omega}. \quad (2.33)$$

Hieraus sieht man, dass die kohärenten Zustände minimale Unschärfe besitzen:

$$\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{2}. \quad (2.34)$$

Für weitere Überlegungen benötigen wir noch die *Ortsdarstellung* der kohärenten Zustände:

$$\langle x|\alpha\rangle = \sqrt[4]{\frac{\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{\omega}{2\hbar}(x-q)^2 + \frac{i}{\hbar}px - \frac{i}{\hbar}\frac{pq}{2}\right). \quad (2.35)$$

Dies verifiziert man direkt mittels der Definition als Eigenzustände von \hat{a} über (2.20) in der Ortsdarstellung. Das Wellenpaket (2.35) stellt ein Gauß-Wellenpaket (zentriert bei $\langle x\rangle = q$) dar, das sich mit einem mittleren Impuls p nach rechts bewegt.

In der *Oszillatorbasis* $|n\rangle$ haben die kohärenten Zustände eine besonders einfache Darstellung. Mit

$$\langle n|\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha\langle n|\alpha\rangle = \sqrt{n+1}\langle n+1|\alpha\rangle \quad (2.36)$$

und

$$\langle n+1|\alpha\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}}\langle n|\alpha\rangle = \dots = \frac{\alpha^{n+1}}{\sqrt{(n+1)!}}\langle 0|\alpha\rangle \quad (2.37)$$

findet man

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \langle 0|\alpha\rangle. \quad (2.38)$$

Die Normierung liefert

$$1 = \langle \alpha|\alpha\rangle = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_n \frac{(\alpha^* \alpha)^n}{n!} = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 e^{|\alpha|^2} \quad (2.39)$$

und damit das gewünschte Resultat

$$\langle n|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}. \quad (2.40)$$

Die Besetzungswahrscheinlichkeiten der Oszillatorzustände n sind also für einen kohärenten Zustand Poisson-verteilt:

$$p_n = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}. \quad (2.41)$$

Wir notieren weiterhin die Identität $|n=0\rangle = |\alpha=0\rangle = |0\rangle$, d.h. der Grundzustand des harmonischen Oszillators ist ein spezieller kohärenter Zustand.

Eine kurze Rechnung führt zu einer weiteren nützlichen Darstellung der kohärenten Zustände:

$$\begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_n |n\rangle \langle n|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{(\alpha \hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} |0\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha \hat{a}^\dagger} e^{-\alpha^* \hat{a}} |0\rangle = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} |0\rangle = \hat{D}(\alpha) |0\rangle \end{aligned} \quad (2.42)$$

(es gilt $|0\rangle = e^{-\alpha^* \hat{a}} |0\rangle$). Weiterhin wurde Gebrauch gemacht von der Baker–Hausdorff Formel

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-[\hat{A},\hat{B}]/2} = e^{\hat{B}} e^{\hat{A}} e^{[\hat{A},\hat{B}]/2} \quad (2.43)$$

für Operatoren mit $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$. Gleichung (2.43) sagt aus, dass die kohärenten Zustände $|\alpha\rangle$ erzeugt werden können durch Anwendung des Verschiebungsoperators

$$\hat{D}(\alpha) = e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} \quad (2.44)$$

auf den Grundzustand $|0\rangle$.

Das Zeitverhalten (die Dynamik) der kohärenten Zustände läßt sich z.B. mit Hilfe der Identität

$$e^{-x \hat{a}^\dagger \hat{a}} f(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) e^{x \hat{a}^\dagger \hat{a}} = f(\hat{a} e^{-x}, \hat{a}^\dagger e^x) \quad (2.45)$$

herleiten¹. Das liefert speziell

$$e^{-x \hat{a}^\dagger \hat{a}} e^{\alpha \hat{a}^\dagger - \alpha^* \hat{a}} e^{x \hat{a}^\dagger \hat{a}} = e^{\alpha e^x \hat{a}^\dagger - \alpha^* e^{-x} \hat{a}} \quad (2.46)$$

¹Die Gleichung (2.45) findet man (neben vielen anderen Resultaten zur Oszillator Algebra) als Theorem 5 in Kap. 3.3 des Buches W. H. Louisell: *Quantum Statistical Properties of Radiation* (John Wiley, 1973).

und mit $x = -i\omega t$ ergibt sich

$$e^{i\omega t \hat{a}^\dagger} \hat{D}(\alpha) e^{-i\omega t \hat{a}^\dagger} = \hat{D}(\alpha e^{-i\omega t}). \quad (2.47)$$

Für den Zeitevolutionsoperator $\hat{U}(t) = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ erhält man also die Vertauschungsrelation

$$\hat{U}(t) \hat{D}(\alpha) = \hat{D}(\alpha e^{-i\omega t}) \hat{U}(t) \quad (2.48)$$

und damit

$$\begin{aligned} \hat{U}(t)|\alpha\rangle &= \hat{U}(t)\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \hat{D}(\alpha e^{-i\omega t})\hat{U}(t)|0\rangle \\ &= \hat{D}(\alpha e^{-i\omega t})|0\rangle = |\alpha(t)\rangle \end{aligned} \quad (2.49)$$

mit $\alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$. Der kohärente Zustand bleibt also kohärent und bewegt sich längs der klassischen Phasenbahn, wie schon oben im Zusammenhang mit dem Theorem von Ehrenfest erwähnt.

Zum Abschluß noch eine Bemerkung zu den sogenannten *gequetschten Zuständen* (den ‘squeezed states’). Diese Zustände kann man erzeugen, indem man z.B. den Verschiebungsoperator \hat{D} definiert bezüglich einer Frequenz ω auf den Grundzustand eines harmonischen Oszillators mit Frequenz ω' anwendet. Ausführlich also

$$\hat{D}(\alpha; \omega)|n = 0; \omega'\rangle = |\alpha; \omega'\rangle. \quad (2.50)$$

Für solche Zustände bewegen sich die Erwartungswerte $\langle \hat{p} \rangle$ und $\langle \hat{q} \rangle$ klassisch (klar wegen des Theorems von Ehrenfest) aber die Unschärfen Δp und Δq oszillieren. Man charakterisiert solche Zustände durch den Parameter

$$s = \omega/\omega', \quad (2.51)$$

den ‘squeezing Parameter’.

2.3 Quantenmechanik im Phasenraum

In der klassischen Mechanik beschreibt man die Dynamik eines (Hamiltonschen) Systems zweckmäßigerweise im Phasenraum mit den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen für die Bahn eines Teilchens:

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}. \quad (2.52)$$

Dabei ist $H(p, q)$ die Hamilton-Funktion.

Die Zeitentwicklung einer Dichteverteilung $\varrho(p, q, t)$ wird durch die Liouville-Gleichung

$$\frac{d\varrho}{dt} + \{\varrho, H\} = 0 \quad (2.53)$$

beschrieben. Wir notieren noch die bekannten Eigenschaften einer solchen Dichteverteilung. Sie ist nicht-negativ

$$\varrho(p, q, t) \geq 0, \quad (2.54)$$

und normiert, d.h. die Gesamtwahrscheinlichkeit ist gleich eins,

$$\int \varrho(p, q, t) dp dq = 1, \quad (2.55)$$

also insbesondere invariant unter der Zeitentwicklung. Erwartungswerte einer Größe $A(p, q)$ sind gegeben durch

$$\bar{A}(t) = \int A(p, q) \varrho(p, q, t) dp dq. \quad (2.56)$$

In der Quantenmechanik gibt es eine ganz ähnliche Beschreibung im Phasenraum. sie ist sehr nützlich, insbesondere wegen der Ähnlichkeit zur klassischen Beschreibung, aber immer noch weniger geläufig, obwohl inzwischen schon mehrere Textbücher existieren, die ausführlichen Gebrauch davon machen².

Man konnte allerdings beweisen, dass keine eigentliche quantenmechanische Dichte im Phasenraum existiert. Stattdessen hat man eine Vielzahl(!) unterschiedlicher (Pseudo)Phasenraumdichten, denen jeweils einige Eigenschaften eigentlicher Phasenraumdichten fehlen. Die populärsten Vertreter sind die Husimi- und die Wigner-Dichte, die wir im Folgenden kennenlernen werden.

2.3.1 Die Husimi-Dichte

Die Projektion auf Zustände minimaler Unschärfe lokalisiert an den Phasenraumpunkten (p, q) , die kohärenten Zustände $|p, q\rangle$, kann man zur Konstruktion einer quantenmechanischen Phasenraumdichte benutzen, der sogenannten Husimi-Dichte

$$\rho_{\text{H}}(p, q) = |\langle p, q | \psi \rangle|^2 = |\langle \alpha | \psi \rangle|^2 \quad (2.57)$$

d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichte eine Projektion auf die kohärenten Zustände. Hier sei angemerkt, dass $|\psi\rangle$ ein beliebiger Zustandsvektor sein kann, der a priori nichts mit dem harmonischen Oszillator zu tun hat, der im Zusammenhang mit den kohärenten Zuständen auftaucht. Oder anders formuliert: Bei der Phasenraum-Analyse eines Zustandes mittels (2.57) hat man die Freiheit der Wahl ‘geeigneter’ kohärenter Zustände, d.h. der Wahl eines optimalen Wertes von ω (vgl. die Bemerkungen über gequetschte Zustände am Ende von Abschnitt 2.2).

Es sei angemerkt, dass dies eine sogenannte *Fenster-Fourier Transformation* (auch als *Gabor Transformation* bezeichnet) darstellt:

$$F(p, q) \sim \int dx e^{-a(x-q)^2 - ipx/\hbar} f(x), \quad (2.58)$$

²z.B. das kürzlich erschienene Buch W. P. Schleich: *Quantum Optics in Phase space* (Wiley-VCH, 2001)

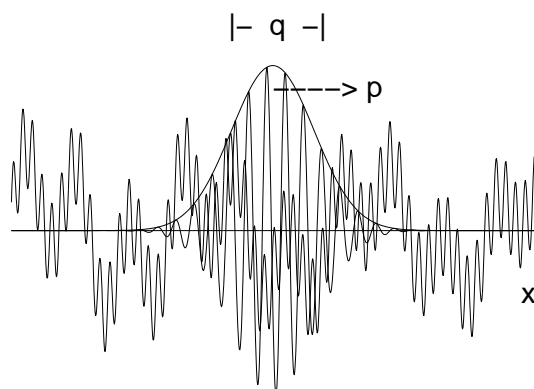


Abbildung 2.1: Analyse einer Funktion $f(x)$ durch Projektion auf Gauß-gewichtete ebene Wellen $e^{-ipx/\hbar}$, zentriert bei $x = q$

bei der der Integrand mit einer Gaußschen Fensterfunktion zentriert bei einem variablen q gewichtet wird (siehe Abb. 2.1). Eine solche Transformierte gibt nicht nur Aufschluß über die Gesamtwahrscheinlichkeit des Auftretens eines Impulses p , sondern auch darüber, *wo* diese Impulse auftreten.

Aufgabe 2.2

Frischen Sie die Kenntnisse von der Zeitentwicklung eines freien Teilchens auf ('Breitfließen eines Gauß-schen Wellenpakets').

Aufgabe 2.3

Lesen sie die Ausführungen in dem Buch von Bayfield, Abschnitt 1.1 b,c,d und Abschnitt 1.3 a zur klassischen Dynamik im Phasenraum.

Einige Eigenschaften der Husimidichte:

- Normierung:

$$\begin{aligned} \int \rho_{\text{H}}(p, q) \frac{dp dq}{2\pi\hbar} &= \int \langle \psi | p, q \rangle \langle p, q | \psi \rangle \frac{dp dq}{2\pi\hbar} \\ &= \langle \psi | \int | p, q \rangle \langle p, q | \psi \rangle \frac{dp dq}{2\pi\hbar} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{1} | \psi \rangle = 1. \end{aligned} \quad (2.59)$$

- Die Erwartungswerte von Ort und Impuls ergeben sich als

$$\langle \hat{q} \rangle = \int q \rho_{\text{H}}(p, q) \frac{dp dq}{2\pi\hbar}, \quad \langle \hat{p} \rangle = \int p \rho_{\text{H}}(p, q) \frac{dp dq}{2\pi\hbar}, \quad (2.60)$$

aber allgemeinere Mittelwerte lassen sich in aller Regel *nicht* durch solche Integrale berechnen.

- Die Orts- und Impulswahrscheinlichkeiten erhält man *nicht* aus $\rho_{\text{H}}(p, q)$ als sogenannte Marginalverteilungen durch Integration über die andere Variable, also

$$|\langle q|\psi\rangle|^2 \neq \int \rho_{\text{H}}(p, q) \frac{dp}{2\pi\hbar}, \quad |\langle p|\psi\rangle|^2 \neq \int \rho_{\text{H}}(p, q) \frac{dq}{2\pi\hbar}. \quad (2.61)$$

- Für die Eigenzustände $|n\rangle$ eines Harmonischen Oszillators lassen sich die Husimichten in einfacher Weise hinschreiben. Für den Fall, dass dieser Oszillator und die bei der Konstruktion der Husimichten verwendeten kohärenten Zustände das gleiche $\omega = \omega' = 1$ besitzen, hat man nach (2.40) einfach

$$\rho_{\text{H}}(p, q) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \quad (2.62)$$

mit $\alpha = (q + ip)/\sqrt{2\hbar}$ nach (2.27), also eine Poisson-Verteilung.

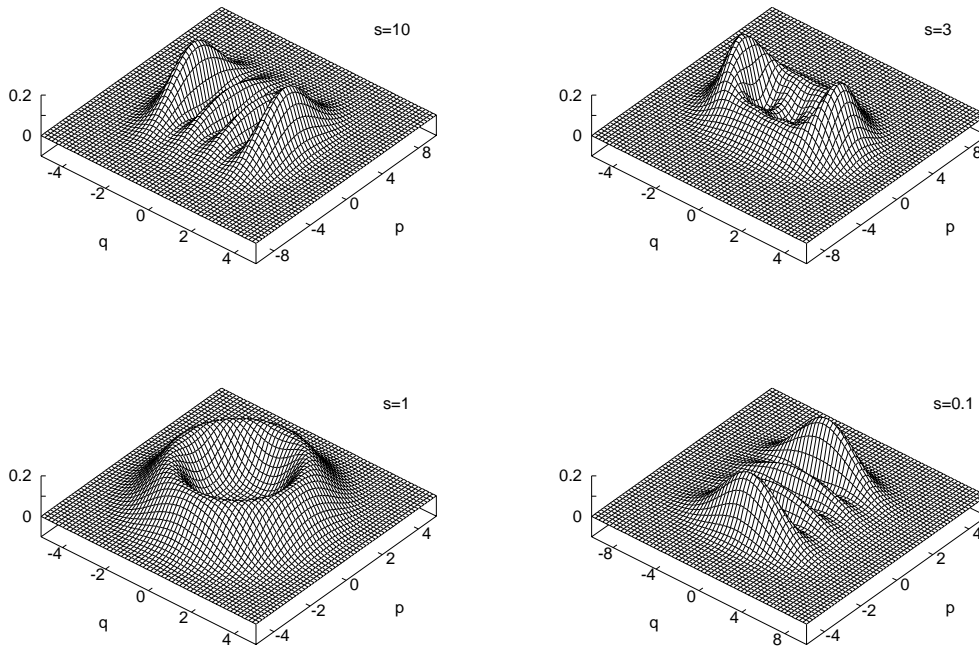


Abbildung 2.2: Husimichten für einen harmonischen Oszillator Eigenzustand $n = 3$ für ‘squeezing’ Parameter ($s = 10, 3, 1,$ and 0.1).

Als illustrierendes Beispiel zeigt Abbildung 2.2 die Husimi Dichte des Eigenzustandes $n = 3$ eines harmonischen Oszillators ($\hbar = 1; \omega = 1$) analysiert mit gequetschten Zuständen zu $\omega' = \omega/s$ für verschiedene Werte von s . Zunächst erkennt man für $s = 1$ die Lokalisierung im Phasenraum auf der klassischen Phasenbahn zur Energie $E_3 = 3 + 1/2$. Für großes s ist der analysierende Zustand stärker lokalisiert im Ortsraum und folglich

werden die Oszillationen der Wellenfunktion im Ortsraum stärker aufgelöst. Für kleines s entsprechend im Impulsraum.

2.3.2 Die Wigner-Dichte

Durch die sogenannte *Weyl-Darstellung* lassen sich quantenmechanische Operatoren \hat{A} als Phasenraumfunktionen $A_W(p, q)$ darstellen, also $\hat{A} \iff A_W(p, q)$ mit

$$A_W(p, q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle q - x/2 | \hat{A} | q + x/2 \rangle e^{ipx/\hbar}. \quad (2.63)$$

Als ein erstes Beispiel untersuchen wir die Weyl-Darstellung von

$$\hat{A}^{(\alpha_0)} = \frac{1}{2\pi\hbar} |\alpha_0\rangle\langle\alpha_0|, \quad (2.64)$$

also eines Projektors auf einen kohärenten Zustand $|\alpha_0\rangle = |p_0, q_0\rangle$. Die Rechnung (wird nachgeliefert) ergibt

$$A_W^{(\alpha_0)}(p, q) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left\{ -\frac{\omega}{\hbar} (q - q_0)^2 - \frac{1}{\hbar\omega} (p - p_0)^2 \right\} =: W(p, q; p_0, q_0). \quad (2.65)$$

also eine zweidimensionale Gaußverteilung im Phasenraum mit einem Maximum bei $(p, q) = (p_0, q_0)$. Für $\omega = 1$ ist die Verteilung um diesen Punkt zirkular symmetrisch, sonst elliptisch.

Im zweiten Beispiel nehmen wir statt eines kohärenten Zustandes einen beliebigen Zustand $|\psi\rangle$, also den Projektor

$$\hat{A}^{(\psi)} = \frac{1}{2\pi\hbar} |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (2.66)$$

Seine Weyl-Darstellung wird als die *Wigner-dichte* $\rho_W(p, q)$ bezeichnet:

$$\begin{aligned} \rho_W(p, q) &= \frac{1}{\hbar} |\psi\rangle\langle\psi| \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle q - x/2 | \psi \rangle \langle \psi | q + x/2 \rangle e^{ipx/\hbar} \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(q + x/2) \psi(q - x/2) e^{ipx/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Einige Eigenschaften der Wigner-dichte:

- Erwartungswerte berechnen sich ganz allgemein als Mittelwerte über die Weyldarstellung des Operators, gewichtet mit der Wignerichte des Zustandes, also als

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int A_W(p, q) \rho_W(p, q) \frac{dp dq}{2\pi\hbar}. \quad (2.68)$$

Das schließt trivialerweise die Normierung der Wignerichte ein.

- Die Marginalverteilungen ergeben sich wie gewohnt durch Integration über die andere Variable. Es gilt also

$$|\langle q | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar} \int \rho_W(p, q) \frac{dp}{2\pi\hbar}, \quad |\langle p | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{\hbar} \int \rho_W(p, q) \frac{dq}{2\pi\hbar}. \quad (2.69)$$

- Als einziger ‘Schönheitsfehler’ dieser Wignerverteilungen muss eine Tatsache angeführt werden, die sie als Wahrscheinlichkeitsverteilungen eigentlich sofort disqualifiziert: Sie können negative Werte annehmen und, mehr noch, das ist auch fast immer der Fall. Wir sehen das weiter unten an einem Beispiel.

Für die Eigenzustände $|n\rangle$ eines Harmonischen Oszillators $\hat{H} = \hat{p}^2/2 + \hat{q}^2/2$ lässt sich die Wignerichte berechnen. Man erhält mit $\hbar = 1$

$$\rho_W(p, q) = (-1)^n \frac{1}{\pi} e^{-(p^2+q^2)} L_n((2(p^2 + q^2))). \quad (2.70)$$

Dabei ist L_n ein Laguerre-Polynom.

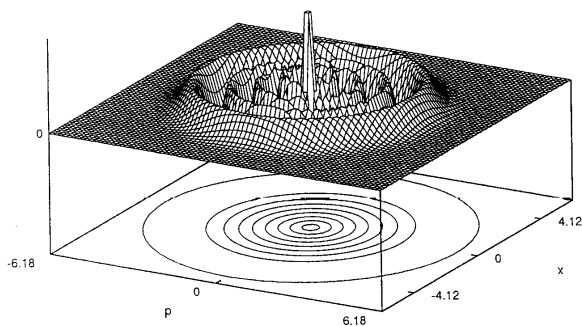


Abbildung 2.3: Wignerichte für einen harmonischen Oszillator Eigenzustand $n = 8$.

Diese Verteilung ist rotationssymmetrisch und, da das Laguerre-Polynom L_n genau n reelle Nullstellen besitzt, verschwindet die Wignerichte auf n Kreisen um den Ursprung. Dazwischen wechselt sie das Vorzeichen, ist also abwechselnd positiv und negativ, wobei – wegen der Normierung – die positiven Regionen etwas überwiegen. Abbildung 2.3 zeigt ein Beispiel für $n = 8$.

Die Husimidichte aus dem vorangehenden Abschnitt und die Wignerichte stehen in einer interessanten Beziehung. Es gilt (Beweis wird nachgereicht)

$$\int \rho_W(p, q; p_0, q_0) \rho(p, q) dp dq = \rho_H(p_0, q_0) \quad (2.71)$$

mit der Gaußverteilung $W(p, q; p_0, q_0)$ aus (2.65). Die Husimidichte ergibt sich also durch Glätten der Wignerichte mit einer Gaußverteilung, wobei interessanteweise alle negativen Bereiche verschwinden, denn die Husimidichte ist ja nach Definition nicht-negativ. Man darf aber aus dieser Beziehung *nicht* den Schluss ziehen, dass die Husimidichte minderwertiger ist, als die Wignerichte, etwa weil beim Glätten Information verlorengeht. Das ist nicht der Fall, denn man kann z.B. allein aus den Nullstellen(!) einer Husimiverteilung und ca. drei ihrer Werte den gesamten Zustandsvektor rekonstruieren, und damit auch die Wignerichte.

2.4 Resonanzzustände und ‘Komplexe Skalierung’

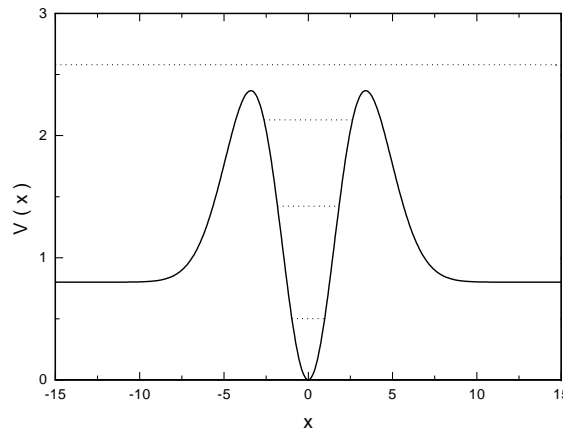


Abbildung 2.4: *Potentialtopf (2.72) mit Potentialbarrieren und Resonanzzuständen.*

Offene Quantensysteme, also zum Beispiel Streusysteme oder Quantensysteme, die eine gebundene Komponente an ein Kontinuum koppeln, können sogenannte *Resonanzphänomene* zeigen, also beispielsweise mehr oder ausgeprägte Maxima (‘peaks’) in den Streuquerschnitten bei charakteristischen Energien. In einer zeitabhängigen Beschreibung äußert sich das in einer Zeitverzögerung bei der Streuung mit Ausbildung eines langlebigen Zwischenzustands. Es wird ein *Resonanzzustände* angeregt, d.h. ein Zustand, der mehr oder weniger langlebig ist und mit der Zeit exponentiell mit einer Lebensdauer τ zerfällt wie $|\psi|^2 \sim \exp -t/\tau$.

Die wohl bekannteste Situation ist wohl die Streuung an einer Potentialbarriere. Zur Illustration wählen wir das oft betrachtete Modellsystem

$$V(x) = \left(\frac{x^2}{2} - J \right) e^{-\lambda x^2} + J. \quad (2.72)$$

Für die Parameterwerte $\lambda = 0.1$, $J = 0.8$ und $\hbar = 1$ besitzt dieses Potential einen gebundenen Zustand und drei Resonanzen (siehe Abbildung 2.4). Bei den markierten Energien findet man Wellenfunktionen mit dem gesuchten Zerfallsverhalten. Darüberhinaus zeigen diese Zustände eine Lokalisierung in dem Gebiet der Potentialmulde und die Lebensdauer läßt sich verstehen als inverse Tunnelwahrscheinlichkeit durch die Potentialbarriere. Man kann die Lage dieser Resonanzen auf der Energieskala approximativ verstehen als die Energieeigenwerte innerhalb der Potentialmulde. Weiterhin manifestieren sich diese Resonanzen als Peaks in den Streuquerschnitten, d.h. hier in den Reflektions- oder Durchlasswahrscheinlichkeiten, die durch Anregung und Zerfall der Resonanzzustände bei diesen Energien zustande kommen. Alle diese Eigenschaften kann man heranziehen, um eine Resonanz zu ‘definieren’. Für den Fall sehr langlebiger (‘scharfer’) Resonanzzustände ist das in der Regel unproblematisch.

Hier soll eine Resonanz definiert sein durch den Separationsansatz $\psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar}\varphi(x)$ mit den sogenannten Siegert Randbedingungen

$$\psi(x) \longrightarrow \sim e^{\pm ikx} \text{ für } x \longrightarrow \pm\infty, \quad (2.73)$$

also durch rein auslaufende Randbedingungen. Wegen der Stromerhaltung ist das für reelle Energie E nicht erfüllbar, d.h. wir erhalten Zustände mit komplexer Energie $E = E_R - i\Gamma/2$ in der unteren Halbebene der komplexen Energieebene. Die Lebensdauer ist dann

$$\tau = \hbar/\Gamma. \quad (2.74)$$

Eine (fast) äquivalente Definition einer Resonanz ist gegeben durch einen Pol der S -Matrix oder der Resolvente $(H - E)^{-1}$ in der komplexen Energieebene. Für unser Modellpotential (2.72) findet man viele Resonanzpole³. Die langlebigsten liegen bei $E_0 = 0.502$, $E_1 = 1.421 - i0.582 \cdot 10^{-4}$, $E_2 = 2.127 - i0.154 \cdot 10^{-1}$ und $E_3 = 2.584 - i0.173$.

Wie berechnet man nun solche Resonanzzustände? Zunächst einmal muß man sich klarmachen, dass wegen des negativen Imaginärteils der Energie der Imaginärteil von k ebenfalls negativ ist und dass damit die Wellenfunktion $\psi(x)$ auf der x -Achse asymptotisch divergiert. Diese Zustände sind also nicht mehr normierbar.

Eine der wichtigsten Methoden für eine numerische Berechnung (aber auch für rein theoretische Analysen!) ist die sogenannte *komplexe Rotation* oder auch *komplexe Skalierung*. In der einfachsten Variante solcher Methoden skaliert man die x -Koordinate wie $x \rightarrow e^{i\theta}x$, d.h. man rotiert die x -Achse in die komplexe Ebene. Wenn man jetzt den Winkel wählt im Bereich $\theta > -\arg k$, dann wird längs der rotierten x -Achse die Wellenfunktion asymptotisch exponentiell abfallen und man kann zur Berechnung der Resonanzzustände auf Methoden zur Berechnung gebundener Zustände zurückgreifen⁴. Für das Potential aus (2.72) muß man dazu die Eigenwerte der Schrödingergleichung

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + e^{2i\theta} \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(e^{i\theta}r)) \right\} \psi = 0 \quad (2.75)$$

berechnen.

³siehe z.B. M. Rittby, N. Elander, E. Brändas, Phys. Rev. A 26 (1982) 1804.

⁴Eine ausführliche Darstellung der Methode der komplexen Skalierung und ihre Anwendungen findet man in N. Moiseyev, Phys. Rep. 302 (1998) 211.

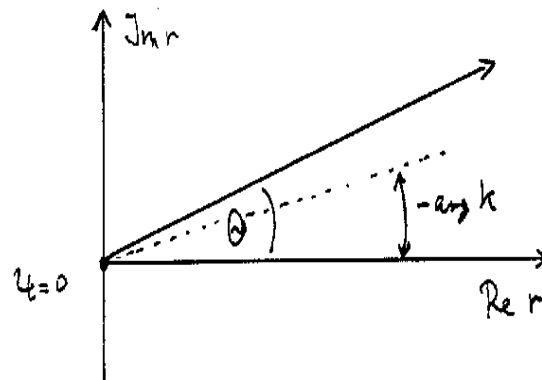


Abbildung 2.5: Komplexe Rotation in der r -Ebene um den Winkel $\theta > -\arg(k)$. Auf dem rotierten Strahl fällt die Wellenfunktion exponentiell ab.

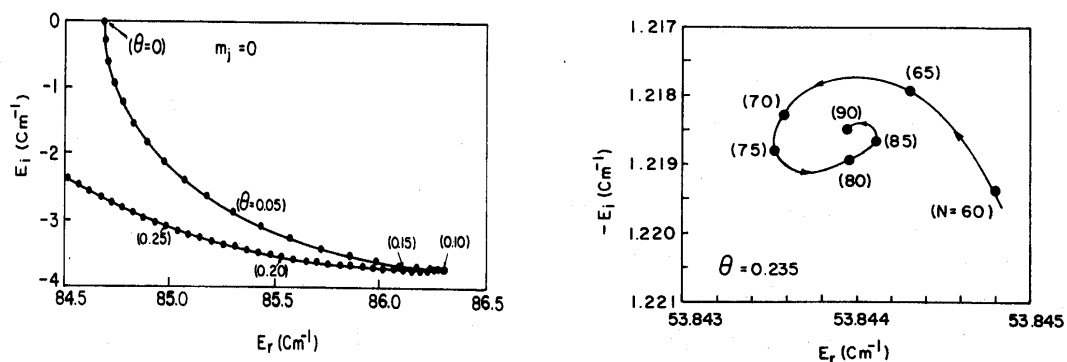


Abbildung 2.6: Resonanz als Funktion des Rotationswinkels θ (θ -Trajektorie) (a) und spiralförmige Konvergenz (b) (aus N. Moiseyev, *Lecture Notes in Physics Vol 211*, p.235-256, Springer 1984)

In der komplexen Energieebene führt die komplexe Skalierung zu dem folgenden Bild: Die Position der Eigenwerte der gebundenen Zustände und der Resonanzen bleibt unverändert, aber das Kontinuum wird rotiert um den Winkel 2θ (siehe Abbildung 2.7). Das ist die Aussage des Balslev-Combes Theorems⁵. Als Anmerkung sei erwähnt, dass dies jedoch so *nicht* für numerische Resultate in einer endlichen Basis gilt. Hier sind die berechneten Resonanzen von dem Winkel θ abhängig. Trägt man die Resonanzenergie $E_R - i\Gamma/2$ in der komplexen Ebene in Abhängigkeit von θ auf (eine sogenannte ' θ -Trajektorie'), so erhält man eine charakteristische Cusp-Struktur (vgl. Abbildung 2.6 (a)) und man er-

⁵E. Balslev, J. M. Combes, *Commun. Math. Phys.* 22 (1970) 280.

mittelt den optimalen Winkel an der Spitze nach θ_{opt} bei $\partial E_{\text{R}}/\partial\theta = 0$ und $\partial\Gamma/\partial\theta = 0$, d.h. als Winkel an der Spitze der θ -Trajektorie. Mit wachsender Größe N der Basis zeigen die Resonanzenergien $E_{\text{R}} - i\Gamma/2$ eine spiralförmige Konvergenz auf den wahren Wert. ein Beispiel zeigt die Abbildung 2.6 (b).

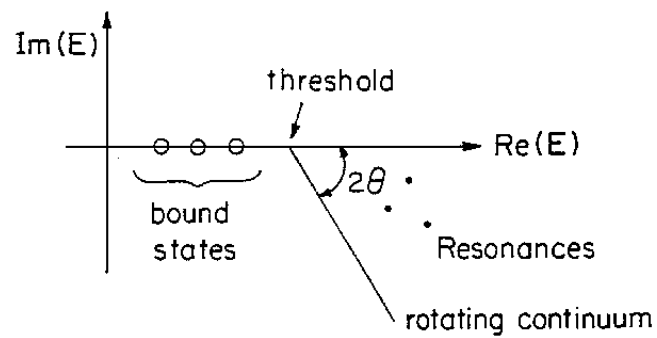


Abbildung 2.7: Komplexe Energieebene: Gebundene Zustände (\circ), Resonanzen (\bullet) und rotiertes Kontinuum bei einer komplexen Rotation um den Winkel θ .

Kapitel 3

Zeitabhängige Hamilton Operatoren

Wir wollen im folgenden Quantensysteme in zeitabhängigen Feldern betrachten, zum Beispiel Atome oder Moleküle in Strahlungsfeldern. Wenn die Wellenlänge des Feldes groß ist gegenüber der Systemdimension, kann man erfolgreich die Felder klassisch behandeln und die Wechselwirkung mit einem elektrischen Feld \vec{E} in elektrischer Dipolnäherung beschreiben durch

$$V(\vec{r}, t) = -\vec{\mu}(\vec{r}) \cdot \vec{E}(t) \quad (3.1)$$

mit dem Dipolmoment $\vec{\mu}(\vec{r})$. In vielen Fällen sind die Felder (näherungsweise) monochromatisch mit konstanter Amplitude, $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \sin(\omega t + \phi)$, oder die Amplitude \vec{E}_0 und Frequenz ω variieren langsam ('adiabatisch') im Vergleich zu $\sin \omega t$.

Manchmal sind auch nur wenige Zustände involviert, und man kann sich auf ein getriebenes N -Niveausystem beschränken. Ein bekanntes Beispiel ist das Zweiniveausystem mit dem Hamilton Operator

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} = -\frac{\Delta}{2} \hat{\sigma}_z - \mu_0 E_0 \sin(\omega t + \phi) \hat{\sigma}_x \quad (3.2)$$

für ein linear polarisiertes Feld. Hier ist $\Delta = E_2 - E_1$ der Niveauabstand und $\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x$ die Pauli'schen Spinmatrizen.

Einen äquivalenten Hamilton Operator erhält man für den Fall der Spin-Magnetfeld Resonanz, z.B. der Elektron-Spin Resonanz (ESR) oder der Nuclear Magnetic-Spin Resonanz (NMR). Dabei wird ein konstantes Magnetfeld B_0 in \vec{e}_z -Richtung und ein oszillierendes Feld in einer dazu senkrechten Richtung \vec{e}_x angelegt:

$$\hat{B} = B_0 \vec{e}_z + 2B_1 \cos \omega t \vec{e}_x. \quad (3.3)$$

Das magnetische Moment $\vec{\mu}$ ist mit dem Drehimpuls \vec{J} durch das gyromagnetische Verhältnis γ gekoppelt, $\vec{\mu} = \gamma \vec{J}$, und wir erhalten für einen Spin $\frac{1}{2}$

$$\hat{H} = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = -\frac{\hbar}{2} \gamma B_0 \hat{\sigma}_z - \hbar \gamma B_1 \cos \omega t \hat{\sigma}_x \quad (3.4)$$

in Übereinstimmung mit (3.2).

Im Folgenden werden wir uns mit Hamilton Operatoren befassen, die explizit von der Zeit abhängen, also

$$\hat{H} = \hat{H}(t) \quad (3.5)$$

Hier kann man den Zeitentwicklungsoperator *nicht* schreiben als

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') dt\right), \quad (3.6)$$

da der Hamilton Operator zur Zeit t_1 , $\hat{H}(t_1)$, nicht mit $\hat{H}(t_2)$ vertauscht. Man kann z.B. schreiben

$$\hat{U}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_n) \Delta t\right) \cdots \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_1) \Delta t\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t_0) \Delta t\right) \quad (3.7)$$

mit $t_k = k\Delta t$, oder formal

$$\hat{U}(t) = \mathcal{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}(t') dt\right), \quad (3.8)$$

mit dem Zeitordnungsoperator \mathcal{T} . In fast allen Fällen ist eine numerische ‘Lösung’ eines derartigen Problems erforderlich, wie sie in den folgenden Kapiteln diskutiert wird. Es ist jedoch instruktiv, sich zuerst zwei (zumindest teilweise) geschlossen lösbar Fälle genauer anzusehen, den harmonischen Oszillator und das Zweizustandssystem mit zeitabhängiger Kraft.

3.1 Der angetriebene harmonische Oszillator

Der harmonische Oszillator unter einer zeitabhängigen Kraft ist geschlossen lösbar und eines der Standardprobleme in der klassischen Dynamik. Das entsprechende quantenmechanische Problem

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \omega_0^2 \hat{q}^2) - f(t) \hat{q} \quad (3.9)$$

ist ebenfalls exakt lösbar, aber weniger bekannt aus den Kursvorlesungen der Quantenmechanik. Die folgende Darstellung zeigt in klarer Weise die Korrespondenz zur klassischen Dynamik.

In der Ortsdarstellung erhalten wir zunächst die Schrödinger Gleichung

$$i\hbar \psi(q, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{1}{2} \omega_0^2 q^2 - f(t) q \right\} \psi. \quad (3.10)$$

Die Koordinatentransformation $q \rightarrow x$ mit

$$x = q - \xi(t), \quad (3.11)$$

wobei $\xi(t)$ die klassische Bewegungsgleichung

$$\ddot{\xi} + \omega_0^2 \xi = f(t) \quad (3.12)$$

löst, führt mit $\dot{\psi} = \frac{\partial \psi}{\partial x} \dot{\xi} + \frac{\partial \psi}{\partial t}$ auf

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left\{ i\hbar \dot{\xi} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega_0^2 (x + \xi)^2 - f(t)(x + \xi) \right\} \psi(x, t). \quad (3.13)$$

Eine (erste) unitäre Transformation

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \dot{\xi} x\right) \varphi(x, t) \quad (3.14)$$

beseitigt den linearen Term in x :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega_0^2 x^2 + L(t) \right\} \varphi(x, t). \quad (3.15)$$

Dabei ist

$$L(t) = \frac{1}{2} \dot{\xi}^2 - \frac{1}{2} \omega_0^2 \xi^2 + \xi f(t) \quad (3.16)$$

die klassische Lagrange Funktion. Eine zweite unitäre Transformation

$$\varphi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t L(\tau) d\tau\right) \chi(x, t) \quad (3.17)$$

führt auf

$$i\hbar \frac{\partial \chi(x, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \omega_0^2 x^2 \right\} \chi(x, t), \quad (3.18)$$

also die bekannte Schrödinger Gleichung für den zeitunabhängigen harmonischen Oszillator mit den Eigenwerten

$$E_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (3.19)$$

und Eigenfunktionen $\chi_n(x)$. Insgesamt haben wir also eine vollständige Klasse von Lösungen von (3.10)

$$\psi_n(q, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left\{ \dot{\xi}(t)(q - \xi(t)) - E_n t - \int_0^t L(\tau) d\tau \right\}\right) \chi_n(q - \xi(t)). \quad (3.20)$$

Hier sieht man klar, wie die Wellenfunktion der klassischen Bewegung folgt mit einer zusätzlichen zeitabhängigen Phase. Wählt man speziell Lösungen der klassischen Gleichung (3.12) mit Anfangsbedingungen $\xi(0) = \dot{\xi}(0) = 0$, so haben wir eine Wellenfunktion mit der Anfangsbedingung $\psi(q, 0) = \chi_n(q)$, d.h. der Oszillator befindet sich anfangs im Vibrationszustand n . Die Wahrscheinlichkeiten für Übergänge $n \rightarrow m$ lassen sich mit Methoden der Oszillatoralgebra ebenfalls geschlossen berechnen:

$$p_{mn}(t) = m!n!e^{-\xi^2 \omega_0 / 2\hbar} \left| \sum_{k=0}^{\min(m,n)} \frac{(-1)^k}{k!(n-k)!(m-k)!} \left(\xi \sqrt{\frac{\omega_0}{2\hbar}}\right)^{n+m-2k} \right|^2 \quad (3.21)$$

(vgl. z.B. J. Katriel, J. Phys. B3, (1970) 1315). Speziell für einen Oszillator, der sich anfangs im Grundzustand befindet, ergibt (3.21) zu jeder Zeit eine Poisson-Verteilung

$$p_{m0}(t) = \frac{1}{m!} \lambda^m(t) e^{-\lambda(t)} \quad (3.22)$$

mit $\lambda(t) = \xi^2(t)\omega_0/2\hbar$. Mit dem bekannten Mittelwert für die Poisson-Verteilung $\langle m \rangle = \lambda$ finden wir schließlich

$$E(t) = \langle \hat{H}_0 \rangle = \hbar\omega_0 \left(\langle m \rangle + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} \xi^2(t) \omega_0^2 + E(0), \quad (3.23)$$

also wiederum das klassische Resultat.

3.2 Das angetriebene Zweizustandssystem

Ein weiteres einfaches Modellsystem ist das angetriebene Zweizustandssystem

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Delta/2 & f(t) \\ f(t) & +\Delta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Hierbei ist $\Delta = E_2 - E_1 > 0$ die Energiedifferenz der beiden Niveaus und $f(t)$ eine reelle Antriebsfunktion, die ‘Kraft’. Die Besetzungswahrscheinlichkeiten der beiden Zustände sind $p_n(t) = |a_n(t)|^2$ mit $p_1 + p_2 = 1$. Mit der Transformation

$$a_1 = c_1 e^{+i\Delta t/2\hbar}, \quad a_2 = c_2 e^{-i\Delta t/2\hbar} \quad (3.25)$$

werden die Diagonalterme eliminiert:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & f(t) e^{-i\Delta t/\hbar} \\ f(t) e^{+i\Delta t/\hbar} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (3.26)$$

Im Gegensatz zum angetriebenen harmonischen Oszillator ist dieses System von zwei gekoppelten Differentialgleichungen nicht mehr geschlossen lösbar, und zwar auch für den Fall eines harmonischen Antriebs

$$f(t) = 2\hbar\lambda \cos \omega t = \hbar\lambda (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (3.27)$$

für den sich (3.26) auf

$$i \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \lambda [e^{-i(\omega+\omega_0)t} + e^{+i(\omega-\omega_0)t}] \\ \lambda [e^{+i(\omega+\omega_0)t} + e^{-i(\omega-\omega_0)t}] & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

mit $\hbar\omega_0 = \Delta$ reduziert.

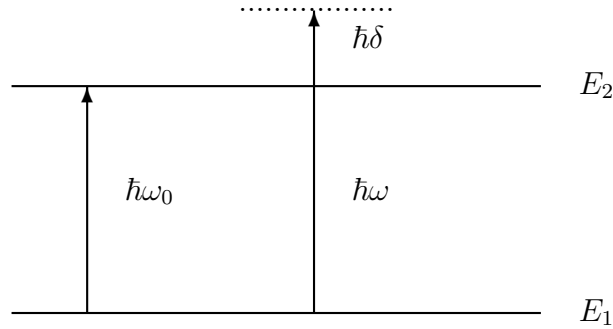


Abbildung 3.1: Das mit einer Frequenz ω angetriebene Zweizustandssystem ($\hbar\omega_0 = \Delta = E_2 - E_1$); $\delta = \omega - \omega_0$ ist die Verstimmung.

Die Rotating-Wave Approximation

In der sogenannten *Drehwellen-Näherung* (engl. ‘Rotating-Wave Approximation’ (RWA)) nimmt man an, dass die Antriebsfrequenz ω in der Nähe der Resonanzfrequenz ω_0 liegt und dass die Amplitude λ des Antriebs relativ schwach ist. Dann kann man die schnell variierenden Terme $e^{\pm i(\omega+\omega_0)t}$ vernachlässigen, und man erhält schließlich

$$i \begin{pmatrix} \dot{c}_1 \\ \dot{c}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \lambda e^{i\delta t} \\ \lambda e^{-i\delta t} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

mit der *Verstimmung* (‘Detuning’) $\delta = \omega - \omega_0$. Differenzieren von $\dot{c}_1 = -i\lambda e^{i\delta t} c_2$ nach t und Eliminieren von \dot{c}_2 und c_2 führt auf die einfache Differentialgleichung

$$\ddot{c}_1 - i\delta\dot{c}_1 + \lambda^2 c_1 = 0, \quad (3.30)$$

die schon von der Theorie des gedämpften harmonischen Oszillators bekannt ist.

Mit dem Ansatz $c_1 = e^{i\sigma t}$ und den Lösungen der sich durch Einsetzen in (3.30) ergebenden charakteristischen Gleichung $\sigma^2 - \delta\sigma - \lambda^2 = 0$,

$$\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\delta \pm \Omega) \quad (3.31)$$

(hier ist

$$\Omega = \sqrt{\delta^2 + 4\lambda^2} \quad (3.32)$$

die sogenannte *Rabifrequenz*), findet man die allgemeine Lösungen

$$c_1(t) = e^{i\delta t/2} [c_+ e^{+i\Omega t/2} + c_- e^{-i\Omega t/2}] \quad (3.33)$$

$$c_2(t) = -\frac{1}{2\lambda} e^{-i\delta t/2} [(\delta + \Omega)c_+ e^{+i\Omega t/2} + (\delta - \Omega)c_- e^{-i\Omega t/2}].$$

Die Anfangsbedingungen $c_1(0) = 1$ und $c_2(0) = 0$ liefern insbesondere

$$p_2(t) = |a_2(t)|^2 = |c_2(t)|^2 = \left(\frac{2\lambda}{\Omega}\right)^2 \sin^2 \frac{\Omega t}{2}. \quad (3.34)$$

Wir beobachten:

- (a) Die Übergangswahrscheinlichkeit ist für kleine Zeiten ($\Omega t \ll 1$) mit $p_2 \approx \lambda^2 t^2$ unabhängig von der Verstimmung δ .
- (b) Im Resonanzfall, $\delta = 0$, ist $\Omega = 2\lambda$ und $p_2 = \sin^2 \lambda t$, d.h. die Besetzungswahrscheinlichkeit oszilliert vollständig zwischen den beiden Zuständen hin und her. Nur in diesem Fall wird der Grundzustand vollständig geleert.

Abbildung 3.2 zeigt als Beispiel den Zeitverlauf von p_2 für verschiedene Werte der Verstimmung $\delta = 0, 0.5, 1, 2$.

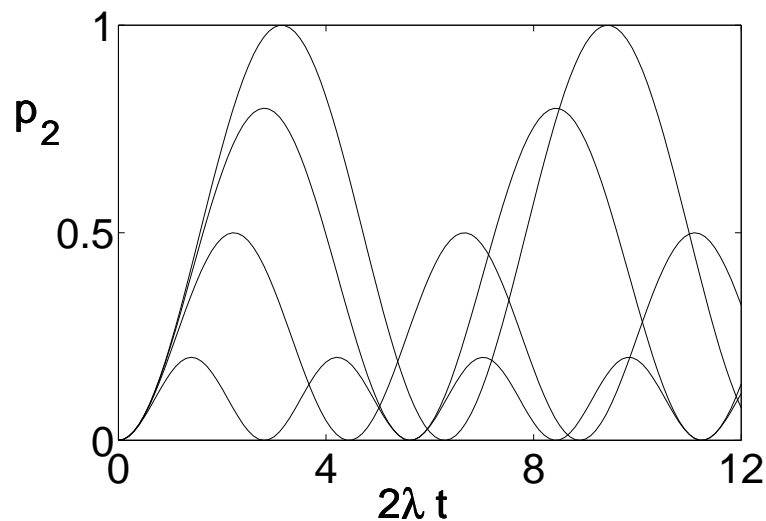


Abbildung 3.2: Anregungswahrscheinlichkeit $p_2(t)$ als Funktion von $2\lambda t$ für verschiedene Werte der Verstimmung $\delta = 0, 0.5, 1, 2$.

Ohne die Rotating-Wave Approximation (RWA) zeigt das Zweizustandssystem Abweichungen von dem oben geschilderten Verhalten. Ein Beispiel zeigt die Abb. 3.3. Man erkennt hier im Vergleich zur RWA in Abb. 3.4 zusätzliche Oszillationen.¹

¹Mehr darüber findet man in B. Shore: *The Theory of Coherent Atomic excitation* (J. Wiley, 1990).

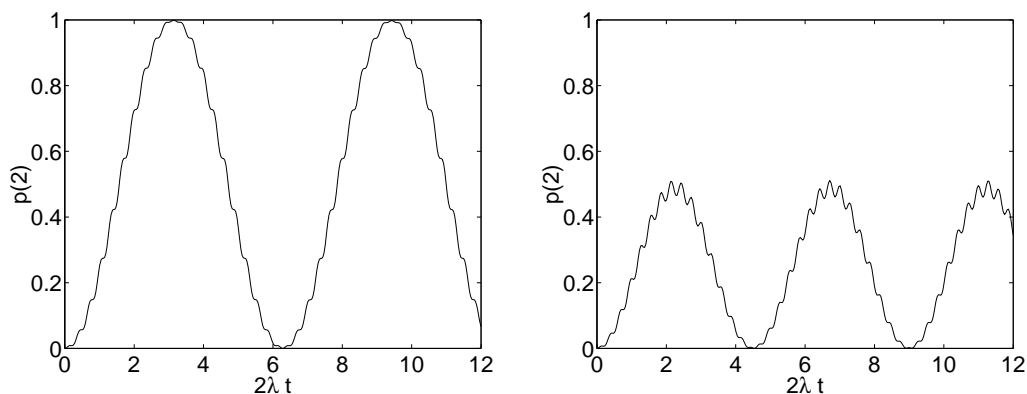


Abbildung 3.3: Numerische Lösung (ohne RWA): Anregungswahrscheinlichkeit $p_2(t)$ als Funktion von $2\lambda t$ für $\lambda = 0.05$ und $\omega_0 = 1$ für resonante Anregung $\omega = 1$ (links) und $\omega = 1.1$ (rechts).

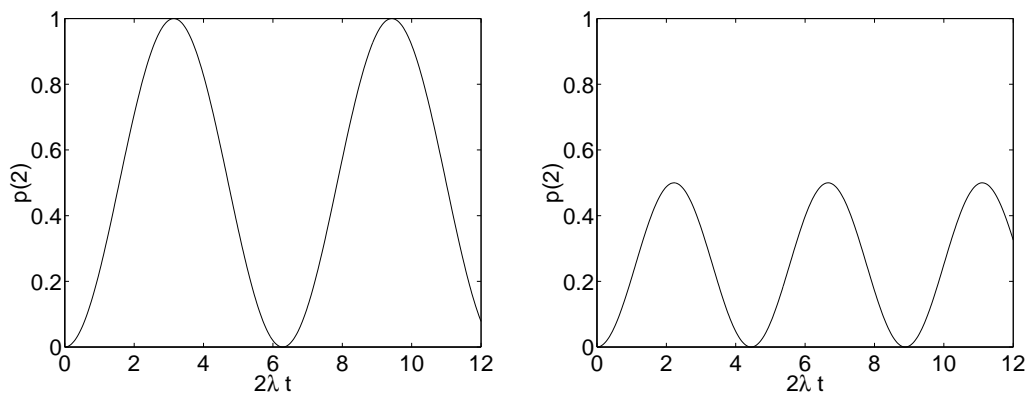


Abbildung 3.4: Rotating Wave Approximation (RWA): Anregungswahrscheinlichkeit $p_2(t)$ als Funktion von $2\lambda t$ für $\lambda = 0.05$ und $\omega_0 = 1$ für resonante Anregung $\omega = 1$ (links) und $\omega = 1.1$ (rechts).

Aufgabe 3.1

Überlegen Sie sich mindestens zwei Realisierungen eines Zweizustandssystems.

Aufgabe 3.2

gegeben sei ein Zweizustandssystem, also die Energieniveaus E_1 und E_2 . Durch welchen Puls $f(t)$ befördert man einen Zustand in dem Zeitintervall T aus dem Grundzustand 1 vollständig in den angeregten Zustand 2? Gibt es Einschränkungen für den Wert von T ?

