

Kapitel 4

Zeitperiodische Systeme

Eine wichtige Klasse zeitabhängiger Quantensysteme sind zeitperiodisch

$$\hat{H}(t + T) = \hat{H}(t), \quad (4.1)$$

die oft in der Form

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{V}(t), \text{ mit } \hat{V}(t + T) = \hat{V}(t) \quad (4.2)$$

auftreten.

Von Bedeutung ist die Symmetrie des Systems: Wir haben eine diskrete Zeitsymmetrie $t \rightarrow t + T$ und häufig auch eine Zeitumkehrsymmetrie $t \rightarrow -t$ (manchmal auch in der verschobenen Form $t_0 + t \rightarrow t_0 - t$).

4.1 Floquet–Theorie und Quasienergie

Die klassische Floquet–Theorie (1883) behandelt die Differentialgleichung

$$\ddot{y} + g(t)y = 0 \quad \text{mit} \quad g(t + T) = g(t), \quad (4.3)$$

die auch als *Hill'sche Gleichung* bekannt ist.

Sind $y_1(t)$ und $y_2(t)$ linear unabhängige Lösungen von (4.3), dann auch $y_1(t + T)$ und $y_2(t + T)$, und es läßt sich schreiben

$$y_i(t + T) = \sum_j a_{ji} y_j(t). \quad (4.4)$$

Im allgemeinen existieren keine periodischen Lösungen von (4.3), aber man kann Lösungen finden, die sich nach einer Periode T bis auf einen Faktor σ reproduzieren. Der allgemeine Ansatz $y(t) = \sum_i c_i y_i(t)$ liefert

$$y(t + T) = \sum_i c_i y_i(t + T) = \sum_{ij} c_i a_{ji} y_j(t) \quad (4.5)$$

$$\stackrel{!}{=} \sigma y(t) = \sigma \sum_j c_j y_j(t) \quad (4.6)$$

und führt auf die Bedingung

$$\sum_i a_{ji} c_i = \sigma c_j, \quad (4.7)$$

oder in Matrixform $A\vec{c} = \sigma\vec{c}$. Die Eigenwerte σ sind also Lösungen der charakteristischen Gleichung

$$|A - \sigma I| = 0, \quad (4.8)$$

und man nennt die μ_{\pm} mit $\sigma_{\pm} = \exp(\mu_{\pm}T)$ die charakteristischen Exponenten. Weiterhin unterscheidet man stabile (μ_i rein imaginär) und instabile Fälle. Ein typischer Fall ist hier die Mathieu Gleichung

$$\ddot{y} + (\delta + 2\epsilon \cos 2t)y = 0 \quad (4.9)$$

mit der bekannten Bandstruktur der Stabilitätsbereiche in der (ϵ, δ) -Ebene.

In der Quantenmechanik ist es zweckmäßig, zunächst den *Floquet Operator* als Zeitentwicklungsoperator über eine Periode T zu definieren:

$$\hat{F}(t) = \hat{U}(t + T, t). \quad (4.10)$$

Dieser Operator ist unitär und seine Eigenwerte sind vom Betrag eins:

$$\hat{F}(t)\psi_{\alpha}(t) = e^{-i\epsilon_{\alpha}T/\hbar}\psi_{\alpha}(t) \quad (4.11)$$

mit reellen ϵ_{α} , sogenannten *Quasienergien*, und den *Quasienergie- oder Floquet-Zuständen* $\psi_{\alpha}(t)$.

Eine kurze Rechnung liefert eine wichtige Faktorisierung der $|\psi_{\alpha}(t)\rangle$. Mit

$$\hat{F}(t)\psi_{\alpha}(t) = \hat{U}(t + T, t)\psi_{\alpha}(t) = \psi_{\alpha}(t + T) = e^{-i\epsilon_{\alpha}T/\hbar}\psi_{\alpha}(t), \quad (4.12)$$

und dem Ansatz

$$\psi_{\alpha}(t) = e^{-i\epsilon_{\alpha}t/\hbar}\varphi_{\alpha}(t) \quad (4.13)$$

erhält man

$$\psi_{\alpha}(t + T) = e^{-i\epsilon_{\alpha}(t+T)/\hbar}e^{-i\epsilon_{\alpha}T/\hbar}\varphi_{\alpha}(t + T) \quad (4.14)$$

und durch Vergleich mit (4.12)

$$\varphi_{\alpha}(t + T) = \varphi_{\alpha}(t), \quad (4.15)$$

d.h. die Quasienergiezustände $\psi_{\alpha}(t)$ faktorisieren in einen Phasenfaktor und einen zeitperiodischen Anteil. Es gilt natürlich

$$\hat{H}(t)\psi_{\alpha}(t) = i\hbar\partial_t\psi_{\alpha}(t) \quad (4.16)$$

und damit

$$\hat{H}(t)e^{-i\epsilon_{\alpha}t/\hbar}\varphi_{\alpha}(t) = i\hbar\left(-\frac{i}{\hbar}\epsilon_{\alpha}e^{-i\epsilon_{\alpha}t/\hbar}\varphi_{\alpha}(t) + e^{-i\epsilon_{\alpha}t/\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\varphi_{\alpha}(t)\right) \quad (4.17)$$

oder

$$\left(\hat{H}(t) - i\hbar\partial_t\right)\varphi_{\alpha}(t) = \epsilon_{\alpha}\varphi_{\alpha}(t). \quad (4.18)$$

Die $\varphi_{\alpha}(t)$ sind also Eigenzustände von

$$\hat{K}(t) = \hat{H}(t) - i\hbar\partial_t \quad (4.19)$$

mit zeitperiodischen Randbedingungen. Der *Quasienergie-Operator* $\hat{K}(t)$ ist hermitisch.

Der erweiterte Phasenraum

In der klassischen Mechanik kann man Systeme mit explizit zeitabhängiger Hamiltonfunktion $H(t)$ durch einen Kunstgriff zeitunabhängig machen. Man führt dazu die Zeit t als neue Koordinate t' ein mit einem kanonischen Impuls $p_{t'}$ sowie eine neue Zeitvariable t . Die neue Hamiltonfunktion

$$K(p, q, p_{t'}, t') = H(p, q, t') + p_{t'} \quad (4.20)$$

liefert die kanonischen Bewegungsgleichungen

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial K}{\partial p} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \text{und} \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial q} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \quad (4.21)$$

d.h. genau die ‘normale’ Hamiltonschen Gleichungen. Zusätzlich haben wir

$$\frac{dt'}{dt} = \frac{\partial K}{\partial p_{t'}} = 1 \quad \text{und} \quad \frac{dp_{t'}}{dt} = -\frac{\partial K}{\partial t'} = -\frac{\partial H}{\partial t'}. \quad (4.22)$$

Die erste dieser Gleichungen liefert den (trivialen) Zusammenhang zwischen der fiktiven Zeit t und der richtigen Zeit t' . Die zweite Gleichung zeigt (mit $\partial_{t'} H = dH/dt'$), dass — bis auf eine irrelevante Konstante, die man durch die Wahl des Energienullpunktes zu Null machen kann — der kanonische Impuls $p_{t'}$ mit der negativen momentanen Energie zusammenfällt, d.h. $p_{t'} = -H = -E$.

Wir haben damit gezeigt, dass man explizit zeitabhängige Systeme mit einem Freiheitsgrad umformulieren kann als zeitunabhängige mit zwei Freiheitsgraden. d.h. der erweiterte Phasenraum¹ $(p, q, p_{t'}, t')$ ist vierdimensional. Ein Vorteil dieser Einbettung ist es, dass die Theoreme aus der Dynamik konservativer Systeme übernommen werden können. Darüberhinaus ist die Dynamik aber entschieden einfacher als die allgemeiner zweidimensionaler konservativer Systeme, denn die Entwicklung in der t' -Richtung ist simpel und der Wert der Konstanten K spielt keine Rolle für die Dynamik. In vielen Zügen entspricht unser System also einem System mit einem dreidimensionalen Phasenraum, man sagt auch, ein solches System habe ‘eineinhalb Freiheitsgrade’.

Wenn wir eine Quantisierung der erweiterten Hamiltonfunktion (4.20) durchführen, wenn wir also den klassischen Impuls p durch den Impulsoperator $-i\hbar\partial_q$ und entsprechend $p_{t'}$ durch den Operator $-i\hbar\partial_{t'}$ ersetzen, geht $K = H + p_{t'}$ in (4.20) über in den Quasienergieoperator $\hat{K}(t') = \hat{H}(t') - i\hbar\partial_{t'}$ (vgl. (4.19)).

Das Quasienergiespektrum

(a) Die Quasienergien sind nur definiert bis auf ein ganzzahliges Vielfaches von $\hbar\omega$ mit $\omega = 2\pi/T$. Eine einzelne Quasienergie ϵ_α ist daher Repräsentant einer ganzen Klasse

¹Mehr dazu in V. I. Arnold: *Mathematische Methoden der klassischen Mechanik* (Springer, 1988).

$\epsilon_\alpha + k\hbar\omega$ mit $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Stellvertretend für diese Klasse schreiben wir auch α' . Wir können einen Repräsentanten aus dieser Klasse in dem Intervall

$$-\frac{\hbar\omega}{2} < \epsilon_\alpha \leq \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (4.23)$$

der ersten Brillouinzone, auswählen. Die einem $\epsilon_\alpha + k\hbar\omega$ entsprechenden $|\varphi_\alpha\rangle$ Zustände sind

$$|\varphi_{\alpha,k}(t)\rangle = e^{-ik\omega t}|\varphi_\alpha(t)\rangle, \quad (4.24)$$

die ‘physikalischen’ Zustände $|\psi_\alpha(t)\rangle$ sind unabhängig von dem Index k .

(b) Im Falle zeitunabhängiger Systeme erscheinen die Energieeigenwerte E_n in einer natürlichen Ordnung, nämlich $E_n \leq E_{n+1}$, und man kann diese Ordnung dazu verwenden, die Eigenwerte zu numerieren. Für die Quasienergie ist dies nicht so einfach. Man erhält typischerweise eine Menge von ϵ_α in der ersten Brillouinzone und muß explizit eine Methode angeben, um die einzelnen Quasizustände mittels Indizes zu kennzeichnen. Man mache sich klar, dass die Quasienergien zum Beispiel schon im einfachen Fall mit einem äquidistantem Quasienergiespektrum mit Abständen $\hbar\omega_0$ und inkommensurablen Werten von ω_0 und ω in der ersten Brillouinzone dicht liegen!

(c) Von großer Bedeutung für die Dynamik ist auch die *Struktur des Quasienergiespektrums*. Man unterscheidet ein *Punktspektrum*, mit einer abzählbaren Menge von Quasienergien, ein *absolut stetiges (oder kontinuierliches) Spektrum* und ein *singulär stetiges Spektrum*, das z.B. lokalisiert auf einer Cantor-Menge (definiert als kompakt, nirgends dicht¹ und überabzählbar). Zudem können alle diese Spektralanteile simultan existieren. Eine Untersuchung der spektralen Eigenschaften eines Systems ist generell schwierig. Mehr dazu findet sich z.B. in dem Übersichtsartikel von Casati und Molinari².

Orthogonalität und Vollständigkeit

Ist \mathcal{H} der von den Eigenvektoren des ungestörten Systems \hat{H}_0 aufgespannte Hilbertraum, so läßt sich in dem um die Klasse \mathcal{T} der T -periodischen Funktionen erweiterten Hilbertraum $\mathcal{H} \otimes \mathcal{T}$ ein Skalarprodukt definieren:

$$\langle\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle \varphi_1(t) | \varphi_2(t) \rangle \quad (4.25)$$

($\langle \cdot | \cdot \rangle$ ist das Skalarprodukt in \mathcal{H}).

Das liefert die Orthonormalität der Quasienergiezustände

$$\langle\langle \varphi_{\alpha'} | \varphi_{\beta'} \rangle\rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{kk'} \quad (4.26)$$

¹Eine Menge heißt nirgends dicht, wenn in der Umgebung eines jeden Punktes dieser Menge eine offene Menge liegt, die nicht zu ihr gehört.

²G. Casati und L. Molinari, Prog. Theoret. Phys. Suppl. 88 (1989) 287.

und die Vollständigkeit

$$\sum_{\alpha k} \varphi_{\alpha k}^*(q, t) \varphi_{\alpha k}(q', t') = T \delta(q - q') \delta(t - t') \quad (4.27)$$

(dabei sind die Zeiten jeweils modulo T zu nehmen). Speziell für $t = t'$ gilt auch

$$\sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}^*(q, t) \varphi_{\alpha}(q', t) = T \delta(q - q'). \quad (4.28)$$

Wir können also einen beliebigen Zustandsvektor nach den Quasienergiezuständen entwickeln und daraus z.B. die Zeitevolution erhalten, ganz ähnlich dem Vorgehen im zeitunabhängigen System:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} e^{-i\epsilon_{\alpha} t/\hbar} |\psi_{\alpha}(t)\rangle \quad (4.29)$$

mit zeitunabhängigen Koeffizienten c_{α} , die durch die Anfangsbedingung festgelegt werden. Es sei noch einmal hervorgehoben, dass in (4.29) jeweils nur ein Repräsentant einer Klasse $\epsilon_{\alpha} + k\hbar\omega$ berücksichtigt werden muß.

Insgesamt ergibt sich also eine direkte Analogie zu dem bekannten Vorgehen für zeitunabhängige Systeme.

4.2 Parameterabhängigkeit

Wie in der klassischen Mechanik hat auch in der Quantenmechanik die Beschreibung zeitperiodischer Systeme im erweiterten Hilbertraum $\mathcal{H} \otimes \mathcal{T}$ den Vorteil, dass man Theoreme aus der Theorie zeitunabhängiger Systeme übernehmen kann. Beispiele dafür sind:

Das **Entartungstheorem** (J. von Neumann und E. Wigner):

Die Eigenwerte eines hermiteschen Operators \hat{A} sind bei Variation nur *eines* Systemparameters typischerweise nicht entartet, falls die Zustände der gleichen Symmetrieklasse angehören.

Zum Beweis reduziert man zunächst das System in der Umgebung einer Fastentartung zweier Zustände $|1\rangle$ und $|2\rangle$ durch ein Zweizustandssystem. Die Eigenzustände sind dann die Eigenwerte der 2×2 Matrix (a_{ik}) mit $a_{ik} = \langle i | \hat{A} | k \rangle$ und reellen a_{ii} :

$$a_{\pm} = \frac{1}{2} \left(a_{11} + a_{22} \pm \sqrt{(a_{11} - a_{22})^2 + 4|a_{12}|^2} \right). \quad (4.30)$$

Eine Entartung $E_+ = E_-$ erfordert dann das *gleichzeitige* Verschwinden von $(a_{11} - a_{22})$ und a_{12} , was typischerweise bei der Variation nur eines Parameters nicht erreicht wird. Ausgenommen sind Fälle, bei denen z.B. das Matrixelement a_{12} ohnehin verschwindet, etwa für zwei Zustände verschiedener Symmetrie oder für einen wechselwirkungsfreien Fall wie weiter unten diskutiert.

Das **Hellmann–Feynman Theorem**² Für die Parameterdifferentiation der Eigenwerte a eines hermiteschen Operators \hat{A} gilt

$$\frac{\partial a}{\partial \lambda} = \langle a | \frac{\partial \hat{A}}{\partial \lambda} | a \rangle. \quad (4.31)$$

Zum Beweis: $0 = \partial_\lambda \langle a | \hat{A} - a | a \rangle = \langle a | (\partial_\lambda \hat{A} - \partial_\lambda a) | a \rangle + 2\text{Re} \langle (\partial_\lambda a) | \hat{A} - a | a \rangle$, wobei der letzte Term verschwindet, da $|a\rangle$ Eigenvektor von \hat{A} zum Eigenwert a ist.

Wir wollen im folgenden die Anwendung dieser Theoreme auf zeitperiodische Systeme illustrieren und dabei gleichzeitig etwas über die Abhängigkeit der Quasienergien von den Parametern lernen. Wir betrachten dazu ein System $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t)$ unter dem Einfluß einer harmonischen Kraft:

$$V(q) = -fq \sin(\omega t + \phi), \quad (4.32)$$

d.h. wir haben drei Parameter f , ω und ϕ . Zunächst überlegen wir uns, dass die Quasienergien ϵ_α nicht von dem Winkel ϕ abhängen, denn ϕ entspricht nur einer Verschiebung des Zeitnullpunktes.

Wir wollen zunächst einmal untersuchen, wie der Erwartungswert der Energie \hat{H} in einem Quasienergiezustand $|\psi_\alpha\rangle$ mit der Quasienergie (gemittelt über eine Periode) zusammenhängt. Dazu berechnen wir zunächst

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_\alpha &= \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle \psi_\alpha(t) | \hat{H} | \psi_\alpha(t) \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle \varphi_\alpha(t) | \hat{H} | \varphi_\alpha(t) \rangle \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle \varphi_\alpha(t) | \hat{K} + i\hbar \partial_t | \varphi_\alpha(t) \rangle = \epsilon_\alpha + \langle \langle \varphi_\alpha(t) | i\hbar \partial_t | \varphi_\alpha(t) \rangle \rangle. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Eine Fourier–Entwicklung

$$\varphi_\alpha(q, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_k(q) e^{-ik\omega t} \quad (4.34)$$

ergibt mit $\sum_k \langle c_k | c_k \rangle = \langle \varphi_\alpha | \varphi_\alpha \rangle = 1$

$$\langle \hat{H} \rangle_\alpha = \epsilon_\alpha + \sum_k k\hbar\omega \langle c_k | c_k \rangle = \sum_k (\epsilon_\alpha + k\hbar\omega) \langle c_k | c_k \rangle, \quad (4.35)$$

d.h. die Energie akkumuliert in jeder harmonischem Mode gemittelt über deren Gewichte.

Eine Anwendung des Hellmann–Feynman Theorems auf die Quasienergien und den Parameter ω , also

$$\partial_\omega \epsilon_\alpha = \langle \langle \varphi_\alpha | \partial_\omega \hat{K} | \varphi_\alpha \rangle \rangle, \quad (4.36)$$

²Dieses Theorem geht eigentlich auf Ehrenfest zurück; wieder einmal eine Bestätigung von ‘Arnolds Law’; mehr dazu findet man unter http://www.phy.bris.ac.uk/people/Berry_mv/quotations.html.

läßt sich noch weiter auswerten. Substitution $t \rightarrow \tau = \omega t$ und Differentiation von $\hat{K}(\tau) = \hat{H}(\tau) - i\hbar\omega\partial_\tau$ nach ω

$$\left(\partial_\omega \hat{K}\right)_\tau = -i\hbar\partial_\tau = -\frac{i\hbar}{\omega}\partial_t. \quad (4.37)$$

liefert

$$\frac{\partial\epsilon_\alpha}{\partial\omega} = -\frac{i\hbar}{\omega} \langle\langle\varphi_\alpha|\frac{\partial}{\partial t}|\varphi_\alpha\rangle\rangle \quad (4.38)$$

und daher

$$\langle\hat{H}\rangle_\alpha = \epsilon_\alpha - \omega \frac{\partial\epsilon_\alpha}{\partial\omega}. \quad (4.39)$$

Wir können also aus der ω -Abhängigkeit der Quasienergie die Mittelwerte der Energie berechnen.

Weiterhin erhalten wir im Grenzfall $f \rightarrow 0$ das zeitunabhängige System \hat{H}_0 mit den Eigenwerten $E_n^{(0)}$ und

$$\epsilon_{\alpha'} = \epsilon_{\alpha k} = \epsilon_{\alpha 0} + k\hbar\omega = E_n^{(0)} + k'\hbar\omega = \epsilon^{(0)}(\omega) \quad \text{mit} \quad k' \in \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\}. \quad (4.40)$$

Diese ansteigenden ($k' > 0$) und abfallenden ($k' < 0$) geraden Linien $\epsilon^{(0)}(\omega)$ kreuzen, was z.B. für zwei dieser Linien schematisch in Abbildung 4.1 dargestellt ist. Je nach der Symmetrie der beiden Zustände wird diese Kreuzung bei der Frequenz ω_c für $f > 0$ aufgehoben oder nicht. In der Abbildung ist der Fall zweier Zustände der gleichen Symmetrieklasse dargestellt. Die Kreuzung der Zustände $\epsilon_1^{(0)}, \epsilon_2^{(0)}$ des feldfreien Systems wird aufgehoben und wir erhalten zwei Zustände, ϵ_+ und ϵ_- , die für Frequenzen ω in einigem Abstand von ω_c näherungsweise in $\epsilon_{1/2}^{(0)}$ übergehen.

Wenn man einen Parameter langsam genug ('adiabatisch') variiert, folgt ein Quasienergiezustand diesen Kurven, d.h. er bleibt ein Quasienergiezustand. Dies kann man ausnutzen, um Übergänge zu induzieren: Starten wir z.B. in dem Zustand $\epsilon_1^{(0)}$ für $f = 0$ und erhöhen langsam die Feldamplitude f , so entwickelt sich der Zustand in den Quasienergiezustand ϵ_- . Steigert man jetzt langsam die Frequenz ω über ω_c hinaus und senkt dann die Amplitude f wieder ab, so befindet man sich im Zustand $\epsilon_2^{(0)}$.

4.3 Der periodisch getriebene harmonische Oszillator

Der linear angetriebene harmonische Oszillator wurde in Abschnitt 3.1 ausführlich diskutiert. Insbesondere ergab sich eine direkte Korrespondenz zu dem analogen klassischen Problem. Für einen zeitperiodischen monochromatischen Antrieb

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \omega_0^2 \hat{q}^2) - \lambda \cos \omega t \hat{q} \quad (4.41)$$

kann man die Lösungen

$$\psi_n(q, t) = e^{i\phi(t)} \chi_n(q - \xi(t)). \quad (4.42)$$

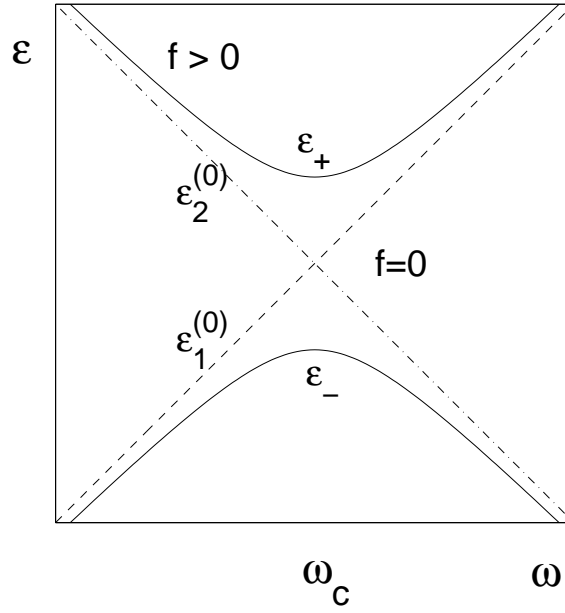


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der vermiedenen Kreuzung zweier Quasienergien aus der gleichen Symmetrieklasse bei Variation der Antriebsfrequenz ω . Die exakte Kreuzung bei ω_c für $f = 0$ wird für $f > 0$ aufgehoben.

mit

$$\hbar\phi(t) = \dot{\xi}(t)(q - \xi(t)) - E_n t - \int_0^t L(\tau) d\tau \quad (4.43)$$

direkt aus (3.20) übernehmen. Hier sind die χ_n die üblichen Wellenfunktionen des harmonischen Oszillators zu den Eigenwerten $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ und $\xi(t)$ ist eine Lösung der wohlbekannten klassischen Bewegungsgleichung

$$\ddot{\xi} + \omega_0^2 \xi = \lambda \cos \omega t. \quad (4.44)$$

Zur Konstruktion der Quasienergiezustände verwenden wir die periodische Lösung

$$\xi(t) = \frac{\lambda}{\omega_0^2 - \omega^2} \cos \omega t \quad (4.45)$$

für $\omega \neq \omega_0$. Mit

$$\frac{1}{T} \int_0^T L(\tau) d\tau = \frac{\lambda^2}{4(\omega_0^2 - \omega^2)} \quad (4.46)$$

läßt sich die Phase (4.43) schreiben als

$$\begin{aligned} \hbar\phi(t) &= \left[\dot{\xi}(t)(q - \xi(t)) + \int_0^t L(\tau) d\tau - \frac{t}{T} \int_0^T L(\tau) d\tau \right] \\ &\quad - \left[E_n - \frac{\lambda^2}{4(\omega_0^2 - \omega^2)} \right] t = \hbar\tilde{\phi}(t) - \epsilon_\alpha t. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Hier ist der erste Term manifest T -periodisch und wir erhalten die gesuchten Quasienergiezustände als

$$\psi_\alpha(q, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_\alpha t} e^{i\tilde{\phi}(t)} \chi_\alpha(q - \xi(t)). \quad (4.48)$$

mit $\alpha = 0, 1, 2 \dots$ und den Quasienergien

$$\epsilon_\alpha = \hbar\omega_0\left(\alpha + \frac{1}{2}\right) - \frac{\lambda^2}{4(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (4.49)$$

Das Quasienergiespektrum ist also ein äquidistantes Punktspektrum mit Abständen $\hbar\omega_0$, d.h. das Spektrum des zeitunabhängigen Operators \hat{H}_0 , verschoben um den konstanten Term $\lambda^2/4(\omega_0^2 - \omega^2)$.

Es sollte noch einmal darauf hingewiesen werden, dass jede dieser Quasienergien einen Repräsentanten der Klasse $\epsilon_\alpha + k\hbar\omega$, $k = 0, \pm 1, \dots$ darstellt, und dass das Punktspektrum (4.49) für nicht-kommensurable Frequenzen, d.h. irrationales Verhältnis ω/ω_0 , in der ersten Brillouinzone $[-\hbar\omega/2, \hbar\omega/2]$ *dicht* liegt.

Für den *resonanten* Fall $\omega = \omega_0$ existiert keine periodische Lösung von (4.44). Mit Hilfe der Lösung

$$\xi(t) = \frac{\lambda}{2\omega} t \sin \omega t \quad (4.50)$$

(mit $\xi(0) = \dot{\xi}(0) = 0$) läßt sich analog zu dem obigen Vorgehen der Floquet Operator konstruieren und man kann sich davon überzeugen, dass das Quasienergiespektrum in diesem Fall kontinuierlich (absolut stetig) ist³.

Man zeigt weiterhin, dass das System beliebig viel Energie aus dem Feld aufnimmt und die Amplituden beliebig groß werden, genau wie im klassischen Resonanzfall (vgl. (3.23)).

Freies Teilchen unter zeitperiodischer Kraft

Zuletzt wollen wir als einfachen Grenzfall des harmonischen Oszillators für $\omega_0 \rightarrow 0$ ein freies Teilchen im periodischen Feld $f(t) = \lambda \cos \omega t$ betrachten. Hier haben wir die periodische Lösung

$$\xi(t) = -\frac{\lambda}{\omega^2} \cos \omega t \quad (4.51)$$

und entsprechend zu (4.48) die Quasienergiefunktionen

$$\psi_\alpha(q, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon_\alpha t} e^{i\tilde{\phi}(t)} \chi_\alpha(q - \xi(t)) \quad (4.52)$$

mit $\epsilon_\alpha = E + \lambda^2/4\omega^2$. Die $\chi_\alpha(x)$ lösen die Schrödingergleichung des freien Teilchens

$$-\frac{\hbar^2}{2}\chi''(x) = E\chi(x) \quad \text{mit } 0 < E < \infty. \quad (4.53)$$

Das Quasienergiespektrum ist also in diesem Fall wie erwartet kontinuierlich. Die Quasienergiefunktionen folgen der Ausbreitung des Wellenpaketes (4.53), das zusätzlich eine Zitterbewegung mit der Antriebsfrequenz ω und Amplitude λ/ω^2 ausführt.

³G. A. Hagedorn, M. Loss, J. Slawny, J. Phys. A 19 (1986) 521.

4.4 Periodisch getriebene Zweizustandssysteme

Es ist sehr lehrreich, die Quasienergiezustände des periodisch angetriebenen Zweizustandssystems (hier geschrieben mit den Spinmatrizen)

$$\hat{K} = \frac{\hbar}{2} \omega_0 \hat{\sigma}_z + 2\hbar\lambda \cos(\omega t) \hat{\sigma}_x - i\hbar\partial_t \quad (4.54)$$

genauer zu untersuchen. Einerseits lassen sich hier typische Phänomene klar herausarbeiten, und andererseits finden sich auch eine Fülle von Anwendungen auf reale Atome in Strahlungsfeldern, die oft näherungsweise als Zweizustandssysteme behandelt werden können. Die gekoppelten Gleichungen für die Besetzungsamplituden der beiden Zustände

$$i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Delta/2 & f(t) \\ f(t) & +\Delta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}. \quad (4.55)$$

($\Delta = E_2 - E_1 = \hbar\omega_0$) und $f(t) = 2\hbar\lambda \cos \omega t$ wurde in Abschnitt (3.2) im Rahmen der Rotating-Wave Approximation (RWA) ‘gelöst’. Wie schon oben diskutiert, führt eine Transformation von (4.54) in das rotierende System

$$e^{i\omega t \hat{\sigma}_z/2} \hat{K}(t) e^{-i\omega t \hat{\sigma}_z/2} = \hat{H}^{\text{RWA}} + \hat{H}^{\text{cr}} - i\hbar\partial_t \quad (4.56)$$

mit dem Rotating-Wave Hamiltonoperator

$$\hat{H}^{\text{RWA}} = \frac{\hbar}{2} [(\omega_0 - \omega) \hat{\sigma}_z + 2\lambda \hat{\sigma}_x] \quad (4.57)$$

und dem gegenrotierenden (‘counter rotating’) Term

$$\hat{H}^{\text{cr}} = \lambda [\cos(2\omega t) \hat{\sigma}_x - \sin(2\omega t) \hat{\sigma}_y], \quad (4.58)$$

der in der RWA vernachlässigt wird.

Aus Gl. (3.25) und Gl. (3.33) ergibt sich mit $\delta = \omega - \omega_0$ und $\Omega = \sqrt{\delta^2 + 4\lambda^2}$

$$a_1^{\text{RWA}}(t) = e^{i\omega t/2} [c_+ e^{+i\Omega t/2} + c_- e^{-i\Omega t/2}] \quad (4.59)$$

$$a_2^{\text{RWA}}(t) = -\frac{1}{2\lambda} e^{-i\omega t/2} [(\delta + \Omega)c_+ e^{+i\Omega t/2} + (\delta - \Omega)c_- e^{-i\Omega t/2}].$$

Setzt man $c_+ = 0$ oder $c_- = 0$, so findet man die Floquet-Lösungen mit der Quasienergie

$$\epsilon_{\pm, k}^{\text{RWA}} = \frac{\hbar}{2} (\omega \pm \Omega) + k\hbar\omega \quad ; \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.60)$$

und den Quasienergiezuständen

$$\varphi_{\pm, k}^{\text{RWA}} = \frac{1}{\sqrt{2\Omega}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{\Omega \mp \delta} \\ \sqrt{\Omega \pm \delta} e^{i\omega t} \end{pmatrix} e^{ik\omega t}. \quad (4.61)$$

Wir wollen zunächst das Verhalten für kleine Feldstärke untersuchen, d.h. den Grenzfall $\lambda \rightarrow 0$. Für die Rabi-Frequenz gilt dann $\Omega \rightarrow |\delta| = |\omega - \omega_0|$ mit $\Omega \geq |\delta|$. Wir unterscheiden zwei Fälle:

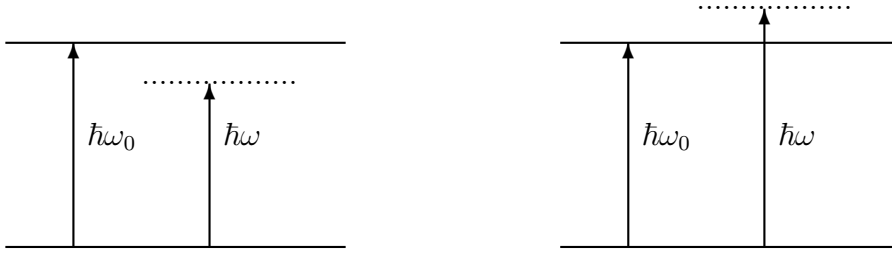


Abbildung 4.2: Rotverstimmung (links) und Blauverstimmung (rechts).

Für eine *rotverstimmte* Anregungsfrequenz $\omega < \omega_0$ ist $\delta < 0$ und

$$\begin{aligned}\epsilon_{+,0}^{\text{RWA}} &\longrightarrow \frac{\hbar}{2}(\omega + \omega_0 - \omega) = \frac{\hbar}{2}\omega_0 \\ \epsilon_{-,-1}^{\text{RWA}} &\longrightarrow \frac{\hbar}{2}(\omega - \omega_0 + \omega) - \hbar\omega = -\frac{\hbar}{2}\omega_0\end{aligned}\quad (4.62)$$

Für eine *blauverstimmte* Anregungsfrequenz $\omega > \omega_0$ ist $\delta > 0$ und

$$\begin{aligned}\epsilon_{-,0}^{\text{RWA}} &\longrightarrow \frac{\hbar}{2}(\omega - \omega + \omega_0) = \frac{\hbar}{2}\omega_0 \\ \epsilon_{+,-1}^{\text{RWA}} &\longrightarrow \frac{\hbar}{2}(\omega + \omega - \omega_0) - \hbar\omega = -\frac{\hbar}{2}\omega_0.\end{aligned}\quad (4.63)$$

Mit anwachsendem λ erhöht sich die Rabifrequenz Ω und die Quasienergien $\epsilon_{+,k}^{\text{RWA}}$ wachsen an, die $\epsilon_{-,k}^{\text{RWA}}$ fallen. Folglich wachsen die Quasienergieabstände bei Rotverstimmung an (Niveauabstoßung) und fallen bei Blauverstimmung (Niveauanziehung). Dies bezeichnet man auch als *dynamischen Starkeffekt* ('ac Stark shift'), der z.B. dazu führt, dass in räumlich inhomogenen Feldern Kräfte auf Atome ausgeübt werden (*optische Dipolkraft*). Das kann man z.B. dazu benutzen, um Atome in Fallen zu halten.

Bei weiterer Erhöhung der Feldamplitude λ kreuzen sich die anwachsenden $\epsilon_{+,k_1}^{\text{RWA}}$ und die fallenden $\epsilon_{-,k_2}^{\text{RWA}}$ bei

$$\epsilon = \frac{\hbar}{2}(\omega + \Omega) + k_1\hbar\omega = \frac{\hbar}{2}(\omega - \Omega) + k_2\hbar\omega, \quad (4.64)$$

also für

$$\Omega = (k_2 - k_1)\omega = n\omega \quad (4.65)$$

d.h. für $n = \sqrt{(1 - \omega_0/\omega)^2 + (2\lambda/\omega)^2}$. Unter diesen Bedingungen sind also die antreibende Frequenz und die interne Rabifrequenz in Resonanz (n 'Photonen' können resonant absorbiert werden). Wenn wir die Brillouinzonestruktur $-\hbar\omega/2 < \epsilon \leq +\hbar\omega/2$ des Quasienergiespektrums beachten, finden wir die Kreuzungen bei

$$\begin{aligned}n \text{ gerade} : & \epsilon^{\text{RWA}} = \hbar\omega/2 \pmod{\hbar\omega} \\ n \text{ ungerade} : & \epsilon^{\text{RWA}} = 0 \pmod{\hbar\omega}\end{aligned}$$

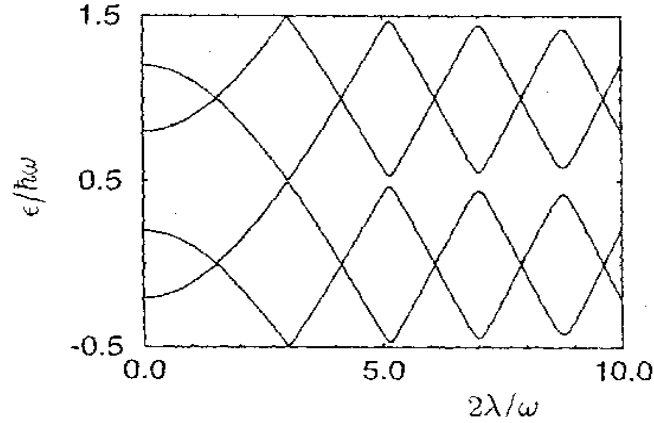


Abbildung 4.3: Quasienergiespektrum des periodisch getriebenen Zweizustandssystems für $\omega_0/\omega = 5.6$ (aus Holthaus⁴).

also am Rand (n gerade) oder in der Mitte (n ungerade) der Brillouinzone.

Diese Ergebnissen beruhen auf der Rotating-Wave Approximation. Wenn man darüber hinausgehen will, muß der gegenrotierende Term \hat{H}^{cr} im Hamiltonoperator (4.58) berücksichtigt werden. Dieser Term enthält die Frequenz 2ω und wir erwarten einen wesentlichen Einfluß für $\Omega = 2\omega$, d.h. an den Rändern der Brillouinzone. Abbildung 4.3 zeigt numerisch exakte Quasienergien⁴ in Abhängigkeit von $2\lambda/\omega$ für $\omega_0/\omega = 5.6$ (zur besseren Veranschaulichung sind zwei Brillouinzonen dargestellt) Wie man sieht folgen die numerischen Quasienergien für schwache Anregungsamplitude λ der RWA und zeigen mit wachsendem λ die erwarteten vermiedenen Kreuzungen an den Rändern der Brillouinzone. Man kann – ausgehend von der RWA – die Korrekturen der Quasienergie für $\Omega = 2n\omega$ in Störungstheorie n -ter Ordnung mit dem Störterm \hat{H}^{cr} berechnen⁴ und findet für $\Omega \approx 2\omega$ in erster Ordnung

$$\epsilon_{\pm} \approx \frac{\hbar}{2}\omega \pm \frac{\hbar}{2}\omega \sqrt{(\Omega - 2\omega)^2 + 4a^2} \quad \text{mod } \hbar\omega \quad (4.66)$$

mit

$$\hbar a = \langle\langle \varphi_{+,0} | \hat{H}^{\text{cr}} | \varphi_{-,1} \rangle\rangle = -\frac{\hbar\lambda}{2} \frac{\Omega + \delta}{\Omega}. \quad (4.67)$$

Damit ergibt sich eine Niveauabstoßung von $|\epsilon_+ - \epsilon_-| \approx \hbar\lambda(1 + \delta/\Omega)$. Entsprechend erhält man für $\Omega = 4\omega$ in Störungstheorie zweiter Ordnung

$$\epsilon_{\pm} \approx \frac{\hbar}{2}\omega \pm \frac{\hbar}{2}\omega \sqrt{(\Omega - 4\omega + b)^2 + 4c^2} \quad \text{mod } \hbar\omega \quad (4.68)$$

mit

$$b = \frac{\lambda^2}{\Omega} \frac{\Omega^2 + \delta^2 + 4\delta\Omega}{\Omega^2 - 4\omega^2}, \quad c = \frac{\lambda^3}{4\omega\Omega} \frac{\Omega + \delta}{\Omega - 2\omega} \quad (4.69)$$

⁴ M. Holthaus, *Periodisch angetriebene Quantensysteme: Konzepte und Perspektiven*, Habilitationsschrift, Univ. Marburg, 1996.

Für $\Omega = 6\omega$ erhält man analog in Störungstheorie dritter Ordnung

$$\epsilon_{\pm} \approx \frac{\hbar}{2}\omega \pm \frac{\hbar}{2}\omega \sqrt{(\Omega - 6\omega + b)^2 + 4d^2} \quad \text{mod } \hbar\omega \quad (4.70)$$

mit

$$d = \frac{\lambda^5}{16\omega^2\Omega} \frac{\Omega + \delta}{(\Omega - 2\omega)(\Omega - 4\omega)}.$$

Als Beispiel zeigt Abbildung 4.3 exakte, numerisch berechnete Quasienergien des Zweineiveausystems für $\omega_0/\omega = 5.6$. Dargestellt sind zwei Brillouinonen; die erste vermiedene Kreuzung bei $2\lambda/\omega \approx 3$ ist ein Beispiel für eine Resonanz $\Omega \approx 6\omega$. Man beachte die Verschiebung (*Bloch–Siegert–Shift*) der Position der Kreuzung um den Term b sowie das Anwachsen der Aufspaltung mit λ . Abbildung 4.4 zeigt einen Ausschnitt aus Abbildung 4.3 in einer Umgebung der $\Omega = 6\omega$ Resonanz. Verglichen werden die numerisch exakten Resultate mit der RWA und dem Resultat der Störungstheorie (4.70). Man beachte die Qualität dieser Näherung. Der Bloch–Siegert Shift (die RWA Quasienergien kreuzen bei $2\lambda/\omega \approx 3.85$, die exakten bei $2\lambda/\omega \approx 3$) und die Niveauabstoßung werden sehr gut wiedergegeben.

Die Aufhebung der Kreuzungen der RWA Quasienergien für $\Omega = n\omega$ mit geradem n und die Nicht-Aufhebung der Kreuzungen für ungerades n läßt sich auch aus Symmetrieüberlegungen verstehen (vgl. Abschnitt 4.2). Der Quasienergieoperator (4.54) ist invariant bezüglich der kombinierten Konjugation mit $\hat{\sigma}_z$ (also $\hat{K} \rightarrow e^{i\pi\hat{\sigma}_z/2}\hat{K}e^{-i\pi\hat{\sigma}_z/2}$; dies überführt wegen $e^{iu\hat{\sigma}_z/2}\hat{\sigma}_xe^{-iu\hat{\sigma}_z/2} = \cos u \hat{\sigma}_x - \sin u \hat{\sigma}_y$ den Operator $\hat{\sigma}_x$ in $-\hat{\sigma}_x$) und der Zeitverschiebung $t \rightarrow t + T/2$ ($T = 2\pi/\omega$) (dies überführt $\cos \omega t$ in $-\cos \omega t$).

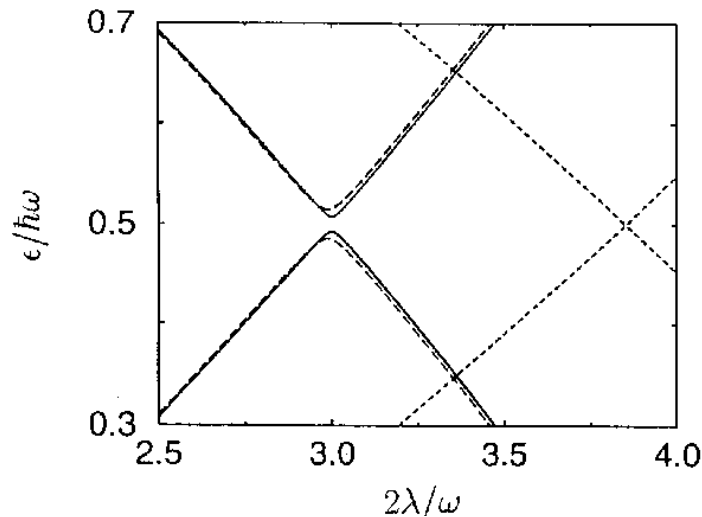


Abbildung 4.4: Ausschnitt aus Abbildung 4.3 im Vergleich mit RWA (---) und Störungstheorie (4.70) (—) (aus Holthaus⁴).

Die Quasienergiezustände (4.61) sind symmetrisch oder antisymmetrisch bezüglich dieser Operation:

$$\varphi_{\pm,k}^{\text{RWA}} \longrightarrow (-1)^k \varphi_{\pm,k}^{\text{RWA}}. \quad (4.71)$$

Die Kreuzungen von Zuständen φ_{\pm,k_1} und φ_{\pm,k_2} gleicher Parität, d.h. geradem $k_1 - k_2$, führt zu einer Aufhebung der Niveaureueung in voller Übereinstimmung mit den Überlegungen weiter oben.

Die Abstoßung der Quasienergien läßt sich in einer einfachen Weise störungstheoretisch aus der Lösung für den Grenzfall $\omega_0 = 0$ herleiten. Hier verifiziert man leicht, dass die Zustände

$$\varphi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(\mp i \frac{2\lambda}{\omega} \sin \omega t\right) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \omega \gg \omega_0 \quad (4.72)$$

Floquet Lösungen zu den (entarteten) Quasienergien $\epsilon_{\pm} = 0 \bmod \hbar\omega$ sind. In Störungstheorie erster Ordnung (gültig für starke Blauverstimmung $\omega \gg \omega_0$ oder starke Anregung $\sqrt{2\lambda\omega} \gg \omega_0$) findet man

$$\begin{aligned} \langle\langle \varphi_+ | \hat{\sigma}_z | \varphi_- \rangle\rangle &= \frac{1}{T} \int_0^T dt \langle \varphi_+ | \hat{\sigma}_z | \varphi_- \rangle \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T dt \exp\left(i \frac{4\lambda}{\omega} \sin \omega t\right) = J_0(4\lambda/\omega) \end{aligned} \quad (4.73)$$

und $\langle\langle \varphi_+ | \hat{\sigma}_z | \varphi_+ \rangle\rangle = \langle\langle \varphi_- | \hat{\sigma}_z | \varphi_- \rangle\rangle = 0$. Die Aufspaltung $\Delta\epsilon = |\epsilon_+ - \epsilon_-|$ ist also in dieser Näherung gegeben durch eine Besselfunktion:

$$\Delta\epsilon \approx \hbar\omega_0 |J_0(4\lambda/\omega)|. \quad (4.74)$$

Diese Näherungsformel zeigt das Anwachsen der Aufspaltung mit λ . Der in Abbildung 4.3 dargestellte Fall liegt allerdings außerhalb des Gültigkeitsbereiches dieser Näherung.

Aus der Theorie atomarer Stoßprozesse sollte bekannt sein, dass Übergänge zwischen elektronischen Zuständen bei Annäherung der Atome bevorzugt an den Kreuzungen der Potentialkurven der betreffenden Zustände (als Funktion des interatomaren Abstands) stattfinden (vgl. etwa die Landau-Zener Theorie der sogenannten Kurvenkreuzungsprozesse). Eine ganz analoge Situation findet man hier: Variiert man langsam (adiabatisch) die Feldamplitude, so sollten die Besetzungen der instantanen Quasienergiezustände konstant bleiben, wobei 'langsam' definiert ist in Relation zu dem Niveauabstand. Übergänge finden in der Hauptsache statt an den (Fast-)Kreuzungen der Quasienergien. Dies soll weiter unten noch genauer untersucht werden. Hier sei nur vorausgeschickt, dass man für die mittlere Wahrscheinlichkeit \bar{P} für das Auftreten von Übergängen zwischen den Zuständen 1 und 2 mit Hilfe des Hellmann-Feynman Theorems (vgl. Abschnitt 4.2) die sehr einfache Beziehung

$$\bar{P} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{4}{\hbar^2} \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \omega_0} \right)^2 \right) \quad (4.75)$$

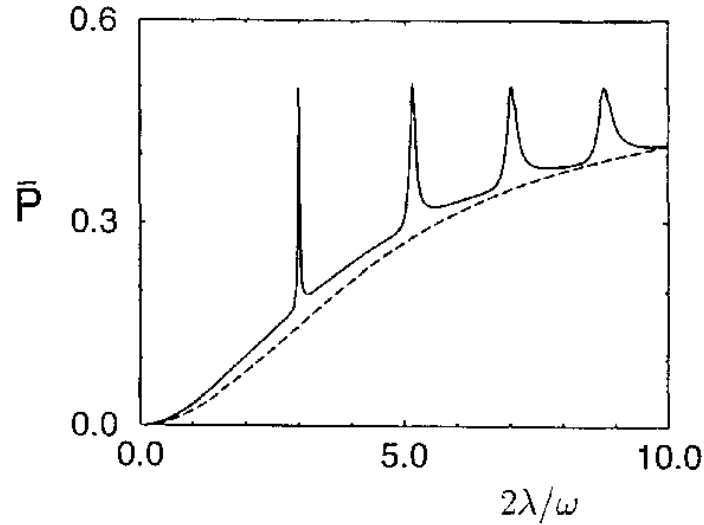


Abbildung 4.5: Mittlere Übergangswahrscheinlichkeit für das Zweiniveausystem aus Abb. 4.3. Zum Vergleich sind auch die Resultate der RWA (---) dargestellt. (aus Holthaus⁴).

herleiten kann⁵. Da an einer vermiedenen Kreuzung $\partial\epsilon/\partial\omega_0 = 0$ gilt (man betrachte z.B. die störungstheoretischen Formeln weiter oben), folgt aus Gleichung (4.75), dass dort die mittlere Übergangswahrscheinlichkeit maximal ist: $\bar{P} = 0.5$. Dieser Zusammenhang zwischen vermiedenen Kreuzungen und maximalen Übergangswahrscheinlichkeiten bleibt bestehen, wenn die Quasienergien als Funktionen anderer Parameter, z.B. der Kopplungsstärke, betrachtet werden (vgl. Holthaus, Fußnote auf Seite 46).

In Abbildung 4.5 wird für das Zweizustandssystem aus Abbildung 4.3 die mittlere Übergangswahrscheinlichkeit \bar{P} dargestellt im Vergleich mit einer entsprechenden Kurve für die RWA, die sich aus (4.75) und (4.60) als

$$\bar{P}^{\text{RWA}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\delta^2}{\Omega^2} \right) \quad (4.76)$$

berechnen läßt und keine resonante Überhöhung der Übergangswahrscheinlichkeiten zeigt (man mache sich hier noch einmal klar, dass die RWA beispielsweise für ein Zweiniveausystem mit zirkular polarisierter Anregung exakt ist).

Zum Abschluß sei noch darauf hingewiesen, dass die in diesem Abschnitt diskutierten Eigenschaften des Zweiniveausystems in sehr ähnlicher Form auch bei Mehrniveausystemen auftreten. In der Regel sind solche Phänomene real, man sollte aber auch beachten, dass bei numerische Rechnungen Effekte auftreten können, die ein Niveaureuzungsszenario vorgaukeln. Es schönes Beispiel für solche Artefakte findet man bei Holthaus⁴: Wird der angetriebene harmonische Oszillator aus Abschnitt 4.3 in einer endlichen Basis von beispielsweise $N = 20$ Eigenfunktionen des ungestörten Oszillators diagonalisiert, so findet man für diesen ‘trunkierten’ harmonischen Oszillator 20 Floquet Zustände. deren

⁵J. H. Shirley, Phys. Rev. 138B (1965) 979.

Quasienergiespektrum als Funktion des Stärkeparameters λ die in Abbildung 4.6 dargestellte interessante Struktur mit einer Vielzahl von vermiedenen Kreuzungen zeigt. Diese gesamte Struktur ist in den exakten Quasienergien *nicht* vorhanden und beruht einzig und allein auf der benutzten endlichen Basis.

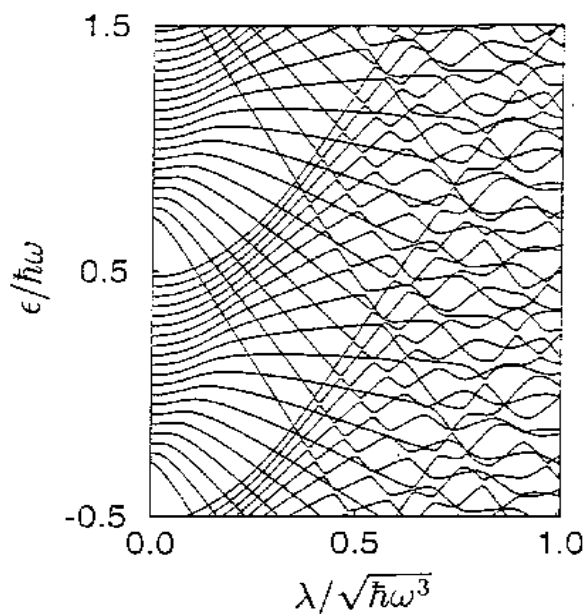


Abbildung 4.6: Quasienergiespektrum des trunkierten harmonischen Oszillators mit $\omega_0/\omega = 0.96$ und $N = 20$ (aus Holthaus⁴).

Aufgabe 4.1

Herleitung von Gleichung (4.66).

Aufgabe 4.2

Verifizieren Sie, dass die Zustände (4.72) wirklich Floquet Zustände sind und berechnen Sie in Störungstheorie erster Ordnung das Resultat von Gleichung (4.73).

Kapitel 5

Numerische Methoden

Die bisher untersuchten Beispiele (der angetriebene harmonische Oszillator und das Zweizustandssystem) konnten gewisse Aspekte der Quantendynamik zeitgetriebener Systeme illustrieren. Sie sind aber — eben wegen ihrer Einfachheit — auch untypisch. Im allgemeinen müssen die Systeme numerisch behandelt werden. Im folgenden sollen beispielhaft einige numerische Methoden zur Behandlung solcher Probleme erläutert werden, die zur Berechnung von Quasienergiespektren eingesetzt werden¹. Wir unterstellen hier also einen zeitperiodischen Hamilton-Operator mit Periode $T = 2\pi/\omega$, obwohl einige dieser Methoden auch für andere Fälle eingesetzt werden können. Weiterhin lassen sich alle diese Methoden auf Systeme mit mehreren (wenigen) Freiheitsgraden anwenden. Hier beschränken wir uns jedoch auf einen einzigen Freiheitsgrad.

5.1 Floquet Matrix

Da die Quasienergiezustände $\phi_\alpha(q, t)$ in der Zeit t periodisch sind (vgl. (4.13) und (4.15)) kann man sie in eine Fourier-Reihe entwickeln:

$$\phi_\alpha(q, t) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} c_\alpha^{(n)}(q) e^{in\omega t}. \quad (5.1)$$

Entwickelt man jetzt die $c_\alpha^{(n)}(q)$ in ein vollständiges System orthonormierter Basisfunktionen $y_m(q) = \langle q|y_m\rangle$

$$c_\alpha^{(n)}(q) = \sum_{m=1}^{\infty} c_{\alpha m}^{(n)} y_m(q), \quad (5.2)$$

so erhält man durch Einsetzen in die Floquet Gleichung

$$\hat{K}|\phi_\alpha(t)\rangle = \left(\hat{H} - i\hbar\partial_t\right)|\phi_\alpha(t)\rangle = \epsilon_\alpha|\phi_\alpha(t)\rangle \quad (5.3)$$

¹Mehr dazu findet man z.B. in J. A. Bayfield, *Quantum Evolution*, Appendix B

und mit $|y_m n\rangle = |y_m\rangle|n\rangle$, $|n\rangle = \exp(in\omega t)$ die Beziehung

$$\sum_{m,n} \hat{K} c_{\alpha m}^{(n)} |y_m n\rangle = \epsilon_\alpha \sum_{m,n} c_{\alpha m}^{(n)} |y_m n\rangle. \quad (5.4)$$

Bildet man Matrixelemente und benutzt die Orthogonalitätsrelation $\langle\langle y_{m'} n' | y_m n \rangle\rangle = \delta_{mm'} \delta_{nn'}$, so erhält man die Matrixgleichung

$$\sum_{m,n} \langle\langle y_{m'} n' | \hat{K} | y_m n \rangle\rangle c_{\alpha m}^{(n)} = \epsilon_\alpha c_{\alpha m'}^{(n')} \quad (5.5)$$

für die Eigenwerte ϵ_α , die Quasienergien. Mit $\hat{K} = \hat{H} - i\hbar\partial_t$ findet man

$$\langle\langle y_{m'} n' | \hat{K} | y_m n \rangle\rangle = \langle y_{m'} | \hat{H}^{(n'-n)} | y_m \rangle + n\hbar\omega \delta_{n'n} \delta_{m'm}, \quad (5.6)$$

wobei $\hat{H}^{(n'-n)}$ die Fourier-Transformierte von $\hat{H}(t)$ ist:

$$\hat{H}^{(n'-n)} = \frac{1}{T} \int_0^T dt \hat{H}(t) e^{i(n'-n)\omega t}. \quad (5.7)$$

Die Matrixgleichung (5.5) hat in vielen Fällen eine einfache Block-Tridiagonalstruktur, z.B. für harmonische Anregung

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 - 2\hbar\lambda \hat{V}(q) \sin(\omega t + \varphi) \quad (5.8)$$

(oft ist $\hat{V}(q) = \hat{q}$) gilt

$$\hat{H}^{n'-n} = \hat{H}_0 - i\hat{V} (\delta_{n',n+1} e^{i\varphi} - \delta_{n',n-1} e^{-i\varphi}) \quad (5.9)$$

und die \hat{K} -Matrix hat die Struktur

$$\hat{K} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 0 & \hat{W} & \hat{H}_0 - \hbar\omega & \hat{W}^\dagger & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & \hat{W} & \hat{H}_0 & \hat{W}^\dagger & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \hat{W} & \hat{H}_0 + \hbar\omega & \hat{W}^\dagger & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Spezielle numerische Methoden zur Berechnung der Eigenwerte solcher Matrizen nehmen Rücksicht auf diese Blockstruktur, z.B. die Matrix-Continued-Fraction (MCF) Methode²

²P. Hänggi, in *Quantum Transport and Dissipation*, ed. T. Dittrich et. al. (VCH-Verlag, 1998); F. Grossmann, P. Jung, T. Dittrich, P. Hänggi, *Z. Phys. B84* (1991) 315.

5.2 Die Split-Operator-Methode

Andere Methoden setzen an an der Zeitpropagation von Wellenfunktionen, also der numerischen Lösung der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\partial_t\psi(q, t) = \hat{H}\psi(q, t) = (\hat{T} + \hat{V})\psi(q, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(q, t)\right)\psi(q, t). \quad (5.11)$$

Weit verbreitet und effizient ist die *Split-Operator-Methode*, bei der der Zeitevolutionsoperator für einen kleinen Zeitschritt δ approximiert wird durch

$$\hat{U}(\delta) \approx e^{-i\hat{H}\delta/\hbar} \approx e^{-i\hat{T}\delta/2\hbar} e^{-i\hat{V}\delta/\hbar} e^{-i\hat{T}\delta/2\hbar}. \quad (5.12)$$

Die kinetische Energie \hat{T} und $\exp(-i\hat{T}\delta/2\hbar)$ sind diagonal in der Impulsdarstellung. Entsprechend sind \hat{V} und $\exp(-i\hat{V}\delta/\hbar)$ diagonal in der Ortsdarstellung. Diese Beobachtung führt zu einem numerischen Algorithmus, der sukzessive zwischen Orts- und Impulsdarstellung hin und her schaltet und dann jeweils die Operatoren $\exp(-i\hat{V}\delta/\hbar)$ oder $\exp(-i\hat{T}\delta/2\hbar)$ anwendet. Die Transformation zwischen den Darstellungen läßt sich sehr schnell mit Hilfe der Fast-Fourier-Transformation (FFT) durchführen.

5.3 Die (t,t')-Methode

Diese Zeitpropagationmethode beruht auf dem Formalismus des erweiterten Phasenraums (vgl. Abschnitt 4.1). Man führt die Zeit t als neue Koordinate t' ein (damit wird das System zeitunabhängig mit zwei Freiheitsgraden) und die Dynamik wird mit Hilfe einer neuen Zeitvariablen beschrieben, die wir hier wieder t nennen wollen. Der Hamilton-Operator ist jetzt

$$\hat{K}(q, t') = \hat{H}(q, t') - i\hbar\partial_{t'} \quad (5.13)$$

und die Schrödinger-Gleichung lautet

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q, t', t) = \hat{K}(q, t')\psi(q, t', t) \quad (5.14)$$

mit der (formalen) Lösung

$$\psi(q, t', t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{K}(q, t')(t - t_0)\right)\psi(q, t', t_0). \quad (5.15)$$

Man kann nun zeigen, dass

$$\psi(q, t) = \psi(q, t', t)|_{t'=t} \quad (5.16)$$

die 'normale' Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q, t) = \hat{H}(q, t)\psi(q, t) \quad (5.17)$$

löst. Das sieht man wie folgt: Mit (5.13) ergibt sich aus der Schrödinger-Gleichung (5.14)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t', t) = \hat{H}(q, t') \psi(q, t', t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \psi(q, t', t) \quad (5.18)$$

und folglich

$$i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t'} \right) \psi(q, t', t) = \hat{H}(q, t') \psi(q, t', t). \quad (5.19)$$

Andererseits liefert Differentiation von (5.16)

$$\frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t} = \frac{\partial \psi(q, t', t)}{\partial t} \Big|_{t'=t} + \frac{\partial \psi(q, t', t)}{\partial t'} \Big|_{t'=t} \quad (5.20)$$

was zusammen mit der vorangehenden Gleichung die Behauptung beweist. Weitere Hinweise zur einer effizienten numerischen Implementierung der (t, t') -Methode und ihrer Anwendung auf Probleme der Atom- und Molekülphysik findet man in der Literatur³.

5.4 Spektrale Methoden

Aus einer berechneten Zeitevolution eines (oder mehrerer) Wellenpakete lassen sich auf unterschiedliche Weise die Quasienergien und Quasizustände extrahieren.

5.4.1 Fourier-Transformation

Wir nehmen hier an, dass wir für ein zeitperiodisches System mit Periode T die Wellenfunktion zu den Zeiten $t = nT$ kennen, d.h. $\psi_n(q) = \psi(q, t = nT)$ sei bekannt. In Analogie zu Abschnitt 2.1.1 berechnen wir die Autokorrelationsfunktion

$$C_n = \int \psi_0^*(q) \psi_n(q) dq \quad (5.21)$$

und deren Fourier-Transformierte

$$C(\theta) = \sum_n C_n e^{in\theta}. \quad (5.22)$$

Stellt man andererseits die Anfangswellenfunktion als Superposition der Quasienergiezustände (4.13) dar:

$$\psi_0(q) = \sum_{\alpha} c_{\alpha} \phi_{\alpha}(q) \quad (5.23)$$

so gilt

$$\psi_n(q) = \sum_{\alpha} e^{in\theta_{\alpha}} c_{\alpha} \phi_{\alpha}(q), \quad (5.24)$$

³U. Peskin, N. Moiseyev, J. Chem. Phys. 99 (1993) 4590; N. Moiseyev, Comm. At. Mol. Phys. 31 (1995) 87.

wobei statt den Quasienergien ϵ_α die *Quasiwinkel* $\theta_\alpha = \epsilon_\alpha T/\hbar$ eingesetzt wurden. Die Fourier-Transformierte (5.22) läßt sich schreiben als

$$C(\theta) = \sum_{\alpha} p_{\alpha} \sum_n e^{in(\theta-\theta_{\alpha})} = 2\pi \sum_{\alpha} p_{\alpha} \delta(\theta - \theta_{\alpha}) \quad (5.25)$$

mit $p_{\alpha} = |c_{\alpha}|^2$.

Plottet man also $C(\theta)$, so erwartet man δ -Spikes an den Quasiwinkeln θ_{α} , deren Gewicht p_{α} durch die Positionierung des Anfangswellenpaketes bestimmt sind. Das ist aber so nur korrekt im extremen Langzeitlimit. Für alle endlichen Propagationszeiten überlagert sich jedem einzelnen Peak die Fourier-Transformierte des Zeitfensters, d.h. einer Kastenfunktion. Das erzeugt jeweils eine Serie von Nebenmaxima, die nur schwer von weiteren echten Peaks zu unterscheiden sind. Man kann diesen Effekt beseitigen, indem man bei der Fourier-Transformation (5.22) eine Fensterfunktion wie $g_n = (1 - \cos(2\pi n/N))/2N$ anbringt:

$$C(\theta) = \sum_n^N g_n C_n e^{in\theta}. \quad (5.26)$$

Gleichung (5.25) wird dann zu

$$C(\theta) = 2\pi \sum_{\alpha} p_{\alpha} G(\theta - \theta_{\alpha}). \quad (5.27)$$

wobei $G(\dots)$ die Fouriertransformierte der Fensterfunktion ist. Abbildung 5.1 zeigt ein Bei-

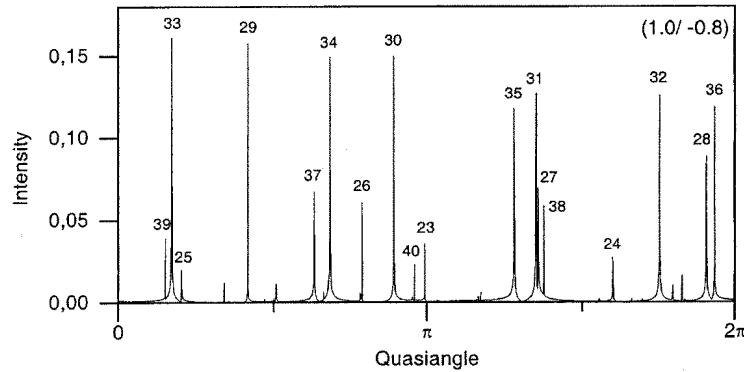


Abbildung 5.1: Fenster-Fourier-Transformierte einer Autokorrelationsfunktion für einen angetriebenen anharmonischen Oszillator.

spiel⁴ einer auf diese Weise numerisch berechneten Fouriertransformierten einer Autokorrelationsfunktion für einen angetriebenen anharmonischen Oszillator (siehe Kapitel 6).

⁴aus: H. J. Korsch, H. Wiescher: *Quantum Chaos in Computational Physics...*, ed. K. H. Hoffmann, M. Schreiber (Springer, 1996).

Typischerweise benötigt man zu einer solchen Rechnung eine Propagation über etwa 10^3 Perioden.

Abschließend sei noch bemerkt, dass man (nachdem man einen Peak bei einer Quasienergie θ_α lokalisiert hat) die Quasienergiezustände aus

$$\psi(q, \theta) = \sum_n g_n \psi_n(q) e^{in\theta} \quad (5.28)$$

mit $\theta = \theta_\alpha$ erhalten kann, denn es gilt in sehr guter Näherung

$$\psi(q, \theta_\alpha) \sim \phi_\alpha(q, 0). \quad (5.29)$$

5.4.2 Matrixdiagonalisierung

Für die Fourier-Methode benötigt man Daten einer Langzeitpropagation eines Wellenpaketes. Alternativ kann man natürlich auch ein System von orthogonalen Basisfunktionen $\varphi_k(q)$ als Anfangswellenfunktionen $\psi_k(q, t = 0)$ jeweils über eine Periode T propagieren und dann aus den so erhaltenen $\psi_k(q, T)$ die Überlappintegrale mit den $\phi_{k'}(q, 0)$ berechnen. Man erhält auf diese Weise die Floquet-Matrix $U_{k'k}(T)$, die man diagonalisieren kann. Ein Nachteil dieser Methode liegt in der im allgemeinen sehr großen Anzahl von Wellenfunktionen und Überlappintegralen, die zu berechnen sind.

5.4.3 Filter Diagonalisierung

Eine alternative Methode, die in jüngster Zeit entwickelt wurde, erlaubt eine Extraktion der Quasienergien (oder auch der Energieeigenwerte für zeitunabhängige Systeme oder ganz generell die Frequenzen einer Zeitreihe von Daten) mittels sogenannter *Filterfunktionen*. Hier soll die Methode anhand der Quasienergien (oder Quasiwinkel) dargestellt werden.

Im allgemeinen wählt man hier eine Basis, die durch Zeitpropagation einer geeignet gewählten Anfangswellenfunktion $|\psi(t = 0)\rangle$ erzeugt wird, nämlich

$$|\psi_\theta\rangle = \frac{1}{N+1} \sum_{n=0}^N e^{in\theta} |\psi(t = nT)\rangle, \quad (5.30)$$

wobei die θ Werte aus einem diskreten Satz $\{\theta_f | f = 1, \dots, f_{\max}\}$ annehmen können. Diese Werte kann man z.B. so wählen, dass sie einen bestimmten Winkelsektor für die Quasienergien belegen, oder man kann sie als Zufallswerte über den gesamten Winkelbereich von 2π verteilen. Man berechnet dann die Matrixelemente des Zeitentwicklungsoperators $U(NT)$ in der Basis der Filterfunktionen (5.30) und löst das verallgemeinerte Eigenwertproblem

$$\mathbf{U}\vec{\Psi} = \lambda\mathbf{S}\vec{\Psi} \quad (5.31)$$

mit $\lambda = e^{-iN\theta}$, wobei \mathbf{S} die Überlappmatrix der Filterfunktionen darstellt.

Wie bei der Fourier–Transformation in Abschnitt 5.4.1 hat man hier die Freiheit, den Anfangszustand $|\psi(t = 0)\rangle$ geeignet zu wählen, z.B. als ein Wellenpaket minimaler Unschärfe (2.35), d.h. einen kohärenten Zustand $|\psi(t = 0)\rangle = |p_0, q_0\rangle$, der lokalisiert in einem interessierenden Punkt (p_0, q_0) im klassischen Phasenraum. Die $|\psi(t = nT)\rangle$ und damit auch die Filterfunktionen (5.30) belegen dann die Folge der zeitpropagierten Zustände. Die Filter–Diagonalisierung verwendet die Autokorrelationen dieses Zustandes. Es ist plausibel, dass — wie bei der Fourier–Transformation in Abschnitt 5.4.1 — hauptsächlich diejenigen Quasienergiezustände gefunden werden können, die von dem (hier jedoch zeitpropagierten) Anfangszustand wesentlich populiert werden. Falls man in der Propagationszeit NT beschränkt ist, kann man mit gutem Erfolg mehrere Anfangswellenpakete propagieren und deren Kreuzkorrelationen.

In typischen Anwendungen zeigte sich, dass die einfach Autokorrelations–Filtermethode schon mit $N \approx 100$ Zeitperioden sehr gute Resultate liefert; unter Verwendung von Kreuzkorrelationen aus der Zeitpropagation von 5 Wellenpaketen ließ sich das Quasienergiespektrum auch aus Daten von $N = 20$ Zeitperioden berechnen⁵.

⁵M. Glück, H. J. Korsch, N. Moiseyev, Phys. Rev. E 58 (1998) 376.

