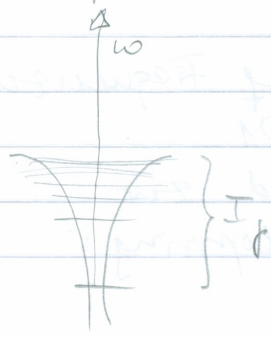


Rund um die Resonanz beobachten wir eine gleiche Besetzung zweier field-dressed states. Der Abstand entspricht der Rabi-Frequenz Ω .

Stabilisierung

Ist die Laserfrequenz sehr viel größer als alle relevanten inneratomaren Frequenzen, also z.B.



$\omega \gg I_p$ (ionization potential), (0)

so reicht es in erster Näherung aus, nur das gemittelte Potential zu betrachten;

d.h. in (□) nur

83

$$H^{(0)} = \frac{1}{T} \int_0^T H(t) dt \quad \text{und} \quad H^{(\pm 1)} = H^{(\pm 2)} = \dots \approx 0.$$

Wie sieht das zeitgemittelte Potential aus?

Am anschaulichsten wird dies nach der Pauli-Fierz bzw. Kramers-Heuniburger Transformation, startend von

$$H(t) = \frac{1}{2} (\vec{p} + \vec{A}(t))^2 + V(\vec{r}), \quad i\partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$

transformieren wir durch

$$|\psi\rangle = \exp\left(-\frac{i}{2} \int_0^t \vec{A}^2(t') dt'\right) \exp(-i\vec{\alpha}(t) \cdot \vec{p}) |\psi'\rangle \quad (*)$$

(mit $\vec{\alpha}(t) = \int_0^t \vec{A}(t') dt'$) auf

$$H'(t) = \frac{\vec{p}^2}{2} + V(\vec{r} + \vec{\alpha}(t)), \quad i\partial_t |\psi'\rangle = H' |\psi'\rangle.$$

Der erste Faktor in (*) transformiert $\frac{\vec{A}^2}{2}$ weg, der zweite entspricht dem Übergang auf das mit einem frei schwingenden Elektron unbewegten System (Translationsoperator).

Damit hat man also $\vec{V}(\vec{\alpha}, \vec{r})$, $\vec{\alpha} = \text{max}\{\vec{\alpha}\}$

$$H'^{(0)} = \frac{\vec{p}^2}{2} + \frac{1}{T} \int_0^T dt V(\vec{r} + \vec{\alpha}(t)),$$

d.h. man untersucht über das in abweichendem System schwingenden Potential des Ions.

Die Floquet-Gleichung (□) vereinfacht sich zu

84

$$\epsilon | \psi' \rangle = \left(\frac{p^2}{2} + \bar{V}'(\hat{x}, \hat{p}) \right) | \psi' \rangle,$$

d.h. alles spielt sich in nur einem einzigen Floquet-Block ab, sodass man lediglich eine stationäre Schrödinger-Gl. für das gemittelte Potential \bar{V}' zu lösen hat.

Mittelt man ein schwingendes Potential \bar{V} so erhält man für ausreichend große Auslenkungsamplituden \hat{x} im Falle linearer Polarisation ein Doppelmuldenpotential:

$$V(x) = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + \epsilon}}$$

$\epsilon = 1.9,$
 $I_p = 0.5$
 $\nu = 2.5$
 $\hat{x} = 10$

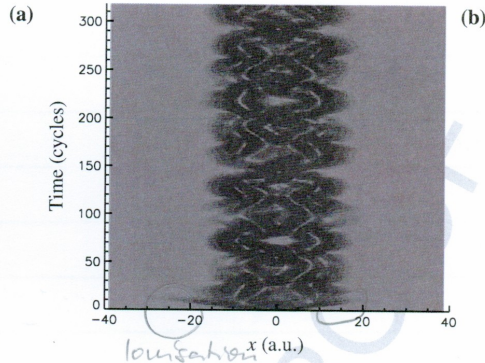
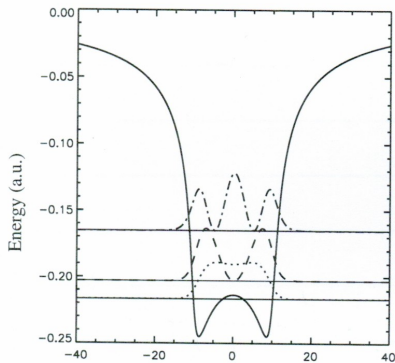


Fig. 7.8 Dynamic stabilization in a one-dimensional model atom. The cycle-averaged ionic potential in a reference frame where a freely oscillating electron is at rest is depicted in (a) (solid line). The three lowest energy levels in this “dressed” potential and the corresponding probability densities are also plotted. In (b) a shadowgraph of the probability density, obtained from the full solution of the time-dependent Schrödinger equation, is shown. The probability density remains trapped in the effective potential. Low-frequency Rabi-floppings are responsible for the oscillatory pattern. Note that the time scale of these oscillations is small compared to the laser period

Die Minima liegen ungefähr bei den laserinduzierten Umkehrpunkten $\pm \hat{x}$. Die Eigenzustände in diesem Potential sind die laser-induzierten Zustände.

Abbild. ops

Wird der Puls hochgefahren, so werden mehrere dieser Zustände besetzt, und ein Teil wird ionisiert. Die zeitliche Entwicklung einer Überlagerung von Zuständen führt zu Oszillationen („beating“, s.o.) der Wahrscheinlichkeitsdichte (zu sehen in (b)).

Erbringt es, die getrennten Zustände im zeitunveränderten Potential zu besetzen, so kann trotz steigender Laserintensität (steigendem Ω) die Ionisation abnehmen; daher die Bezeichnung „Stabilisierung“.

Stabilisierung wurde in numerischen Simulationen beobachtet, im Experiment allerdings nur für Rydbergzustände, da für diese die Bedingung (c) mit heutigen Lasern leicht zu erfüllen ist.

Adiabatisches Theorem

Im eben diskutierten Beispiel gehen wir von einem atomaren Bindungspotential durch Einschalten eines hochfrequenten Lasers (d.h. ansteigendes Ω) auf ein laser-gedrehtes Potential über, welches einem Doppelwundelpotential entspricht. Generell stellt sich bei solchen Problemen die Frage, wie die RH Population überführt wird. Wir betrachten zunächst, dass der Übergang zwischen

→ Beispiel: Stoßprozesse ($H + H^+ \rightarrow H_2^+$), chem. Reaktoren

den Potentials langsam stattfindet.

86

Betrachte

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle \quad H = H_0 + V(t) \\ V(0) = 0$$

Wir beschränken uns auf Systeme mit diskreten Zuständen $|a\rangle, |b\rangle, \dots$, die die Eigenzustände von H_0 seien.

Dann ist in der Energieeigenstellung

$$H(t) = \begin{pmatrix} E_a & V_{ab}(t) \\ V_{ba}(t) & E_b \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix}, \quad \langle a|V(t)|b\rangle = V_{ab}(t)$$

$$\text{und } \psi(t) = \begin{pmatrix} \langle a|\psi(t)\rangle \\ \langle b|\psi(t)\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_a(t) \\ \psi_b(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Betrachte nun die Transformation $U(t)$, welche den Ham. op. zur Zeit t diagonalisiert:

$$U^{-1}(t) H(t) U(t) = D(t)$$

$$\text{Da } i\partial_t |\psi(t)\rangle = H(t) \underbrace{U(t)U^{-1}(t)}_1 |\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow iU^{-1}(t) \partial_t |\psi(t)\rangle = \underbrace{U^{-1}(t) H(t) U(t)}_{D(t)} |\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow i\partial_t \underbrace{(U^{-1}(t) |\psi(t)\rangle)}_{|\psi'(t)\rangle} = D(t) |\psi'(t)\rangle + i \frac{\partial U^{-1}(t)}{\partial t} |\psi(t)\rangle$$

$$\Rightarrow i\partial_t |\psi(t)\rangle = D(t) |\psi(t)\rangle + i \frac{\partial u^{-1}(t)}{\partial t} u(t) |\psi(t)\rangle$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial t} (u^{-1}u) \Rightarrow D(t) |\psi(t)\rangle - i u^{-1}(t) \frac{\partial u(t)}{\partial t} |\psi(t)\rangle$$

also

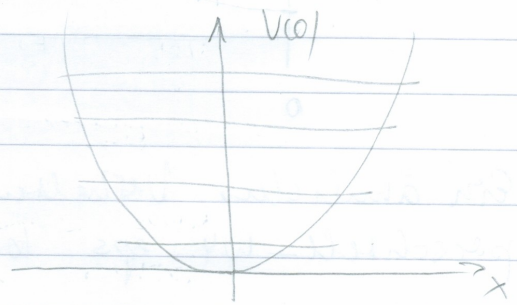
$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = \left(D(t) - i u^{-1}(t) \frac{\partial u(t)}{\partial t} \right) |\psi(t)\rangle \quad (*)$$

↑
diagonal,
adiabatisch

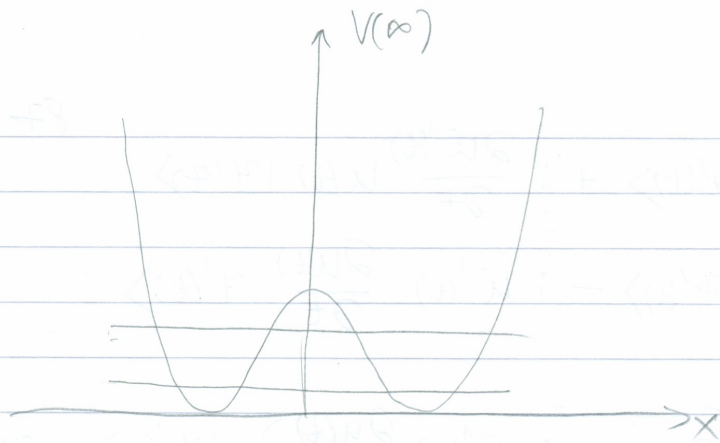
Gesamtgl. noch
exakt!

Wenn $H(t)$ sich nur langsam verändert, so auch $u(t)$ und $u^{-1}(t)$. Dann kann man den zweiten Term in (*) vernachlässigen. Ist also $|\psi(0)\rangle$ ein Eigenzustand von $H_0 = H(0)$, so wird $|\psi(t)\rangle$ sich so verhalten, dass es Eigenzustand des instantanen $H(t)$ bleibt.

Beispiel: $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$

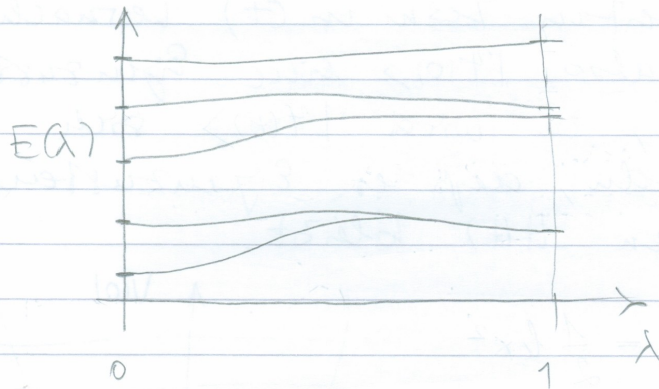


und $V(\infty) = k_1 x^4 - k_2 x^2$, $H(t) = H_0 + \lambda(t) (V(\infty) - V(x))$
 $\lambda(t)$ langsam von 0 auf 1 ändern.



88

Niedrigsten Zustände sind „quasi-entartet“, da Zustände $\sim x$ und $\sim -x$ quasi zur gleichen Energie führen. Trägt man also die Querspezienwerte als Funktion von λ auf, so erhält man folgendes Bild („Korrelationsdiagramm“):



Ein ähnliches Verhalten haben wir in pörschell-w4. eps beobachtet (Seite 79).

Nichtadiabatische Korrektur

Für ein Zweizustandensystem kann man den zweiten Term in (*) explizit ausrechnen:

mit $H(t) = \begin{pmatrix} \epsilon_a(t) & V_{ab}(t) \\ V_{ba}(t) & \epsilon_b(t) \end{pmatrix}$ ^{das ist auch langsam zeitveränderlich sein} finden wir für 89

die diagonalisierende Matrix $U(t)$

$$U^{-1}(t) H(t) U(t) = D(t)$$

$$U(t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} & -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} & \cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix}, \quad U^{-1} = U^\dagger \quad (\Delta)$$

und $D(t) = \begin{pmatrix} \epsilon_- & 0 \\ 0 & \epsilon_+ \end{pmatrix}$

$$\epsilon_{\pm} = \frac{1}{2} (\epsilon_a + \epsilon_b) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_a - \epsilon_b)^2 + 4|V_{ab}|^2}$$

$$\tan \theta = \frac{2|V_{ab}|}{\epsilon_a - \epsilon_b}, \quad 0 \leq \theta < \pi$$

$$V_{ba} = |V_{ba}| e^{i\phi}, \quad 0 \leq \phi < 2\pi$$

(vgl. Rabi-Rechnung Seite 74).

Setzt man (Δ) in $(+)$ ein, so erhält man

$$i\partial_t \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_- & 0 \\ 0 & \epsilon_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix} + \left\{ -iU^{-1} \frac{\dot{\theta}}{2} \begin{pmatrix} -\sin e^- & -\cos e^- \\ \cos e^+ & -\sin e^+ \end{pmatrix} \right.$$

$$\left. -iU^{-1} \frac{i\dot{\phi}}{2} \begin{pmatrix} -\cos e^- & +\sin e^- \\ \sin e^+ & \cos e^+ \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix}$$

$$U^{-1} = \begin{pmatrix} \cos e^+ & \sin e^- \\ -\sin e^+ & \cos e^- \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow i\dot{\theta}_x \begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_- & 0 \\ 0 & \epsilon_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix} + \left\{ -\frac{i\dot{\theta}}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \frac{\dot{\phi}}{2} \begin{pmatrix} \sin^2 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2} & 2\sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \\ 2\sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} & \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix} \quad 90$$

$$\sin^2 x - \cos^2 x = -\cos 2x$$

$$2\sin x \cos x = \sin 2x$$

$$\Rightarrow i\dot{\theta}_x \begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix} = \left\{ \begin{pmatrix} \epsilon_- & 0 \\ 0 & \epsilon_+ \end{pmatrix} - \frac{i\dot{\theta}}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{\dot{\phi}}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ -\sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} \psi_- \\ \psi_+ \end{pmatrix}$$

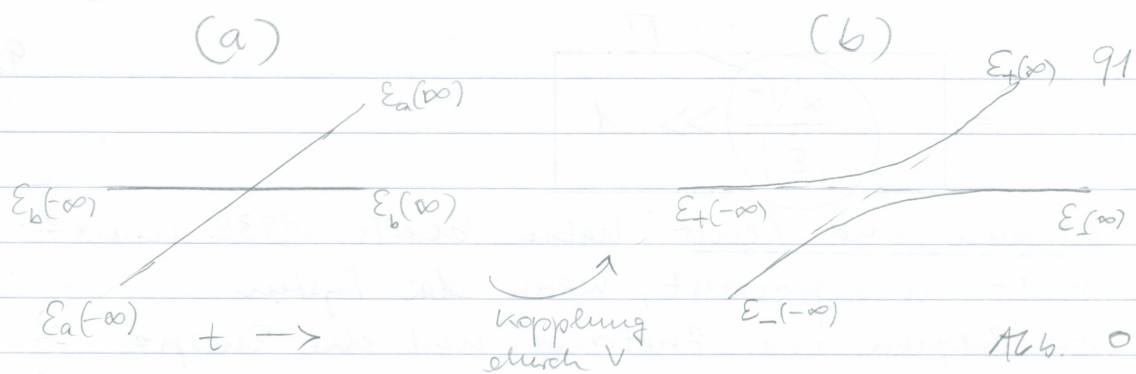
Wir wählen $\dot{\phi} = 0$. $|\epsilon_+ - \epsilon_-|$ bestimmt die langsamste Zeitskala des Diagonalanteils. Daher können wir als Adiabazitätsbedingung fordern

$$|\dot{\theta}| \ll \frac{|\epsilon_+ - \epsilon_-|}{2} \quad (5)$$

Im einfachsten Fall

$$\epsilon_a(t) = \epsilon_b + \dot{\epsilon} t$$

$$V_{ab} = V_{ba} = V$$



Da $\tan \theta = \frac{2V}{\dot{\epsilon}t}$ folgt

$$\frac{d}{dt} \tan \theta = \frac{\dot{\theta}}{\cos^2 \theta} = - \frac{2V}{\dot{\epsilon}t^2} = - \frac{2V}{(\epsilon_a - \epsilon_b)^2} \dot{\epsilon}$$

$$= (1 + \tan^2 \theta) \dot{\theta} = \left(1 + \frac{4V^2}{(\epsilon_a - \epsilon_b)^2} \right) \dot{\theta}$$

$$= \frac{(\epsilon_+ - \epsilon_-)^2}{(\epsilon_a - \epsilon_b)^2} \dot{\theta}$$

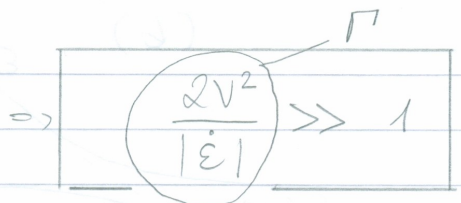
$$\Rightarrow \dot{\theta} = - \frac{2V\dot{\epsilon}}{(\epsilon_+ - \epsilon_-)^2}$$

und mit der Adiabathizitätsbedingung (3) folgt

$$\frac{2V|\dot{\epsilon}|}{(\epsilon_+ - \epsilon_-)^2} \ll \frac{|\epsilon_+ - \epsilon_-|}{2}$$

Au Kreuzungspunkt ist $\epsilon_a = \epsilon_b \Rightarrow \epsilon_+ - \epsilon_- = 2V$

$$\Rightarrow \frac{2\sqrt{|\dot{\epsilon}|}}{4V^2} \ll \sqrt{|\dot{\epsilon}|}$$



Landau und Zener haben bereits 1932 untersucht, was passiert, wenn das System zu Beginn im Zustand mit der Energie $E_a \approx E_-$ ist. Wie groß ist dann die Wahrscheinlichkeit P , dass durch die Kopplung beim Durchfahren der Kreuzung das System zu Zustand E_+ übergeht? Das Ergebnis lautet

$$P = 1 - p, \quad p = e^{-\pi \Gamma}$$

D.h. im adiabatischen Grenzfall ist $p \approx 0, P \approx 1$, und das System folgt wie man es aufgrund der Abb. 0a erwarten würde. Bei einem schnellen Durchfahren ist $p \approx 1, P \approx 0$, und das System bleibt auf E_- in Abb. 0b.

Beispiele:

Geometrische Phase (Berry phase)

- Paralleltransport
- Foucault-Pendel
- Aharonov-Bohm

Im adiabatischen Fall ist das System immer im Eigenzustand, aber wir wissen noch nichts über die Phase.

hängt von langsam zeitlich veränderlichen

Parametern $X(t), Y(t)$ ab:

ist schreiben hier der Einfachheit halber zunächst nur 2 Parameter

$$i \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H(X(t), Y(t)) |\psi\rangle \quad (\square)$$