12.3 Die Floquet-Methode

→ Zeitentwicklung für zeitlich periodischen Hamiltonian.

- Motivation:
  - Experimente mit Wechselfeldern, z.B. Ionisation von Atomen durch Wechselfelder, deren Frequenz $\omega \ll \frac{E_{ion.}}{\hbar}$
  - Zirkular polarisiertes Licht auf Festkörper $\xrightarrow{?}$ Strom → Magnetisierung (inverser Faraday-Effekt)
  - Große Anzahl periodischer Laserpulse (→ E II)

- Literatur:
  - Peter Hänggi: Driven quantum systems Chapter 5 (pp. 249-286) in T. Dittrich, P. Hänggi, G.-L. Ingold, B. Kramer, G. Schön und W. Zwerger (Hg.): Quantum Transport and Dissipation, Wiley-VCH, Weinheim 1998
  - Frank Großmann: Der Tunneleffekt in periodisch getriebenen Quantensystemen Dissertation, Augsburg 1992

Idee: Zeitliche Periodizität von H führt zu einer bestimmten Struktur von Lösungen der Schrögl, genau wie räumliche Periodizität von H zu bestimmter Struktur der H-Eigenfunktionen führt: Bloch-Theorem der FK-Physik — allerdings war Gaston Floquet historisch deutlich vor Felix Bloch!

→ 1847-1920
Gymnasiallehrer an versch. Orten
dann Prof. in Nancy

28. Vorl
21-7-17

Gegeben: $H(t) = H_0 + V(t)$; $V(t) = V(t+T)$ (34)

Gesucht: Lösungen $|\psi(t)\rangle$ der Schrödgl

$$\left(H(t) - i\hbar \frac{d}{dt}\right)|\psi(t)\rangle = 0 \qquad (35)$$

Floquet: Die Lösungen von (35) haben die Form

$$|\psi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar}|\phi_\alpha(t)\rangle \qquad (36)$$

„Floquet-Funktionen", dabei ist

$$|\phi_\alpha(t+T)\rangle = |\phi_\alpha(t)\rangle \quad , \qquad (37)$$

die Floquet-Moden $|\phi_\alpha(t)\rangle$ sind also T-periodisch. Die Quasi-Energie ε_α kann eingeschränkt werden auf den Bereich

$$-\frac{\hbar\omega}{2} \le \varepsilon_\alpha \le \frac{\hbar\omega}{2} \; ; \; \omega = \frac{2\pi}{T} \qquad (38)$$

(„1. Brillouin-Zone")

Die Quasi-Energien sind Eigenwerte des (hermiteschen) Operators

$$\mathcal{H}(t) := H(t) - i\hbar\frac{d}{dt} \qquad (39)$$

Leicht nachzurechnen:

$$\mathcal{H}(t)|\phi_\alpha(t)\rangle = \varepsilon_\alpha|\phi_\alpha(t)\rangle \qquad (40)$$

Allerdings: Auch

$$|\phi_{\alpha'}(t)\rangle = |\phi_{\alpha n}(t)\rangle = e^{in\omega t}|\phi_\alpha(t)\rangle \qquad (41)$$

löst (40) mit

$$\varepsilon_{\alpha'} = \varepsilon_{\alpha n} = \varepsilon_\alpha + \hbar\omega n \qquad (42)$$

und ist auch T-periodisch → Einschränkung (38) sinnvoll.

Der Clou: (40) sieht formal genauso aus wie die stationäre Schrgl eines zeitunabhängigen Hamiltonians; alle Methoden, die man aus der stationären QM kennt, können übernommen werden.

Eine moderate Dosis Formalismus sichert das.

$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}^{+}(t)$ arbeitet auf einem zusammengesetzten Hilbertraum $R \otimes T$

↑ periodisch in t

Raum, auf dem H_0 wirkt; z.B. für Bewegung in einer Dimension $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, also quadratintegrable Funktionen einer reellen Variablen, wählen wir als Beispiel, wann immer nötig.

Skalarprodukt in R, z.B. für Eigenzustände von H_0

$$H_0 | \varphi_n \rangle = E_n | \varphi_n \rangle \tag{43}$$

$$\langle \varphi_n | \varphi_m \rangle = \delta_{nm} \tag{44}$$

Die „Fourier-Vektoren" $|n\rangle$ in T schreiben sich in „t-Darstellung" $\langle t | n \rangle = e^{in\omega t}$, mit Skalarprodukt

$$(m, n) = \frac{1}{T} \int_0^T dt\, e^{i(n-m)\omega t} = \delta_{nm} \tag{45}$$

und das Skalarprodukt im zusammengesetzten Hilbertraum $R \otimes T$:

$$\langle\langle \phi_{\alpha'}(t) | \phi_{\beta'}(t) \rangle\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \phi_{\alpha'}^{*}(x,t)\, \phi_{\beta'}(x,t)$$

$$= \delta_{\alpha'\beta'} = \delta_{\alpha\beta}\, \delta_{mn} \tag{46}$$

In Analogie zur stationären QM gilt dann

Die Eigenfunktionen /-vektoren von $\mathcal{H}(t)$ bilden ein VONS in $\mathcal{R}\otimes\mathcal{T}$:

$$\sum_\alpha \sum_n \phi^*_{\alpha n}(x,t)\,\phi_{\alpha n}(y,t') = \delta(x-y)\,\delta(t-t') \qquad (47)$$

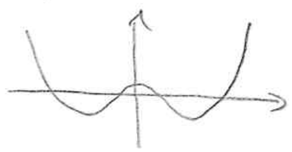
und für eine feste Zeit ($t=t'$) bilden diese Floquet-Moden der 1. BZ $|\phi_{\alpha 0}\rangle = |\phi_\alpha\rangle$ ein VONS in $\mathcal{R}$:

$$\sum_\alpha \phi^*_\alpha(x,t)\,\phi_\alpha(y,t) = \delta(x-y) \qquad (48)$$

Ungewohnt: $H=H(t) \Rightarrow$ Energie <u>nicht</u> erhalten; über eine Periode gemittelter Erwartungswert von $H(t)$ im Zustand $|\psi_\alpha(t)\rangle$ kann berechnet werden; hier nicht von Interesse.

Anwendungsbeispiel (Diss. Großmann)

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \alpha x^2 + \beta x^4$$



$$V(t) = -Sx\sin(\omega t+\phi) \qquad (49)$$

Getriebene Doppelmulde („geschaukelt"). Wie wirkt sich Antrieb auf den Tunneleffekt zwischen Zuständen in den beiden Minima aus?
→ Großmann et al, Coherent destruction of tunneling, PRL <u>67</u>, 516 (1991)

<u>Die Zeitentwicklung</u>

... ist etwas komplizierter als für zeitunabhängiges H, aber nicht viel.
Betrachte den <u>Propagator</u> $K(t,t_0)$; def. durch

$$|\psi(t)\rangle = K(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle\,; \quad K(t_0,t_0)=1 \qquad (50)$$

Wegen $H(t+T) = H(t)$ spielt der Propagator über eine Periode eine Sonderrolle. Es gilt

$$K(nT,0) = \left[K(T,0)\right]^n \qquad (51)$$

Diese Identität ist für zeitunabhängiges H trivial; hier muss man sie beweisen:

$$K(nT,0) = \mathcal{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^{nT} dt\, H(t)\right]$$

Zeitordnungsoperator, vgl z.B. A.L. Fetter, J.D. Walecka: Quantum Theory of Many-Particle Systems, § 6 für detaillierte Diskussion

$$= \mathcal{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{n}\int_{(k-1)T}^{kT} dt\, H(t)\right]$$

$$\overset{H(t+T)=H(t)}{=} \mathcal{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{n}\int_0^{T} dt\, H(t)\right]$$

[Alle Summanden im exp gleich, dann kommutieren sie auch, und dann gilt $e^{A+B} = e^A e^B$.]

$$= \mathcal{T} \prod_{k=1}^{n} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^{T} dt\, H(t)\right]$$

[Alle Terme des Produkts sind gleich, also kann man auch jeden einzeln zeitordnen.]

$$= \prod_{k=1}^{n} \mathcal{T} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^{T} dt\, H(t)\right] = \left[K(T,0)\right]^n \qquad (52)$$

Zeittranslationsinvarianz

$$\Rightarrow \quad K(t+T,T) = K(t,0) \qquad (53)$$

und das bietet auf einfache Art die Möglichkeit, in jede Periode hineinzuschauen:

$$K(nT+t,0) = K(t,0)\,K(nT,0) = K(t,0)\,\left[K(T,0)\right]^n \quad (54)$$

Wenn es gelingt, $K(T,0)$ in Diagonalform zu bringen, kann man die Langzeit-dynamik eines Anfangszustand „stroboskopisch" verfolgen.

29. Vorl. 25-7-17

<u>Propagation eines beliebigen Anfangszustands</u>

Entwickle $|\psi(0)\rangle$ nach Floquet-Moden

$$|\psi(0)\rangle = \sum_\alpha c_\alpha |\phi_\alpha(0)\rangle; \quad c_\alpha = \langle\phi_\alpha(0)|\psi(0)\rangle \quad (55)$$

(geht wg Vollständigkeit (48)).
Die Floquet-Funktionen $|\psi_\alpha(t)\rangle$ sind Lösungen der Schrödgl (35) und stimmen zur Zeit $t=0$ mit den Floquet-Moden $|\phi_\alpha(t)\rangle$ überein (36); also entwickelt sich (55) gemäß

$$|\psi(t)\rangle = \sum_\alpha c_\alpha e^{-i\varepsilon_\alpha t/\hbar}|\phi_\alpha(t)\rangle \quad (56).$$

Wir brauchen also noch die ε_α und die $|\phi_\alpha(t)\rangle$. Die erhalten wir (ggfs numerisch) aus der ...

<u>Floquet-Matrix</u>

Da die Floquet-Moden $|\phi_\alpha(t)\rangle$ T-periodisch sind, können sie in eine Fourierreihe entwickelt werden. (FK-Physik: Da die Blochfaktoren gitterperiodisch sind, können sie „nach reziproken Gittervektoren" entwickelt werden.)

$$|\phi_\alpha(t)\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\omega t}\,\underbrace{|c_\alpha^n\rangle}_{\text{zeitunabhängig}} \quad (57)$$

Die zeitunabhängigen $|C_\alpha^n\rangle$ entwickelt man nach einem geeigneten VONS, z. B. nach den H_0 - Eigenvektoren (43)

$$|C_\alpha^n\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} C_{\alpha k}^n |\varphi_k\rangle \; ; \quad C_{\alpha k}^n = \langle\varphi_k|C_\alpha^n\rangle \tag{58}$$

$$\Rightarrow |\phi_\alpha(t)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_{\alpha k}^n \, e^{in\omega t} |\varphi_k\rangle \tag{59}$$

Das einsetzen in die Floquet - Eigenwertgleichg (40)

$$\Rightarrow \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{H}(t)\, C_{\alpha k}^n \, e^{in\omega t} |\varphi_k\rangle$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \varepsilon_\alpha C_{\alpha k}^n \, e^{in\omega t} |\varphi_k\rangle \tag{60}$$

Wir fassen die Fourier Vektoren $|m\rangle$; $\langle t|m\rangle = e^{im\omega t}$ und die H_0-EV zusammen, $|\varphi_k\rangle|m\rangle =: |\varphi_k m\rangle$ und multiplizieren (60) von links mit $\langle\varphi_j m|$. Skalarprodukt à la (46) liefert

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \langle\langle \varphi_j m | \mathcal{H}(t) | \varphi_k n \rangle\rangle \, C_{\alpha k}^n = \varepsilon_\alpha C_{\alpha j}^m \tag{61}$$

Wegen der T-Periodizität von $H(t)$ gibt es eine Fourierzerlegung mit Koeff'n

$$H^{m-n} = \frac{1}{T}\int_0^T dt \; H(t)\, e^{-i(m-n)t} \tag{61}$$

Wir berechnen das Matrixelement auf der linken Seite von (61)

$$\langle\langle \varphi_j m | \overset{H(t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial t}}{\mathcal{H}(t)} | \varphi_k n \rangle\rangle \qquad \langle t|n\rangle = e^{in\omega t}, \quad \frac{\partial}{\partial t}|n\rangle = in\omega|n\rangle$$

$$= \frac{1}{T}\int_0^T dt \, \langle\varphi_j| \big(H(t) + n\hbar\omega \mathbb{1}\big) |\varphi_k\rangle \, e^{i(n-m)\omega t}$$

$$= \langle \varphi_j | H^{m-n} | \varphi_k \rangle + n\hbar\omega \, \delta_{jk} \delta_{nm}$$

$$=: \langle\langle \varphi_j m | \mathcal{H}_F | \varphi_k n \rangle\rangle \qquad (62)$$

... ein Element der Floquetmatrix. Diese steht in der Eigenwertgleichung

$$\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \langle\langle \varphi_j m | \mathcal{H}_F | \varphi_k n \rangle\rangle \, C^n_{\alpha k} = \varepsilon_\alpha C^m_{\alpha j} \qquad (63)$$

deren Lösung uns die Quasienergien ε_α und die Entwicklungskoeff'n $C^n_{\alpha k}$ liefert, die wir brauchen, um die Floquet-Moden $|\phi_\alpha(t)\rangle$ (59) zu bestimmen, aus denen sich die Zeitentwicklung (56) des beliebigen Anfangszustands (55) ergibt.

<u>Einfachster Fall: harmonische Zeitabhängigkeit</u>

$$H(t) = H_0 - 2\hbar\lambda V \sin(\omega t + \varphi) \qquad (64)$$

(z.B. $V = x$ in der Großmannschen Dissertation, wo H_0 die symmetrische x^2-x^4-Doppelmulde ist.)
Dann ist die Fourierzerlegung von H

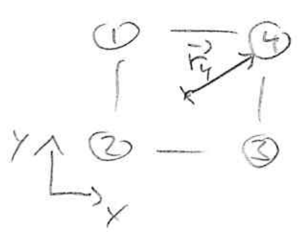
$$H^{m-n} = H_0 \delta_{mn} + i\hbar\lambda V \left(\delta_{m,n+1} e^{i\varphi} - \delta_{m,n-1} e^{-i\varphi} \right). \qquad (65)$$

Bezüglich der „Fourier-Indices" n, m ist dann die Floquet-Matrix tridiagonal, mit $n\hbar\omega$ (als einem Summanden, vgl. (62)) auf der Diagonalen und konstanten Elementen auf der Nebendiagonalen.

Wenn nun H_0 und V auf dem gleichen endlichdimensionalen Hilbertraum wirken, z.B. mit Dimension D, dann kann man die Floquet-Matrix wie folgt in $D \times D$-Blöcke teilen:

$$
\begin{pmatrix}
\ddots & & & & & \\
& H_0 - 2\hbar\omega \mathbb{1} & i\hbar\lambda V e^{i\varphi} & 0 & 0 & 0 \\
& -i\hbar\lambda V e^{-i\varphi} & H_0 - \hbar\omega \mathbb{1} & i\hbar\lambda V e^{i\varphi} & 0 & 0 \\
& 0 & -i\hbar\lambda V e^{-i\varphi} & H_0 & i\hbar\lambda V e^{i\varphi} & 0 \\
& 0 & 0 & -i\hbar\lambda V e^{-i\varphi} & H_0 + \hbar\omega \mathbb{1} & i\hbar\lambda V e^{i\varphi} \\
& 0 & 0 & 0 & -i\hbar\lambda V e^{-i\varphi} & H_0 + 2\hbar\omega \mathbb{1} \\
& 0 & 0 & 0 & 0 & -i\hbar\lambda V e^{-i\varphi} & \ddots
\end{pmatrix} \qquad (66)
$$

Beispiel („sehr einfach") Bachelorarbeit Dag Hering (TIa, 2017) 4er-Ring im zirkular polarisierten $\vec{E}$-Feld; Einteilchenzustände



$$H_0 = J \sum_{i=1}^{4} \left(c_{i+1}^\dagger c_i + c_i^\dagger c_{i+1} \right) + \sum_{i=1}^{4} (-1)^i a\, c_i^\dagger c_i$$

$$H_1(t) = \sum_{i=1}^{4} \varepsilon_i c_i^\dagger c_i \; ; \quad \varepsilon_i = -\vec{E} \cdot \vec{r}_i \qquad (67)$$

$$\vec{E} = E_0 \begin{pmatrix} \cos\omega t \\ \sin\omega t \end{pmatrix}$$

→ Anregung von Strömen durch zirkular polarisiertes Licht in einem „Bandisolator". Der a-Term sorgt gerade für eine Lücke im Spektrum. Größere Systeme kann man später immer noch einmal anschauen. Als Matrix:

$$H_0 = \begin{pmatrix} -a & J & 0 & J \\ J & a & J & 0 \\ 0 & J & -a & J \\ J & 0 & J & a \end{pmatrix} \quad H_1 = \begin{pmatrix} f_1(t) & & & 0 \\ & f_2(t) & & \\ & & f_3(t) & \\ 0 & & & f_4(t) \end{pmatrix}$$

periodisch, keine [illegible] auszurechnen

30. Vorlesg. 28-7-12 (75 min.)

Stromoperator-Erwartungswert ....