

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science

**Floquet-Theorie, Erwartungswerte und
zweite Quantisierung von periodisch
getriebenen quantenmechanischen
Oszillatoren**

Ismael Abu-Nada
geboren in Dortmund

2018

Lehrstuhl für Theoretische Physik II
Fakultät Physik
Technische Universität Dortmund

Erstgutachter:	Prof. Dr. Erstgutachter
Zweitgutachter:	Prof. Dr. Zweitgutachter
Abgabedatum:	

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Floquet-Theorie des getriebenen harmonischen Oszillators	2
2.1	Grundlagen	2
2.1.1	Zeitlich gemittelter Erwartungswert der Energie \bar{H}_n	3
2.2	Allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung	4
2.3	Identifizierung der Quasienergien ϵ_n und der Floquet-Moden $\Phi_n(x, t)$	6
2.3.1	Quasienergien für eine sinusoidale Treibkraft	6
2.3.2	Quasienergien für eine beliebige periodische Treibkraft $S(t)$	7
3	Berechnung von Erwartungswerten	8
3.1	Zeitabhängige Erwartungswerte des Ortes	8
3.2	Zeitabhängige Erwartungswerte des Impulses	10
3.3	Heisenberg-Unschärferelation	11
3.4	Zeitabhängiger Erwartungswert der Energie	11
3.5	Durchschnittlicher Erwartungswert der Energie	12
4	Zwei gekoppelte getriebene harmonische Oszillatoren	13
4.1	Die Schrödinger-Gleichung mit unabhängigen Hamilton-Operatoren	13
4.2	Unitäre Variablentransformation und allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung	14
4.3	Erwartungswerte	17
4.3.1	Zeitabhängige Erwartungswerte des Ortes	18
4.3.2	Zeitabhängige Erwartungswerte des Impulses	19
4.3.3	Erwartungswerte der Energie	19
5	Zweite Quantisierung	22
6	Zusammenfassung und Ausblick	23
A	Ein Anhangskapitel	24
	Literatur	25

1 Einleitung

2 Floquet-Theorie des getriebenen harmonischen Oszillators

Der Hamilton-Operator eines quantenmechanischen harmonischen Oszillators der Masse m , welcher mit einer beliebigen aber periodischen äußeren Kraft $S(t) = S(t+T)$ getrieben wird, hat die Form

$$H(t) = H(t+T) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 - S(t)x, \quad (2.1)$$

mit $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ und der Potentialkonstante k .

Im Folgenden werden vorerst die allgemeinen Grundzüge der Floquet-Theorie erläutert, indem die entsprechenden Teile aus [2] und [6] reproduziert wird.

Dann wird Schrödinger-Gleichung (2.1) für eine beliebige Treibkraft $S(t)$ gelöst, wobei die Ergebnisse aus [2],[3] und [4] reproduziert werden. Weiterhin werden die Floquet-Moden $\Phi_n(x, t)$ identifiziert, genauso wie die Quasienergien ϵ_n , welche für eine beliebige periodische Treibkraft und explizit für eine sinusförmige Treibkraft bestimmt werden.

2.1 Grundlagen

Die Floquet-Theorie [2] ist ein nützliches Werkzeug zur der Lösung von quantenmechanischen Systemen, welche durch einen zeitlich periodischen Hamilton-Operator

$$H(t) = H(t+T), \quad (2.2)$$

mit der Periode T , beschrieben werden.

Das Floquet-Theorem besagt, dass bei einem solchen System, die Lösungen $\Psi_n(x, t)$ der Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_n(x, t) = H(t) \Psi_n(x, t) \quad (2.3)$$

in Ortsdarstellung die Form

$$\Psi_n(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \epsilon_n t\right) \Phi_n(x, t) \quad (2.4)$$

haben. Hierbei sind $\Phi_n(x, t) = \Phi_n(x, t+T)$ T -periodische Funktionen, die sogenannten Floquet-Moden, und ϵ_n die zugehörigen reellen Quasienergien, wobei diese Bezeichnungen gewählt wurden aufgrund der Parallele zu den Bloch-Moden und Quasiimpulsen des Bloch-Theorems [2]. Das Floquet-Theorem kann damit als "Bloch-Theorem in der Zeit" aufgefasst werden [6].

Durch Einsetzen dieses Ansatzes für die Wellenfunktionen (2.4) in die Schrödingergleichung (2.3) erhalten wir

$$\epsilon_n \Phi_n(x, t) = \left(H(t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Phi_n(x, t) = \mathcal{H}(t) \Phi_n(x, t) . \quad (2.5)$$

Die Lösung der Schrödinger-Gleichung kann somit auf die Lösung eines Eigenwertproblems für den neuen Operator $\mathcal{H}(t)$ zurückgeführt werden [6].

Die hermiteschen Operatoren $H(t)$ und $\mathcal{H}(t)$ operieren auf dem Hilbertraum $\mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{T}$. Dabei ist \mathcal{L}^2 der Raum der quadratintegriblen Funktionen und \mathcal{T} der Raum der auf $[0, T]$ integriblen Funktionen, da die Operatoren T -periodisch sind [2]. Nach dem Spektralsatz bilden die Eigenfunktionen $\Phi_n(x, t)$ von $\mathcal{H}(t)$ eine Orthogonalbasis von $\mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{T}$, welche auf eine Orthonormalbasis normiert werden kann, wodurch wir das Skalarprodukt definieren können als [2]:

$$\begin{aligned} \langle \langle \Phi_n(x, t) | \Phi_m(x, t) \rangle \rangle &= \frac{1}{T} \int_0^T \langle \Phi_n(x, t) | \Phi_m(x, t) \rangle dt \\ &= \frac{1}{T} \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n^*(x, t) \Phi_m(x, t) dx dt = \delta_{n,m} . \end{aligned} \quad (2.6)$$

2.1.1 Zeitlich gemittelter Erwartungswert der Energie \bar{H}_n

Da $H(t)$ nicht zeitlich konstant ist, sind auch dessen Erwartungswerte, die Energien des Systems, zeitabhängig. Ein direkter Vorteil der Floquet-Theorie liegt darin, dass sich die durchschnittliche Energie

$$\bar{H}_n = \langle \langle \Psi_n(x, t) | H(t) | \Psi_n(x, t) \rangle \rangle \quad (2.7)$$

des n -ten Zustandes $\Psi_n(x, t)$ leicht über die Quasienergien ϵ_n berechnen lässt, ohne explizit Integrale zu lösen.

Dazu ersetzen wir $H(t)$ mit Hilfe von (2.5). Außerdem unterscheiden sich die Floquet-Moden $\Phi_n(x, t)$ und die Wellenfunktionen $\Psi_n(x, t)$ nur durch eine komplexe Phase, daher sind deren Skalarprodukte identisch. Weiterhin benutzen wir (2.5), dass die Floquet-Moden Eigenfunktionen von $\mathcal{H}(t)$ sind:

$$\bar{H}_n = \langle \langle \Phi_n(x, t) | \mathcal{H}(t) + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Phi_n(x, t) \rangle \rangle = \epsilon_n + \langle \langle \Phi_n(x, t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Phi_n(x, t) \rangle \rangle . \quad (2.8)$$

Nähere Betrachtung zeigt, dass

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\omega \frac{\partial \mathcal{H}(t)}{\partial \omega} \quad (2.9)$$

gilt [2]. Da für ϵ_n und $\mathcal{H}(t)$ mit (2.5) eine Eigenwertgleichung vorliegt, kann das Hellman-Feynman-Theorem angewendet werden [1]. Dieses gibt eine Verbindung zwischen den Ableitungen der Eigenwerte und der Ableitung des Hamilton-Operators an. In unserem Fall erhalten wir dadurch

$$\frac{\partial \epsilon_n}{\partial \omega} = \langle \langle \Phi_n(x, t) | \frac{\partial \mathcal{H}(t)}{\partial \omega} | \Phi_n(x, t) \rangle \rangle . \quad (2.10)$$

Damit folgt [2]:

$$\bar{H}_n = \epsilon_n - \omega \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \omega} . \quad (2.11)$$

2.2 Allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung

Das System mit Hamilton-Operator (2.1) kann exakt gelöst werden, indem die Schrödinger-Gleichung durch einen Variablenwechsel und zwei unitäre Transformationen auf die bekannte Form des ungetriebenen Oszillators reduziert wird [2].

1) Unitärer Variabletransformation

Für den neuen Ortsoperator bzw. die Ortsvariable wird eine zeitabhängige Verschiebung angesetzt:

$$x \rightarrow y = x - \zeta(t) . \quad (2.12)$$

Wie zu erwarten verändert sich der Impuls(operator) durch die Translation im Ort nicht, da $\zeta(t)$ bei der Ortsableitung wegfällt.

Mit der neuen Zeitableitung der Wellenfunktion

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(y(t), t) = i\hbar \dot{\Psi} - \dot{\zeta} \frac{\partial}{\partial y} \Psi(y(t), t) \quad (2.13)$$

wird die Schrödinger-Gleichung zu:

$$i\hbar \dot{\Psi}(y, t) = \left[i\hbar \dot{\zeta} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (y + \zeta)^2 - (y + \zeta) S(t) \right] \Psi(y, t) . \quad (2.14)$$

2) Unitäre Transformation für $\Psi(y, t)$

Im Weiteren wählen wir die unitäre Transformation

$$\Psi(y, t) = \exp \left(\frac{i}{\hbar} m \dot{\zeta} y \right) \Lambda(y, t) . \quad (2.15)$$

Durch Einsetzen in beide Seiten der Schrödinger-Gleichung (2.14) und Ausrechnen der Ableitungen erhalten wir

$$\begin{aligned} & \exp \left(\frac{i}{\hbar} m \dot{\zeta} y \right) (i\hbar \dot{\Lambda}(y, t) - m y \ddot{\zeta} \Lambda(y, t)) = \\ & \exp \left(\frac{i}{\hbar} m \dot{\zeta} y \right) \left[\left(-m \dot{\zeta}^2 \Lambda(y, t) + i\hbar \dot{\zeta} \frac{\partial}{\partial y} \Lambda(y, t) \right) \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{2} m \dot{\zeta}^2 \Lambda(y, t) - i\hbar \dot{\zeta} \frac{\partial}{\partial y} \Lambda(y, t) - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \Lambda(y, t) \right) + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (y + \zeta)^2 + (y + \zeta) S(t) \right] . \end{aligned} \quad (2.16)$$

Indem auf beiden Seiten durch die Exponentialfunktion geteilt wird, bekommen wir eine Differentialgleichung für $\Lambda(y, t)$. Außerdem können durch Umsortieren der Terme die Lagrange-Funktion $L(\zeta, \dot{\zeta}, t)$

$$L(\zeta, \dot{\zeta}, t) = \frac{1}{2} m \dot{\zeta}^2 - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \zeta^2 + S(t) \zeta , \quad (2.17)$$

sowie die Bewegungsgleichung des klassischen getriebenen harmonischen Oszillators [3]

$$m\ddot{\zeta} + m\omega_0^2\zeta - S(t) = 0 \quad (2.18)$$

für die Verschiebung $\zeta(t)$ identifiziert werden. Die Differentialgleichung für $\Lambda(y, t)$ ist folglich

$$i\hbar\dot{\Lambda}(y, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 y^2 + (m\ddot{\zeta} + m\omega_0^2\zeta - S(t))y - L(\zeta, \dot{\zeta}, t) \right] \Lambda(y, t) . \quad (2.19)$$

Um die Gleichung zu vereinfachen, wählen wir $\zeta(t)$ nun so, dass es gerade die klassische Bewegungsgleichung erfüllt, der entsprechende Term in (2.19) also verschwindet. Nur noch die Lagrange-Funktion unterscheidet diese Differential-Gleichung von der des ungetriebenen Oszillators.

3) Unitäre Transformation für $\Lambda(y, t)$

Zuletzt wählen wir den Ansatz

$$\Lambda(y, t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t L \, dt'\right) \chi(y, t) \quad (2.20)$$

für $\Lambda(y, t)$, um die Lagrange-Funktion in (2.19) zu eliminieren. Dadurch wird die Differential-Gleichung für $\Lambda(y, t)$ bzw. die ursprüngliche Schrödinger-Gleichung auf einen ungetriebenen Oszillator für $\chi(y, t)$ zurückgeführt:

$$i\hbar\dot{\chi}(y, t) = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 y^2 \right] \chi(y, t) . \quad (2.21)$$

Das bedeutet die $\chi_n(y, t)$ sind die Wellenfunktionen des ungetriebenen Oszillators und die Gesamtlösung der Schrödinger-Gleichung des getriebenen Oszillators ist damit gegeben durch

$$\begin{aligned} \Psi_n(x, t) &= \Psi_n(y = x - \zeta(t), t) \\ &= N_n O_n \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} (x - \zeta(t)) \right) \exp \left[\frac{-m\omega_0}{2\hbar} (x - \zeta(t))^2 \right] \\ &\quad \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(m\dot{\zeta}(t)(x - \zeta(t)) - E_n t + \int_0^t L(\dot{\zeta}, \zeta, t') \, dt' \right) \right] , \quad n \in \mathbb{N}_0 . \end{aligned} \quad (2.22)$$

Dabei sind O_n die Hermit-Polynome, $E_n = \hbar\omega_0(n + 1/2)$ die bekannten Eigenenergien der Zustände des ungetriebenen Oszillators und

$$N_n = \left(\frac{m\omega_0}{\pi\hbar} \right) \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \quad (2.23)$$

dessen Normierungsfaktoren. Die Lösungen des getriebenen Oszillators sind auf $x \in (-\infty, \infty)$ normiert und somit ist ebenfalls Gleichung (2.6) mit dem Skalarprodukt erfüllt.

Die Lösung entspricht damit einem, um die klassische Lösung $\zeta(t)$ verschobenen, ungetriebenen Oszillator, mit einer zusätzlichen zeit- und ortsabhängigen komplexen Phase. Die treibende Kraft $S(t)$ geht in die klassische Lösung $\zeta(t)$ und, über das Wirkungsintegral, in die komplexe Phase ein.

2.3 Identifizierung der Quasienergien ϵ_n und der Floquet-Moden

$$\Phi_n(x, t)$$

Nach dem Floquet-Theorem für periodische Hamilton-Operatoren (2.4) kann die Lösung des getriebenen Oszillators geschrieben werden als

$$\Psi_n(x, t) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar}\epsilon_n t\right) \Phi_n(x, t), \quad (2.24)$$

mit $\Phi_n(x, t) = \Phi_n(x, t + T)$. Nun können wir alle T -periodischen Terme als $\Phi_n(x, t)$ identifizieren, und alle Terme im Exponenten, die linear in t sind, als $-i\epsilon_n t/\hbar$ [2].

Alle Funktionen von $(x - \zeta(t))$ haben die Periode T , da $\zeta(T)$ als Lösung der klassischen Bewegungsgleichung mit $S(t) = S(t + T)$ die Periode T hat. Das Ergebnis des Integrals über die Lagrange-Funktion kann nur T -periodisch oder linear in t sein, deshalb sind die Quasienergien gegeben durch die E_n und den linearen Teil des Integrals [2]:

$$\epsilon_n = E_n - \frac{1}{T} \int_0^T L(\dot{\zeta}, \zeta, t) dt. \quad (2.25)$$

Die Floquet-Moden sind demnach

$$\begin{aligned} \Phi_n(x, t) = N_n O_n \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} (x - \zeta(t)) \right) \exp \left[\frac{-m\omega_0}{2\hbar} (x - \zeta(t))^2 \right] \\ \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(m\dot{\zeta}(t)(x - \zeta(t)) + \int_0^t L(\dot{\zeta}, \zeta, t') dt - \frac{t}{T} \int_0^T L(\dot{\zeta}, \zeta, t) dt \right) \right], \quad n \in \mathbb{N}_0. \end{aligned} \quad (2.26)$$

2.3.1 Quasienergien für eine sinusoidale Treibkraft

Hier wird ein Beispiel einer treibenden Kraft diskutiert:

$$S(t) = S(t + T) = A \sin(\omega t), \quad (2.27)$$

wobei $T = 2\pi/\omega$ ist. Setzen wir die allgemeine homogene Lösung gleich null, wird die Lösung $\zeta(t)$ der klassischen Bewegungsgleichung (2.18) zu [4]

$$\zeta(t) = \frac{A \sin(\omega t)}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (2.28)$$

Das Berechnen des Wirkungsintegrals und anschließendes Identifizieren des linearen Anteils liefert die Quasienergien für die gegebene Kraft [4]:

$$\epsilon_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{A}{4m(\omega_0^2 - \omega^2)}. \quad (2.29)$$

Wie zu erkennen streben die Quasienergien, und somit die mittlere Energie des Systems (3.19), gegen Unendlich, wenn sich die Treibfrequenz ω nahe der Eigenfrequenz des Oszillators ω_0 befindet. Da wir einen getriebenen Oszillator ohne Dämpfung betrachten, war dieses Ergebnis zu erwarten.

2.3.2 Quasienergien für eine beliebige periodische Treibkraft $S(t)$

Um die Quasienergien bei einer beliebigen periodisch treibenden Kraft auf elegante Weise zu bestimmen, und ohne ein Wirkungsintegral berechnen zu müssen, setzen wir eine komplexe Fourier-Reihe an:

$$S(t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_j e^{ij\omega t}, \quad c_j = \frac{1}{T} \int_0^T S(t) e^{-ij\omega t} dt. \quad (2.30)$$

Die c_j haben die Einheit einer Kraft. Für $\zeta(t)$ wählen wir jetzt den gleichen Reihenansatz mit anderen Koeffizienten d_j . Wir betrachten wieder nur die inhomogene klassische Bewegungsgleichung und bestimmen die d_j , indem wir einsetzen und einen Koeffizientenvergleich der d_j und c_j machen. Es zeigt sich, dass

$$\zeta(t) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{c_j}{m(\omega_0^2 - j^2\omega^2)} e^{ij\omega t} \quad (2.31)$$

gilt, womit sich die Lagrange-Funktion (2.17) ergibt zu:

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} m \dot{\zeta}^2 - \frac{1}{2} m \omega_0^2 \zeta^2 + S(t) \zeta \\ &= \sum_j \sum_l \left[\frac{-\omega^2}{2m} \frac{j c_j}{\omega_0^2 - j^2 \omega^2} \frac{l c_l}{\omega_0^2 - l^2 \omega^2} - \frac{\omega_0^2}{2m} \frac{c_j}{\omega_0^2 - j^2 \omega^2} \frac{c_l}{\omega_0^2 - l^2 \omega^2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{m} \frac{c_j c_l}{\omega_0^2 - j^2 \omega^2} \right] e^{i(j+l)\omega t}, \quad j, l \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

Nun identifizieren wir alle Terme der Lagrange-Funktion, welche nach der Ausführung des Wirkungsintegrals linear in der Zeit t sind, ohne dieses explizit zu berechnen. Denn wir wissen, dass die Exponentialterme, welche sich beim Integrieren nach der Zeit reproduzieren, periodisch in der Zeit sind. Daher werden nur die konstanten Terme, welche entstehen, wenn die Exponentialterme wegfallen, eine lineare Abhängigkeit aufweisen. Die Exponentialterme werden 1, wenn $j = -l$ ist. Infolgedessen wird die Doppelsumme, die bei der Quadrierung entstanden ist, wieder zur Einzelsumme. Wir fassen den linearen Teil des Wirkungsintegrals zusammen:

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T L dt &= \sum_j \left[\frac{\omega^2}{2m} \frac{j^2 c_j c_{-j}}{(\omega_0^2 - j^2 \omega^2)^2} - \frac{\omega_0^2}{2m} \frac{c_j c_{-j}}{(\omega_0^2 - j^2 \omega^2)^2} + \frac{1}{m} \frac{c_j c_{-j}}{\omega_0^2 - j^2 \omega^2} \right] \\ &= \sum_j \frac{c_j c_{-j}}{2m(\omega_0^2 - j^2 \omega^2)} = \frac{c_0^2}{2m\omega_0^2} + \sum_j \frac{c_j^2}{m(\omega_0^2 - j^2 \omega^2)} \end{aligned} \quad (2.32)$$

Die Quasienergien ϵ_n sind hiernach:

$$\epsilon_n = \hbar \omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - \sum_j \frac{c_j c_{-j}}{2m(\omega_0^2 - j^2 \omega^2)}. \quad (2.33)$$

Interessanterweise kommt es in obiger Formel nicht nur bei $\omega = \omega_0$ zu einer Singularität, wie bei der Beispielkraft $S(t) = A \sin(\omega t)$, sondern bei allen $\omega = \omega_0/j$.

3 Berechnung von Erwartungswerten

In diesem Abschnitt werden die zeitabhängigen Erwartungswerte des periodisch getriebenen Oszillators für den Impuls, den Ort und die Energie berechnet, so wie das zeitliche Mittel des Erwartungswertes der Energie. Dabei werden die Erwartungswerte für alle Zustände $\Psi_n(x, t)$ auf die bekannten Erwartungswerte des Standard-Oszillators zurückgeführt, womit wir eine Art "2. Quantisierung für die Erwartungswerte" haben.

Die Treibkraft $S(t) = S(t + T)$ ist nicht weiter festgelegt und geht stets über die klassische Lösung $\zeta(t)$ (2.18) in die Erwartungswerte ein.

Um die Erwartungswerte des getriebenen Oszillators zu erhalten, werden wir dessen Berechnung auf die Berechnung der bekannten Erwartungswerte des ungetriebenen Oszillators zurückführen. Dafür nutzen wir aus, dass die Wellenfunktionen und die Floquet-Moden nach (2.22) und (2.26) einem um $\zeta(t)$ verschobenen ungetriebenen Oszillator mit einer zusätzlichen komplexen Phase entsprechen. Da eine komplexe Phase beim Bilden des Betrages wegfällt, gilt

$$\Psi_n^*(x, t)\Psi_n(x, t) = |\Psi_n(x, t)|^2 = |\Phi_n(x, t)|^2 = |\Psi_{n,\text{ung}}(x - \zeta(t), t)|^2 = |\Psi_{n,\text{ung}}(y, t)|^2, \quad (3.1)$$

wobei $\Psi_{n,\text{ung}}(y, t)$ die Zustände des ungetriebenen Oszillators bezeichnen.

Bei dem Integral von $-\infty$ bis ∞ ist eine konstante Verschiebung der Variable irrelevant. Außerdem sind die $\Psi_{n,\text{ung}}(y, t)$ auf dem Raum normiert, daher sind auch die $\Psi_n(x, t)$ auf $x \in (-\infty, \infty)$ normiert, wie bereits am Ende von Kapitel 2.2 erwähnt.

Eine Visualisierung von Erwartungswerten folgt in Kapitel (4.3), weil es sich bei den Erwartungswerten der zwei gekoppelten Oszillatoren genau um die Summe aus den Erwartungswerten von zwei gesonderten Oszillatoren handelt, wie sich dort zeigen wird.

3.1 Zeitabhängige Erwartungswerte des Ortes

Zuerst betrachten wir den Erwartungswert $\langle x \rangle_n$ des Ortsoperators x für den n -ten Zustand $\Psi_n(x, t)$ des getriebenen Oszillators, welcher per Definition gegeben ist durch

$$\langle x \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x, t)x\Psi_n(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n(x, t)|^2 x dx. \quad (3.2)$$

Mit der Substitution $y = x - \zeta(t)$ und unter Verwendung von (3.1) und der Normierung der ungetriebenen Oszillator-Funktionen gelangen wir zu

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_n &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{n,\text{ung}}(x - \zeta(t), t)|^2 x dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{n,\text{ung}}(y, t)|^2 (y + \zeta(t)) dy \\ &= \langle y \rangle_{n,\text{ung}} + \zeta(t) = \zeta(t). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Da die Erwartungswerte $\langle y \rangle_{n,\text{ung}}$ für den Ort des ungetriebenen Oszillators verschwinden, ist der Erwartungswert jedes Zustandes des getriebenen Oszillators genau $\zeta(t)$.

Das bedeutet, der Erwartungswert $\langle x \rangle_n$ für den Ort eines beliebigen Zustandes des quantenmechanischen getriebenen Oszillators entspricht genau der Lösung $\zeta(t)$ der Bewegungsgleichung des klassischen getriebenen Oszillators. Der Erwartungswert hat deshalb sehr große Amplituden, wenn die Treibfrequenz ω von $S(t)$ in der Nähe der Eigenfrequenz des Systems ω_0 liegt (2.31), was der klassischen Anschauung entspricht, weil wir ein ungedämpftes System betrachten. Der Erwartungswert des ungetriebenen Oszillators, welcher im Ursprung liegt, ist somit zeitabhängig periodisch um $\zeta(t) = \zeta(t+T)$ verschoben, mit $T = 2\pi/\omega_0$. Dies entspricht dem Ergebnis, wie es auch bei einer konstanten Verschiebung der Ortsvariable/-operator x erhalten wird, z.B. beim Oszillator im zusätzlichen konstanten elektrischen Feld, nur dass die Verschiebung hier die zeitabhängige klassische Lösung ist.

Da $\langle x \rangle_n = \zeta(t)$ die klassische Bewegungsgleichung

$$m\ddot{\langle x \rangle}_n + m\omega_0^2 \langle x \rangle_n - S(t) = 0 \quad (3.4)$$

erfüllt, ist ergänzend das Ehrenfest-Theorem bestätigt.

Für den Erwartungswert von x^2 ergibt sich komplett analog

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_n &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_n(x, t)|^2 x^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{n,\text{ung}}(y, t)|^2 (y + \zeta(t))^2 dy \\ &= \langle y^2 \rangle_{n,\text{ung}} + 2\zeta(t) \langle y \rangle_{n,\text{ung}} + \zeta^2(t) = s^2(2n+1) + \zeta^2(t), \end{aligned} \quad (3.5)$$

zusammen mit der charakteristischen Länge des ungetriebenen Oszillators

$$s = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}. \quad (3.6)$$

Der Erwartungswert ist nun um $\zeta^2(t)$ verschoben.

Insgesamt können alle Erwartungswerte $\langle x^m \rangle_n$ auf diese Art mit den bekannten ungetriebenen Erwartungswerten berechnet werden. Ab $\langle x^3 \rangle_n$ kommt es wegen $(y + \zeta(t))^3$ aber im Allgemeinen nicht nur zu Verschiebungen bzw. zusätzlichen $\zeta(t)$ -Termen, mit demselben Exponenten wie die ungetriebenen Erwartungswerte, weshalb wir den Erwartungswert $\langle x^m \rangle_n$ nicht einfacher schreiben können als den linearen Erwartungswert des Klammerausdruckes mit dem binomischen Lehrsatz zu vereinfachen:

$$\langle x^m \rangle_n = \langle (y + \zeta(t))^m \rangle_{n,\text{ung}} = \sum_{j=0}^m \binom{m}{j} \langle y^{m-j} \rangle_{n,\text{ung}} \zeta^j(t). \quad (3.7)$$

In obiger Formel ist

$$\binom{m}{j} = \frac{m!}{j! (m-j)!} \quad (3.8)$$

der Binomial-Koeffizient.

Hiernach setzt sich der Erwartungswert $\langle x^m \rangle_n$ aus allen $\zeta(t) \dots \zeta^m(t)$ zusammen, die mit dem Binomial-Koeffizienten und der jeweiligen Potenz von $\langle y \rangle_{n,\text{ung}}$ gewichtet werden.

3.2 Zeitabhängige Erwartungswerte des Impulses

Um den Erwartungswert $\langle p \rangle_n$ des Impulsoperators für den Zustand $\Psi_n(x, t)$ des getriebenen Oszillators zu ermitteln, nutzen wir gleichermaßen die Beziehung (3.1) und unterdessen ein geschicktes Anwenden der Produktregel, um das Problem erneut auf den ungetriebenen Oszillator zu beschränken.

Wieder wählen wir den Variablenwechsel zur neuen Variable $y = x - \zeta(t)$, weil der Impulsoperator $p = p_x$ in der neuen Koordinate identisch ist, wie schon am Anfang von Kapitel 2.2 angedeutet, was sich leicht mit der Kettenregel zeigen lässt:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \cdot 1, \quad \text{d.h.} \quad p_x = p_y. \quad (3.9)$$

Weiterhin können wir den y -unabhängigen Teil der komplexen Phasen in den Wellenfunktionen (2.22) sofort am Operator vorbeiziehen und zu 1 zusammenfassen, daher schreiben wir $\langle p \rangle_n$ als

$$\begin{aligned} \langle p \rangle_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(x, t) p \Psi_n(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(y + \zeta(t), t) p_y \Psi_n(y + \zeta(t), t) dy = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} N_n O_n(ay) \exp\left(\frac{-m\omega_0}{2\hbar} y^2 + \frac{+i}{\hbar} m\dot{\zeta}(t)y\right) p_y N_n O_n(ay) \exp\left(\frac{-m\omega_0}{2\hbar} y^2 + \frac{+i}{\hbar} m\dot{\zeta}(t)y\right) dy, \end{aligned} \quad (3.10)$$

wobei der Faktor im Argument der Hermit-Polynome (2.22) als a abgekürzt wird. Mit der Produktregel spalten wir die Anwendung des Impulsoperators auf in die Anwendung auf die ungetriebene Oszillatorfunktion (in der neuen Koordinate y) und die Anwendung auf die verbleibende komplexe Phase:

$$\begin{aligned} &p_y N_n O_n(y) \exp\left(\frac{-m\omega_0}{2\hbar} y^2 + \frac{+i}{\hbar} m\dot{\zeta}(t)y\right) \\ &= \exp\left(\frac{+i}{\hbar} m\dot{\zeta}(t)y\right) (p_y + m\dot{\zeta}(t)) N_n O_n(y) \exp\left(\frac{-m\omega_0}{2\hbar} y^2\right) \end{aligned} \quad (3.11)$$

Hiernach haben wir effektiv den Impulsoperator an der y -abhängigen Phase vorbeigezogen. Damit ist es möglich diese verbliebenen Phasen in (3.10) ebenso zu 1 zu vereinfachen. Es verbleiben noch die Anwendung des Impulsoperators auf die Wellenfunktionen des ungetriebenen Oszillators und die Multiplikation dieser mit dem ortsunabhängigen Term $\dot{\zeta}(t)$. Zusammen mit dem übrigen linken Teil aus (3.11), welcher nach dem Wegfallen der komplexen Phase jetzt auch der ungetriebenen Wellenfunktion entspricht, ergeben sich dadurch die Erwartungswerte für p_y und den Term $m\dot{\zeta}(t)$.

Schließlich können wir den Erwartungswert für den Impuls in Abhängigkeit der bekannten Erwartungswerte des Standard-Oszillators hinschreiben:

$$\langle p \rangle_n = \langle p_y \rangle_{n, \text{ung}} + m\dot{\zeta}(t) = m\dot{\zeta}(t). \quad (3.12)$$

Wieder erfüllt der Erwartungswert die Bewegungsgleichung des klassischen Oszillators:

$$\langle \ddot{p} \rangle_n + \omega_0^2 \langle p \rangle_n - \dot{S}(t) = 0. \quad (3.13)$$

Um darüber hinaus den Erwartungswert $\langle p^m \rangle_n$ für einen beliebigen Exponenten $m \in \mathbb{N}$ zu evaluieren, muss in Formel (3.11) m -mal die Produktregel angewandt werden. Da sich die komplexe Phase beim Ableiten reproduziert und jedesmal ein ortsunabhängiger Term übrig bleibt, gilt für den Erwartungswert Gleiches wie für den Erwartungswert $\langle x^m \rangle_n$:

$$\langle p^m \rangle_n = \langle (p_y + \zeta(t))^m \rangle_{n,\text{ung}} = \sum_{j=0}^m \binom{m}{j} \langle p_y^{m-j} \rangle_{n,\text{ung}} \zeta^j(t). \quad (3.14)$$

Speziell für $m = 2$ gilt:

$$\langle p^2 \rangle_n = \langle p_y^2 \rangle_{n,\text{ung}} + 2m\dot{\zeta}(t) \langle p_y \rangle_{n,\text{ung}} + (m\dot{\zeta}(t))^2 = m^2 \omega_0^2 s^2 (2n+1) + m^2 \dot{\zeta}^2(t). \quad (3.15)$$

3.3 Heisenberg-Unschärferelation

Mit den zuvor errechneten Erwartungswerten $\langle x \rangle_n, \langle x^2 \rangle_n, \langle p \rangle_n, \langle p^2 \rangle_n$ wird hier die Unschärfe des periodisch getriebenen Oszillators aufgestellt. Diese ist

$$\begin{aligned} \Delta x_n \Delta p_n &= \sqrt{\langle x^2 \rangle_n - \langle x \rangle_n^2} \sqrt{\langle p^2 \rangle_n - \langle p \rangle_n^2} \\ &= \sqrt{s^2(2n+1) + \zeta^2(t) - \zeta^2(t)} \sqrt{m^2 \omega_0^2 s^2 (2n+1) + m^2 \dot{\zeta}^2(t) - m^2 \dot{\zeta}^2(t)} \\ &= \frac{\hbar}{2} (2n+1). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Die Unschärfe ist also gleich der des ungetriebenen Oszillators, welche zeitunabhängig ist und für den Grundzustand $n = 0$ minimal ist.

Dieses Ergebnis ist sinnvoll in Anbetracht der Tatsache, dass die (zeitabhängige) Verschiebung der Wellenfunktionen im Raum $\zeta(t)$ (2.22) die Unschärfe nicht ändern sollte. Die Wellenfunktionen haben allerdings noch den weiteren Unterschied der orts- und zeitabhängigen komplexen Phase, verglichen mit den Wellenfunktionen des Standard-Oszillators. Diese spielt zwar keine Rolle bei den Erwartungswerten für den Ort, bei den Impulserwartungswerten aber schon. Dennoch war zu erwarten, dass sich auch beim Impuls eine Standardabweichung Δp_n wie beim ungetriebenen Oszillator ergibt, so wie bei Δx_n , da $\langle p \rangle_n$ im Wesentlichen die zeitliche Ableitung von $\langle x \rangle_n$ ist. Demnach folgte die gleiche Unschärfe.

3.4 Zeitabhängiger Erwartungswert der Energie

Mit denselben Erwartungswerten für den Ort und den Impuls, wie sie bei der Heisenberg-Unschärferelation von Nöten sind, wird im Folgenden der normale Erwartungswert der

Energie bzw. des Hamilton-Operators $\langle H(t) \rangle_n$ aufgestellt, es muss nur die Linearität des Erwartungswertes verwendet werden:

$$\begin{aligned}\langle H(t) \rangle_n &= \left\langle \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2 - S(t)x \right\rangle_n = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle_n + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \langle x^2 \rangle_n - S(t) \langle x \rangle_n \\ &= \frac{1}{2m} \langle p_y^2 \rangle_{n,\text{ung}} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \langle y \rangle_{n,\text{ung}} + \frac{1}{2}m\dot{\zeta}^2(t) + \frac{1}{2}m\omega_0^2 \zeta^2(t) - S(t)\zeta(t) \\ &= \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right) - L(\dot{\zeta}, \zeta, t) + m\dot{\zeta}^2(t) = E_n - L(\dot{\zeta}, \zeta, t) + m\dot{\zeta}^2(t) .\end{aligned}\quad (3.17)$$

Wir finden wieder den Erwartungswert des ungetriebenen Oszillators, die E_n , mit einer zeitabhängigen Verschiebung, in welcher die Lagrange-Funktion des klassischen Problems (2.17) mit dem Restterm identifiziert werden kann.

3.5 Durchschnittlicher Erwartungswert der Energie

Hier wird der zeitlich, über eine Periode T , gemittelte Erwartungswert \bar{H}_n mittels Formel (3.19) für eine beliebige Treibkraft bestimmt, indem wir die Quasienergien ϵ_n benutzen, welche wir in Kapitel 2.3.2 für eine allgemeine periodische Treibkraft $S(t)$, in Abhängigkeit deren Fourier-Koeffizienten, bestimmt haben.

Unter der Annahme, dass die Summe in ϵ_n (2.3.2) konvergiert, weil es sich im Wesentlichen um die Summe über $1/j^2$ handelt, leiten wir nach ω ab, indem wir die Ableitung und Summe vertauschen, dann haben wir:

$$\bar{H}_n = \epsilon_n - \omega \frac{\partial}{\partial \omega} \epsilon_n = E_n - \sum_{j=-\infty}^{\infty} \left[\frac{c_j c_{-j}}{2m(\omega_0^2 - j^2 \omega^2)} \left(1 - \frac{2j^2 \omega^2}{(\omega_0^2 - j^2 \omega^2)} \right) \right] . \quad (3.18)$$

Für den expliziten Fall der Sinus-Treibkraft $S(t) = A \sin(\omega t)$ folgt:

$$\bar{H}_n = E_n - \frac{A}{4m(\omega_0^2 - \omega^2)} \left(1 - \frac{2\omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)} \right) . \quad (3.19)$$

Für $\omega_0^2 > \omega^2$ erhalten wir in diesem Beispiel demnach einen Anstieg des Energiemittelwertes gegenüber den Quasienergien, andernfalls eine Absenkung.

4 Zwei gekoppelte getriebene harmonische Oszillatoren

In diesem Teil der Arbeit werden mit Hilfe der aus (2.2) bekannten Lösung des einzelnen getriebenen Oszillators die Wellenfunktionen für ein System hergeleitet, das aus zwei gekoppelten Oszillatoren x_1 und x_2 der gleichen Masse m besteht, von denen einer mit der periodischen Kraft $S(t) = S(t + T)$ angetrieben wird. Die Potentialkonstanten k der beiden Oszillatoren sind ebenfalls identisch, aber im Allgemeinen unterschiedlich zur Kopplungskonstante κ zwischen den Oszillatoren. Der Hamilton-Operator dieses Systems kann direkt aus der Hamilton-Funktion der klassischen Mechanik übernommen werden:

$$H(t) = H(t + T) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}kx_1^2 + \frac{1}{2}kx_2^2 + \frac{1}{2}\kappa(x_2 - x_1)^2 - S(t)x_1 . \quad (4.1)$$

Es werden auch die Erwartungswerte für den Ort $\langle x_{1,2} \rangle_{n,l}$ und den Impuls $\langle p_{1,2} \rangle_{n,l}$, genauso wie der Erwartungswert der Energie $\langle H \rangle_{n,l}$ und dessen zeitliches Mittel $\bar{H}_{n,l}$ berechnet, indem auf die bekannten Erwartungswerte des einzelnen getriebenen Oszillators zurückgeführt wird. Die Erwartungswerte werden auch graphisch dargestellt.

Zur Lösung des Systems wird eine unitäre Koordinatentransformation eingeführt, welche den Hamilton-Operator $H(x_1, x_2, p_1, p_2, t)$ zu zwei in den neuen Koordinaten unabhängigen Hamilton-Operatoren $H_+(x_+, p_+, t)$ und $H_-(x_-, p_-, t)$ mit effektiven Potentialkonstanten k_+, k_- entkoppelt, welche je einen einzelnen (getriebenen) Oszillator beschreiben. Dann ergeben sich die Wellenfunktionen leicht aus denen des einzelnen Oszillators.

4.1 Die Schrödinger-Gleichung mit unabhängigen Hamilton-Operatoren

Liegt ein Hamilton-Operator der Form

$$H = \sum_i H_i(x_i, p_i, t) , \quad H_i : \mathcal{H}_i \rightarrow \mathcal{H}_i \quad (4.2)$$

vor, führt der Ansatz

$$\Psi = \prod_i \Psi(x_i, p_i, t) , \quad \Psi_i \in \mathcal{H}_i \quad (4.3)$$

auf unabhängige Schrödinger-Gleichungen für die einzelnen Wellenfunktionen $\Psi_i(x_i, p_i, t)$, sodass

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_i = \delta_{i,j} H_j \Psi_i \quad (4.4)$$

erfüllt ist. Um dies schnell zu zeigen, schauen wir uns den Fall von zwei unabhängigen Operatoren an:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi \iff \Psi_2 H_1 \Psi_1 + \Psi_1 H_2 \Psi_2 = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \Psi_1 \Psi_2 + \Psi_1 \frac{\partial}{\partial t} \Psi_2 \right). \quad (4.5)$$

Da die Operatoren nur auf Funktionen wirken, die auf dem selben Raum definiert sind, kann man sie an der jeweils anderen Funktion vorbei ziehen. Wenn wir weiterhin durch unseren Ansatz $\Psi_1 \Psi_2$ teilen, wird die Gleichung zu:

$$\frac{1}{\Psi_1} H_1 \Psi_1 + \frac{1}{\Psi_2} H_2 \Psi_2 = i\hbar \left(\frac{\frac{\partial}{\partial t} \Psi_1}{\Psi_1} + \frac{\frac{\partial}{\partial t} \Psi_2}{\Psi_2} \right). \quad (4.6)$$

Weil die linke und rechte Seite für alle unabhängigen x_1, p_1, x_2, p_2 gleich sein müssen, folgen die einzelnen Schrödinger-Gleichungen für die Wellenfunktionen Ψ_1 und Ψ_2 :

$$\frac{1}{\Psi_1} H_1 \Psi_1 = \frac{\frac{\partial}{\partial t} \Psi_1}{\Psi_1}, \quad \frac{1}{\Psi_2} H_2 \Psi_2 = \frac{\frac{\partial}{\partial t} \Psi_2}{\Psi_2}. \quad (4.7)$$

Wie an diesem Beispiel zu sehen, gilt Gleiches auch für beliebig viele unabhängige Hamilton-Operatoren, womit (4.4) erfüllt ist und wir wissen, dass die Lösung Ψ die Form (4.3) hat.

4.2 Unitäre Variablentransformation und allgemeine Lösung der Schrödinger-Gleichung

Um für unseren Hamilton-Operator $H(x_1, x_2, p_1, p_2, t)$ (4.1) eine entkoppelte Form $H(x_+, x_-, p_+, p_-, t) = H_+(x_+, p_+, t) + H_-(x_-, p_-, t)$ nach (4.2) in den neuen Koordinaten/Variablen x_+, x_-, p_+, p_- zu erhalten, wählen wir die unitären Koordinationstransformationen [5]

$$x_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 + x_1), \quad x_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1), \quad (4.8)$$

welche aus den Eigenmoden/Eigenvektoren des klassischen Problems folgen. Dessen Normierung stellt sicher, dass die Transformation unitär ist. Durch einfaches Umstellen folgen x_1 und x_2 in Abhängigkeit der neuen Koordinaten x_+ und x_- :

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_+ - x_-), \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_+ + x_-). \quad (4.9)$$

Indem wir x_1 und x_2 so im Hamilton-Operator (4.1) ersetzen, formen wir den ortsabhängigen Teil um zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} k x_1^2 + \frac{1}{2} k x_2^2 + \frac{1}{2} \kappa (x_2 - x_1)^2 - S(t) x_1 = \\ \frac{1}{2} k x_+^2 + \frac{1}{2} (k + 2\kappa) x_-^2 - S(t) \frac{1}{\sqrt{2}} (x_+ - x_-). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Es tauchen nun keine Kopplungsterme $x_+ x_-$ mehr auf, wie es in den alten Koordinaten der Fall war.

Jetzt betrachten wir die neuen Impulse und überprüfen, dass es durch den Variablenwechsel nicht zu neuen Kopplungstermen in den p_+, p_- kommt. Mit der Kettenregel folgt für die Ableitungen der Impulsoperatoren

$$\frac{\partial}{\partial x_{\pm}} = \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial x_1}{\partial x_{\pm}} + \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial x_2}{\partial x_{\pm}} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\pm \frac{1}{\sqrt{2}} \right) + \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\partial}{\partial x_2} \pm \frac{\partial}{\partial x_1} \right), \quad (4.11)$$

weshalb für die Impulsoperatoren identisch zu den Ortsoperatoren gilt

$$p_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_2 + p_1), \quad p_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_2 - p_1). \quad (4.12)$$

Wir setzen erneut in unseren Hamilton-Operator (4.1) ein und erhalten für den impulsabhängigen Teil

$$\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} = \frac{p_+^2}{2m} + \frac{p_-^2}{2m}. \quad (4.13)$$

Wie erwartet bleibt die Summe der quadrierten Impulsoperatoren unverändert.

Der gesamte Hamilton-Operator der zwei gekoppelten getriebenen Oszillatoren ist in den neuen Variablen folglich

$$\begin{aligned} H(t) &= H(t+T) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}kx_1^2 + \frac{1}{2}kx_2^2 + \frac{1}{2}\kappa(x_2 - x_1)^2 - S(t)x_1 \\ &= \frac{p_+^2}{2m} + \frac{1}{2}kx_+^2 - \frac{1}{\sqrt{2}}S(t)x_+ + \frac{p_-^2}{2m} + \frac{1}{2}(k+2\kappa)x_-^2 + \frac{1}{\sqrt{2}}S(t)x_- \\ &= \frac{p_+^2}{2m} + \frac{1}{2}k_+x_+^2 - S_+(t)x_+ + \frac{p_-^2}{2m} + \frac{1}{2}k_-x_-^2 - S_-(t)x_- \\ &= H_+(x_+, p_+, t) + H_-(x_-, p_-, t), \quad H_{\pm} : \mathcal{H}_{\pm} \rightarrow \mathcal{H}_{\pm}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Der Hamilton-Operator in den neuen Variablen x_{\pm}, p_{\pm} beschreibt demnach ein System aus zwei unabhängigen getriebenen harmonischen Oszillatoren mit neuen Potentialkonstanten $k_1 = k$ und $k_2 = k + 2\kappa$ bzw. neuen Eigenfrequenzen

$$\omega_+ = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{und} \quad \omega_- = \sqrt{\frac{k+2\kappa}{m}}. \quad (4.15)$$

Die beiden Oszillatoren werden, wegen dem verschiedenen Vorzeichen von $S_+(t) = S_+(t+T)$ und $S_-(t) = S_-(t+T)$, periodisch aber phasenversetzt um π mit der ursprünglichen Treibkraft $S(t)$ angetrieben, wobei diese mit dem Faktor $1/\sqrt{2}$ skaliert wird.

Betrachten wir den Fall, dass beide Oszillatoren x_1 und x_2 des Systems in den alten Koordinaten getrieben sind, und zwar genau wie durch die neuen Koordinaten x_+ und x_- vorgegeben, das heißt

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}kx_1^2 + \frac{1}{2}kx_2^2 + \frac{1}{2}\kappa(x_2 - x_1)^2 - S(t)(x_2 + x_1) \\ \text{oder } H(t) &= \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}kx_1^2 + \frac{1}{2}kx_2^2 + \frac{1}{2}\kappa(x_2 - x_1)^2 - S(t)(x_2 - x_1), \end{aligned} \quad (4.16)$$

liegt in den neuen Variablen ein vereinfachtes System vor, bei dem nur ein Oszillator x_+ oder x_- getrieben ist. Es muss also in den klassischen Normalmoden getrieben werden, damit nach dem Variablenwechsel ein möglichst einfaches System mit nur noch einem getriebenen Oszillator vorliegt.

Lösung der Schrödinger-Gleichung

Nach den Ergebnissen dieses und des vorherigen Abschnittes können wir nun die Wellenfunktion $\Psi_{n,l}(x_1, x_2, p_1, p_2, t)$ des Systems zweier gekoppelter getriebener Oszillatoren (4.1), für eine allgemeine Treibkraft $S(t) = S(t + T)$, in den neuen entkoppelten Koordinaten x_+ und x_- , nach Formel (4.4) hinschreiben. Durch Ersetzen der neuen Variablen nach Formel (4.8) und (4.13) ist auch die Wellenfunktion in den alten Variablen bekannt:

$$\begin{aligned}
 \Psi_{n,l}(x_+, x_-, t) &= \Psi_{+,n}(x_+, t) \Psi_{-,l}(x_-, t) \\
 &= N_{n,+} O_n \left(\sqrt{\frac{m\omega_+}{\hbar}} (x_+ - \zeta_+(t)) \right) \exp \left(-\frac{m\omega_+}{2\hbar} (x_+ - \zeta_+(t))^2 \right) \\
 &\quad \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(m\dot{\zeta}_+(t)(x_+ - \zeta_+(t)) - E_{+,n}t + \int_0^t L_+ dt' \right) \right] \\
 &\quad \cdot N_{l,-} O_l \left(\sqrt{\frac{m\omega_-}{\hbar}} (x_- - \zeta_-(t)) \right) \exp \left(-\frac{m\omega_-}{2\hbar} (x_- - \zeta_-(t))^2 \right) \\
 &\quad \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(m\dot{\zeta}_-(t)(x_- - \zeta_-(t)) - E_{-,l}t + \int_0^t L_- dt' \right) \right], \Psi_{\pm} \in \mathcal{H}_{\pm} \\
 &= N_{+,n} N_{-,l} O_n \left(\sqrt{\frac{m\omega_+}{\hbar}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 + x_1) - \zeta_+(t) \right) \right) O_l \left(\sqrt{\frac{m\omega_-}{\hbar}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1) - \zeta_-(t) \right) \right) \\
 &\quad \cdot \exp \left[\frac{-m}{2\hbar} \left(\omega_+ \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 + x_1) - \zeta_+(t) \right)^2 + \omega_- \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1) - \zeta_-(t) \right)^2 \right) \right] \\
 &\quad \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(m\dot{\zeta}_+(t) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 + x_1) - \zeta_+(t) \right) + m\dot{\zeta}_-(t) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1) - \zeta_-(t) \right) \right) \right] \\
 &\quad \cdot \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(-(E_{+,n} + E_{-,l}) + \int_0^t L_+ + L_- dt' \right) \right] \\
 &= \Psi_{n,l}(x_1, x_2, t), \quad n, l \in \mathbb{N}_0.
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

HIER GUCKEN, OB SO AUFSCHREIBEN OK (GEHT UEBER RAND) UND EVTL AUCH IN X1 X2 AUSGESCHRIEBEN (WAHRSCHEINLICH SCHON, DANN AUCH MIT (t) UEBERALL) Die klassischen Lösungen ζ_{\pm} und die Lagrange-Funktionen L_{\pm} sind wie bei der Lösung des einzelnen Oszillators bestimmt über (2.18) und (2.17). Genauso sind die Normierungskonstanten $N_{+,n}/N_{-,l}$ und ungetriebenen Eigenenergien $E_{+,n}/E_{-,l}$ wie beim einzelnen getriebenen Oszillator definiert, nur die Eigenfrequenz ω_0 wird ersetzt durch die neuen Eigenfrequenzen ω_+, ω_- (4.15).

Wie in Abschnitt beschrieben, ist Ψ in den neuen Variablen das Produkt aus den unabhängigen Wellenfunktionen Ψ_+ und Ψ_- , welche Lösungen der einzelnen Schro"dingler-Gleichungen mit H_+/H_- sind, dadurch ist Ψ auch auf dem Raum, das heißt auf $x_{\pm} \in (-\infty, \infty)$, normiert,

wie am Anfang von Kapitel (3) gezeigt:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{n,l}(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{n,l}(x_+, x_-, t)|^2 dx_+ dx_- \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{+,n}(x_+, t)|^2 dx_+ \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_{-,l}(x_-, t)|^2 dx_- = 1 \cdot 1 = 1. \end{aligned} \quad (4.18)$$

In den ursprünglichen Koordinaten sind Kopplungsterme $x_1 x_2$ in der Wellenfunktion vorhanden, durch die Hermit-Polynome O_n/O_l treten hierbei im Allgemeinen unterschiedliche Potenzen der x_1 und x_2 auf.

Die Floquet-Moden $\Phi_{n,l}(x_+, x_-, t) = \Phi_+(x_+, t)\Phi_-(x_-, t)$ sind in den neuen Koordinaten das Produkt aus den einzelnen Floquet-Moden (2.26), so wie die Wellenfunktionen, Die Quasienergien sind dadurch die Summe der einzelnen Quasienergien (??): $\epsilon_{n,l} = \epsilon_{+,n} + \epsilon_{-,l}$.

4.3 Erwartungswerte

Um die Erwartungswerte für die Observablen x_1, x_2, p_1, p_2 zu evaluieren, verwenden wir die benutzten Transformationen für den Ort (4.8) und den Impuls (4.12), mit welchen wir die Berechnung auf die schon bekannten Erwartungswerte des einzelnen getriebenen Oszillators zurückführen können.

Es werden alle Erwartungswerte für eine allgemeine T -periodische Treibkraft $S(t) = A \sin(\omega t)$ berechnet und für die konkrete sinusförmige Treibkraft aus Kapitel (??), für einfache Konstanten, visualisiert.

Die "+" und "-" Operatoren wirken auf verschiedene Variablen/operieren auf den verschiedenen Räumen $\mathcal{H}_+, \mathcal{H}_-$. Aus diesem Grund gilt für den Erwartungswert eines Operators $U_+ : \mathcal{H}_+ \rightarrow \mathcal{H}_+$ bezüglich einer Wellenfunktion der Form $\Psi_{n,l} = \Psi_{+,n}\Psi_{-,l}$ mit $\Psi_{\pm} \in \mathcal{H}_{\pm}$, wegen der Normierung nach Formel (4.18):

$$\begin{aligned} \langle U_+ \rangle_{n,l} &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* U_+ \Psi dx_+ dx_- = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi_-|^2 dx_- \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{+,n}^* U_+ \Psi_{+,n} dx_+ \\ &= 1 \cdot \langle U_+ \rangle_n^+. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Für einen Operator U_+ ist Erwartungswert der Gesamtwellenfunktion $\Psi_{n,l}$ der gekoppelten getriebenen Oszillatoren also identisch zum Erwartungswert der Wellenfunktion des einzelnen getriebenen Oszillators, in den "+"-Koordinaten. Für U_- gilt Gleiches.

Demnach folgt für den Erwartungswert $\langle U_+ U_- \rangle_{n,l}$

$$\langle U_+ U_- \rangle_{n,l} = \langle U_- U_+ \rangle_{n,l} = \langle U_+ \rangle_n^+ \langle U_- \rangle_l^- . \quad (4.20)$$

4.3.1 Zeitabhängige Erwartungswerte des Ortes

Mit der Transformation (4.8), der Überlegung zum gekoppelten Erwartungswert (4.19) und dem Erwartungswert des einzelnen getriebenen Oszillators (3.3) aus Kapitel (3), sind nun die Erwartungswerte $\langle x_1 \rangle_{n,l} / \langle x_2 \rangle_{n,l}$ bekannt:

$$\langle x_1 \rangle_{n,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle x_+ \rangle_{n,l} \mp \langle x_- \rangle_{n,l} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle x_+ \rangle_n^+ \mp \langle x_- \rangle_l^- \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\zeta_+(t) \mp \zeta_-(t)) . \quad (4.21)$$

Der Mittelwert des Ortes für einen der beiden Oszillatoren x_1 oder x_2 des gekoppelten Systems ist somit die quantenzahlunabhängige Differenz oder die Summe der beiden klassischen Lösungen ζ_+ und ζ_- der entkoppelten Oszillatoren nach der Variablentransformation, multipliziert mit $1/\sqrt{2}$.

Der Erwartungswert für x_1^2/x_2^2 ergibt sich darüber hinaus mit Formel (4.20) und zusätzlich dem Erwartungswert (3.5) zu

$$\begin{aligned} \langle x_1^2 \rangle_{n,l} &= \frac{1}{2} \langle (x_+ \mp x_-)^2 \rangle_{n,l} = \frac{1}{2} \left(\langle x_+^2 \rangle_n^+ \mp 2 \langle x_+ \rangle_n^+ \langle x_- \rangle_l^- - \langle x_-^2 \rangle_l^- \right) \\ &= \frac{1}{2} (s_+^2 (2n+1) + \zeta_+^2(t) \mp 2 \zeta_+(t) \zeta_-(t) + s_-^2 (2l+1) \zeta_-^2(t)) , \end{aligned} \quad (4.22)$$

mit s_{\pm} der charakteristischen Länge des ungetriebenen Oszillator nach (3.6), mit der jeweiligen Eigenfrequenz ω_{\pm} .

Sinusoidale Treibkraft

Für eine sinusoidale Treibkraft $S(t) = A \sin(\omega t)$ und entsprechenden $S_{\pm}(t)$ (siehe (4.14)) sind $\zeta_{\pm}(t)$ gegeben durch (2.28)

$$\zeta_{\pm}(t) = \frac{\pm \frac{1}{\sqrt{2}} A \sin(\omega t)}{m(\omega_{\pm}^2 - \omega^2)} . \quad (4.23)$$

Hiermit werden die Erwartungswerte $\langle x_1 \rangle_{n,l}$ und $\langle x_2 \rangle_{n,l}$, für die Konstanten

$$\omega = 2 , \quad A = 1 , \quad k = 1 , \quad m = 1 , \quad \hbar = 1 , \quad (4.24)$$

dargestellt. Hierbei untersuchen wir, für welche Kopplungskonstanten κ die beiden Erwartungswerte gleichphasig oder gegenphasig bzw. mit selbem oder unterschiedlichem Vorzeichen der Amplitude schwingen, also bei welchem κ die Amplitude $\langle x_1 \rangle_{n,l}$ ihr Vorzeichen ändert. Wir betrachten somit die Situation einer schwachen (gegenphasig) und starken (gleichphasig) Kopplung.

Die Amplitude von $\langle x_2 \rangle_{n,l}$ kann ihr Vorzeichen nicht ändern, da negative Kopplungskonstanten nicht sinnvoll sind, der Erwartungswert verschwindet genau für $\kappa = 0$, wie in Abb.(4.1a) veranschaulicht. Dies entspricht der Erwartung, da es sich bei x_2 ohne Kopplung um einen einzelnen ungetriebenen Oszillator handelt, weil nur x_1 getrieben ist.

Der Erwartungswert von x_1 wechselt sein Vorzeichen für/ist genau 0 für $\kappa = \omega^2 m - k = 2^2 \cdot 1 - 1 = 3$, wie in Abb.(4.1b) gezeigt. Die gegenphasige (schwache) Kopplung ist für $4\kappa = 1 < 3$

in Abb.(4.1c) dargestellt. Wie klassisch anzunehmen, ist die Amplitude des Erwartungswertes $\langle x_2 \rangle_{n,l}$ des angekoppelten Oszillators in diesem Fall geringer als die des getriebenen Oszillator-Erwartungswertes $\langle x_1 \rangle_{n,l}$. Die gleichphasige (starke) Kopplung ist für $\kappa = 15 > 3$ in Abb.(4.1d) dargestellt. Für eine starke Kopplung werden die Erwartungswerte identisch und die Amplitude geringer, was der klassischen Anschauung zweier starr gekoppelter Oszillatoren entspricht.

4.3.2 Zeitabhängige Erwartungswerte des Impulses

Die Transformation der Impulsoperatoren (4.12) hat die gleiche Form wie bei den Ortsoperatoren (4.8), die Berechnung der Erwartungswerte $\langle p_2 \rangle_{n,l}$ und $\langle p_1^2 \rangle_{n,l}$ erfolgt darum analog, mit den Impuls-Erwartungswerten (3.12) und (3.15). Es gilt:

$$\langle p_2 \rangle_{n,l} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle p_+ \rangle_{n,l} \mp \langle p_- \rangle_{n,l} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle p_+ \rangle_n^+ \mp \langle p_- \rangle_l^- \right) = \frac{m}{\sqrt{2}} (\dot{\zeta}_+(t) \mp \dot{\zeta}_-(t)) \quad (4.25)$$

und

$$\begin{aligned} \langle p_1^2 \rangle_{n,l} &= \frac{1}{2} \frac{1}{2} \langle (x_+ \mp x_-)^2 \rangle_{n,l} \\ &= \frac{m^2}{2} (\omega_+^2 s_+^2 (2n+1) + \ddot{\zeta}_+^2(t) \mp 2\dot{\zeta}_+(t)\dot{\zeta}_-(t) + \omega_-^2 s_-^2 (2l+1)\ddot{\zeta}_-^2(t)) . \end{aligned} \quad (4.26)$$

Die Erwartungswerte sind ähnlich zu denen des Ortes, wie beim einzelnen Oszillator kommt nur ein Faktor hinzu und die $\zeta_{\pm}(t)$ werden zu ihren Ableitungen.

Für eine sinusoidale Treibkraft, sehen die Erwartungswerte für p_2 demnach so aus wie die $\langle x_1 \rangle_{n,l}$ nur mit skaliertem Amplitude und phasenverschoben um π . Das Verhalten für die verschiedenen κ ist ebenfalls identisch.

4.3.3 Erwartungswerte der Energie

Der zeitabhängige Erwartungswert $\langle H(t) \rangle_{n,l}$ des Hamilton-Operators für eine beliebige Treibkraft $S(t)$ ist auch mit dem Erwartungswert des einzelnen Oszillators berechenbar, indem wir wieder in den neuen Koordinaten arbeiten:

$$\begin{aligned} \langle H(t) \rangle_{n,l} &= \langle H_+(t) \rangle_n^+ + \langle H_-(t) \rangle_l^- \\ &= E_{+,n} + E_{-,l} - L_+ - L_- + m\dot{\zeta}_+^2(t) + m\dot{\zeta}_-^2(t) . \end{aligned} \quad (4.27)$$

Der mittlere Erwartungswert $\bar{H}_{n,l}$ wird wieder in den neuen Koordinaten, mit Formel (3.19), berechnet. Weil die Quasieenergien $\epsilon_{n,l}$ die Summe von $\epsilon_{+,n}$ und $\epsilon_{-,l}$ ist, kriegen wir sofort

$$\bar{H}_{n,l} = \bar{H}_{+,n} + \bar{H}_{-,l} , \quad (4.28)$$

Sinusoidale Treibkraft

Für das Beispiel der Sinus-Kraft folgt $\langle H(t) \rangle_{n,l}$ mit den entsprechenden Orts- und Impulserwartungswerten aus vorherigem Abschnitt und $\bar{H}(t)_{n,l}$ folgt aus Gleichung (??). Der Erwartungswert der Energie $\langle H \rangle_{0,0}$ und dessen zeitliches Mittel $\bar{H}(t)_{0,0}$ sind für die selben Konstanten wie zuvor

$$\omega = 2, \quad A = 1, \quad k = 1, \quad m = 1, \quad \hbar = 1, \quad (4.29)$$

in Abb.(??) aufgetragen. Da beide Erwartungswerte wegen den $E_{+,n}/E_{-,l}$ abhängig von den Quantenzahlen sind, wird hier der einfachste Fall $n = l = 0 \rightarrow E_{\pm,0} = \hbar\omega_{\pm}/2$ betrachtet. Ohne Kopplung (4.1e) ist die mittlere Energie am geringsten, für eine möglichst starke/starre Kopplung (??) wird die mittlere Energie im System maximal, weil die Treibkraft so möglichst viel Energie auf den angekoppelten Oszillator x_2 übertragen kann.

b

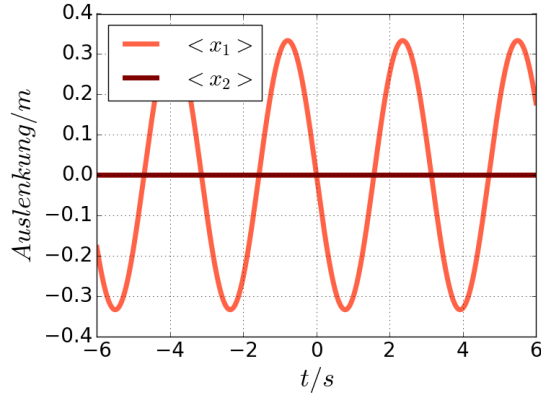
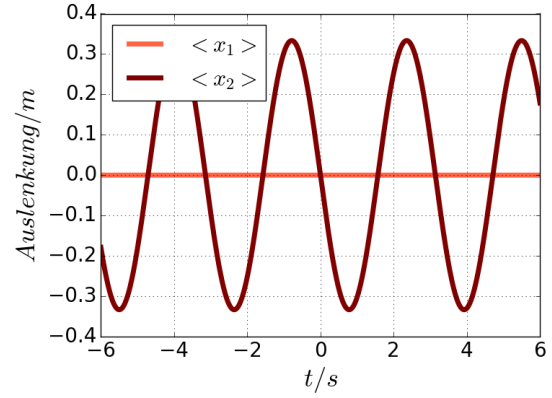
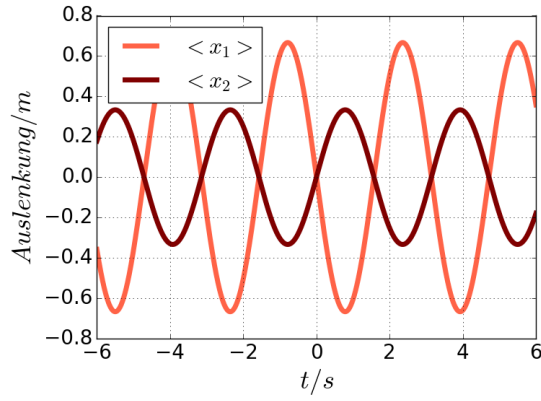
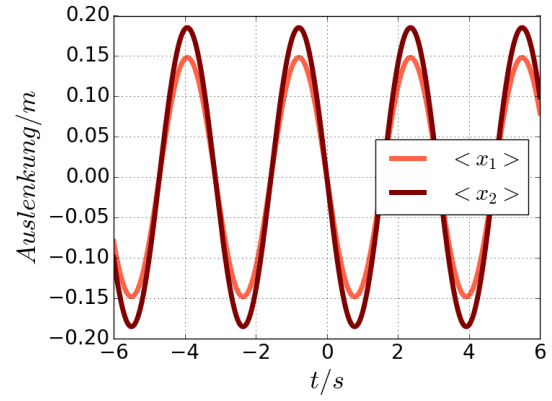
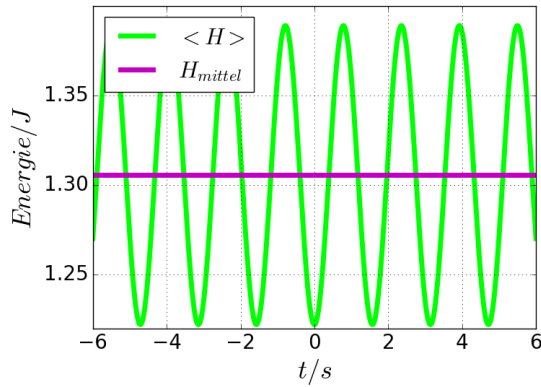
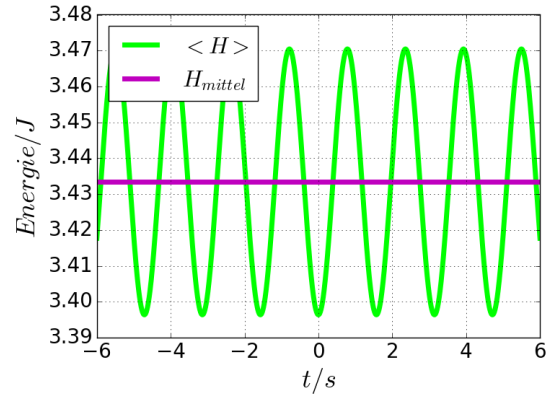
(a) $\kappa = 0$.(b) $\kappa = \omega^2 m - k = 3$.(c) $\kappa = 1$.(d) $\kappa = 15$.(e) $\kappa = 0$.(f) $\kappa = 15$.

Abbildung 4.1: Erwartungswerte der gekoppelten Oszillatoren $\langle x_1 \rangle_{n,l}$ und $\langle x_2 \rangle_{n,l}$ für beliebigen Zustand $\Psi_{n,l}$, außerdem der Erwartungswert der Gesamtenergie $\langle H(t) \rangle_{0,0}$ und zeitliches Mittel $\bar{H}_{0,0}$ für den Grundzustand $\Psi_{0,0}$. Mit $\omega = 2$, $A = 1$, $k = 1$, $m = 1$, $\hbar = 1$, für verschiedene Kopplungskonstanten κ .

5 Zweite Quantisierung

6 Zusammenfassung und Ausblick

A Ein Anhangskapitel

Hier könnte ein Anhang stehen, falls Sie z.B. Code, Konstruktionszeichnungen oder Ähnliches mit in die Arbeit bringen wollen. Im Normalfall stehen jedoch alle Ihre Resultate im Hauptteil der Bachelorarbeit und ein Anhang ist überflüssig.

Literatur

- [1] A. G. Fainshtein, N. L. Manakov und L. P. Rapoport. „Some general properties of quasi-energetic spectra of quantum systems in classical monochromatic fields“. In: *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 11.14 (1978), S. 2561.
- [2] P. Hänggi. *Quantum Transport and Dissipation*. Wiley-VCH, 1998. Kap. 5.
- [3] K. Husimi. „Miscellanea in Elementary Quantum Mechanics,II“. In: *Progress of Theoretical Physics* 9.4 (1953), S. 381–402.
- [4] M. Jørgensen. „Driven Problems in Quantum and Classical Mechanics with Floquet Theory“. Bachelorarbeit. University of Copenhagen, 2015.
- [5] R. M. McDermott und I. H. Redmount. „Coupled Classical and Quantum Oscillators“. In: *eprint arXiv:quant-ph/0403184* (März 2004). Zugriff am: 03.08.18.
- [6] J. Shirley. „Solution of the Schrödinger Equation with a Hamiltonian Periodic in Time“. In: *Phys. Rev.* 138.4B (1965), S. 979–987.

Eidesstattliche Versicherung

Ich versichere hiermit an Eides statt, dass ich die vorliegende Abschlussarbeit mit dem Titel „Floquet-Theorie, Erwartungswerte und zweite Quantisierung von periodisch getriebenen quantenmechanischen Oszillatoren“ selbstständig und ohne unzulässige fremde Hilfe erbracht habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt, sowie wörtliche und sinngemäße Zitate kenntlich gemacht. Die Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Ort, Datum

Unterschrift

Belehrung

Wer vorsätzlich gegen eine die Täuschung über Prüfungsleistungen betreffende Regelung einer Hochschulprüfungsordnung verstößt, handelt ordnungswidrig. Die Ordnungswidrigkeit kann mit einer Geldbuße von bis zu 50 000 € geahndet werden. Zuständige Verwaltungsbehörde für die Verfolgung und Ahndung von Ordnungswidrigkeiten ist der Kanzler/die Kanzlerin der Technischen Universität Dortmund. Im Falle eines mehrfachen oder sonstigen schwerwiegenden Täuschungsversuches kann der Prüfling zudem exmatrikuliert werden (§ 63 Abs. 5 Hochschulgesetz –HG–).

Die Abgabe einer falschen Versicherung an Eides statt wird mit Freiheitsstrafe bis zu 3 Jahren oder mit Geldstrafe bestraft.

Die Technische Universität Dortmund wird ggf. elektronische Vergleichswerkzeuge (wie z. B. die Software „turnitin“) zur Überprüfung von Ordnungswidrigkeiten in Prüfungsverfahren nutzen.

Die oben stehende Belehrung habe ich zur Kenntnis genommen.

Ort, Datum

Unterschrift