

Max-Planck-Institut für Quantenoptik

Das Drei-Körper-Coulombproblem unter periodischem Antrieb

Peter Schlagheck

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Physik der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr., Dr. h.c. A. Laubereau

Prüfer der Dissertation:

1. apl. Prof. Dr. J. Meyer-ter-Vehn

2. Univ.-Prof. Dr. H. Friedrich

Die Dissertation wurde am 26. 2. 1999 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am 11. 5. 1999 angenommen.

Zusammenfassung

Wir präsentieren eine detaillierte Analyse der klassischen und quantenmechanischen Dynamik der Frozen-Planet-Konfiguration von Helium im externen elektromagnetischen Feld. Es wird gezeigt, daß der klassische Phasenraum der kollinearen, getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration gemischt regulär-chaotische Struktur aufweist. Insbesondere enthält er reguläre Inseln, die nichtlinearen Resonanzen zwischen dem externen Antrieb und der korrelierten Dynamik der ungestörten Konfiguration entsprechen. Die diesen nichtlinearen Resonanzen entsprechende Konfiguration zeichnet sich im allgemeinen durch transversale Instabilität aus, läßt sich jedoch mit Hilfe eines zusätzlichen, statischen elektrischen Feldes bezüglich Abweichungen von der Kollinearität stabilisieren. Die auf diese Weise stabilisierten Resonanzen entsprechen im quantenmechanischen System nichtdispergierenden Zwei-Elektronen-Wellenpaketen, die für experimentell zugängliche Quantenzahlen im Spektrum des getriebenen Helium-Atoms erwartet werden. Diese Hypothese wird durch quantenmechanische Rechnungen zum kollinearen, getriebenen Helium-Atom untermauert. In der Tat finden wir bei Quantenzahlen $N \leq 10$ des inneren Elektrons auf der feldinduzierten Resonanzinsel lokalisierte, nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete. Deren Lebensdauern liegen im Bereich von $10^4 \dots 10^7$ Feldzyklen und weisen starke Fluktuationen auf, die auf die gemischt regulär-chaotische Struktur des klassischen Phasenraums zurückzuführen sind.

Abstract

We present a detailed analysis of the classical and quantum dynamics of the frozen-planet configuration of helium in an external electromagnetic field. We show that the classical phase space of the collinear, driven configuration exhibits a mixed regular-chaotic structure. In particular, it contains regular islands which correspond to nonlinear resonances between the external driving and the correlated dynamics of the unperturbed configuration. Along these resonances, the configuration is generally characterized by transverse instability. However, the application of an additional, static electric field allows to stabilize the configuration with respect to deviations from collinearity. The thereby stabilized resonances correspond to nondispersing two-electron wave packets in the quantum mechanical system, which are expected at experimentally accessible quantum numbers. This hypothesis is supported by quantum calculations on the collinear, driven helium atom. Indeed, we find nondispersing two-electron wave packets which are localized on the field-induced resonance island for quantum numbers $N < 10$ of the inner electron. They are characterized by life times of the order of $10^4 \dots 10^7$ field cycles, which exhibit strong fluctuations due to the mixed regular-chaotic structure of the classical phase space.

Die vorliegende Arbeit wurde am Max-Planck-Institut für Quantenoptik in der Gruppe von Prof. Dr. Peter Lambropoulos unter der offiziellen Leitung von Prof. Dr. Jürgen Meyerter-Vehn und unter der Betreuung von Dr. Andreas Buchleitner erstellt. Prof. Lambropoulos danke ich für die Aufnahme in seiner Arbeitsgruppe und für sein stetes Interesse am Fortgang der Arbeit. An dieser Stelle möchte ich mich auch bei allen Mitgliedern der Theoriegruppe, die innerhalb des Zeitraums von 1995 bis 1999 am MPQ tätig gewesen waren, für die freundliche, offene Arbeitsatmosphäre bedanken. Insbesondere bedanke ich mich auch bei Fr. Renate Weise-McKnight, dem guten Geist der Theoriegruppe, für ihre stete Aufmunterung, sowie bei Dr. Reinhard Volk für vielfältige Unterstützung im computertechnischen Bereich.

Bedanken möchte ich mich auch bei Dr. Dominique Delande und Dr. Benoît Grémaud vom Laboratoire Kastler-Brossel in Paris für viele interessante und hilfreiche Diskussionen sowie für einen zweiwöchigen Aufenthalt in Paris. Des weiteren möchte ich mich auch bei Prof. Ken Taylor bedanken, der mir einen zweiwöchigen Aufenthalt an der Queen's University in Belfast ermöglicht hat. Auch bei Dr. Oriol Bohigas bedanke ich mich für einen Aufenthalt am Institut de Physique Nucléaire in Orsay, aus dem sich interessante Diskussionen ergeben haben.

Vor allem aber bedanke ich mich bei Andreas Buchleitner. Sein außerordentliches Engagement und seine vorbildliche Betreuung haben entscheidend zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen. Gerne blicke ich auf drei Jahre enger Zusammenarbeit mit Andreas zurück, die nicht nur in physikalischer Hinsicht lehrreich und interessant waren.

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
1.1 Hintergrund und Themenstellung	1
1.2 Gliederung	3
I Klassische Mechanik der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration	7
2 Die Frozen-Planet-Konfiguration des klassischen Helium-Atoms	9
2.1 Allgemeines zum klassischen Helium-Atom	9
2.2 Die Frozen-Planet-Konfiguration	13
2.3 Adiabatische Theorie der Frozen-Planet-Konfiguration	17
3 Formale Behandlung des klassischen Systems	22
3.1 Fundamentale Eigenschaften des klassischen Systems	22
3.2 Regularisierung der Bewegungsgleichungen	24
4 Die kollinare, getriebene Frozen-Planet-Konfiguration	28
4.1 Phasenraumvisualisierung	29
4.2 Der Phasenraum der kollinearen, getriebenen Konfiguration	33
5 Abweichungen von der Kollinearität	42
5.1 Bestimmung der transversalen Stabilitätseigenschaften	44
5.2 Transversal stabile und instabile Gebiete	47
5.3 Dynamik instabiler, gekippter Konfigurationen	57
6 Konsequenzen für das quantenmechanische System	65
6.1 Quantenmechanische Entsprechung regulärer Inseln	65
6.2 Quantisierung der Inseln des kollinearen Phasenraums	67
6.3 Quantenzustände auf Inseln im nichtkollinearen Phasenraum	69

7 Stabilisierung durch ein statisches elektrisches Feld	72
7.1 Stabilisierung der Konfiguration gegen Kippen und Ionisation	73
7.2 Konsequenzen für das quantenmechanische System	80
II Quantenmechanik des kollinearen, getriebenen Helium-Atoms	83
8 Formulierung und numerische Lösung des Eigenwertproblems	85
8.1 Der Hamiltonoperator der kollinearen Zee-Konfiguration	86
8.2 Das Floquet-Theorem	89
8.3 Komplexe Skalierung	90
8.4 Entwicklung nach Sturmschen Basisfunktionen	93
8.5 Visualisierung der Wellenfunktion	96
9 Das Spektrum des kollinearen Zee-Helium-Atoms	99
9.1 Energien der autoionisierenden Zustände	99
9.2 Ionisationsbreiten	102
9.3 Wellenfunktionen	105
10 Das kollinare Helium-Atom unter externem Antrieb	112
10.1 Floquet-Zustände in Abhängigkeit der Feldamplitude	114
10.2 Stationäre Zustände und nichtdispergierende Wellenpakete	124
10.3 Lebensdauern der Wellenpaketzustände	129
10.4 Einfluß eines zusätzlichen, statischen elektrischen Feldes	134
11 Zusammenfassung und Ausblick	140
11.1 Zusammenfassung der Arbeit	140
11.2 Perspektiven	142
Anhang	145
A.1 Numerische Integration der Bewegungsgleichungen	145
A.2 Berechnung der Matrixelemente in der Sturmschen Basis	146
A.3 Konvergenz der quantenmechanischen Rechnungen	147
Literaturverzeichnis	149
Vorveröffentlichungen	156

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Hintergrund und Themenstellung

Im vergangenen Jahrzehnt sind erhebliche Anstrengungen unternommen worden, ein umfassendes Verständnis der Dynamik von Zwei-Elektronen-Atomen im starken elektromagnetischen Feld zu gewinnen (siehe etwa [1] für einen Überblick). Verschiedene numerische Verfahren wurden entwickelt bzw. ausgebaut (etwa [2, 3, 4, 5]), um eine quantitative Beschreibung von Anregungs- und Ionisationsprozessen zu ermöglichen, die in Experimenten zur Wechselwirkung von Zwei-Elektronen-Atomen mit starken Laserfeldern typischerweise auftreten. Einer der zentralen Aspekte ist dabei die Fragestellung, inwieweit Zwei-Elektronen-Effekte bzw. „Korrelationseffekte“ (d.h. Effekte, die nicht im Rahmen eines effektiven Einteilchenbildes, etwa der Hartree-Fock-Methode, beschrieben werden können [1]) in solchen Prozessen eine Rolle spielen bzw. wie derartige Korrelationseffekte zu interpretieren sind. Insbesondere Experimente zur Doppelionisation von Helium (etwa [6]), die deutliche Anzeichen für eine Signatur derartiger Korrelationseffekte gezeigt haben, stimulierten intensive, auf unterschiedlichsten Näherungsverfahren basierende Untersuchungen zu diesem Thema (etwa [7, 8, 9]).

In der vorliegenden Arbeit wird die Dynamik korrelierter Zwei-Elektronen-Atome im externen elektromagnetischen Feld unter dem in diesem Zusammenhang bislang unbeachteten *klassischen* Aspekt untersucht. Wir betrachten, gewissermaßen komplementär zum Studium von Korrelationseffekten in vom Grundzustand (bzw. von niedrig angeregten Zuständen) ausgehenden Ionisationsprozessen, Zustände bzw. Konfigurationen im *doppelt* angeregten Bereich, die sich aufgrund der zugrunde liegenden *klassischen* Dynamik a priori durch ein hohes Maß an Elektron-Elektron-Korrelation auszeichnen, und untersuchen, wie sich derartige Konfigurationen unter der Einwirkung eines externen elektromagnetischen Feldes verhalten. Dabei interessieren wir uns insbesondere für den Aspekt der Koexistenz regulärer und chaotischer Dynamik im klassischen Phasenraum. Speziell untersuchen wir, inwieweit durch die Kombination der externen Störung und der intrinsischen, der Elektron-Elektron-Wechselwirkung

entsprechenden Nichtlinearität des atomaren Systems Gebiete regulärer Bewegung im klassischen Phasenraum induziert werden, sowie welche Konsequenzen sich aus der Existenz dieser regulären Gebiete für das quantenmechanische, getriebene Helium-Atom ergeben. Wir steuern damit nicht unmittelbar auf den Parameter- bzw. Anregungsbereich zu, der in oben genannten Arbeiten im Zusammenhang mit der Wechselwirkung von Zwei-Elektronen-Atomen mit starken elektromagnetischen Feldern typischerweise betrachtet wird. Unser Zugang zur hochkorrelierten Zwei-Elektronen-Dynamik ist jedoch *frei* von willkürlichen Annahmen und Näherungen und erlaubt somit allgemeine Aussagen, die prinzipiell auch für die Beschreibung von Laserionisationsprozessen aus niedrig angeregten Zuständen relevant sind.

In der Tat ist die klassische Mechanik des durch ein externes elektromagnetisches Feld getriebenen Helium-Atoms bislang so gut wie unerforscht geblieben. Es wurden zwar Ansätze zu einer Beschreibung von Ionisationsprozessen in Zwei-Elektronen-Atomen anhand „klassischer“ bzw. quasiklassischer Modelle unternommen [9, 10, 11, 12, 13]. Diese Modelle verwenden jedoch entweder eine geglättete, nichtsinguläre Coulomb-Wechselwirkung [9, 10, 11] oder zusätzliche Terme in der Wechselwirkung zwischen den geladenen Teilchen [12, 13]. Sie erscheinen somit als letztlich ungeeignet, um mehr als nur grobe qualitative Eigenschaften des betrachteten Systems zu reproduzieren. Des weiteren enthalten diese Modelle freie Parameter, was im Hinblick auf den Vergleich der erzielten Ergebnisse mit experimentellen Resultaten nicht unproblematisch ist.

Im Gegensatz zu solchen Modellsystemen ist der Zusammenhang der *ungeschönten* klassischen Mechanik mit dem realen, quantenmechanischen System in *wohldefinierter* Weise durch den semiklassischen Grenzfall der Quantenmechanik gegeben. Die Kenntnis der klassischen Mechanik eines atomaren Systems erlaubt somit über die entsprechende semiklassische Theorie weitreichende Vorhersagen und Interpretationen zur Quantendynamik dieses Systems, insbesondere auch im Bereich niedriger atomarer Anregungen. Dies haben unter anderem die von Richter und Wintgen initiierten Arbeiten zum klassischen und semiklassischen Helium-Atom gezeigt [14, 15].

Ein herausragendes Beispiel stellt die erst vor kurzem entdeckte [16], hochkorrelierte „Frozen-Planet-Konfiguration“ des Helium-Atoms dar, in der sich beide Elektronen in einer quasi-kollinearen Anordnung auf der *gleichen* Seite des Kerns befinden. Entgegen der Intuition zeichnet sich diese Konfiguration durch klassische Stabilität gegen Autoionisation aus, die in wesentlichem Maße auf die nichtlineare, im Vergleich zur Kernanziehung nichtvernachlässigbare Elektron-Elektron-Wechselwirkung zurückzuführen ist. Diese Stabilität bewirkt, daß im quantenmechanischen Helium-Atom bereits für relativ niedrige Doppelanregungen langlebige und hochkorrelierte autoionisierende Zustände auftreten, die entlang des klassischen Orbitals der Frozen-Planet-Konfiguration lokalisiert sind [17].

Gestützt auf diese Erfahrung mit dem ungestörten Drei-Körper-Coulombproblem wollen

wir hier die Dynamik der Frozen-Planet-Konfiguration unter dem Einfluß einer periodischen Kraft untersuchen. Von besonderem Interesse wird dabei die Situation sein, in der Feldstärke und Frequenz des externen Antriebs in der Nähe der die Dynamik der ungestörten Konfiguration charakterisierenden intrinsischen Feldstärke- und Frequenzskalen liegen, das atomare System also einem starken, *nahresonanten* Antrieb unterworfen wird. Wie Arbeiten zum Wasserstoffatom im externen Mikrowellenfeld gezeigt haben [18, 19, 20, 21], treten bei einem derartigen resonanten Antrieb des Ein-Elektron-Atoms Quantenzustände im Floquet-Spektrum auf, die im Konfigurationsraum *nichtdispergierenden Wellenpaketen* entsprechen, die der resonant getriebenen Kepler-Trajektorie über einen Zeitraum von über 10^6 Keplerzyklen folgen. Die hohe Stabilität dieser nichtdispergierenden Wellenpakete ist im wesentlichen ein klassisches Phänomen: Im Phasenraum sind diese Wellenpaketzustände auf regulären, *nichtstationären* Inseln lokalisiert, die durch die nichtlineare Resonanz zwischen dem externen Antrieb und der ungestörten Kepler-Bewegung erzeugt werden.

Wie die vorliegende Arbeit zeigt, läßt sich das Konzept nichtdispergierender Wellenpakete, die mit feldinduzierten regulären Inseln des klassischen Phasenraums assoziiert sind, auch auf Zwei-Elektronen-Atome übertragen. Unsere Analyse des klassischen Phasenraums der extern getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration von Helium belegt dessen regulär-chaotische Struktur und insbesondere die Existenz regulärer Inseln, die nichtlinearen Resonanzen zwischen dem externen Antrieb und der ungestörten, korrelierten Zwei-Elektronen-Dynamik entsprechen. Im Quantenspektrum induzieren derartige nichtlineare Resonanzen auf den zugehörigen regulären Inseln lokalisierte Eigenzustände, die wegen der zeitlich periodischen Phasenraumstruktur dieser Inseln (induziert durch die Periodizität der die Dynamik erzeugenden Hamiltonfunktion) tatsächlich *nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete* darstellen. Wir weisen die Existenz dieser Wellenpakete durch Lösung des quantenmechanischen Eigenwertproblems für die kollineare, getriebene Konfiguration explizit nach.

Unser eingehendes Studium der klassischen und quantenmechanischen Dynamik der hochkorrelierten Zwei-Elektronen-Konfiguration weist schließlich auf wesentliche *qualitative* Unterschiede zwischen der dimensionsreduzierten und der uneingeschränkt hochdimensionalen Dynamik des betrachteten Systems hin, die insbesondere die Stabilität der Konfiguration in klassischer wie in quantenmechanischer Hinsicht betreffen. Diese Beobachtung impliziert auch eine deutliche *Warnung* hinsichtlich der Reduktion der Dreikörperdynamik auf quasi eindimensionale Modellsysteme mit geglätteter Coulomb-Singularität [10, 11].

1.2 Gliederung

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in zwei Teile. In **Teil I** wird die klassische Mechanik der Frozen-Planet-Konfiguration im externen elektromagnetischen Feld analysiert.

Wir liefern zunächst in **Kapitel 2** einen Überblick über bereits bestehende Erkennt-

nisse zum klassischen Helium-Atom im allgemeinen sowie zur Frozen-Planet-Konfiguration des klassischen Helium-Atoms im besonderen. Wir gehen dabei vor allem auf die kollineare Frozen-Planet-Konfiguration sowie auf deren approximative Beschreibung anhand der Theorie der adiabatischen Invarianten ein.

In **Kapitel 3** werden formale Eigenschaften des klassischen Atoms im externen elektromagnetischen Feld dargelegt. Es wird darüber hinaus die Variablentransformation beschrieben, die für die numerische Behandlung des Systems erforderlich ist.

Kapitel 4 wendet sich der klassischen Dynamik der extern getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration zu. Wir betrachten zunächst den Unterraum des klassischen Phasenraums, der der kollinearen Frozen-Planet-Konfiguration entspricht. Es zeigt sich, daß der Phasenraum durch die Anwesenheit der externen Störung gemischt regulär-chaotisch wird und reguläre Inseln enthält, die nichtlinearen Resonanzen zwischen dem externen Feld und der Dynamik der ungestörten Konfiguration entsprechen.

In **Kapitel 5** wird die Dynamik in der unmittelbaren Umgebung des kollinearen Phasenraums untersucht. Es wird ermittelt, inwieweit die regulären Gebiete des kollinearen Phasenraums durch Stabilität bezüglich Abweichungen von der Kollinearität gekennzeichnet sind und somit regulären Inseln im Phasenraum der dreidimensionalen Bewegung entsprechen. Aspekte der regulären bzw. irregulären Dynamik in der Umgebung der Inseln des kollinearen Phasenraums werden erörtert.

Der Bezug zur Quantenmechanik wird in **Kapitel 6** hergestellt. Es wird erläutert, welche Eigenschaften Quantenzustände aufweisen, die auf regulären Inseln des klassischen Phasenraums lokalisiert sind. Des weiteren wird anhand des semiklassischen Einstein-Brillouin-Keller (EBK)-Quantisierungskriteriums abgeschätzt, ab welchen Anregungen derartige Zustände im Quantenspektrum zu erwarten sind.

Im Hinblick auf die Erzeugung nichtdispergierender Zwei-Elektronen-Wellenpakete wird in **Kapitel 7** die Dynamik der getriebenen Konfiguration in einem zusätzlichen, statischen elektrischen Feld untersucht. Es wird gezeigt, daß ein derartiges statisches elektrisches Feld bei geeigneten Feldparametern die Dynamik in der transversalen Umgebung von regulären Inseln des kollinearen Phasenraums stabilisiert. Anhand des EBK-Kriteriums ergibt sich, daß Quantenzustände entlang der so stabilisierten Resonanzen für experimentell zugängliche Quantenzahlen erwartet werden.

Im **Teil II** der Arbeit wird die Quantenmechanik der kollinearen, getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration behandelt.

In **Kapitel 8** wird zunächst die Formulierung und numerische Behandlung des eindimensionalen Quantensystems beschrieben. Insbesondere werden dabei die Floquet-Theorie, die komplexe Skalierung und die wesentlichen Eigenschaften der Sturmschen Basis beschrieben.

In **Kapitel 9** wird das quantenmechanische Spektrum des ungestörten kollinearen Helium-

Atoms untersucht. Es wird gezeigt, daß die autoionisierenden Zustände dieses Systems durch Eigenschaften gekennzeichnet sind, die sich unmittelbar aus den regulären Strukturen des zugrunde liegenden klassischen Phasenraums ergeben.

Kapitel 10 behandelt die Quantenmechanik des extern getriebenen kollinearen Systems. Floquet-Zustände, die mit den regulären Inseln des klassischen Phasenraums assoziiert sind, werden identifiziert. Es wird gezeigt, wie diese Floquet-Zustände aus den Eigenzuständen des ungestörten Systems hervorgehen. Die Lebensdauern dieser Zustände sowie deren Verhalten im zusätzlichen statischen Feld werden diskutiert.

Die Arbeit schließt mit einer **Zusammenfassung** der wesentlichen Ergebnisse der Arbeit sowie einem **Ausblick** auf weiterführende Fragestellungen. Im **Anhang** der Arbeit werden die Konvergenz der klassischen und der quantenmechanischen Rechnungen diskutiert sowie die Berechnung der Hamilton-Matrixelemente in der Sturmschen Basis aufgezeigt.

Teil I

Klassische Mechanik der
getriebenen
Frozen-Planet-Konfiguration

Kapitel 2

Die Frozen-Planet-Konfiguration des klassischen Helium-Atoms

2.1 Allgemeines zum klassischen Helium-Atom

Während die Untersuchung des quantenmechanischen Helium-Atoms innerhalb der letzten Jahrzehnte kontinuierlich vorangetrieben wurde und heute ein beachtliches Niveau erreicht hat [22, 23, 24], ist die klassische Dynamik von Helium zum großen Teil noch unerforscht. Die ersten Arbeiten zum klassischen Helium-Atom stammen aus der Anfangszeit der Quantentheorie [25, 26, 27, 28]. Spezielle periodische Orbits wurden untersucht, anhand derer man über eine geeignete, dem Wasserstoff-Atom analoge Vorschrift das Helium-Atom zu quantisieren (bzw. dessen Ionisationspotential korrekt zu reproduzieren) suchte. Bedingt durch das Scheitern dieser Quantisierungsversuche (das unter anderem auf die Nichtintegrabilität der klassischen Dynamik von Helium zurückzuführen ist [29]) sowie durch den Erfolg der quantenmechanischen Theorie erlosch das Interesse am klassischen Helium-Atom. Abgesehen von vereinzelten Ausnahmen (wie [30]) erschienen erst in den achtziger Jahren, vor dem Hintergrund der Fortentwicklung der semiklassischen Theorie [31, 32, 33, 34, 35], neue Arbeiten zum klassischen Helium-Atom, die zum Teil auf die historischen Quantisierungsversuche [25, 26, 27, 28] bezug nahmen [36, 37, 38], zum Teil aber auch das klassische Helium-Atom unter neuen Gesichtspunkten wie etwa der Veranschaulichung quantenmechanischer Prozesse [39] oder der Untersuchung dynamischer Gleichgewichtskonfigurationen [40, 41, 42, 43] betrachteten.

Die Erfolge der semiklassischen Theorie bei der Beschreibung von nichtintegrablen Systemen (etwa Wasserstoff im Magnetfeld [44]) stimulierten weitergehende Untersuchungen zum klassischen Helium-Atom. Die ersten (und in ihrer Ausführlichkeit bisher einzigen) systematischen Phasenraumanalysen wurden von Richter und Wintgen unternommen [14, 15]. Im Hinblick auf eine semiklassische Quantisierung anhand stabiler und instabiler periodischer

Orbits untersuchten sie die unter dem Einfluß der klassischen Dynamik invarianten Symmetrieräume innerhalb des zweidimensionalen Konfigurationsraums wie etwa den „Wannier-Sattel“ [45] sowie die „Frozen-Planet-Konfiguration“ [16, 17, 46]. Weitere, zum Teil auf diesen Untersuchungen aufbauende Arbeiten, die ebenfalls im Hinblick auf eine semiklassische Quantisierung unternommen wurden, erschienen zur kollinearen Konfiguration mit beiden Elektronen auf entgegengesetzten Seiten des Kerns [47, 48, 49] (die später auch unter dem Aspekt von klassischem chaotischen Streuen studiert wurde [50, 51, 52]), zum „Langmuir-Orbit“ [53], sowie zur „asynchronen“ Konfiguration [54, 55]. Die von Richter und Wintgen entdeckte Frozen-Planet-Konfiguration wurde in einer globalen Suche nach regulären Gebieten innerhalb des zweidimensionalen Konfigurationsraums [56] als stabile Konfiguration bestätigt, sowie von mehreren Gruppen [57, 58, 59, 60, 61] im Hinblick auf die Anwendung geeigneter Näherungsverfahren untersucht.

Die bisherigen Untersuchungen haben gezeigt, daß die klassische Dynamik von Helium überwiegend chaotisch ist, was zur Folge hat, daß die allermeisten Anfangsbedingungen im klassischen Helium-Atom zur Autoionisation führen. Am eingehendsten untersucht sind dabei die von Richter und Wintgen betrachteten Symmetrieebenen. Innerhalb bzw. in der Umgebung dieser Symmetrieebenen hat sich gezeigt, daß vor allem diejenigen Konfigurationen, bei denen sich die Elektronen im wesentlichen auf entgegengesetzten Seiten des Kerns befinden, durch Instabilität gekennzeichnet sind; Abweichungen von dem einer solchen Konfiguration entsprechenden periodischen Orbit – insbesondere solche, die einer Variation des Verhältnisses r_1/r_2 der Kernabstände entsprechen – verstärken sich im Lauf der Zeitentwicklung exponentiell und führen zur Autoionisation.

Ein typisches Beispiel stellt der „Wannier-Orbit“ [30] dar, der den durch $\mathbf{r}_1 = -\mathbf{r}_2$, $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2$ definierten Wannier-Sattel konstituiert [40, 45, 62] (\mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 und \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 bezeichnen die Orte bzw. Impulse der Elektronen 1 und 2): Variiert man das Verhältnis der Kernabstände, d.h. führt man ein Elektron dem Kern näher zu und entfernt das andere etwas vom Kern, so bewirkt die veränderte effektive Kernladungsabschirmung, daß das innere Elektron vom Kernpotential eingefangen wird, während das äußere Elektron ins Unendliche abgestoßen wird (Abb. 2.1a). Diese Instabilität – quantifiziert durch den Lyapunov-Exponenten, der die Zeitskala angibt, auf der infinitesimal benachbarte Trajektorien auseinanderlaufen – nimmt zu mit zunehmender Exzentrizität des Orbits und wird im Grenzfall einer kollinearen Anordnung aufgrund der involvierten Dreifachkollision unendlich groß [45].

Ein Beispiel für einen *stabilen* periodischen Orbit im klassischen Helium-Atom stellt der Langmuir-Orbit dar, der erstmals von Langmuir für die Quantisierung von Helium vorgeschlagen wurde [26] und dem fundamentalen periodischen Orbit innerhalb des durch $x_1 = x_2$, $y_1 = -y_2$, $z_1 = z_2 = 0$, $p_{x1} = p_{x2}$, $p_{y1} = -p_{y2}$, $p_{z1} = p_{z2} = 0$ definierten Symmetrieraums entspricht (mit $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ und $\mathbf{p}_i = (p_{xi}, p_{yi}, p_{zi})$). Kleine Abweichungen von diesem Or-

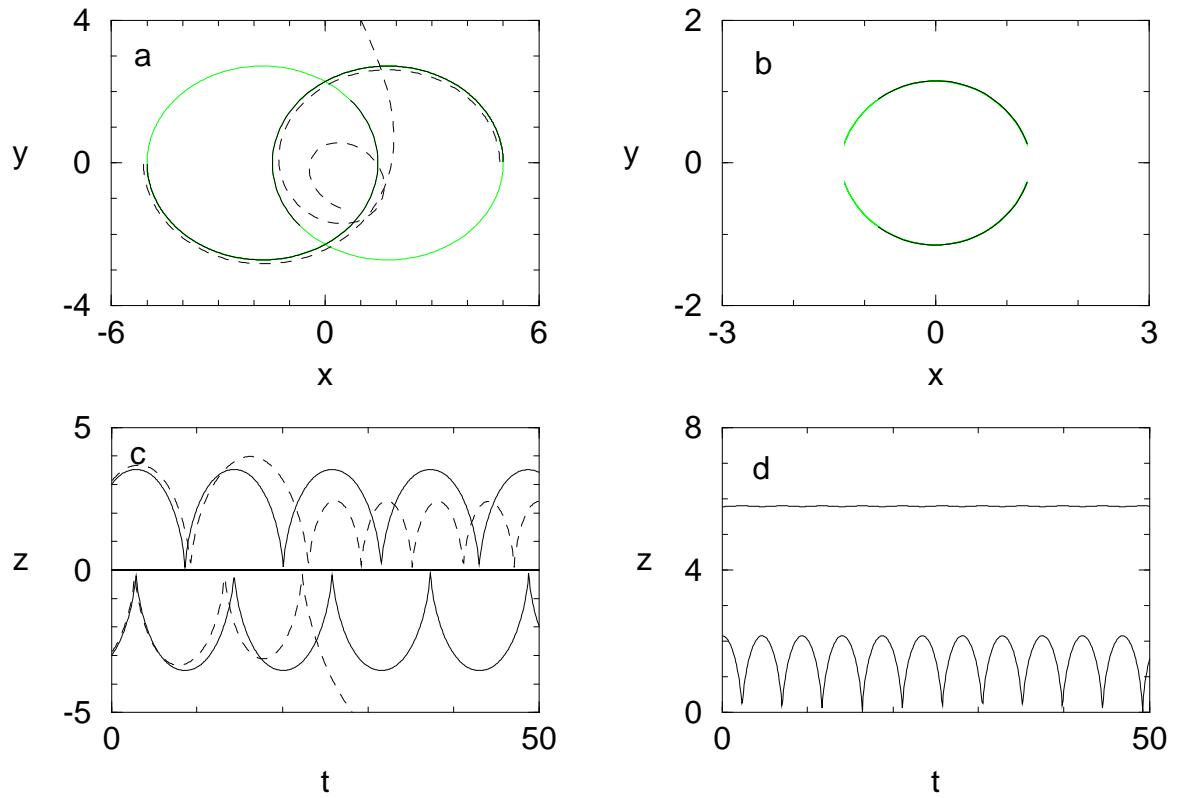


Abb. 2.1: Einige periodische Orbits des klassischen Helium-Atoms. (a) Instabiler Wannier-Orbit. (b) Stabiler Langmuir-Orbit. (c) Instabiler Asymmetric-Stretch-Orbit. (d) Stabiler Frozen-Planet-Orbit. (a) und (b): Trajektorien innerhalb des zweidimensionalen Konfigurationsraums; (c) und (d): Zeitentwicklung innerhalb des kollinearen Konfigurationsraums (der Kern befindet sich jeweils bei $x = y = z = 0$). Die gestrichelten Linien in (a) und (c) zeigen Trajektorien, die sich ergeben, wenn eines der Elektronen vom Kern etwas entfernt, das andere dem Kern etwas zugeführt wird. x, y, z und t sind in atomaren Einheiten gegeben.

bit führen zu regulären, quasiperiodischen Oszillationen, die auf die unmittelbare Umgebung des Langmuir-Orbits beschränkt bleiben; der Langmuir-Orbit bildet damit eines der wenigen regulären Gebiete innerhalb des überwiegend chaotischen Phasenraums des klassischen Helium-Atoms (das andere bekannte reguläre Gebiet ist die Frozen-Planet-Konfiguration) [45]. Der Parameterbereich, innerhalb dessen r_1/r_2 variiert werden kann, ohne die Konfiguration zu destabilisieren, ist jedoch so klein, daß eine semiklassische Quantisierung langlebige quantenmechanische Zustände, die vollständig auf dem Langmuir-Orbit lokalisiert sind, erst für sehr hohe Hauptquantenzahlen $N \sim 500$ erwarten läßt [53] (N entspricht der Hauptquantenzahl der Ionisationsschwelle von Helium, unterhalb der diese Zustände liegen). Tatsächlich wurden quantenmechanische Zustände mit erhöhter Wahrscheinlichkeitsdichte entlang des Langmuir-Orbits jedoch bereits bei der Hauptquantenzahl $N = 10$ entdeckt [63].

Innerhalb des kollinearen Phasenraums muß aufgrund der Coulomb-Singularität des Kerns, die die Elektronen in einer kollinearen Anordnung nicht überschreiten können (siehe etwa [60]), prinzipiell unterschieden werden zwischen der „Zee“-Konfiguration, bei der sich beide Elektronen auf der gleichen Seite des Kerns befinden, und der „eZe“-Konfiguration, bei der beide Elektronen auf entgegengesetzten Seiten des Kerns angeordnet sind. Entgegen der Intuition ist es die Zee-Konfiguration, welche sich durch einen (nahezu vollständig) regulären Phasenraum auszeichnet, während der Phasenraum der eZe-Konfiguration vollständig chaotisch ist: Sämtliche periodischen Orbits der eZe-Konfiguration sind instabil bezüglich Variationen innerhalb des kollinearen Phasenraums. Durch eine „Cycle Expansion“ der Produktdarstellung der Gutzwillerschen Spurformel [64, 65] konnte gezeigt werden, daß im wesentlichen nur ein einziger periodischer Orbit dieser Konfiguration, nämlich der in Abb. 2.1c gezeigte, einer gegenphasigen Stretschwingerung der Elektronen entsprechende „Asymmetric Stretch“-Orbit (also *nicht* der Wannier-Orbit), zur semiklassischen Zustandsdichte beiträgt [48]. Tatsächlich konnte in quantenmechanischen Rechnungen gezeigt werden, daß doppelt angeregte Zustände von Helium mit $\langle \cos \theta_{12} \rangle \approx -1$ (wobei θ_{12} den Zwischenwinkel zwischen den Elektronen bezeichnet), bei denen beide Elektronen also auf entgegengesetzten Seiten des Kerns angeordnet sind, entlang des Asymmetric-Stretch-Orbits lokalisiert sind [48, 66, 67].

Außerhalb der von Richter und Wintgen betrachteten Symmetrieräume wurde in [54, 55] die von den Autoren sogenannte „asynchrone“ Konfiguration untersucht, die im wesentlichen die Verallgemeinerung des Asymmetric-Stretch-Orbits auf den zweidimensionalen Konfigurationsraum darstellt. So gut wie unerforscht sind periodische Orbits innerhalb des zweidimensionalen Konfigurationsraums mit nichtverschwindendem Drehimpuls, die nicht dem Wannier-Sattel angehören (abgesehen von der rotierenden Frozen-Planet-Konfiguration [61]), sowie periodische Orbits außerhalb des zweidimensionalen Konfigurationsraums – abgesehen von quasistarr rotierenden Gleichgewichtskonfigurationen, bei denen sich die Abstände der Elektronen voneinander und vom Kern im Lauf der Zeit nicht ändern [40, 41, 42, 43] (diese

Konfigurationen haben sich ebenfalls als instabil erwiesen). Die Schwierigkeit bei der Erforschung des Phasenraums der dreidimensionalen Dynamik liegt in der Anzahl der Freiheitsgrade $f = 6$, die für eine Visualisierung etwa anhand von Poincaré-Schnitten zu hoch ist. Methoden wie die Stabilitätsanalyse einzelner periodischer Orbits sowie die globale Suche nach regulären Gebieten [56, 68] sind wahrscheinlich nur bedingt in der Lage, Einblick in die Phasenraumstruktur des dreidimensionalen Konfigurationsraums zu vermitteln.

2.2 Die Frozen-Planet-Konfiguration

Die Frozen-Planet-Konfiguration wurde erst vor knapp einem Jahrzehnt von Richter und Wintgen entdeckt [16] und im Anschluß daran von denselben Autoren im Hinblick auf ihre klassischen und semiklassischen Eigenschaften sowie auf ihre quantenmechanische Entsprechung eingehend analysiert [14, 15, 17, 46, 69]. In dieser Konfiguration befinden sich beide Elektronen auf der *gleichen* Seite des Atomkerns, wobei sie sich durch unterschiedlich hohe Anregungen auszeichnen, wir also ein „inneres“ und ein „äußeres“ Elektron unterscheiden. Das innere Elektron oszilliert auf extrem exzentrischen Kepler-Bahnen um den Kern. Das äußere Elektron wird durch die Bewegung des inneren Elektrons dynamisch stabilisiert und oszilliert um einen Gleichgewichtsabstand, der dadurch gekennzeichnet ist, daß sich dort die anziehende Kraft – die überwiegt, wenn das innere Elektron in der Nähe des Kerns ist – und die abstoßende Kraft – die überwiegt, wenn das innere Elektron den äußeren Umkehrpunkt seines Umlaufs erreicht – im Zeitmittel einer Kepler-Periode aufheben.

Der Name „Frozen-Planet-Konfiguration“ leitet sich von dem auf Percival zurückgehenden Begriff der „planetaren Zustände“ her [70], die doppelt hochangeregte Zustände des Zweielektronen-Atoms mit unterschiedlich hoher Anregung beider Elektronen bezeichnen. Bei der Frozen-Planet-Konfiguration handelt es sich also um eine einem planetaren Zustand ähnliche Konfiguration, bei der das äußere Elektron quasi „eingefroren“ ist. Der Begriff „frozen planet“ wurde von Eichmann und Mitarbeitern eingeführt [71], die hochaufgelöste Spektren doppelt hochangeregter Barium-Atome mit Hilfe einer in der betreffenden Arbeit sogenannten „Frozen-Planet-Approximation“ reproduzieren konnten: Bei dieser Näherung wird das äußere Elektron fixiert und die Wellenfunktion des inneren Elektrons im resultierenden statischen Zweikörperpotential berechnet [72].

Das besonders Antiintuitive dieser Konfiguration ist ihre Stabilität. Neben dem Langmuir-Orbit stellt die Frozen-Planet-Konfiguration die einzige bekannte Konfiguration des klassischen Helium-Atoms dar, die klassisch stabil gegen Autoionisation ist, d.h. bei der Abweichungen vom fundamentalen Orbit zu stabilen, quasiperiodischen Oszillationen führen. Das Phasenraumvolumen, innerhalb dessen die Frozen-Planet-Konfiguration stabil ist, ist überraschend groß, was in Abb. 2.2b angedeutet wird, die eine stabile, vom kollinearen fundamentalen Orbit der Konfiguration relativ stark abweichende Trajektorie zeigt. Die Frozen-

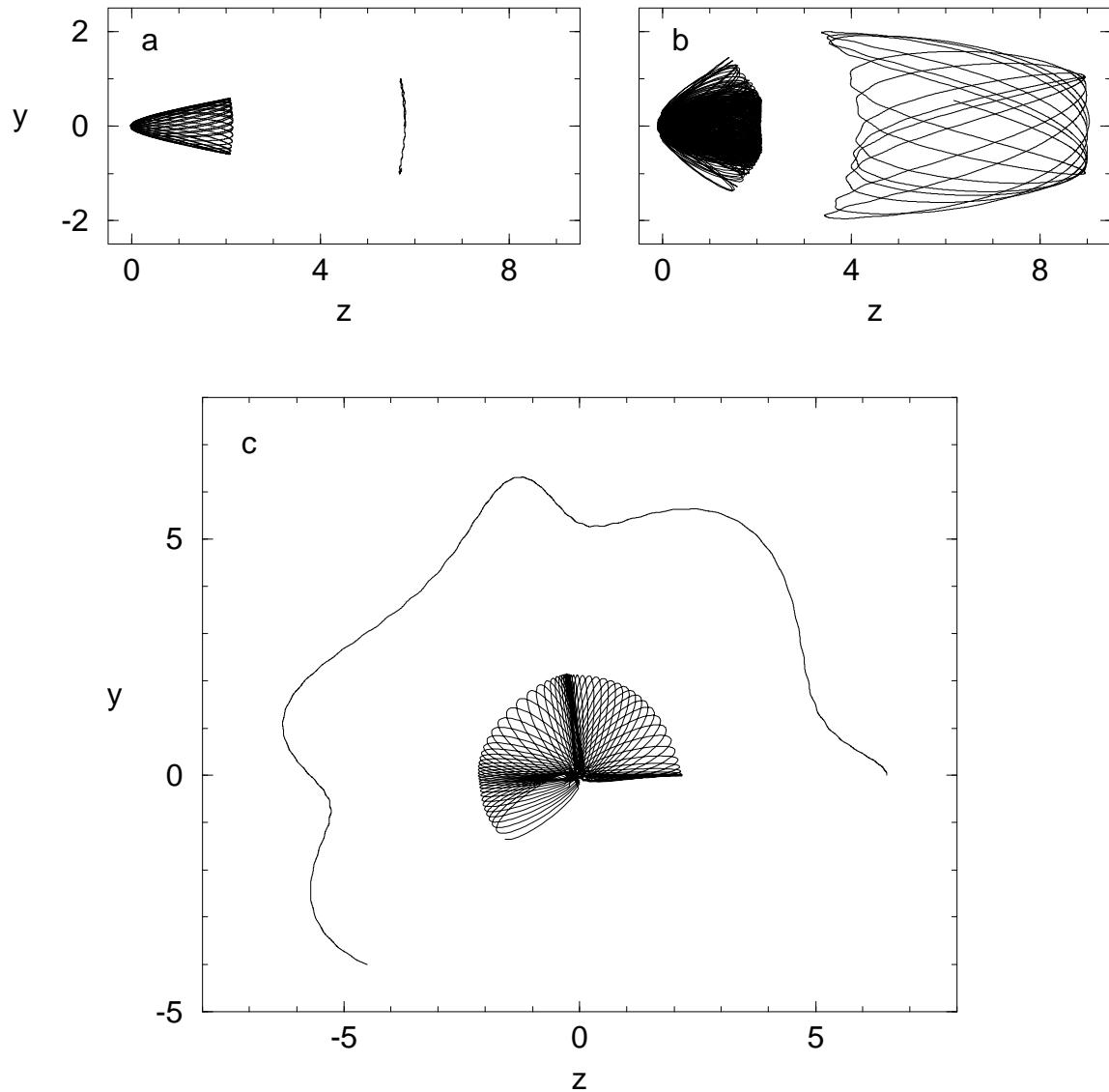


Abb. 2.2: Einige reguläre Trajektorien vom Typ der Frozen-Planet-Konfiguration von Helium im zweidimensionalen Konfigurationsraum (y und z sind in atomaren Einheiten gegeben). Während bei (a) und (b) der Gesamtdrehimpuls $L = 0$ ist, besitzt die Konfiguration in (c) einen nichtverschwindenden Gesamtdrehimpuls $L = 0.1625$ a.u.

Planet-Konfiguration ist auch stabil bezüglich Abweichungen, die einen nichtverschwindenden Gesamtdrehimpuls implizieren, und existiert somit auch, wie in Abb. 2.2c gezeigt wird, als rotierende Konfiguration (siehe auch [61]).

Eine Konsequenz des großen Phasenraumvolumens der stabilen Frozen-Planet-Konfiguration ist die Tatsache, daß sich diese im quantenmechanischen Spektrum bereits für relativ niedrige Doppelanregungen manifestiert: In *ab initio* Rechnungen zum doppelt angeregten Helium-Atom konnte gezeigt werden [17], daß für Hauptquantenzahlen $N \geq 3$ des inneren Elektrons autoionisierende Zustände existieren, die entlang des klassischen Frozen-Planet-Orbits lokalisiert sind. Diese Frozen-Planet-Zustände zeichnen sich durch sehr kleine Ionisationsbreiten aus (verglichen mit Zuständen gleicher Quantenzahl N , also mit Zuständen, die der gleichen Ionisationsschwelle von Helium angehören), die als Funktion von N im Mittel exponentiell abnehmen. Neben dem Asymmetric-Stretch-Orbit ist damit der Frozen-Planet-Orbit der einzige periodische Orbit des klassischen Helium-Atoms, der im Spektrum moderat doppelt angeregter Zustände ($N < 10$) mit niedrigem Drehimpuls nachgewiesen werden konnte [67].

Im Gegensatz zur theoretischen Berechnung ist ein experimenteller Zugang zu Frozen-Planet-Zuständen bislang noch nicht erfolgt [73]. Die Schwierigkeit, die mit der experimentellen Anregung von mit der Frozen-Planet-Konfiguration assoziierten Zuständen verbunden ist, besteht darin, daß diese Zustände aufgrund der speziellen Symmetrie der Frozen-Planet-Konfiguration einen verschwindend geringen Überlapp mit dem Grundzustand bzw. mit den vom Grundzustand aus leicht zugänglichen angeregten Zuständen aufweisen. Die Fortschritte, die im vergangenen Jahrzehnt im Hinblick auf die experimentelle Anregung hochangeregter planetarer Zustände in Zwei-Elektronen-Atomen erzielt wurden [71, 72, 74, 75], geben jedoch Anlaß zur Hoffnung, daß derartige Schwierigkeiten bald überwunden werden können.

Wir werden uns im folgenden insbesondere für die *kollineare* Frozen-Planet-Konfiguration interessieren, die der kollinearen *Zee*-Anordnung der Elektronen entspricht. Wie Richter, Wintgen und Mitarbeiter [14] gezeigt haben, ist der Phasenraum der kollinearen *Zee*-Konfiguration nahezu vollständig regulär und enthält ein großes Gebiet gebundener Bewegung, zentriert um den fundamentalen periodischen Orbit der Frozen-Planet-Konfiguration. Diese Regularität manifestiert sich darin, daß die Bewegungen beider Elektronen trotz ihrer starken Wechselwirkung nahezu unabhängig voneinander ablaufen: Das innere Elektron oszilliert auf exzentrischen, Kepler-artigen Trajektorien, die durch die langsame Oszillation des äußeren Elektrons nur sehr schwach moduliert werden; das äußere Elektron vollführt Oszillationen um den Gleichgewichtsabstand, denen die schnellen Oszillationen des inneren Elektrons nur sehr schwach überlagert sind (Abb. 2.3). Die kollineare Dynamik wird also durch zwei Moden konstituiert, die in sehr guter Näherung separieren: nämlich die Kepler-Mode und die langsame Oszillation um die Gleichgewichtslage (deren jede in der Bewegung *beider* Elektronen

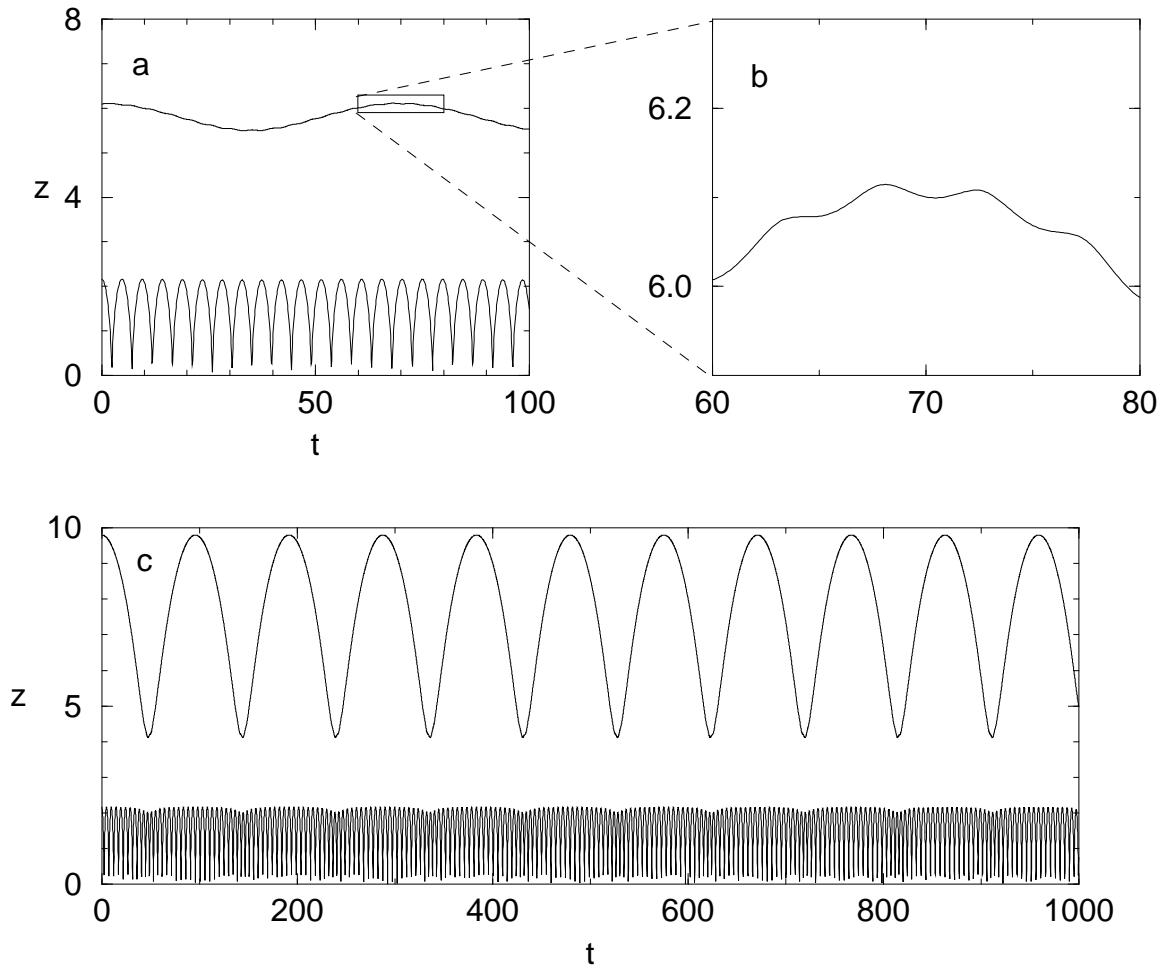


Abb. 2.3: Trajektorien der kollinearen Frozen-Planet-Konfiguration, aufgetragen als Funktion der Zeit (z und t sind in atomaren Einheiten gegeben). Wie man sieht, ist die reguläre Dynamik innerhalb des kollinearen Konfigurationsraums durch zwei Bewegungsmoden charakterisiert, die approximativ separieren: die der schnellen Kepler-Oszillation des inneren Elektrons entsprechende Mode, die sich in der Bewegung des äußeren Elektrons in Form von Oszillationen mit kleiner Amplitude abzeichnet (b), sowie die der langsamen Oszillation des äußeren Elektrons um die Gleichgewichtslage entsprechende Mode, die in der Bewegung des inneren Elektrons zu kleinen Modulationen der Amplitude des Kepler-Orbits führt (c).

aufscheint und sich daher, streng genommen, nicht mit einem einzelnen Elektron identifizieren läßt).

Es ist bemerkenswert, daß die approximative Separation der Moden innerhalb des kollinearen Konfigurationsraums auf die *Nichtvernachlässigbarkeit* der Elektron-Elektron-Wechselwirkung im Vergleich zur Kernanziehung zurückzuführen ist. Für zunehmende Kernladungszahlen $Z > 2$, für die die Stärke der Elektron-Elektron-Wechselwirkung geringer wird und das System sich scheinbar der regulären Dynamik zweier unkorrelierter Elektronen annähert, findet man einen gemischt regulär-chaotischen Phasenraum, dessen regulärer Anteil zunehmend kleiner wird und für $Z \geq 13$ vollständig verschwindet [17]. Umgekehrt wird für $Z \rightarrow 1$ der Phasenraum immer regulärer und die Separation zwischen den Elektronen immer besser (für $Z \leq 1$ existiert die Frozen-Planet-Konfiguration nicht, da bei derartigen Kernladungszahlen das äußere Elektron in dem durch den Kern und das innere Elektron gebildeten Potential nicht gebunden wird). Dies zeigt, wie wichtig das *gleichwertige* Zusammenspiel aller beteiligten Wechselwirkungen, der Kernanziehung und der Elektron-Elektron-Abstoßung, für das Zustandekommen der Frozen-Planet-Konfiguration ist.

2.3 Adiabatische Theorie der Frozen-Planet-Konfiguration

Die approximative Separation der schnellen Kepler-Mode und der langsamen Oszillation um den fundamentalen periodischen Orbit erlaubt die Anwendung verschiedener Näherungsverfahren zum Studium der Frozen-Planet-Konfiguration [57, 58, 59, 60, 61]. Für diese Arbeit von besonderem Interesse ist die von Ostrovsky und Prudov [59] durchgeführte Separation der Moden unter Verwendung der Theorie der adiabatischen Invarianten, über die die langsame Komponente der Oszillation des äußeren Elektrons innerhalb des kollinearen Konfigurationsraums durch die Bewegung in einem effektiven, den Abschirmungseffekt des inneren Elektrons berücksichtigenden Potential beschrieben werden kann.

Gemäß der Theorie der adiabatischen Invarianten [76] bleibt in einem Hamiltonschen System mit einem Freiheitsgrad q und zugehörigem kanonischen Impuls p das Wirkungsintegral $\oint p \, dq$ invariant, wenn ein externer Parameter der Hamiltonfunktion in sehr langsamer Weise zeitlich variiert wird (verglichen mit der Zeitskala, die die Dynamik von q und p charakterisiert). Im Fall der kollinearen Frozen-Planet-Konfiguration, die durch die Hamiltonfunktion

$$H = \frac{p_{z1}^2}{2} + \frac{p_{z2}^2}{2} - \frac{Z}{z_1} - \frac{Z}{z_2} + \frac{1}{z_1 - z_2} \quad (2.1)$$

mit den Ortskoordinaten z_1, z_2 und den Impulsen p_{z1}, p_{z2} des äußeren bzw. des inneren Elektrons beschrieben wird, läßt sich der Ort z_1 des äußeren Elektrons in dem Wechselwirkungsterm $1/(z_1 - z_2)$ als zeitlich langsam veränderlicher Parameter interpretieren, der die schnelle Oszillation des inneren Elektrons adiabatisch beeinflußt. Unter Anwendung der Theorie der adiabatischen Invarianten ergibt sich damit, daß das Wirkungsintegral $\oint p_{z2} \, dz_2$,

integriert über einen Zyklus der Kepler-Oszillation des inneren Elektrons, näherungsweise invariant bleibt als Funktion der Zeit.

Die Auswertung dieses Wirkungsintegrals läßt sich nach der Transformation der Variablen z_2, p_{z2} des inneren Elektrons auf die Winkel-Wirkungs-Variablen θ, I des eindimensionalen Kepler-Problems, definiert durch

$$z_2 =: \frac{I^2}{Z} (1 - \cos \zeta), \quad (2.2)$$

$$p_{z2} =: \frac{Z}{I} \frac{\sin \zeta}{1 - \cos \zeta}, \quad (2.3)$$

wobei die exzentrische Anomalie $\zeta(\theta)$ durch $\theta = \zeta - \sin \zeta$ gegeben ist, vornehmen. Ausgedrückt in diesen neuen Variablen lautet die Hamiltonfunktion (2.1)

$$H(z_1, p_{z1}, I, \theta) = \frac{p_{z1}^2}{2} - \frac{Z}{z_1} - \frac{Z^2}{2I^2} + \frac{1}{z_1 - \frac{I^2}{Z}(1 - \cos \zeta)}. \quad (2.4)$$

Die adiabatische Invarianz des Wirkungsintegrals läßt sich nun gemäß

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} I d\theta = N \quad (2.5)$$

formulieren, wobei N eine Konstante ist, die der „Wirkung“ der Kepler-ähnlichen Oszillation des inneren Elektrons entspricht (und bei der Quantisierung des Systems mit dessen Hauptquantenzahl identifiziert wird). Über (2.4) läßt sich I als Funktion der Gesamtenergie, der Winkelvariable θ , sowie der Variablen des äußeren Elektrons ausdrücken: $I = I(H, \theta, z_1, p_{z1})$. Nach Einsetzen dieses Ausdrucks in (2.5) ergibt sich eine implizite Relation zwischen H , z_1 und p_{z1} , aus der man, nach Auflösung nach H , eine effektive Hamiltonfunktion für die Beschreibung der langsamen Komponente der Bewegung des äußeren Elektrons erhält:

$$H_{\text{eff}}^{(N)}(z_1, p_{z1}) = \frac{p_{z1}^2}{2} + V_{\text{eff}}^{(N)}(z_1). \quad (2.6)$$

Das effektive Potential $V_{\text{eff}}^{(N)}$ läßt sich nur numerisch berechnen, da die Integration von (2.5) analytisch nicht durchführbar ist.

Abb. 2.4 zeigt das effektive Potential für das Helium-Atom ($Z = 2$). Wir erkennen, daß es sich für große Abstände einem attraktiven $1/z$ Potential annähert, während es für kleine Abstände aufgrund der überhand nehmenden Coulomb-Abstoßung durch das innere Elektron stark repulsiv ist. Dazwischen weist es ein lokales Minimum an dem Ort $z_1 \simeq 2.6 N^2$ auf, der dem Gleichgewichtsabstand des äußeren Elektrons in der Frozen-Planet-Konfiguration entspricht.

Anhand dieses Potentials lassen sich nun intrinsische, allein von der Wirkung N des inneren Elektrons abhängende Skalen für Feldstärke und Frequenz bestimmen, die später für den externen Antrieb der Frozen-Planet-Konfiguration durch ein elektromagnetisches Feld von Bedeutung sein werden. Die *Frequenzskala* ist durch die Krümmung des Potentials in

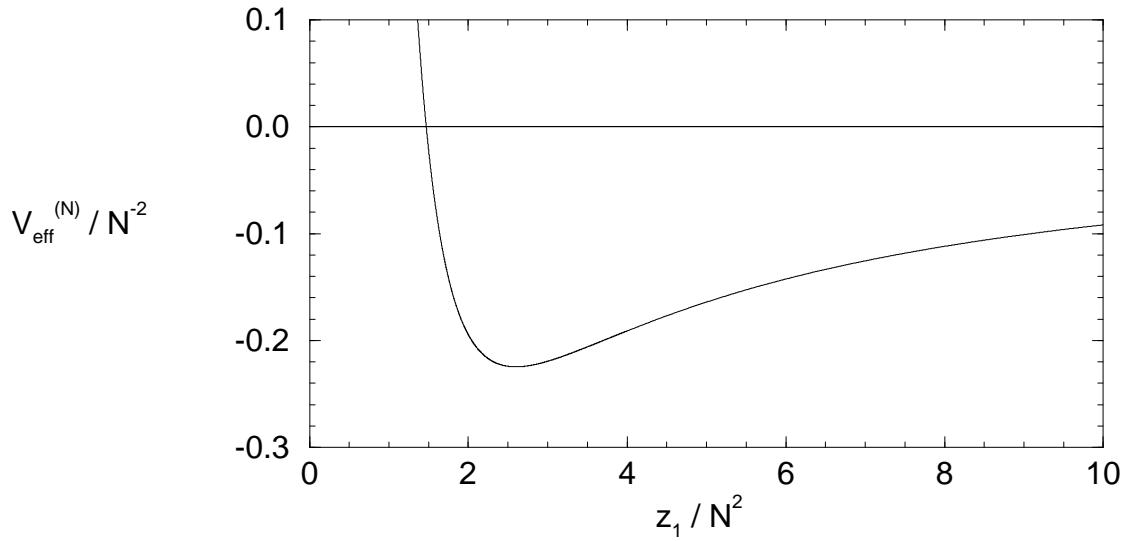


Abb. 2.4: Effektives adiabatisches Potential, das die langsame Komponente der Bewegung des äußeren Elektrons in der kollinearen Frozen-Planet-Konfiguration beschreibt.

seinem Minimum gegeben. Sie entspricht der Frequenz kleiner Schwingungen um die Gleichgewichtslage. Wie man an der Form des effektiven Potentials in Abb. 2.4 erkennt, ist dies zugleich die maximale Frequenz, mit der das äußere Elektron um die Gleichgewichtslage oszilliert. Die *Feldstärkenskala* ist durch die maximale positive Steigung des effektiven Potentials gegeben (bei $z_1 \simeq 3.7 N^2$). Sie entspricht der maximalen rücktreibenden Kraft auf das innere Elektron und gibt die maximale Stärke eines statischen Feldes an, das man an die Frozen-Planet-Konfiguration anlegen kann, ohne diese vollkommen zu destabilisieren.

Konkret erhalten wir, sowohl aus dem effektiven Potential als auch aus numerisch berechneten Trajektorien der Frozen-Planet-Konfiguration, für die intrinsische Frequenzskala

$$\omega_I \simeq 0.30 N^{-3} \quad (2.7)$$

und für die intrinsische Feldstärkenskala

$$F_I \simeq 0.030 N^{-4}. \quad (2.8)$$

Im Minimum des effektiven Potentials bei erhalten wir bei $z_1 \simeq 2.6 N^2$

$$V_{\text{eff}}^{(N)} \simeq -0.22 N^{-2}, \quad (2.9)$$

woraus sich die Gesamtenergie der Konfiguration zu

$$E \simeq -2.2 N^{-2}. \quad (2.10)$$

ergibt. Für die Frequenz der Kepler-artigen Oszillation des inneren Elektrons erhalten wir aus der numerisch berechneten Trajektorie

$$\omega_K \simeq 4.4 N^{-3}. \quad (2.11)$$

Die Güte der adiabatischen Näherung wird damit durch das Verhältnis $\omega_I/\omega_K \simeq 0.07$ charakterisiert, das wesentlich kleiner als Eins ist.

Bei Wirkungen bzw. Quantenzahlen der Größenordnung $N \sim 50$, die für den resonanten Antrieb der Konfiguration relevant sind (siehe die folgenden Kapitel), liegen die intrinsischen Frequenz- und Feldstärkeskalen im Bereich der Frequenzen und Feldamplituden, die in Mikrowellen-Ionisationsexperimenten von Ein-Elektron-Atomen typischerweise verwendet werden [77]. Konkret erhalten wir für $N = 50$

$$\omega_I/(2\pi) \simeq 16 \text{ GHz}, \quad (2.12)$$

$$\omega_K/(2\pi) \simeq 230 \text{ GHz}, \quad (2.13)$$

$$F_I \simeq 25 \text{ V/cm.} \quad (2.14)$$

Mit der Theorie der adiabatischen Invarianten lassen sich auch Oszillationsmoden der Frozen-Planet-Konfiguration außerhalb des kollinearen Konfigurationsraums beschreiben. Bezeichnet l_{12} die halbe Differenz der Drehimpulse der Elektronen in bezug auf den Kernort und φ_{12} den Winkel zwischen dem Ortsvektor des äußeren Elektrons und der großen Hauptachse der Kepler-Ellipse des inneren Elektrons, so lässt sich für die Zeitentwicklung dieser kanonisch konjugierten Variablen bei kleinen Schwingungen transversal zur Achse, entlang der die Frozen-Planet-Konfiguration ausgerichtet ist, die effektive Hamiltonfunktion

$$H_{\text{eff}} = -\frac{1}{2} k_1 l_{12}^2 - \frac{1}{2} k_2 \varphi_{12}^2 \quad (2.15)$$

herleiten, wobei k_1 und k_2 positive Konstanten darstellen [59]. Die daraus resultierenden Bewegungsgleichungen entsprechen denen eines harmonischen Oszillators, bei dem jedoch die Rollen der Orts- und Impulsvariablen vertauscht sind (der „Impuls“ l_{12} erfährt hier also einen *positiven* Zuwachs für positive Werte der „Ortsvariablen“ φ_{12}):

$$\frac{d}{dt} l_{12} = k_2 \varphi_{12} \quad (2.16)$$

$$\frac{d}{dt} \varphi_{12} = -k_1 l_{12}. \quad (2.17)$$

Abb. 2.5 zeigt die Trajektorie einer derartigen transversalen Schwingung, bei der sich das innere Elektron anfänglich auf der z -Achse befindet, das äußere Elektron hingegen gegenüber der z -Achse etwas versetzt ist. Die aus der numerisch berechneten Trajektorie ermittelte Frequenz der transversalen Schwingung beträgt $\omega_{\text{ang}} \simeq 0.17 N^{-3}$ und stimmt gut mit dem Wert überein, den die Theorie der adiabatischen Invarianten liefert [59].

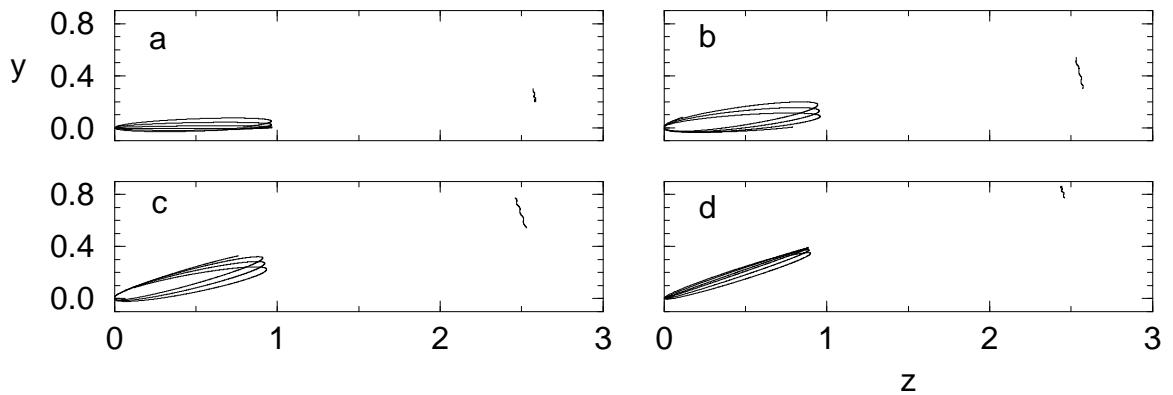


Abb. 2.5: Trajektorie einer transversalen Schwingung der Frozen-Planet-Konfiguration. Die Anfangsbedingung ist durch $z_1 = 2.58$, $y_1 = 0.2$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$ gegeben; der Anfangswert von z_2 ist so gewählt, daß die Wirkung des inneren Elektrons $N = 1$ beträgt (der Index 1 bezeichnet das innere, der Index 2 das äußere Elektron; alle Orts- und Zeitvariablen sind in atomaren Einheiten gegeben). Dargestellt sind Ausschnitte der Trajektorie zu den Zeiten (a) $t = 0 \dots 4.6$; (b) $t = 4.6 \dots 9.2$; (c) $t = 9.2 \dots 13.8$; (d) $t = 13.8 \dots 18.4$. Bei $t = 18.4$ ist ungefähr die Hälfte des Oszillationszyklus vollzogen. Die Konfiguration schwingt anschließend zurück in die Anfangsposition (a).

Kapitel 3

Formale Behandlung des klassischen Systems

In den folgenden Kapiteln untersuchen wir den Einfluß eines externen elektromagnetischen Feldes auf die Dynamik des klassischen Helium-Atoms. Zunächst werden in diesem Kapitel formale Aspekte des klassischen Drei-Körper-Problems unter einem externen, zeitlich periodischen Antrieb behandelt. Wir definieren in Abschnitt 3.1 die klassische Hamiltonfunktion und erörtern wesentliche fundamentale Eigenschaften der aus dieser Hamiltonfunktion resultierenden klassischen Dynamik. In Abschnitt 3.2 beschreiben wir die Variablentransformation, die auf das klassische System angewandt wird, um die klassischen Bewegungsgleichungen numerisch zu integrieren.

3.1 Fundamentale Eigenschaften des klassischen Systems

Wir betrachten die klassische Dynamik des dreidimensionalen Helium-Atoms im externen elektromagnetischen Feld linearer Polarisation. Das System wird beschrieben durch zwei klassische, über die elektrostatische Coulomb-Kraft miteinander wechselwirkende Punktladungen im attraktiven Coulomb-Potential, die einem externen oszillierenden elektrischen Feld ausgesetzt sind. Relativistische Korrekturen der Wechselwirkung sowie Effekte aufgrund der endlichen Masse bzw. der nichtverschwindenden Ausdehnung des Atomkerns werden vernachlässigt.

Unter Verwendung atomarer Einheiten ist die Hamiltonfunktion dieses Systems gegeben durch

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t) = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2} - \frac{Z}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{Z}{|\mathbf{r}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \mathbf{F}(t). \quad (3.1)$$

Dabei bezeichnen $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ bzw. $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ die Ortskoordinaten bzw. Impulse der beiden Elektronen,

deren Zeitentwicklung durch die Hamiltonschen Gleichungen

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad (3.2)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (3.3)$$

für $i = 1, 2$ gegeben ist. Z bezeichnet die Kernladungszahl, die in den konkreten Rechnungen stets $Z = 2$ gesetzt wird. Im Fall linearer Polarisation ist das externe Feld $\mathbf{F}(t)$ (unter Verwendung der Dipolnäherung) durch

$$\mathbf{F}(t) = F \mathbf{e} \cos \omega t \quad (3.4)$$

gegeben, wobei F die (zeitlich konstante) Amplitude, ω die Frequenz und \mathbf{e} den Einheitsvektor in Richtung der Polarisation des elektromagnetischen Feldes bezeichnen.

Als einzige Konstante der Bewegung des Systems verbleibt unter dem zeitlich periodischen Antrieb bei linearer Polarisation die Komponente des Gesamtdrehimpulses entlang der Polarisationsrichtung des elektrischen Feldes. Die Trajektorie verläuft damit innerhalb eines elfdimensionalen Unterraums des zwölfdimensionalen Phasenraums. Es bietet sich an, die Zeit bzw. die Phase des treibenden Feldes $\omega t \bmod 2\pi$ als zusätzliche Dimension des klassischen Phasenraums einzuführen, um formal zu gewährleisten, daß die klassischen Bewegungsgleichungen im erweiterten Phasenraum autonom sind [78]. Damit erhalten wir effektiv einen zwölfdimensionalen Phasenraum, innerhalb dessen die klassische Dynamik zu analysieren ist.

Die Hamiltonfunktion (3.1) zeichnet sich durch folgende fundamentale Skalierungseigenschaft aus [70, 79]: Bezeichnet $\lambda > 0$ einen reellen, positiven Parameter, so bleiben unter der Transformation

$$\mathbf{r}_i \mapsto \lambda \mathbf{r}_i \quad (i = 1, 2) \quad (3.5)$$

$$\mathbf{p}_i \mapsto \lambda^{-1/2} \mathbf{p}_i \quad (i = 1, 2) \quad (3.6)$$

$$t \mapsto \lambda^{3/2} t \quad (3.7)$$

$$\mathbf{F} \mapsto \lambda^{-2} \mathbf{F} \quad (3.8)$$

$$\omega \mapsto \lambda^{-3/2} \omega \quad (3.9)$$

$$H \mapsto \lambda^{-1} H \quad (3.10)$$

die Bewegungsgleichungen (3.2, 3.3) invariant. Es empfiehlt sich also, die Analyse der klassischen Dynamik auf einen festen Wert der Skalierung λ zu beschränken, was sich durch Festsetzung des Anfangswerts einer zeitabhängigen Variablen, etwa der Gesamtenergie H , oder durch Fixierung eines zeitunabhängigen Parameters, etwa der Frequenz ω , erreichen läßt. Im Bedarfsfall läßt sich der klassische Phasenraum über (3.5 – 3.10) auf die Skala des tatsächlich betrachteten Systems isomorph abbilden. Dabei ist zu beachten, daß eine Größe,

deren Einheit durch das Produkt mehrerer in (3.5 – 3.10) aufgeführter Variablen bzw. Parameter bestimmt ist, entsprechend transformiert wird. Eine Wirkungsvariable N etwa, mit der durch das Produkt von Ort und Impuls (bzw. von Energie und Zeit) gegebenen Einheit, transformiert sich unter (3.5 – 3.10) gemäß

$$N \longmapsto \lambda^{1/2} N. \quad (3.11)$$

3.2 Regularisierung der Bewegungsgleichungen

Für eine numerische Integration sind die Bewegungsgleichungen (3.2, 3.3) im allgemeinen ungeeignet: Kommt ein Elektron dem Kernort sehr nahe, so wächst dessen Impuls $|\mathbf{p}_i|$ sehr stark, nämlich proportional zu $|\mathbf{r}_i|^{-1/2}$, an und divergiert im Fall eines direkten Zusammenstoßes mit dem Kern. Da sich derartige Zusammenstöße in der uns speziell interessierenden Frozen-Planet-Konfiguration regelmäßig ereignen, ist es erforderlich, die Bewegungsgleichungen zu regularisieren. Die geeignete Methode zur Regularisierung ist durch die Kustaanheimo-Stiefel-Transformation [80] gegeben. Bei dieser kanonischen Transformation werden die Koordinaten und Impulse der Elektronen auf neue Variablen transformiert, die bei Elektron-Kern-Zusammenstößen ein reguläres Verhalten aufweisen. Im Gegensatz zu in klassischen Zwei-Elektronen-Atomen gängigen „Regularisierungsverfahren“, bei denen das Coulomb-Potential durch ein geglättetes, im Ursprung reguläres („soft core“) Potential ersetzt wird [11], sind die aus dieser Transformation resultierenden Bewegungsgleichungen exakt äquivalent zu den Newtonschen Bewegungsgleichungen in den ursprünglichen Variablen. (Ein „soft core“-Potential würde, nebenbei bemerkt, das Auftreten der Frozen-Planet-Konfiguration nicht ermöglichen, da in einem derartigen Potential der Kern keine unüberwindliche Barriere für das innere Elektron in einer kollinearen Anordnung darstellt.) Im folgenden wird nun im einzelnen beschrieben, wie die Transformation im Zwei-Elektronen-System gemäß der von Aarseth und Zare für das gravitative Dreikörperproblem beschriebenen Methode [81] durchgeführt wird.

Bei der Kustaanheimo-Stiefel-Transformation werden der Ortsvektor \mathbf{r} und der Impulsvektor \mathbf{p} eines im dreidimensionalen Konfigurationsraum beschriebenen Teilchens auf vierkomponentige, ebenfalls kanonisch konjugierte Variablen \mathbf{Q} , \mathbf{P} abgebildet:

$$\begin{aligned} \mathbf{r} = (r_x, r_y, r_z)^T &\longmapsto \mathbf{Q} = (Q_a, Q_b, Q_c, Q_d)^T \\ \mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)^T &\longmapsto \mathbf{P} = (P_a, P_b, P_c, P_d)^T \end{aligned} \quad . \quad (3.12)$$

Die Transformation ist definiert durch die Erzeugende

$$W(\mathbf{p}, \mathbf{Q}) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{Q}), \quad (3.13)$$

wobei

$$\mathbf{f}(\mathbf{Q}) = (f_x(\mathbf{Q}), f_y(\mathbf{Q}), f_z(\mathbf{Q}))^T \quad (3.14)$$

durch

$$f_x(\mathbf{Q}) = Q_a^2 - Q_b^2 - Q_c^2 + Q_d^2, \quad (3.15)$$

$$f_y(\mathbf{Q}) = 2(Q_a Q_b - Q_c Q_d), \quad (3.16)$$

$$f_z(\mathbf{Q}) = 2(Q_a Q_c + Q_b Q_d) \quad (3.17)$$

gegeben ist. Wir erhalten

$$\mathbf{r} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{p}} = \mathbf{f}(\mathbf{Q}), \quad (3.18)$$

$$\mathbf{P} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{Q}} = A(\mathbf{Q}) \mathbf{p}, \quad (3.19)$$

mit

$$A(\mathbf{Q}) = 2 \begin{pmatrix} Q_a & Q_b & Q_c \\ -Q_b & Q_a & Q_d \\ -Q_c & -Q_d & Q_a \\ Q_d & -Q_c & Q_b \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Wegen

$$A^T(\mathbf{Q}) A(\mathbf{Q}) = 4 \mathbf{Q}^2 \mathbb{I}, \quad (3.21)$$

wobei \mathbb{I} die Einheitsmatrix in \mathbb{R}^3 bezeichnet, ergibt sich die Inversion von (3.19) zu

$$\mathbf{p} = \frac{1}{4 \mathbf{Q}^2} A^T(\mathbf{Q}) \mathbf{P}. \quad (3.22)$$

Die Umkehrung von (3.18) ist nicht eindeutig vorgegeben. Sie lässt sich zum Beispiel durch

$$\mathbf{Q} = \mathbf{G}(\mathbf{r}) = (G_a(\mathbf{r}), G_b(\mathbf{r}), G_c(\mathbf{r}), G_d(\mathbf{r}))^T \quad (3.23)$$

mit

$$G_a(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{2}(|\mathbf{r}| + r_x)}, \quad (3.24)$$

$$G_b(\mathbf{r}) = \frac{r_y}{2 G_a(\mathbf{r})}, \quad (3.25)$$

$$G_c(\mathbf{r}) = \frac{r_z}{2 G_a(\mathbf{r})}, \quad (3.26)$$

$$G_d(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.27)$$

für $r_x \geq 0$ bzw.

$$G_b(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{2}(|\mathbf{r}| - r_x)}, \quad (3.28)$$

$$G_a(\mathbf{r}) = \frac{r_y}{2 G_b(\mathbf{r})}, \quad (3.29)$$

$$G_d(\mathbf{r}) = \frac{r_z}{2 G_b(\mathbf{r})}, \quad (3.30)$$

$$G_c(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.31)$$

für $r_x < 0$ definieren.

Mit (3.15 – 3.17) folgt schließlich

$$\mathbf{Q}^2 = |\mathbf{r}| \quad (3.32)$$

und

$$\mathbf{P}^2 = 4 \mathbf{Q}^2 \mathbf{p}^2 = 4 |\mathbf{r}| \mathbf{p}^2. \quad (3.33)$$

Dies garantiert für die neuen Variablen die eingangs geforderte Eigenschaft, bei Zusammenstößen mit der Coulomb-Singularität, bei denen $\mathbf{p}^2 \sim |\mathbf{r}|^{-1}$ divergiert, regulär zu bleiben.

In dem uns interessierenden System zweier Elektronen im attraktiven Coulomb-Potential wird auf die Orts- und Impulsvariablen jedes der beiden Elektronen separat eine Kustaanheimo-Stiefel-Transformation (3.12) angewandt:

$$(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) \mapsto (\mathbf{Q}_1, \mathbf{P}_1), \quad (3.34)$$

$$(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \mapsto (\mathbf{Q}_2, \mathbf{P}_2), \quad (3.35)$$

mit

$$\mathbf{Q}_i = \mathbf{G}(\mathbf{r}_i), \quad (3.36)$$

$$\mathbf{P}_i = A(\mathbf{Q}_i) \mathbf{p}_i \quad (3.37)$$

bzw.

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{f}(\mathbf{Q}_i), \quad (3.38)$$

$$\mathbf{p}_i = \frac{1}{4 R_i} A^T(\mathbf{Q}_i) \mathbf{P}_i \quad (3.39)$$

für $i = 1, 2$, wobei R_i durch

$$R_i = \mathbf{Q}_i^2 \quad (3.40)$$

definiert ist. Zusätzlich werden eine neue „Zeit“ τ sowie eine neue Hamiltonfunktion \mathcal{H} gemäß

$$dt =: R_1 R_2 d\tau \quad (3.41)$$

bzw.

$$\mathcal{H} := R_1 R_2 (H - E) \quad (3.42)$$

eingeführt, wobei H die ursprüngliche Hamiltonfunktion des Systems, ausgedrückt in den neuen Variablen \mathbf{Q}, \mathbf{P} , darstellt und E deren Wert zum jeweils aktuellen Zeitpunkt t bezeichnet. Per Konstruktion verschwindet \mathcal{H} für alle Zeiten τ und repräsentiert damit (im Gegensatz zu (3.1)) ein autonomes System.

Entsprechend werden E und t als zusätzliche, kanonisch konjugierte Variablen des Systems eingeführt, deren Zeitentwicklung durch

$$\frac{dt}{d\tau} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial E}, \quad (3.43)$$

$$\frac{dE}{d\tau} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} \quad (3.44)$$

beschrieben wird. Unter Verwendung des Ausdrucks (3.1) für H erhalten wir schließlich die Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \mathcal{H}(\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2, \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, E, t) \\ &= \frac{1}{8} R_2 \mathbf{P}_1^2 + \frac{1}{8} R_1 \mathbf{P}_2^2 - (R_1 + R_2) Z + \frac{R_1 R_2}{|\mathbf{f}(\mathbf{Q}_1) - \mathbf{f}(\mathbf{Q}_2)|} \\ &\quad + R_1 R_2 (\mathbf{f}(\mathbf{Q}_1) + \mathbf{f}(\mathbf{Q}_2)) \cdot \mathbf{F}(t) - R_1 R_2 E,\end{aligned}\quad (3.45)$$

die die Bewegungsgleichungen

$$\frac{dt}{d\tau} = R_1 R_2, \quad (3.46)$$

$$\frac{dE}{d\tau} = R_1 R_2 (\mathbf{f}(\mathbf{Q}_1) + \mathbf{f}(\mathbf{Q}_2)) \cdot \frac{d\mathbf{F}}{dt}(t), \quad (3.47)$$

$$\frac{d\mathbf{Q}_1}{d\tau} = \frac{1}{4} R_2 \mathbf{P}_1, \quad (3.48)$$

$$\frac{d\mathbf{Q}_2}{d\tau} = \frac{1}{4} R_1 \mathbf{P}_2, \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{P}_1}{d\tau} &= R_1 R_2 \sum_{j=x,y,z} \left(\frac{f_j(\mathbf{Q}_1) - f_j(\mathbf{Q}_2)}{R_{12}^3} - F_j(t) \right) \frac{\partial f_j}{\partial \mathbf{Q}_1}, \\ &\quad + 2 \mathbf{Q}_1 \left(-\frac{1}{8} \mathbf{P}_2^2 + Z - \frac{R_2}{R_{12}} - R_2 (\mathbf{f}(\mathbf{Q}_1) + \mathbf{f}(\mathbf{Q}_2)) \cdot \mathbf{F}(t) + R_2 E \right),\end{aligned}\quad (3.50)$$

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{P}_2}{d\tau} &= R_1 R_2 \sum_{j=x,y,z} \left(\frac{f_j(\mathbf{Q}_2) - f_j(\mathbf{Q}_1)}{R_{12}^3} - F_j(t) \right) \frac{\partial f_j}{\partial \mathbf{Q}_2}, \\ &\quad + 2 \mathbf{Q}_2 \left(-\frac{1}{8} \mathbf{P}_1^2 + Z - \frac{R_1}{R_{12}} - R_1 (\mathbf{f}(\mathbf{Q}_1) + \mathbf{f}(\mathbf{Q}_2)) \cdot \mathbf{F}(t) + R_1 E \right)\end{aligned}\quad (3.51)$$

mit

$$R_{12} = |\mathbf{f}(\mathbf{Q}_1) - \mathbf{f}(\mathbf{Q}_2)| \quad (3.52)$$

erzeugt.

Wie man sieht, sind die (3.46 – 3.51) *regulär* für $|\mathbf{r}_1| = 0$ oder $|\mathbf{r}_2| = 0$ und lassen sich damit numerisch stabil über Elektron-Kern-Zusammenstöße integrieren. Instabilitäten treten lediglich im Fall von Elektron-Elektron-Zusammenstößen $|\mathbf{r}_1| = |\mathbf{r}_2|$ auf, die jedoch aus Energieerhaltungsgründen nur bei Dreifachkollisionen, bei denen beide Elektronen zugleich auf den Kern stürzen, stattfinden. Wie von Siegel gezeigt wurde [82], sind derartige Dreifachkollisionen prinzipiell nicht regularisierbar. Numerisch lassen sich jedoch die Bewegungsgleichungen entlang von Trajektorien, die der Dreifachkollision sehr nahe kommen, problemlos integrieren, da mit $|\mathbf{r}_1| - |\mathbf{r}_2|$ auch $|\mathbf{r}_1|$ und $|\mathbf{r}_2|$ sehr klein werden und somit die Brüche in (3.50) und (3.51) bzw. die Zeitableitungen von \mathbf{P}_1 und \mathbf{P}_2 stets beschränkt bleiben. Details zur numerischen Integration der klassischen Bewegungsgleichungen werden in Anhang A.1 beschrieben.

Kapitel 4

Die kollineare, getriebene Frozen-Planet-Konfiguration

In den nun folgenden Kapiteln wird die klassische Dynamik der Frozen-Planet-Konfiguration im externen elektromagnetischen Feld untersucht. Dabei konzentrieren wir uns auf Feldamplituden F des elektrischen Feldes, die klein sind im Vergleich zur Coulomb-Anziehung des inneren Elektrons durch den Kern (d.h. typischerweise weniger als 1% des Kernfeldes betragen), sowie auf im Vergleich zur Frequenz ω_K der Kepler-Oszillation des inneren Elektrons kleine Frequenzen ω . Wir untersuchen zunächst den invarianten Unterraum des klassischen Phasenraums, der der *kollinearen* Anordnung der Elektronen entlang der Polarisationsachse des elektrischen Wechselfeldes entspricht. Aufgrund der Separation der die Bewegung der Elektronen charakterisierenden Zeitskalen (siehe Abschnitt 2.2) lässt sich die Struktur des kollinearen Phasenraums anhand eines Poincaré-Schnitt-Verfahrens, das in Abschnitt 4.1 beschrieben wird, vollständig visualisieren. Der gemischt regulär-chaotische Phasenraum der kollinearen, getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration wird in Abschnitt 4.2 analysiert. Er enthält reguläre Inseln innerhalb der chaotischen „See“, die nichtlinearen Resonanzen zwischen dem treibenden Feld und der Dynamik des ungestörten atomaren Systems entsprechen.

Im folgenden sind die Koordinaten und Impulse des äußeren Elektrons durch

$$\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)^T \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{p}_1 = (p_{x1}, p_{y1}, p_{z1})^T \quad (4.1)$$

und jene des inneren Elektrons durch

$$\mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)^T \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{p}_2 = (p_{x2}, p_{y2}, p_{z2})^T \quad (4.2)$$

gegeben. Die z -Achse definiert die Polarisierung des externen Wechselfeldes. Atomare Einheiten werden im folgenden durchgehend verwendet.

4.1 Phasenraumvisualisierung

Innerhalb des kollinearen Konfigurationsraums besitzt das klassische Helium-Atom zwei Freiheitsgrade. Nach Einführung der Phase ωt des treibenden Feldes als zusätzliche Phasenraumvariable ist der erweiterte Phasenraum der kollinearen, getriebenen Konfiguration damit fünfdimensional. Da keine Konstanten der Bewegung existieren, ist es im Prinzip nicht möglich, die Struktur des Phasenraums mit einem einfachen Poincaré-Schnitt zu visualisieren. Für Frequenzen des treibenden Feldes, die klein sind im Vergleich zur Frequenz ω_K der Kepler-Oszillation des inneren Elektrons (und für Feldamplituden, die den Kepler-artigen Charakter der Bewegung des inneren Elektrons nicht wesentlich verändern) läßt sich jedoch, unter Ausnutzung der approximativen Separation der Zeitskalen (siehe Abschnitt 2.2), ein *doppelter* Poincaré-Schnitt durchführen, durch den der Phasenraum auf einer zweidimensionalen Fläche bzw. Mannigfaltigkeit dargestellt werden kann.

Generell ist die Methode der Poincaré-Schnitte geeignet, die Dynamik solcher klassischer Systeme zu visualisieren, deren Zeitentwicklung effektiv innerhalb eines dreidimensionalen Phasenraums verläuft (dazu zählen autonome Systeme mit zwei Freiheitsgraden, sowie periodisch getriebene Systeme mit einem Freiheitsgrad). Man definiert eine zweidimensionale Fläche bzw. Mannigfaltigkeit innerhalb des dreidimensionalen Phasenraums und registriert auf dieser „Poincaré-Schnittfläche“ sämtliche Punkte, in denen die numerisch berechnete Trajektorie diese Fläche mit definierter Orientierung schneidet [78]. Führt man diesen Poincaré-Schnitt für hinreichend viele Trajektorien durch, so erhält man ein genaues Abbild der Struktur des Phasenraums, welches die Unterscheidung von regulären und chaotischen Gebieten erlaubt. Reguläre Gebiete zeichnen sich als eindimensionale Kurven ab, die die Existenz eines zusätzlichen (lokalen) Integrals der Bewegung widerspiegeln. Chaotische Trajektorien hingegen, die die Energiehyperfläche (bzw. deren Analogon in periodisch getriebenen Systemen) vollständig ausfüllen, werden auf zweidimensionale Teilmengen der Schnittfläche abgebildet.

Für höherdimensionale Phasenräume ist die Methode der Poincaré-Schnitte zur Visualisierung im allgemeinen ungeeignet. Innerhalb eines vier- bzw. höherdimensionalen Phasenraums ist eine zweidimensionale Fläche durch zwei bzw. mehr als zwei Bedingungen festgelegt und besitzt damit generisch keinen Schnittpunkt mit einer eindimensionalen Trajektorie. Im Fall der kollinearen, getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration läßt sich dieses Problem durch einen *doppelten* Poincaré-Schnitt umgehen. Dabei verwenden wir die Tatsache, daß eine der Oszillationsmoden des Systems, die Kepler-Mode, durch eine wesentlich kürzere Zeitskala gekennzeichnet ist als alle anderen Oszillationsmoden.

Wir führen zunächst einen Poincaré-Schnitt der durch $z_1, z_2, p_{z1}, p_{z2}, t$ parametrisierten Trajektorie mit einer vierdimensionalen Hyperfläche durch, die durch die Fixierung des Orts des inneren Elektrons gemäß $z_2 = 0$ definiert ist und damit einem festen Wert der Winkelvariable θ der Kepler-Oszillation entspricht. Pro Kepler-Zyklus des inneren Elektrons erhalten

wir damit genau einen Schnittpunkt. Die Phasenraumvariablen, durch die diese Schnittpunkte beschrieben werden, variieren auf einer im Vergleich zur Kepler-Periode des inneren Elektrons langsamen Zeitskala. Die zeitlich aufeinander folgenden Schnittpunkte lassen sich damit relativ glatt zu einer effektiv dreidimensionalen Phasenraumtrajektorie interpolieren. Letzterer läßt sich entnehmen, welche Werte diese Phasenraumvariablen zu gegebener Zeit t angenommen hätten, wenn die Kepler-Oszillation zu *diesem* Zeitpunkt (und nicht, wie tatsächlich, etwas früher bzw. später) durch $z_2 = 0$ gegangen wäre. An dieser Phasenraumtrajektorie läßt sich nun durch Fixierung der Phase des treibenden Feldes gemäß $\omega t = \varphi_0 \bmod 2\pi$ (für festes φ_0) ein weiterer, stroboskopischer Poincaré-Schnitt vornehmen. Aufgrund der Tatsache, daß die Gesamtenergie des Systems für feste Phase des treibenden Feldes näherungsweise konstant bleibt (zumindest für reguläre Bewegung, die nicht in Resonanz mit dem treibenden Feld ist), liegen die Schnittpunkte auf der durch $z_2 = 0$ und $\omega t = \varphi_0$ definierten, dreidimensionalen Poincaré-Hyperfläche in der unmittelbaren Nähe der zweidimensionalen Untermannigfaltigkeit konstanter Energie und lassen sich somit auf einer zweidimensionalen Fläche darstellen.

Man beachte, daß das durch dieses Verfahren gewonnene Abbild der Phasenraumstruktur nahezu exakt dem entspricht, das ein einfacher, durch die simultane Fixierung von $z_2 = 0$ und $\omega t = \varphi_0$ definierter Poincaré-Schnitt im Grenzfall unendlich langer Integrationszeiten liefert. Da die Kepler-Mode von der langsamen Oszillation nahezu entkoppelt ist und Resonanzeffekte zwischen der schnellen Mode und der langsamen Mode damit vernachlässigbar sind, füllt die Gesamtheit der Schnittpunkte innerhalb der durch $z_2 = 0$ definierten Poincaré-Hyperfläche praktisch dieselbe reguläre bzw. chaotische Struktur aus wie die durch die oben beschriebene Interpolation der Schnittpunkte gewonnene Trajektorie. Der durch $\omega t = \varphi_0$ definierte Poincaré-Schnitt dieser „interpolierenden“ Trajektorie ist demnach dem durch $z_2 = 0$ und $\omega t = \varphi_0$ definierten Poincaré-Schnitt der tatsächlichen Phasenraumtrajektorie des Systems in sehr guter Näherung äquivalent.

Die konkrete Methode, mit der der doppelte Poincaré-Schnitt durchgeführt wird, ist in Abb. 4.1 dargestellt. Zunächst wird für gegebene Anfangswerte der Orts- und Impulsvariablen des äußeren Elektrons der Anfangsort des inneren Elektrons durch die Forderung bestimmt, daß der Anfangswert der feldfreien (d.h. für $F = 0$ berechneten) Gesamtenergie $E = -1$ beträgt (der Anfangsimpuls des inneren Elektrons wird $p_{z2} = 0$ gesetzt). Bei der numerischen Integration der Trajektorie werden Ort und Impuls des äußeren Elektrons zu jenen Zeitpunkten registriert, zu denen das innere Elektron mit dem Kern zusammenstößt. Anhand dieser Poincaré-Schnittpunkte wird nun mittels einer kubischen Interpolation bestimmt, welche Werte die Variablen des äußeren Elektrons zu Kollisionszeiten $t = (\varphi_0 \bmod 2\pi)/\omega$ angenommen hätten. Die auf diese Weise erhaltenen Punkte werden in einem durch den Ort und den Impuls des äußeren Elektrons aufgespannten Diagramm aufgetragen.

Abb. 4.2a zeigt das so konstruierte Phasenraumporträt für die Feldparameter $\omega = 0.07$

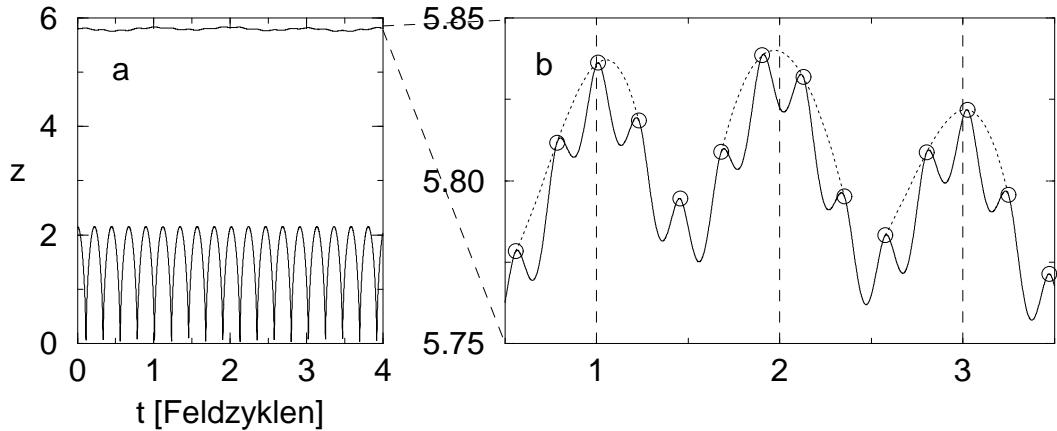


Abb. 4.1: Schematische Darstellung des Verfahrens, mit dem der doppelte Poincaré-Schnitt erstellt wird. Die Abbildung zeigt eine Trajektorie der kollinearen Frozen-Planet-Konfiguration, die einem externen Feld der Frequenz $\omega = 0.3$ und der Amplitude $F = 0.002$ ausgesetzt ist. Für eine gegebene Anfangsbedingung des äußeren Elektrons – in unserem Beispiel $z_1(t = 0) = 5.8, p_{z1}(t = 0) = 0$ – wird der Anfangsort z_2 des inneren Elektrons über (2.1) durch die Forderung bestimmt, daß der Anfangswert der feldfreien (d.h. für $F = 0$ berechneten) Gesamtenergie $E = -1$ beträgt (der Anfangsimpuls des inneren Elektrons wird $p_{z2} = 0$ gesetzt). Im Verlauf der numerischen Integration werden Ort und Impuls des äußeren Elektrons zu jenen Zeiten registriert, zu denen das innere Elektron am Kernort ist (diese Punkte sind in (b) durch Kreise gekennzeichnet). Durch kubische Interpolation dieser Punkte wird ermittelt, welche Werte die Variablen des äußeren Elektrons zu den Zeiten $\omega t = 0 \bmod 2\pi$ angenommen hätten, wäre das innere Elektron zu *diesen* Zeitpunkten mit dem Kern kollidiert (diese Werte entsprechen den Schnittpunkten der die Interpolation symbolisierenden gepunkteten Kurvenzüge mit den vertikalen, gestrichelten Linien). Die auf diese Weise erhaltenen Wertepaare werden dann im z_1 – p_{z1} -Diagramm aufgetragen.

und $F = 0.0005$, wobei die Phase des treibenden Feldes $\varphi_0 = 0$ gesetzt ist (sofern nicht explizit anders vermerkt, wird in den im folgenden gezeigten Phasenraumportraits stets diese Phase verwendet). Wir sehen, daß sich reguläre und chaotische Gebiete innerhalb des Phasenraums in präziser Weise unterscheiden lassen. Zum Vergleich zeigen wir in Abb. 4.2c einen einfachen stroboskopischen Schnitt des Phasenraums, bei dem von der numerisch berechneten Trajektorie Ort und Impuls des äußeren Elektrons zu den Zeiten $t = (0 \bmod 2\pi)/\omega$ registriert wurden, ohne Rücksicht auf die Modulation der Trajektorie des äußeren Elektrons durch die Oszillation des inneren Elektrons. Insbesondere bei kleinen Kernabständen z_1 , bei denen sich die Oszillation des inneren Elektrons in der Bewegung des äußeren Elektrons relativ deutlich abzeichnet, liefert der einfache stroboskopische Schnitt ein wesentlich unschärferes Phasenraumbild als der doppelte Poincaré-Schnitt.

Alternativ zur Gesamtenergie läßt sich für die Erstellung des Poincaré-Schnitts auch die durch (2.5) definierte *Wirkung* N der Kepler-Mode des inneren Elektrons fixieren (Abb. 4.2b).

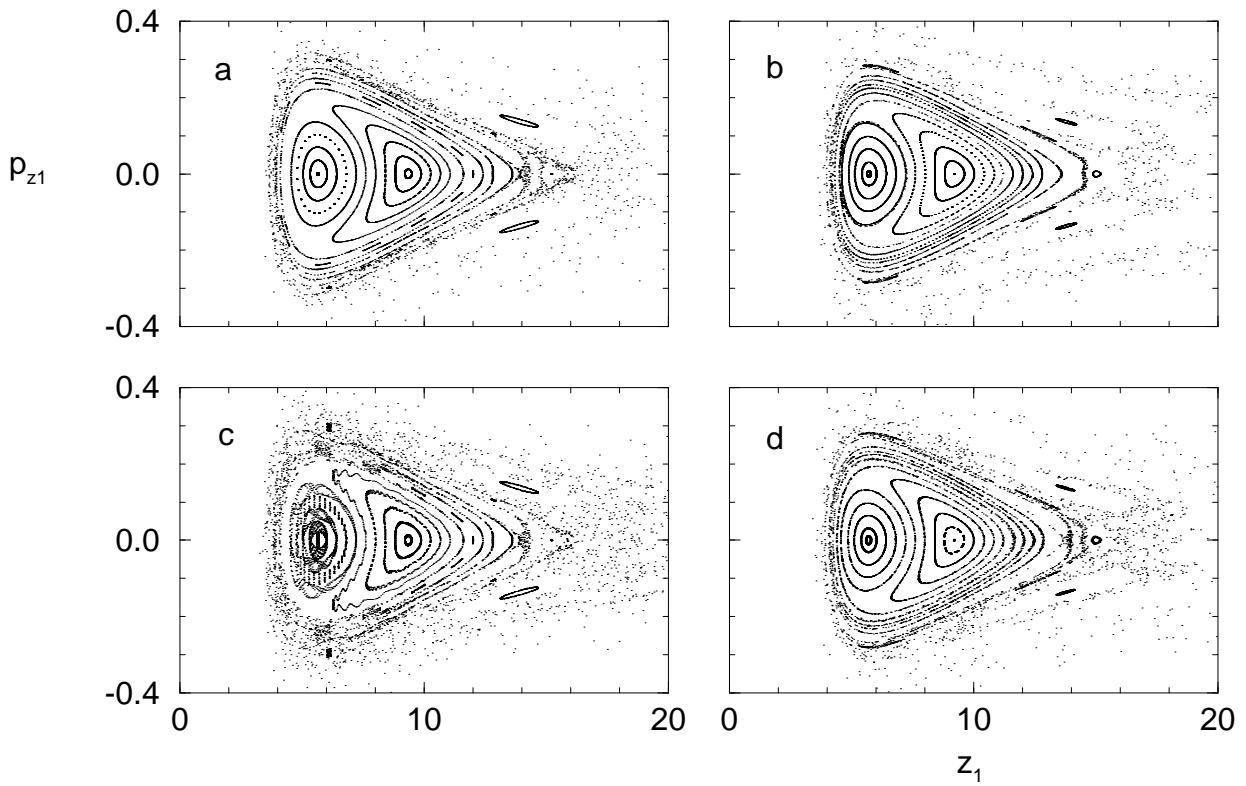


Abb. 4.2: (a) Phasenraumporträt der kollinearen Konfiguration, das mit Hilfe der Methode des doppelten Poincaré-Schnitts zur Phase $\omega t = \varphi_0 = 0$ für die Feldparameter $\omega = 0.07$ und $F = 0.0005$ erstellt wurde. Dazu wurden ca. 20 Trajektorien propagiert, deren Anfangsbedingungen im Bereich $z_1 = 5.6 \dots 17$ entlang der $p_{z1} = 0$ Achse des Phasenraums verteilt sind, sowie eine Trajektorie mit der Anfangsbedingung $z_1 = 14, p_{z1} = 0.13$, um die in diesem Phasenraumgebiet liegende reguläre Insel zu visualisieren. Der Anfangsort des inneren Elektrons wurde jeweils so gewählt, daß die Gesamtenergie $E = -1$ beträgt. Wir sehen, daß sich reguläre und chaotische Gebiete im Phasenraum in präziser Weise unterscheiden lassen. (b) Das gleiche Phasenraumporträt wie in (a), mit dem einzigen Unterschied, daß statt der Gesamtenergie die *Wirkung* des inneren Elektrons gemäß $N = 1.5$ fixiert wurde. Wir sehen, daß sich dieses Phasenraumporträt von (a) praktisch nicht unterscheidet. (c) Einfacher stroboskopischer Schnitt des Phasenraums, bei dem von der numerisch berechneten Trajektorie Ort und Impuls des äußeren Elektrons zu den Zeiten $t = (0 \bmod 2\pi)/\omega$ ohne Rücksicht auf z_2 und p_{z2} aufgetragen wurden. Wir sehen, daß dieser stroboskopische Schnitt insbesondere bei kleinen Kernabständen z_1 ein wesentlich unschärferes Phasenraumbild als der doppelte Poincaré-Schnitt liefert. (d) Phasenraumporträt, das durch die direkte Propagation des äußeren Elektrons im effektiven adiabatischen Potential $V_{\text{eff}}^{(N)}$ (2.6) zur Wirkung $N = 1.5$ gewonnen wurde. Diesem effektiven Potential ist ein externes elektrisches Wechselfeld der Frequenz $\omega = 0.07$ und der Feldamplitude $F = 0.0005$ überlagert. Aufgetragen sind Ort und Impuls des äußeren Elektrons zu den Zeiten $\omega t = 0 \bmod 2\pi$. Wir sehen, daß dieses stroboskopische Bild sehr gut mit dem durch den doppelten Poincaré-Schnitt erstellten Phasenraumabbild der exakten Dynamik (b) übereinstimmt.

Da diese eine adiabatische Invariante ist (siehe Abschnitt 2.3), ist ihre Konstanz im Lauf der Zeitentwicklung im allgemeinen besser gewährleistet als die der Energie. Das Problem, das mit der Fixierung der Wirkung verbunden ist, besteht jedoch darin, daß die durch feste Wirkung N definierte Anfangsbedingung des inneren Elektrons sich nur auf kompliziertem Wege, nämlich über die numerische Kenntnis des effektiven Potentials (2.6), berechnen läßt, wohingegen bei vorgegebener Gesamtenergie die Position des inneren Elektrons durch die Auflösung der kollinearen Hamiltonfunktion (2.1) nach z_2 analytisch bestimmbar ist. Um die numerische Nachvollziehbarkeit unserer Ergebnisse zu erleichtern, führen wir daher die Analyse des klassischen Phasenraums unter der Fixierung der Gesamtenergie $E = -1$ durch. Für den Vergleich mit der Quantenmechanik in Kap. 8–10 hingegen wird es besser sein, die Wirkung N zu fixieren, die der Hauptquantenzahl des inneren Elektrons entspricht.

Mit geringem numerischen Aufwand läßt sich ein relativ gutes Abbild des Phasenraums auch durch die direkte Propagation des äußeren Elektrons im effektiven adiabatischen Potential (2.6), dem ein externes elektrisches Wechselfeld überlagert ist, erstellen. Abb. 4.2d zeigt einen stroboskopischen Poincaré-Schnitt, bei dem der Impuls des in diesem Potential oszillierenden Elektrons gegen dessen Ort zur Feldphase $\omega t = 0$ aufgetragen ist (die Feldparameter betragen wie in Abb. 4.2a–c $\omega = 0.07$, $F = 0.0005$). Wir sehen, daß dieses stroboskopische Bild sehr gut mit dem durch den doppelten Poincaré-Schnitt erstellten Phasenraumabbild der exakten Dynamik (Abb. 4.2b) übereinstimmt. Abweichungen zwischen der exakten Zwei-Elektronen-Bewegung und der Dynamik im effektiven adiabatischen Potential treten für hohe Feldamplituden $F \gtrsim 0.1$ auf, für die das innere Elektron durch das externe Feld maßgeblich beeinflußt wird.

4.2 Der Phasenraum der kollinearen, getriebenen Konfiguration

Bei im Vergleich zur Kepler-Frequenz ω_K des inneren Elektrons kleinen Frequenzen ω des treibenden Feldes und bei im Vergleich zur Coulomb-Kraft des Kerns auf das innere Elektron kleinen Feldamplituden F wird durch das oszillierende Feld hauptsächlich die Bewegung des äußeren Elektrons beeinflußt. Die Dynamik der getriebenen, kollinearen Konfiguration wird damit im wesentlichen durch das Verhältnis der Feldparameter F und ω zu den in Abschnitt 2.3 eingeführten intrinsischen Skalen F_I und ω_I bestimmt, welche die langsame Bewegung des äußeren Elektrons charakterisieren. Die Feldstärkenskala F_I (2.8) gibt die Größenordnung der maximalen Feldamplitude F an, für die stabile Dynamik der getriebenen Konfiguration bei kleinen Frequenzen ω zu erwarten ist. Die Frequenzskala ω_I , die der Frequenz kleiner Schwingungen um die Gleichgewichtslage entspricht, definiert die Lage der Resonanzen zwischen dem treibenden Feld und der Oszillation des äußeren Elektrons im ungestörten System. Für

die Gesamtenergie $E = -1$, für die wir das System im folgenden untersuchen werden, erhalten wir aus (2.10) die Wirkung der Kepler-Oszillation des inneren Elektrons

$$N \simeq 1.5, \quad (4.3)$$

woraus gemäß (2.7), (2.8) und (2.11)

$$\omega_I \simeq 0.091, \quad (4.4)$$

$$F_I \simeq 0.006, \quad (4.5)$$

sowie

$$\omega_K \simeq 1.34 \quad (4.6)$$

folgt.

Generell ist für $F < F_I$ der Phasenraum der getriebenen, kollinearen Konfiguration gemischt regulär-chaotisch und wird in wesentlichem Maß geprägt durch nichtlineare Resonanzen zwischen dem treibenden Feld und der langsamen Oszillation der Konfiguration um die Gleichgewichtslage. Um die Störung der Phasenraumstruktur durch diese Resonanzen zu erörtern, betrachten wir zunächst den Phasenraum für variierende Feldamplitude F bei fester Frequenz $\omega = 0.05 < \omega_I$, für die im Phasenraum die fundamentale *1:1 Resonanz* auftritt. Bei dieser nichtlinearen Resonanz oszilliert das äußere Elektron genau einmal innerhalb einer Periode des treibenden Feldes um die Gleichgewichtslage. Generell bezeichnet die $n:m$ Resonanz diejenige nichtlineare Resonanz zwischen dem treibenden Feld und dem atomaren System, bei der m elektronische Oszillationen binnen n Feldzyklen stattfinden.

Abb. 4.3b zeigt das durch den in Abschnitt 4.1 beschriebenen doppelten Poincaré-Schnitt gewonnene Abbild des Phasenraums für $\omega = 0.05$ und die Feldamplitude $F = 0.0002$, die sehr klein ist im Vergleich zur intrinsischen Feldstärke F_I . Der Phasenraum ist gemischt regulär-chaotisch, ähnelt jedoch noch, entsprechend dem Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM) Theorem [78], in groben Zügen dem Phasenraum des ungestörten Systems (Abb. 4.3a). Nach wie vor existiert ein großes Gebiet gebundener regulärer Bewegung, zentriert um den fundamentalen periodischen Orbit bei $z_1 \simeq 5.8$, das jedoch auf diejenigen Orbits des ungestörten Systems beschränkt ist, deren äußerer Umkehrpunkt unterhalb $z_1 \simeq 25$ liegt. Außerhalb dieses regulären Gebiets ist der Phasenraum chaotisch. Trajektorien, die im chaotischen Gebiet starten, führen früher oder später zur Ionisation, bei der das äußere Elektron ins Unendliche entschwindet. Darüber hinaus existieren innerhalb des regulären Gebiets Substrukturen, die auf nichtlineare Resonanzen zwischen dem treibenden Feld und der Oszillation des äußeren Elektrons zurückzuführen sind. In der Nähe dieser Resonanzen ist die feldinduzierte Deformation der Phasenraumstruktur besonders ausgeprägt. Aufgrund der Konstanz der Phasenbeziehung zwischen dem externen, resonanten Antrieb und der Oszillation im ungestörten System kann sich der

Effekt der kleinen externen Störung über viele Perioden hinweg verstärken bzw. aufschaukeln; bei nichtresonanter Bewegung hingegen (bei der zu gegebener Phase der ungestörten Oszillation der Betrag bzw. das Vorzeichen der externen Störung variiert) verschwindet der Effekt der kleinen Störung im Zeitmittel vieler Perioden.

Die reguläre Substruktur bei $z_1 \simeq 12.6$ entspricht der fundamentalen 1:1 Resonanz zwischen dem treibenden Feld und der Oszillation des äußeren Elektrons. Diese Resonanz weist im getriebenen System zwei periodische Orbits auf: einen *stabilen* periodischen Orbit, der dadurch gekennzeichnet ist, daß sich das äußere Elektron zur Phase $\omega t = 0$ am äußeren Umkehrpunkt der Oszillation um die Gleichgewichtslage befindet, und einen *instabilen* periodischen Orbit, für welchen das äußere Elektron sich zur Phase $\omega t = 0$ am inneren Umkehrpunkt befindet. (Streng genommen handelt es sich hier nicht um periodische, sondern um quasiperiodische *Zwei-Elektronen-Trajektorien*, da die Kepler-Bewegung des inneren Elektrons nicht resonant mit dem treibenden Feld ist; um jedoch die Nomenklatur nicht übermäßig zu komplizieren, behalten wir die Bezeichnung „periodischer Orbit“.)

In der Umgebung des stabilen periodischen Orbits ist die Dynamik regulär: Befindet sich die atomare Konfiguration auf einer Trajektorie, die in der Nähe des stabilen periodischen Orbits liegt, so wird sie durch das externe Feld derart beschleunigt bzw. gebremst, daß sie quasiperiodische Oszillationen um den stabilen periodischen Orbit vollführt. Im Phasenraum ist der stabile periodische Orbit demnach von einer eigenständigen Torusstruktur umgeben, die sich im Poincaré-Schnitt in Form von konzentrischen, Ellipsen ähnelnden Strukturen abzeichnet. In der Umgebung des instabilen periodischen Orbits hingegen ist die Dynamik chaotisch: Befindet sich das System anfangs in der Nähe des instabilen periodischen Orbits, so wird es durch das externe Feld von diesem Orbit weg bewegt und vollführt chaotische Bewegung in der Umgebung der 1:1 Resonanz. Der instabile periodische Orbit erzeugt eine dünne chaotische Schicht, die die reguläre Struktur des stabilen periodischen Orbits der feldinduzierten 1:1 Resonanz von den noch unzerstörten Tori der Frozen-Planet-Dynamik trennt.

Am Rande des regulären Gebiets in Abb. 4.3b existieren weitere Substrukturen, die auf Resonanzen höherer Ordnung zurückzuführen sind. Bei $z_1 \simeq 18$ und $p_{z1} \simeq \pm 0.12$ etwa erkennen wir die der 2:1 Resonanz entsprechenden Strukturen, bei der eine Periode des äußeren Elektrons innerhalb von zwei Feldzyklen durchlaufen wird (und der stabile bzw. der instabile periodische Orbit sich demnach jeweils zweimal im Poincaré-Schnitt abzeichnen).

Mit zunehmender Feldamplitude F nimmt die Ausdehnung des regulären Gebiets der Frozen-Planet-Dynamik immer mehr ab, während die vom externen Feld erzeugte Substruktur der 1:1 Resonanz immer größer wird. Für $F \simeq 0.0005 \sim 0.1 F_I$ sind sämtliche Tori der intrinsischen Frozen-Planet-Dynamik, die die reguläre Struktur der feldinduzierten 1:1 Resonanz von dem chaotischen Gebiet abschirmen, aufgebrochen (Abb. 4.3c). Wir erhalten damit zwei separate reguläre „Inseln“, die von der chaotischen „See“ umschlossen sind: Die

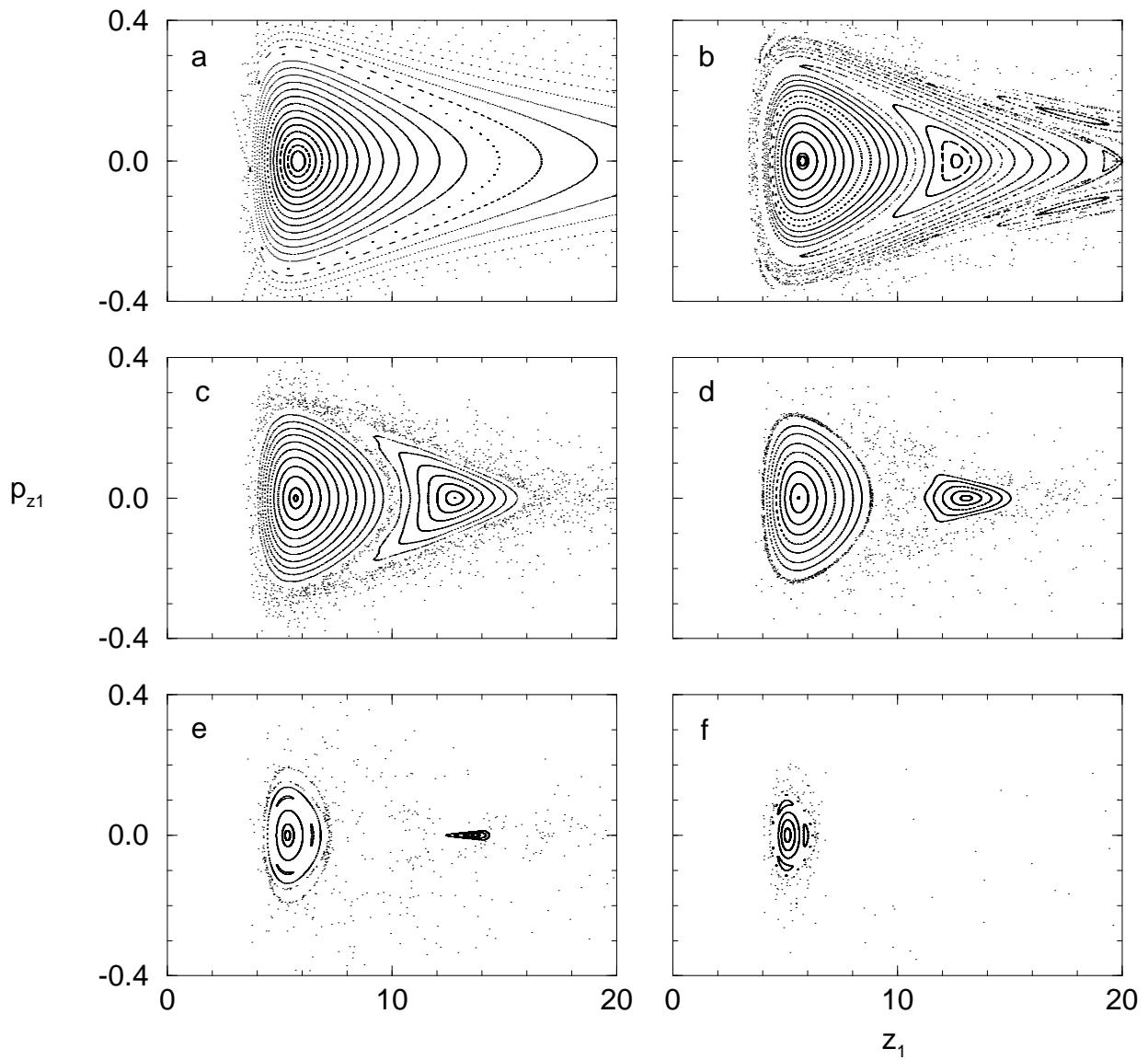


Abb. 4.3: Entwicklung des Phasenraums der kollinearen Dynamik der periodisch getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration in Abhängigkeit der Feldamplitude F . Die Feldfrequenz beträgt $\omega = 0.05$ und ist so gewählt, daß die 1:1 Resonanzstruktur im Phasenraum gut ausgeprägt ist. (a) $F = 0$, Phasenraumstruktur der ungestörten Frozen-Planet-Konfiguration (vgl. Abb. 2 in [17]); (b) $F = 0.0002$; (c) $F = 0.0005$; (d) $F = 0.001$; (e) $F = 0.002$; (f) $F = 0.003$. Mit zunehmender Feldamplitude $F = 0 \dots 0.0005$ wächst die Substruktur der 1:1 Resonanz immer stärker an (a – c), bis sie bei $F \simeq 0.0005$ vom intrinsischen regulären Gebiet der ungestörten Frozen-Planet-Dynamik getrennt wird (c). Wir erhalten oberhalb $F = 0.0005$ zwei separate reguläre Inseln: die „intrinsische Insel“ (zentriert um $z_1 \simeq 5.7$) und die feldinduzierte 1:1 Resonanzinsel (zentriert um $z_1 \simeq 13$). Mit weiter zunehmender Feldamplitude schrumpfen beide Inseln immer weiter zusammen (d – f), bis der Phasenraum oberhalb $F \simeq 0.003 \simeq F_I/2$ vollständig chaotisch wird.

„intrinsische“ Insel, die diejenigen Tori der ungestörten Frozen-Planet-Dynamik umfaßt, die durch das externe Feld noch nicht zerstört worden sind, sowie die Insel der feldinduzierten 1:1 Resonanz. Mit weiter zunehmender Feldamplitude werden die beiden Inseln immer stärker voneinander getrennt und überdecken stetig abnehmende Phasenraumvolumina, bis sie für $F \rightarrow F_I$ verschwinden und der Phasenraum vollständig chaotisch wird (Abb. 4.3f).

Betrachten wir nun den Phasenraum für variierende Frequenz bei fester Feldamplitude $F = 0.001$, bei der für $\omega = 0.05$ die Separation zwischen der intrinsischen Insel und der 1:1 Resonanzinsel besonders ausgeprägt ist. Die Entwicklung des Phasenraums in Abhängigkeit der Frequenz ist in Abb. 4.4 dargestellt. Sie läßt sich unmittelbar anhand des effektiven Potentials (Abb. 2.4) verstehen, das die langsame Bewegung des äußeren Elektrons um die Gleichgewichtslage beschreibt. Da die Oszillationsperiode mit zunehmender Anregung im effektiven Potential zunimmt, werden zum resonanten Antrieb höherenergetischer Trajektorien zunehmend niederfrequente Felder benötigt. Umgekehrt verschiebt sich bei einer Zunahme der Antriebsfrequenz die Resonanz zu niedrigeren Energien innerhalb des effektiven Potentials.

Die zeigt sich in der Tat in Abb. 4.4: Mit zunehmender Frequenz verschiebt sich die 1:1 Resonanzinsel immer mehr zum intrinsischen Gleichgewichtspunkt und wird dabei immer größer, auf Kosten der intrinsischen Insel. Bei $\omega = 0.08$ schließlich dominiert die 1:1 Resonanzinsel den regulären Bereich des Phasenraums; die intrinsische Insel hingegen überdeckt nur noch ein sehr kleines Phasenraumvolumen (Abb. 4.4d). Für $\omega > \omega_I \simeq 0.091$ ist ein resonanter Antrieb der Konfiguration in Form einer 1:1 Resonanz nicht möglich. Tatsächlich finden wir, daß die 1:1 Resonanzinsel für $\omega < \omega_I$ kontinuierlich übergeht in die intrinsische Insel für $\omega > \omega_I$ (Abb. 4.4d–f).

Im Frequenzbereich $\omega = 0.08 \dots 0.1$ treten im Phasenraum verstärkt Resonanzen höherer Ordnung auf. Bei $\omega = 0.1$ (Abb. 4.4f) etwa erkennen wir die zwei Inseln der 2:1 Resonanz (bei $z_1 \simeq 10.5$, $p_{z1} \simeq \pm 0.15$), die drei Inseln der 3:1 Resonanz (bei $z_1 \simeq 11.5$, $p_{z1} \simeq \pm 0.2$, sowie bei $z_1 \simeq 17.5$, $p_{z1} = 0$), sowie die Inselketten der 3:2 und der 5:3 Resonanz. $n:m$ Resonanzen mit $n < m$ treten für niedrigere Frequenzen $\omega < \omega_I$ auf. Für $\omega = 0.04$ (Abb. 4.4a) etwa finden wir die reguläre Substruktur der 1:2 Resonanz innerhalb der intrinsischen Insel (bei $z_1 \simeq 4.5$). Mit zunehmender Frequenz verschieben sich die $n:m$ Resonanzen zum intrinsischen Gleichgewicht und gehen dort für $\omega = n/m \cdot \omega_I$ in die intrinsische Insel über.

Der wesentliche Unterschied zwischen der intrinsischen Insel und der feldinduzierten Resonanz besteht darin, daß innerhalb der intrinsischen Insel die Dynamik im wesentlichen durch die *feldfreien* atomaren Wechselwirkungen der Frozen-Planet-Konfiguration geprägt wird, während die Dynamik der feldinduzierten Resonanz aus der *Kopplung* der atomaren Freiheitsgrade und des externen Antriebs resultiert. Dementsprechend zeichnet sich der fundamentale periodische Orbit der intrinsischen Insel durch eine nahezu stationäre Trajektorie des äußeren Elektrons aus (die dem fundamentalen periodischen Orbit der ungestörten

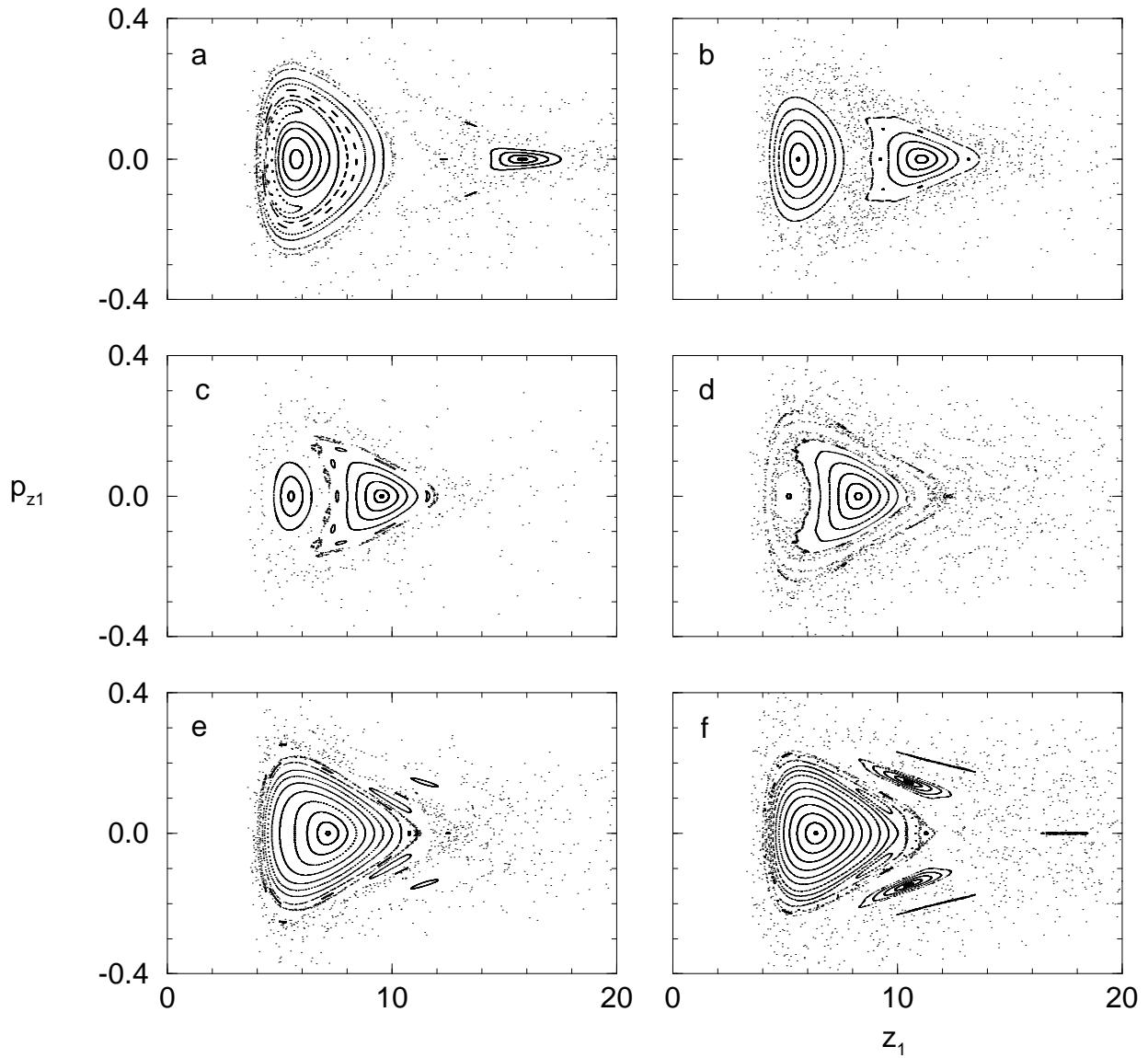


Abb. 4.4: Entwicklung des Phasenraums in Abhängigkeit der Frequenz bei fester Feldamplitude $F = 0.001$. (a) $\omega = 0.04$; (b) $\omega = 0.06$; (c) $\omega = 0.07$; (d) $\omega = 0.08$; (e) $\omega = 0.09$; (f) $\omega = 0.1$. Mit zunehmender Frequenz verschiebt sich die 1:1 Resonanzinsel immer mehr zum intrinsischen Gleichgewichtsabstand bei $z_1 \simeq 5.7$ und wird dabei immer größer (a - d) – auf Kosten der intrinsischen Insel, die bei $\omega = 0.08$ ein sehr kleines Phasenraumvolumen überdeckt (bei $z_1 \simeq 5.7$) (d). Bei $\omega \simeq \omega_I \simeq 0.091$ findet ein kontinuierlicher Übergang von der 1:1 Resonanzinsel für $\omega < \omega_I$ in die intrinsische Insel für $\omega > \omega_I$ statt (d - f). Darüber hinaus treten im Phasenraum auch reguläre Gebiete auf, die Resonanzen höherer Ordnung entsprechen: bei $\omega = 0.04$ (a) die reguläre Substruktur der 1:2 Resonanz innerhalb der intrinsischen Insel (bei $z_1 \simeq 4.5$), sowie bei $\omega \simeq \omega_I$ (d-f) die Inseln der 3:2 Resonanz, der 5:3 Resonanz, der 2:1 Resonanz (bei $z_1 \simeq 10.5$, $p_{z1} \simeq \pm 0.15$ in (f)), sowie der 3:1 Resonanz (bei $z_1 \simeq 11.5$, $p_{z1} \simeq \pm 0.2$, sowie bei $z_1 \simeq 17.5$, $p_{z1} = 0$ in (f)).

Frozen-Planet-Konfiguration sehr ähnlich ist, siehe Abb. 2.1d), während beim fundamentalen periodischen Orbit der feldinduzierten Resonanzinsel das äußere Elektron in Resonanz mit dem treibenden Feld um die Gleichgewichtslage oszilliert (Abb. 4.5). Die entsprechende Zeitentwicklung der Inseln im Phasenraum lässt sich visualisieren, indem wir doppelte Poincaré-Schnitte für verschiedene Werte von φ_0 erstellen, den Phasenraum also zu verschiedenen Zeiten bzw. Phasen ωt des treibenden Feldes abbilden. Wir sehen in Abb. 4.6, daß die intrinsische Insel innerhalb einer Feldperiode im wesentlichen stationär bleibt, während die feldinduzierten Resonanzen in der Poincaré-Schnittebene um die intrinsische Insel entlang der periodisch getriebenen Trajektorie propagieren.

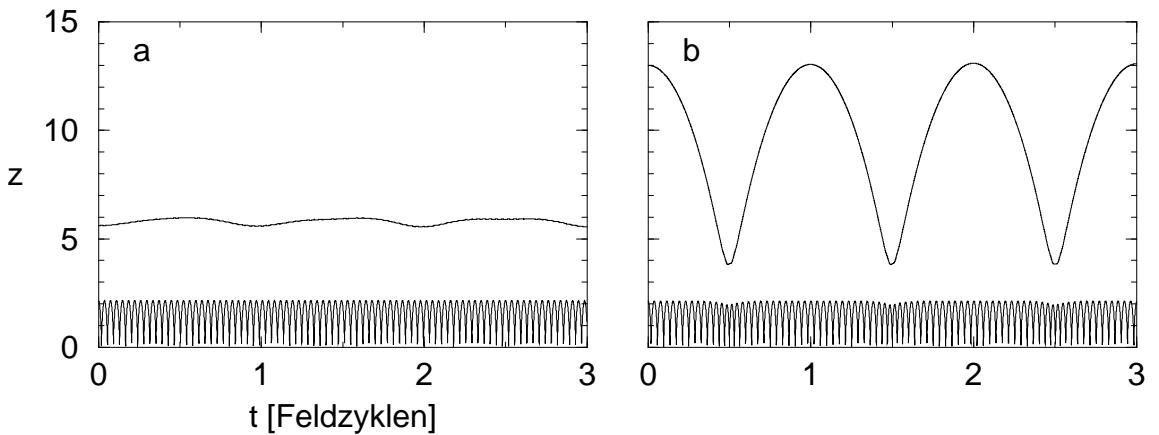


Abb. 4.5: Fundamental periodischer Orbit der intrinsischen Insel (a) bzw. der feldinduzierten 1:1 Resonanz (b) für $\omega = 0.05$, $F = 0.001$. Aufgetragen sind die Koordinaten der Elektronen als Funktion der Zeit. Während der fundamentale periodische Orbit der intrinsischen Insel einer im wesentlichen stationären Trajektorie des äußeren Elektrons entspricht, oszilliert beim fundamentalen periodischen Orbit der 1:1 Resonanz das äußere Elektron in Resonanz mit dem treibenden Feld um die Gleichgewichtslage.

Mit zunehmender Frequenz $\omega \rightarrow \omega_K$ lässt sich die Separation zwischen den Bewegungen der Elektronen immer weniger gut realisieren, da das innere Elektron durch das externe Feld zunehmend *resonant* getrieben wird. Während sich für $\omega < \omega_I$ die gemischt regulär-chaotische Dynamik im wesentlichen in der Bewegung des äußeren Elektrons manifestiert und das innere Elektron im Feldamplitudenzbereich $F < F_I$, in dem der Phasenraum gemischt regulär-chaotisch ist, durch das externe Feld nur sehr schwach beeinflusst wird, lässt sich für $\omega > \omega_I$ die gemischt regulär-chaotische Dynamik nicht mehr vollständig anhand der Bewegung des äußeren Elektrons im effektiven adiabatischen Potential beschreiben. Bereits für $\omega = 0.3 \simeq 0.2\omega_K$ wird bei den höchsten Feldamplituden $F \simeq 0.2$, bei denen der Phasenraum noch ein reguläres Gebiet aufweist, das innere Elektron durch das externe Feld unmittelbar getrieben (Abb. 4.7). Für $\omega \rightarrow \omega_K$ sowie für $\omega > \omega_K$ werden beide Elektronen durch das externe Feld in vergleichbarem Maße angeregt. Eine detaillierte Analyse der ge-

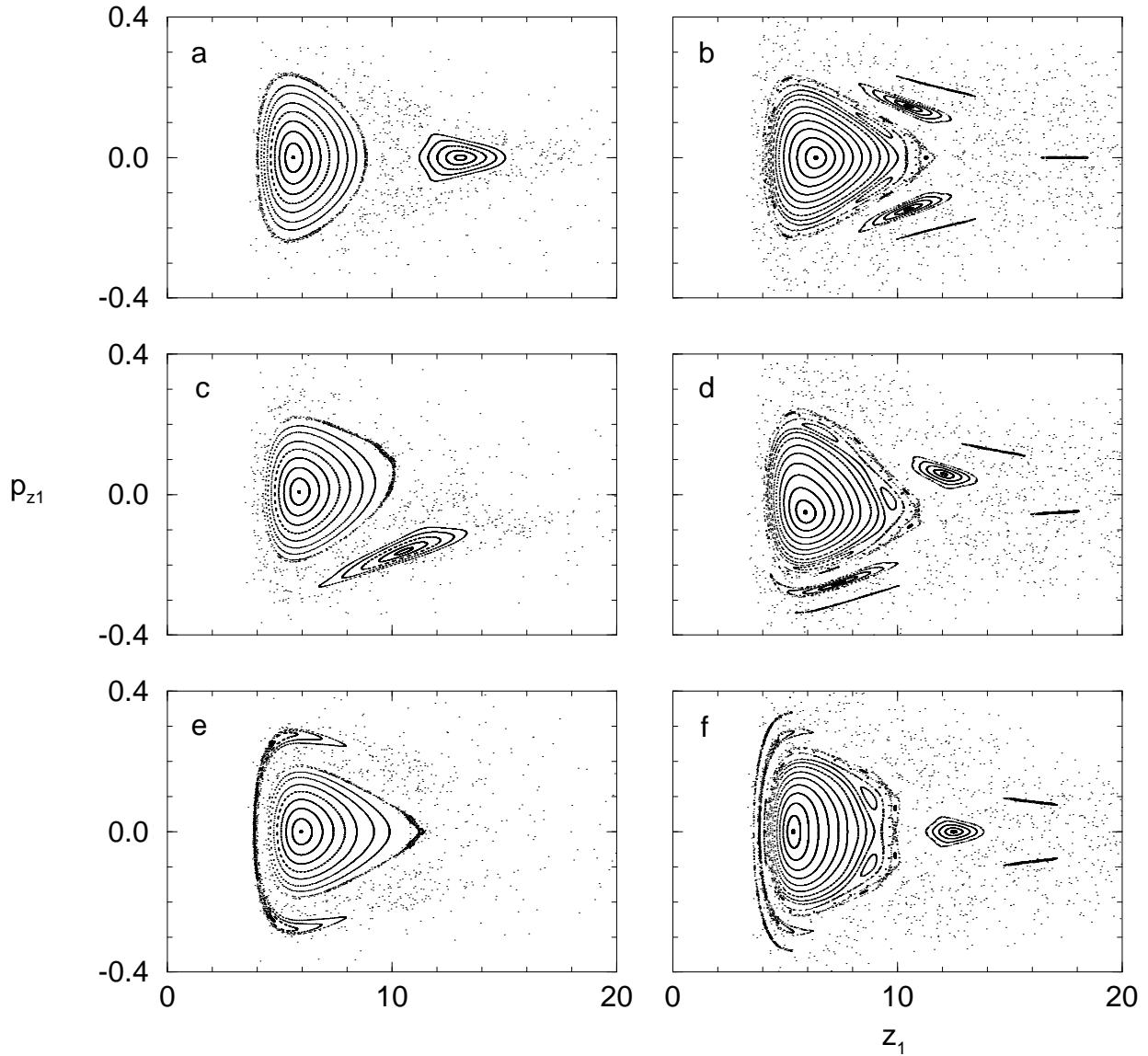


Abb. 4.6: Zeitentwicklung der Phasenraumstruktur während einer Feldperiode $2\pi/\omega$, dargestellt für die Feldparameter $\omega = 0.05 < \omega_I$, $F = 0.001$ (a, c, e), bei denen die 1:1 Resonanzinsel im Phasenraum auftritt, sowie für $\omega = 0.1 > \omega_I$, $F = 0.001$ (b, d, f), bei denen die 2:1 Resonanzinseln sowie Resonanzinseln höherer Ordnung im Phasenraum auftreten. Die Phasenraumpورtraits wurden mit der Methode des doppelten Poincaré-Schnitts für verschiedene Werte der Phase $\omega t = \varphi_0$ des treibenden Feldes erstellt: (a, b) $\varphi_0 = 0$; (c, d) $\varphi_0 = \pi/2$; (e, f) $\varphi_0 = \pi$. Auf diese Weise läßt sich die Entwicklung der regulären Inseln im Verlauf einer Feldperiode visualisieren. Wir sehen, daß die intrinsische Insel innerhalb einer Feldperiode im wesentlichen stationär bleibt, während die feldinduzierten Resonanzen entlang der resonant getriebenen Trajektorie die intrinsische Insel umlaufen.

mischt regulär-chaotischen Dynamik in diesem Frequenzbereich erfordert die Visualisierung eines fünfdimensionalen Phasenraums, bei dem sich keine Dimension durch die approximative Separation einer Mode bzw. durch die Existenz einer approximativen Konstanten der Bewegung eliminieren lässt, und wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht durchgeführt.

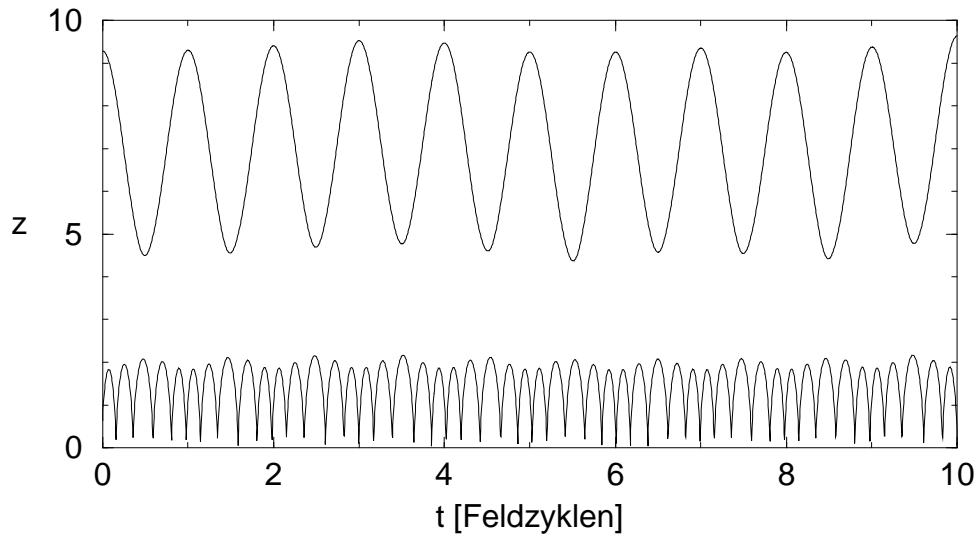


Abb. 4.7: Stabile Trajektorie, aufgetragen als Funktion der Zeit, für $\omega = 0.3 \simeq 0.2 \omega_K$, $F = 0.2$. Bei diesen Feldparametern wird das innere Elektron durch das externe Feld derart maßgeblich beeinflußt, daß die Zeitentwicklung des Systems nicht mehr durch die Bewegung im effektiven adiabatischen Potential beschrieben werden kann. Während für $\omega < \omega_I$ bzw. für niedrigere Feldamplituden die Modulation des Kepler-Orbits des inneren Elektrons im wesentlichen allein durch die Bewegung des äußeren Elektrons verursacht wird (das seinerseits wiederum durch das externe Feld angetrieben wird), liegt hier ein unmittelbar *nahresonanter* Antrieb des inneren Elektrons durch das externe Feld vor. Dies läßt sich daran erkennen, daß die Oszillation der Amplitude des Kepler-Orbits im Gegensatz zur Bewegung für $\omega < \omega_I$ bzw. für niedrigere Feldamplituden (siehe Abb. 2.3 bzw. Abb. 4.5) *gegenphasig* zur Bewegung des äußeren Elektrons erfolgt, also das Maximum erreicht, wenn das äußere Elektron am *inneren* Umkehrpunkt ist. In der Tat läßt sich der Figur entnehmen, daß das innere Elektron in Form einer 1:5 Resonanz angetrieben wird, bei der innerhalb einer Feldperiode 5 Keplerzyklen durchlaufen werden.

Kapitel 5

Abweichungen von der Kollinearität

Unsere vorangehende Analyse des Phasenraums der kollinearen, getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration hat die Existenz regulärer Inseln gezeigt, die von der chaotischen See umschlossen sind. Dieses Ergebnis mag zu der naiven, vorschnellen Annahme verleiten, daß diese Inseln auch reguläre Inseln im Phasenraum der *dreidimensionalen* Bewegung darstellen und somit langlebigen Quantenzuständen des dreidimensionalen getriebenen Helium-Atoms entsprechen, die vollständig entlang der diesen Inseln entsprechenden Orbits lokalisiert sind (siehe Kap. 6 zur Diskussion der quantenmechanischen Entsprechung regulärer Inseln des klassischen Phasenraums). Unterstützt wird diese Annahme durch die transversale Stabilität der ungestörten Frozen-Planet-Konfiguration sowie durch die Tatsache, daß analoge reguläre Inseln des eindimensionalen, getriebenen *Wasserstoff*-Atoms (also des getriebenen Zwei-Körper-Coulombproblems) in reguläre Gebiete im Phasenraum der dreidimensionalen Bewegung eingebettet sind [83, 84].

Bei der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration läßt sich die Regularität des kollinearen Phasenraums jedoch im allgemeinen *nicht* auf das dreidimensionale System übertragen: Es zeigt sich, daß die regulären Gebiete des Phasenraums der kollinearen, getriebenen Konfiguration überwiegend durch *Instabilität* bezüglich Abweichungen von der Kollinearität gekennzeichnet sind. Lediglich in der Umgebung von Teilgebieten der intrinsischen Insel sowie entlang einiger Resonanzen hoher Ordnung ist die Dynamik der nichtkollinearen Konfiguration regulär.

Betrachten wir als typisches Beispiel für die Dynamik in der Umgebung eines durch transversale Instabilität gekennzeichneten Gebiets des kollinearen Phasenraums eine Trajektorie, deren Anfangsbedingung in der unmittelbaren Nähe des fundamentalen periodischen Orbits der 1:1 Resonanz für $\omega = 0.08$, $F = 0.001$ (Abb. 4.4d) liegt und eine kleine transversale Komponente $y_1(t = 0) = 0.01$ in der Position des äußeren Elektrons aufweist. Wir wir in Abb. 5.1 sehen, wird die anfangs kleine Abweichung der Konfiguration von der z -Achse, entlang der das elektromagnetische Feld polarisiert ist, im Lauf der Zeit verstärkt; beide Elektronen wer-

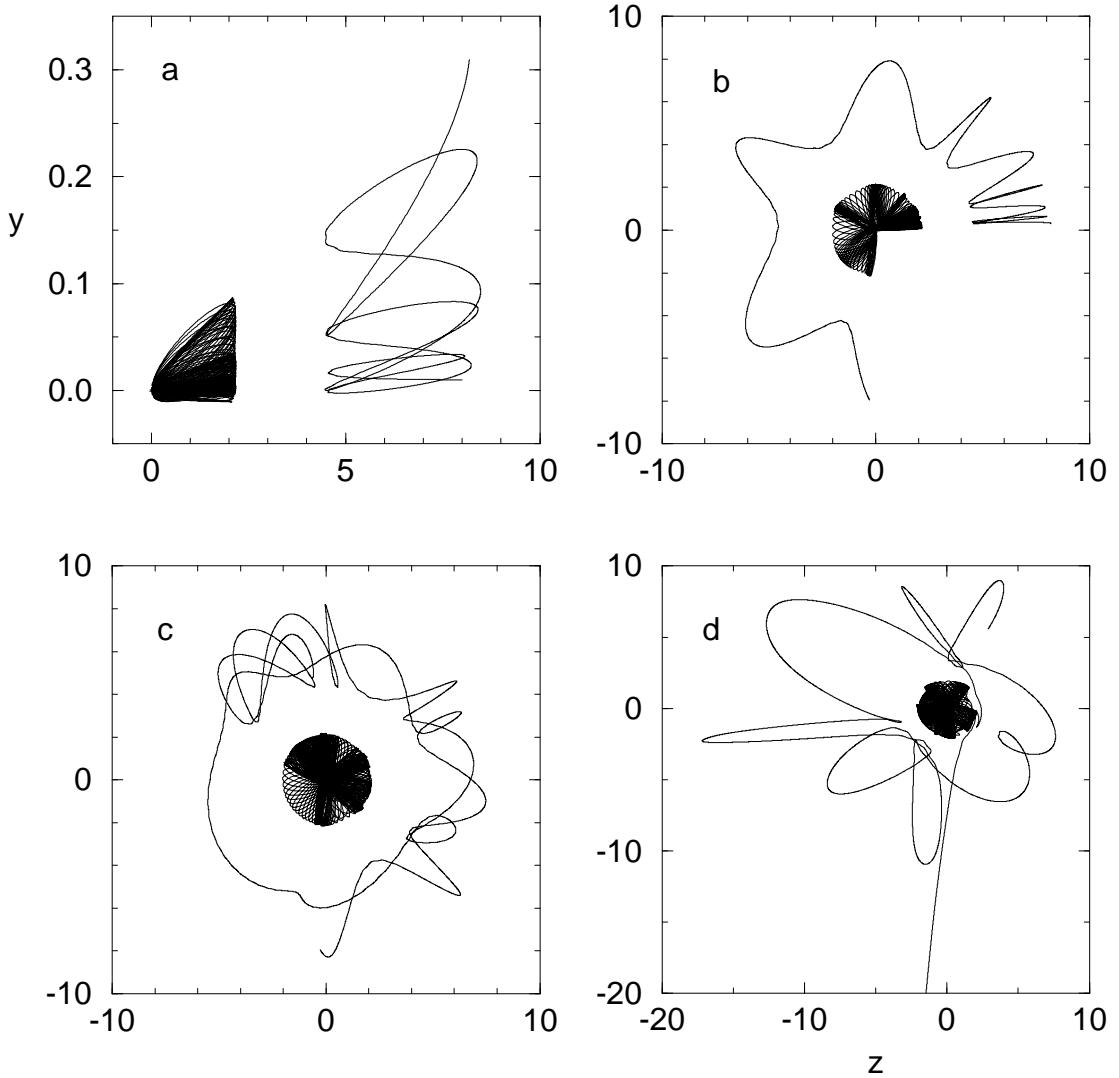


Abb. 5.1: Zeitentwicklung einer Trajektorie, die in der transversalen Umgebung der 1:1 Resonanz des kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.08$, $F = 0.001$ startet. Aufgetragen sind Ausschnitte der Trajektorie in den Zeitintervallen (a) $t = 0 \dots 6$ Feldzyklen, (b) $t = 6 \dots 15$ Feldzyklen, (c) $t = 15 \dots 30$ Feldzyklen, (d) $t = 95 \dots 110$ Feldzyklen. Die Anfangswerte betragen $z_1(t = 0) = 8$, $y_1(t = 0) = 0.01$, $y_2(t = 0) = 0$, $p_1(t = 0) = p_2(t = 0) = 0$; $z_2(t = 0)$ ist so gewählt, daß die feldfreie Gesamtenergie anfangs $E = -1$ beträgt (der Index 1 bezeichnet das äußere, der Index 2 das innere Elektron; das elektrische Wechselfeld ist entlang der z -Achse polarisiert). Wir sehen, daß die anfänglich kleine Abweichung der Konfiguration von der z -Achse im Lauf der Zeit verstärkt wird (a), bis die Konfiguration nach etwa 15 Feldzyklen auf die andere Seite des Kerns kippt (b). Die Konfiguration vollführt anschließend chaotische Rotationen um den Kern (c), bis sie nach etwa 100 Feldzyklen ionisiert (d).

den von der z -Achse weggetrieben und gelangen, nach etwa 15 Feldzyklen, auf die andere Seite des Kerns. Die Konfiguration vollführt nun chaotische Rotationen um den Kern. Nach etwa 100 Feldzyklen bricht die die Frozen-Planet-Konfiguration charakterisierende Korrelation der Elektronen zusammen; es kommt zum Zusammenstoß zwischen den Elektronen und das System ionisiert.

In diesem Kapitel wird nun das Stabilitätsverhalten der Konfiguration in der Umgebung des kollinearen Phasenraums untersucht. Wir beschreiben zunächst in Abschnitt 5.1, mit welcher Methode die Regularität bzw. Irregularität der Dynamik in der Umgebung des kollinearen Phasenraums bestimmt wird. In Abschnitt 5.2 wird die nichtkollineare Dynamik entlang transversal stabiler und instabiler Resonanzen untersucht. Es wird gezeigt, daß die Instabilität der Dynamik in der Umgebung der Resonanzen durch das Drehmoment verursacht wird, das das externe Feld auf die Konfiguration in der Nähe der Feldpolarisationsachse ausübt. Anschließend werden in Abschnitt 5.3 wesentliche Charakteristika der Dynamik der chaotisch rotierenden Konfiguration aufgezeigt.

Die Dynamik der nichtkollinearen Konfiguration wird im folgenden anhand von Trajektorien untersucht, die innerhalb des Phasenraums der zweidimensionalen Bewegung des extern getriebenen Helium-Atoms verlaufen. Aufgrund der Rotationssymmetrie der Konfiguration bezüglich der z -Achse lassen sich die in diesen Untersuchungen erzielten Ergebnisse (insbesondere zum Phasenraumvolumen transversal stabiler Resonanzen, siehe Kap. 6) auch auf das *dreidimensionale*, getriebene Helium-Atom übertragen. Dies wurde in Stichproben anhand von Trajektorien, die nicht auf den zweidimensionalen Konfigurationsraum beschränkt sind (etwa aufgrund nichtverschwindender Anfangswerte von y_1 und x_2), explizit überprüft.

5.1 Bestimmung der transversalen Stabilitätseigenschaften

Da die Trajektorie der von der Kollinearität abweichenden Konfiguration in Anwesenheit eines äußeren Antriebs selbst bei Beschränkung auf den zweidimensionalen Konfigurationsraum innerhalb eines neundimensionalen Phasenraums verläuft (aufgespannt durch die Koordinaten und Impulse der Elektronen z_i, y_i, p_{zi}, p_{yi} sowie durch die Zeit t), ist es nicht möglich, die transversalen Stabilitätseigenschaften der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration anhand von Poincaré-Schnitten zu untersuchen. Um zu bestimmen, ob reguläre Gebiete innerhalb des kollinearen Phasenraums durch Stabilität oder Instabilität bezüglich Abweichungen von der Kollinearität gekennzeichnet sind, betrachten wir daher einzelne, nichtkollineare Anfangsbedingungen in der Nähe des kollinearen Phasenraums und überprüfen, ob diese Anfangsbedingungen zu regulären oder chaotischen Trajektorien führen. Als quantitatives Kriterium für Regularität bzw. Chaos verwenden wir die Ionisation des Systems. Ionisiert das System innerhalb einer vorgegebenen, hinreichend groß gewählten Zeitspanne, so liegt chaotische Dynamik vor. Bleibt das System hingegen innerhalb dieser Zeitspanne für ein endliches Phasenraum-

volumen von Anfangsbedingungen gebunden, so werten wir dies als Anzeichen für reguläre Dynamik innerhalb dieses Phasenraumvolumens.

Konkret betrachten wir das System als ionisiert, wenn der Abstand eines der Elektronen vom Kern einen vorgegebenen Maximalwert R_{ion} übersteigt (der in unseren Rechnungen $R_{\text{ion}} = 100$ gesetzt ist) und dieses Elektron dabei einen so großen Impuls aufweist, daß es in dem durch den Kern und das innere Elektron erzeugten Potential nicht gebunden bleibt. Die Ionisationszeit ist damit definiert durch den Zeitpunkt, zu dem erstmals

$$r_i > R_{\text{ion}} \quad (5.1)$$

und

$$\Delta E_B = \frac{1}{2} (\mathbf{p}_i - \mathbf{A}(t))^2 - \frac{Z}{r_i} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} > 0 \quad (5.2)$$

für $i = 1$ oder 2 gilt, wobei

$$\mathbf{A}(t) = -\frac{F}{\omega} \mathbf{e}_z \sin \omega t \quad (5.3)$$

dem ponderomotiven Impuls des Elektrons im elektromagnetischen Feld entspricht (\mathbf{e}_z bezeichnet den Einheitsvektor entlang der z -Achse). ΔE_B gibt somit die negative effektive Bindungsenergie des äußeren Elektrons an.

Zusätzlich zur Ionisationszeit berechnen wir, eingedenk des in Abb. 5.1 gezeigten Verhaltens instabiler Trajektorien in der Umgebung des kollinearen Phasenraums, die *Kippzeit*, die angibt, zu welcher Zeit die Konfiguration auf die andere Seite des Kerns „kippt“, und konkret durch den Zeitpunkt definiert ist, zu dem für das äußere Elektron erstmals $z_1 < 0$ gilt. Die Kenntnis der Kippzeit erlaubt wesentliche Rückschlüsse über die Art der regulären bzw. chaotischen Bewegung, die die aus der Ionisationszeit gewonnenen Informationen ergänzen.

Abb. 5.2a zeigt die Kipp- und Ionisationszeiten für Anfangsbedingungen entlang der durch $p_{z1} = 0$ gekennzeichneten Achse des Phasenraums der kollinearen Konfiguration (Abb. 5.2b) für $F = 0.0005$, $\omega = 0.05$. Die Kipp- und Ionisationszeiten sind in Abhängigkeit der z -Komponente des Anfangsorts des äußeren Elektrons aufgetragen, die in äquidistanten Schritten der Länge $\Delta z = 0.01$ von $z_1 = 3.5$ bis $z_1 = 20$ variiert wurde. Die Abweichung der Konfiguration von der Kollinearität wird durch einen kleinen nichtverschwindenden Anfangswert der y -Komponente des Orts des äußeren Elektrons erzeugt: $y_1(t = 0) = 0.01$. Für jede dieser Anfangsbedingungen ist die Trajektorie bis zum Ionisationszeitpunkt berechnet worden. Ist das Atom nach 500 Feldzyklen noch nicht ionisiert, so wird in der Abbildung die Ionisationszeit (und ebenso die Kippzeit, falls die Konfiguration noch nicht gekippt ist) dieser maximalen Zeit gleichgesetzt.

Wir sehen in Abb. 5.2a, daß die in der transversalen Umgebung der intrinsischen Insel bzw. der 1:1 Resonanzinsel des kollinearen Phasenraums startende Trajektorie relativ schnell, nämlich bereits nach 10 - 20 Feldzyklen, zum Kippen der Konfiguration führt. Anhand der

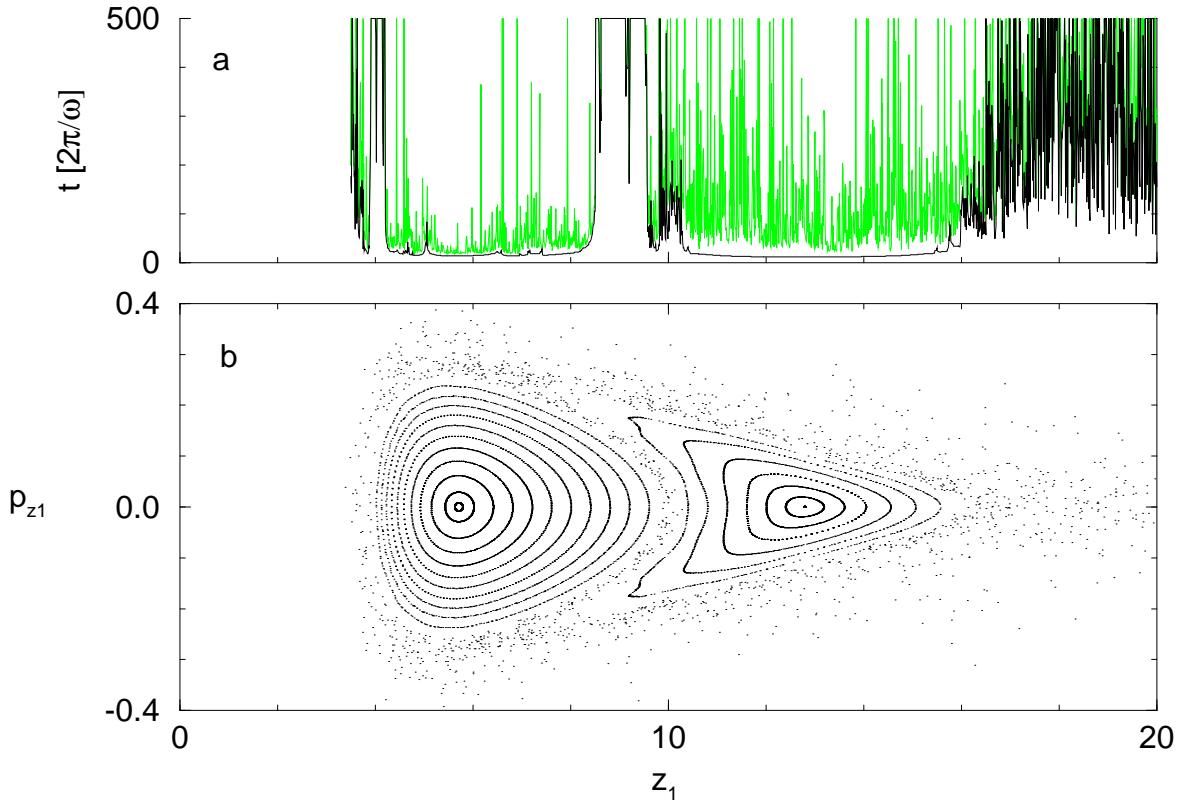


Abb. 5.2: Kipp- und Ionisationsverhalten von Trajektorien, die in der Umgebung des kollinearen Konfigurationsraums starten. Aufgetragen sind in (a) und (b) die Kippzeiten (dunkle Linie) und die Ionisationszeiten (helle Linie) in Abhängigkeit des Anfangsorts z_1 des äußeren Elektrons für die Feldparameter $\omega = 0.05$, $F = 0.0005$. Der Anfangswert von z_1 wurde in äquidistanten Schritten der Länge $\Delta z = 0.01$ von $z_1 = 3.5$ bis $z_1 = 20$ variiert (zur Hervorhebung regulären und chaotischen Verhaltens sind die Kipp- und Ionisationszeiten benachbarter Werte von z_1 durch gerade Streckenzüge miteinander verbunden). Die Abweichung von der Kollinearität wird durch einen nichtverschwindenden Anfangswert $y_1(t = 0) = 0.01$ erzeugt. Die übrigen Anfangswerte betragen $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$; $z_2(t = 0)$ ist so gewählt, daß die feldfreie Gesamtenergie anfangs $E = -1$ beträgt. (b) Poincaré-Schnitt des entsprechenden klassischen Phasenraums. Da die Anfangsbedingungen von (a) in der unmittelbaren transversalen Umgebung des durch $p_{z1} = 0$ gekennzeichneten Unterraums des kollinearen Phasenraums liegen, läßt sich das Kipp- und Ionisationsverhalten der Konfiguration in eindeutiger Weise den Strukturen des klassischen Phasenraums zuordnen, die die $p_{z1} = 0$ -Achse des Phasenraumabbilds in (b) schneiden. Die regulären Gebiete etwa, in denen die Konfiguration weder kippt noch ionisiert (und bei denen Kipp- und Ionisationszeit der maximalen Propagationszeit von 500 Feldzyklen gleichgesetzt sind), entsprechen den Tori der intrinsischen Insel, die zwischen $z_1 \simeq 3.9$ und $z_1 \simeq 4.2$ bzw. zwischen $z_1 \simeq 8.5$ und $z_1 \simeq 9.5$ die $p_{z1} = 0$ -Achse schneiden.

Tatsache, daß in der Umgebung dieser regulären Inseln die Kippzeit eine relativ glatte Funktion des Anfangswertes von z_1 ist, erkennen wir, daß der Kippvorgang, also die Bewegung der Konfiguration bis zum Kippzeitpunkt, ein im wesentlichen *regulärer* Prozeß ist. Nach dem Kippen wird die Dynamik jedoch chaotisch, was daran zu erkennen ist, daß die Ionisationszeit in extrem sensibler Weise von $z_1(t = 0)$ abhängt. In der Umgebung von chaotischen Gebieten des kollinearen Phasenraums hingegen (etwa bei $z_1 \gtrsim 16$ in Abb. 5.2) ist die Konfiguration relativ stabil gegen Kippen und ionisiert gelegentlich, ohne auf die andere Seite des Kerns gekippt zu sein (in diesem Fall ist in der Abbildung die Kippzeit der Ionisationszeit gleichgesetzt). Des weiteren existieren in der transversalen Umgebung des Randbereichs der intrinsischen Insel Gebiete, in denen die Konfiguration weder kippt noch ionisiert. Tatsächlich zeigt es sich, daß in diesen Gebieten die Dynamik regulär ist.

Das Kipp- und Ionisationsverhalten in der Umgebung des kollinearen Phasenraums ist im wesentlichen unabhängig von der Größe des Anfangswerts von y_1 (sofern y_1 nicht zu groß gewählt wird; für $y_1(t = 0) > 0.1$ wird entlang des Randbereichs der intrinsischen Insel in Abb. 5.2b die Dynamik instabil). Ebensowenig ändert sich das qualitative Kipp- und Ionisationsverhalten, wenn die anfängliche Abweichung der Konfiguration von der Kollinearität auf eine andere Art, etwa durch einen nichtverschwindenden Anfangswert von p_{y1} , y_2 oder p_{y2} , erzeugt wird.

5.2 Transversal stabile und instabile Gebiete

Mit der im vorigen Abschnitt beschriebenen Methode wurden die regulären Inseln des kollinearen Phasenraums im Hinblick auf transversale Stabilität untersucht. Dabei hat sich erwiesen, daß die überwiegende Mehrzahl der feldinduzierten Resonanzinseln durch Instabilität bezüglich Abweichungen von der Kollinearität gekennzeichnet sind. Insbesondere zeichnet sich auch die 1:1 Resonanz, unabhängig von F und ω , durch transversale Instabilität aus. Stabil ist die Dynamik lediglich entlang Resonanzen hoher Ordnung, die im kollinearen Phasenraum für $\omega \simeq \omega_I$ auftreten.

Auch entlang des Zentrums der intrinsischen Insel ist die Dynamik instabil. Lediglich der Randbereich der intrinsischen Insel, dessen Tori die $p_{z1} = 0$ Achse des kollinearen Phasenraums oberhalb $z_1 \simeq 9$ schneiden, zeichnet sich durch transversale Stabilität aus (abgesehen von der eingebetteten 1:1 Resonanz). Dies ist in Abb. 5.3 gezeigt, in der wir die Kipp- und Ionisationszeiten entlang des kollinearen Phasenraums für verschiedene Feldamplituden bei fester Frequenz $\omega = 0.05$ auftragen. Wie wir in Abb. 5.3 sehen, nimmt mit zunehmendem F die Ausdehnung des stabilen Randbereichs ab, bis dieser oberhalb $F = 0.0005$ vollständig verschwindet.

Bemerkenswert ist in Abb. 5.3, daß selbst für sehr niedrige Feldamplituden die Dynamik entlang der durch die 1:1 Resonanz erzeugten regulären Substruktur instabil bezüglich

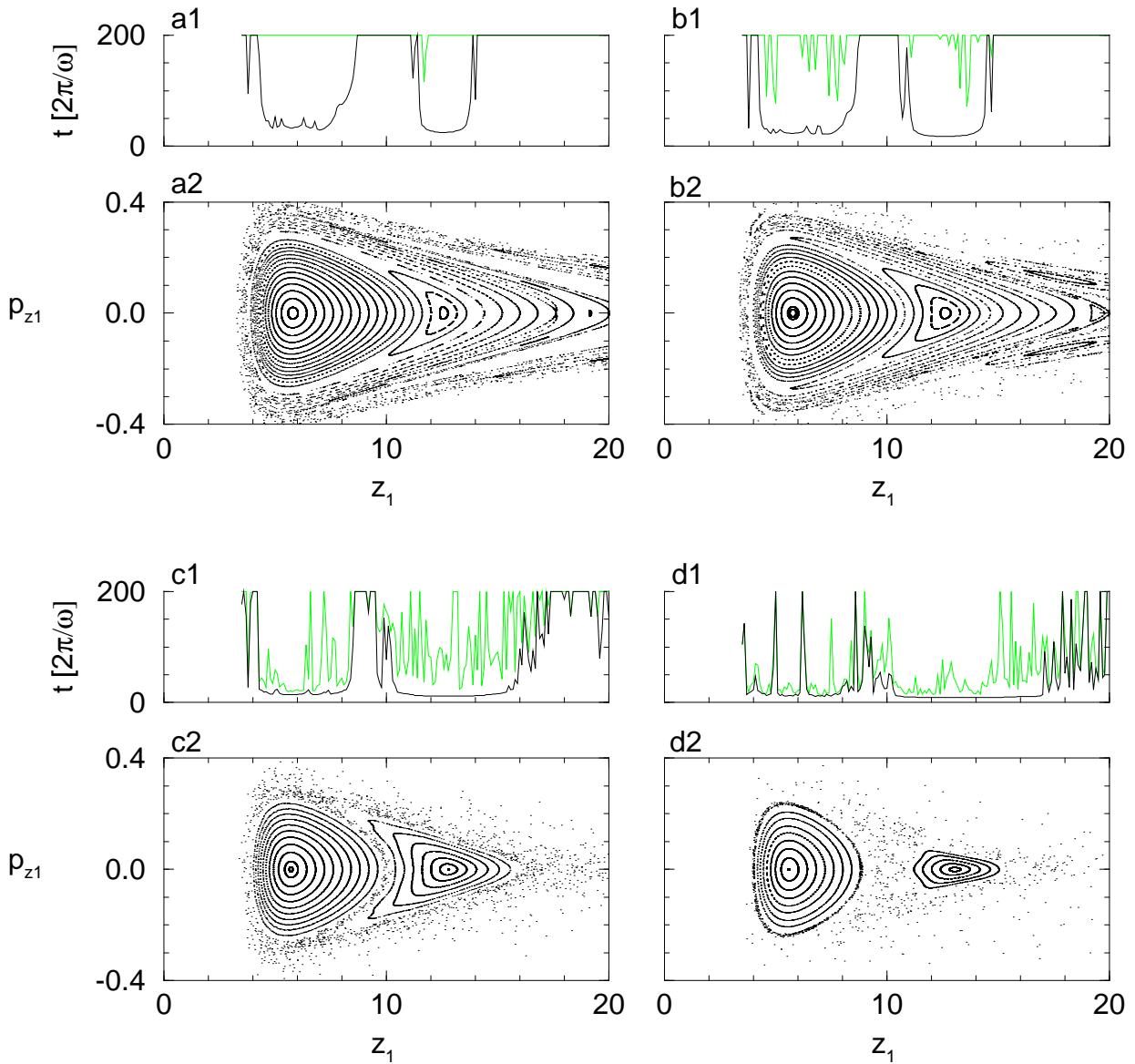


Abb. 5.3: Kipp- und Ionisationsverhalten in der Umgebung der intrinsischen Insel und der 1:1 Resonanz für $\omega = 0.05$ und variierende Feldamplitude: (a1, a2) $F = 0.0001$; (b1, b2) $F = 0.0002$; (c1, c2) $F = 0.0005$; (d1, d2) $F = 0.001$. (a1, b1, c1, d1) Kippzeiten (dunkle Linie) und Ionisationszeiten (helle Linie) als Funktion des Anfangswerts von z_1 , der in äquidistanten Schritten der Länge $\Delta z = 0.1$ von $z_1 = 3.5$ bis $z_1 = 20$ variiert ist (die übrigen Anfangswerte sind $y_1 = 0.01$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $E = -1$). (a2, b2, c2, d2) Poincaré-Schnitt des entsprechenden kollinearen Phasenraums. Wir sehen, daß sowohl das Zentrum der intrinsischen Insel als auch die reguläre Struktur der 1:1 Resonanz durch transversale Instabilität gekennzeichnet sind. Stabil ist die Dynamik lediglich entlang des Randbereichs der intrinsischen Insel, dessen Tori die $p_{z1} = 0$ Achse im Poincaré-Schnitt bei $z_1 \gtrsim 9$ schneiden. Wie wir sehen, nimmt die Größe dieses stabilen Randbereichs mit zunehmender Feldamplitude ab. Oberhalb $F = 0.0005$ (c, d) ist der kollineare Phasenraum vollständig durch Instabilität bezüglich Abweichungen von der Kollinearität gekennzeichnet (abgesehen von einem kleinen stabilen Gebiet in (d) entlang der Tori, die die $p_{z1} = 0$ Achse bei $z_1 \simeq 5$ bzw. $z_1 \simeq 6.2$ schneiden).

Abweichungen von der Kollinearität ist. Abb. 5.4 zeigt eine Trajektorie, die in der unmittelbaren transversalen Umgebung des periodischen Orbits der 1:1 Resonanz von Abb. 5.3a startet. Wir sehen, daß die Konfiguration im Lauf der Zeit von der z -Achse, entlang der das elektromagnetische Feld polarisiert ist, immer weiter entfernt wird, bis sie schließlich, nach etwa 35 Feldzyklen, auf die andere Seite des Kerns kippt.

Diese Instabilität ist auf das Drehmoment zurückzuführen, das das externe Feld auf die Konfiguration ausübt (die aufgrund der starken Winkelkorrelation zwischen den Elektronen näherungsweise als quasistarrer Körper betrachtet werden kann). Dieses Drehmoment ist desto größer, je weiter das äußere Elektron vom Kern entfernt ist, je größer also der „Hebelarm“ der Konfiguration ist. Wird nun die nahezu kollinear entlang der Feldpolarisation ausgerichtete Konfiguration resonant angetrieben, so überwiegt innerhalb einer Feldperiode dasjenige Drehmoment, das am *äußeren* Umkehrpunkt der Oszillation des äußeren Elektrons vorliegt. Da beim stabilen periodischen Orbit der kollinearen 1:1 Resonanz die Kraft auf die Elektronen am äußeren Umkehrpunkt nach *innen* gerichtet ist, erfährt die um einen kleinen Winkel von der Feldpolarisationsachse weggedrehte Konfiguration am äußeren Umkehrpunkt eine senkrecht zur Symmetriearchse der Konfiguration gerichtete Kraftkomponente, die diese von der Feldpolarisationsachse weg bewegt. Das über eine Feldperiode gemittelte Drehmoment auf die Konfiguration ist damit so gerichtet, daß es eine kleine Abweichung der Konfiguration von der Polarisationsachse verstärkt.

Auch $n:1$ Resonanzen höherer Ordnung, etwa die 2:1 und die 3:1 Resonanz, zeichnen sich durch transversale Instabilität aus. Tatsächlich ist auch in der transversalen Umgebung dieser Resonanzen das über n Feldperioden gemittelte Drehmoment auf die Konfiguration so gerichtet, daß es diese von der Polarisationsachse wegtreibt. Etwas komplizierter stellt sich die Situation für die $1:n$ Resonanzen dar, etwa die 1:2 Resonanz (Abb. 4.4a). In der Umgebung dieser Resonanz ist das über eine Feldperiode gemittelte Drehmoment auf die Konfiguration so gerichtet, daß es diese zur Polarisationsachse *zurücktreibt*. Jedoch ist das rücktreibende Drehmoment so groß, daß eine anfänglich in Richtung positiver y -Werte ausgelenkte Konfiguration durch das externe Feld in die Halbebene negativer y -Werte getrieben wird und dort eine größere Auslenkung von der y -Achse erfährt, als sie ursprünglich auf der Seite positiver y -Werte aufwies (Abb. 5.5). Durch ein derartiges, die Abweichung von der Kollinearität verstärkendes „Hin- und Herschaukeln“ der Konfiguration entfernt sich diese immer weiter von der z -Achse und kippt schließlich auf die andere Seite des Kerns (Abb. 5.5c).

Neben den transversal instabilen $n:1$ und $1:n$ Resonanzen existieren auch $n:m$ Resonanzen hoher Ordnung, in deren Umgebung die Dynamik *stabil* ist. Diese $n:m$ Resonanzen zeichnen sich durch $n < m < 2n$ aus (etwa die 3:2 Resonanz, die 4:3 Resonanz, die 5:3 Resonanz etc.) und treten bei Frequenzen $\omega \simeq \omega_I$ im Phasenraum auf. Abb. 5.6 zeigt die Kipp- und Ionisationszeiten in der Umgebung des kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.09$ und $F = 0.001$.

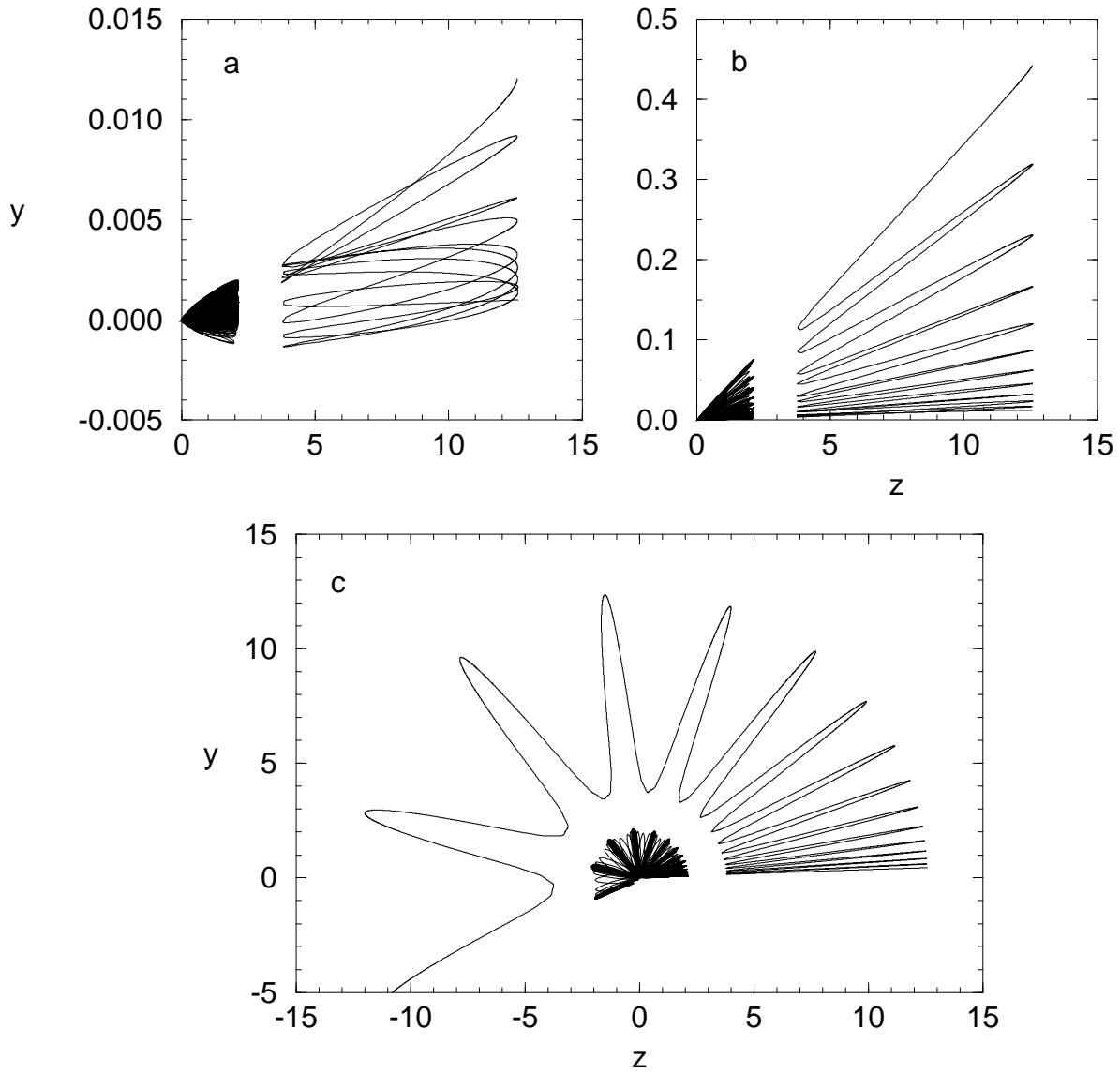


Abb. 5.4: Instabile Trajektorie in der Umgebung der 1:1 Resonanz des kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.05$ und die relativ niedrige Feldamplitude $F = 0.0001$. Die anfängliche Versetzung des äußeren Elektrons von der z -Achse beträgt $y_1 = 0.001$; die übrigen Anfangswerte lauten $z_1 = 12.6$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$; $z_2(t = 0)$ ist so gewählt, daß die feldfreie Gesamtenergie anfangs $E = -1$ beträgt. Aufgetragen sind Ausschnitte der Trajektorie in den Zeitintervallen (a) $t = 0 \dots 9$ Feldzyklen, (b) $t = 9 \dots 20$ Feldzyklen, (c) $t = 20 \dots 35$ Feldzyklen. Aufgrund des Drehmoments, das das externe Feld auf die Konfiguration ausübt, wird die Abweichung der Konfiguration von der z -Achse im Lauf der Zeit immer größer, bis die Konfiguration schließlich nach etwa 35 Feldzyklen auf die andere Seite des Kerns kippt.

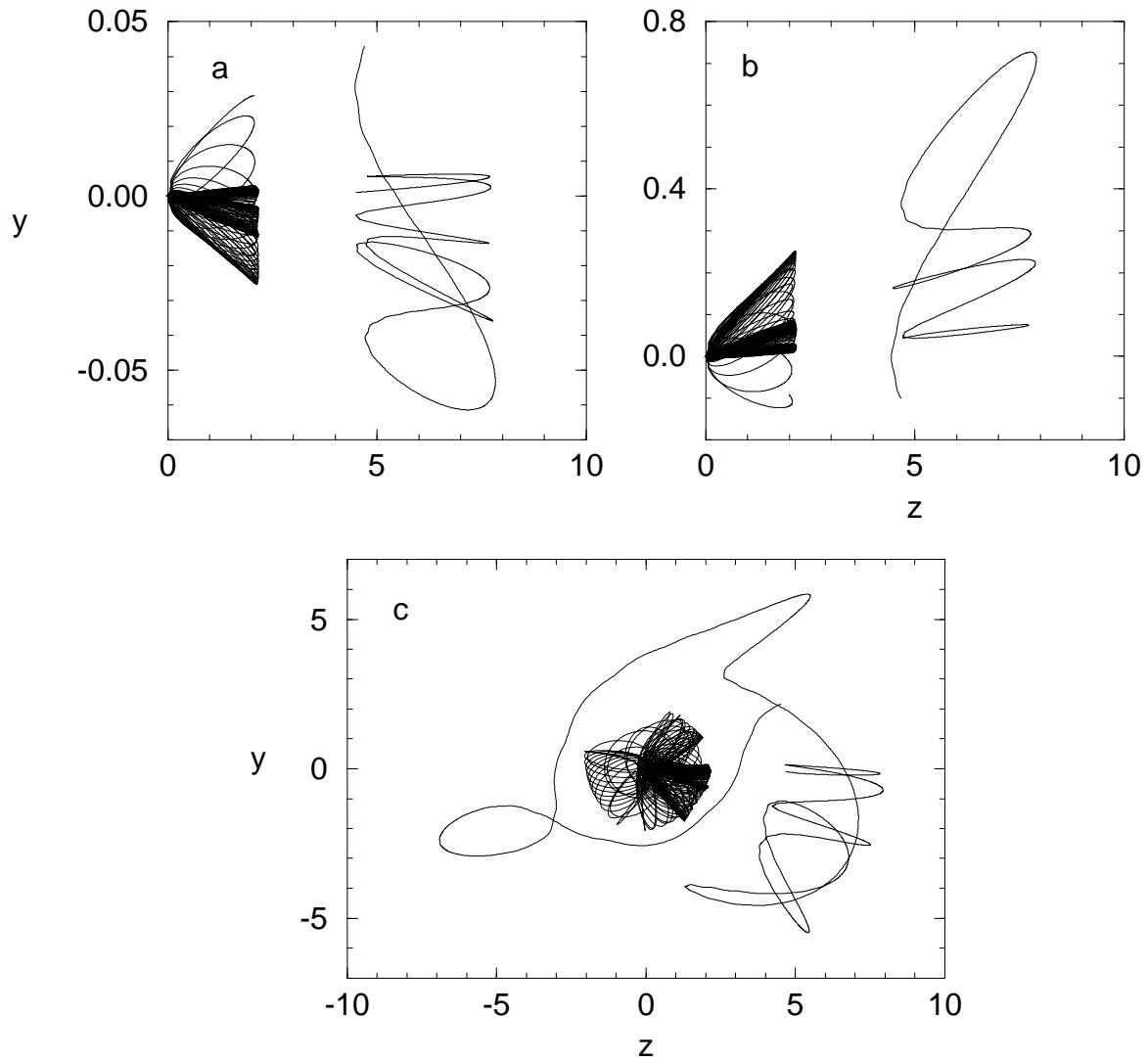


Abb. 5.5: Instabile Trajektorie in der Umgebung der 1:2 Resonanz des kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.04$ und $F = 0.001$ (s. Abb. 4.4a). Die anfängliche Versetzung des äußeren Elektrons von der z -Achse beträgt $y_1 = 0.001$; die übrigen Anfangswerte betragen $z_1 = 4.5$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$; $z_2(t = 0)$ ist so gewählt, daß die feldfreie Gesamtenergie anfangs $E = -1$ beträgt. Aufgetragen sind Ausschnitte der Trajektorie in den Zeitintervallen (a) $t = 0 \dots 3$ Feldzyklen, (b) $t = 3 \dots 5$ Feldzyklen, (c) $t = 5 \dots 9$ Feldzyklen. Im Gegensatz zur 1:1 Resonanz (bzw. zu $n:1$ Resonanzen höherer Ordnung) übt das externe Feld auf die Konfiguration ein Drehmoment aus, das diese im Zeitmittel einer Feldperiode zur z -Achse *zurücktreibt*. Wie man sieht, ist dieses rücktreibendes Drehmoment jedoch so groß, daß sich im Lauf der Zeit die Abweichung der Konfiguration von der z -Achse vergrößert. Nach etwa 9 Feldzyklen kippt die Konfiguration schließlich auf die andere Seite des Kerns.

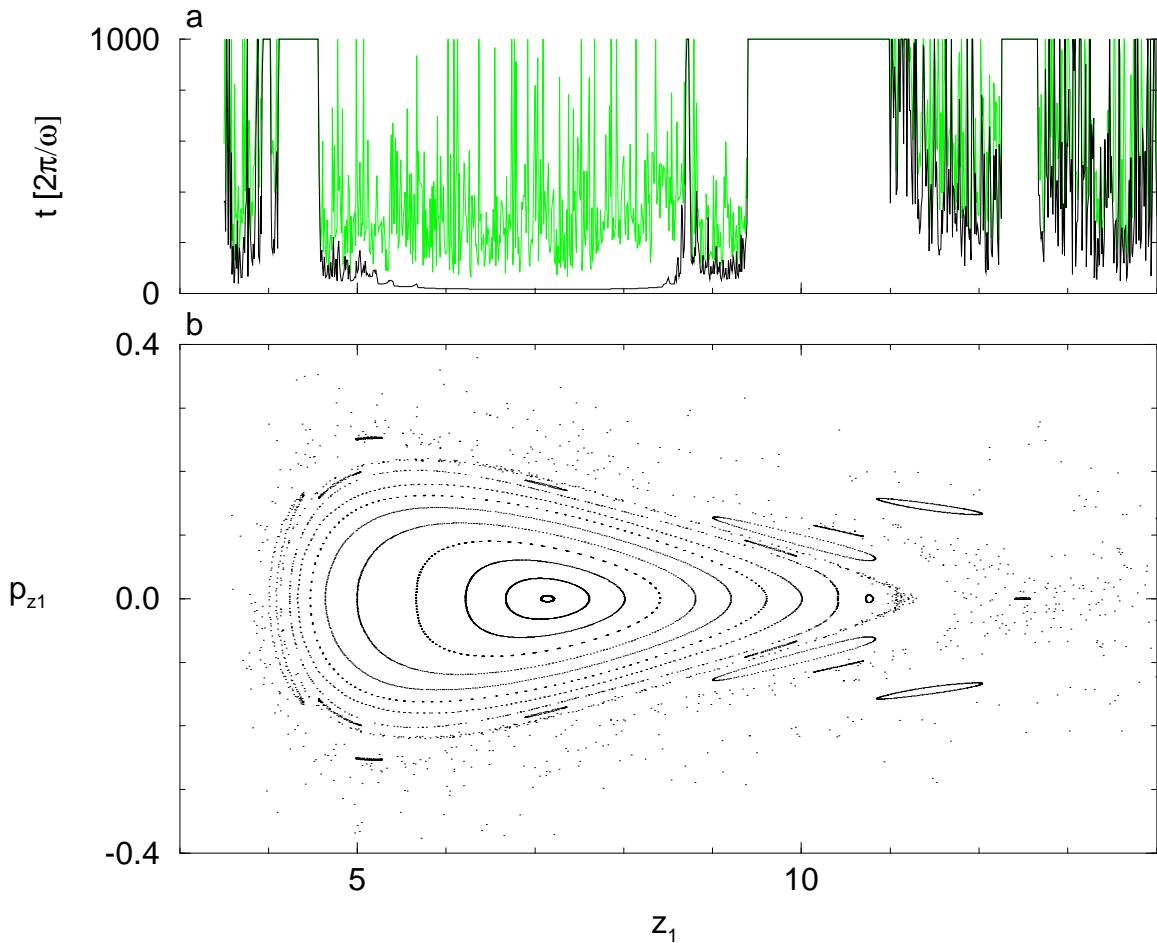


Abb. 5.6: Kipp- und Ionisationsverhalten in der Umgebung der 3:2 und der 5:3 Resonanzinseln für $\omega = 0.09 \simeq \omega_I$ und $F = 0.001$. (a) Kippzeiten (dunkle Linie) und Ionisationszeiten (helle Linie) als Funktion des Anfangswerts von z_1 , der in äquidistanten Schritten der Länge $\Delta z = 0.1$ von $z_1 = 3.5$ bis $z_1 = 20$ variiert ist ($y_1(t = 0) = 0.01$; alle übrigen Anfangswerte sind wie in Abb. 5.2). (b) Poincaré-Schnitt des entsprechenden kollinearen Phasenraums, mit den 3:2 Resonanzinseln bei $z_1 \simeq 4$, $p_{z1} = 0$ und bei $z_1 \simeq 10$, $p_{z1} \simeq \pm 0.1$, sowie den 5:3 Resonanzinseln bei $z_1 \simeq 12.5$, $p_{z1} = 0$, bei $z_1 \simeq 10.5$, $p_{z1} \simeq \pm 0.1$ und bei $z_1 \simeq 5$, $p_{z1} \simeq \pm 0.25$. Wie wir in (a) sehen, ist die Dynamik in der transversalen Umgebung dieser Inseln regulär: Sowohl entlang der 3:2 Resonanzinsel (bei $z_1 \simeq 4$) als auch entlang der 5:3 Resonanzinsel (bei $z_1 \simeq 12.5$) führt eine kleine Abweichung von der Kollinearität weder zum Kippen noch zur Ionisation der Konfiguration. Stabil bezüglich Abweichungen von der Kollinearität ist die Dynamik ebenfalls entlang Tori im Randbereich der intrinsischen Insel, die zwischen $z_1 \simeq 4.1$ und $z_1 \simeq 4.6$ sowie zwischen $z_1 \simeq 9.4$ und $z_1 \simeq 11$ die $p_{z1} = 0$ Achse in der Poincaré-Schnittebene schneiden.

Wir sehen, daß sowohl in der Umgebung der 3:2 Resonanz (deren Insel bei $z_1 \simeq 4$ die z -Achse der Poincaré-Schnittfläche schneidet) als auch in der Umgebung der 5:3 Resonanz (bei $z_1 \simeq 12.5$) die Konfiguration weder kippt noch ionisiert.

Die Regularität der nichtkollinearen Dynamik wird durch das Studium von Trajektorien bestätigt, die in der transversalen Umgebung dieser Inseln starten. Betrachten wir als Beispiel eine Trajektorie in der Umgebung der 3:2 Resonanzinseln von Abb. 5.6b. Abb. 5.7 zeigt die Zeitentwicklung der y -Komponente des Orts des äußeren Elektrons, deren Anfangswert $y_1(t=0) = 0.01$ beträgt. Wir erkennen eine reguläre Bewegung mit quasiperiodischen Oszillationen, die aus verschiedenen Oszillationsmoden zusammengesetzt sind: Neben der radialen Oszillation des äußeren Elektrons entlang der 3:2 Resonanz des kollinearen Phasenraums identifizieren wir eine *transversale* Komponente, die der in Abb. 5.8 dargestellten, auf einer Zeitskala von ca. 50 Feldzyklen stattfindenden Schwingung der Konfiguration um die z -Achse entspricht. Darüber hinaus treten auch noch langsame Schwankungen der Amplitude dieser Schwingung auf, die auf einer Zeitskala von ca. 600 Feldzyklen stattfinden.

In ähnlicher Weise verläuft die Bewegung in der Umgebung anderer transversal stabiler Resonanzinseln sowie in der Umgebung des Randbereichs der intrinsischen Insel: Die Zeitentwicklung der Trajektorie weist in diesen Gebieten ebenfalls quasiperiodische Oszillationen auf, die aus radialen und transversalen Moden zusammengesetzt sind. Der maximale Anfangswert von y_1 , für den die Konfiguration stabil bleibt, beträgt für diese Gebiete ca. $y_1(t=0) \sim 0.1 \dots 0.5$ (für $F \sim 0.0005 \dots 0.001$). Bei diesem Anfangswert oszilliert y_1 ungefähr zwischen -1 und $+1$.

Es ist zu bemerken, daß die regulären Gebiete im Phasenraum des zweidimensionalen, getriebenen Helium-Atoms von der diese Gebiete umgebenden chaotischen See prinzipiell nicht scharf abgegrenzt werden können. Da in einem $2n$ -dimensionalen Phasenraum die invarianten Tori n -dimensionalen Mannigfaltigkeiten entsprechen und damit für $n > 2$ keine topologische Separation verschiedener Phasenraumgebiete erzeugen, sind innerhalb eines hochdimensionalen, gemischt regulär-chaotischen Phasenraums Trajektorien, die in einem regulären Gebiet innerhalb dieses Phasenraums starten, stets in der Lage, die regulären Tori dieses Gebiets zu umgehen. Als Folge davon tritt in diesen Systemen „Arnold-Diffusion“ auf [78, 85], d.h. eine prinzipiell irreguläre, typischerweise auf einer sehr langen Zeitskala stattfindende Diffusion durch das reguläre Gebiet, die es der Trajektorie erlaubt, jedes Phasenraumvolumen innerhalb und außerhalb des regulären Gebiets zu erreichen. Durch diesen Diffusionsprozeß können insbesondere Trajektorien, die am Rand des regulären Gebiets starten, dieses innerhalb relativ kurzer Zeit verlassen. Eine konzeptionell scharfe Unterscheidung zwischen gebundener Bewegung innerhalb des regulären Gebiets und ungebundener, chaotischer Bewegung außerhalb davon ist damit nicht möglich (formal gilt dies auch für den fünfdimensionalen Phasenraum der kollinearen getriebenen Konfiguration; dort sorgt jedoch die Separation der Zeitskalen

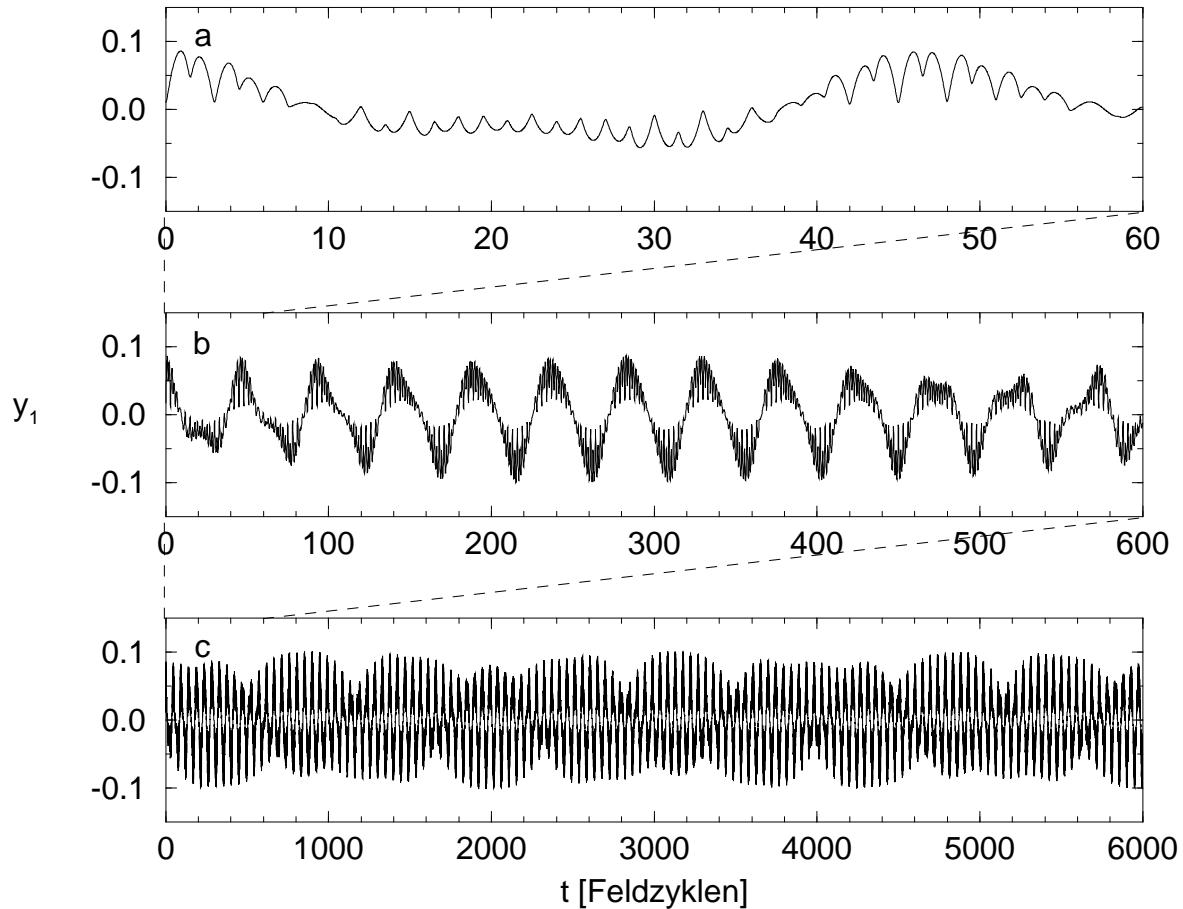


Abb. 5.7: Stabile Trajektorie in der transversalen Umgebung der 3:2 Resonanz fur $\omega = 0.09$, $F = 0.001$ (s. Abb. 5.6). Aufgetragen ist die y -Komponente des Orts des auferen Elektrons als Funktion der Zeit innerhalb von (a) $0 \dots 60$ Feldzyklen, (b) $0 \dots 600$ Feldzyklen, (c) $0 \dots 6000$ Feldzyklen. Die Anfangswerte betragen $z_1 = 3.98$, $y_1 = 0.01$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$; $z_2(t = 0)$ ist so gewahlt, da die feldfreie Gesamtenergie anfangs $E = -1$ betragt. Wie wir sehen, entspricht die Trajektorie einer quasiperiodischen Oszillation, die aus verschiedenen Moden zusammengesetzt ist; wir erkennen die radiale, der kollinearen 3:2 Resonanz entsprechende Oszillation, die auf der Zeitskala von 1.5 Feldzyklen ablauft (a), eine transversale Schwingungsmoden auf einer Zeitskala von ca. 50 Feldzyklen (b), sowie langsame Amplitudenschwankungen dieser Schwingung auf einer Zeitskala von ca. 600 Feldzyklen.

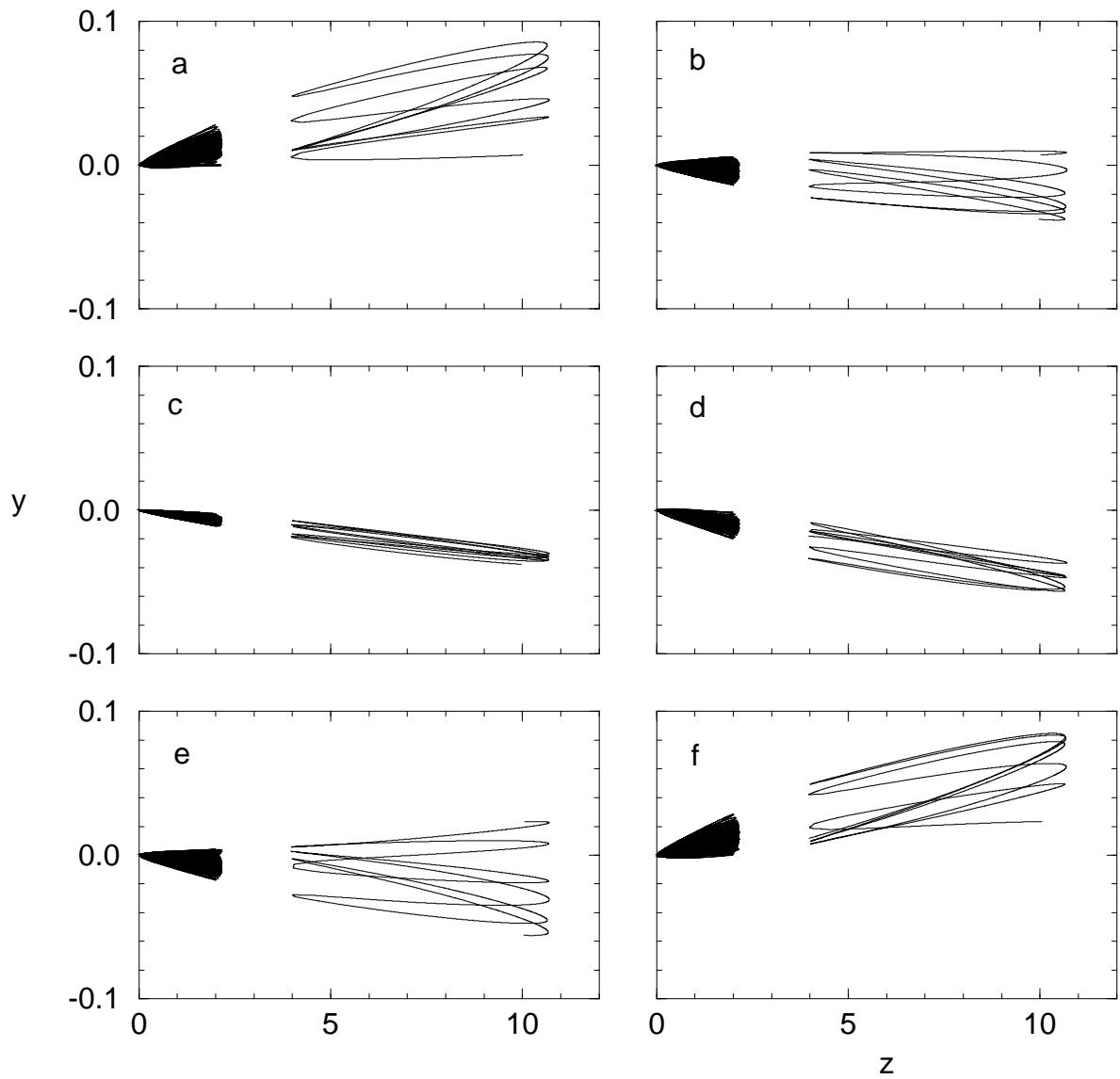


Abb. 5.8: Transversale Schwingung in der Umgebung der 3:2 Resonanzinsel für $\omega = 0.09$, $F = 0.001$ (s. Abb. 5.6). Aufgetragen sind die Trajektorien der Elektronen im Konfigurationsraum in den Zeintervallen (a) $t = 0 \dots 8$ Feldzyklen, (b) $t = 8 \dots 16$ Feldzyklen, (c) $t = 16 \dots 24$ Feldzyklen, (d) $t = 24 \dots 32$ Feldzyklen, (e) $t = 32 \dots 40$ Feldzyklen, (f) $t = 40 \dots 48$ Feldzyklen. Die Anfangsbedingung ist wie für Abb. 5.7 gewählt.

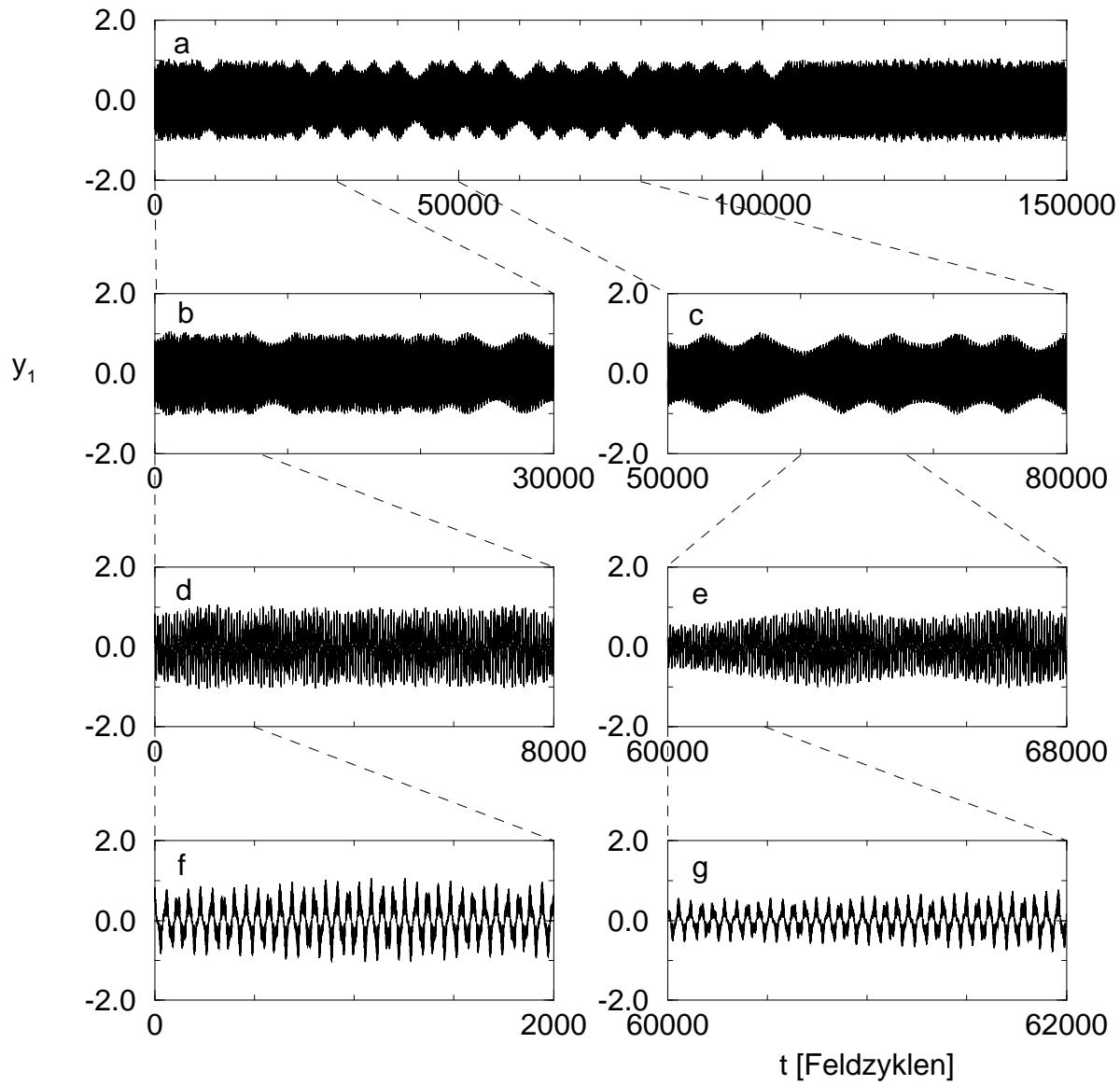


Abb. 5.9: Stabile Trajektorie in der Umgebung des Randbereichs der 3:2 Resonanzinsel für $\omega = 0.09$, $F = 0.001$. Aufgetragen ist die y -Komponente des Orts des äußeren Elektrons über einen Zeitraum von 150000 Feldzyklen (a). Die Anfangswerte betragen $z_1(t = 0) = 4$, $y_1(t = 0) = 0.1$ (alle übrigen Anfangsbedingungen sind wie in Abb. 5.7). Die Abbildungen (b – g) zeigen Ausschnitte dieser Trajektorie; in (f) und (g) ist die transversale Schwingungsmodus der Konfiguration erkennbar (vgl. Abb. 5.7b). Wir sehen, daß die Amplitude dieser Schwingung einer langsamen Drift auf Zeitskalen von $10^3 \dots 10^4$ Feldzyklen unterworfen ist.

der Bewegung der Elektronen dafür, daß Arnold-Diffusion innerhalb der regulären Gebiete extrem stark unterdrückt ist).

Tatsächlich finden wir am Rande der regulären Gebiete der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration Trajektorien, die Signaturen von Arnold-Diffusion auf sehr langen Zeitskalen aufweisen. Eine derartige Trajektorie, die am Randbereich der 3:2 Resonanzinsel startet, ist in Abb. 5.9 dargestellt. Wir erkennen Schwankungen der Amplitude der Oszillation, die auf Zeitskalen von 10^3 bis 10^4 Feldzyklen stattfinden. Im Zentrum der regulären Gebiete, insbesondere bei der in Abb. 5.7 gezeigten Trajektorie, sind jedoch keine Anzeichen für Arnold-Diffusion festgestellt worden.

5.3 Dynamik instabiler, gekippter Konfigurationen

Die Kippinstabilität der Konfiguration, also der Umstand, daß eine kleine Abweichung der Frozen-Planet-Konfiguration von der Feldpolarisationsachse im Lauf der Zeit verstärkt wird, ist ein Phänomen, das bereits vom extern getriebenen Ein-Elektron-Atom bekannt ist [84]. Ähnlich wie bei der Frozen-Planet-Konfiguration von Helium ist der klassische Phasenraum des eindimensionalen Wasserstoffatoms im linear polarisierten elektromagnetischen Feld gemischt regulär-chaotisch und enthält reguläre Inseln, die nichtlinearen Resonanzen zwischen dem treibenden Feld und der Kepler-Oszillation des Elektrons entsprechen [83, 84]. Befindet sich das System nun anfangs in der transversalen Umgebung einer solchen Resonanz, so wird das Elektron (bzw. genauer, dessen Runge-Lenz-Vektor) im Lauf der Zeit von der Feldpolarisationsachse weggetrieben und kippt schließlich auf die andere Seite des Kerns. Die Bewegung nach dem Kippen ist jedoch regulär; das Elektron gelangt auf die andere Seite des Kerns und vollführt dort, wie zum Anfangszeitpunkt, resonante Oszillationen entlang der Feldpolarisationsachse, um anschließend erneut auf die gegenüberliegende Seite des Kerns zu kippen [84, 18].

Bei der Frozen-Planet-Konfiguration des Helium-Atoms hingegen ist die Dynamik der gekippten Konfiguration für alle betrachteten Feldamplituden und Frequenzen *irregulär* und führt früher oder später zur Ionisation. Die Zeitskala, innerhalb der typischerweise Ionisation stattfindet, ist dabei stark abhängig von der Feldamplitude und der Frequenz des treibenden Feldes. Für sehr niedrige Feldamplituden bzw. für hohe Frequenzen erweist sich die gekippte Konfiguration als sehr langlebig; die Konfiguration vollführt, wie in Abb. 5.10 für $\omega = 0.05$ und $F = 0.0001$ zu sehen ist, nach dem Kippen nahezu reguläre Rotationen um den Kern, die durch das äußere Feld nur auf einer sehr langen Zeitskala gestört werden. Für hohe Feldamplituden bzw. niedrige Frequenzen hingegen ist die Dynamik der gekippten Konfiguration deutlich chaotisch und führt bereits nach wenigen Rotationen zur Ionisation (Abb. 5.11).

Bemerkenswert ist dabei, daß selbst für relativ hohe Feldamplituden die die Frozen-Planet-Konfiguration charakterisierende Winkelkorrelation zwischen den Elektronen im Verlauf der

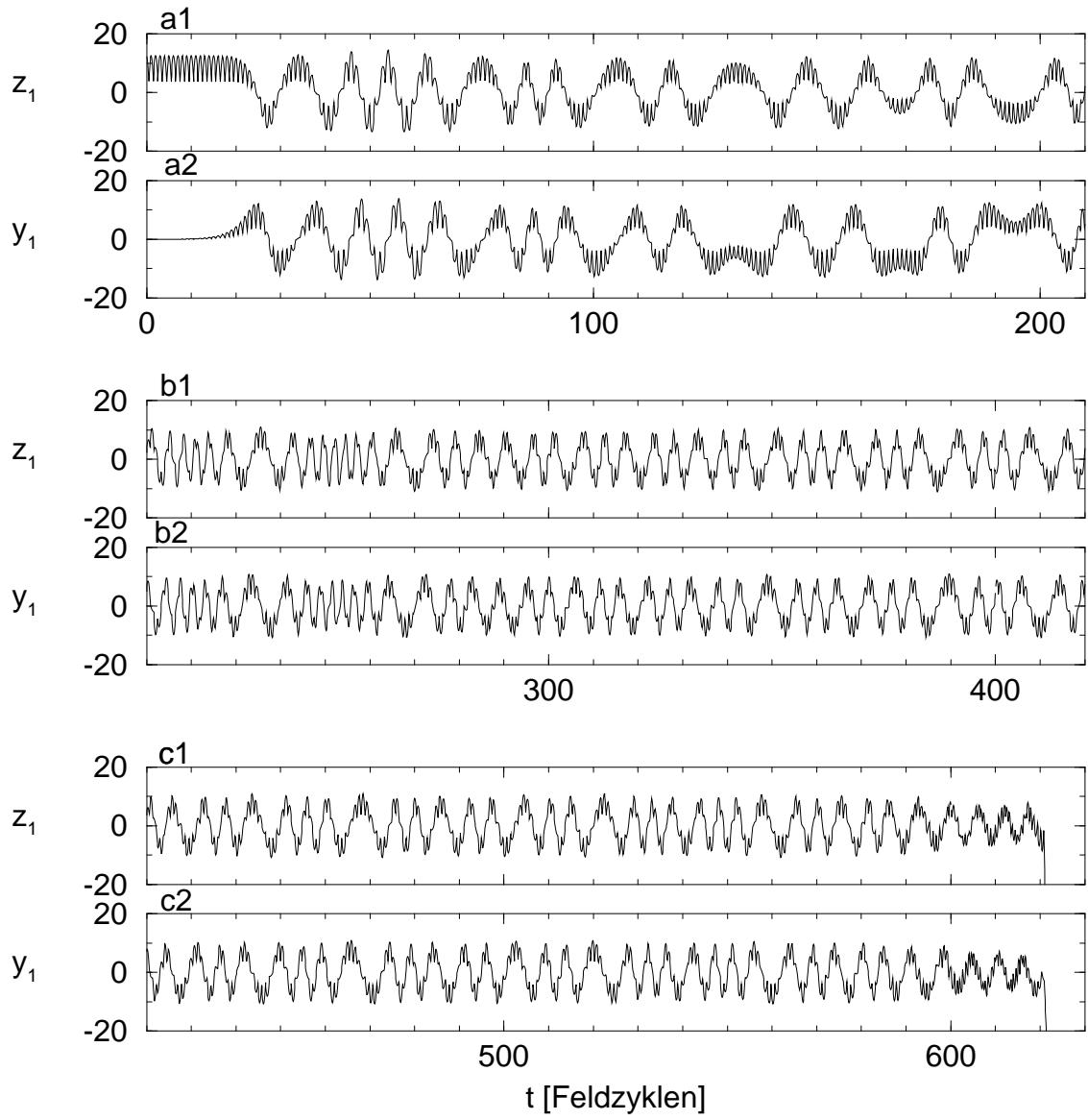


Abb. 5.10: Langlebige Trajektorie in der Umgebung der 1:1 Resonanzinsel des kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.05$ und die relativ niedrige Feldamplitude $F = 0.0001$. Aufgetragen sind die z - und die y -Komponente des äußeren Elektrons als Funktion der Zeit für (a1, a2) $t = 0 \dots 210$ Feldzyklen, (b1, b2) $t = 210 \dots 420$ Feldzyklen, (c1, c2) $t = 420 \dots 630$ Feldzyklen. Die Anfangswerte betragen $z_1 = 12.6$, $y_1 = 0.01$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$; $z_2(t = 0)$ ist so gewählt, daß die anfängliche Gesamtenergie $E = -1$ beträgt. Wir sehen, daß die Konfiguration nahezu reguläre Rotationen vollführt, die durch das externe Feld nur sehr schwach bzw. nur auf sehr langen Zeitskalen ($t \sim 10 \dots 100$ Feldzyklen) gestört werden. Nach ca. 620 Feldzyklen ionisiert die Konfiguration.

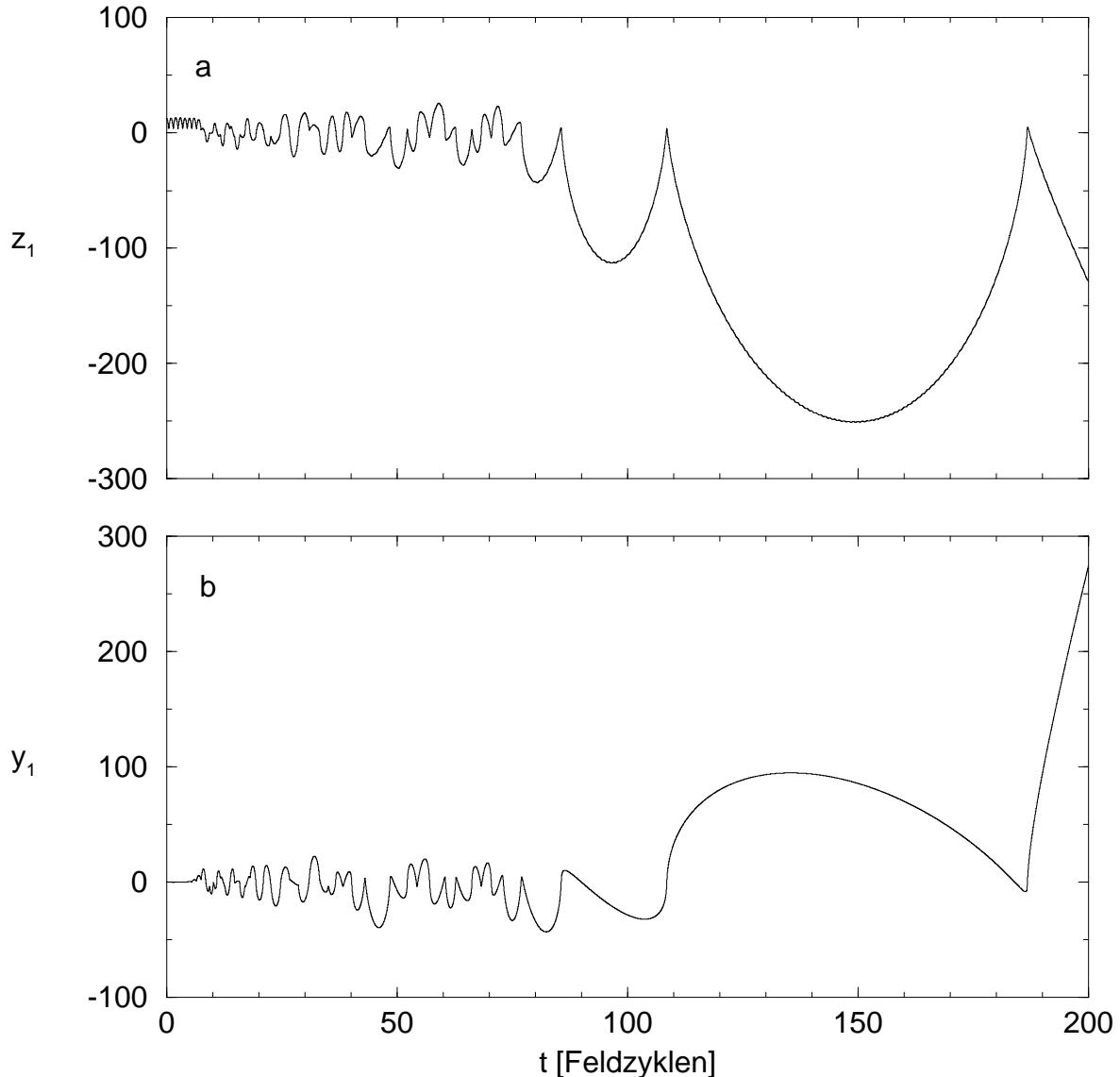


Abb. 5.11: Trajektorie in der Umgebung der 1:1 Resonanzinsel des kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.05$ und die relativ hohe Feldamplitude $F = 0.001$. Aufgetragen sind die z - und die y -Komponente des äußeren Elektrons als Funktion der Zeit. Die Anfangswerte betragen $z_1 = 12.8$, $y_1 = 0.01$ ($y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$; $E = -1$). Wir erkennen, daß die Dynamik nach dem Kippen der Konfiguration im Gegensatz zu Abb. 5.10 deutlich irregulär ist. Nach etwas mehr als 100 Feldzyklen kommt es zu einer kollisionsähnlichen Wechselwirkung zwischen den Elektronen, die bewirkt, daß das äußere Elektron auf eine sehr weit vom Kern wegführende Kepler-Bahn gerät, jedoch noch gebunden bleibt. Der eigentliche Ionisationsvorgang vollzieht sich knapp 100 Feldzyklen später, wenn das äußere Elektron zum Kerngebiet zurückkehrt und erneut mit dem inneren Elektron kollidiert.

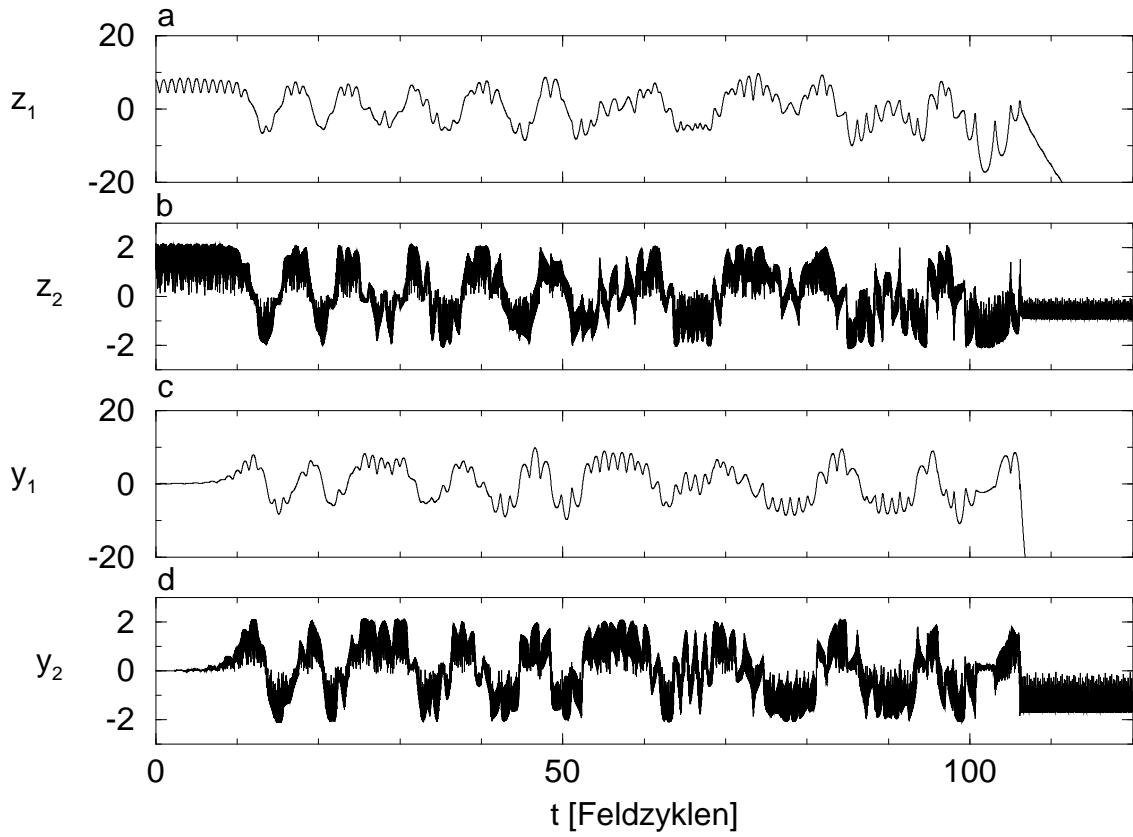


Abb. 5.12: Trajektorie in der Umgebung der 1:1 Resonanzinsel des kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.08$ und $F = 0.001$. Aufgetragen ist die Zeitentwicklung der z -Komponenten z_1 , z_2 und der y -Komponenten y_1 , y_2 des äußeren bzw. des inneren Elektrons. Die Anfangswerte betragen $z_1(t = 0) = 8$, $y_1(t = 0) = 0.01$ ($y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$; $E = -1$) (siehe Abb. 5.1). Zu beachten ist hier die ausgeprägt starke Winkelkorrelation zwischen den Elektronen: Wie wir durch Vergleich von (a) mit (b) bzw. von (c) mit (d) sehen, vollführt das innere Elektron die exzentrischen Kepler-Oszillationen stets auf der Seite des Kerns, auf der sich auch das äußere Elektron befindet. Sogar nach dem Ionisationsvorgang (nach ca. 105 Feldzyklen) bleibt diese Form der Winkelkorrelation aufrechterhalten.

Rotationen erhalten bleibt. Wie man in Abb. 5.12 sieht, vollführt das innere Elektron Keplerartige Oszillationen im wesentlichen stets auf der Seite des Kerns, auf der sich das äußere Elektron befindet. Die daraus resultierende Abschirmung des äußeren Elektrons vom Kernbereich bewirkt, daß auch für hohe Feldamplituden die Lebensdauer der gekippten Konfiguration relativ hoch ist, verglichen mit der typischen Lebensdauer einer Konfiguration, bei der sich beide Elektronen (bei gleicher Gesamtenergie) im wesentlichen auf entgegengesetzten Seiten des Kerns befinden (wie wir in Abb. 2.1c gesehen haben, beträgt die Lebensdauer einer derartigen eZe -ähnlichen Konfiguration typischerweise wenige Kepler-Zyklen).

Wie bereits in Abschnitt 5.1 bemerkt wurde, führt die Tatsache, daß die Dynamik nach dem Kippen chaotisch ist, zu einer extrem sensitiven Abhängigkeit der Ionisationszeit von

dem Anfangswert $z_1(t=0)$. Dies ist in Abb. 5.13 verdeutlicht, in der die Ionisationszeiten in der Umgebung der 1:1 Resonanzinsel für $\omega = 0.06$, $F = 0.001$ (Abb. 4.4b) in Abhängigkeit vom Anfangsort z_1 aufgetragen sind, der in äquidistanten Schritten der Länge $\Delta z = 10^{-5}$ zwischen $z_1 = 10.9$ und $z_1 = 10.91$ variiert ist (die anfängliche Abweichung von der Kollinearität beträgt $y_1 = 10^{-5}$). Wir erkennen eine fraktale Struktur, die typisch für chaotische Streuvorgänge ist [86] (in der Tat entspricht die Ionisation aus einem irregulären Gebiet des klassischen Phasenraums einem „halben“ chaotischen Streuvorgang: durch Propagation des Systems in negativer Zeitrichtung, die ebenfalls zur Ionisation führt, läßt sich die chaotische Streutrajektorie vervollständigen).

Auffällig ist in Abb. 5.13 die Existenz vereinzelter Anfangsbedingungen, bei denen die Konfiguration extrem langlebig ist, d.h. nach einer extrem langen Zeitskala ionisiert. Das Studium der diesen Anfangsbedingungen entsprechenden Trajektorien läßt erkennen, daß diese Langlebigkeit auf das Auftreten von Kollisionen bzw. kollisionsähnlichen Wechselwirkungen zwischen den Elektronen zurückzuführen ist, bei denen eines der Elektronen einen derart hohen Energieübertrag erhält, daß dessen kinetische Energie (abzüglich des feldinduzierten Anteils) knapp unterhalb derjenigen Energie liegt, die nötig wäre, um dem durch den Kern und das innere Elektron erzeugten Potential zu entkommen. In diesem Fall vollführt das äußere Elektron eine extrem weit vom Kern wegführende Kepler-Bewegung, um nach einer Zeitspanne von

$$\tau \propto |\Delta E_B|^{-3/2}, \quad (5.4)$$

wobei $|\Delta E_B|$ die effektive Bindungsenergie (5.2) dieses Elektrons bezeichnet, zum Kerngebiet zurückzukehren und erneut mit dem inneren Elektron zu kollidieren, worauf dann schließlich die Ionisation erfolgt (siehe Abb. 5.11).

Unter der Annahme, daß nach derartigen Kollisionen sämtliche Bindungsenergien des äußeren Elektrons innerhalb eines sehr kleinen Intervalls unterhalb $\Delta E_B = 0$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit auftreten (diese Annahme sollte gerechtfertigt sein, da der Energieübertrag bei einer Kollision a priori nicht davon abhängt, wie weit nach dieser Kollision die kinetische Energie des äußeren Elektrons von der zur Ionisation nötigen Energie entfernt ist), ergibt sich aus (5.4), daß die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das äußere Elektron nach der Zeitspanne τ noch nicht zum Kerngebiet zurückgekehrt ist, proportional $\tau^{-2/3}$ abnimmt. Auf diese Weise erhalten wir, daß die „Überlebenswahrscheinlichkeit“ der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration (d.h. die Wahrscheinlichkeit, daß die Konfiguration nach der Zeit t noch nicht ionisiert ist) für große Zeiten t sehr langsam, nämlich proportional $t^{-2/3}$ abfällt.

Tatsächlich finden wir eine derartige algebraische Abnahme der Überlebenswahrscheinlichkeit in der Umgebung der transversal instabilen Gebiete des kollinearen Phasenraums. In Abb. 5.14 ist als Funktion der Zeit der Anteil derjenigen in der Umgebung der 1:1 Resonanzinsel für $\omega = 0.06$, $F = 0.001$ startenden Trajektorien aufgetragen, bei denen die Konfiguration

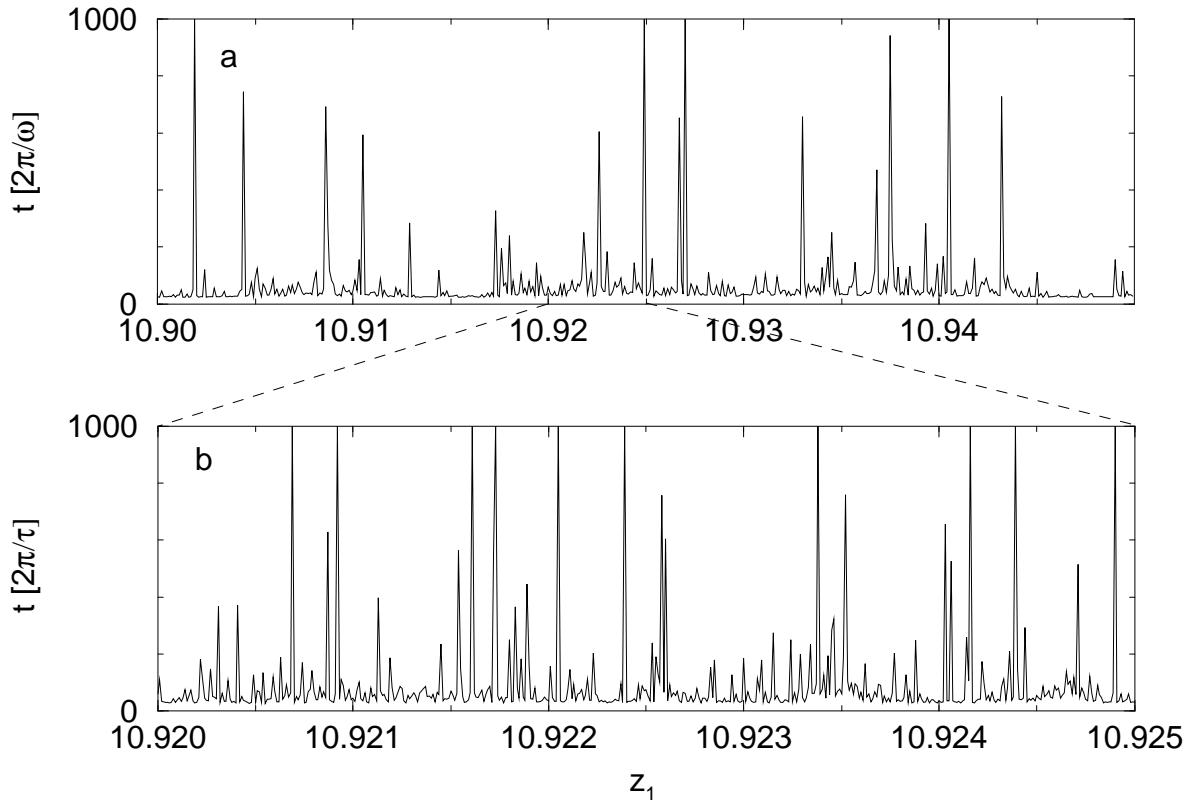


Abb. 5.13: Ionisationszeiten in der Umgebung des Zentrums der kollinearen 1:1 Resonanz für $\omega = 0.06$, $F = 0.001$. Aufgetragen sind die Ionisationszeiten von jeweils 500 Anfangsbedingungen, die äquidistant zwischen (a) $z_1 = 10.9$ und $z_1 = 10.95$ bzw. (b) $z_1 = 10.92$ und $z_1 = 10.925$ verteilt sind. Die übrigen Anfangswerte betragen $y_1 = 10^{-5}$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $E = -1$. Die Vergrößerung (b) zeigt deutlich die fraktale Abhängigkeit der Ionisationszeit vom Anfangsort $z_1(t = 0)$. Auffallend ist die Existenz vereinzelter Anfangsbedingungen, bei denen die Konfiguration extrem langlebig ist. Diese Anfangsbedingungen entsprechen Trajektorien, bei denen eines der Elektronen nach einer Kollision bzw. kollisionsähnlichen Wechselwirkung mit dem anderen Elektron auf eine extrem hochangeregte (jedoch noch gebundene) Kepler-Trajektorie befördert wird (s. Abb. 5.11) und somit erst nach sehr langer Zeit zum Kerngebiet zurückkehrt und erneut mit dem inneren Elektron wechselwirkt.

nach dieser Zeit noch nicht ionisiert ist (dabei wurden insgesamt 5000 Trajektorien berücksichtigt, deren Anfangsbedingungen äquidistant zwischen $z_1 = 10.9$ und $z_1 = 10.95$ liegen). Wir erkennen, daß der Anteil der nichtionisierten Trajektorien für große Zeiten proportional t^{-z} abnimmt. Der Zerfallsexponent beträgt dabei ca. $z \simeq 0.9$ und liegt damit in der Nähe der Vorhersage $z = 2/3$. Auch bei anderen Feldparametern bzw. in der Umgebung anderer Gebiete des kollinearen Phasenraums finden wir für große Zeiten eine algebraische Abnahme der Überlebenswahrscheinlichkeit, die durch Zerfallsexponenten in der Nähe von $z = 2/3$ gekennzeichnet ist.

Eine algebraische Abnahme der Überlebenswahrscheinlichkeit proportional $t^{-2/3}$ konnte auch für das eindimensionale Wasserstoffatom im externen elektrischen Wechselfeld gezeigt werden [87] (und ist dort ebenfalls auf das Auftreten hochangeregter Kepler-Trajektorien zurückzuführen). Andere Studien zum algebraischen Zerfall im eindimensionalen getriebenen Wasserstoffatom [88] haben jedoch gezeigt, daß in diesem System auch andere algebraische Zerfallskomponenten mit Exponenten im Bereich $z \simeq 1 \dots 2$ existieren (siehe auch [89]). Diese Zerfallskomponenten sind auf die Existenz regulärer Gebiete im gemischt regulär-chaotischen Phasenraum zurückzuführen, in deren unmittelbarer Umgebung aufgrund der Anwesenheit von *Cantori* [90] (d.h. von aufgebrochenen Tori im chaotischen Bereich des Phasenraums) der chaotische Transport stark unterdrückt ist [90, 91, 92]. Es ist daher im allgemeinen davon auszugehen, daß die Zeitentwicklung der Überlebenswahrscheinlichkeit durch eine Vielzahl unterschiedlicher Zerfallskomponenten geprägt ist, die unterschiedliche Zerfallsexponenten aufweisen und auf verschiedenen Zeitskalen bedeutsam werden (siehe auch [93]).

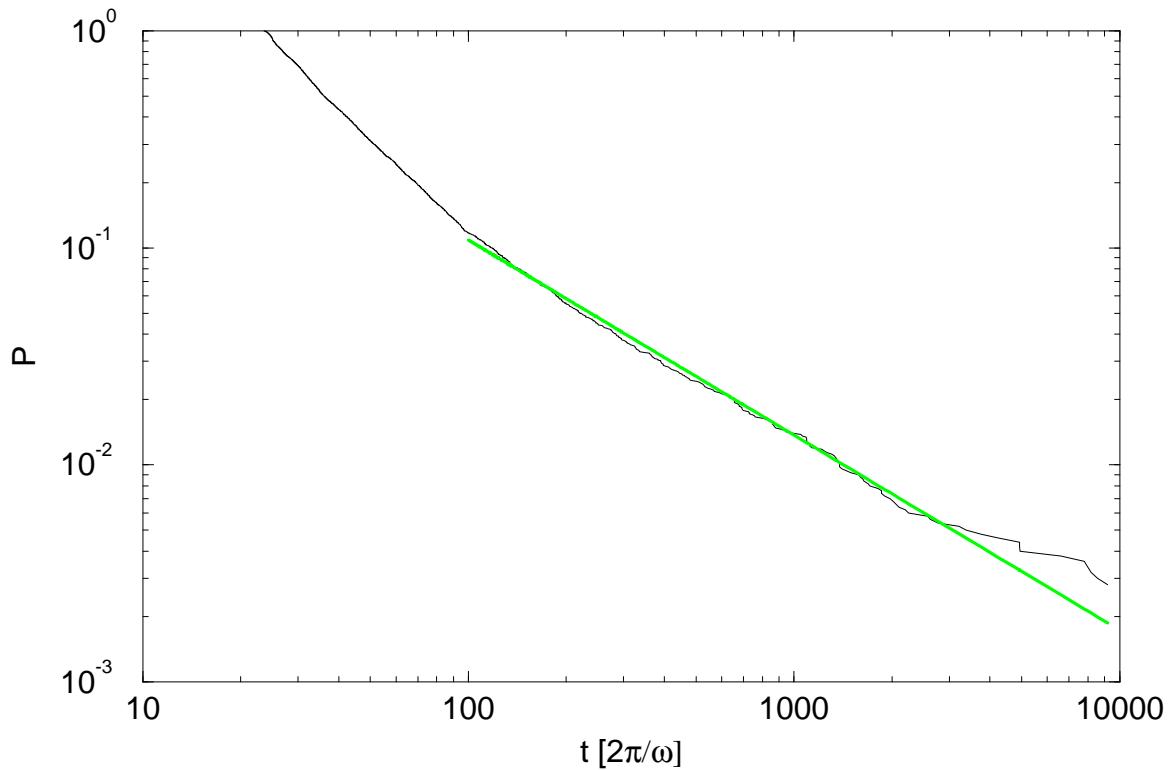


Abb. 5.14: Zeitentwicklung der Überlebenswahrscheinlichkeit der Konfiguration in der Umgebung des Zentrums der kollinearen 1:1 Resonanzinsel für $\omega = 0.06$, $F = 0.001$. Aufgetragen ist der Anteil der nach der Zeit t noch nicht ionisierten Trajektorien, die in der transversalen Umgebung der 1:1 Resonanz starten. Dabei wurden insgesamt 5000 Trajektorien berücksichtigt, deren Anfangsbedingungen äquidistant zwischen $z_1 = 10.9$ und $z_1 = 10.95$ verteilt sind (die übrigen Anfangswerte betragen $y_1 = 10^{-5}$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $E = -1$). Wir sehen, daß die zeitliche Abnahme der Überlebenswahrscheinlichkeit in guter Näherung durch eine *algebraische* Funktion $P \propto t^{-z}$ beschrieben wird. Der Zerfallsexponent liegt für große Zeiten bei $z \simeq 0.9$ (helle Linie) und liegt damit in der Nähe der Vorhersage $z = 2/3$, die sich aus der Betrachtung hochangeregter Kepler-Trajektorien der Elektronen ergibt.

Kapitel 6

Konsequenzen für das quantenmechanische System

In diesem Kapitel wird nun erörtert, welche Konsequenzen sich aus der Existenz der regulären Inseln im klassischen Phasenraum der extern getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration für das reale, quantenmechanische Helium-Atom ergeben. Speziell interessieren wir uns für das Auftreten quantenmechanischer Eigenzustände, die vollständig entlang der regulären Inseln des klassischen Phasenraums lokalisiert sind. In Abschnitt 6.1 werden zunächst die allgemeinen Eigenschaften derartiger Zustände erörtert. Anschließend wird in Abschnitt 6.2 und 6.3 unter Verwendung der semiklassischen Einstein-Brillouin-Keller (EBK) Quantisierungsvorschrift abgeschätzt, ab welcher Anregung des Systems (d.h. ab welcher Hauptquantenzahl des inneren Elektrons) quantenmechanische Zustände, die entlang der regulären Inseln der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration lokalisiert sind, im Floquet-Spektrum des getriebenen Helium-Atoms zu erwarten sind.

6.1 Quantenmechanische Entsprechung regulärer Inseln

Generell impliziert das Vorhandensein eines regulären Gebiets innerhalb eines gemischt regulär-chaotischen Phasenraums die Existenz einer Serie von Zuständen im entsprechenden Quantensystem, die im Phasenraum auf diesem regulären Gebiet lokalisiert sind. Diese Zustände ergeben sich im wesentlichen aus der semiklassischen Quantisierung der Bewegungsmoden, die die Dynamik innerhalb dieses Gebiets charakterisieren. Aufgrund der lokalen Integrität der klassischen Mechanik, die bewirkt, daß klassisch kein Transport vom regulären Gebiet in die dieses Gebiet umgebende chaotische See erfolgt (abgesehen von Arnold-Diffusion in hochdimensionalen Systemen), ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines derartigen Zustands im Phasenraum vollständig auf das reguläre Gebiet konzentriert. Eine Kopplung dieser Zustände an die chaotische See ist quantenmechanisch nur über „dynamisches Tunneln“ durch

die mehrdimensionalen regulären Phasenraumbarrieren möglich [94, 95]. In einem atomaren System entspricht eine reguläre Insel des gemischt regulär-chaotischen klassischen Phasenraums einer Serie von entweder gebundenen Zuständen (etwa bei Wasserstoff im Magnetfeld [96]) oder autoionisierenden Zuständen, die sich aufgrund dieser Tunnelkopplung durch sehr kleine Zerfallsbreiten auszeichnen. Ein Beispiel für derart langlebige Zustände sind die bereits in Kap. 2.2 erwähnten Frozen-Planet-Zustände in Helium, die sich durch eine scharf entlang des klassischen Frozen-Planet-Orbits konzentrierte Aufenthaltswahrscheinlichkeit auszeichnen (siehe Abb. 12 in [17]).

Eine im Prinzip analoge Situation liegt bei periodisch getriebenen Systemen vor. Aufgrund der expliziten Zeitabhängigkeit der externen Störung wird die quantenmechanische Dynamik dieser Systeme jedoch nicht durch stationäre Eigenzustände, sondern durch *zeitlich periodische* Quasienergie-Zustände des entsprechenden Floquet-Operators (siehe Abschnitt 8.2) beschrieben. Eine reguläre Insel des klassischen Phasenraums entspricht im getriebenen atomaren System damit einer Serie von *zeitlich periodischen*, autoionisierenden Zuständen des Floquet-Systems, deren Wellenfunktionen entlang dieser regulären Insel lokalisiert sind und der Zeitentwicklung dieser Insel im Verlauf einer Periode des treibenden Feldes folgen.

Besonders ausgeprägt ist die Zeitabhängigkeit der Wellenfunktion auf regulären Inseln, die durch nichtlineare Resonanzen zwischen dem externen Antrieb und der Dynamik des ungestörten Systems erzeugt werden [97, 98]. Ein auf einer derartigen Resonanzinsel lokalisierte Floquet-Zustand entspricht im Konfigurationsraum einem Wellenpaket, das der Oszillation der Insel entlang der resonant getriebenen Mode des ungestörten Systems folgt und aufgrund seiner periodischen Zeitabhängigkeit im Gegensatz zu „konventionellen“ Wellenpaketen, die durch kohärente Überlagerungen von Eigenfunktionen im ungestörten System gebildet werden, *keiner Dispersion* unterliegt [18]. Unter einem anderen Blickwinkel betrachtet, wird dasjenige Wellenpaket, das durch die diesem Floquet-Zustand entsprechende kohärente Überlagerung von Eigenfunktionen des ungestörten Systems erzeugt wird, durch die Anwesenheit des externen Feldes derart in Form gehalten, daß es, ohne zu dispergieren, der klassischen Oszillationsmode folgt und nur aufgrund der nichtverschwindenden Ionisationsbreite des Floquet-Zustands auf der dieser Breite entsprechenden Zeitskala zerfällt. Derartige nichtdispergierende Wellenpakete – mit Lebensdauern bis zu 10^6 Feldzyklen – wurden zuerst in Wasserstoff im linear polarisierten elektromagnetischen Feld entlang der 1:1 Resonanz des kollinearen Phasenraums gefunden [18, 19, 99], später auch in Wasserstoff im zirkular polarisierten [20, 21, 100, 101, 102] bzw. elliptisch polarisierten Feld [103] entlang analoger Resonanzinseln des klassischen Phasenraums nachgewiesen.

Die Existenz feldinduzierter Resonanzinseln im Phasenraum der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration deutet darauf hin, daß im quantenmechanischen, getriebenen Helium-Atom nichtdispergierende *Zwei-Elektronen*-Wellenpakete erzeugt werden können, also nichtdisper-

gierende Wellenpakete, deren zeitlich periodischer Charakter sich in den Koordinaten *beider* Elektronen manifestiert (wie wir bereits in Abb. 2.3 gesehen haben, manifestiert sich die langsame Oszillation um die Gleichgewichtslage, die vom externen Feld resonant getrieben wird, sowohl in der Bewegung des äußeren als auch in der des inneren Elektrons). Diese nichtdispergierenden Wellenpakete sind entlang feldinduzierter Resonanzen lokalisiert, die regulären Gebieten im Phasenraum der dreidimensionalen Bewegung entsprechen, sich also durch *Stabilität* bezüglich Abweichungen von der Kollinearität auszeichnen. Wir erwarten also für die extern getriebene Frozen-Planet-Konfiguration nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete entlang der transversal stabilen Resonanzen des kollinearen Phasenraums (etwa der 3:2 Resonanz). Entlang des transversal stabilen Bereichs der intrinsischen Insel hingegen sind Floquet-Zustände zu erwarten, die im wesentlichen stationär sind.

6.2 Quantisierung der Inseln des kollinearen Phasenraums

Von besonderem Interesse ist die Frage, ab welchen Quantenzahlen mit der Existenz von auf regulären Inseln des klassischen Phasenraums lokalisierten Eigenzuständen des quantenmechanischen Systems zu rechnen ist. Eine Abschätzung dieser Mindestquantenzahl lässt sich mittels des semiklassischen Einstein-Brillouin-Keller (EBK) Quantisierungskriteriums gewinnen [29, 31, 104]. Das EBK-Kriterium besagt, daß der zu quantisierende Torus für jede geschlossene Kurve \mathcal{C} im Phasenraum, die auf der Hyperfläche des Torus verläuft (und diesen im gleichen Umlaufsinn wie die klassische Trajektorie umrundet), die Bedingung

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{p} \, d\mathbf{q} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu}{4} \right) \quad (6.1)$$

für eine nichtnegative, ganze Zahl n erfüllen muß ($\hbar = 1$ im folgenden). Dabei bezeichnen \mathbf{q}, \mathbf{p} die kanonisch konjugierten Koordinaten und Impulse des Systems. μ steht für den „Maslov-Index“ [105], der die Anzahl der Umkehrpunkte der klassischen Bewegung entlang dieser Kurve angibt [106].

Damit gemäß 6.1 zumindest *ein* Quantenzustand auf einer regulären Insel des klassischen Phasenraums existiert, muß die Insel mindestens so groß sein, daß der äußerste Torus dieser Insel (d.h. derjenige invariante Torus, der sich durch die höchsten Wirkungen in den die reguläre Dynamik in dieser Insel charakterisierenden Bewegungsmoden auszeichnet) die Quantisierungsbedingung (6.1) für $n = 0$ erfüllt:

$$\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{p} \, d\mathbf{q} \geq \pi \frac{\mu}{2} \quad (6.2)$$

Typischerweise überprüft man diese Bedingung anhand von topologisch unabhängigen Kurven \mathcal{C}_i , von denen jede innerhalb der durch ein Paar kanonisch konjugierte Variablen q_i, p_i aufgespannten Phasenraumebene verläuft [53, 107] und innerhalb dieser Ebene den Torus

genau einmal umrundet. Das Wirkungsintegral (6.2) entlang einer solchen Kurve ist damit durch die Querschnittsfläche des Torus in der entsprechenden Phasenraumebene gegeben.

Innerhalb des Phasenraums der kollinearen getriebenen Konfiguration lässt sich eine solche semiklassische Abschätzung relativ leicht durchführen. Da die Bewegungen der Elektronen im kollinearen Konfigurationsraum approximativ separieren, ist es naheliegend, das Wirkungsintegral (6.2) für diejenigen Kurven $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2$ zu betrachten, die die reguläre Insel innerhalb der durch z_1 und p_{z1} bzw. durch z_2 und p_{z2} aufgespannten Phasenraumebenen, bei festen Werten der jeweils anderen Phasenraumvariablen sowie der Phase ωt des treibenden Feldes, genau einmal umrunden. Während das Integral entlang der Kurve C_2 , die im wesentlichen der Phasenraumtrajektorie der Kepler-Oszillation entspricht, durch die Wirkung N der Kepler-Mode gegeben ist (analog (2.5)) und somit (6.2) für $E = -1$ erfüllt, liefert das Integral entlang \mathcal{C}_1 die Querschnittsfläche A der regulären Insel innerhalb der Poincaré-Schnittebene. (Der Maslov-Index ist bei beiden Kurven $\mu = 2$.) Die kritische Bedingung für die Existenz eines Quantenzustands auf dieser regulären Insel lautet damit

$$A \geq \pi. \quad (6.3)$$

Für die regulären Inseln des kollinearen Phasenraums ist diese Bedingung bei der Gesamtenergie $E = -1$ bzw. bei der Wirkung $N = 1.5$ im allgemeinen nicht erfüllt. Anhand der Querschnittsfläche A lässt sich jedoch unmittelbar bestimmen, wie das System gemäß (3.5 – 3.10) skaliert werden muß, um (6.3) zu erfüllen: der dazu nötige Skalierungsparameter λ muß so groß sein, daß die transformierte Querschnittsfläche

$$A' = A \lambda^{1/2} \geq \pi \quad (6.4)$$

genügt. Da N unter der Skalierungstransformation in der gleichen Weise wie A transformiert wird, ergibt sich damit der Mindestwert von N , für den die Quantisierungsbedingung (6.2) erfüllt ist, zu

$$N_{\min} \simeq 1.5 \lambda_{\min}^{1/2} = 1.5 \pi/A. \quad (6.5)$$

Dieser Wert entspricht also der Mindesthauptquantenzahl des inneren Elektrons, ab der im kollinearen System Quantenzustände auf der regulären Insel des klassischen Phasenraums lokalisiert sind. Konkret erhalten wir für die kollineare 1:1 Resonanzinsel bei $\omega = 0.05$, $F = 0.001$ (Abb. 4.3d): $N_{\min} \simeq 13$.

Genau genommen muß ebenfalls das Wirkungsintegral innerhalb der Ebene betrachtet werden, die durch die Zeit (bzw. die Phase des treibenden Feldes) und deren kanonisch konjugierte Variable, die Energie, aufgespannt wird. Da die dem Torus folgende Kurve innerhalb dieser Ebene jedoch keine Umkehrpunkte aufweist (die Zeit verläuft nie „rückwärts“) ist der Maslov-Index dieser Kurve $\mu = 0$; die Bedingung (6.2) ist für diese Kurve damit stets erfüllt. Wie Breuer und Holthaus gezeigt haben [108], liefert die Quantisierung des Torus entlang dieser Kurve im wesentlichen die ω -Periodizität der Quasienergien im Floquet-Spektrum.

6.3 Quantenzustände auf Inseln im nichtkollinearen Phasenraum

Das Verfahren zur Quantisierung der kollinearen Inseln lässt sich im Prinzip auch auf die Inseln im Phasenraum der dreidimensionalen Bewegung übertragen. Ähnlich wie im kollinearen System betrachten wir Integrationspfade innerhalb der Phasenraumebenen, die durch kanonisch konjugierte Variablen der transversalen Dynamik aufgespannt sind. Das Integral (6.2) liefert damit die Querschnittsfläche der Insel innerhalb der jeweiligen Phasenraumebene. Aufgrund der Hochdimensionalität des Phasenraums lassen sich diese Querschnittsflächen jedoch nicht (bzw. nur unter hohem Aufwand [53]) anhand von Poincaré-Schnitten bestimmen.

Eine Abschätzung des Phasenraumvolumens regulärer Bewegung in den transversalen Variablen ergibt sich aus der Ausdehnung des regulären Gebiets entlang der Koordinatenachsen, die den transversalen Phasenraum aufspannen. Dazu verwenden wir als kanonisch konjugierte Variablen der transversalen Dynamik die Winkeldifferenz φ_{12} zwischen den Elektronen und die halbe Differenz l_{12} deren Drehimpulse,

$$\varphi_{12} := \varphi_1 - \varphi_2, \quad (6.6)$$

$$l_{12} := \frac{1}{2}(l_1 - l_2), \quad (6.7)$$

sowie den mittleren Winkel $\bar{\varphi}$ der Elektronen und den Gesamtdrehimpuls L ,

$$\bar{\varphi} := \frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2), \quad (6.8)$$

$$L := l_1 + l_2. \quad (6.9)$$

Dabei bezeichnet

$$\varphi_1 = \arctan(y_1/z_1) \quad (6.10)$$

den Winkel, den das äußere Elektron mit der z -Achse einschließt, φ_2 den entsprechenden Winkel des Runge-Lenz-Vektors des inneren Elektrons

$$\mathbf{A} = -\frac{1}{\sqrt{\frac{2Z}{|\mathbf{r}_2|} - \mathbf{p}_2^2}} \left(\mathbf{p}_2 \times (\mathbf{r}_2 \times \mathbf{p}_2) - Z \frac{\mathbf{r}_2}{|\mathbf{r}_2|} \right) \quad (6.11)$$

und

$$l_i = z_i p_{yi} - y_i p_{zi} \quad (6.12)$$

den Drehimpuls des Elektrons i um den Kern. Wie aus der adiabatischen Theorie der Frozen-Planet-Konfiguration von Ostrovsky und Prudov hervorgeht [59] (siehe Abschnitt 2.3), sind diese Phasenraumvariablen speziell für die Beschreibung von transversalen Schwingungen der ungestörten Frozen-Planet-Konfiguration geeignet.

Die maximale Ausdehnung der regulären Insel entlang einer der transversalen Variablen bestimmen wir anhand der Kipp- und Ionisationszeiten. Diese berechnen wir in einem Intervall

entlang der z -Achse, in dem die betrachtete reguläre Insel die $p_{z1} = 0$ Achse des kollinearen Phasenraums schneidet. Die Abweichung von der Kollinearität wird durch einen nichtverschwindenden Anfangswert einer der transversalen Variablen (6.6 – 6.9) erzeugt, wobei die Anfangswerte aller anderen transversalen Phasenraumvariablen gleich Null gesetzt sind. Anhand der Kipp- und Ionisationszeiten werden so die Maximalwerte $(\varphi_{12})_{\max}$, $(l_{12})_{\max}$, $(\bar{\varphi})_{\max}$, $(L)_{\max}$ der Variablen (6.6 – 6.9) bestimmt, für die die transversale Dynamik stabil ist.

Unter der Annahme eines ellipsenförmigen Querschnitts der regulären Insel in den von den kanonisch konjugierten Variablen aufgespannten Phasenraumebenen (diese Annahme wurde in Stichproben bestätigt), ergibt sich der Flächeninhalt dieses Querschnitts in der von φ_{12} und l_{12} aufgespannten Ebene zu

$$A_1 \simeq \pi (\varphi_{12})_{\max} (l_{12})_{\max}, \quad (6.13)$$

sowie in der von $\bar{\varphi}$ und L aufgespannten Ebene zu

$$A_2 \simeq \pi (\bar{\varphi})_{\max} (L)_{\max}. \quad (6.14)$$

Aus der Skalierungstransformation (3.5 – 3.10), die nötig ist, um die Quantisierungsbedingungen (6.4) $A_1 \geq \pi$ und $A_2 \geq \pi$ zu erfüllen, erhalten wir damit, zusätzlich zu (6.5), die Bedingungen

$$N \gtrsim \frac{1.5}{(\varphi_{12})_{\max} (l_{12})_{\max}} \quad (6.15)$$

sowie

$$N \gtrsim \frac{1.5}{(\bar{\varphi})_{\max} (L)_{\max}} \quad (6.16)$$

für das Auftreten eines Quantenzustands, der auf einem regulären Gebiet des klassischen Phasenraums der dreidimensionalen Bewegung lokalisiert ist.

Für die 3:2 Resonanzinsel bei $\omega = 0.09$, $F = 0.001$ (Abb. 5.6) liefert diese Abschätzung $N \gtrsim 750$. Es ist daher zu erwarten, daß Quantenzustände, die auf dieser Insel lokalisiert sind, ab Hauptquantenzahlen dieser Größenordnung $N \simeq 750 \sim 500 \dots 1000$ im Spektrum des getriebenen Helium-Atoms auftreten. Generell höhere Mindestquantenzahlen ergeben sich für $n:m$ Resonanzinseln höherer Ordnung (für die 5:3 Resonanzinsel bei $\omega = 0.09$, $F = 0.001$ etwa $N \gtrsim 3000$). Etwas niedrigere Mindestquantenzahlen hingegen errechnen wir für den Randbereich der intrinsischen Insel. Für $\omega = 0.09$, $F = 0.001$ erhalten wir, daß entsprechende Quantenzustände ab Quantenzahlen der Größenordnung $N \simeq 200$ zu erwarten sind.

Die hier errechneten Quantenzahlen liegen außerhalb der gegenwärtigen experimentellen Reichweite. Mit Hilfe von mehrstufigen “isolated core” Anregungsprozessen [109] lassen sich in Atomen mit zwei Valenzelektronen wie etwa Barium autoionisierende Zustände mit Quantenzahlen maximal bis zu $N \simeq 100$ selektiv bevölkern [71]. Für das Helium-Atom liegen die

höchstangeregten Zustände, die, unter Verwendung von monochromatisierter Synchrotronstrahlung, photospektroskopisch untersucht werden können, bei $N \simeq 10$ [110]. Es ist daher im allgemeinen nicht davon auszugehen, daß nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete, die auf Resonanzinseln hoher Ordnung der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration lokalisiert sind, experimentell realisiert werden können.

Bei aller Skepsis ist jedoch zu bemerken, daß die semiklassische Abschätzung anhand des EBK-Kriteriums mit erheblichen Unsicherheiten verbunden ist. Zum einen läßt sich das Phasenraumvolumen regulärer Bewegung in den transversalen Variablen nur ungefähr bestimmen. Des weiteren hat sich in anderen atomaren Systemen gezeigt, daß das EBK-Kriterium generell dazu neigt, die Mindestquantenzahl für das Auftreten eines auf einer regulären Insel des klassischen Phasenraums lokalisierten Quantenzustands zu überschätzen. So hat die von Müller, Burgdörfer und Noid durchgeführte semiklassische Quantisierung des Langmuir-Orbits von Helium ergeben, daß Quantenzustände, die auf dem regulären Gebiet des Langmuir-Orbits lokalisiert sind, erst ab Quantenzahlen der Größenordnung $N \sim 500$ zu erwarten sind [53]. Eine quantenmechanische Rechnung hat jedoch gezeigt, daß bereits bei $N \simeq 10$ quantenmechanische Zustände im Spektrum von Helium auftreten, die eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit entlang des Langmuir-Orbits aufweisen [63]. Wir erwarten daher, daß sich bereits für Quantenzahlen, die weit unterhalb $N \sim 500$ liegen, Signaturen der klassischen 3:2 Resonanz im Spektrum abzeichnen.

Kapitel 7

Stabilisierung durch ein statisches elektrisches Feld

Die Analyse der transversalen Stabilitätseigenschaften der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration hat gezeigt, daß die regulären Inseln des kollinearen Phasenraums überwiegend durch Instabilität bezüglich Abweichungen von der Kollinearität gekennzeichnet sind. Reguläre Gebiete innerhalb des Phasenraums der dreidimensionalen Bewegung existieren lediglich am Randbereich der intrinsischen Insel sowie entlang von feldinduzierten Resonanzen hoher Ordnung. Wie die Abschätzung in Kap. 6 gezeigt hat, ist die transversale Ausdehnung dieser regulären Inseln so klein, daß quantenmechanische Zustände, die auf diesen Inseln lokalisiert sind, nur für sehr hohe Quantenzahlen $N \sim 100 \dots 1000$ des inneren Elektrons erwartet werden. Dies impliziert insbesondere, daß nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete, die auf den feldinduzierten Resonanzinseln der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration lokalisiert sind, im Spektrum des extern getriebenen Helium-Atoms für experimentell realistische Anregungen nicht auftreten.

Im Hinblick auf die Erzeugung derartiger hochkorrelierter Zwei-Elektronen-Zustände stellt sich nun die Frage, ob mit Hilfe eines zusätzlichen äußeren Eingriffs die getriebene Frozen-Planet-Konfiguration bezüglich Abweichungen von der Kollinearität stabilisiert werden kann. Wie wir in Kap. 5 gesehen haben, wird der Destabilisierungsprozeß der Konfiguration in der Umgebung der regulären Inseln des kollinearen Phasenraums durch das Kippen der Konfiguration auf die andere Seite des Kerns eingeleitet. Es liegt also nahe, ein zusätzliches, *statisches* elektrisches Feld parallel zur Polarisation des oszillierenden Feldes an die Konfiguration anzulegen, das so gerichtet ist, daß es diesem Kippvorgang entgegenwirkt.

Tatsächlich ist es mit Hilfe eines derartigen statischen Feldes möglich, das Kippen der Konfiguration in der Umgebung der regulären Inseln des kollinearen Phasenraums zu verhindern und die Konfiguration auf ein Gebiet in der Umgebung der Feldpolarisationsachse zu beschränken. Für geeignete Parameter des oszillierenden und des statischen Feldes ist das

Phasenraumvolumen der auf diese Weise entstehenden regulären Inseln im Phasenraum der dreidimensionalen Bewegung so groß, daß Quantenzustände, die auf diesen Inseln lokalisiert sind, für *experimentell zugängliche* Quantenzahlen zu erwarten sind.

In diesem Kapitel wird nun dieses Stabilisierungsphänomen näher untersucht. Wir konzentrieren uns dabei auf Resonanzen niedriger Ordnung, deren Stabilisierung im Hinblick auf die Erzeugung nichtdispergierender Zwei-Elektronen-Wellenpakete interessant ist. In Abschnitt 7.1 werden zunächst wesentliche Charakteristika der Dynamik der stabilisierten Konfigurationen erläutert. Es wird gezeigt, daß zwei verschiedene Formen der Bewegung der stabilisierten Konfiguration auftreten – eine *kollineare* bzw. quasikollineare und eine *nichtkollineare* Bewegungsform – die im Phasenraum durch eine Bifurkation ineinander übergehen. Anschließend schätzen wir in Abschnitt 7.2 anhand des EBK-Quantisierungskriteriums ab, ab welchen Anregungen quantenmechanische Zustände existieren, die auf diesen Inseln lokalisiert sind.

7.1 Stabilisierung der Konfiguration gegen Kippen und Ionisation

Die Idee, ein statisches elektrisches Feld zur Stabilisierung der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration zu verwenden, geht auf die Arbeit von Leopold und Richards zurück, die die klassische Dynamik von Wasserstoff im linear polarisierten Mikrowellenfeld, dem ein zusätzliches, statisches elektrisches Feld überlagert ist, untersucht haben [111]. In dieser Arbeit konnte gezeigt werden, daß die Bewegung des Elektrons in der Umgebung der 1:1 Resonanz des kollinearen Phasenraums durch das Anlegen eines statischen elektrischen Feldes F_{st} parallel zur Polarisation des Mikrowellenfeldes F mit $0.22 F \lesssim F_{\text{st}} \lesssim F$ auf die *unmittelbare* Umgebung der Feldpolarisationsachse beschränkt werden kann. Auf diese Weise ist es möglich, nichtdispergierende Wellenpakete im extern getriebenen Wasserstoffatom zu erzeugen, die vollständig entlang des 1:1 Resonanz-Orbits des kollinearen Konfigurationsraums lokalisiert sind [112].

In der Tat läßt sich dieses Verfahren auf die getriebene Frozen-Planet-Konfiguration von Helium übertragen und ist geeignet, die Resonanzinseln des kollinearen Phasenraums, ebenso wie die intrinsische Insel, bezüglich Abweichungen von der Kollinearität zu stabilisieren. Sofern die Amplitude F des oszillierenden elektrischen Feldes nicht zu groß ist, wird durch das Anlegen eines statischen elektrischen Feldes mit geeigneter Stärke F_{st} , also durch eine Modifikation von (3.4) gemäß

$$\mathbf{F}(t) = (F \cos \omega t - F_{\text{st}}) \mathbf{e}_z, \quad (7.1)$$

die Konfiguration in der transversalen Umgebung der regulären Insel des kollinearen Phasenraums am Kippen gehindert und vollführt quasiperiodische Oszillationen, die auf den Halbraum mit $z > 0$ beschränkt bleiben (Abb. 7.1).

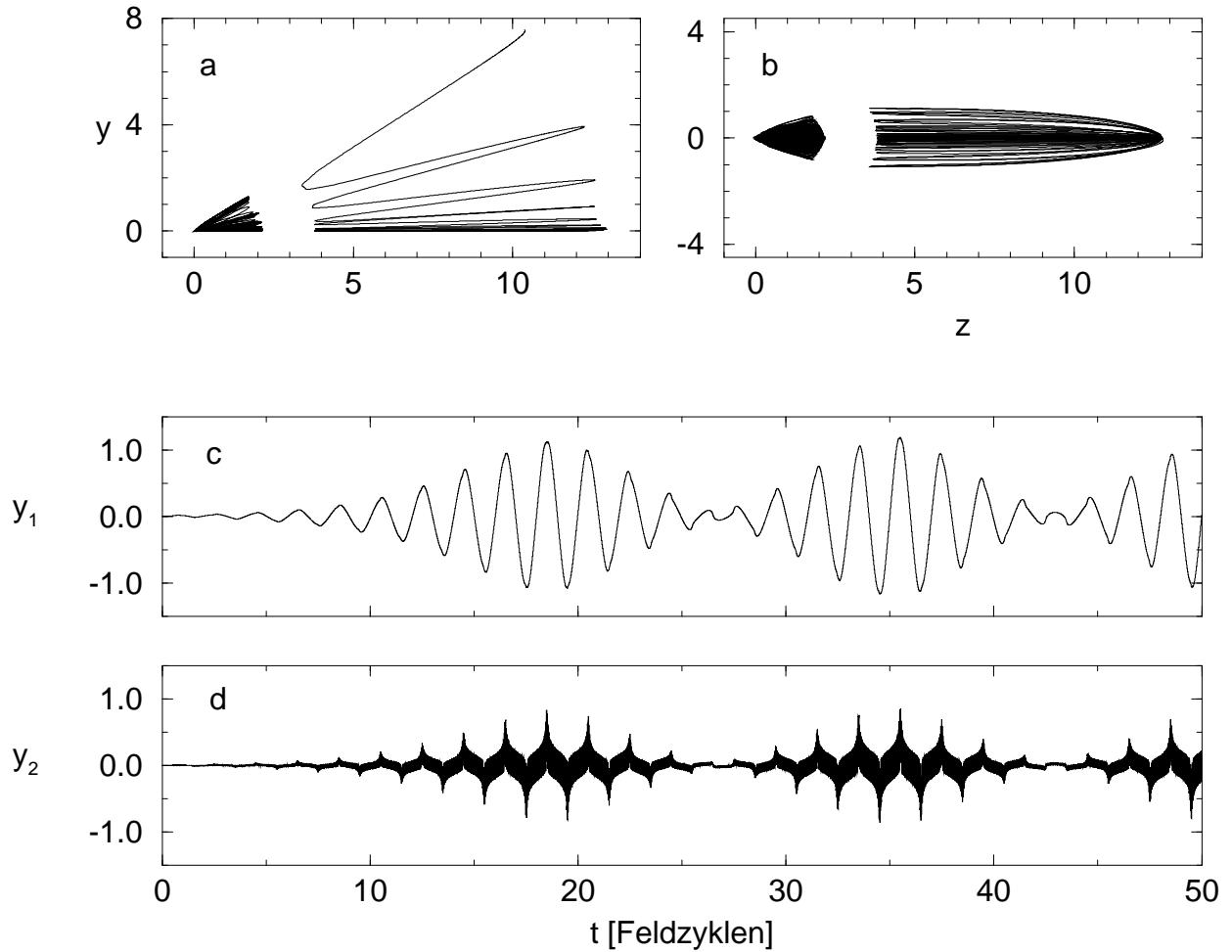


Abb. 7.1: Stabilisierung der Dynamik in der Umgebung der 1:1 Resonanz des kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.05$, $F = 0.0005$. (a) Instabile Trajektorie für $F_{st} = 0$. (b) Trajektorie der stabilisierten Konfiguration bei der statischen Feldstärke $F_{st} = 0.0001$. Die Anfangsbedingung ist in (a) und (b) durch $z_1 = 12.6$, $y_1 = 0.01$ gegeben ($y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $E = -1$). Die Zeitentwicklung dieser Trajektorie ist in den Abbildungen (c) und (d) dargestellt, in denen die y -Komponenten des Orts des äußeren und des inneren Elektrons aufgetragen sind. Wir sehen, daß die Bewegung der Konfiguration *nicht* auf die unmittelbare Umgebung der Feldpolarisationsachse beschränkt bleibt (man beachte, daß die maximale Abweichung des äußeren Elektrons von der z -Achse, $y_{1,\max} \simeq \pm 1$, wesentlich größer ist als die anfängliche Abweichung $y_1 = 0.01$), sondern um einen fundamentalen Orbit oszilliert, der nicht innerhalb des kollinearen Phasenraums liegt.

Während der Phasenraum der *kollinearen* getriebenen Konfiguration durch die Anwesenheit eines statischen Feldes, dessen Feldstärke kleiner als die Amplitude des oszillierenden Feldes F ist, nur unwesentlich geändert wird – die Resonanzstrukturen des kollinearen Phasenraums werden mit zunehmendem F_{st} lediglich etwas in Richtung des intrinsischen Gleichgewichts verschoben –, ist das *transversale* Stabilisierungsphänomen bei der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration von Helium insgesamt weitaus komplizierter als im Fall von getriebenem Wasserstoff. So zeigt es sich, daß entlang einer regulären Insel des kollinearen Phasenraums die Konfiguration nur stabilisiert werden kann, wenn die Amplitude des oszillierenden Feldes nicht zu groß ist. Für die 1:1 Resonanzinsel bei $\omega = 0.05$ etwa beträgt die maximale Feldamplitude, unterhalb der Stabilisierung möglich ist, ca. $F \simeq 0.0006$ und liegt damit nur knapp oberhalb der Feldamplitude $F \simeq 0.0005$, bei der im kollinearen Phasenraum die 1:1 Resonanz vom intrinsischen regulären Gebiet getrennt wird (siehe Abb. 4.3c). Des weiteren ist das Stabilitätsverhalten im allgemeinen *uneinheitlich* entlang einer regulären Insel des kollinearen Phasenraums: so läßt sich etwa für $\omega = 0.05$, $F = 0.0005$ bei $F_{\text{st}} = 0.0001$ (Abb. 7.1) das Zentrum der 1:1 Resonanzinsel in ein stabiles Gebiet innerhalb des Phasenraums der dreidimensionalen Bewegung eingebettet, während der Randbereich der 1:1 Resonanzinsel instabil bezüglich Abweichungen von der Kollinearität bleibt. Darüber hinaus treten bei der getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration von Helium zwei verschiedene Formen der stabilisierten Bewegung auf: eine *kollinare* bzw. quasikollinare Bewegungsform, bei der die Konfiguration auf die unmittelbare Umgebung der Feldpolarisationsachse beschränkt wird (d.h. bei der die maximale Entfernung der Konfiguration von der Feldpolarisationsachse direkt proportional zur anfänglichen Abweichung von dieser Achse ist – analog der Bewegung in der Umgebung der stabilen 3:2 Resonanz ohne statisches Feld, siehe Abb. 5.8), sowie eine *nichtkollinare* Bewegungsform, bei der die Konfiguration um einen fundamentalen periodischen Orbit oszilliert, der nicht innerhalb des kollinearen Konfigurationsraums liegt (Abb. 7.1).

Das Auftreten dieser beiden Bewegungsformen wird am Beispiel der Stabilisierung der 1:1 Resonanz bei $\omega = 0.05$ und $F = 0.0002$ (siehe Abb. 5.3b) erläutert. Bei diesen Feldparametern läßt sich die Bewegung in der der transversalen Umgebung der 1:1 Resonanz mit einem statischen Feld der Stärke $F_{\text{st}} \gtrsim 4 \cdot 10^{-5}$ stabilisieren: eine kleine Abweichung der Konfiguration von der Kollinearität führt zu quasiperiodischen Oszillationen der Konfiguration um den Orbit der kollinearen 1:1 Resonanz. Dies läßt sich anhand von stroboskopischen Bildern von Trajektorien in der Umgebung des kollinearen Phasenraums zeigen, bei denen wir die halbe Drehimpulsdifferenz l_{12} der Elektronen (6.7) gegen deren Winkeldifferenz φ_{12} (6.6) zu den Zeiten $\omega t = 0 \bmod 2\pi$ auftragen. Obwohl ein derartiges stroboskopisches Bild der Trajektorie keinen Poincaré-Schnitt des Phasenraums darstellt (pro erhaltenen Punkt im $\varphi_{12}-l_{12}$ Diagramm sind lediglich zwei der vier transversalen Phasenraumvariablen sowie näherungswise

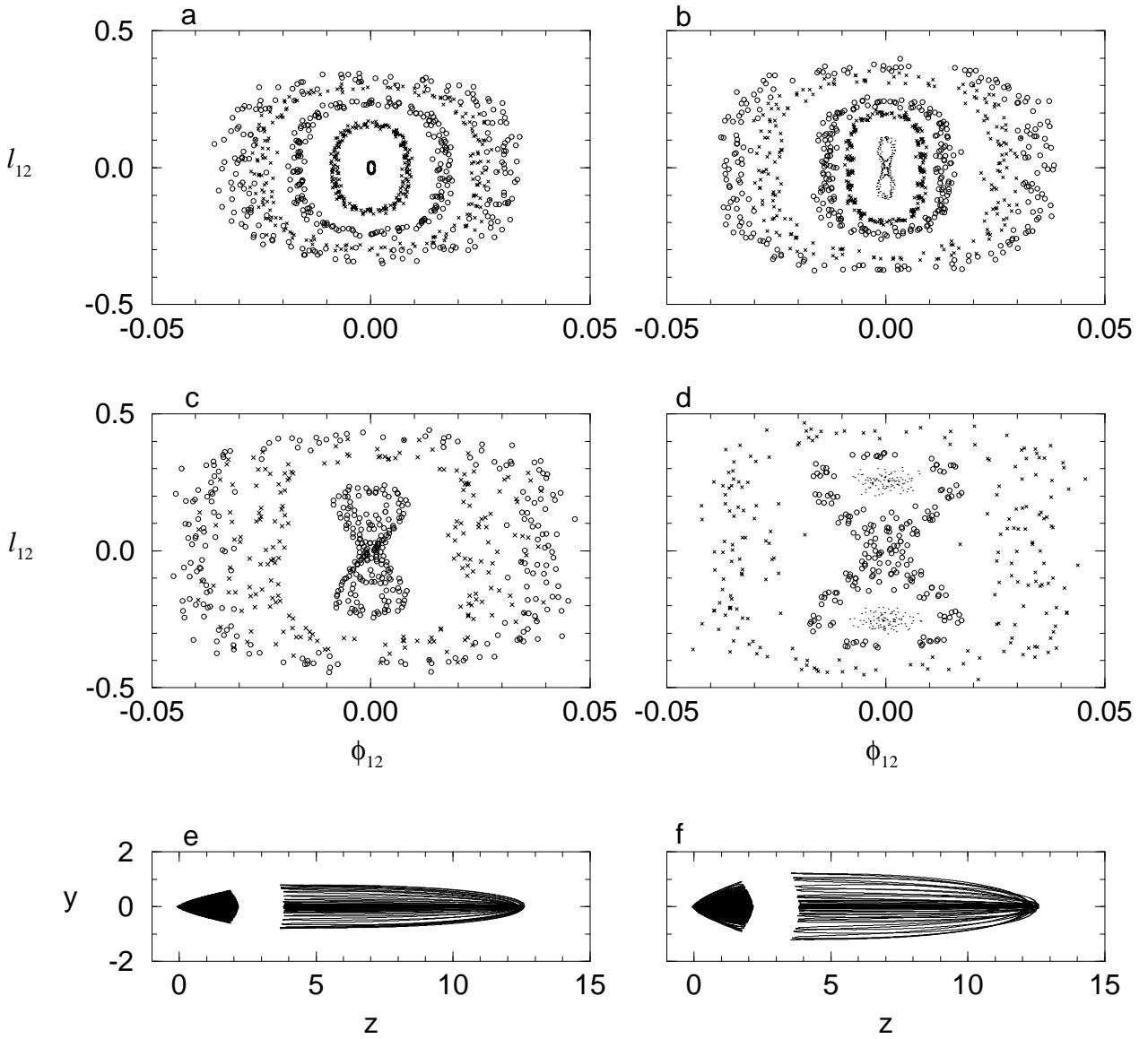


Abb. 7.2: Stroboskopische Bilder von Trajektorien der stabilisierten 1:1 Resonanz für $\omega = 0.05$, $F = 0.0002$ und (a) $F_{\text{st}} = 0.00015$, (b) $F_{\text{st}} = 0.00017$, (c) $F_{\text{st}} = 0.0002$, (d) $F_{\text{st}} = 0.00025$. Aufgetragen sind die halbe Drehimpulsdifferenz $l_{12} = \frac{1}{2}(l_1 - l_2)$ gegen die Winkeldifferenz $\varphi_{12} = \varphi_1 - \varphi_2$ der Elektronen zu den Zeiten $\omega t = 0 \bmod 2\pi$. Trajektorien zu verschiedenen Anfangsbedingungen sind durch unterschiedliche Symbole gekennzeichnet; in (b) etwa betragen die Anfangsbedingungen (von innen nach außen) $y_1 = 0.01$ (Punkte), 0.1 (Kreuze), 0.2 (Kreise), 0.3 (Kreuze), 0.4 (Kreise) ($z_1 = 12.6$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $E = -1$). Wir erkennen für $F_{\text{st}} = 0.00015$ ellipsenähnliche Strukturen, die um den kollinearen Orbit bei $\varphi_{12} = l_{12} = 0$ zentriert sind. Bei $F_{\text{st}} \simeq 0.00016$ findet eine Bifurkation im Phasenraum statt. Der kollineare Orbit ist oberhalb $F_{\text{st}} \simeq 0.00016$ in eine Separatrixstruktur eingebettet, die mit zunehmendem F_{st} größer wird. Der fundamentale Orbit der Resonanzinsel entspricht nun dem Zentrum des von der Separatrix umschlossenen Gebiets oberhalb bzw. unterhalb der $l_{12} = 0$ Achse. (e) und (f) zeigen die (durch Kreise gekennzeichneten) Separatrixtrajektorien von (c) und (d) im Konfigurationsraum ($y_1(t = 0) = 0.01$).

die kollinearen Phasenraumvariablen festgelegt) liefert es hinreichend konsistente Strukturen, die Rückschlüsse auf die transversale Phasenraumstruktur des regulären Gebiets erlauben. Für $4 \cdot 10^{-5} \lesssim F_{\text{st}} \lesssim 0.00016$ liegen die Punkte des stroboskopischen Bildes der Trajektorien entlang von ellipsenähnlichen Strukturen, die um den kollinearen periodischen Orbit der 1:1 Resonanz zentriert sind (Abb. 7.2a).

Oberhalb einer Feldstärke von $F_{\text{st}} \simeq 0.00016$ wird die Konfiguration nicht mehr auf die unmittelbare Umgebung des kollinearen Phasenraums beschränkt: die Konfiguration entfernt sich von dem Orbit der kollinearen 1:1 Resonanz, bleibt jedoch nach wie vor in ein reguläres Gebiet eingebunden, das die Bewegung des äußeren Elektrons auf den Halbraum positiver z -Werte beschränkt. Entsprechend erkennen wir in Abb. 7.2b, daß bei $F_{\text{st}} \simeq 0.00016$ im Phasenraum ein *Bifurkation* auftritt. Der kollineare Orbit stellt oberhalb $F_{\text{st}} \simeq 0.00016$ nicht mehr das Zentrum eines elliptischen Gebiets dar, sondern bildet eine dünne, in das reguläre Gebiet der stabilisierten 1:1 Resonanz eingebettete chaotische Schicht aus, die sich im stroboskopischen Bild in Form einer Separatrixstruktur abzeichnet. Der fundamentale periodische Orbit dieser Konfiguration liegt nun im Zentrum des Gebiets, das im stroboskopischen Bild von der Separatrix oberhalb bzw. unterhalb der durch $l_{12} = 0$ definierten Achse umschlossen wird; er entspricht, wie wir in Abb. 7.3 sehen, einer nichtkollinearen, resonanten Oszillation der Konfiguration, deren Periodendauer doppelt so groß ist wie die Periode des treibenden Feldes.

Mit zunehmender statischer Feldstärke F_{st} nimmt die Abweichung der Separatrix bzw. des fundamentalen periodischen Orbits von der Kollinearität immer mehr zu (Abb. 7.2c–d). Die die Separatrix umgebende Schicht regulärer Strukturen wird dabei immer dünner, bis sie schließlich bei $F_{\text{st}} \simeq 0.0003$ vollständig verschwindet. Oberhalb dieser Feldstärke ist die Dynamik in der Umgebung der kollinearen 1:1 Resonanz instabil.

In ähnlicher Weise wird durch ein statisches Feld auch die Bewegung entlang $n:1$ Resonanzen höherer Ordnung stabilisiert. Dabei zeigt es sich, daß bei Feldparametern, bei denen diese Resonanzen von der intrinsischen Insel getrennt sind, die Bewegung der stabilisierten Konfiguration in der Regel nichtkollinear ist, d.h. nicht auf die unmittelbare Umgebung der Feldpolarisationsachse beschränkt ist. Auch in der Umgebung des Zentrums der intrinsischen Insel läßt sich die Dynamik durch ein statisches Feld stabilisieren. Der maximale Wert von F , für den eine Stabilisierung möglich ist, liegt für die intrinsische Insel im allgemeinen höher als für die Resonanzinseln.

Wie bereits in Abschnitt 5.2 erwähnt wurde, läßt sich in hochdimensionalen Systemen aufgrund von Arnold-Diffusion eine reguläre Insel nicht scharf von der sie umgebenden chaotischen See abgrenzen: Da die invarianten Tori dieser Insel keine topologisch unüberwindbaren Phasenraumbarrieren darstellen, kann eine Trajektorie, die innerhalb dieser Insel startet, diese Tori umgehen und in das chaotische Gebiet des Phasenraums gelangen. Tatsächlich läßt

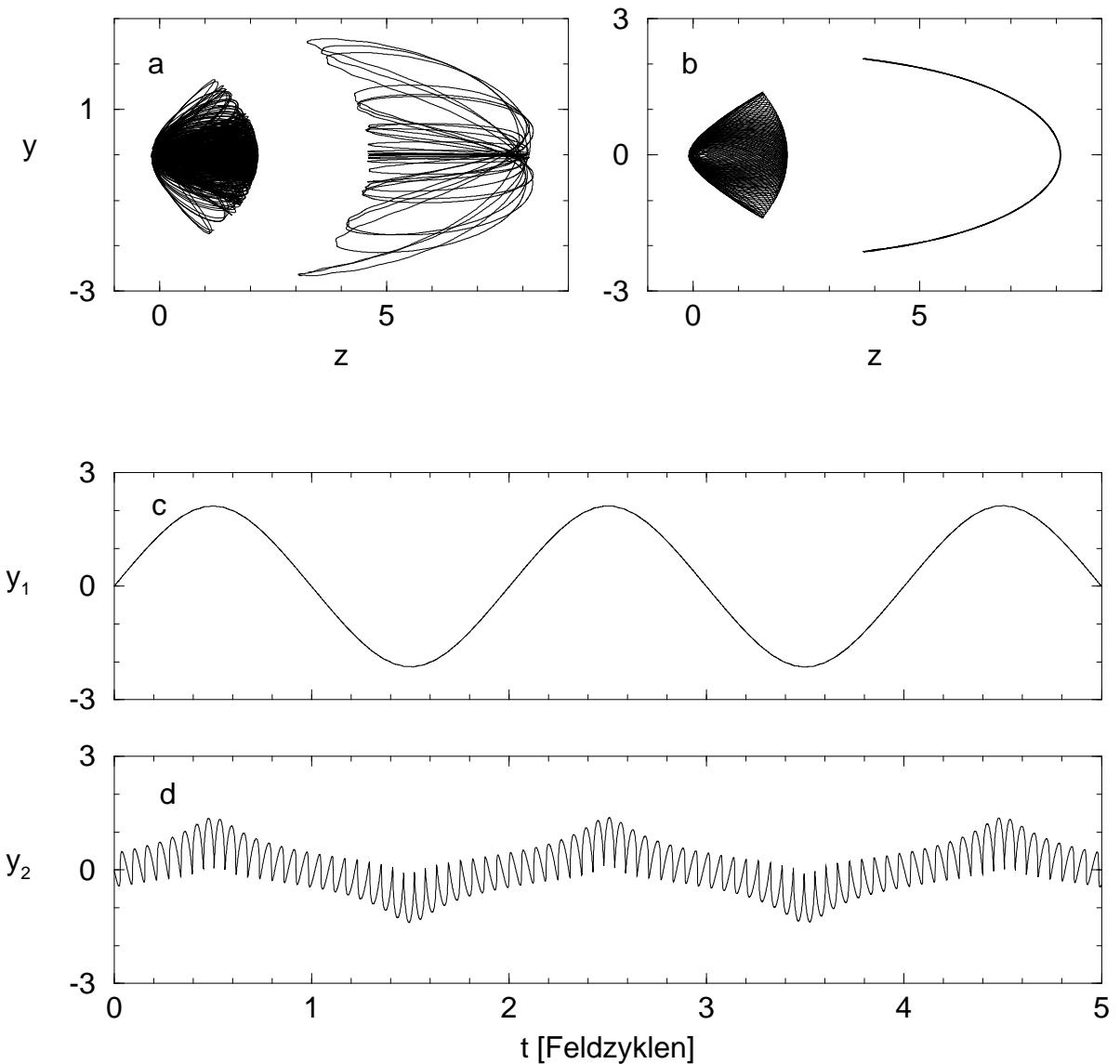


Abb. 7.3: Fundamentaler periodischer Orbit der stabilisierten 1:1 Resonanz für $\omega = 0.08$, $F = 0.001$, $F_{\text{st}} = 0.0003$ (s. Abb. 4.4d). (a) Trajektorie, die in der unmittelbaren Umgebung der z -Achse startet (mit der Anfangsbedingung $z_1 = 8$, $y_1 = 0.01$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $E = -1$). (b) Trajektorie des fundamentalen periodischen Orbits. Die Anfangswerte betragen $z_1 = 8.092$, $p_{y1} = 0.07871$, $y_1 = y_2 = 0$, $p_{z1} = p_{z2} = 0$; z_2 und p_{y2} sind so gewählt, daß die Gesamtenergie $E = -1$ und der Gesamtdrehimpuls $L = 0.04704$ beträgt (diese Anfangswerte wurden mit Hilfe eines Minimierungsverfahrens gefunden). Die Bewegung der Elektronen im fundamentalen Orbit ist in (c) und (d) aufgetragen. Wir sehen, daß sowohl das äußere (c) als auch das innere Elektron (d) periodische (bzw. quasiperiodische) Oszillationen vollführt, deren Periodendauer doppelt so groß ist wie die Periode der kollinearen 1:1 Resonanz.

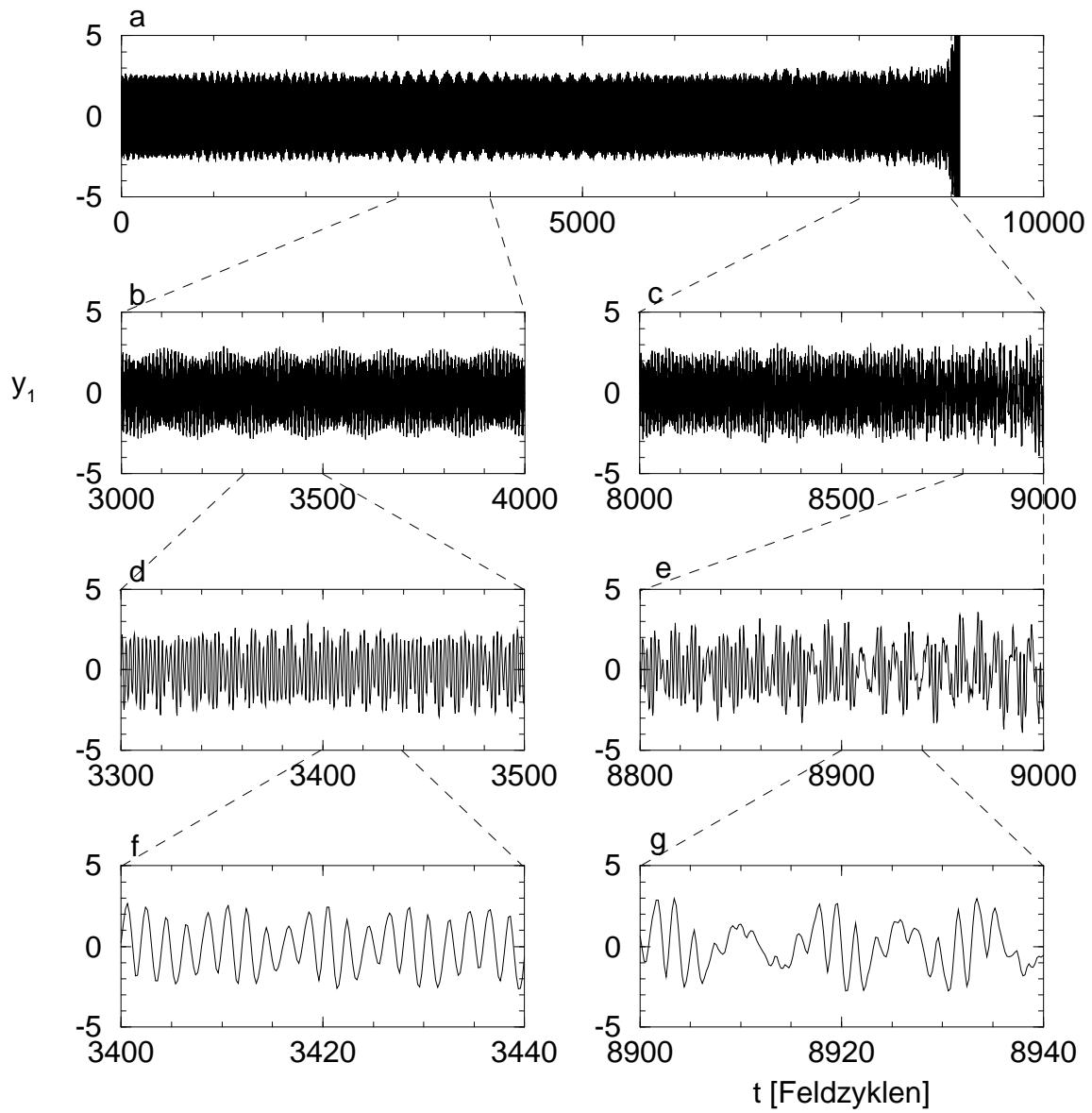


Abb. 7.4: Langfristig instabile Trajektorie, die innerhalb des regulären Gebiets der stabilisierten 1:1 Resonanz für $\omega = 0.08$, $F = 0.001$, $F_{st} = 0.0003$ startet. Aufgetragen ist in (a) die Zeitentwicklung der y -Komponente des äußeren Elektrons über einen Zeitraum von 10000 Feldzyklen; (b–g) zeigen Ausschnitte von (a). Die Anfangswerte betragen $z_1 = 8.1$, $p_{y1} = 0.02$, $y_1 = y_2 = 0$, $p_{z1} = p_{z2} = 0$; p_{y2} und z_2 sind so gewählt, daß die Gesamtenergie $E = -1$ und der Gesamtdrehimpuls $L = 0.0125$ betragen (im Phasenraum liegt der Anfangspunkt damit zwischen dem kollinearen und dem fundamentalen Orbit der stabilisierten 1:1 Resonanz, wobei die Entfernung zum fundamentalen Orbit etwa dreimal so groß ist wie die zum kollinearen Orbit). Wir erkennen langfristige, auf Arnold-Diffusion hinweisende Schwankungen der Amplitude der transversalen Oszillation auf Zeitskalen von ca. 100 Feldzyklen (vgl. Abb. 5.9). Nach ca. 9000 Feldzyklen wird die Dynamik instabil (c,e,g); die Konfiguration verläßt das reguläre Gebiet und ionisiert.

sich diese Auswirkung der Hochdimensionalität des Phasenraums bei Konfigurationen, die mit einem statischen Feld in Form einer nichtkollinearen Bewegung stabilisiert sind, deutlich bemerken. So finden wir insbesondere in der Nähe der Separatrix, entlang der die Dynamik generell durch Irregularität gekennzeichnet ist, Trajektorien, die das Gebiet gebundener Bewegung nach einer sehr langen aber endlichen Zeitspanne verlassen und zur Ionisation führen. Ein Beispiel für eine solche Trajektorie ist in Abb. 7.4 dargestellt. Wir sehen, daß die Trajektorie langfristigen, auf Arnold-Diffusion hinweisenden Schwankungen in der Amplitude der transversalen Schwingung unterworfen ist und schließlich, nach etwa 10^4 Feldzyklen, instabil wird und ionisiert.

7.2 Konsequenzen für das quantenmechanische System

Gemäß der in Abschnitt 6.1 angestellten Überlegungen entsprechen die regulären Inseln der stabilisierten Konfiguration im quantenmechanischen, getriebenen Helium-Atom langlebigen Zuständen, die im klassischen Phasenraum entlang dieser Inseln lokalisiert sind. Während Quantenzustände, die entlang der intrinsischen Insel lokalisiert sind, im wesentlichen statio-när sind, sind entlang der stabilisierten Resonanzinseln nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete zu erwarten. Um die Mindestquantenzahl N abzuschätzen, ab der derartige Zustände im Spektrum des getriebenen Helium-Atoms auftreten, gehen wir wie in Kap. 6 vor. Wir bestimmen zunächst die maximale Ausdehnung der regulären Insel entlang der Phasenraumvariablen der transversalen Dynamik und schätzen daraus, unter Annahme eines ellipsenförmigen Querschnitts, die Querschnittsflächen der Insel innerhalb der von kanonisch konjugierten Phasenraumvariablen aufgespannten Ebenen ab. Daraus ergibt sich die gesuchte Mindestquantenzahl durch die Bedingungen (6.15) und (6.16).

Für die stabilisierte 1:1 Resonanz liegen die Mindestquantenzahlen, ab denen Quantenzustände auf der klassischen Insel lokalisiert sind, außerhalb der experimentellen Reichweite. Konkret erhalten wir für $\omega = 0.05$, $F = 0.0005$, $F_{\text{st}} = 0.0001$ (Abb. 7.1): $N_{\text{min}} \simeq 750$. Vergleichbare bzw. höhere Mindestquantenzahlen erhalten wir für andere Feldparameter, bei denen die 1:1 Resonanz im kollinearen Phasenraum von der intrinsischen Insel getrennt ist.

Günstigere Bedingungen für die Erzeugung nichtdispergierender Zwei-Elektronen-Wellen-pakete liegen bei Resonanzen höherer Ordnung vor. So erhalten wir für $\omega = 0.15$, $F = 0.002$ bei einem statischen Feld von $F_{\text{st}} = 0.0001$ (Abb. 7.5) eine Mindestquantenzahl von $N_{\text{min}} \simeq 60 \sim 50 \dots 100$ für die Existenz eines Quantenzustands, der auf einer der 2:1 Resonanzinseln lokalisiert ist. Diese Quantenzahl liegt bereits im Bereich experimentell zugänglicher Anre-gungen in Zwei-Elektronen-Atomen wie Barium [71]. Auch für die 3:1 Resonanz, etwa bei $\omega = 0.2$, $F = 0.002$, $F_{\text{st}} = 0.0002$, erhalten wir Mindestquantenzahlen der Größenordnung $N_{\text{min}} \sim 50 \dots 100$ für die Existenz eines entsprechenden Quantenzustands. Für die intrinsische Insel finden wir, bei gleichen Feldparametern, typischerweise niedrigere Mindestquantenzah-

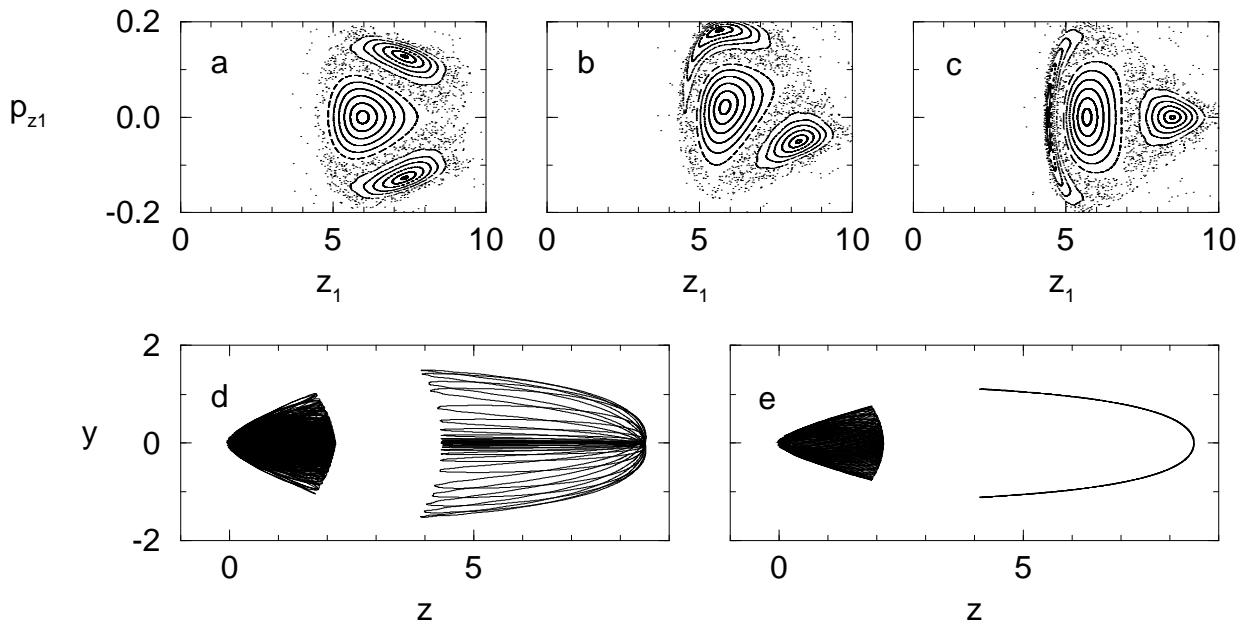


Abb. 7.5: Stabilisierte 2:1 Resonanz für $\omega = 0.1$, $F = 0.0015$, $F_{\text{st}} = 0.0001$. (a–c) Poincaré-Schnitt des kollinearen Phasenraums für $\omega t = 0$ (a), $\omega t = \pi/2$ (b), $\omega t = \pi$ (c). (d) Trajektorie, die in der Umgebung der z -Achse startet (mit der Anfangsbedingung $z_1 = 8.5$, $y_1 = 0.01$, $y_2 = 0$, $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 = 0$, $E = -1$). (e) Fundamentalster periodischer Orbit der stabilisierten 2:1 Resonanz (mit der Anfangsbedingung $z_1 = 8.499$, $p_{y1} = 0.03767$, $L = 0.001961$, $y_1 = y_2 = 0$, $p_{z1} = p_{z2} = 0$, $E = -1$). Bei diesen Feldparametern ist die transversale Ausdehnung der stabilisierten 2:1 Resonanzinsel im Phasenraum der dreidimensionalen Bewegung so groß, daß Quantenzustände auf dieser Insel für Quantenzahlen der Größenordnung $N \sim 50 \dots 100$ erwartet werden.

len als für die Resonanzinseln. Bei $\omega = 0.15$, $F = 0.002$, $F_{\text{st}} = 0.0001$ etwa (Abb. 7.5) sind stationäre Quantenzustände auf der intrinsischen Insel ab $N_{\text{min}} \sim 20 \dots 50$ zu erwarten.

Insgesamt läßt sich feststellen, daß sowohl für die intrinsische Insel als auch für feldinduzierte Resonanzinseln (nämlich die 2:1 und die 3:1 Resonanzinseln) bei geeignet gewählten Feldparametern ω , F , F_{st} quantenmechanische Zustände, die vollständig auf diesen Inseln lokalisiert sind, für experimentell zugängliche Quantenzahlen existieren sollten. Insbesondere erwarten wir, daß nichtdispersierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete, die entlang der 2:1 und der 3:1 Resonanzinseln lokalisiert sind, ab Quantenzahlen der Größenordnung $N \sim 50 \dots 100$ im Spektrum des getriebenen Helium-Atoms auftreten. Bei einer Quantenzahl von $N = 50$ betragen die Laborwerte der zur Erzeugung dieser Resonanzinseln gewählten Feldparameter, etwa $\omega = 0.15$, $F = 0.002$, $F_{\text{st}} = 0.0001$ bei der 2:1 Resonanz, gemäß den Skalierungsgesetzen (3.5 – 3.10) ungefähr

$$\omega/(2\pi) \simeq 30 \text{ GHz}, \quad (7.2)$$

$$F \simeq 8 \text{ V/cm}, \quad (7.3)$$

$$F_{\text{st}} \simeq 0.4 \text{ V/cm} \quad (7.4)$$

und liegen damit in der Größenordnung jener Feldparameter, die in Mikrowellen-Ionisationsexperimenten in Ein-Elektron-Atomen typischerweise verwendet werden [77]. Eine experimentelle Realisierung von nichtdispergierenden Zwei-Elektronen-Wellenpaketen im Mikrowellengetriebenen Helium-Atom ist damit prinzipiell möglich.

Wie schon in Abschnitt 6.3 ist anzumerken, daß die Abschätzung anhand des EBK-Kriteriums mit erheblichen Unsicherheiten verbunden ist und insbesondere dazu tendiert, die Mindestquantenzahl, ab der Quantenzustände auf regulären Inseln des klassischen Phasenraums lokalisiert sind, zu überschätzen [53, 63]. Es ist daher davon auszugehen, daß $N \sim 50 \dots 100$ eine eher pessimistische Abschätzung für das Auftreten nichtdispergierender Zwei-Elektronen-Wellenpakete darstellt. Zu erwarten ist, daß bereits für niedrigere Quantenzahlen Quantenzustände im Spektrum des getriebenen Helium-Atoms auftreten, die auf den feldinduzierten Resonanzinseln der stabilisierten Konfiguration lokalisiert sind.

Teil II

Quantenmechanik des kollinearen, getriebenen Helium-Atoms

Kapitel 8

Formulierung und numerische Lösung des Eigenwertproblems

In bezug auf konkrete quantitative Eigenschaften der Zustände, die mit regulären Inseln des klassischen Phasenraums assoziiert sind, lässt die klassische Analyse einige Fragen offen. So lässt sich zwar anhand des EBK-Quantisierungskriteriums die Größenordnung der Anregung bzw. Quantenzahl abschätzen, ab der diese Zustände im quantenmechanischen Spektrum auftreten. Keine Informationen hingegen liegen zur *Ionisationsrate* bzw. Lebensdauer dieser Zustände vor (die insbesondere zur Charakterisierung nichtdispergierender Wellenpaketete wichtig ist). Diese Lebensdauer ist einer klassischen Analyse des Systems generell nicht zugänglich, da auf den regulären Inseln, auf denen diese Zustände lokalisiert sind, die quantenmechanische Ionisation nur über dynamisches Tunneln (also durch einen klassisch verbotenen Prozeß) erfolgt. Um also quantitativ zu ermitteln, ab welcher Quantenzahl hochkorrelierte Zwei-Elektronen-Wellenpaketete im getriebenen System existieren, die der Oszillation der klassischen Insel auf einer hinreichend langen Zeitskala ohne Dispersion folgen, ist daher in jedem Fall eine exakte quantenmechanische Rechnung erforderlich. Derartige quantenmechanische Rechnungen sind in dem uns interessierenden Anregungsbereich beim gegenwärtigen Stand der numerischen Technik jedoch nicht möglich. Konkret lassen sich im ungestörten Helium-Atom *ab initio* Quantenrechnungen derzeit bis zur Hauptquantenzahl $N \simeq 10$ durchführen [113].

Um einen Einblick in die quantenmechanische Entsprechung der regulären Inseln des klassischen Phasenraums zu gewinnen, wird in den nun folgenden Kapiteln die Quantendynamik des *eindimensionalen*, der kollinearen Frozen-Planet-Konfiguration entsprechenden Helium-Atoms unter externem Antrieb untersucht. Dabei interessieren wir uns für das Auftreten von Quantenzuständen, die mit regulären Inseln des klassischen Phasenraums der kollinearen Konfiguration assoziiert sind. Zu untersuchen ist, wie die charakteristischen Eigenschaften dieser Zustände, also deren Lokalisierung im klassischen Phasenraum, deren Lebensdauern,

sowie deren Zusammensetzung aus Eigenzuständen des ungestörten Systems, durch die gemischt regulär-chaotische Struktur des klassischen Phasenraums beeinflußt werden bzw. wie sich diese Eigenschaften mit zunehmender Anregung des Systems bzw. abnehmender Größe des effektiven Wirkungsquantums verhalten.

Neben einem tiefgehenden Einblick in die Quantenmechanik nichtdispergierender Zweielektronen-Wellenpakete liefert diese eindimensionale Rechnung auch konkrete Informationen über die entsprechenden Quantenzustände des *dreidimensionalen* Systems. Wie wir in Kap. 7 gesehen haben, wird durch das statische Feld die Konfiguration auf die Umgebung der Feldpolarisationsachse beschränkt. Die durch das statische Feld stabilisierten Resonanzen entsprechen damit *quasi kollinearen* Quantenzuständen, deren Wahrscheinlichkeitsdichte auf die unmittelbare Umgebung des kollinearen Phasenraums konzentriert ist. Folglich sollten wesentliche Eigenschaften dieser Zustände, insbesondere deren Lokalisierung auf Strukturen des kollinearen Phasenraums, durch eine eindimensionale Rechnung korrekt reproduziert werden.

In diesem Kapitel werden zunächst formale Aspekte zur numerischen Lösung des eindimensionalen Quantensystems beschrieben. Wir führen in Abschnitt 8.1 die Koordinaten ein, die sich für die numerische Behandlung des Systems eignen. Die Floquet-Theorie, mit der das periodisch getriebene System in ein zeitunabhängiges Eigenwertproblem transformiert wird, wird in Abschnitt 8.2 beschrieben. Um im Floquet-Spektrum die autoionisierenden Resonanzen vom Kontinuum zu isolieren, wenden wir die Methode der komplexen Skalierung an, deren wesentliche Eigenschaften in Abschnitt 8.3 dargelegt werden. Die Entwicklung des komplex skalierten Floquet-Hamiltonoperators nach Sturmschen Basisfunktionen wird in Abschnitt 8.4 behandelt. Dabei wird auch die Methode beschrieben, mit der die numerische Diagonalisierung konkret durchgeführt wird. Schließlich wird in Abschnitt 8.5 dargelegt, wie aus den Eigenvektoren des komplex skalierten Systems die Dichteverteilung der Floquet-Zustände im Konfigurationsraum bzw. im Phasenraum berechnet wird.

8.1 Der Hamiltonoperator der kollinearen *Zee*-Konfiguration

Die Quantenmechanik des eindimensionalen Helium-Atoms zeichnet sich durch grundsätzliche konzeptionelle Besonderheiten gegenüber dem dreidimensionalen Helium-Atom aus, die damit zusammenhängen, daß die beteiligten Teilchen, der Atomkern und die beiden Elektronen, aufgrund der Coulomb-Singularität der Wechselwirkung nicht in der Lage sind, aneinander vorbei zu gelangen: Zum einen muß, wie in der klassischen Dynamik, prinzipiell unterschieden werden zwischen der *eZe*-Konfiguration, bei der die Elektronen auf unterschiedlichen Seiten des Kerns angeordnet sind, und der *Zee*-Konfiguration, bei der sich beide Elektronen auf der gleichen Seite des Kerns befinden, zum anderen findet kein Austausch zwischen den Elektronen statt, was dazu führt, daß in dem zu diagonalisierenden Hamiltonoperator die Elektronen effektiv als *unterscheidbare* Teilchen auftreten.

Die Wellenfunktion ψ , die den Zustand der kollinearen, durch ein externes oszillierendes elektrisches Feld linearer Polarisation getriebenen Zee-Konfiguration beschreibt, ist definiert auf $\{(z_1, z_2) : 0 < z_1, z_2 < \infty\}$. Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion gemäß

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = H \psi \quad (8.1)$$

ist durch den auf den kollinearen Konfigurationsraum beschränkten Hamiltonoperator des getriebenen Helium-Atoms

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{Z}{z_1} - \frac{Z}{z_2} + \frac{1}{|z_1 - z_2|} - \frac{F}{\omega} \sin \omega t \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z_2} \right), \quad (8.2)$$

gegeben, wobei das oszillierende elektrische Feld (der Amplitude F und Frequenz ω) über die Geschwindigkeitseichung eingekoppelt ist (um die Identifizierung der die Wechselwirkung mit dem Kern beschreibenden Terme zu erleichtern, verwenden wir für die formale Beschreibung des Eigenwertproblems die allgemeine Kernladung Z , wobei natürlich die konkreten Rechnungen mit $Z = 2$ durchgeführt wurden). Aufgrund der Coulomb-Singularität der Kernanziehung ergeben sich die Randbedingungen der Wellenfunktion zu

$$\psi(z_1, z_2) \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad z_1 \rightarrow 0 \quad \text{oder} \quad z_2 \rightarrow 0. \quad (8.3)$$

Eine weitere Bedingung ergibt sich aus der Coulomb-Singularität der Elektron-Elektron-Wechselwirkung:

$$\psi(z_1, z_2) \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad z_1 \rightarrow z_2. \quad (8.4)$$

Die Austauschsymmetrie, also die Tatsache, daß die Elektronen a priori ununterscheidbar sind, erfordert

$$\psi(z_1, z_2) = \psi(z_2, z_1) \quad (8.5)$$

für Singulett-Zustände, sowie

$$\psi(z_1, z_2) = -\psi(z_2, z_1) \quad (8.6)$$

für Triplett-Zustände. Es bietet sich an,

$$\psi(z_1, z_2) = \psi_>(z_1, z_2) \pm \psi_>(z_2, z_1) \quad (8.7)$$

für Singulett- bzw. für Triplett-Zustände anzusetzen, wobei

$$\psi_>(z_1, z_2) := \begin{cases} \psi(z_1, z_2) & : z_1 > z_2 \\ 0 & : z_1 < z_2 \end{cases} \quad (8.8)$$

die Einschränkung der Wellenfunktion auf den Teilraum $U_> = \{(z_1, z_2) : 0 < z_2 < z_1 < \infty\}$ bezeichnet, in dem das zweite Elektron näher am Kern ist als das erste Elektron. Die Anwendung des Hamiltonoperators auf ψ ergibt

$$H\psi = (H_>\psi_>)(z_1, z_2) \pm (H_>\psi_>)(z_2, z_1) \quad (8.9)$$

mit

$$(H_>\psi_>)(z_1, z_2) = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{Z}{z_1} - \frac{Z}{z_2} + \frac{1}{z_1 - z_2} - \frac{F}{\omega} \sin \omega t \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z_2} \right) \right) \psi_>(z_1, z_2). \quad (8.10)$$

Da $\psi_>(z_1, z_2)$ und $\psi_>(z_2, z_1)$ auf disjunkten Teilträumen nichtverschwindende Werte annehmen, lässt sich die Schrödinger-Gleichung separieren:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_>(z_1, z_2) = (H_>\psi_>)(z_1, z_2) \quad \text{für } z_1 > z_2, \quad (8.11)$$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_>(z_2, z_1) = (H_>\psi_>)(z_2, z_1) \quad \text{für } z_1 < z_2. \quad (8.12)$$

Da $\psi_>$ aufgrund (8.3) und (8.4) am Rand des Gebiets $U_>$ verschwindet, stellt $H_>$ in (8.11) bzw. (8.12) effektiv einen *hermiteschen* Hamiltonoperator dar. Es genügt also, das unitäre Zeitentwicklungsproblem (8.11) für *unterscheidbare* Elektronen mit $z_1 > z_2$ zu lösen und die tatsächliche Wellenfunktion des Systems über (8.7) zu bestimmen.

Anschaulich formuliert, findet im Lauf der Zeitentwicklung kein Austausch zwischen den Elektronen statt; das innere Elektron bleibt stets „innen“ aufgrund der unüberwindbaren Coulomb-Singularität der Elektron-Elektron-Wechselwirkung. Eine unmittelbare Konsequenz der Separation der Schrödinger-Gleichung gemäß (8.11, 8.12) ist die Tatsache, daß Singulett- und Triplet-Zustände (gemäß (8.7)) entartet sind bzw. daß der Elektronenspin für die kollineare Konfiguration nicht von Bedeutung ist.

Im folgenden betrachten wir also, ohne Beschränkung der Allgemeinheit, den Hamiltonoperator

$$H \equiv H_> = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{Z}{z_1} - \frac{Z}{z_2} + \frac{1}{z_1 - z_2} - \frac{F}{\omega} \sin \omega t \left(\frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z_1} + \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial z_2} \right), \quad (8.13)$$

wobei $z_2 \in]0, \infty[$ und $z_1 \in]z_2, \infty[$ gilt. Um die gegenseitige Abhängigkeit der Koordinaten zu beseitigen, bietet es sich an, neue Koordinaten gemäß

$$x := z_1 - z_2 \quad (8.14)$$

$$y := z_2 \quad (8.15)$$

einzu führen, die beide, unabhängig voneinander, alle Werte aus $]0, \infty[$ annehmen und den perimetrischen Koordinaten [114, 115], spezialisiert auf die kollineare *Zee*-Konfiguration, entsprechen. Mit

$$\frac{\partial}{\partial z_1} = \frac{\partial}{\partial x} \quad (8.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial z_2} = \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \quad (8.17)$$

erhalten wir für den Hamiltonoperator, ausgedrückt in diesen Koordinaten,

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - \frac{Z}{x+y} - \frac{Z}{y} + \frac{1}{x} - \frac{F}{\omega} \sin \omega t \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial y}. \quad (8.18)$$

8.2 Das Floquet-Theorem

Die Tatsache, daß die Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators (8.18) periodischer Natur ist, erlaubt die Anwendung des Floquet-Theorems [116, 117, 118]. Das Floquet-Theorem impliziert die Umformulierung des periodischen Zeitentwicklungsproblems in ein zeitunabhängiges Eigenwertproblem und ermöglicht damit eine konzeptionell „handliche“ Beschreibung des Systems über zeitlich periodische Quasienergiefunktionen und deren zugehörige Quasienergien.

Wir betrachten den Hamiltonoperator

$$H = H_0 + V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}, \quad (8.19)$$

wobei, in unserem Fall, H_0 und V durch

$$H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} - \frac{Z}{x+y} - \frac{Z}{y} + \frac{1}{x} \quad (8.20)$$

$$V = \frac{F}{2\omega} \frac{\partial}{\partial y} \quad (8.21)$$

gegeben sind. Aufgrund der periodischen Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators ist es angebracht, die Schrödinger-Gleichung (8.1) im Fourier-Raum zu betrachten. In Analogie zur Einführung der Brillouin-Zone im räumlich periodischen Potential liegt es nahe, ein Energiespektrum der Breite ω , etwa $[0, \omega[$, vorzugeben und in bezug auf diese „Floquet-Zone“ die Fourierkomponenten $\hat{\psi}_\omega$ der Wellenfunktion ψ_t durch die „Quasienergie“ $\epsilon \in [0, \omega[$ sowie durch einen ganzzahligen Index k gemäß

$$\psi_t = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{i\omega' t} \hat{\psi}_{\omega'} \equiv \int_0^{\omega} d\epsilon \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{i(k\omega-\epsilon)t} \hat{\psi}_k^{(\epsilon)} \quad (8.22)$$

zu bezeichnen. Die Fourier-Transformation der Schrödinger-Gleichung liefert damit

$$(H_0 + k\omega) \hat{\psi}_k^{(\epsilon)} + V \hat{\psi}_{k-1}^{(\epsilon)} + V^\dagger \hat{\psi}_{k+1}^{(\epsilon)} = \epsilon \hat{\psi}_k^{(\epsilon)} \quad (8.23)$$

für alle $k \in \mathbb{Z}$, $\epsilon \in [0, \omega[$.

Wie man sofort erkennt, handelt es sich bei (8.23) um ein System von Eigenwertgleichungen zu dem Eigenwert ϵ und der zugehörigen, vektorwertigen Eigenfunktion $(\hat{\psi}_k^{(\epsilon)})_{k \in \mathbb{Z}}$. Unter Annahme eines diskreten Spektrums von Eigenwerten $\epsilon_n \in [0, \omega[$ mit den zugehörigen Eigenvektoren $(\hat{\psi}_k^{(n)})_{k \in \mathbb{Z}}$ ergibt sich die Wellenfunktion über (8.22) zu

$$\psi_t = \sum_n C_n \phi_n(t) e^{-i\epsilon_n t} \quad (8.24)$$

mit

$$\phi_n(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{\psi}_k^{(n)} e^{ik\omega t}. \quad (8.25)$$

ψ_t lässt sich also, ähnlich wie im zeitunabhängigen Quantensystem, als Linearkombination von zeitlich periodischen „Quasienergiefunktionen“ bzw. „Floquet-Eigenfunktionen“ ϕ_n darstellen. Die Kenntnis sämtlicher Floquet-Eigenfunktionen ϕ_n sowie deren „Quasienergien“ bzw. „Floquet-Energien“ ϵ_n ermöglicht somit eine vollständige Charakterisierung der Dynamik des periodisch getriebenen Systems. Formal spielt die genaue Lage der Floquet-Zone auf der Energieachse keine Rolle: Wie man sofort sieht, ist zum Eigenwert ϵ_n auch $\epsilon_n + \omega$ Eigenwert des Gleichungssystems (8.23) mit der Eigenfunktion $\phi = e^{i\omega t} \phi_n$. Das gesamte Eigenspektrum von (8.23) ist also periodisch mit der Frequenz ω , und jede beliebig gewählte Floquet-Zone liefert den vollständigen Satz von Floquet-Eigenfunktionen und -Eigenwerten.

Die Annahme eines diskreten Spektrums von Floquet-Eigenwerten ist für atomare Systeme in aller Regel falsch. Dies liegt an der Existenz von Kontinua im ungestörten Atom, an die, bei eingeschaltetem Antrieb, jeder gebundene Zustand durch Multiphotonen-Anregung mit einer hinreichend hohen Anzahl von Photonen koppelt. Das Floquet-Spektrum des getriebenen atomaren Systems ist damit vollständig *kontinuierlich*. Die im störungsfreien Limes gebundenen atomaren Zustände manifestieren sich im Kontinuumsspektrum in Form von Resonanzen, deren Breiten den Photoionisationsraten dieser Zustände entsprechen.

8.3 Komplexe Skalierung

Um die Resonanzstrukturen im Floquet-Spektrum aufzulösen, wenden wir die Methode der „komplexen Skalierung“ (auch „komplexe Rotation“ bzw. „komplexe Dilatation“ genannt) an. Die Methode ermöglicht einen konzeptionell eleganten Zugang zu ins Kontinuum eingebetteten autoionisierenden (bzw., im Floquet-Problem, photoionisierenden) Zuständen. In diesem Abschnitt sollen die grundlegenden Eigenschaften der Methode kurz beschrieben werden; weitergehende und ausführlichere Informationen finden sich in der Literatur [119, 120, 121, 122, 123, 124].

Die Grundidee der komplexen Skalierung besteht darin, die Transformation

$$\mathbf{r} \mapsto \mathbf{r} e^{i\theta} \quad (8.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mapsto \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{-i\theta} \quad (8.27)$$

mit reellem $\theta \in [0, \pi/4[$ [119] an dem zu untersuchenden Hamiltonoperator durchzuführen (\mathbf{r} bezeichnet hier die Gesamtheit aller Ortskoordinaten), was durch

$$H \mapsto H_\theta = R(\theta) H R(-\theta) \quad (8.28)$$

mit

$$R(\theta) = \exp \left(-\frac{\theta}{2} \left(\mathbf{r} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{r} \right) \right) \quad (8.29)$$

geleistet wird. Der resultierende Hamiltonoperator H_θ ist komplex symmetrisch (nicht hermitesch!) und besitzt damit *komplexe* Eigenwerte sowie komplexe Eigenvektoren, die (sofern H rein reell ist) bezüglich des Skalarprodukts

$$\langle \overline{\psi} | \phi \rangle = \int d^f r \psi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) \quad (8.30)$$

(wobei in dem Integral ψ *nicht* komplex konjugiert wird) orthogonal sind.

Das Eigenspektrum des komplex skalierten Hamiltonoperators eines atomaren Systems gliedert sich im allgemeinen in *reell-diskrete* Eigenwerte, *komplex-diskrete* Eigenwerte mit negativem Imaginärteil, sowie *komplex-kontinuierliche* Eigenwerte. Die reell-diskreten Eigenwerte entsprechen den gebundenen Zuständen des unskalierten Hamiltonoperators; sie stimmen mit deren Energien überein. Diskrete Eigenwerte mit negativem Imaginärteil existieren energetisch oberhalb der niedrigsten Ionisationsschwelle des atomaren Systems und entsprechen den autoionisierenden Resonanzzuständen des unskalierten Systems; die Realteile der Eigenwerte stimmen mit den Energielagen, die Imaginärteile mit den halben Ionisationsbreiten der Resonanzzustände überein. Daneben existiert zu jeder Ionisationsschwelle E_0 des Atoms ein nahezu strukturloses Kontinuum von Eigenwerten entlang der Halbgeraden $E_0 + \epsilon e^{-2i\theta}$ mit $\epsilon > 0$. Diese Kontinua entsprechen im wesentlichen den Kontinuumskanälen des unskalierten Hamiltonoperators, die sich an die jeweiligen Ionisationsschwellen anschließen.

Grob gesprochen, separiert die komplexe Skalierung die autoionisierenden Zustände des betrachteten Systems von den einzelnen Kontinuumskanälen, in die diese Zustände eingebettet sind. Sofern der Skalierungswinkel θ so groß ist, daß die Breite der autoionisierenden Resonanz kleiner ist als die negativen Imaginärteile der Kontinua, in die sie im unskalierten System eingebettet ist, – sofern also durch die Rotation dieser Kontinua die betrachtete Resonanz „aufgedeckt“ wird, – ist diese Resonanz im Spektrum des komplex skalierten Hamiltonoperators als *diskreter* Zustand vertreten, dessen Eigenschaften unabhängig vom Skalierungswinkel θ sind. Die Methode erlaubt daher, die Struktur des Kontinuums, etwa im Zusammenhang mit einem Photoionisationsprozeß [23, 125], allein anhand einzelner, diskreter Resonanzzustände quantitativ korrekt zu reproduzieren.

Der Zusammenhang zwischen dem Spektrum des unskalierten Hamiltonoperators und jenem des komplex skalierten Hamiltonoperators läßt sich formal über die Greens-Funktion $G^+(E)$ des unskalierten Systems herleiten, die sich durch die Greens-Funktion des komplex skalierten Systems gemäß

$$G^+(E) = \lim_{\eta \rightarrow 0+} \frac{1}{E - H + i\eta} = R(-\theta) \frac{1}{E - H_\theta} R(\theta) \quad (8.31)$$

ausdrücken läßt [123]. Die komplexe Skalierung liefert also den Zugang zu der analytischen Fortsetzung der Greens-Funktion in die negative komplexe Halbebene, deren Polstellen den autoionisierenden Zuständen des Systems entsprechen. Für den Projektor auf den Kontinuumszustand zur Energie E des unskalierten Systems erhält man damit unter der Annahme

nichtentarteter Kontinua

$$|E\rangle\langle E| = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} (G^+(E)) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \sum_{\nu} \frac{R(-\theta) |\nu\rangle_{\theta} \langle \nu| R(\theta)}{E_{\nu\theta} - E}, \quad (8.32)$$

wobei über sämtliche Eigenfunktionen $|\nu\rangle_{\theta}$ mit den zugehörigen Eigenenergien $E_{\nu\theta}$ des komplex skalierten Systems summiert (bzw., bei kontinuierlichen $|\nu\rangle_{\theta}$, integriert) wird [124]. Die Strukturierung des Kontinuums $|E\rangle$ wird bestimmt durch die diskreten, den autoionisierenden Resonanzen entsprechenden Zustände, während die kontinuierlichen Zustände einen flachen Hintergrund liefern. Liegt E in der Nähe eines autoionisierenden Zustands $|\nu\rangle_{\theta}$, so dominiert dessen Beitrag die Summe (8.32):

$$|E\rangle\langle E| \simeq \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{R(-\theta) |\nu\rangle_{\theta} \langle \nu| R(\theta)}{E_{\nu\theta} - E}. \quad (8.33)$$

Über diesen Projektor lassen sich Überlappmatrixelemente zwischen (normierbaren) Wellenfunktionen des unskalierten Systems und autoionisierenden Eigenzuständen des komplex skalierten Systems in wohldefinierter Weise berechnen. Konkret wird der Überlapp einer Wellenfunktion $|\phi\rangle$ des unskalierten Systems mit einem autoionisierenden Zustand $|\nu\rangle_{\theta}$ über

$$\begin{aligned} |\langle \phi | \nu \rangle|^2 &\longrightarrow \langle \phi | E \rangle \langle E | \phi \rangle|_{E=\operatorname{Re} E_{\nu\theta}} \\ &= \frac{1}{\pi |\operatorname{Im} E_{\nu\theta}|} \operatorname{Re} \left(\int d^f r \phi(\mathbf{r}) \psi_{\nu}(\mathbf{r}) \int d^f r \phi^*(\mathbf{r}) \psi_{\nu}(\mathbf{r}) \right) \end{aligned} \quad (8.34)$$

berechnet, wobei

$$\psi_{\nu}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{R}(-\theta) | \nu \rangle_{\theta} \quad (8.35)$$

als Wellenfunktion des autoionisierenden Zustands im unskalierten System interpretiert werden kann.

Die Äquivalenz zwischen dem unskalierten und dem komplex skalierten System konnte für eine Reihe von „dilatationsanalytischen“ Systemen gezeigt werden, unter anderem für Atome im externen statischen elektrischen Feld [126, 127, 128, 129] sowie für das Floquet-Problem atomarer Systeme im externen elektromagnetischen Feld [130, 131]. In Analogie zum ungetriebenen System erhalten wir im Spektrum des komplex skalierten Floquet-Operators Kontinuumszustände, die den um ein ganzzahliges Vielfaches der treibenden Frequenz verschobenen Ionisationsschwellen angehören. Neben diesen Kontinua treten auch *diskrete* Eigenwerte mit negativem Imaginärteil im Spektrum auf, die den im ungestörten System gebundenen (bzw., im Mehr-Elektronen-System, autoionisierenden) Zuständen entsprechen, die durch das treibende Feld an die atomaren Kontinua gekoppelt sind. Die Imaginärteile dieser diskreten Eigenwerte geben die Photoionisationsbreiten (bzw., im Mehr-Elektronen-System, die kombinierten Autoionisations- und Photoionisationsbreiten) dieser Zustände an.

8.4 Entwicklung nach Sturmschen Basisfunktionen

Für die numerische Diagonalisierung des Hamiltonoperators wird die Eigenfunktion in beiden Koordinaten x und y nach den Sturmschen Funktionen des eindimensionalen Coulomb-Potentials [132] entwickelt. Diese sind definiert durch

$$S_n^{(\alpha)}(r) = \frac{1}{\sqrt{n}} (-1)^n \frac{2r}{\alpha} \exp\left(-\frac{r}{\alpha}\right) L_{n-1}^{(l=1)}\left(\frac{2r}{\alpha}\right) \quad \text{für } n \geq 1, \quad (8.36)$$

wobei $L_n^{(l)}$ die zugeordneten Laguerre-Polynome bezeichnen [133] und $\alpha > 0$ einen beliebigen reellen Parameter, den „Sturmschen Skalierungsparameter“, darstellt. Sie eignen sich speziell für die Modellierung wasserstoffähnlicher Eigenfunktionen: die Sturmsche Funktion $S_n^{(\alpha=n)}$ stimmt mit dem Radialteil der gebundenen Wasserstoffeigenfunktion zur Hauptquantenanzahl n (und zur Drehimpulskomponente $l=0$) überein. Im Gegensatz zu den gebundenen Wasserstoffeigenfunktionen sind die Sturmschen Funktionen vollständig; in bezug auf das Skalarprodukt

$$\langle \widetilde{f} | g \rangle = \int_0^\infty \frac{1}{r} f(r) g(r) dr \quad (8.37)$$

bildet $\{S_n^{(\alpha)} : n \geq 1\}$ einen vollständigen orthonormierten Basissatz auf dem Raum der auf $[0, \infty[$ definierten Funktionen, die für $r \rightarrow 0$ proportional $\mathcal{O}(r)$ gegen Null gehen.

Über die Rekursionsformel sowie die Differentialgleichungen der zugeordneten Laguerre-Polynome [133] gewinnt man die Operatoren

$$\hat{S}_\pm := \frac{\alpha}{2} r \frac{\partial^2}{\partial r^2} \mp r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{r}{2\alpha}, \quad (8.38)$$

$$\hat{S}_3 := -\frac{\alpha}{2} r \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{r}{2\alpha}, \quad (8.39)$$

die die fundamentalen Abbildungen

$$\hat{S}_\pm S_n^{(\alpha)} = \sqrt{n(n \pm 1)} S_{n \pm 1}^{(\alpha)}, \quad (8.40)$$

$$\hat{S}_3 S_n^{(\alpha)} = n S_n^{(\alpha)} \quad (8.41)$$

definieren. Anhand \hat{S}_\pm, \hat{S}_3 lässt sich die Anwendung der Operatoren

$$r = \alpha \left(\frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) + \hat{S}_3 \right) \quad (8.42)$$

$$r \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{2} (\hat{S}_- - \hat{S}_+) \quad (8.43)$$

$$r \frac{\partial^2}{\partial r^2} = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{2} (\hat{S}_+ + \hat{S}_-) - \hat{S}_3 \right) \quad (8.44)$$

sowie sämtlicher Kombinationen dieser Operatoren auf $S_n^{(\alpha)}$ bestimmen.

Da der Hamiltonoperator (8.20, 8.21) in bezug auf das Skalarprodukt (8.37), das wir einführen wollen, um die Orthogonalität der Sturmschen Funktionen auszunutzen zu können,

nicht hermitesch ist (bzw. nach Durchführung der komplexen Skalierung nicht komplex symmetrisch ist), ist es erforderlich, statt $(H - E)\psi = 0$ das bezüglich (8.37) hermitesch (bzw. komplex symmetrische) Eigenwertproblem

$$xy(H - E)\psi = 0 \quad (8.45)$$

zu studieren. Um bezüglich des effektiven Hamiltonoperators strenge Auswahlregeln zu gewährleisten (und damit die Bandbreite der zu diagonalisierenden Matrix so niedrig wie möglich zu halten) – mit Ausnahme des Terms $xy/(x + y)$ sind bereits sämtliche, den Operator xyH konstituierenden Terme als Kombination der elementaren Operatoren (8.42 – 8.44) darstellbar und weisen somit strenge Auswahlregeln in der Sturmschen Basis auf – empfiehlt sich die Transformation

$$\psi(x, y) =: (x + y)\phi(x, y). \quad (8.46)$$

Entwickeln wir ϕ nach Sturmschen Funktionen, so skaliert die Wellenfunktion ψ proportional $xy(x + y)$ für $x \rightarrow 0$ und $y \rightarrow 0$. Diese Skalierung stellt im Prinzip eine Beschränkung der Allgemeinheit dar, da (aufgrund der Coulomb-Wechselwirkung zwischen den geladenen Teilchen) formal lediglich $\psi \propto x$ für $x \rightarrow 0$ bzw. $\psi \propto y$ für $y \rightarrow 0$ gilt und somit die Wellenfunktion für $x \rightarrow 0$ und $y \rightarrow 0$ formal nur proportional xy skaliert. Zu beachten ist jedoch, daß der Fall $x \rightarrow 0$ und $y \rightarrow 0$ einer *Dreifachkollision* der Elektronen und des Kerns entspricht, die in der *Zee*-Konfiguration grundsätzlich vermieden wird. Da folglich die Wahrscheinlichkeitsdichte der *Zee*-Wellenfunktion für $x \rightarrow 0$ und $y \rightarrow 0$ extrem stark abnimmt, ist die Ausfaktorisierung eines zusätzlichen Terms der Form $(x + y)$ gerechtfertigt.

Die Formulierung des Eigenwertproblems des komplex skalierten Floquet-Hamiltonoperators lautet damit

$$(x + y)xy(H_{0\theta} + k\omega - E)(x + y)\phi_k(x, y) + (x + y)xyV_\theta(x + y)(\phi_{k-1}(x, y) - \phi_{k+1}(x, y)) = 0 \quad (8.47)$$

wobei $H_{0\theta}$ und V_θ durch die komplex skalierten Operatoren

$$H_{0\theta} = \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) e^{-2i\theta} + \left(-\frac{Z}{x+y} - \frac{Z}{y} + \frac{1}{x} \right) e^{-i\theta} \quad (8.48)$$

$$V_\theta = \frac{F}{2\omega} \frac{\partial}{\partial y} e^{-i\theta} \quad (8.49)$$

gegeben sind und die Floquet-Komponenten ϕ_k nach Sturmschen Funktionen entwickelt werden:

$$\phi_k(x, y) = \sum_{n_x, n_y=1}^{\infty} C_{n_x n_y}^{(k)} S_{n_x}^{(\alpha_x)}(x) S_{n_y}^{(\alpha_y)}(y). \quad (8.50)$$

Die in das unskalierte System zurücktransformierte Floquet-Eigenfunktion ist als Funktion der Ortskoordinaten z_1, z_2 der Elektronen für Singulett- bzw. Triplet-Zustände durch

$$\psi_t(z_1, z_2) = \begin{cases} \phi_t(z_1 - z_2, z_2) & : z_1 > z_2 \\ \pm \phi_t(z_2 - z_1, z_1) & : z_1 < z_2 \end{cases} \quad (8.51)$$

mit

$$\phi_t(x, y) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (x + y) e^{-2i\theta} \phi_k(x e^{-i\theta}, y e^{-i\theta}) e^{ik\omega t} \quad (8.52)$$

gegeben. Die Berechnung der Matrixelemente von (8.48, 8.49) wird in Anhang A.2 skizziert. Wie dort gezeigt wird, verfügen der effektive Hamiltonoperator sowie die darstellende Matrix des Skalarprodukts $xy(x + y)^2$ innerhalb der Sturmschen Basis über die Auswahlregeln

$$|\Delta n_x| \leq 3, \quad |\Delta n_y| \leq 3, \quad (8.53)$$

wobei n_x, n_y die in der Entwicklung (8.50) verwendeten Indizes bezeichnen.

Die zur numerischen Lösung unvermeidliche Näherung besteht nun darin, die Größe der Basis sowie die Anzahl der Floquet-Komponenten zu begrenzen. Konkret beschränken wir uns auf die ersten N_x Basisfunktionen in der x -Variable, die ersten N_y Basisfunktionen in der y -Variable, sowie auf N_k Floquet-Komponenten. Aus (8.50) wird damit

$$\phi_k(x, y) = \sum_{n_x=1}^{N_x} \sum_{n_y=1}^{N_y} C_{n_x n_y}^{(k)} S_{n_x}^{(\alpha_x)}(x) S_{n_y}^{(\alpha_y)}(y) \quad (8.54)$$

für $k = -k_0 \dots k_0$ mit $N_k = 2k_0 + 1$. In dieser Basis sind der effektive Hamiltonoperator und die darstellende Matrix des Skalarprodukts durch Bandmatrizen gegeben, die sehr dünn besetzt sind.

Zur Bestimmung der Eigenwerte und Eigenvektoren wird eine effiziente Implementierung des Lanczos-Algorithmus mit inverser Iteration verwendet [134, 135]. Bei diesem Verfahren wird durch iterative Multiplikation der Inversen der zu diagonalisierenden Matrix, ausgehend von einem beliebigen Startvektor, ein „Krylov“-Unterraum von vergleichsweise handlicher Größe erzeugt, der vorwiegend Eigenvektoren zu Eigenwerten nahe Null enthält und innerhalb dessen die betrachtete Matrix effizient diagonalisiert wird. Durch geeignete Wahl des Nullpunkts im Spektrum (der durch Subtraktion von Vielfachen der Einheitsmatrix beliebig verschoben werden kann) gelingt es damit, mit vergleichsweise geringem Aufwand die Eigenvektoren zu den Eigenwerten in der Nähe eines beliebig vorgegebenen Referenzwertes bis auf Maschinengenauigkeit zu berechnen.

Zur Berechnung der Inversen der komplex symmetrischen Bandmatrix wird diese durch eine Cholesky-Zerlegung [136] als Produkt zweier Dreiecksmatrizen dargestellt. Diese weisen die gleiche Bandstruktur wie die zu diagonalisierende Matrix auf, sind jedoch im Gegensatz zu dieser innerhalb des Bandes im allgemeinen voll besetzt. Der gesamte Speicherplatzbedarf ist damit dem Produkt aus Länge und Bandbreite der zu diagonalisierenden Matrix proportional, skaliert also in unserem Fall quadratisch mit zwei und linear mit einer der drei Dimensionen N_x, N_y, N_k (was bei der Wahl der Hierarchie der Indizes im Hinblick auf einen möglichst geringen Gesamtspeicherplatzbedarf zu beachten ist).

Auf Details zu Fragen der numerischen Konvergenz der Rechnungen wird in Anhang A.3 eingegangen.

8.5 Visualisierung der Wellenfunktion

Da die Wellenfunktion der kollinearen Konfiguration nur von zwei Koordinaten abhängt, ist es möglich, deren Dynamik in nahezu vollständiger Weise auf einer zweidimensionalen Fläche zu visualisieren: Es bietet sich an, die Wahrscheinlichkeitsdichte der Wellenfunktion $|\psi(z_1, z_2)|^2$ als Funktion der Koordinaten z_1, z_2 der Elektronen aufzutragen. Allerdings erlaubt diese Wahrscheinlichkeitsdichte nur sehr eingeschränkte Aussagen in bezug auf die Lokalisierung der Zustände auf Strukturen des zugrunde liegenden klassischen Phasenraums. Es ist daher angebracht, neben der Wahrscheinlichkeitsdichte im Konfigurationsraum auch die „Husimi-Verteilung“ [99, 137, 138, 139] dieser Zustände aufzutragen, die als Projektion der Wellenfunktion auf den Phasenraum interpretiert werden kann.

Die Husimi-Dichte einer Wellenfunktion lässt sich definieren als das Betragsquadrat des Überlapps dieser Wellenfunktion mit einem kohärenten Zustand, der um einen gegebenen Ort q und einen gegebenen Impuls p (bzw. um eine gegebene Wirkung I und einen gegebenen Winkel θ) mit minimaler Unschärfe zentriert ist. Konkret definieren wir

$$Q(q, p) := |\langle \phi_{q,p} | \psi \rangle|^2 \quad (8.55)$$

mit

$$\phi_{q,p}(r) = \exp\left(-\frac{1}{2}\omega_s(r - q)^2 - i p r\right). \quad (8.56)$$

$Q(q, p)$ gibt ein Maß für die Wahrscheinlichkeit an, unter Berücksichtigung der Unschärferelation das System in der Nähe des Ortes q und des Impulses p zu finden, und lässt sich damit als Dichte der Wellenfunktion ψ innerhalb des klassischen Phasenraums interpretieren. Über den „Squeezing“-Parameter ω_s , der der Frequenz desjenigen harmonischen Oszillators entspricht, dessen Grundzustandseigenfunktion durch $\phi_{q=0,p=0}$ gegeben ist, lässt sich die Auflösung in der Orts- bzw. in der Impulskoordinate einstellen: maximale Ortsauflösung (bzw. minimale Impulsaufklärung) erhält man für $\omega_s \rightarrow \infty$ mit $Q(q, p) \rightarrow |\psi(q)|^2$, maximale Impulsaufklärung (bzw. minimale Ortsauflösung) erhält man für $\omega_s \rightarrow 0$, mit $Q(q, p) \rightarrow |\int dr e^{ipr} \psi(r)|^2$.

Für Wellenfunktionen der Zee-Konfiguration muß die Definition (8.56) der Husimi-Verteilung in Anpassung an die klassische Phasenraumvisualisierung modifiziert werden. Der klassische Phasenraum wird gemäß der in Abschnitt 4.1 besprochenen Methode visualisiert, wobei wir hier, im Gegensatz zu Kap. 4–7, statt der Gesamtenergie die Wirkung bzw. Hauptquantenzahl N des inneren Elektrons fixieren. Letztere stellt approximativ eine gute Quantenzahl dar (siehe auch Abschnitt 2.3), da Zustände zu verschiedenen Quantenzahlen N durch das externe Feld nur sehr schwach gemischt werden. Wir tragen also für feste Wirkung N und festen Ort $z_2 = 0$ des inneren Elektrons bei fester Phase ωt des treibenden Feldes den Impuls gegen den Ort des äußeren Elektrons auf. Die quantenmechanische Entsprechung dieser Phasenraumvisualisierung ist durch die Husimi-Verteilung der Floquet-Eigenfunktion in den

Koordinaten des äußeren Elektrons gegeben, wobei das innere Elektron auf $z_2 \approx 0$ fixiert wird. Wir betrachten also den Überlapp der Floquet-Eigenfunktion mit

$$\phi_{q,p}(z_1, z_2) = \exp\left(-\frac{1}{2}\omega_s(z_1 - q)^2 - \mathrm{i}p z_1\right) \delta(z_2 - z_2^0), \quad (8.57)$$

wobei z_2^0 nahe bei Null liegt (die Wahl $z_2^0 = 0$ ist nicht sinnvoll, da dort die Wellenfunktion verschwindet). Für den Squeezing-Parameter ω_s verwenden wir die intrinsische Frequenzskala $\omega_I = 0.3 N^{-3}$ (2.7) der Frozen-Planet-Konfiguration.

Für die Berechnung der Wahrscheinlichkeitsdichte sowie der Husimi-Verteilung des mit der Methode der komplexen Skalierung berechneten Floquet-Eigenzustands ist zu beachten, daß das Betragsquadrat der Matrixelemente durch einen (8.34) analogen Ausdruck zu ersetzen ist. Bezeichnet

$$|\psi\rangle_t = \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{ik\omega t} R(-\theta) |\phi_k\rangle_{\theta} \quad (8.58)$$

die in das unskalierte System zurücktransformierte Floquet-Eigenfunktion zu dem im komplex skalierten System berechneten Eigenvektor $(|\phi_k\rangle_{\theta})_{k \in \mathbb{Z}}$, so ist der Überlapp mit einer beliebigen normierbaren Wellenfunktion $|\phi\rangle$ unter Auslassung der Vorfaktoren gemäß

$$|\langle \phi | \psi \rangle_t|^2 \rightarrow \mathrm{Re} \left(\int d^f r \phi^*(\mathbf{r}) \psi_t(\mathbf{r}) \int d^f r \phi(\mathbf{r}) \psi_{-t}(\mathbf{r}) \right) \quad (8.59)$$

zu berechnen. ψ_{-t} läßt sich hier als die zu (8.58) adjungierte Wellenfunktion interpretieren, bei der aufgrund der Definition der Adjunktion gemäß (8.30) die Eigenvektoren des komplex skalierten Systems $|\phi_k\rangle_{\theta}$ unverändert bleiben, die zeitabhängigen Vorfaktoren dieser Eigenvektoren hingegen komplex konjugiert werden. Konkret erhalten wir damit für die Wahrscheinlichkeitsdichte der Floquet-Eigenfunktion $\psi_t(z_1, z_2)$ (8.51) im Konfigurationsraum

$$|\psi_t(z_1, z_2)|^2 \rightarrow \begin{cases} \mathrm{Re} \phi_t(z_1 - z_2, z_2) \phi_{-t}(z_1 - z_2, z_2) & : z_1 > z_2 \\ \mathrm{Re} \phi_t(z_2 - z_1, z_1) \phi_{-t}(z_2 - z_1, z_1) & : z_1 < z_2 \end{cases}, \quad (8.60)$$

sowie für deren über (8.55) und (8.57) definierte Husimi-Dichte

$$\begin{aligned} |\langle \phi_{q,p} | \psi \rangle_t|^2 &\rightarrow \mathrm{Re} \left(\left(\int_0^{\infty} dz_1 \int_0^{\infty} dz_2 \phi_{q,p}^*(z_1, z_2) \phi_t(z_1 - z_2, z_2) \right) \right. \\ &\quad \times \left. \left(\int_0^{\infty} dz_1 \int_0^{\infty} dz_2 \phi_{q,p}(z_1, z_2) \phi_{-t}(z_1 - z_2, z_2) \right) \right) \\ &= \mathrm{Re} \left(\left(\int_0^{\infty} dz_1 \exp\left(-\frac{1}{2}\omega_s(z_1 - q)^2 + \mathrm{i}p z_1\right) \phi_t(z_1 - z_2^0, z_2^0) \right) \right. \\ &\quad \times \left. \left(\int_0^{\infty} dz_1 \exp\left(-\frac{1}{2}\omega_s(z_1 - q)^2 - \mathrm{i}p z_1\right) \phi_{-t}(z_1 - z_2^0, z_2^0) \right) \right), \end{aligned} \quad (8.61)$$

wobei ϕ_t durch (8.52) gegeben ist.

Für die Berechnung von $\phi_t(x, y)$ gemäß (8.52) und (8.50) ist zu beachten, daß die Auswertung der Sturmschen Funktionen bei komplexen Argumenten im allgemeinen zu numerischen

Instabilitäten neigt. Es empfiehlt sich daher [124], die „komplex skalierten“ Sturmschen Funktionen $S_n(xe^{-i\theta})$ als komplexe Linearkombinationen der „unskalierten“ Sturmschen Funktionen $S_n(x)$ darzustellen, was sich mit der Kenntnis der Darstellung des Skalierungsoperators $R(\theta)$ in der Sturmschen Basis analytisch durchführen lässt [124], und diese Linearkombination für die Auswertung von (8.50) zu verwenden.

Kapitel 9

Das Spektrum des kollinearen Zee-Helium-Atoms

Bevor wir das Verhalten der kollinearen Frozen-Planet-Konfiguration von Helium im externen elektromagnetischen Feld studieren, sollen in diesem Kapitel zunächst einmal die wesentlichen Eigenschaften der *ungestörten* kollinearen Konfiguration erörtert werden. Im Mittelpunkt unseres Interesses steht dabei die Frage, inwieweit die reguläre Struktur des dieser Konfiguration zugrunde liegenden klassischen Phasenraums das quantenmechanische System beeinflußt. In Abschnitt 9.1 und 9.2 werden zunächst die Energien und Ionisationsbreiten der autoionisierenden Zustände dieses Systems analysiert. Es wird gezeigt, daß diese Ionisationsbreiten oberhalb der Quantenzahl $N = 4$ des inneren Elektrons exponentiell mit N abnehmen. Diese exponentielle Abnahme wird darauf zurückgeführt, daß die entsprechenden Quantenzustände innerhalb des Gebiets gebundener regulärer Bewegung im klassischen Phasenraum lokalisiert sind und nur über dynamisches Tunneln an das Ionisationskontinuum gekoppelt sind. Die Lokalisierung dieser Zustände wird in Abschnitt 9.3 anhand der Phasenraumprojektion bzw. Husimi-Verteilung der entsprechenden Wellenfunktionen explizit dargestellt.

9.1 Energien der autoionisierenden Zustände

Abgesehen von Arbeiten, in denen die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den geladenen Teilchen durch ein “soft core” Potential ersetzt wurde (etwa [140]), wurde die Quantenmechanik des eindimensionalen Helium-Atoms bislang nur von Blümel und Reinhardt untersucht, die sich auf die eZe -Konfiguration (bei der beide Elektronen auf entgegengesetzten Seiten des Kerns angeordnet sind) konzentrierten [141, 142]. In diesen Untersuchungen wurde gezeigt, daß das Spektrum des kollinearen Helium-Atoms in der eZe -Konfiguration sich durch typische Signaturen klassisch chaotischer Systeme auszeichnet. So tritt bereits ab der Quantenzahl $N \simeq 5$ ein energetischer Überlapp von verschiedenen Zustandsserien auf, der zu einer

beträchtlichen Mischung der entsprechenden Zustände führt. Des weiteren wurde ermittelt, daß oberhalb $N \sim 30$ ein „Ericson-Regime“ überlappender Resonanzen vorliegt [143], in dem die Breiten der autoionisierenden Zustände von vergleichbarer Größe bzw. größer sind als die mittleren Abstände benachbarter Niveaus.

Im Gegensatz zu *eZe*-Helium ist die klassische Dynamik der kollinearen *Zee*-Konfiguration von Helium nahezu vollständig *regulär*. Konsequenterweise ergibt sich für dieses System ein „reguläres“ Quantenspektrum, in dem die autoionisierenden Zustände durch nahezu gute Quantenzahlen charakterisiert sind: die Quantenzahl N , die der Wirkung der Kepler-Oszillation des inneren Elektrons entspricht, sowie die Quantenzahl n , die sich aus der Quantisierung der langsamen Oszillation des äußeren Elektrons um die Gleichgewichtslage ergibt. Abb. 9.1 zeigt die Energien und Ionisationsbreiten der autoionisierenden Zustände für $N \leq 10$. Wir sehen, daß Zustandsserien zu verschiedenen Quantenzahlen N des inneren Elektrons in diesem Bereich von N deutlich voneinander getrennt sind (und somit eine eindeutige Identifizierung der Quantenzahlen der Zustände innerhalb dieser Serien erlauben).

In der Tat zeigt sich, daß ein energetischer Überlapp von Zustandsserien zu verschiedenen Quantenzahlen N erst ab $N = 20$ auftritt. Dies ergibt sich bereits aus dem effektiven Potential (2.6), das die langsame Oszillation des äußeren Elektrons um die Gleichgewichtslage beschreibt. Wie man Abb. 2.4 entnehmen kann, beträgt der Wert des effektiven Potentials im Minimum $V_{\min} \simeq -0.22N^{-2}$. Eine untere Grenze für die Energie des niedrigsten Zustands der Serie zur Quantenzahl N ist damit durch

$$E_{N,\min} = -\frac{Z^2}{2N^2} + V_{\min} \stackrel{Z=2}{\simeq} -\frac{2.22}{N^2} \quad (9.1)$$

gegeben. Aus der Forderung, daß diese Energie unterhalb der Ionisationsschwelle zur Quantenzahl $N - 1$ liegen soll,

$$E_{N,\min} \leq E_{N-1}^{(\text{thr})} = -\frac{2}{(N-1)^2}, \quad (9.2)$$

ergibt sich damit die Mindestquantenzahl, ab der Serien zu verschiedenen Quantenzahlen überlappen, zu $N = 20$.

Tab. 9.1 vergleicht die Energien der jeweils niedrigsten Zustände ($n = 1$) der Serien zu den Quantenzahlen $N = 3 \dots 10$ mit den Energien der von Richter, Wintgen und Mitarbeitern [17] im dreidimensionalen Helium-Atom berechneten Frozen-Planet-Zustände, die sich durch verschwindende Anregungen bezüglich transversaler Freiheitsgrade auszeichnen und damit die dreidimensionalen Entsprechungen der Zustände des eindimensionalen Systems darstellen. Wir sehen, daß die Energien der eindimensionalen und der dreidimensionalen Frozen-Planet-Zustände gut übereinstimmen, wobei der relative Unterschied zwischen diesen Energien mit zunehmendem N kleiner wird. Da die Elektronen im dreidimensionalen Konfigurationsraum einander in transversaler Richtung ausweichen können, liegen die Energien der Zustände im dreidimensionalen Helium-Atom etwas niedriger als im kollinearen *Zee*-Helium.

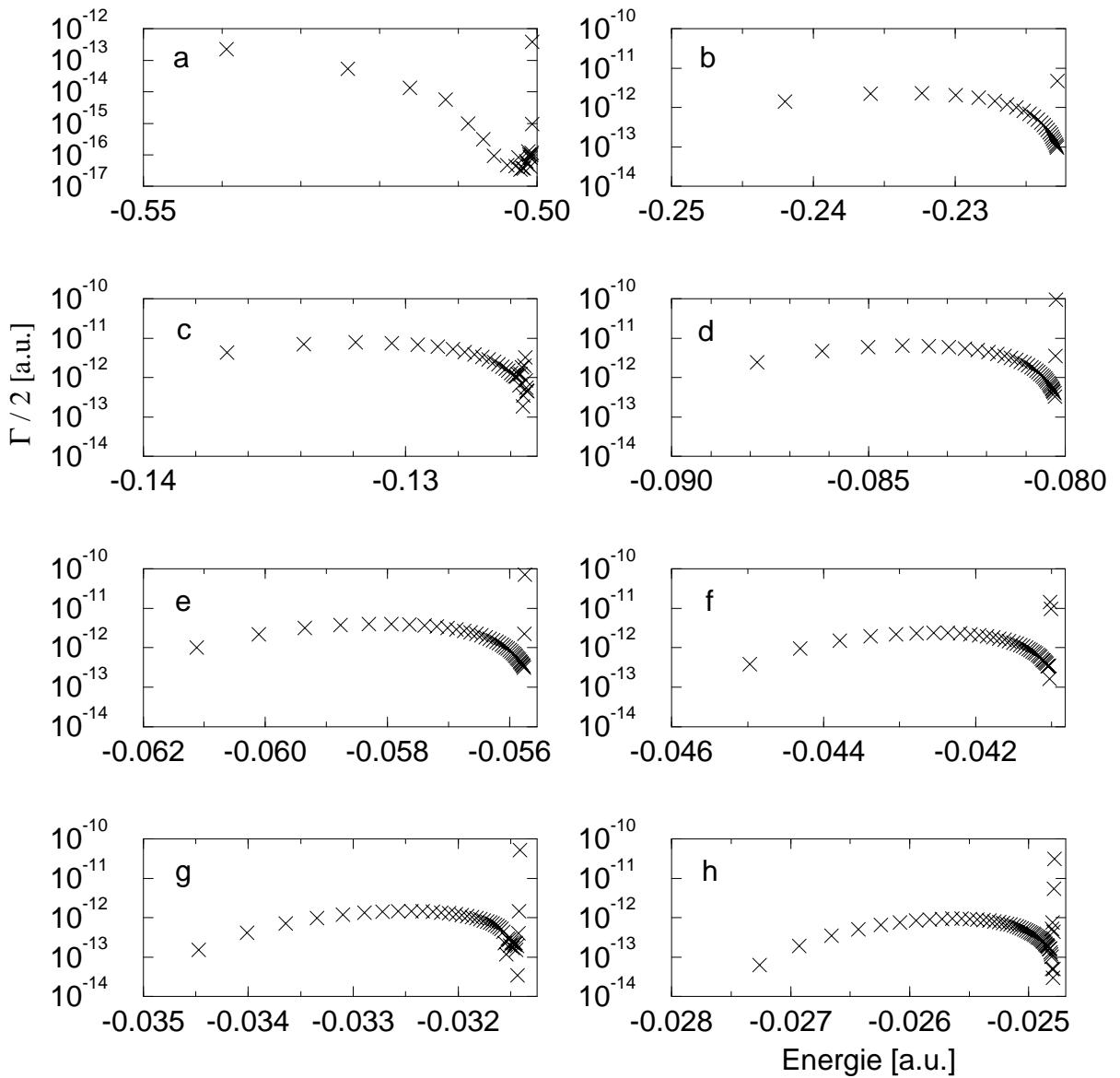


Abb. 9.1: Spektrum des kollinearen Zee Helium-Atoms. Aufgetragen sind die Energien und Ionisationsbreiten der (durch Kreuze gekennzeichneten) autoionisierenden Zustände, die den Serien zu den Quantenzahlen (a) $N = 2$, (b) $N = 3$, (c) $N = 4$, (d) $N = 5$, (e) $N = 6$, (f) $N = 7$, (g) $N = 8$, (h) $N = 9$ angehören ($\Gamma/2$ bezeichnet die halbe Breite bei halbem Maximum der autoionisierenden Resonanz (HWHM)). Wir sehen, daß Zustandsserien zu verschiedenen Quantenzahlen N deutlich voneinander getrennt sind. Die reguläre Abfolge der Zustände im Spektrum ist die unmittelbare Manifestation der Regularität der zugrunde liegenden klassischen Dynamik. Zu beachten ist insbesondere, wie die Ionisationsbreiten für $N \leq 4$ mit zunehmendem N zunehmen (a–c), oberhalb $N = 4$ jedoch stark abfallen (c–h). Dieses Verhalten der Ionisationsbreiten deutet an, daß ab $N \simeq 4$ die autoionisierenden Zustände vollständig innerhalb des Gebiets gebundener klassischer Bewegung lokalisiert sind.

Tab. 9.1: Energien der kollinearen und der dreidimensionalen Frozen-Planet-Zustände. $E^{(1D)}$ bezeichnet die Energie des niedrigsten Zustands ($n = 1$) der Serie zur Quantenzahl N des inneren Elektrons im kollinearen System. $E^{(3D)}(^1S)$ und $E^{(3D)}(^3S)$ bezeichnen die aus Tab. 1 in [17] entnommenen Energien der Singulett- und Triplet-Zustände der dreidimensionalen Frozen-Planet-Konfiguration, die sich durch verschwindende Anregungen in den kollinearen und transversalen Freiheitsgraden auszeichnen, zur Hauptquantenzahl N des inneren Elektrons. Die Energien sind in atomaren Einheiten gegeben.

N	$E^{(1D)}$	$E^{(3D)}(^1S)$	$E^{(3D)}(^3S)$
3	-0.2420	-0.2574	-0.2500
4	-0.1368	-0.1411	-0.1401
5	-0.08783	-0.08957	-0.08947
6	-0.06112	-0.06205	-0.06204
7	-0.04497	-0.04554	-0.04554
8	-0.03447	-0.03484	-0.03484
9	-0.02726	-0.02752	-0.02752
10	-0.02210	-0.02228	-0.02228

9.2 Ionisationsbreiten

Der Einfluß der regulären Struktur des zugrunde liegenden klassischen Phasenraums manifestiert sich bereits ab der Quantenzahl $N = 4$ des inneren Elektrons. Dies ergibt sich unmittelbar aus dem Verhalten der *Ionisationsbreiten* der autoionisierenden Zustände als Funktion von N . Wir sehen in Abb. 9.1, daß diese Breiten für $N \leq 4$ mit zunehmendem N anwachsen, oberhalb dieser Quantenzahl jedoch stark abnehmen.

Die Abnahme der Ionisationsbreiten als Funktion von N ist ein unmittelbarer Hinweis darauf, daß die entsprechenden Zustände auf Gebieten *gebundener* regulärer Bewegung im klassischen Phasenraum lokalisiert sind. In einem derartigen Gebiet ist eine Kopplung an das Kontinuum nur über „dynamisches Tunneln“ [94] durch die regulären Phasenraumbarrieren der klassischen Dynamik möglich (im Fall der kollinearen Frozen-Planet-Konfiguration ist dieser Tunnelvorgang mit der Brechung der adiabatischen Invarianz der Wirkung des inneren Elektrons assoziiert [17]). Ähnlich wie bei Systemen mit einem Freiheitsgrad ist die Rate dieses Tunnelprozesses proportional $\exp(-S_N)$, wobei S_N die klassische Wirkung darstellt, die die Höhe der Barrieren im „verbotenen“ Bereich des klassischen Phasenraums bei der Wirkung N charakterisiert. Da diese Wirkung unter einer Skalierungstransformation in gleicher Weise wie N transformiert wird, also $S_N = NS_1$ gilt, erhalten wir für die Tunnel- bzw. Ionisationsrate des Quantenzustands, der auf dem gebundenen Gebiet des klassischen Phasenraums lokalisiert

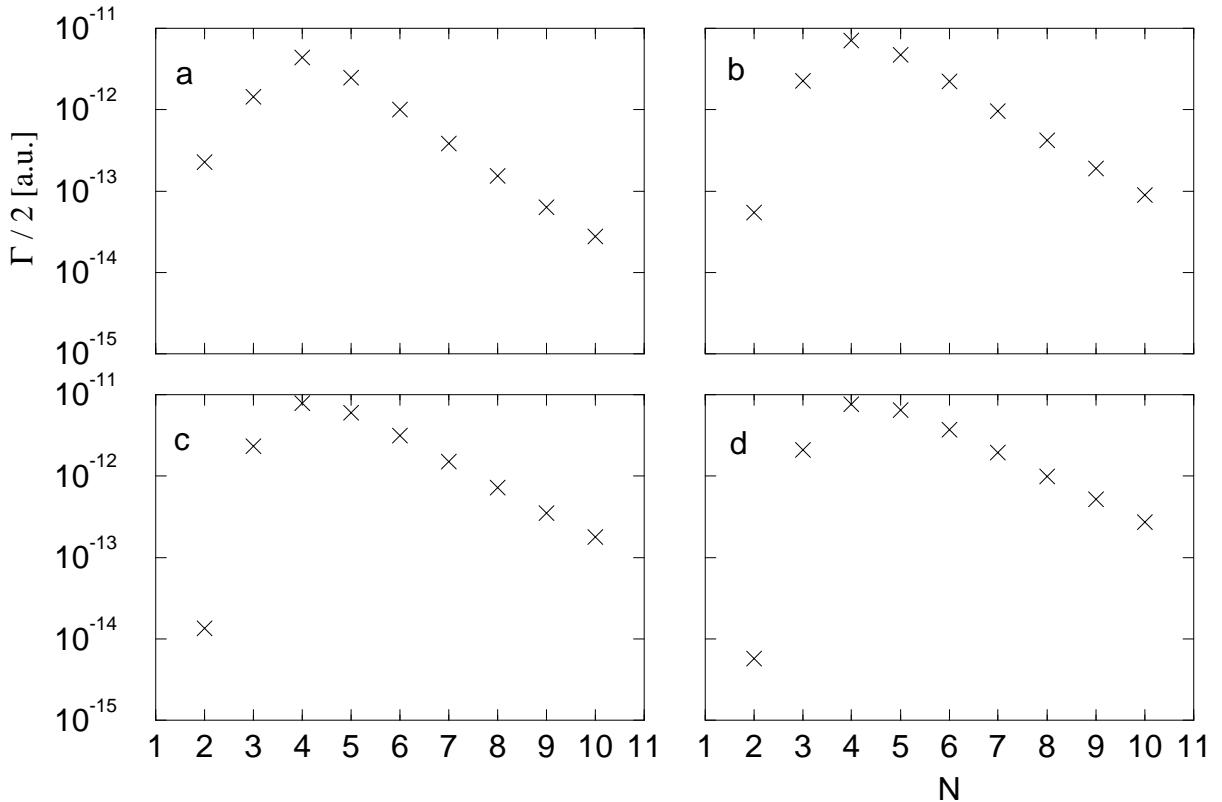


Abb. 9.2: Ionisationsbreiten (HWHM) der jeweils vier niedrigsten autoionisierenden Zustände einer Serie – also der Zustände zu den Quantenzahlen (a) $n = 1$, (b) $n = 2$, (c) $n = 3$, (d) $n = 4$ – in Abhängigkeit der Quantenzahl N . Wir sehen, daß diese Breiten unterhalb $N = 4$ mit zunehmendem N zunehmen, oberhalb $N = 4$ jedoch *exponentiell* abfallen. Diese exponentielle Abnahme ist eine unmittelbare Manifestation der Tatsache, daß die zugehörigen Eigenfunktionen auf einem Gebiet *gebundener* Bewegung im *regulären* klassischen Phasenraum lokalisiert sind. Eine Kopplung aus diesem Gebiet an das Ionisationskontinuum ist nur über dynamisches Tunneln durch die regulären Barrieren des Phasenraums möglich. Die Rate dieses Tunnelprozesses nimmt mit der klassischen Wirkung, die die Höhe der Barrieren im verbotenen Bereich des Phasenraums charakterisiert, exponentiell ab und ist damit aufgrund des Skalierungsverhaltens der Wirkung (3.11) proportional $\exp(-NS_1)$. Aus der Abnahme der Ionisationsbreiten oberhalb $N = 4$ läßt sich die skalierte Wirkung S_1 , die die Höhe der Barrieren für $N = 1$ charakterisiert, numerisch bestimmen. Wir erhalten konkret (a) $S_1 \simeq 0.90$ für $n = 1$, (b) $S_1 \simeq 0.80$ für $n = 2$, (c) $S_1 \simeq 0.71$ für $n = 3$, (d) $S_1 \simeq 0.64$ für $n = 4$.

Tab. 9.2: Ionisationsbreiten der kollinearen und der dreidimensionalen Frozen-Planet-Zustände. $\Gamma^{(1D)}/2$ bezeichnet die halbe Breite bei halbem Maximum der autoionisierenden Resonanz (HWHM) des niedrigsten Zustands ($n = 1$) der Serie zur Quantenzahl N des inneren Elektrons im kollinearen System. $(\Gamma^{(3D)}/2)(^1S)$ und $(\Gamma^{(3D)}/2)(^3S)$ bezeichnen die aus Tab. 5 in [17] entnommenen Ionisationsbreiten (HWHM) der Singulett- und Triplet-Zustände der dreidimensionalen Frozen-Planet-Konfiguration, die sich durch verschwindende Anregungen in den kollinearen und transversalen Freiheitsgraden auszeichnen, zur Hauptquantenzahl N des inneren Elektrons. Die Ionisationsbreiten sind in atomaren Einheiten gegeben.

N	$\Gamma^{(1D)}/2$	$(\Gamma^{(3D)}/2)(^1S)$	$(\Gamma^{(3D)}/2)(^3S)$
3	$1.4 \cdot 10^{-12}$	$1.1 \cdot 10^{-5}$	$6.8 \cdot 10^{-6}$
4	$4.4 \cdot 10^{-12}$	$1.2 \cdot 10^{-5}$	$4.4 \cdot 10^{-6}$
5	$2.5 \cdot 10^{-12}$	$2.0 \cdot 10^{-6}$	$1.8 \cdot 10^{-7}$
6	$1.0 \cdot 10^{-12}$	$5.6 \cdot 10^{-7}$	$3.3 \cdot 10^{-8}$
7	$3.9 \cdot 10^{-13}$	$2.0 \cdot 10^{-7}$	$3.8 \cdot 10^{-7}$
8	$1.5 \cdot 10^{-13}$	$3.7 \cdot 10^{-7}$	$1.4 \cdot 10^{-7}$
9	$6.4 \cdot 10^{-14}$	$1.2 \cdot 10^{-6}$	$2.2 \cdot 10^{-8}$
10	$2.8 \cdot 10^{-14}$	$5.3 \cdot 10^{-7}$	$3.5 \cdot 10^{-8}$

ist, eine *exponentielle* Abnahme mit N :

$$\Gamma \propto \exp(-NS_1). \quad (9.3)$$

Tatsächlich finden wir eine derartige exponentielle Abnahme der Ionisationsbreiten für die Zustände des kollinearen Zee-Helium-Atoms. Dies ist in Abb. 9.2 gezeigt, in der die Breiten der niedrigsten vier Zustände einer Serie (also der Zustände zu $n = 1, n = 2, n = 3$ und $n = 4$) in Abhängigkeit von N aufgetragen sind. Wir erkennen, daß die Abnahme der Breiten oberhalb $N = 4$ sehr gut durch eine Exponentialfunktion der obigen Form (9.3) beschrieben werden kann. Aus dieser exponentiellen Abnahme läßt sich unmittelbar die skalierte Wirkung S_1 bestimmen, die die Höhe der Tunnelbarrieren im Phasenraum für $N = 1$ charakterisiert. Aus den Breiten des Zustands zu $n = 1$ erhalten wir konkret $S_1 \simeq 0.9$.

Tab. 9.2 vergleicht die Ionisationsbreiten der jeweils niedrigsten Zustände ($n = 1$) der Serien zu den Quantenzahlen $N = 3 \dots 10$ mit den Ionisationsbreiten der entsprechenden dreidimensionalen Frozen-Planet-Zustände [17]. Wir sehen, daß sich die Ionisationsbreiten der eindimensionalen und der dreidimensionalen Zustände um etliche Größenordnungen voneinander unterscheiden: Während die Breiten der Zustände des kollinearen Systems im Bereich $N = 5 \dots 10$ von 10^{-12} auf 10^{-14} a.u. abfallen, liegen die Breiten der entsprechenden Zustände im dreidimensionalen Atom für $N = 5 \dots 10$ im Bereich von $10^{-6} \dots 10^{-8}$ a.u. (und weisen

darüber hinaus starke Fluktuationen auf, die auf die gemischt regulär-chaotische Struktur des klassischen Phasenraums der dreidimensionalen Bewegung zurückzuführen sind; siehe dazu Abschnitt 10.3). Wir schließen daraus, daß im dreidimensionalen System *effiziente* Zerfallskanäle existieren, die mit den *transversalen* Freiheitsgraden der Frozen-Planet-Konfiguration assoziiert sind – also etwa mit dynamischem Tunneln durch die transversalen Phasenraumbarrieren oder einem im kollinearen System verbotenen Übergang des inneren Elektrons auf die andere Seite des Kerns (der einen Wechsel von einer stabilen *Zee*-Anordnung zu einer instabilen *eZe*-Anordnung induziert; siehe hierzu auch [60]). Die Ionisation der dreidimensionalen Frozen-Planet-Zustände erfolgt damit offenbar dominant über derartige transversale Freiheitsgrade.

9.3 Wellenfunktionen

Ein genauer Aufschluß über die Lokalisierungseigenschaften der autoionisierenden Zustände ergibt sich aus dem Studium der *Wellenfunktionen* dieser Zustände. Da das auf den kollinearen Konfigurationsraum eingeschränkte atomare System nur über zwei Freiheitsgrade verfügt, lassen sich diese Wellenfunktionen, wie bereits in Abschnitt 8.5 erwähnt wurde, in nahezu vollständiger Weise auf einer zweidimensionalen Fläche visualisieren. Abb. 9.3 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte der drei niedrigsten Zustände der Serie zur Quantenzahl $N = 8$ als Funktion der Koordinaten der Elektronen. Entsprechend der Tatsache, daß die Bewegungen der Elektronen in der klassischen Dynamik approximativ separieren, läßt sich diese Dichteverteilung in guter Näherung als Produkt zweier unabhängiger Ein-Elektron-Dichten darstellen. Entlang der Koordinate des inneren Elektrons erhalten wir die Struktur einer wasserstoffartigen Eigenfunktion zur Knotenzahl $n_r = N - 1 = 7$. In der Koordinate des äußeren Elektrons ist die Wellenfunktion durch die Form des effektiven adiabatischen Potentials (Abb. 9.3d) geprägt; die Zustände mit $n = 1$, $n = 2$ und $n = 3$ in Abb. 9.3a–c entsprechen dem Grundzustand, dem ersten angeregten Zustand, sowie dem zweiten angeregten Zustand des effektiven Potentials zur Wirkung $N = 8$ des inneren Elektrons.

Der unmittelbare Zusammenhang zwischen der quantenmechanischen Wellenfunktion und dem zugrunde liegenden klassischen Phasenraum läßt sich anhand der in Abschnitt 8.5 beschriebenen Phasenraumprojektion bzw. Husimi-Verteilung dieser Wellenfunktion herstellen. Dazu berechnen wir den Überlapp dieser Wellenfunktion mit einem um einen gegebenen Ort z und einen gegebenen Impuls p_z zentrierten Gaußschen Wellenpaket in der Koordinate des äußeren Elektrons, wobei die Koordinate des inneren Elektrons auf einen festen Wert nahe $z_2 = 0$ fixiert ist. Auf diese Weise erhalten wir das quantenmechanische Analogon zur Visualisierung des klassischen Phasenraums; diese wird gemäß der in Abschnitt 4.1 beschriebenen Methode des doppelten Poincaré-Schnitts durchgeführt, wobei wir hier, im Gegensatz zu Kap. 4–7, die Wirkung N des inneren Elektrons fixieren. Abb. 9.4 zeigt die Phasenraum-

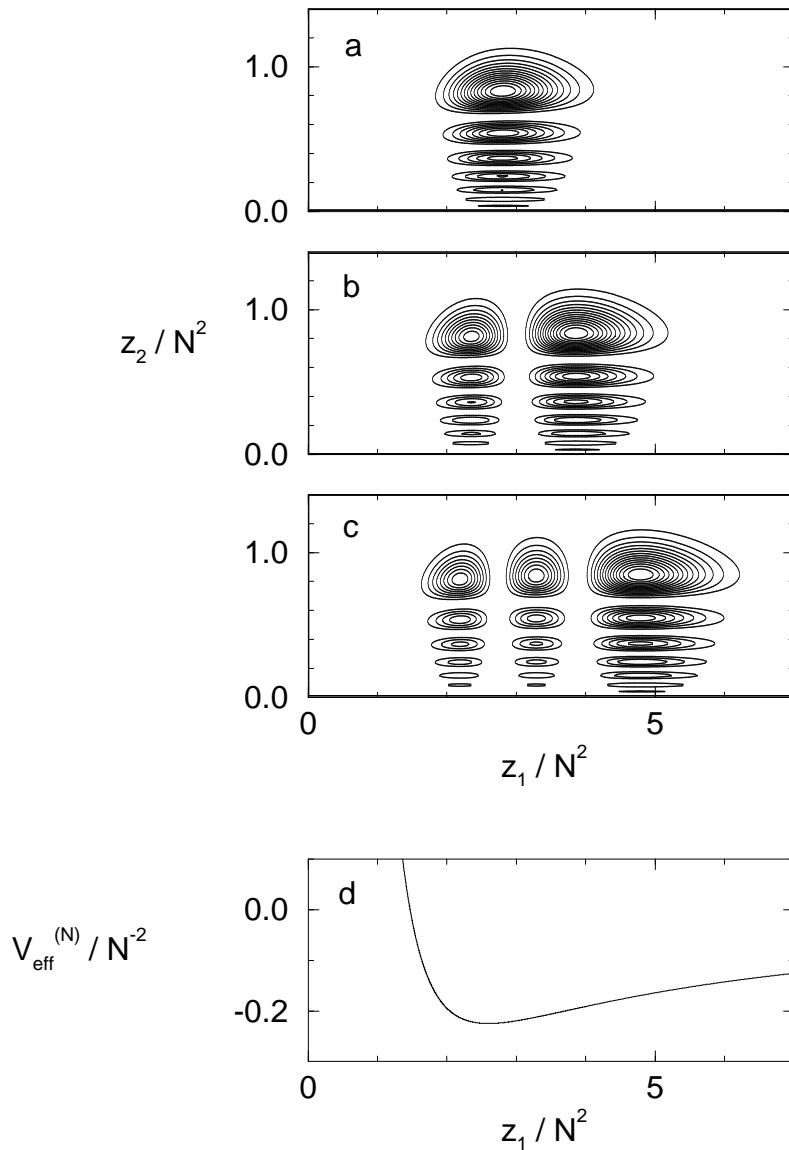


Abb. 9.3: Wahrscheinlichkeitsdichte der drei niedrigsten Zustände zur Quantenzahl $N = 8$ im Konfigurationsraum. Die Abbildungen (a – c) zeigen Konturplots der Wahrscheinlichkeitsdichte (mit 15 äquidistanten Niveaus) in Abhängigkeit der Koordinaten der Elektronen für die Zustände (a) $n = 1$, (b) $n = 2$, (c) $n = 3$. Wir sehen, daß die DichteVerteilung in guter Näherung als Produkt zweier unabhängiger Ein-Elektron-Dichten dargestellt werden kann. Während in der Koordinate des inneren Elektrons die Wahrscheinlichkeitsdichte näherungsweise durch die Struktur einer wasserstoffartigen Eigenfunktion zur Knotenzahl $n_r = N - 1 = 7$ gegeben ist, entsprechen in der Koordinate des äußeren Elektrons die Zustände verschiedenen Anregungen innerhalb des effektiven adiabatischen Potentials, das in (d) gezeigt ist: nämlich dem Grundzustand (a), dem ersten (b) und dem zweiten angeregten Zustand (c) des effektiven Potentials zur Quantenzahl $N = 8$.

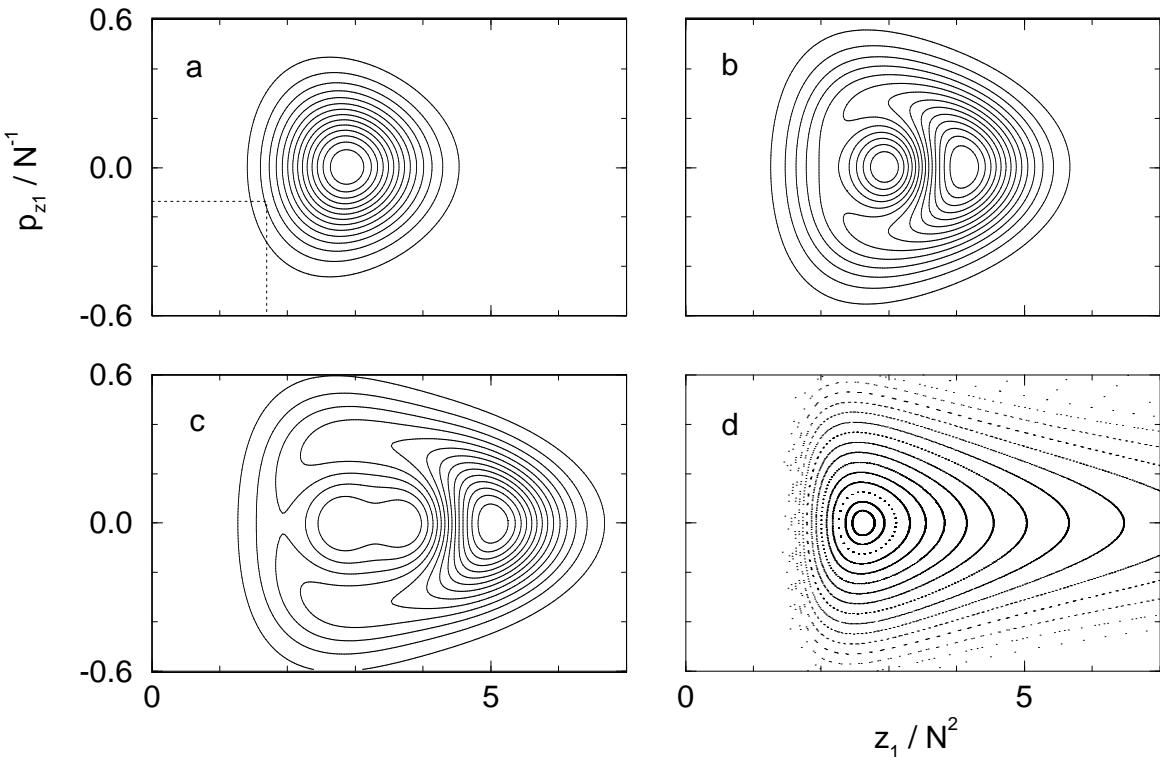


Abb. 9.4: (a – c) Husimi-Verteilungen der drei niedrigsten Zustände der Serie zur Quantenzahl $N = 8$. Die Abbildungen (a – c) zeigen Konturplots der Husimi-Verteilung (mit 15 äquidistanten Niveaus) in Abhängigkeit der Phasenraumvariablen des äußeren Elektrons für die Zustände (a) $n = 1$, (b) $n = 2$, (c) $n = 3$. Das Quadrat unten links in (a) markiert die Größe von $2\pi\hbar$. (d) Poincaré-Schnitt des klassischen Phasenraums. Man beachte die ausgeprägte Lokalisierung der quantenmechanischen Zustände entlang von regulären Tori der klassischen Dynamik, die unterschiedlichen Anregungen innerhalb des effektiven Potentials entsprechen. Während der Zustand zu $n = 1$ im Zentrum des regulären Gebiets (bzw. im Minimum des effektiven Potentials) lokalisiert ist, sind die Zustände zu $n = 2$ und $n = 3$ auf Tori lokalisiert, die bei $z_1 \simeq 4$ ($n = 2$) bzw. $z_1 \simeq 5$ ($n = 3$) die $p_{z1} = 0$ Achse in der Poincaré-Schnittfläche schneiden.

projektionen der drei niedrigsten Zustände der Serie zur Quantenzahl $N = 8$. Deutlich läßt sich erkennen, daß die quantenmechanischen Eigenfunktionen entlang regulärer Tori der gebundenen klassischen Dynamik der Frozen-Planet-Konfiguration lokalisiert sind.

Das Verhalten der Ionisationsbreiten als Funktion von N (Abb. 9.2) deutet an, daß eine derartige Lokalisierung auf den gebundenen Strukturen des klassischen Phasenraums für Zustände mit Quantenzahlen $N \geq 4$ vorliegt. Dies zeigt sich tatsächlich in Abb. 9.5, in der wir die Husimi-Dichten der jeweils zwei niedrigsten Zustände der Serien zu den Quantenzahlen $N = 2, N = 3, N = 4$ auftragen. Für $N = 2$ (Abb. 9.2a, b) weisen die Zustände zwar eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb des Phasenraumgebiets gebundener Bewegung auf, sind jedoch nicht vollständig auf dieses Gebiet beschränkt. Insbesondere höherangeregte Zustände dieser Serie weisen einen erheblichen Überlapp mit dem Gebiet ungebundener Bewegung auf (Abb. 9.2b). Eine vollständige Lokalisierung der Zustände entlang der Tori der gebundenen klassischen Dynamik liegt erst bei bzw. oberhalb $N = 4$ vor. Wie man durch Vergleich von Abb. 9.5 und Abb. 9.4 erkennt, wird diese Lokalisierung mit zunehmendem N immer ausgeprägter. Dies entspricht der Tatsache, daß die effektive, auf die Struktur des klassischen Phasenraums bezogene Größe des Wirkungsquantums \hbar mit zunehmendem N proportional $1/N$ abnimmt, wodurch, entsprechend der semiklassischen Quantisierungsregel (6.1), die Zahl der Quantenzustände innerhalb eines gegebenen Phasenraumgebiets zunimmt bzw. die Ausdehnung eines einzelnen Quantenzustands bezogen auf dieses Phasenraumgebiet kleiner wird.

Bei der Interpretation der Husimi-Verteilung als Dichte des Zustands im klassischen Phasenraum ist generell Vorsicht geboten. So scheint die Phasenraumprojektion des Zustands mit den Quantenzahlen $N = 8, n = 3$ zu suggerieren, daß dieser vollständig in der Umgebung des äußeren Umkehrpunkts des äußeren Elektrons lokalisiert ist (Abb. 9.4c). Wie man der Dichteverteilung im Konfigurationsraum entnehmen kann (Abb. 9.3c), ist die Wellenfunktion dieses Zustands tatsächlich auf den *gesamten* Bereich des klassischen Orbits verteilt. Da jedoch das Maximum der Dichte am inneren Umkehrpunkt relativ schmal ist – was darauf zurückzuführen ist, daß die klassische Dynamik in der Umgebung dieses Umkehrpunkts durch eine relativ große Variation des Impulses gekennzeichnet ist – ist der Überlapp der Wellenfunktion mit einem um diesen Umkehrpunkt zentrierten Gaußschen Wellenpaket, dessen Squeezing-Parameter ω_s der Dynamik in der Umgebung des Minimums des effektiven Potentials angepaßt ist (und dessen Breite im Ortsraum in etwa der Breite des niedrigsten Zustands dieser Serie entspricht), sehr klein im Gegensatz zum Überlapp mit dem um den äußeren Umkehrpunkt zentrierten Wellenpaket und liefert damit praktisch keinen Beitrag zur Husimi-Verteilung dieser Wellenfunktion. Tatsächlich läßt sich durch eine Erhöhung der Squeezing-Frequenz ω_s (also durch den Überlapp der Wellenfunktion mit einem im Ortsraum schmäleren Wellenpaket) die Verteilung der Wellenfunktion in der Umgebung des inneren

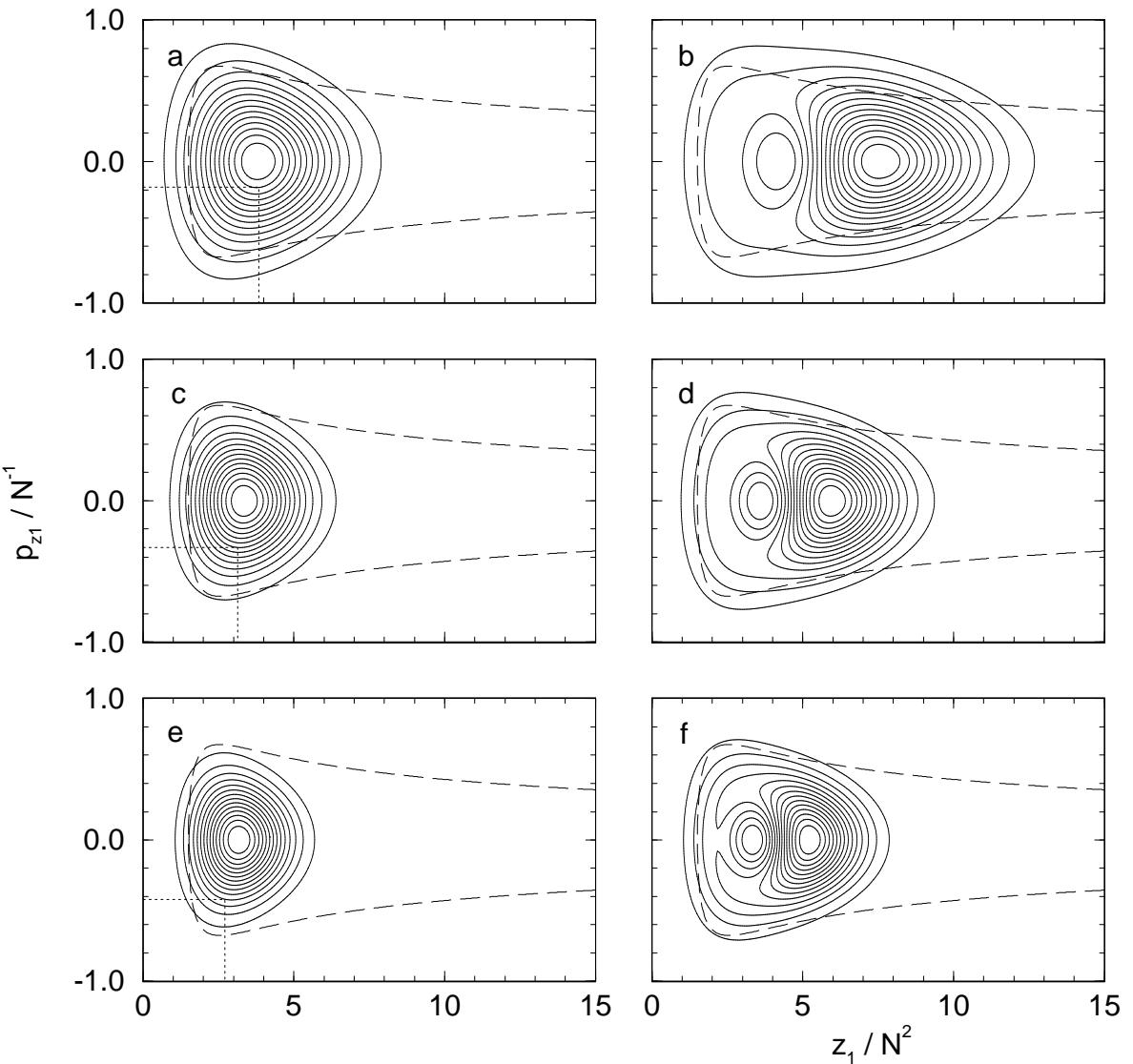


Abb. 9.5: Husimi-Verteilungen der zwei niedrigsten Zustände $n = 1$ (a, c, e) und $n = 2$ (b, d, f) zu den Quantenzahlen $N = 2$ (a, b), $N = 3$ (c, d) und $N = 4$ (e, f). Die gestrichelte Linie markiert die Separatrix zwischen der gebundenen und der ungebundenen Dynamik im klassischen Phasenraum. Die Quadrate unten links in (a, c, e) markieren die Größe von $2\pi\hbar$. Wir sehen, daß für $N = 2$ die Dichteverteilungen der autoionisierenden Zustände nicht vollständig auf das Gebiet gebundener klassischer Bewegung beschränkt ist. Insbesondere höherangeregte Zustände dieser Serie weisen einen erheblichen Überlapp mit dem Gebiet ungebundener Bewegung auf (b). Eine vollständige Lokalisierung der Zustände innerhalb des Gebiets gebundener Bewegung setzt erst oberhalb $N = 3$ ein. Entsprechend der Tatsache, daß die effektive, auf die Struktur des klassischen Phasenraums bezogene Größe des Wirkungsquantums mit zunehmendem N proportional zu $1/N$ abnimmt, wird diese Lokalisierung zunehmend ausgeprägter mit zunehmendem N (vgl. hierzu auch die Husimi-Verteilungen der Zustände zu $N = 8$ in Abb. 9.4).

Umkehrpunkts besser hervorheben. Dies zeigt Abb. 9.6, in der die Phasenraumprojektion des Zustands mit den Quantenzahlen $N = 8, n = 3$ für verschiedene Werte der Squeezing-Frequenz ω_s aufgetragen sind.

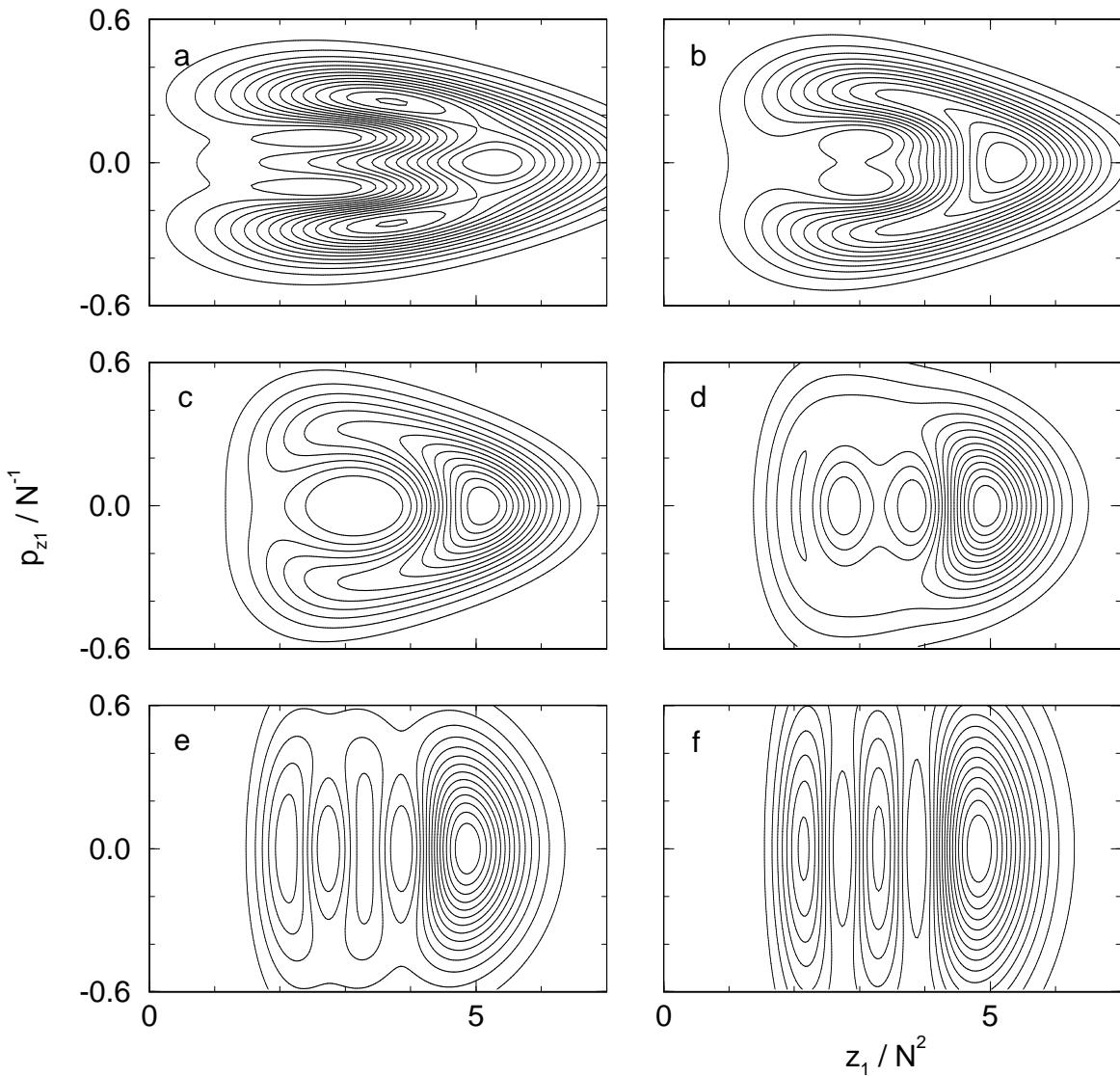


Abb. 9.6: Husimi-Verteilungen des Zustands zu $N = 8$ und $n = 3$ für verschiedene Werte der Squeezing-Frequenz ω_s (gemäß (8.56)). (a) $\omega_s = 0.05 N^{-3}$; (b) $\omega_s = 0.1 N^{-3}$; (c) $\omega_s = 0.2 N^{-3}$; (d) $\omega_s = 0.5 N^{-3}$; (e) $\omega_s = 1 N^{-3}$; (f) $\omega_s = 2 N^{-3}$. Wie wir sehen, bestimmt die Wahl von ω_s die Unschärfe der Husimi-Verteilung in Ort und Impuls: Maximale Auflösung in der Impulskoordinate p bei minimaler Auflösung in der Ortskoordinate x erhalten wir für kleine ω_s (a,b), maximale Ortsauflösung bei minimaler Impulsauflösung erhalten wir für große ω_s (e,f). Der Übergang von einer „impulsaufgelösten“ zu einer „ortsauflösten“ Husimi-Verteilung findet in der Umgebung der intrinsischen Frequenzskala $\omega_I \simeq 0.3 N^{-3}$ statt (c, d). In der Umgebung dieser Frequenz lässt sich die Lokalisierung des Zustands auf Strukturen des zugrunde liegenden klassischen Phasenraums besonders gut visualisieren.

Kapitel 10

Das kollinare Helium-Atom unter externem Antrieb

Nachdem in den vorangegangenen Kapitel die wesentlichen Eigenschaften der Eigenzustände des *ungestörten* kollinearen Systems aufgezeigt wurden, ist in diesem Kapitel zu untersuchen, wie sich die kollinare Konfiguration unter Einfluß eines periodischen Antriebs verhält. Dabei interessieren wir uns insbesondere für die Charakteristika von Eigenzuständen, die mit *regulären* Inseln des klassischen Phasenraums der getriebenen Konfiguration assoziiert sind. Um einen direkten Vergleich zwischen stationären Zuständen, die auf der intrinsischen Insel lokalisiert sind, und nichtdispergierenden Zwei-Elektronen-Wellenpaketen, die auf der feldinduzierten Resonanzinsel lokalisiert sind, zu ermöglichen, wählen wir die Feldparameter F und ω so, daß im klassischen Phasenraum sowohl die intrinsische Insel als auch die feldinduzierte 1:1 Resonanzinsel in gut ausgeprägter Weise vertreten sind. Dies ist, wie Abb. 10.1 zeigt, bei $\omega = 0.2$ und $F = 0.005$ für $N = 1$ der Fall. Bei diesen Feldparametern sind beide Inseln so groß, daß Quantenzustände, die auf ihnen lokalisiert sind, für Quantenzahlen $N < 10$ im Spektrum auftreten. Konkret erhalten wir aus den Querschnittsflächen dieser Inseln über das EBK-Kriterium (Abschnitt 6.2) die Mindestquantenzahlen $N \simeq 6$ für Quantenzustände auf der intrinsischen Insel sowie $N \simeq 7$ für Quantenzustände auf der 1:1 Resonanzinsel.

Damit die klassische Phasenraumstruktur für alle betrachteten Quantenzahlen N gleich bleibt, ist es erforderlich, die Feldparameter entsprechend der Skalierungsgesetze (3.5 – 3.10) gemäß

$$\omega = 0.2 N^{-3}, \quad (10.1)$$

$$F = 0.005 N^{-4} \quad (10.2)$$

zu skalieren. Es empfiehlt sich, „skalierte“ Feldparameter gemäß

$$\omega_0 := \omega N^3, \quad (10.3)$$

$$F_0 := F N^4 \quad (10.4)$$

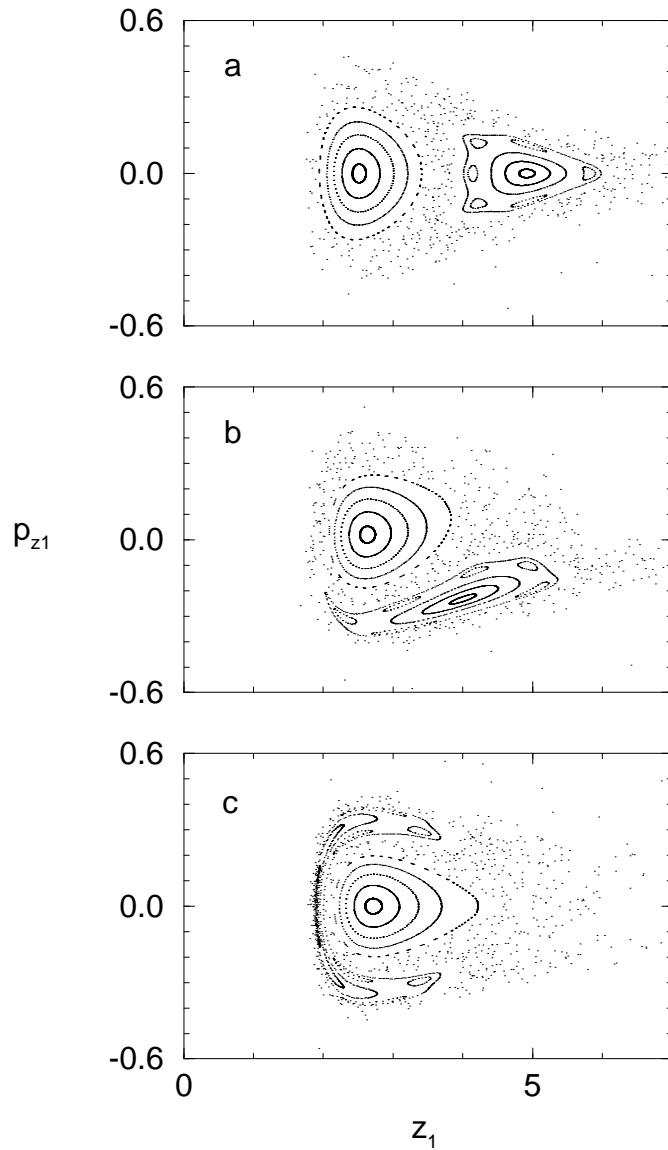


Abb. 10.1: Poincaré-Schnitt des klassischen, kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.2$, $F = 0.005$ zu den Feldphasen (a) $\omega t = 0$, (b) $\omega t = \pi/2$, (c) $\omega t = \pi$. Im Gegensatz zu den Poincaré-Schnitten in Kap. 4–7 wird hier statt der Gesamtenergie die Wirkung des inneren Elektrons gemäß $N = 1$ fixiert. Bei diesen Feldparametern sind sowohl die intrinsische Insel als auch die feldinduzierte 1:1 Resonanzinsel so groß, daß im Spektrum ab Quantenzahlen $N = 5$ des inneren Elektrons sowohl stationäre Quantenzustände auf der intrinsischen Insel als auch nichtdispergierende Wellenpakete auf der 1:1 Resonanzinsel auftreten (in guter Übereinstimmung mit dem EBK-Kriterium, das die Mindestquantenzahlen $N_{\min} \simeq 6$ für die intrinsische und $N_{\min} \simeq 7$ für die 1:1 Resonanzinsel vorhersagt).

einzu führen, die, in Abhängigkeit der Quantenzahl N , die Feldparameter ω, F auf die zu grunde liegende klassische Phasenraumstruktur beziehen. Für jede Serie zur Quantenzahl N betrachten wir damit einen externen Antrieb der skalierten Frequenz $\omega_0 = 0.2$ und der skalierten Feldamplitude $F_0 = 0.005$.

Um zu untersuchen, inwieweit stationäre Zustände auf der intrinsischen Insel und nicht-dispergierende Wellenpakete auf der 1:1 Resonanzinsel durch die feldinduzierte Kopplung von Zuständen innerhalb einer Serie des ungestörten Systems erzeugt werden (es zeigt sich, daß die Kopplungen zwischen Zuständen verschiedener Serien bei den betrachteten Feldparametern und Quantenzahlen keine Rolle spielen), betrachten wir in Abschnitt 10.1 zunächst die Entwicklung dieser Floquet-Zustände in Abhängigkeit der Feldamplitude. Im Anschluß daran analysieren wir die Lokalisierungseigenschaften (Abschnitt 10.2) und Lebensdauern (Abschnitt 10.3) der mit den regulären Inseln assoziierten Zustände. Schließlich untersuchen wir in Abschnitt 10.4, inwieweit durch das Anlegen eines zusätzlichen, statischen elektrischen Feldes, dessen Feldstärke F_{st} in dem für die Stabilisierung der dreidimensionalen Konfiguration relevanten Bereich $0 < F_{\text{st}} < F/2$ liegt (siehe Kap. 7), die Eigenschaften der auf den regulären Inseln lokalisierten Zustände modifiziert werden.

10.1 Floquet-Zustände in Abhängigkeit der Feldamplitude

Bei der Untersuchung der Entwicklung stationärer Zustände und nichtdispergierender Wellenpakete aus Eigenzuständen des ungestörten Systems konzentrieren wir uns auf das Floquet-Spektrum der Serie zur Quantenzahl $N = 8$. Abb. 10.2 zeigt dieses Floquet-Spektrum für $\omega = 0.2 N^{-3} = 0.0003906$ innerhalb der Floquet-Zone zwischen $E = -0.0323906$ und $E = -0.032$ im Grenzfall verschwindender Feldamplitude. Bei $F = 0$ entsprechen die Floquet-Zustände den Eigenzuständen des ungestörten atomaren Systems, deren Energien durch Addition bzw. Subtraktion eines ganzzahligen Vielfachen der Frequenz ω in die Floquet-Zone verschoben sind. Wird die externe Störung eingeschaltet, so tritt eine starke feldinduzierte Wechselwirkung vor allem zwischen denjenigen Zuständen auf, die innerhalb der Floquet-Zone relativ nahe nebeneinander liegen (also nahezu *resonant* gekoppelt sind) und im Phasenraum stark überlappende Dichteverteilungen aufweisen (also durch relativ nahe benachbarte Quantenzahlen gekennzeichnet sind). Dies trifft insbesondere auf die Zustände zu den Quantenzahlen $n = 2$ und $n = 3$ zu, die durch das externe Feld in Form eines Ein-Photonen-Übergangs nahezu resonant gekoppelt sind. Es ist zu erwarten, daß aus der Mischung dieser beiden Zustände das nichtdispergierende Wellenpaket hervorgeht, das auf der 1:1 Resonanzinsel lokalisiert ist. Entsprechend erkennt man durch Vergleich von Abb. 9.4 und Abb. 10.1a, daß die Zustände zu $n = 2$ und $n = 3$ entlang regulärer Tori in dem Phasenraumgebiet lokalisiert sind, in dem sich bei nichtverschwindender Störung die 1:1 Resonanzinsel befindet. Für den Zustand zu $n = 1$ hingegen ist zu erwarten, daß er bei Einschalten des Feldes in einen auf

der intrinsischen Insel lokalisierten, stationären Zustand übergeht.

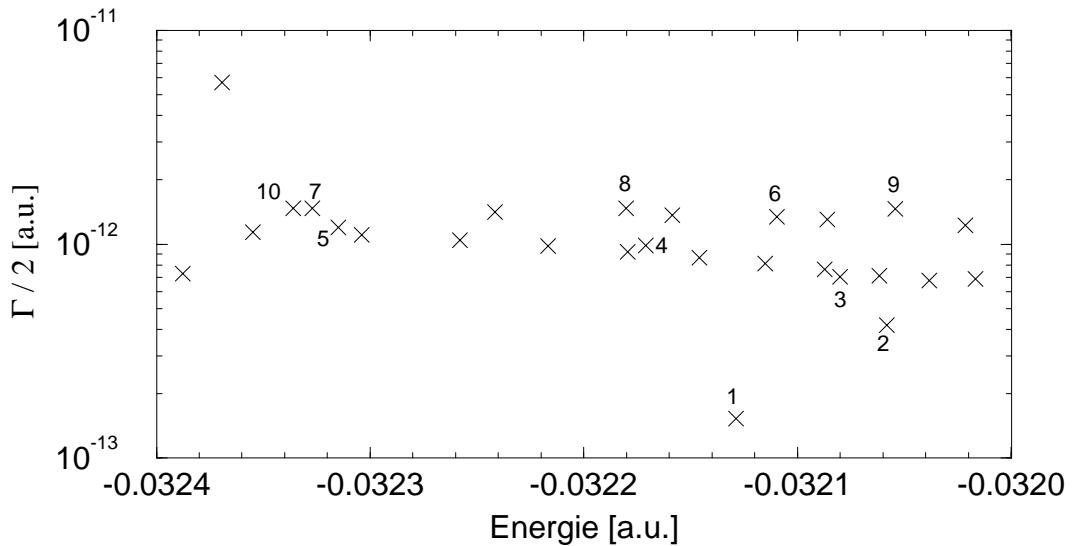


Abb. 10.2: Energien und Ionisationsbreiten (HWHM) der Floquet-Zustände zur Quantenzahl $N = 8$ im Grenzfall verschwindender Feldamplitude $F = 0$. Die Zustände entsprechen den autoionisierenden Zuständen des ungestörten Systems zu $N = 8$, die durch Addition bzw. Subtraktion ganzzahliger Vielfacher von $\omega = 0.0003906$ in die Floquet-Zone zwischen $E = -0.0323906$ und $E = -0.032$ verschoben sind (vgl. Abb. 9.1g). Die ersten zehn Zustände dieser Serie sind durch Nummern gekennzeichnet. Bei Einschalten des externen Feldes tritt eine starke Kopplung vor allem zwischen denjenigen Zuständen auf, die in der Floquet-Zone energetisch nahe nebeneinander liegen (also nahezu resonant gekoppelt sind) und deren Dichteverteilungen im Phasenraum stark überlappen (die also durch relativ nahe benachbarte Quantenzahlen n gekennzeichnet sind). Wie wir sehen, trifft dies insbesondere auf die Zustände zu $n = 2$ und $n = 3$ zu. In der Tat ergibt sich aus der feldinduzierten Kopplung dieser Zustände das mit der 1:1 Resonanz assoziierte nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpaket.

Abb. 10.3 zeigt die Entwicklung des Floquet-Spektrums zur Quantenzahl $N = 8$ als Funktion der Feldamplitude, die in äquidistanten Schritten der Länge $\Delta F_0 = 0.0005$ von $F_0 = 0$ bis $F_0 = 0.01$ variiert ist. Aufgetragen sind in Abb. 10.3a2–d2 die Energieniveaus in der Umgebung derjenigen (durch Kreise gekennzeichneten) Floquet-Zustände, die aus den ungestörten Zuständen zu den Quantenzahlen $n = 1$ (Abb. 10.3a2), $n = 2$ (Abb. 10.3b2), $n = 3$ (Abb. 10.3c2) und $n = 4$ (Abb. 10.3d2) hervorgehen. Zusätzlich zeigen Abb. 10.3a1–d1 die Ionisationsbreiten dieser Floquet-Zustände. Um die Übersichtlichkeit der Abbildung zu gewährleisten, sind im Floquet-Spektrum lediglich diejenigen Niveaus dargestellt, die autoionisierenden Resonanzzuständen entsprechen (d.h. nicht dem Kontinuum angehören).

Wir sehen, daß unter dem Einfluß des äußeren Feldes eine dynamische Verschiebung der

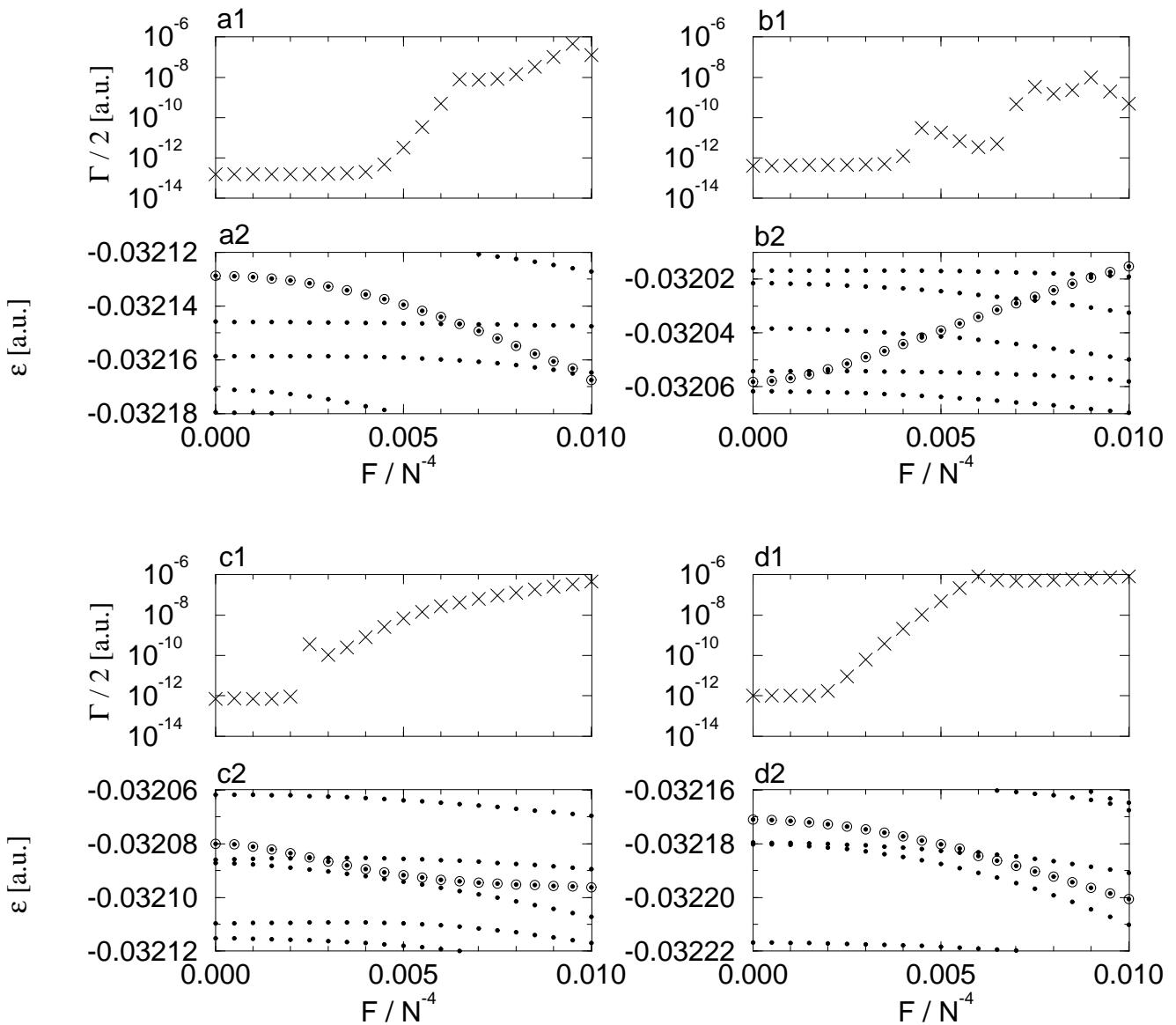


Abb. 10.3: Entwicklung der Floquet-Zustände $n = 1, n = 2, n = 3, n = 4$ zur Quantenzahl $N = 8$.

Gezeigt sind in (a2, b2, c2, d2) Ausschnitte des Floquet-Spektrums, zentriert um die (durch Kreise gekennzeichneten) Floquet-Zustände, die die diabatische Fortsetzung der Zustände zu $n = 1$ (a), $n = 2$ (b), $n = 3$ (c) und $n = 4$ (d) darstellen. Aufgetragen sind jeweils die Quasienergien ϵ in Abhängigkeit der Feldamplitude F bei der Frequenz $\omega_0 = 0.2$. Die Ionisationsbreiten (HWHM) dieser Floquet-Zustände sind entsprechend in (a1, b1, c1, d1) aufgetragen. Wir sehen, daß diese Ionisationsbreiten insbesondere bei vermiedenen Kreuzungen zunehmen, bei denen diese Zustände mit höherangeregten Zuständen der gleichen Serie resonant gekoppelt sind. Auffallend ist darüber hinaus die starke Niveauverschiebung des Zustands zu $n = 2$ (b). In der Tat entspricht dieser Zustand dem auf der 1:1 Resonanzinsel lokalisierten, nichtdispergierenden Wellenpaket.

Niveaus im Floquet-Spektrum stattfindet. Besonders ausgeprägt ist diese Niveauverschiebung bei dem Floquet-Zustand, der aus dem Eigenzustand zur Quantenzahl $n = 2$ des ungestörten Systems hervorgeht. Da die Änderung der Energie mit der Amplitude des treibenden Feldes dem dynamischen Dipolmoment der atomaren Konfiguration entspricht, eine starke Änderung der Energie mit F also auf ein ausgeprägtes Oszillationsverhalten der Wellenfunktion im Konfigurationsraum hinweist, ist daraus bereits zu erkennen, daß dieser Floquet-Zustand dem nichtdispersierenden Wellenpaket entspricht, das auf der 1:1 Resonanzinsel lokalisiert ist. Dies ergibt sich auch aus der Tatsache, daß die Energie dieses Zustands, im Gegensatz zu den Energien der Zustände zu $n = 1$, $n = 3$ und $n = 4$, mit zunehmendem F zunimmt: Wie wir in Abb. 4.3 gesehen haben (bzw. in Abb. 10.11 sehen werden), verschiebt sich die 1:1 Resonanzinsel mit zunehmender Feldamplitude ein wenig zu höheren Energien im effektiven Potential. Die Energie eines auf dieser Insel lokalisierten Zustands sollte daher ebenfalls mit zunehmendem F anwachsen.

Die Zuordnung der Floquet-Zustände zu Quantenzahlen des ungestörten Systems ergibt sich zum einen unmittelbar aus der Entwicklung der Energieniveaus als Funktion von F , zum anderen läßt sie sich anhand der Überlappmatrixelemente dieser Floquet-Zustände mit Zuständen des ungestörten Systems rechtfertigen. Die Betragsquadrate dieser Überlappmatrixelemente sind für die Floquet-Zustände zu den Quantenzahlen $n = 1$, $n = 2$, $n = 3$ und $n = 4$ in Abb. 10.4 dargestellt. Wir sehen, daß für niedrige Feldamplituden $F_0 < 0.005$ diese Floquet-Zustände einen wesentlichen Überlapp hauptsächlich mit denjenigen Eigenzuständen des ungestörten Systems aufweisen, aus denen sie im Grenzfall verschwindender Feldamplitude hervorgehen.

Eine starke Beimischung anderer Komponenten des ungestörten Systems liegt vor allem in der Umgebung „vermiedener Kreuzungen“ (“avoided crossings”) vor [144, 145, 146]. Diese Kreuzungen treten stets dann auf, wenn zwei atomare Zustände durch das externe Feld *resonant* gekoppelt werden. Da eine nichtverschwindende, wenn auch kleine Wechselwirkung zwischen diesen Zuständen deren energetische Entartung verhindert, kommt es bei derartigen resonanten Kopplungen zu einer „Abstoßung“ der Niveaus, die bewirkt, daß diese beiden Zustände an der Kreuzung kontinuierlich ineinander übergehen. Dies ist in Abb. 10.5 gezeigt, in der die vermiedene Kreuzung zwischen dem Zustand zu $n = 4$ und dem Floquet-Zustand, der den Zustand zu $n = 19$ des ungestörten Systems fortsetzt, bei $F_0 \simeq 0.006$ vergrößert dargestellt ist. Wir sehen, daß der Zustand zu $n = 4$ bei Erhöhung von F_0 kontinuierlich in den Zweig übergeht, der der geradlinigen Fortsetzung des Niveaus zu $n = 19$ entspricht, während der Zustand zu $n = 19$ kontinuierlich in die geradlinige Fortsetzung des Zustands zu $n = 4$ übergeht. Durch eine adiabatische Variation der Feldamplitude – d.h. durch eine Variation von F , die im Vergleich zu der Zeitskala, die dem inversen Niveauabstand der vermiedenen Kreuzung entspricht, *langsam* abläuft – läßt sich also der Floquet-Zustand zu

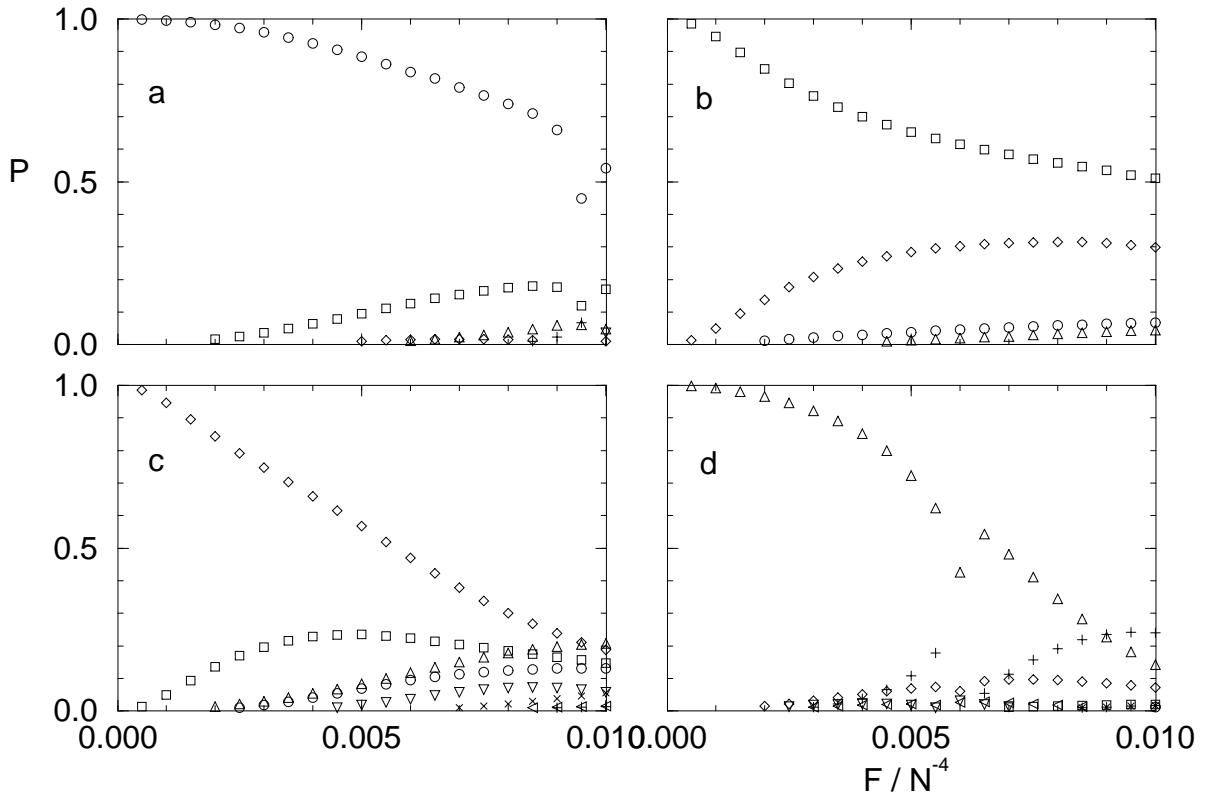


Abb. 10.4: Überlapp P der Floquet-Zustände zu $n = 1$ (a), $n = 2$ (b), $n = 3$ (c) und $n = 4$ (d) mit Zuständen des ungestörten Systems zur Quantenzahl $N = 8$ (s. Abb. 10.3). Aufgetragen sind in Abhängigkeit der Feldamplitude F die Betragsquadrate der Überlappmatrixelemente dieser Floquet-Zustände mit den Zuständen zu $n = 1(\circ)$, $n = 2(\square)$, $n = 3(\diamond)$, $n = 4(\triangle)$, $n = 5(\triangleleft)$, $n = 6(\triangledown)$, $n = 7(\triangleright)$, $n = 8(\times)$, $n = 9(+)$, $n = 10(\star)$ des ungestörten Systems. (Betragsquadrate, die kleiner als 0.01 sind, wurden nicht aufgetragen.) Wir sehen, daß diese Floquet-Zustände für niedrige Feldamplituden $F_0 < 0.005$ einen wesentlichen Überlapp hauptsächlich mit den Zuständen des ungestörten Systems aufweisen, die sie im Spektrum diabatisch fortsetzen. Eine starke Beimischung anderer Komponenten des ungestörten Systems liegt vor allem in der Umgebung vermiedener Kreuzungen vor (in (a) bei $F_0 \simeq 0.0095$ sowie in (d) bei $F_0 \simeq 0.006$, vgl. dazu Abb. 10.3a und d). Darüber hinaus tritt eine relativ starke Mischung auch zwischen den nahezu resonant gekoppelten Zuständen $n = 2$ und $n = 3$ auf (b und c), die sich bereits bei relativ niedrigen Feldamplituden bemerkbar macht.

$n = 4$ kontinuierlich in den Zustand zu $n = 19$ überführen.

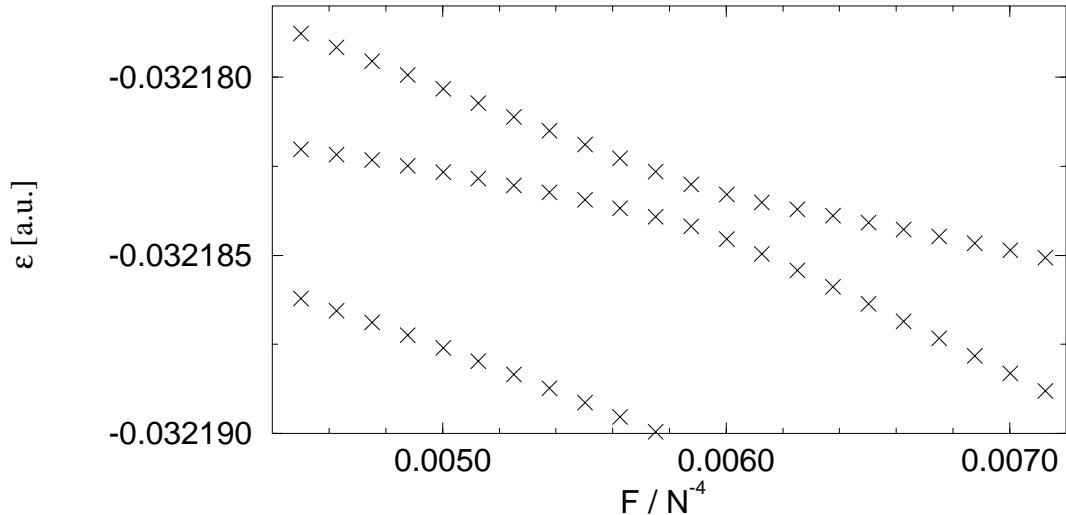


Abb. 10.5: Vergrößerte Darstellung der vermiedenen Kreuzung zwischen dem Zustand $n = 4$ und dem Zustand $n = 19$ aus Abb. 10.3d. Wir sehen, daß der Zustand zu $n = 4$ (oberer linker bzw. unterer rechter Zweig der Kreuzung) bei adiabatischer Variation von F kontinuierlich in den Zustand zu $n = 19$ (unterer linker bzw. oberer rechter Zweig der Kreuzung) übergeht.

Die von uns gewählte Notation entspricht einem *adiabatischen* Einschalten des Feldes, d.h. einem Einschaltvorgang, der langsam abläuft im Vergleich zur Zeitskala, die dem inversen mittleren Abstand benachbarter Niveaus entspricht, jedoch schnell ist im Vergleich zum inversen Niveauabstand bei vermiedenen Kreuzungen. Ein derartiger Einschaltvorgang sorgt dafür, daß das System der Entwicklung des Floquet-Niveaus zwischen vermiedenen Kreuzungen folgt, die Kreuzungen selbst jedoch „überspringt“, d.h. in den Zweig übergeht, der das Niveau jenseits der Kreuzung geradlinig fortsetzt. Wie wir anhand der Überlappmatrixelemente in Abb. 10.4 sehen, setzt eine derartige Notation die Floquet-Zustände in sinnvoller Weise zu den Eigenzuständen des ungestörten Systems in Beziehung. In der unmittelbaren Umgebung der vermiedenen Kreuzungen ist diese Notation jedoch uneindeutig, da nicht genau festgelegt werden kann, bei welcher Feldamplitude die Zuordnung des Floquet-Zustands zu einer Quantenzahl n vom unteren in den oberen Zweig der Kreuzung (bzw. umgekehrt) wechselt.

Das Auftreten vermiedener Kreuzungen manifestiert sich auch in den Ionisationsbreiten. Wie wir in Abb. 10.3a1–d1 sehen, nehmen für die Zustände zu den Quantenzahlen $n = 1, 2, 3, 4$ die Ionisationsbreiten generell zu mit zunehmendem F . Lokale, signifikante Erhöhungen der Breiten treten in der Umgebung von vermiedenen Kreuzungen mit Zuständen

auf, die höheren Quantenzahlen innerhalb der Serie zu $N = 8$ entsprechen und daher im allgemeinen durch höhere Ionisationsbreiten gekennzeichnet sind. Im atomaren System lässt sich eine derartige lokale Erhöhung der Ionisationsrate als Verstärkung der Ionisation durch resonante Multiphotonenkopplung (REMPI) interpretieren (siehe etwa [147]).

Eine starke Mischung zwischen Zuständen des ungestörten Systems tritt nicht nur auf, wenn die entsprechenden Floquet-Niveaus energetisch nahezu entartet sind, sondern vor allem auch dann, wenn diese Zustände durch Dichteverteilungen gekennzeichnet sind, die im Phasenraum einen relativ großen gemeinsamen Überlapp aufweisen (was auf Zustände benachbarter Quantenzahlen n zutrifft), bzw. wenn diese Zustände durch eine geringe Zahl von Photonen aneinander gekoppelt sind (was auf die Zustände zu niedrigen n zutrifft). Dementsprechend finden wir, daß die Floquet-Zustände zu $n = 1, 2, 3, 4$ außerhalb von vermiedenen Kreuzungen hauptsächlich aus der Mischung derjenigen Komponenten gebildet werden, die den niedrigsten Zuständen der Serie des ungestörten Systems entsprechen. Besonders ausgeprägt ist die Mischung zwischen den nahezu resonant gekoppelten Zuständen zu $n = 2$ und $n = 3$, die sich bereits bei relativ niedrigen Feldamplituden bemerkbar macht (Abb. 10.4b,c).

Eine prinzipiell ähnliche Situation liegt auch bei Serien zu anderen Quantenzahlen N vor. Die Abbildungen 10.6, 10.7 zeigen die Entwicklung der Energien und Breiten der Floquet-Zustände zu $n = 1, 2, 3, 4$ für die Serien zu den Quantenzahlen $N = 9$ (Abb. 10.6) und $N = 10$ (Abb. 10.7) (die Frequenz beträgt jeweils $\omega_0 = 0.2$). Wir sehen, daß für jede dieser Quantenzahlen ein Floquet-Zustand existiert, der sich durch ein starkes Anwachsen der Energie als Funktion der Feldamplitude auszeichnet. Dieser Zustand entspricht dem nichtdispergierenden Wellenpaket, das auf der 1:1 Resonanzinsel lokalisiert ist.

Die Überlappmatrixelemente dieser Wellenpaketzustände mit den Eigenzuständen des ungestörten Systems sind in Abb. 10.8 dargestellt. Wie für $N = 8$ wird dieser Zustand auch für $N = 7$, $N = 9$ und $N = 10$ durch Mischungen verschiedener Komponenten des ungestörten Systems gebildet, insbesondere der Komponenten zu $n = 2$ und $n = 3$ sowie, für $N = 10$, auch der zu $n = 4$. Dabei wird mit zunehmendem N , entsprechend der zunehmenden Auflösung der klassischen Phasenraumstruktur durch die Quantendynamik, die Quantenzahl der dominierenden Komponente immer größer. Während für $N = 7$ der Wellenpaketzustand hauptsächlich durch den Zustand $n = 2$ gebildet wird, setzt er sich für $N = 9$ zu nahezu gleichen Teilen aus den Zuständen zu $n = 2$ und $n = 3$ zusammen. Für $N = 10$ dominiert die Komponente $n = 3$; das nichtdispergierende Wellenpaket entspricht hier der diabatischen Fortsetzung des Zustands $n = 3$ des ungestörten Systems.

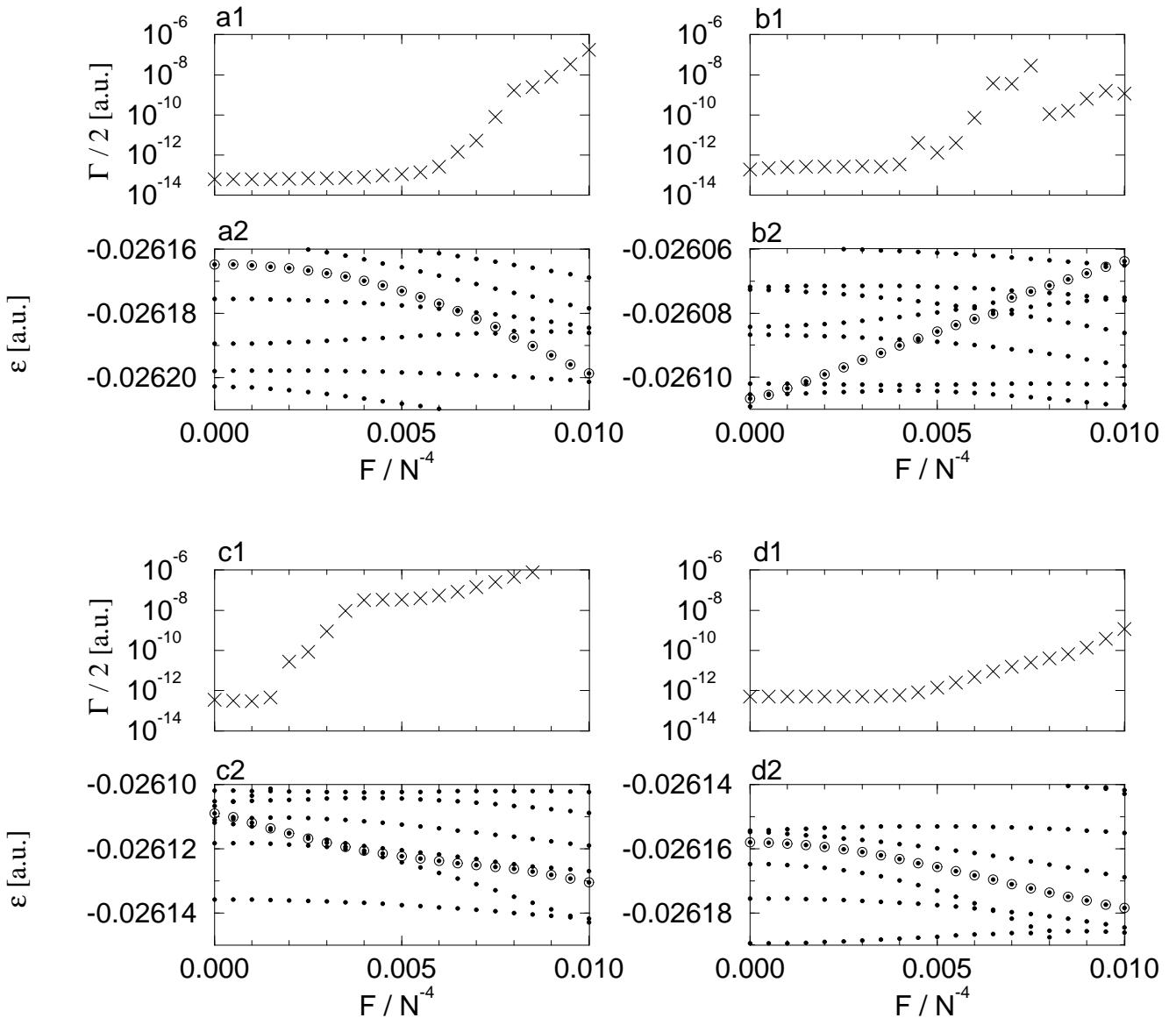


Abb. 10.6: Entwicklung der Floquet-Zustände $n = 1, n = 2, n = 3, n = 4$ zur Quantenzahl $N = 9$. Gezeigt sind in (a2, b2, c2, d2) Ausschnitte des Floquet-Spektrums, zentriert um die (durch Kreise gekennzeichneten) Floquet-Zustände, die die diabatische Fortsetzung der Zustände zu $n = 1$ (a), $n = 2$ (b), $n = 3$ (c) und $n = 4$ (d) darstellen. Aufgetragen sind jeweils die Quasienergien ϵ in Abhängigkeit der Feldamplitude F bei der Frequenz $\omega_0 = 0.2$. Die Ionisationsbreiten (HWHM) dieser Floquet-Zustände sind in (a1, b1, c1, d1) aufgetragen. Wie auch bei $N = 8$ (Abb. 10.3) entspricht der Floquet-Zustand zu $n = 2$ dem auf der 1:1 Resonanzinsel lokalisierten, nichtdispergierenden Wellenpaket, während der Zustand zu $n = 1$ den auf der intrinsischen Insel lokalisierten, stationären Zustand darstellt. Man beachte die im Vergleich zu $N = 8$ gestiegene Zahl vermiedener Kreuzungen, die der stationäre Zustand und das nichtdispergierende Wellenpaket im Bereich $0 < F < 0.01 N^{-4}$ durchlaufen.

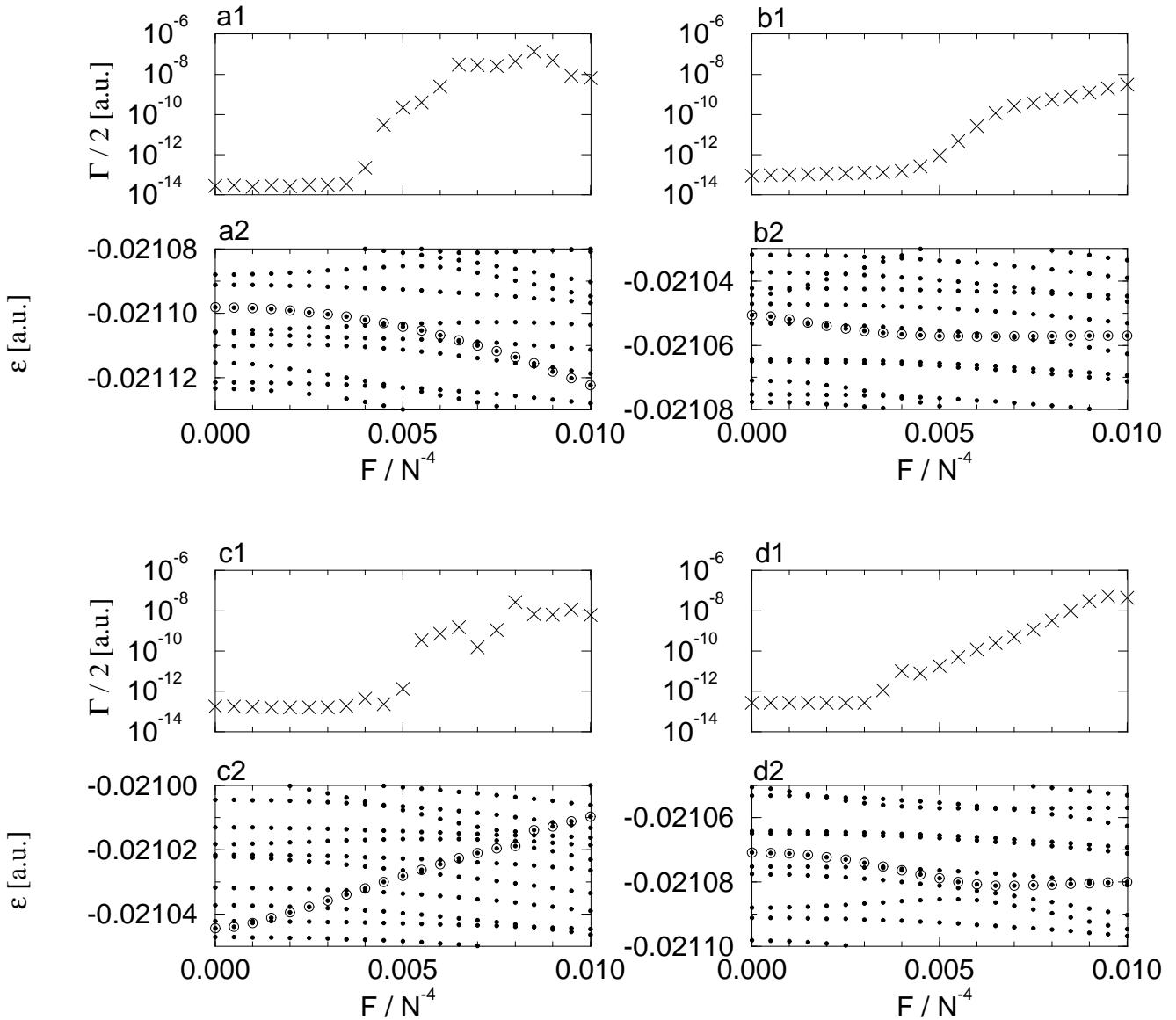


Abb. 10.7: Entwicklung der Floquet-Zustände $n = 1, n = 2, n = 3, n = 4$ zur Quantenzahl $N = 10$. Gezeigt sind in (a2, b2, c2, d2) Ausschnitte des Floquet-Spektrums, zentriert um die (durch Kreise gekennzeichneten) Floquet-Zustände, die die diabatische Fortsetzung der Zustände zu $n = 1$ (a), $n = 2$ (b), $n = 3$ (c) und $n = 4$ (d) darstellen. Aufgetragen sind jeweils die Quasienergien ϵ in Abhängigkeit der Feldamplitude F bei der Frequenz $\omega_0 = 0.2$. Die Ionisationsbreiten (HWHM) dieser Floquet-Zustände sind in (a1, b1, c1, d1) aufgetragen. Im Gegensatz zu $N = 8, 9$ entspricht das nichtdispersierende Wellenpaket hier der diabatischen Fortsetzung des Zustands $n = 3$ (c). Dies ist an dem starken Anstieg dessen Energie mit F zu erkennen (c2).

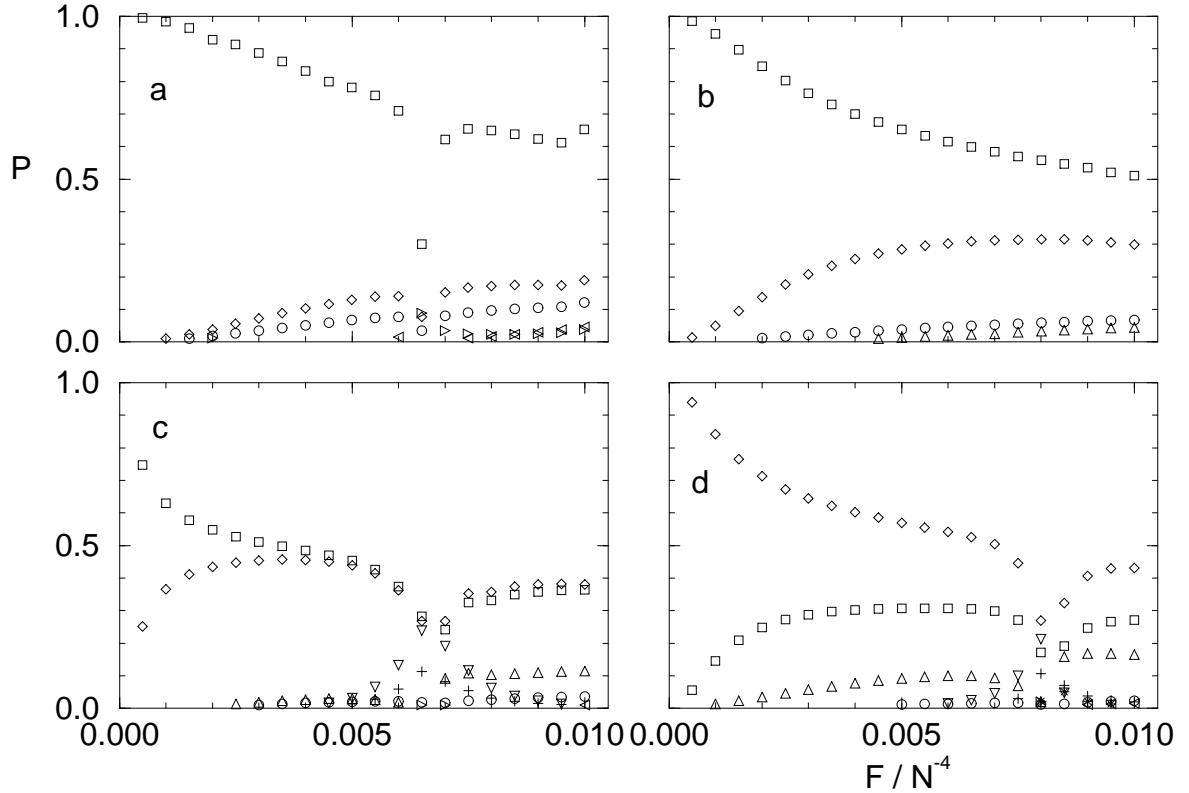


Abb. 10.8: Überlapp P der nichtdispergierenden Wellenpakete mit Zuständen des ungestörten Systems zur Quantenzahl (a) $N = 7$, (b) $N = 8$ (Abb. 10.3b), (c) $N = 9$ (Abb. 10.6b) und (d) $N = 10$ (Abb. 10.7c). Aufgetragen sind in Abhängigkeit der Feldamplitude F die Betragsquadrate der Überlappmatrixelemente der entsprechenden Floquet-Zustände mit den Zuständen zu $n = 1(\circ)$, $n = 2(\square)$, $n = 3(\diamond)$, $n = 4(\triangle)$, $n = 5(\triangleleft)$, $n = 6(\triangledown)$, $n = 7(\triangleright)$, $n = 8(\times)$, $n = 9(+)$, $n = 10(\star)$ des ungestörten Systems (Betragsquadrate, die kleiner als 0.01 sind, wurden nicht aufgetragen). Wir sehen, daß sich mit zunehmendem N die dominierende Komponente zu höheren Quantenzahlen verschiebt. Während für $N = 7$ das Wellenpaket einen wesentlichen Überlapp hauptsächlich mit dem Zustand $n = 2$ aufweist (a), setzt es sich für $N = 9$ zu nahezu gleichen Teilen aus den Zuständen zu $n = 2$ und $n = 3$ zusammen (c). Für $N = 10$ dominiert die Komponente $n = 3$ (d); das nichtdispergierende Wellenpaket entspricht hier der diabatischen Fortsetzung des Zustands $n = 3$ des ungestörten Systems.

10.2 Stationäre Zustände und nichtdispergierende Wellenpakte

Wie im vorigen Abschnitt erwähnt wurde, läßt sich bereits aus dem starken Anstieg seiner Energie mit F erkennen, daß derjenige Floquet-Zustand, der die diabatische Fortsetzung des Zustands zu $n = 2$ (bzw. zu $n = 3$ für $N = 10$) darstellt, mit der 1:1 Resonanzinsel des klassischen Phasenraums assoziiert ist. Vom Floquet-Zustand zur Quantenzahl $n = 1$ hingegen ist zu erwarten, daß er im Phasenraum auf der intrinsischen Insel lokalisiert ist. Dies läßt sich anhand der Husimi-Verteilungen der Floquet-Zustände verifizieren, die in Abb. 10.9 für $N = 8$ und für die Feldparameter $\omega_0 = 0.2$, $F_0 = 0.005$ zu den Zeiten $\omega t = 0$, $\pi/2$ und π dargestellt sind. Wir sehen, daß der Zustand zu $n = 1$ einen im wesentlichen *stationären* Zustand darstellt, während der Zustand zu $n = 2$ einem *nichtdispergierenden* Wellenpaket entspricht, das der Oszillation der 1:1 Resonanzinsel folgt.

Abb. 10.10 zeigt die Wahrscheinlichkeitsdichte des stationären Zustands und des nichtdispergierenden Wellenpakets im Konfigurationsraum. Wir sehen, daß der stationäre Zustand im wesentlichen mit dem ungestörten Zustand $n = 1$ der Serie $N = 8$ übereinstimmt. Das nichtdispergierende Wellenpaket hingegen läßt sich *nicht* unmittelbar einem Eigenzustand des ungestörten Systems zuordnen, sondern entspricht vielmehr einer zeitabhängigen Linear-kombination mehrerer Eigenzustände, insbesondere der Zustände zu $n = 2$ und $n = 3$ (wie wir anhand der Wahrscheinlichkeitsdichten dieser Zustände im Konfigurationsraum erkennen, siehe Abb. 9.3). Während es in der Koordinate des inneren Elektrons im wesentlichen durch eine Wasserstoff-Eigenfunktion zur Knotenzahl $N - 1 = 7$ gegeben ist, folgt es in der Koordinate des äußeren Elektrons der klassischen Trajektorie der 1:1 Resonanz. Wie wir an der klassischen Trajektorie in Abb. 4.5b gesehen haben, manifestiert sich der Wellenpaket-charakter auch in der Koordinate des inneren Elektrons, nämlich in Form von periodischen Modulationen der Ausdehnung der Dichteverteilung in z_2 . Diese Modulationen sind jedoch bei der hier betrachteten Quantenzahl $N = 8$ kaum erkennbar.

Die Entwicklung des nichtdispergierenden Wellenpakets aus der Wellenfunktion des Zustands $n = 2$ des ungestörten Systems ist in Abb. 10.11 für $\omega t = 0$ und in Abb. 10.12 für $\omega t = \pi$ dargestellt. Wir sehen, daß der Eigenzustand zu $n = 2$ mit zunehmendem $F_0 < 0.005$ kontinuierlich der Entwicklung der 1:1 Resonanzstruktur folgt. Dabei verlagert sich die Wahrscheinlichkeitsdichte immer mehr zum äußeren Umkehrpunkt für $\omega t = 0$ (Abb. 10.11) sowie zum inneren Umkehrpunkt für $\omega t = \pi$ (Abb. 10.12). Für $F_0 > 0.005$ verschlechtert sich die Lokalisierung des nichtdispergierenden Wellenpakets: Bei $F_0 = 0.01$ (Abb. 10.11e) überdeckt das Wellenpaket einen deutlich größeren Bereich im Phasenraum als bei $F_0 = 0.005$, was darauf zurückzuführen ist, daß sich durch die Verkleinerung der 1:1 Resonanzinsel die Kopplung des Wellenpaketzustands an die diese Insel umgebende chaotische See vergrößert.

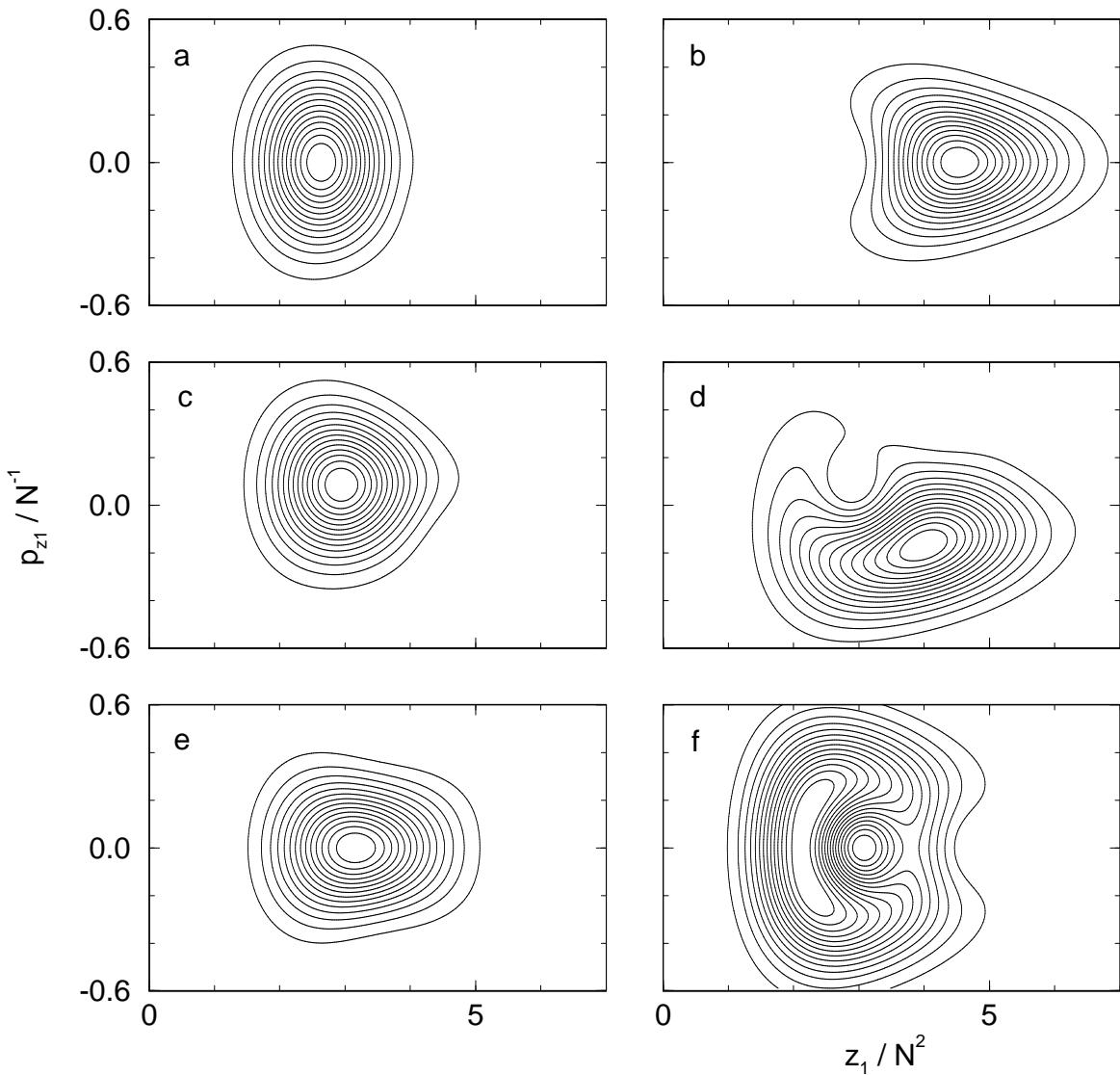


Abb. 10.9: Stationärer Zustand und nichtdispergierendes Wellenpaket im Phasenraum. Aufgetragen sind die Husimi-Verteilungen der Floquet-Zustände zu $n = 1$ (a, c, e) und zu $n = 2$ (b, d, f) für $N = 8$, $\omega_0 = 0.2$, $F_0 = 0.005$ (siehe Abb. 10.3a und Abb. 10.3b) zu verschiedenen Zeiten bzw. Phasen des treibenden Feldes: (a, b) $\omega t = 0$, (c, d) $\omega t = \pi/2$, (e, f) $\omega t = \pi$. Durch Vergleich mit dem Poincaré-Schnitt der klassischen Dynamik in Abb. 10.1 erkennen wir, daß diese Floquet-Zustände vollständig auf den entsprechenden regulären Inseln des klassischen Phasenraums lokalisiert sind. Während der Zustand zu $n = 1$ (a, c, e) auf der intrinsischen Insel lokalisiert ist und somit einen im wesentlichen *stationären* Zustand darstellt, entspricht der Zustand zu $n = 2$ einem *nichtdispergierenden Wellenpaket*, das der Zeitentwicklung der 1:1 Resonanzinsel im Verlauf der Feldperiode folgt.

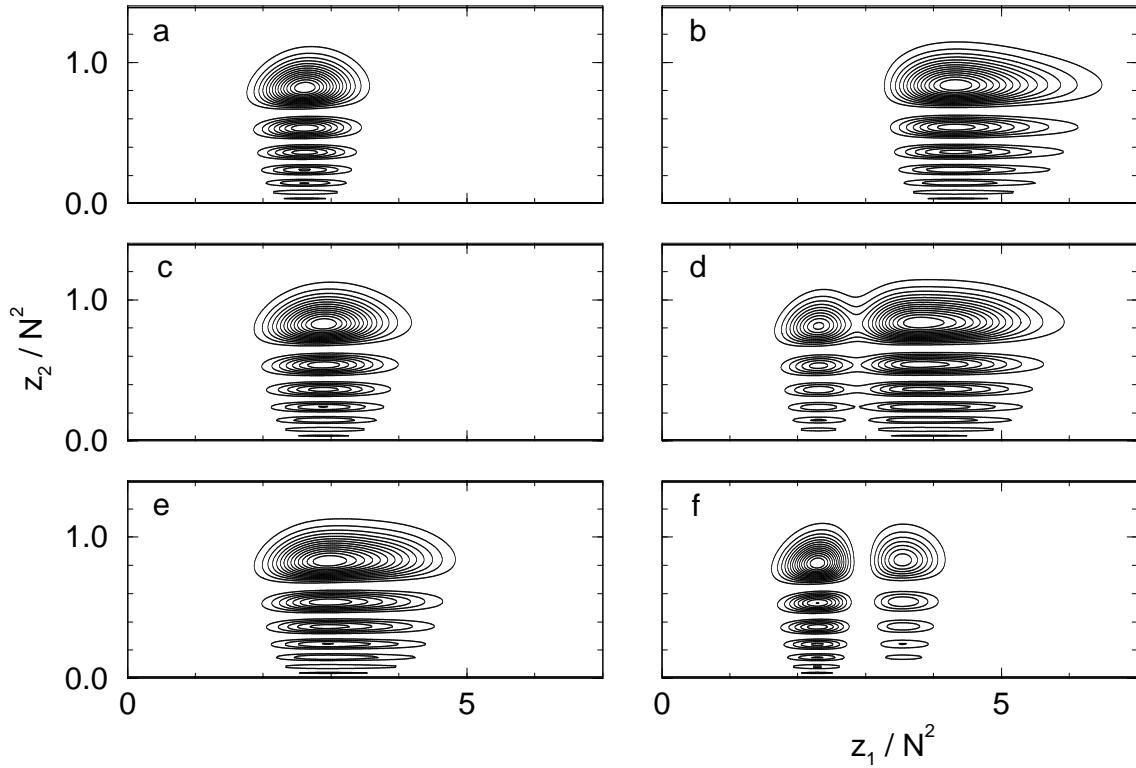


Abb. 10.10: Stationärer Zustand und nichtdispersierendes Wellenpaket im Konfigurationsraum. Aufgetragen sind die Wahrscheinlichkeitsdichten der Floquet-Zustände zu $n = 1$ (a, c, e) und zu $n = 2$ (b, d, f), für $N = 8$, $\omega_0 = 0.2$, $F_0 = 0.005$ und die Feldphasen (a, b) $\omega t = 0$, (c, d) $\omega t = \pi/2$, (e, f) $\omega t = \pi$. Wir sehen, daß der stationäre Zustand (a, c, e) im wesentlichen mit dem ungestörten Zustand $n = 1$ der Serie zur Quantenzahl $N = 8$ übereinstimmt (s. Abb. 9.3a). Das nichtdispersierende Wellenpaket hingegen (b, d, f) konstituiert sich aus der (periodisch) *zeitabhängigen* Linearkombination verschiedener Eigenzustände des ungestörten Systems, insbesondere der Zustände zu $n = 2$ und $n = 3$ (vgl. dazu auch die Wahrscheinlichkeitsdichte dieser Zustände im Konfigurationsraum in Abb. 9.3b, c). Während es in der Koordinate des inneren Elektrons im wesentlichen durch eine Wasserstoff-Eigenfunktion zur Knotenzahl 7 gegeben ist, folgt es in der Koordinate des äußeren Elektrons der klassischen Trajektorie der 1:1 Resonanz.

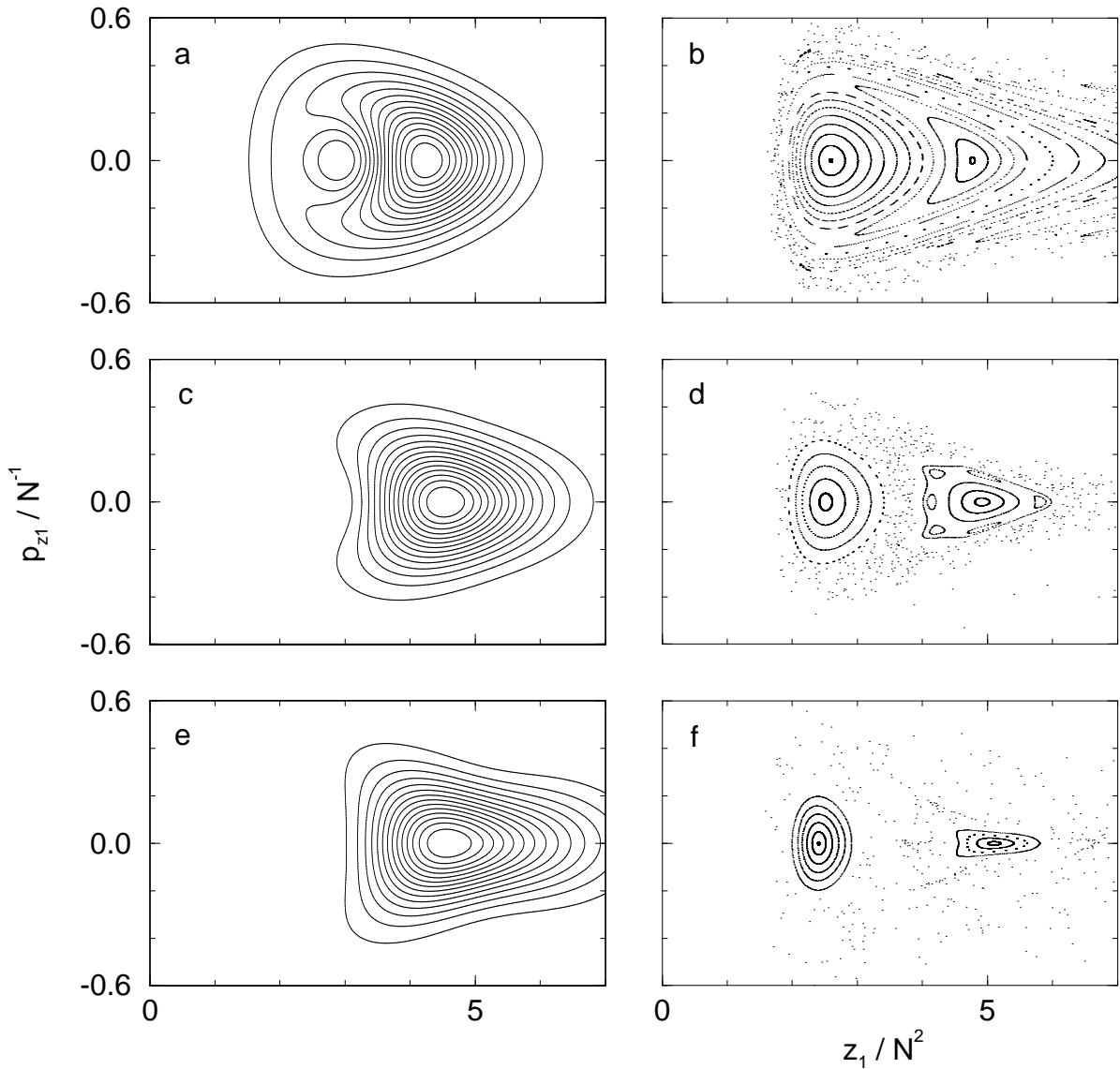


Abb. 10.11: Entwicklung des nichtdispergierenden Wellenpakets in Abhängigkeit der Feldamplitude zur Phase $\omega t = 0$. Aufgetragen sind in (a, c, e) die Husimi-Verteilungen des Floquet-Zustands zu $n = 2$ für $N = 8$, $\omega_0 = 0.2$ und (a) $F_0 = 0.001$, (b) $F_0 = 0.005$, (c) $F_0 = 0.01$. (b, d, f) zeigen die Poincaré-Schnitte des entsprechenden klassischen Phasenraums. Wir sehen, daß der Floquet-Zustand kontinuierlich von dem stationären, ungestörten Zustand $n = 2$ (vgl. Abb. 9.4b) in den *nichtstationären* Wellenpaketzustand auf der 1:1 Resonanz übergeht (a, c) (vgl. hierzu auch Abb. 10.12). Für $F_0 > 0.005$ verschlechtert sich die Lokalisierung des Wellenpakets: Wie wir in (e) sehen, überdeckt der Wellenpaketzustand bei $F_0 = 0.01$ einen deutlich größeren Bereich im Phasenraum als bei $F_0 = 0.005$ (c). Dies ist auf die Verkleinerung der 1:1 Resonanzinsel (f) zurückzuführen, die bewirkt, daß sich die Kopplung des auf ihr lokalisierten Zustands an die chaotische See vergrößert.

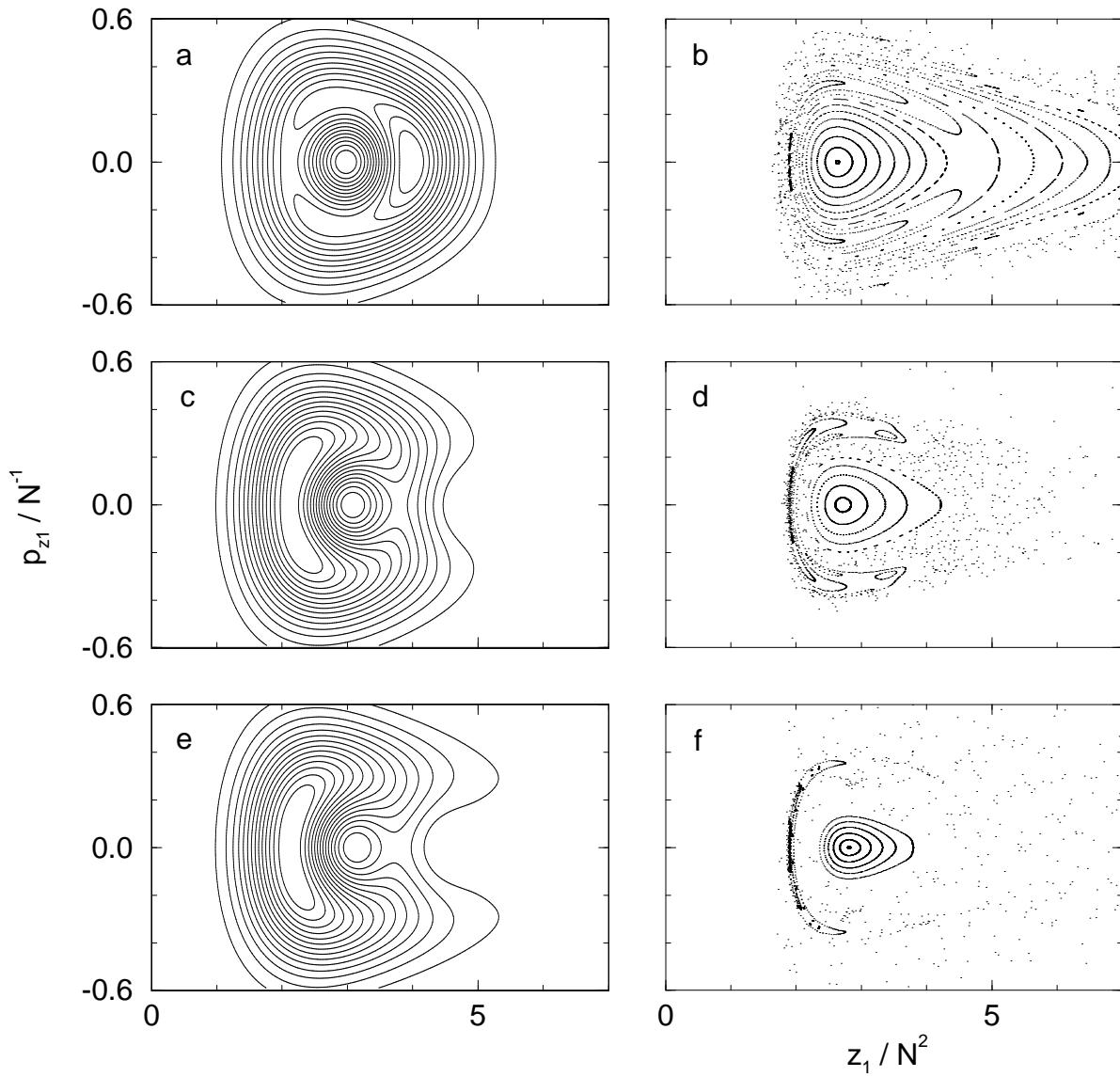


Abb. 10.12: Entwicklung des nichtdispersierenden Wellenpakets in Abhängigkeit der Feldamplitude zur Phase $\omega t = \pi$. Aufgetragen sind in (a, c, e) die Husimi-Verteilungen des Floquet-Zustands zu $n = 2$, für $N = 8$, $\omega_0 = 0.2$ und (a) $F_0 = 0.001$, (b) $F_0 = 0.005$, (c) $F_0 = 0.01$. (b, d, f) zeigen die Poincaré-Schnitte des entsprechenden klassischen Phasenraums. Der Vergleich mit Abb. 10.11 sowie mit der Husimi-Verteilung des ungestörten Zustands $n = 2$ in Abb. 9.4b lässt erkennen, wie sich mit zunehmendem $F_0 < 0.005$ der zeitabhängige Charakter des Wellenpakets immer stärker herausbildet.

Floquet-Zustände zu höheren Quantenzahlen $n > 2$ sind bei $F_0 = 0.005$ ausschließlich mit dem *chaotischen* Bereich des klassischen Phasenraums assoziiert. Abb. 10.13 zeigt die Husimi-Dichte der Zustände zu $n = 3$ und $n = 4$ für $\omega t = 0, \pi/2$ und π . Wir sehen, daß diese Floquet-Zustände *Minima* in der Phasenraumdichte auf den regulären Inseln des klassischen Phasenraums aufweisen (vgl. Abb. 10.1). Der Zustand $n = 3$ (a, c, e) ist mit der Separatrixstruktur der 1:1 Resonanz assoziiert: Wir erkennen eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit sowohl in dem die 1:1 Resonanzinsel umgebenden chaotischen Phasenraumgebiet (Abb. 10.13a) als auch entlang des instabilen periodischen Orbits der 1:1 Resonanz (Abb. 10.13e).

Während das EBK-Quantisierungskriterium die Existenz von Zuständen auf der intrinsischen Insel ab $N \simeq 6$ und auf der 1:1 Resonanzinsel ab $N \simeq 7$ vorhersagt, finden wir bereits ab $N = 5$ Zustände im Floquet-Spektrum, die auf der intrinsischen Insel bzw. der 1:1 Resonanzinsel lokalisiert sind. Wie für $N = 8$ geht auch für $N = 5, 6, 7$ der auf der intrinsischen Insel lokalisierte Zustand aus dem Eigenzustand $n = 1$ des ungestörten Systems hervor, während der mit der 1:1 Resonanzinsel assoziierte Zustand der diabatischen Fortsetzung des Zustands $n = 2$ entspricht. Abb. 10.14 zeigt die Husimi-Verteilungen der stationären Zustände bzw. der nichtdispergierenden Wellenpakte für $N = 6$, $N = 8$ und $N = 10$. Wir sehen, daß die Lokalisierung dieser Zustände mit zunehmendem N schärfer wird, entsprechend der Tatsache, daß die auf die Struktur des klassischen Phasenraums bezogene, effektive Größe des Wirkungsquantums \hbar abnimmt.

10.3 Lebensdauern der Wellenpaketzustände

Die in Abschnitt 10.2 gezeigten Abbildungen sowie der Begriff „nichtdispergierendes Wellenpaket“ suggerieren, daß den mit der 1:1 Resonanzinsel assoziierten Zuständen Wellenfunktionen entsprechen, die der Zeitentwicklung dieser Insel in *exakt* periodischer Weise folgen und damit auf unbestimmte Zeit ihre Form wahren. Eine obere Grenze für diese periodische Zeitentwicklung ergibt sich jedoch aus der Tatsache, daß es sich bei diesen Zuständen um *autoionisierende* Zustände des Floquet-Systems handelt, die durch nichtverschwindende Ionisationsbreiten gekennzeichnet sind. Jene Überlagerung von Eigenzuständen des ungestörten Systems, die dem Floquet-Zustand auf der 1:1 Resonanzinsel entspricht, folgt daher im externen Antrieb der Oszillation dieser Insel nur auf einer Zeitskala, die der inversen Ionisationsbreite dieses Floquet-Zustands entspricht (danach ist die Population auf das Kontinuum verteilt). Um also quantitativ zu charakterisieren, inwieweit ein auf einer feldinduzierten Resonanzinsel lokalisierte Zustand im Konfigurationsraum tatsächlich einem nichtdispergierenden Wellenpaket entspricht (d.h. auf einer im Vergleich zur Feldperiode *sehr langen* Zeitskala der resonant getriebenen, klassischen Trajektorie folgt, ohne zu dispergieren), ist es erforderlich, die Ionisationsbreiten dieser Zustände zu untersuchen.

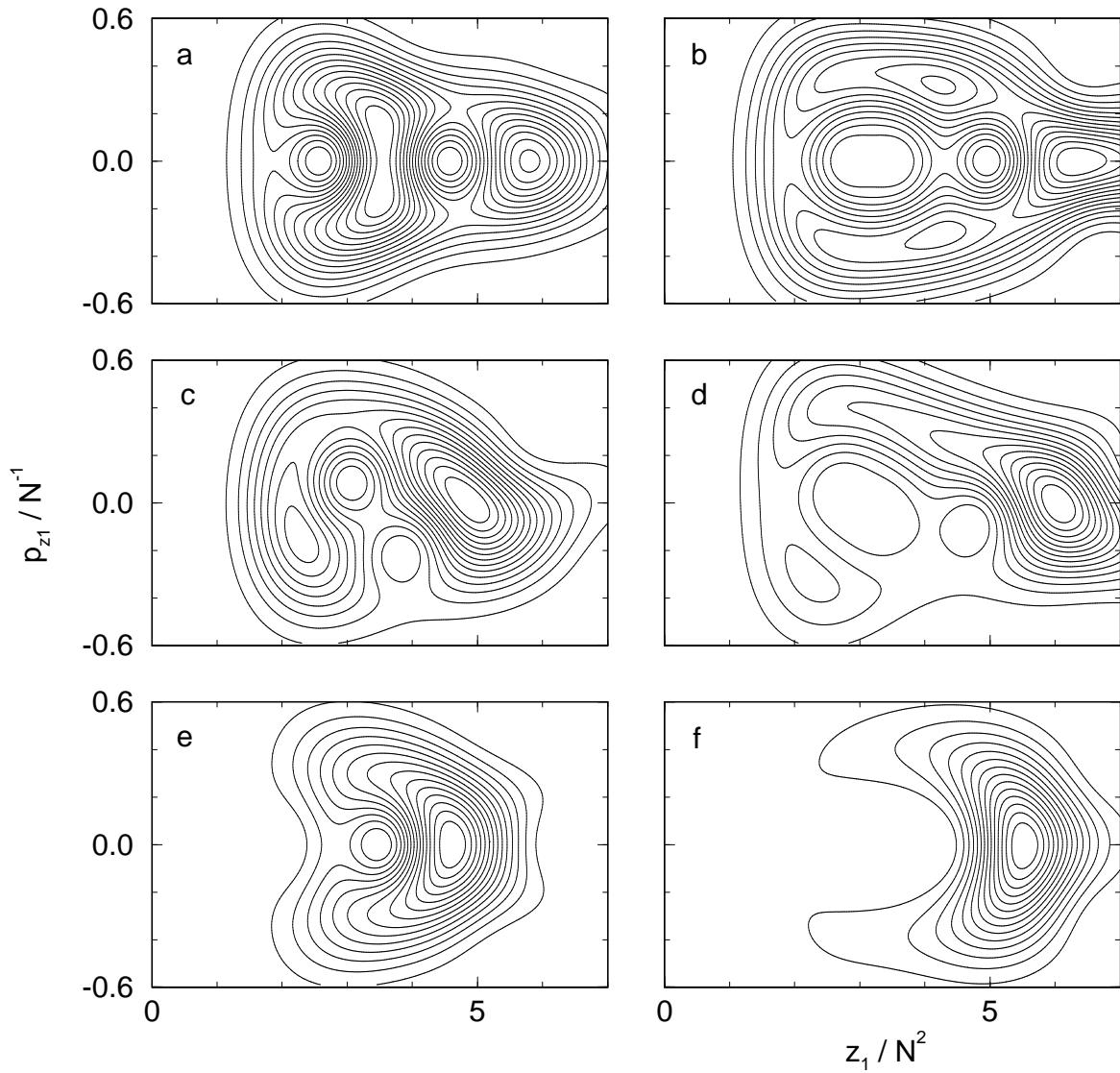


Abb. 10.13: Floquet-Zustände, die mit dem chaotischen Bereich des Phasenraums assoziiert sind. Aufgetragen ist die Husimi-Verteilung der Zustände $n = 3$ (a, c, e) und $n = 4$ (b, d, f) zur Quantenzahl $N = 8$ bei den Feldphasen (a, b) $\omega t = 0$, (c, d) $\omega t = \pi/2$, (e, f) $\omega = \pi$. Die Feldparameter betragen $\omega_0 = 0.2$ und $F_0 = 0.005$. Wir erkennen, daß diese Floquet-Zustände Minima in der Aufenthaltswahrscheinlichkeit auf den regulären Inseln des klassischen Phasenraums aufweisen (vgl. Abb. 10.1). Der Zustand $n = 3$ (a, c, e) ist mit der Separatrixstruktur der 1:1 Resonanz assoziiert: Wir erkennen eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit sowohl in dem die 1:1 Resonanzinsel umgebenden chaotischen Phasenraumgebiet (a) als auch entlang des instabilen periodischen Orbits der 1:1 Resonanz (e).

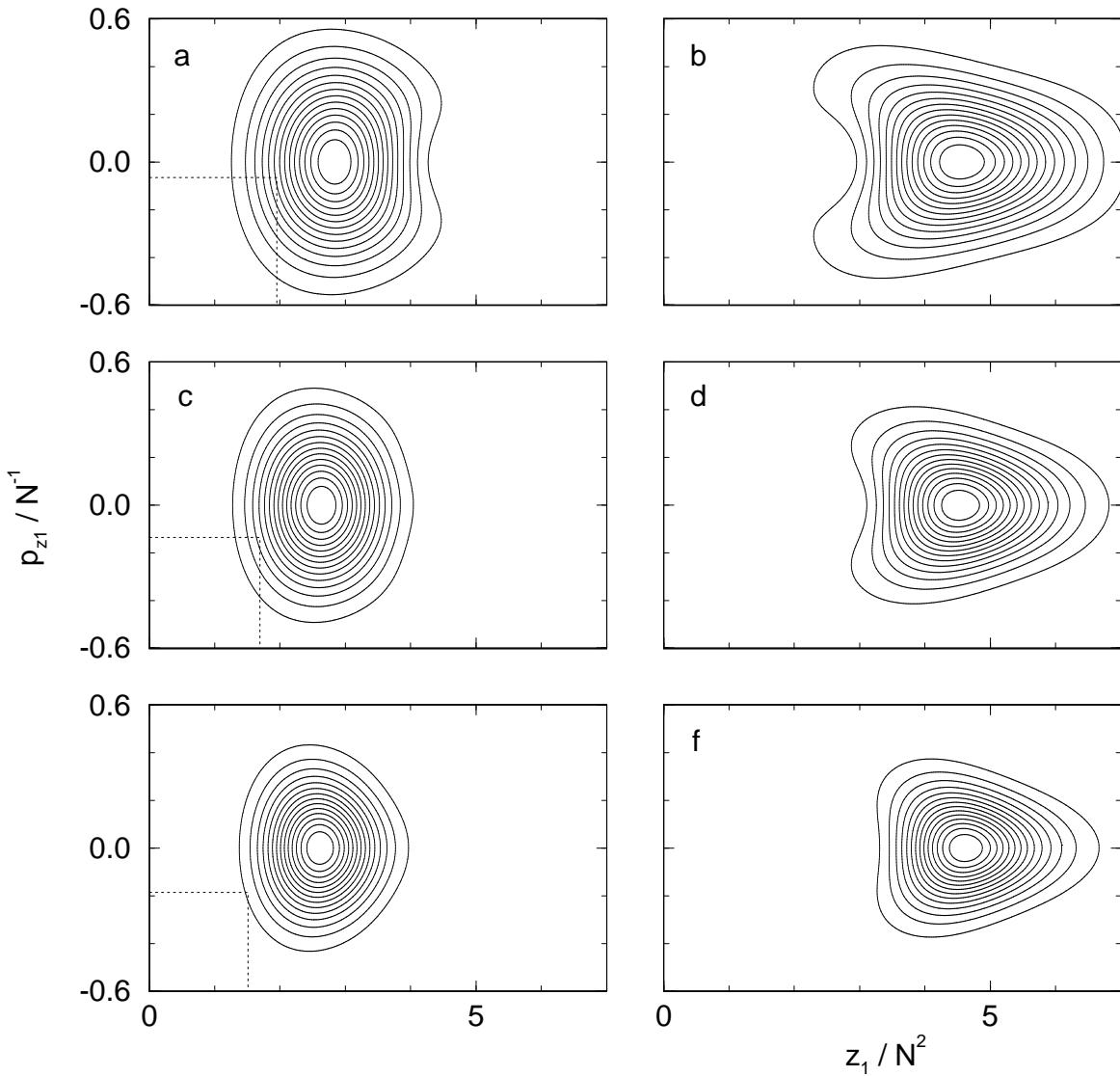


Abb. 10.14: Stationäre Zustände und nichtdispergierende Wellenpakete für verschiedene Quantenzahlen N . Aufgetragen sind die Husimi-Verteilungen der Floquet-Zustände zu $n = 1$ (a, d, e) und zu $n = 2$ (b, d, f) zu den Quantenzahlen (a, b) $N = 6$, (c, d) $N = 8$, (e, f) $N = 10$ (die Größe von $2\pi\hbar$ ist durch Quadrate unten links in (a, c, e) markiert). Die Feldparameter betragen jeweils $\omega = 0.2 N^{-3}$ und $F = 0.005 N^{-4}$. Der klassische Phasenraum entspricht damit für jede dieser Quantenzahlen der in Abb. 10.1 gezeigten Struktur. Wir sehen, daß mit zunehmender Quantenzahl N die Lokalisierung des Quantenzustands auf der regulären Insel immer schärfer wird, entsprechend der Tatsache, daß die effektive, auf die Struktur des klassischen Phasenraums bezogene Größe des Wirkungsquantums \hbar proportional $1/N$ abnimmt.

Tatsächlich zeichnen sich nichtdispergierende Wellenpakete auf feldinduzierten Resonanzinseln typischerweise durch sehr hohe Lebensdauern aus: in Wasserstoff im linear polarisierten Mikrowellenfeld etwa von der Größenordnung von 10^6 Kepler-Zyklen [18, 19]. Diese Langlebigkeit ist darauf zurückzuführen, daß die entsprechenden Floquet-Zustände auf *regulären* Inseln im klassischen Phasenraum lokalisiert sind, auf denen eine Kopplung an das Kontinuum nur über *dynamisches Tunneln* durch klassisch impenetrable Tori erfolgen kann. In der Tat erhalten wir ebenfalls sehr lange Lebensdauern für die nichtdispergierenden *Zwei-Elektronen*-Wellenpakete im kollinearen, getriebenen Helium-Atom. Tab. 10.1 zeigt die Ionisationsbreiten und Lebensdauern der den stationären Zuständen und den nichtdispergierenden Wellenpaketen entsprechenden Floquet-Zustände für $\omega = 0.2 N^{-3}$ und $F = 0.005 N^{-4}$ in Abhängigkeit der Quantenzahl N . Wir sehen, daß die Lebensdauern der stationären Zustände und der nichtdispergierenden Wellenpakete im Bereich von $10^4 \dots 10^7$ Feldzyklen liegen.

Tab. 10.1: Ionisationsbreiten und Lebensdauern der stationären Zustände und der nichtdispergierenden Wellenpakete bei der Frequenz $\omega = 0.2 N^{-3}$ und der Feldamplitude $F = 0.005 N^{-4}$. $\Gamma^{(s)}/2$ und $\Gamma^{(w)}/2$ bezeichnen die Ionisationsbreiten (HWHM) des stationären Zustands (Index s) und des nichtdispergierenden Wellenpakets (Index w) zur Quantenzahl N des inneren Elektrons. $\tau^{(s)} = 1/\Gamma^{(s)}$ und $\tau^{(w)} = 1/\Gamma^{(w)}$ bezeichnen die entsprechenden Lebensdauern.

N	$\Gamma^{(s)}/2$ [a.u.]	$\tau^{(s)}$ [$2\pi/\omega$]	$\Gamma^{(w)}/2$ [a.u.]	$\tau^{(w)}$ [$2\pi/\omega$]
5	$4.48 \cdot 10^{-12}$	$2.8 \cdot 10^7$	$5.53 \cdot 10^{-12}$	$2.3 \cdot 10^7$
6	$8.43 \cdot 10^{-12}$	$8.7 \cdot 10^6$	$1.09 \cdot 10^{-10}$	$6.8 \cdot 10^5$
7	$9.35 \cdot 10^{-11}$	$5.0 \cdot 10^5$	$5.99 \cdot 10^{-9}$	$7.7 \cdot 10^3$
8	$3.36 \cdot 10^{-12}$	$9.3 \cdot 10^6$	$1.77 \cdot 10^{-11}$	$1.8 \cdot 10^6$
9	$1.14 \cdot 10^{-13}$	$1.9 \cdot 10^8$	$1.35 \cdot 10^{-12}$	$1.6 \cdot 10^7$
10	$2.22 \cdot 10^{-10}$	$7.2 \cdot 10^4$	$1.35 \cdot 10^{-12}$	$1.2 \cdot 10^7$

Ähnlich wie bei den Eigenzuständen des ungestörten kollinearen Systems, die im Phasenraumgebiet gebundener Bewegung lokalisiert sind (siehe Abschnitt 9.2), ist zu erwarten, daß die Lebensdauern der mit den regulären Inseln assoziierten Zustände exponentiell mit N abnehmen. Im Gegensatz zum ungestörten System läßt sich eine derartige exponentielle Abnahme im Bereich $N = 5 \dots 10$ jedoch nicht feststellen: Sowohl die stationären Zustände als auch die nichtdispergierenden Wellenpakete sind durch Ionisationsbreiten gekennzeichnet, die über mehrere Größenordnungen hinweg fluktuieren und keinem eindeutigen Trend folgen. Dies läßt sich zum einen dadurch erklären, daß in dem hier untersuchten Bereich von Quantenzahlen $N = 5 \dots 10$ die regulären Inseln zu klein sind, um eine hinreichende Lokalisierung zu gewährleisten; die Ionisation der mit diesen Inseln assoziierten Zustände erfolgt damit nicht nur durch dynamisches Tunneln, sondern auch durch direkten Überlapp der Wellenfunktion

mit dem chaotischen Bereich des Phasenraums.

Aufgrund der gemischt regulär-chaotischen Struktur des Phasenraums ist ein nichtmonotoner Verhalten der Ionisationsbreite als Funktion von N jedoch auch bei hohen Quantenzahlen zu erwarten, bei denen die Zustände vollständig im Zentrum der regulären Insel lokalisiert sind. Im Gegensatz zum ungestörten kollinearen Helium-Atom, in dem die klassische Dynamik sowohl innerhalb als auch außerhalb des Gebiets gebundener Bewegung regulär ist, ist im getriebenen System die Kopplung der auf den regulären Inseln lokalisierten Zustände an das Kontinuum nicht durch einen „reinen“ Tunnelprozeß gegeben; sie enthält, neben einer *regulären* Komponente, die dem Tunneln durch die Phasenraumbarrieren dieser Insel entspricht, auch eine *irreguläre* Komponente, die den sich diesem Tunnelprozeß anschließenden Transport durch den chaotischen Bereich des Phasenraums kennzeichnet. Ähnlich wie bei „Chaos-assistiertem Tunneln“ zwischen auf unterschiedlichen regulären Inseln lokalisierten Zuständen, deren Niveaupartitionen durch die diese Inseln trennende chaotische Schicht stochastisch moduliert werden [148, 149], führt dieser chaotische Transport zu stochastischen Fluktuationen in der Ionisationsbreite (man könnte also von „Chaos-assistierter Tunnel-Ionisation“ sprechen). Tatsächlich wurden derartige Fluktuationen in der Ionisationsbreite für die nichtdispergierenden Wellenpakete in Wasserstoff im externen Mikrowellenfeld nachgewiesen [21, 150].

Konkret lassen sich die Fluktuationen der Ionisationsbreite durch nahresonante Kopplungen mit Zuständen erklären, die mit dem chaotischen Bereich des Phasenraums assoziiert sind. Wie wir in Abschnitt 10.1 gesehen haben, führt eine derartige Kopplung im Floquet-Spektrum zu einer vermiedenen Kreuzung, in deren Umgebung sich die Ionisationsbreiten der mit regulären Inseln assoziierten Zustände signifikant erhöhen. Die Ionisationsbreite des regulären Zustands bei $F = 0.005 N^{-4}$ wird damit wesentlich durch das Auftreten vermiedener Kreuzungen in der Umgebung dieser Feldamplitude beeinflußt. Da die Lage und Größe dieser vermiedenen Kreuzungen in der Umgebung von $F = 0.005 N^{-4}$ von N zu N variieren (vgl. Abb. 10.3, 10.6, 10.7), ist die Beeinflussung der Ionisationsbreite durch chaotische Komponenten bei $F = 0.005 N^{-4}$ unterschiedlich groß für verschiedene N . Folglich nimmt die Ionisationsbreite der auf regulären Inseln lokalisierten Zustände nicht monoton ab mit N , sondern ist unregelmäßigen Fluktuationen unterworfen.

Um im Fall der kollinearen, getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration zu bestimmen, in welcher Weise die Ionisationsbreiten der auf regulären Inseln lokalisierten Zustände fluktuiieren bzw. mit welcher Rate diese Ionisationsbreiten im Mittel exponentiell mit N abnehmen, ist es erforderlich, die Floquet-Zustände in einem Bereich von Quantenzahlen zu berechnen, der den bisher untersuchten Bereich $N = 5 \dots 10$ weit übersteigt. Wie wir jedoch in Tab. 10.1 sehen, liegen bereits bei $N \simeq 10$ die Ionisationsbreiten dieser Zustände im Bereich von $10^{-12} \dots 10^{-13}$ a.u. und damit nur wenige Größenordnungen oberhalb des Rundungsfeh-

lers der numerischen Diagonalisierung $\sim 10^{-15}$. Eine konvergente Berechnung der Breiten dieser Zustände ist damit weit oberhalb von $N = 10$ nicht möglich.

10.4 Einfluß eines zusätzlichen, statischen elektrischen Feldes

Wie wir in Kap. 7 gezeigt haben, wird ein zusätzliches, statisches elektrisches Feld benötigt, um die Konfiguration gegen Kippen und Ionisation zu stabilisieren und auf die Umgebung des kollinearen Phasenraums zu beschränken. Es stellt sich daher die Frage, welche Auswirkungen die Anwendung dieses statischen Feldes auf die eindimensionale getriebene Frozen-Planet-Konfiguration hat. Speziell interessiert uns dabei, ob bzw. inwieweit die auf regulären Inseln lokalisierten Zustände durch die Anwesenheit eines statischen Feldes, dessen Feldstärke F_{st} in dem für die Stabilisierung der dreidimensionalen Konfiguration relevanten Bereich $0 \leq F_{\text{st}} < F/2$ liegt (siehe Abschnitt 7.2), in ihren Lokalisierungseigenschaften sowie in ihren Lebensdauern wesentlich modifiziert werden.

Für eine quantenmechanische Beschreibung der einem zusätzlichem, statischen Feld ausgesetzten Konfiguration sind zunächst einige Modifikationen in der Formulierung des Eigenwertproblems nötig (Kap. 8). Gemäß der klassischen Analyse von Kap. 7 ist das zur Stabilisierung der Konfiguration erforderliche statische Feld entlang der z -Achse polarisiert und dabei so gerichtet, daß es auf die Elektronen eine Kraft in Richtung zunehmender z -Werte ausübt. Der das kollineare System beschreibende Hamiltonoperator (8.2) ist daher um den Term

$$H_{\text{st}} = -F_{\text{st}}(z_1 + z_2) \quad (10.5)$$

zu ergänzen, der der Energie der Elektronen im statischen Feld der Stärke F_{st} entspricht ($F_{\text{st}} > 0$). Ausgedrückt in den perimetrischen Koordinaten x, y (8.14, 8.15) lautet diese zusätzliche Komponente des Hamiltonoperators

$$H_{\text{st}} = -F_{\text{st}}(x + 2y). \quad (10.6)$$

Wie bereits in Abschnitt 8.3 erwähnt wurde, ist die Äquivalenz zwischen dem unskalierten und dem komplex skalierten System auch bei Anwesenheit eines externen statischen Feldes gewährleistet [126, 127, 128, 129]. Unter Anwendung der komplexen Skalierung erhält die zusätzliche Komponente im Hamiltonoperator den Phasenfaktor $e^{i\theta}$. Insgesamt erhalten wir damit, daß die formale Beschreibung des komplex skalierten Floquet-Systems (8.47 – 8.52) durch das statische Feld gemäß

$$H_{0\theta} \longrightarrow H_{0\theta} - F_{\text{st}}(x + 2y) e^{i\theta} \quad (10.7)$$

modifiziert wird. Unter Berücksichtigung der zusätzlichen Faktoren, die sich aus der Entwicklung der Wellenfunktion nach Sturmschen Basisfunktionen ergeben, erhalten wir damit einen

zusätzlichen Term der Form $(x+y)^2 x y (x+2y)$ in dem effektiv zu diagonalisierenden Hamiltonoperator. Wie alle anderen Terme dieses Hamiltonoperators weist auch dieser zusätzliche Term strenge Auswahlregeln in der Sturmschen Basis auf; das Auftreten von vierten Potenzen von x und y vergrößert lediglich die Bandbreite der Auswahlregeln (8.53) zu

$$|\Delta n_x| \leq 4, \quad |\Delta n_y| \leq 4. \quad (10.8)$$

Abb. 10.15 zeigt die Entwicklung des nichtdispergierenden Wellenpakets mit F zur Quantenzahl $N = 8$ für die statischen Feldstärken $F_{\text{st}} = 0.0005 N^{-4}$, $F_{\text{st}} = 0.001 N^{-4}$, $F_{\text{st}} = 0.0015 N^{-4}$ und $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$. Wir sehen, daß sich das Verhalten des Niveaus in Abhängigkeit der Amplitude F des oszillierenden Feldes qualitativ nicht ändert: für sämtliche dieser statischen Feldstärken finden wir einen signifikanten, von F_{st} nahezu unabhängigen Anstieg des Floquet-Niveaus mit zunehmendem F .

Auffallend ist die mit zunehmendem F_{st} abnehmende Anzahl vermiedener Kreuzungen. Diese Abnahme ist darauf zurückzuführen, daß das statische Feld die effektive Potentialbarriere, die die Bindung des äußeren Elektrons bewirkt, absenkt. Auf diese Weise existiert bereits im *ungestörten* System zu einer gegebenen Quantenzahl N nur eine endliche, mit zunehmendem F_{st} geringer werdende Anzahl autoionisierender Zustände. Folglich wird auch im periodisch getriebenen System die Anzahl der Zustände, mit denen der Floquet-Zustand zu $n = 2$ resonant koppelt, verringert. Die Abnahme der vermiedenen Kreuzungen mit zunehmendem F_{st} läßt sich auch als Manifestation der zunehmenden *Regularität* des klassischen Ionisationsprozesses interpretieren – verursacht dadurch, daß durch das statische Feld die Bewegung im chaotischen Bereich des Phasenraums relativ schnell zu Ionisation führt und somit die Bedeutung der *chaotischen* Komponente der Chaos-assistierten Tunnelionisation verringert wird (in ähnlicher Weise induziert auch die Einbeziehung eines zusätzlichen, regulären Zerfallskanals, etwa spontane Übergänge zu niedrigen atomaren Zuständen, eine Regularisierung des Zerfallsprozesses nichtdispergierender Wellenpakete [151]).

Auch die Abnahme der Energien mit zunehmendem F_{st} bei festem F ist auf die Absenkung des effektiven Potentials zurückzuführen. Entsprechend verschieben sich auch die regulären Inseln im klassischen Phasenraum mit zunehmendem F_{st} zu niedrigeren Anregungen innerhalb des effektiven Potentials. Dies ist in Abb. 10.16 gezeigt, in der wir die klassische Phasenraumstruktur für $\omega = 0.2$, $F = 0.005$ und für variierende statische Feldstärke $F_{\text{st}} = 0, 0.001, 0.002$ darstellen.

Eine bedeutsame Änderung findet vor allem bei den *Ionisationsbreiten* der auf regulären Inseln lokalisierten Zustände statt. Wie wir in Abb. 10.15 sehen, erhöht sich die Ionisationsbreite des nichtdispergierenden Wellenpakets für $F_0 = 0.005$ um 2 bis 3 Größenordnungen von ca. 10^{-11} bei $F_{\text{st}} = 0$ auf ca. 10^{-8} bei $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$. Auch bei dem auf der intrinsischen Insel lokalisierten, stationären Zustand finden wir einen deutlichen Anstieg der Ionisationsbreite mit zunehmendem F_{st} . Diese erhöht sich für $F_0 = 0.005$ ebenfalls von ca.

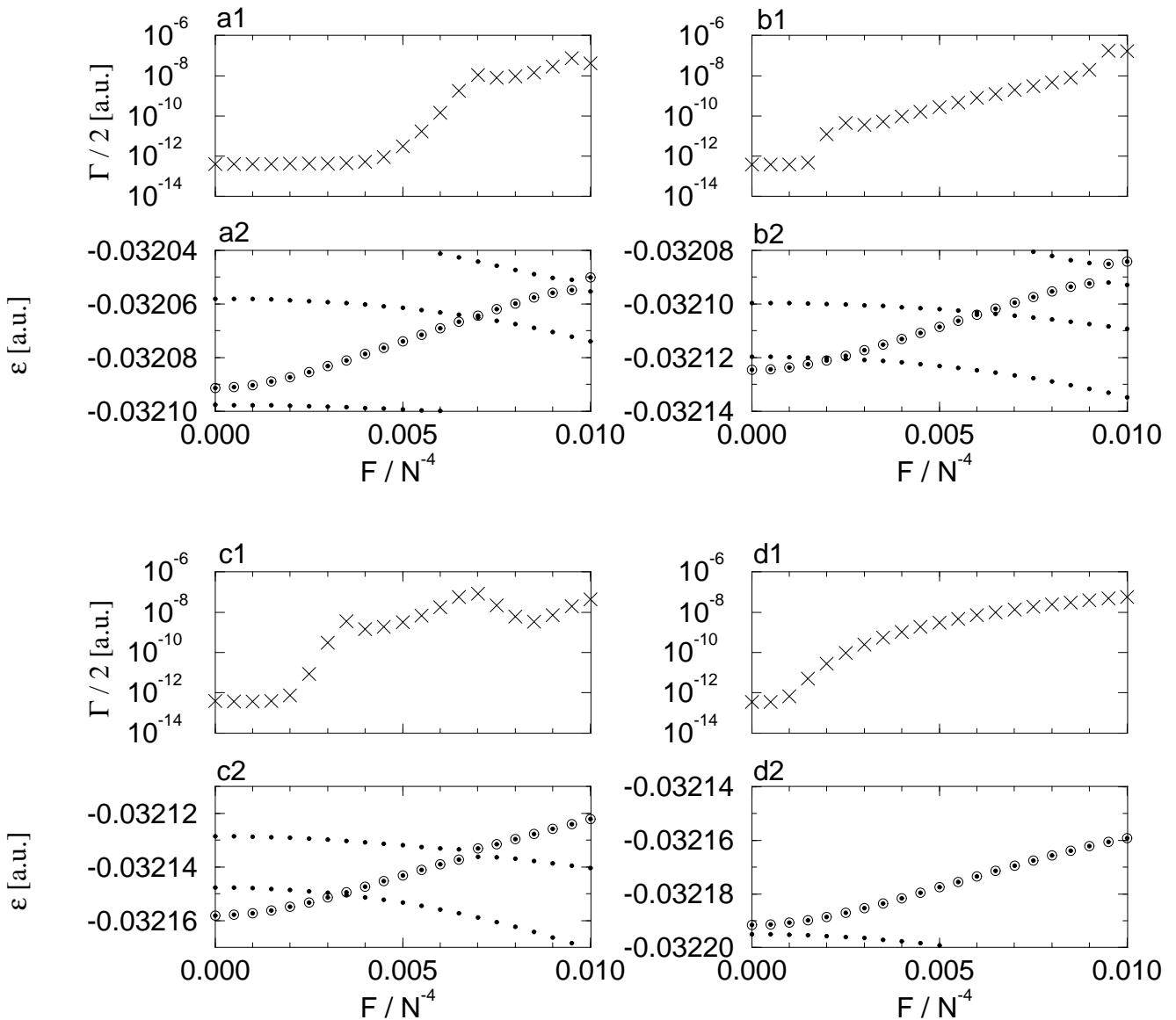


Abb. 10.15: Entwicklung des nichtdispergierenden Wellenpakets zur Quantenzahl $N = 8$ für verschiedene statische Feldstärken: (a) $F_{\text{st}} = 0.0005 N^{-4}$, (b) $F_{\text{st}} = 0.001 N^{-4}$, (c) $F_{\text{st}} = 0.0015 N^{-4}$, (d) $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$. Aufgetragen sind in (a2, b2, c2, d2) die um den Wellenpaketzustand zur Quantenzahl $n = 2$ zentrierten Ausschnitte des Floquet-Spektrums in Abhängigkeit der Feldamplitude F bei der Frequenz $\omega_0 = 0.2$. Die Ionisationsbreiten der Wellenpakete sind in (a1, b1, c1, d1) aufgetragen. Wir sehen, daß sich die Entwicklung der Energieniveaus mit F bei Einschalten eines statischen Feldes nicht wesentlich ändert (siehe Abb. 10.3b für $F_{\text{st}} = 0$). Aufgrund der Absenkung der Potentialbarriere verschieben sich die Niveaus mit zunehmendem F_{st} zu niedrigeren Energien. Das Absenken der Potentialbarriere bewirkt auch einen Rückgang der Anzahl vermiedener Kreuzungen (vgl. (a) bzw. Abb. 10.3b mit (d)), der sich als Manifestation der zunehmenden Regularität des Ionisationsprozesses interpretieren läßt. Eine bedeutende Änderung beobachten wir in den Ionisationsbreiten. Diese erhöhen sich für $F_0 = 0.005$ von ca. 10^{-11} bei $F_{\text{st}} = 0$ auf ca. 10^{-8} bei $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$.

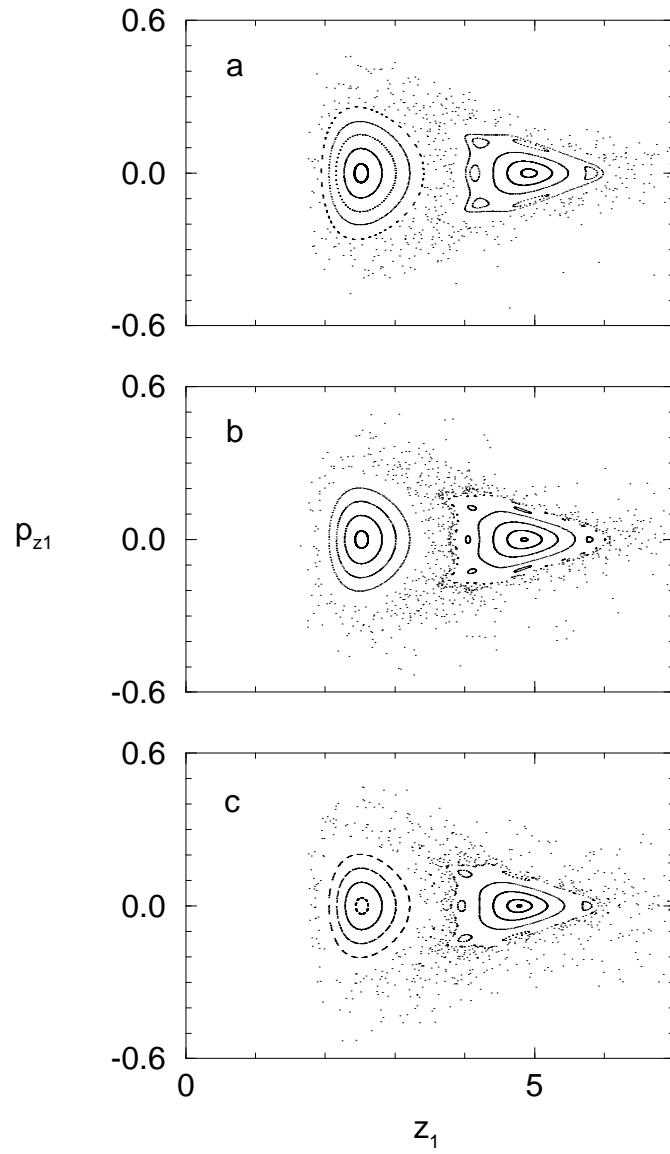


Abb. 10.16: Poincaré-Schnitt des klassischen, kollinearen Phasenraums für $\omega = 0.2$, $F = 0.005$ und für die statischen Feldstärken (a) $F_{\text{st}} = 0$, (b) $F_{\text{st}} = 0.001 N^{-4}$, (c) $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$. Wir sehen, daß ein statisches Feld in diesem Feldstärkebereich die klassische Phasenraumstruktur nur geringfügig modifiziert. Lediglich die Ausdehnung der regulären Inseln verringert sich etwas mit zunehmendem F_{st} .

10^{-11} bei $F_{\text{st}} = 0$ auf ca. 10^{-9} bei $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$. Die zugehörige Floquet-Energie verhält sich für $F_{\text{st}} > 0$ qualitativ ähnlich wie für $F_{\text{st}} = 0$, verschiebt sich also, wie in Abb. 10.3a, mit zunehmendem F zu niedrigeren Energien.

Abb. 10.17 zeigt die Husimi-Dichten der Zustände zu $n = 1$ und $n = 2$ für verschiedene statische Feldstärken $F_{\text{st}} = 0$, $F_{\text{st}} = 0.001 N^{-4}$ und $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$. Die Amplitude des treibenden Feldes beträgt $F_0 = 0.005$. Wir sehen, daß die Phasenprojektionen des stationären Zustands und des nichtdispersierenden Wellenpakets mit zunehmendem F_{st} *keine* merklichen Änderungen erfahren. Insbesondere sind beide Zustände bei $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$ in nahezu der gleichen Weise auf den entsprechenden regulären Inseln lokalisiert wie bei $F_{\text{st}} = 0$. Wir schließen daraus, daß die signifikante Erhöhung der Ionisationsbreiten *nicht* mit einem erhöhten direkten Überlapp der Wellenfunktion mit dem chaotischen Bereich des Phasenraums zu assoziieren ist, sondern in erster Linie auf die durch das statische Feld erhöhte Tunnelwahrscheinlichkeit aus der regulären Insel zurückzuführen ist (bzw. auf die Tatsache, daß bei Anwesenheit eines statischen Feldes die chaotische Dynamik relativ schnell zur Ionisation führt).

Analog verhalten sich die auf der intrinsischen Insel bzw. der 1:1 Resonanzinsel lokalisierten Zustände bei Variation von F_{st} auch für andere Quantenzahlen $N \neq 8$. Es läßt sich daher zusammenfassend feststellen, daß durch das Anlegen eines zusätzlichen, statischen Feldes die Energien und Lokalisierungseigenschaften der mit regulären Inseln assoziierten Zustände nur marginal modifiziert werden. Die Ionisationsbreiten hingegen werden durch das statische Feld erheblich geändert und steigen um einige Größenordnungen an. Wir sehen daraus insbesondere, daß allein aus der Lokalisierung der Zustände auf regulären Inseln im klassischen Phasenraums im allgemeinen *nicht* entnommen werden kann, durch welche Lebensdauern diese Zustände gekennzeichnet sind (siehe dazu auch [99]).

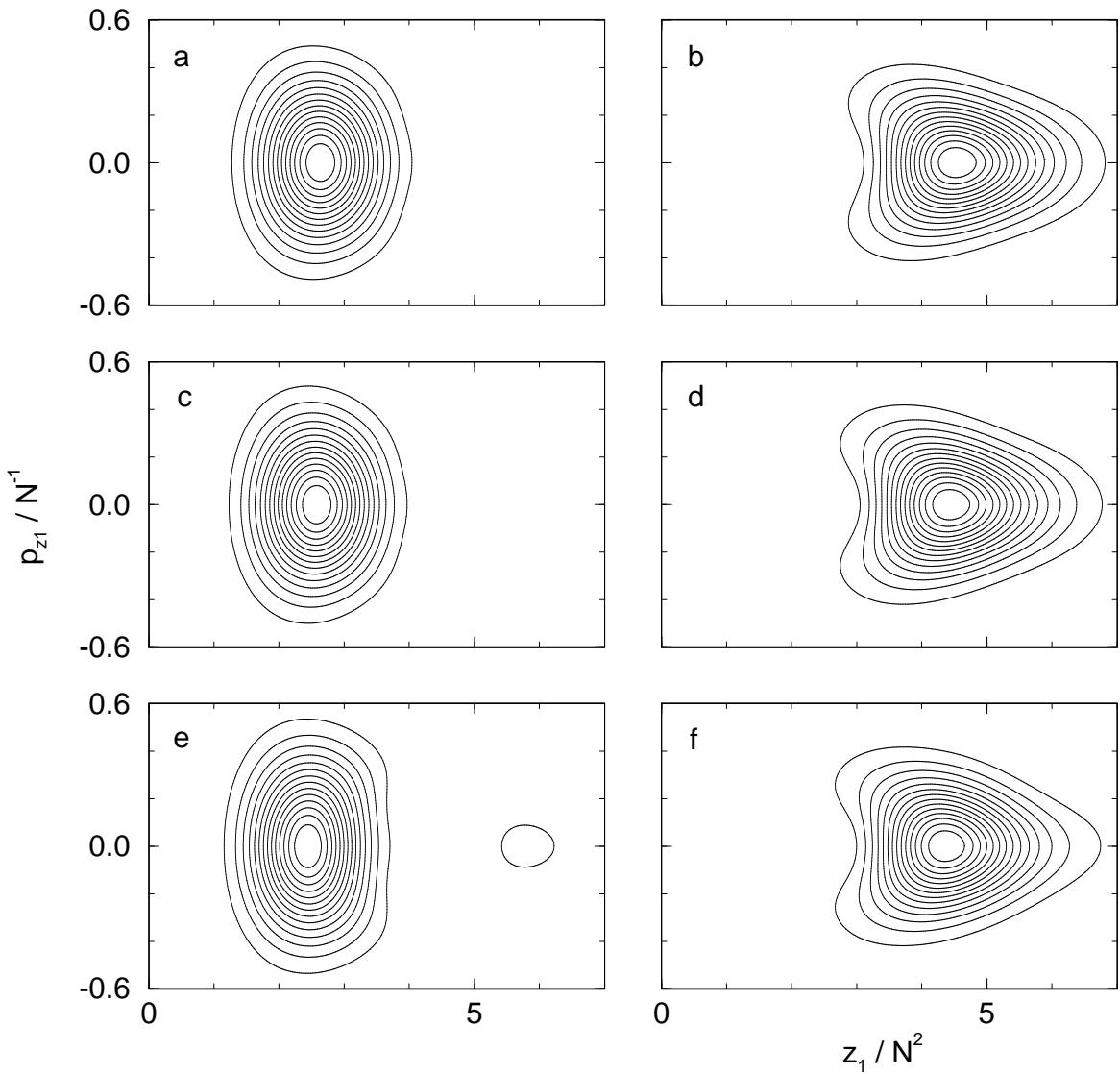


Abb. 10.17: Entwicklung des stationären Zustands und des nichtdispergierenden Wellenpaketes in Abhängigkeit der statischen Feldstärke. Aufgetragen sind die Husimi-Verteilungen der Floquet-Zustände zu $n = 1$ (a, c, e) und zu $n = 2$ (b, d, f) der Serie zur Quantenzahl $N = 8$, für $\omega = 0.2 N^{-3}$, $F = 0.005 N^{-4}$ und die statische Feldstärke (a, b) $F_{\text{st}} = 0$, (c, d) $F_{\text{st}} = 0.001 N^{-4}$, (e, f) $F_{\text{st}} = 0.002 N^{-4}$. Wir sehen, daß sich die Lokalisierungseigenschaften dieser Zustände mit zunehmendem $F_{\text{st}} < 0.002 N^{-4}$ nicht wesentlich ändern. Selbst bei $F_{\text{st}} = 0.4 F$ sind sowohl der intrinsische Zustand als auch das nichtdispergierende Wellenpaket noch vollständig auf den entsprechenden regulären Inseln des (in Abb. 10.16 dargestellten) klassischen Phasenraums lokalisiert (abgesehen von einer kleinen Beimischung einer mit der 1:1 Resonanz assoziierten Komponente beim stationären Zustand in (e)).

Kapitel 11

Zusammenfassung und Ausblick

11.1 Zusammenfassung der Arbeit

In dieser Arbeit wurde die klassische und quantenmechanische Dynamik der Frozen-Planet-Konfiguration von Helium im externen elektromagnetischen Feld untersucht. Im Mittelpunkt unseres Interesses stand dabei die Frage, inwieweit durch die Kombination des externen nicht-linearen Antriebs und der intrinsischen Nichtlinearität der hochkorrelierten Konfiguration Gebiete regulärer Bewegung im klassischen Phasenraum induziert werden, die einer durch das externe Feld resonant getriebenen Konfiguration entsprechen, sowie welche Konsequenzen sich aus der Existenz dieser regulären Gebiete für das entsprechende quantenmechanische System ergeben.

In der Tat hat die Analyse der klassischen Dynamik der kollinearen, getriebenen Konfiguration gezeigt, daß der Phasenraum dieser Konfiguration im allgemeinen gemischt regulär-chaotisch ist. Neben der intrinsischen Insel, die die durch das externe Feld noch nicht zerstörten Tori der Frozen-Planet-Konfiguration umfaßt, treten auch *feldinduzierte* reguläre Inseln auf, die durch nichtlineare Resonanzen zwischen dem externen Antrieb und der ungestörten Frozen-Planet-Dynamik entstehen. Die Erfahrungen in extern getriebenen Ein-Elektronen-Atomen suggerieren, daß diese Resonanzinseln im quantenmechanischen System Zwei-Elektronen-Wellenpaketen entsprechen, die der klassischen Trajektorie dieser Resonanz auf sehr langer Zeitskala *ohne Dispersion* folgen.

Die Regularität der Dynamik entlang der kollinearen Resonanzen läßt sich jedoch im allgemeinen *nicht* auf das dreidimensionale System übertragen. Wie die Analyse der transversalen Stabilitätseigenschaften der getriebenen Konfiguration gezeigt hat, zeichnen sich die feldinduzierten Resonanzen im allgemeinen durch *Instabilität* bezüglich Abweichungen von der Kollinearität aus: Eine anfänglich kleine Abweichung der Konfiguration von der Feldpolarisationsachse verstärkt sich im Lauf der Zeit und führt zu chaotischer Bewegung der Konfiguration im zwei- bzw. dreidimensionalen Konfigurationsraum, die schließlich zur Ioni-

sation führt. Lediglich in der Umgebung von Resonanzen hoher Ordnung finden wir reguläre, quasiperiodische Bewegung.

Im Hinblick auf die Erzeugung nichtdispergierender Zwei-Elektronen-Wellenpakete entlang der Resonanzen der kollinearen Dynamik wurde der Einfluß eines zusätzlichen, *statischen* elektrischen Feldes auf die getriebene Konfiguration untersucht. Tatsächlich konnte gezeigt werden, daß durch ein derartiges statisches Feld die Konfiguration bezüglich Abweichungen von der Kollinearität *stabilisiert* wird. Auf diese Weise ergibt sich eine Einbettung der kollinearen Resonanzen in reguläre Inseln der dreidimensionalen Dynamik, die einer auf die Umgebung des kollinearen Phasenraums beschränkten Bewegung entsprechen. Entlang dieser Inseln werden, gemäß der Abschätzung anhand des semiklassischen EBK-Quantisierungskriteriums, nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete für experimentell zugängliche Quantenzahlen der Größenordnung $N \sim 50 \dots 100$ erwartet.

Um einen Einblick in die quantenmechanische Entsprechung der regulären Inseln der extern getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration zu gewinnen, wurde im zweiten Teil der Arbeit die Quantenmechanik des eindimensionalen getriebenen Helium-Atoms betrachtet. Die Analyse des ungestörten kollinearen Quantensystems ergab ein *reguläres* Quantenspektrum, das unmittelbar auf die Regularität der zugrunde liegenden klassischen Dynamik zurückzuführen ist. Insbesondere wurde eine *exponentielle* Abnahme der Ionisationsbreiten der autoionisierenden Zustände gefunden, die auf deren Lokalisierung auf Phasenraumgebieten gebundener klassischer Bewegung zurückzuführen ist. Ein Vergleich dieser Ionisationsbreiten mit den Ionisationsbreiten der entsprechenden dreidimensionalen Frozen-Planet-Zustände ergab Unterschiede um etliche Größenordnungen, woraus sich schließen läßt, daß die quantenmechanische Ionisation der dreidimensionalen Zustände im wesentlichen über Zerfallskanäle verläuft, die mit den *transversalen* Freiheitsgraden der Konfiguration assoziiert sind.

Die Analyse des extern getriebenen, kollinearen Systems konnte die Existenz nichtdispergierender Zwei-Elektronen-Wellenpakete bestätigen: Floquet-Rechnungen im Bereich der Quantenzahlen $N \leq 10$ des inneren Elektrons konnten zeigen, daß ab Quantenzahlen $N \geq 5$ sowohl stationäre Zustände, die auf der intrinsischen Insel lokalisiert sind, als auch nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete, die mit der 1:1 Resonanz assoziiert sind, im quantenmechanischen Spektrum auftreten. Es wurde aufgezeigt, wie sich diese Zustände durch Variation der Feldamplitude aus Eigenzuständen des ungestörten Systems entwickeln. Des weiteren wurden die Lebensdauern dieser Zustände diskutiert. Diese liegen im Bereich von $10^4 \dots 10^7$ Feldzyklen und weisen starke Fluktuationen auf, die auf die gemischt regulär-chaotische Struktur des klassischen Phasenraums zurückzuführen sind. Es wurde abschließend untersucht, inwieweit durch das Anlegen eines zusätzlichen, statischen elektrischen Feldes die Eigenschaften der regulären Zustände modifiziert werden. Floquet-Rechnungen unter Einbeziehung dieses statischen Feldes ergaben einen mit zunehmender statischer Feldstärke signifi-

kanten Anstieg der Ionisationsbreiten der Zustände (bei gleichbleibender Lokalisierung), der mit der zunehmenden Regularität des klassischen Ionisationsprozesses erklärt wird.

11.2 Perspektiven

Als wesentliches Ergebnis hat unsere Arbeit gezeigt, daß im extern getriebenen Helium-Atom nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete existieren, die auf feldinduzierten Resonanzinseln der Frozen-Planet-Konfiguration lokalisiert sind. Viele Aspekte, die sich im Zusammenhang mit dem Auftreten dieser nichtdispergierenden Wellenpakete ergeben, konnten im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht behandelt werden. So wurde der Einfluß eines externen elektromagnetischen Feldes im klassischen Helium-Atom bislang nur an der Frozen-Planet-Konfiguration untersucht. Weitere Konfigurationen, die aufgrund ihrer Symmetrie im Zusammenhang mit der Erzeugung regulärer Inseln durch ein externes Feld linearer Polarisation prinzipiell interessant sind, sind die kollinare eZe -Konfiguration, bei der sich die Elektronen auf entgegengesetzten Seiten des Kerns befinden, sowie der Langmuir-Orbit. Vorläufige Rechnungen zur extern getriebenen eZe -Konfiguration scheinen allerdings anzudeuten, daß eine Stabilisierung der (im ungestörten System instabilen) Orbits der eZe -Konfiguration, insbesondere des Asymmetric-Stretch-Orbits, durch ein linear polarisiertes elektrisches Wechselfeld nicht möglich ist.

Auch die extern getriebene Frozen-Planet-Konfiguration wurde bisher nur unter eingeschränktem Blickwinkel untersucht. So wurde die Analyse des Phasenraums der kollinaren getriebenen Konfiguration bisher nur im Bereich von Frequenzen ω durchgeführt, die wesentlich kleiner als die Kepler-Frequenz ω_K des inneren Elektrons sind, für die also durch den externen Antrieb nur das äußere Elektron maßgeblich beeinflußt wird. Eine qualitativ unterschiedliche Dynamik wird im Frequenzbereich $\omega \simeq \omega_K$ bzw. $\omega > \omega_K$ erwartet, in dem durch das externe Feld *beide* Elektronen in vergleichbarem Maße angeregt werden. Zunächst ist es plausibel, hier mit großer Wahrscheinlichkeit auch *Doppelionisationsprozesse* zu beobachten, d.h. die Ionisation *beider* Elektronen nach einer durch das Feld induzierten Kollision (derartige Prozesse wurden bei den in der vorliegenden Arbeit betrachteten niedrigen Frequenzen lediglich für sehr hohe Feldamplituden verzeichnet). Weiter stellt sich die Frage, welche Konsequenzen sich aus einem resonanten Antrieb des *inneren* Elektrons, der bei Frequenzen der Größenordnung $\omega \simeq \omega_K$ realisiert wird, ergeben. Sofern ein derartiger resonanter Antrieb zu einer regulären klassischen Bewegung führt, ist in der Tat zu erwarten, daß auch entlang der in dieser Form resonant getriebenen Kepler-Mode nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete im entsprechenden Quantensystem lokalisiert sind.

Weitere Fragen schließen sich an unsere Untersuchungen zur transversalen Stabilität bzw. Instabilität der getriebenenen Konfiguration an. Im Rahmen dieser Arbeit konnten wir wesentliche Aspekte der transversalen Dynamik nur aufzeigen, jedoch nicht zur Gänze klären. In-

teressante Fragestellungen ergeben sich hinsichtlich des Mechanismus der Destabilisierung der resonant getriebenen Konfiguration (insbesondere bei extrem niedrigen Feldamplituden), hinsichtlich der Langzeitdynamik in der Umgebung transversal stabiler bzw. durch ein statisches Feld stabilisierter Resonanzen (insbesondere im Hinblick auf die Rolle von Arnold-Diffusion), sowie hinsichtlich der Dynamik der chaotisch rotierenden Konfiguration. Auch quantenmechanische Aspekte zur transversal instabilen Konfiguration sind bislang noch nicht betrachtet worden. Zu erwarten ist in der Tat, daß sich auch die transversal *instabilen* Resonanzen der getriebenen Konfiguration im quantenmechanischen Spektrum in Form von Zuständen manifestieren, die eine erhöhte Aufenthaltswahrscheinlichkeit entlang des kollinearen Orbits aufweisen.

Als wichtige Erkenntnis hat unsere Arbeit wesentliche qualitative Unterschiede hinsichtlich der Stabilität der Konfiguration zwischen der dimensionsreduzierten, kollinearen Dynamik und der uneingeschränkten Dynamik im dreidimensionalen Konfigurationsraum gezeigt. Dies gilt nicht nur für die Regularität der resonant getriebenen Frozen-Planet-Bewegung in der klassischen Mechanik, sondern trifft auch auf die Stabilität bzw. Langlebigkeit entsprechender *quantenmechanischer* Zustände zu. Die enormen Unterschiede zwischen den Ionisationsraten der kollinearen und der dreidimensionalen Frozen-Planet-Zustände im ungestörten Helium-Atom lassen in der Tat den Schluß zu, daß auch im extern getriebenen System langlebige, mit regulärer klassischer Dynamik der Frozen-Planet-Konfiguration assoziierte Quantenzustände im dreidimensionalen atomaren System auf einer wesentlich kürzeren Zeitskala zerfallen als in einer kollinearen Beschreibung. Insbesondere ist zu erwarten, daß nichtdispergierende Zwei-Elektronen-Wellenpakete des dreidimensionalen getriebenen Helium-Atoms, die mit transversal stabilen (bzw. stabilisierten) Resonanzen der Frozen-Planet-Konfiguration assoziiert sind, bei gleichen Quantenzahlen N durch weitaus *niedrigere* Lebensdauern gekennzeichnet sind als die entsprechenden kollinearen Wellenpaketzustände. Zu klären ist dabei jedoch noch, wie sich der Einfluß der (im ungestörten System effizienten) transversalen Zerfallskanäle der Frozen-Planet-Konfiguration in Anwesenheit der zeitlich periodischen bzw. statischen Störung verhält. Derartige Fragen lassen sich jedoch nur durch exakte Quantenrechnungen zum dreidimensionalen, getriebenen Helium-Atom beantworten, die beim gegenwärtigen Stand der numerischen Technik in dem im Hinblick auf das Auftreten nicht-dispergierender Zwei-Elektronen-Wellenpakete interessanten Bereich von Doppelanregungen nicht möglich sind.

Einen approximativen Zugang zu Quantenzahlen der Größenordnung $N \sim 50 \dots 100$ liefert unter Umständen das von Richter, Wintgen und Mitarbeitern entwickelte, auf dem Prinzip der Born-Oppenheimer-Näherung basierende Verfahren, das sich die approximative Separation der Zeitskalen der Bewegung der Elektronen zunutze macht [17]. Bei diesem Verfahren wird, ähnlich wie bei der Born-Oppenheimer-Beschreibung von Molekülen, die quantenmecha-

nische Dynamik der Frozen-Planet-Konfiguration durch die Dynamik des äußeren Elektrons in dem effektiven adiabatischen Potential genähert, das sich aus der Lösung der Schrödinger-Gleichung des inneren Elektrons bei festem Ort des äußeren Elektrons ergibt. Wie Richter und Mitarbeiter gezeigt haben, lassen sich die Energien der Frozen-Planet-Zustände durch dieses Verfahren gut reproduzieren [17]. Obwohl die Verallgemeinerung dieses Verfahrens auf das periodisch getriebene System mit Komplikationen verbunden ist, die eine numerische Anwendung im Vergleich zum ungestörten System erheblich erschweren (so müssen im getriebenen System verschiedene Werte des Gesamtdrehimpulses, der keine Erhaltungsgröße mehr darstellt, berücksichtigt werden), ist anzunehmen, daß es dieses Verfahren erheblich leichter erlaubt, doppelt hochangeregte Frozen-Planet-Zustände im externen elektromagnetischen Feld zu beschreiben, als *ab initio* Methoden.

Neben der numerischen Berechnung nichtdispergierender Zwei-Elektronen-Wellenpakete im dreidimensionalen, getriebenen Helium-Atom stellt auch die *Visualisierung* dieser Wellenpakete eine große Herausforderung dar (siehe zu diesem Thema auch [152]). Im Gegensatz zur kollinearen Dynamik ist es im dreidimensionalen Konfigurationsraum aufgrund der hohen Zahl der Freiheitsgrade nicht möglich, die Wahrscheinlichkeitsdichte des Zwei-Elektronen-Zustands in Abhängigkeit sämtlicher Koordinaten des Systems aufzutragen. Zu prüfen ist daher, auf welche Koordinaten- bzw. Phasenraumebenen die Wellenfunktion sinnvollerweise zu projizieren ist, um die kollineare und transversale Lokalisierung der Wellenpakete entlang der feldinduzierten Resonanzen anhand von Dichteverteilungen unzweideutig darzustellen.

Anhang

A.1 Numerische Integration der Bewegungsgleichungen

Die numerische Integration der klassischen Bewegungsgleichungen (3.46 – 3.51) wurde mit der Routine D02CJF der NAG-Library [153] durchgeführt, die eine Adams-Methode variabler Ordnung und Schrittweite verwendet. Diese Routine hat sich als effizienter gegenüber Runge-Kutta-Methoden erwiesen. Verglichen mit dieser Routine wurde außerdem eine auf dem von Meyer [154] entwickelten Verfahren basierende Integrationsroutine, bei dem neben der ersten Zeitableitung auch *höhere* Zeitableitungen der Variablen berechnet werden, was die Wahl relativ großer Zeitschritte ermöglicht und damit den Einfluß von Rundungsfehlern gering hält. Während bei Wasserstoffsystemen dieses Verfahren eine sehr effiziente Integration der Bewegungsgleichungen erlaubt [155], hat es sich für die Integration von (3.46 – 3.51) als vergleichsweise ineffizient erwiesen, da die Berechnung höherer Ableitungen der in (3.50) und (3.51) auftretenden Terme mit erheblichem numerischen Rechenaufwand verbunden ist.

Aufgrund der endlichen numerischen Rechengenauigkeit läßt sich die Konvergenz der numerischen Integration nicht über einen beliebig langen Integrationszeitraum gewährleisten. Insbesondere im chaotischen Bereich des Phasenraums, in dem kleine Abweichungen von einer gegebenen Trajektorie sich im Lauf der Zeit exponentiell verstärken, ist eine konvergente Integration der Bewegungsgleichungen nur innerhalb eines begrenzten Zeitraums möglich. So sind die in Kap. 5 und Kap. 7 gezeigten Trajektorien, die sich durch chaotische Dynamik (etwa Abb. 5.1) bzw. durch Irregularitäten auf sehr langer Zeitskala (etwa Abb. 5.9) auszeichnen, im allgemeinen nicht über den in den entsprechenden Abbildungen betrachteten Zeitraum konvergent berechnet worden. Dies spielt jedoch keine Rolle, da zur Charakterisierung der chaotischen Dynamik die quantitativ genaue Zeitentwicklung einzelner Trajektorien nicht relevant ist. Von Belang hingegen sind statistische Merkmale der betrachteten chaotischen Dynamik (etwa die Zeitentwicklung der Überlebenswahrscheinlichkeit, siehe Abb. 5.14), die, wie durch Variation der Integrationsgenauigkeit überprüft wurde, in den numerischen Rechnungen korrekt reproduziert wurden.

A.2 Berechnung der Matrixelemente in der Sturmschen Basis

In diesem Anhang wird die Berechnung der Matrixelemente des effektiven Hamiltonoperators und des effektiven Identitätsoperators aus (8.47) in der Sturmschen Basis skizziert. Ausgeschrieben in ihren elementaren Komponenten lauten die in (8.47) auftretenden Operatoren

$$(x+y) x y H_{0\theta} (x+y) = \left(-x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} x y - \left(x \frac{\partial^2}{\partial x^2} x + x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) y^2 - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} y^3 \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left(x y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} y + x^2 \left(y \frac{\partial^2}{\partial y^2} y + y^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + x^3 y \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right. \\ \left. + x^2 \frac{\partial}{\partial x} x y \frac{\partial}{\partial y} + x^2 \frac{\partial}{\partial x} y \frac{\partial}{\partial y} y + x \frac{\partial}{\partial x} x y^2 \frac{\partial}{\partial y} y \right) e^{-2i\theta} \\ + \left(x^2 y + 2x y^2 + y^3 - Z(x^3 + 3x^2 y + 2x y^2) \right) e^{-i\theta} \quad (A.1)$$

$$(x+y) x y V_\theta (x+y) = \frac{F}{2\omega} \left(x y^2 \frac{\partial}{\partial y} y + x^2 \left(y^2 \frac{\partial}{\partial y} + y \frac{\partial}{\partial y} y \right) + x^3 y \frac{\partial}{\partial y} \right) e^{-i\theta} \quad (A.2)$$

$$(x+y) x y (x+y) = x^3 y + 2x^2 y^2 + x y^3 \quad (A.3)$$

Jede dieser hier auftretenden Komponenten lässt sich als Produkt der Operatoren (8.42 – 8.44) darstellen und damit durch die Operatoren \hat{S}_\pm, \hat{S}_3 (8.38, 8.39) unter Berücksichtigung der Regeln

$$\hat{S}_3 \hat{S}_\pm = \hat{S}_\pm (\hat{S}_3 \pm 1) \quad (A.4)$$

$$\hat{S}_\pm \hat{S}_\mp = \hat{S}_3 (\hat{S}_3 \mp 1) \quad (A.5)$$

ausdrücken:

$$x^2 = \alpha^2 \left(\frac{1}{4} \hat{S}_+^2 + \frac{1}{2} \hat{S}_+ (2 \hat{S}_3 + 1) + \frac{3}{2} \hat{S}_3^2 + \frac{1}{2} \hat{S}_- (2 \hat{S}_3 - 1) + \frac{1}{4} \hat{S}_-^2 \right) \quad (A.6)$$

$$x^3 = \alpha^3 \left(\frac{1}{8} \hat{S}_+^3 + \frac{3}{4} \hat{S}_+^2 (\hat{S}_3 + 1) + \frac{3}{8} \hat{S}_+ (5 \hat{S}_3^2 + 5 \hat{S}_3 + 2) + \frac{1}{2} \hat{S}_3 (5 \hat{S}_3^2 + 1) \right. \\ \left. + \frac{3}{8} \hat{S}_- (5 \hat{S}_3^2 - 5 \hat{S}_3 + 2) + \frac{3}{4} \hat{S}_-^2 (\hat{S}_3 - 1) + \frac{1}{8} \hat{S}_-^3 \right) \quad (A.7)$$

$$x^2 \frac{\partial}{\partial x} = \alpha \left(-\frac{1}{4} \hat{S}_+^2 - \frac{1}{2} \hat{S}_+ (\hat{S}_3 + 1) - \frac{1}{2} \hat{S}_3 + \frac{1}{2} \hat{S}_- (\hat{S}_3 - 1) + \frac{1}{4} \hat{S}_-^2 \right) \quad (A.8)$$

$$x \frac{\partial}{\partial x} x = \alpha \left(-\frac{1}{4} \hat{S}_+^2 - \frac{1}{2} \hat{S}_+ \hat{S}_3 + \frac{1}{2} \hat{S}_3 + \frac{1}{2} \hat{S}_- \hat{S}_3 + \frac{1}{4} \hat{S}_-^2 \right) \quad (A.9)$$

$$x^2 \frac{\partial}{\partial x} x = \alpha^2 \left(-\frac{1}{8} \hat{S}_+^3 - \frac{1}{2} \hat{S}_+^2 (\hat{S}_3 + 1) - \frac{1}{8} \hat{S}_+ (5 \hat{S}_3^2 + 5 \hat{S}_3 + 2) \right. \\ \left. + \frac{1}{8} \hat{S}_- (5 \hat{S}_3^2 - 5 \hat{S}_3 + 2) + \frac{1}{2} \hat{S}_-^2 (\hat{S}_3 - 1) + \frac{1}{8} \hat{S}_-^3 \right) \quad (A.10)$$

$$x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{1}{4} \hat{S}_+^2 + \frac{1}{2} \hat{S}_+ - \frac{1}{2} \hat{S}_3^2 - \frac{1}{2} \hat{S}_- + \frac{1}{4} \hat{S}_-^2 \quad (A.11)$$

$$x \frac{\partial^2}{\partial x^2} x = \frac{1}{4} \hat{S}_+^2 - \frac{1}{2} \hat{S}_+ - \frac{1}{2} \hat{S}_3^2 + \frac{1}{2} \hat{S}_- + \frac{1}{4} \hat{S}_-^2 \quad (A.12)$$

$$x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} x = \alpha \left(\frac{1}{8} \hat{S}_+^3 + \frac{1}{4} \hat{S}_+^2 (\hat{S}_3 + 1) - \frac{1}{8} \hat{S}_+ (\hat{S}_3^2 + \hat{S}_3 + 2) - \frac{1}{2} \hat{S}_3 (\hat{S}_3^2 + 1) \right)$$

$$- \frac{1}{8} \hat{S}_- (\hat{S}_3^2 - \hat{S}_3 + 2) + \frac{1}{4} \hat{S}_-^2 (\hat{S}_3 - 1) + \frac{1}{8} \hat{S}_-^3. \quad (\text{A.13})$$

Die Anwendung auf eine Sturmsche Basisfunktion $S_n^{(\alpha)}$ ergibt sich damit unmittelbar aus (8.40, 8.41). Für (A.8) etwa erhalten wir

$$\begin{aligned} x^2 \frac{\partial}{\partial x} S_n^{(\alpha)} &= \alpha \left(-\frac{1}{4} (n+1) \sqrt{n(n+2)} S_{n+2}^{(\alpha)} - \frac{1}{2} (n+1) \sqrt{n(n+1)} S_{n+1}^{(\alpha)} - \frac{1}{2} n S_n^{(\alpha)} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} (n-1) \sqrt{n(n-1)} S_{n-1}^{(\alpha)} + \frac{1}{4} (n-1) \sqrt{n(n-2)} S_{n-2}^{(\alpha)} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Da der Index n der Sturmschen Funktionen durch die Operatoren (A.6–A.13) maximal um $\Delta n = \pm 3$ geändert wird, lassen sich die Anwendungen der Operatoren (A.1–A.3) auf das Produkt $S_{n_x}^{(\alpha_x)}(x) S_{n_y}^{(\alpha_y)}(y)$ als Linearkombinationen der Produkte $S_{n'_x}^{(\alpha_x)}(x) S_{n'_y}^{(\alpha_y)}(y)$ mit $|n_x - n'_x| \leq 3$ und $|n_y - n'_y| \leq 3$ darstellen. Innerhalb der Sturmschen Basis (8.50) verfügen die Operatoren (A.6–A.13) damit über die Auswahlregeln $|\Delta n_x| \leq 3$ und $|\Delta n_y| \leq 3$.

A.3 Konvergenz der quantenmechanischen Rechnungen

Wie bereits in Abschnitt 8.4 erwähnt wurde, besteht die für eine numerische Lösung des Eigenwertproblems unvermeidliche Näherung darin, die Anzahl der Basisfunktionen sowie die Zahl N_k der Floquet-Blöcke zu beschränken. Es ist daher zu untersuchen, ab welchen Basislängen N_x, N_y in der x - und y -Variablen, sowie ab welchen Werten von N_k das Ergebnis der numerischen Rechnung konvergiert ist, d.h. sich für größere Werte von N_x, N_y und N_k nicht mehr ändert. Dabei ist zu beachten, daß in dem uns interessierenden Eigenwertproblem frei wählbare Parameter existieren, von deren Werten die Konvergenzgeschwindigkeit im allgemeinen abhängt: die Sturmschen Skalierungsparameter α_x, α_y , die im wesentlichen die Ortsauflösung der Sturmschen Basis in den Koordinaten x und y charakterisieren, sowie der Winkel θ der komplexen Skalierung. Im Hinblick auf einen möglichst geringen Gesamtspeicherplatz für die numerische Diagonalisierung ist daher zu untersuchen, bei welcher Wahl dieser Parameter die für eine konvergente Rechnung erforderlichen Mindestwerte von N_x, N_y und N_k minimal werden.

Konkret sind wir daran interessiert, die Eigenschaften von autoionisierenden Zuständen zu bestimmen, die mit den regulären Strukturen des klassischen Phasenraums der kollinearen, getriebenen Frozen-Planet-Konfiguration assoziiert sind. Neben den Energien dieser Zustände und deren Überlappmatrixelementen mit Zuständen des ungestörten Systems geht es uns insbesondere auch um deren *Ionisationsbreiten*, die in der Regel sehr hohe Anforderungen an die numerische Konvergenz stellen, da sie eine sehr gute Beschreibung der Wellenfunktion im *gesamten* Phasenraum (insbesondere auch in den mit klassischer Ionisation assoziierten, „verbotenen“ Gebieten) erfordert. Da wir die Ionisationsbreiten dieser Zustände insbesondere auch bei Feldparametern bestimmen wollen, bei denen diese Zustände stark mit anderen

Zuständen der gleichen Serie mischen (bei vermiedenen Kreuzungen also), ist eine konvergente Berechnung der Ionisationsbreiten sämtlicher autoionisierender Zustände der betrachteten Serie wünschenswert. Konkret fordern wir, daß die Ionisationsbreiten niedrig liegender autoionisierender Zustände (d.h. mit niedrigen Quantenzahlen n) bis auf einen Absolutfehler von 10^{-14} a.u. konvergiert sind.

Aufgrund der Tatsache, daß die Wahrscheinlichkeitsdichte der autoionisierenden Zustände in den Koordinaten der Elektronen approximativ separiert (siehe Abb. 9.3), bestimmen wir die Kombination der Basislängen N_x , N_y und Parameter α_x , α_y , bei denen eine derartige Konvergenz unter relativ guten Bedingungen (d.h. bei relativ geringem Gesamtspeicherplatzbedarf) vorliegt, separat in den Variablen x und y . Dazu wählen wir eine relativ kleine Basis, die die grundlegende Struktur des betrachteten Floquet-Spektrums im wesentlichen korrekt reproduziert. In dieser Basis werden zunächst der Parameter α_x und die Basislänge N_x variiert; es wird eine geeignete Kombination von α_x und N_x gesucht, bei der N_x relativ niedrig ist und die uns interessierenden Ionisationsbreiten konvergiert sind (d.h. sich bei Verdopplung von N_x um weniger als 10^{-14} a.u. ändern). Analog bestimmen wir eine geeignete Kombination von α_y und N_y durch separate Variation dieser beiden Größen.

Eine Teilbedingung für die optimale Kombination von N_x und α_x bzw. von N_y und α_y ergibt sich aus der Ausdehnung der Dichteverteilung der Zustände im Konfigurationsraum. Zu beachten ist dabei, daß die n -te Sturmsche Funktion $S_n^{(\alpha)}(r)$ maximal wird bei ca. $r \simeq 2n\alpha$ und oberhalb davon exponentiell abfällt (ähnlich wie die Wasserstoffeigenfunktion zur Drehimpulsquantenzahl $l = 0$), im wesentlichen also den Bereich $r = 0 \dots 2n\alpha$ überdeckt. Folglich wird eine Wellenfunktion, deren Wahrscheinlichkeitsdichte auf den Bereich $r = 0 \dots r_{\max}$ konzentriert ist und außerhalb dieses Bereichs nahezu verschwindet, optimal durch die Sturmsche Basis $\{S_1^{(\alpha)}, \dots, S_N^{(\alpha)}\}$ beschrieben, bei der das Produkt von N und α etwas oberhalb $r_{\max}/2$ liegt, die Basis den Bereich $r = 0 \dots r_{\max}$ also gut beschreibt.

Da die Wellenfunktionen sämtlicher Zustände der Serie zu einer gegebenen Quantenzahl N in der Koordinate des inneren Elektrons näherungsweise durch die Wasserstoffeigenfunktion zur Knotenzahl $N - 1$ bei der Kernladung $Z = 2$ gegeben sind (siehe Abb. 9.3), deren maximale Ausdehnung in z_2 ca. $z_{2,\max} \simeq N^2$ beträgt, ist es für eine konvergente Beschreibung dieser Zustände erforderlich, die Sturmsche Basis in der Variable y so zu wählen, daß $N_y \alpha_y$ größer als $N^2/2$ ist (konkret finden wir gute Konvergenz bei $N_y \alpha_y \sim N^2$). Typischerweise ergeben sich in der Variable x höhere Werte für die Basislänge und den Skalierungsparameter als in y . Zum einen zeichnen sich, wie wir in Abb. 9.3 sehen, die Wellenfunktionen in der Koordinate z_1 durch Variationen auf viel größeren Ortsskalen aus als in z_2 (und erfordern daher eine geringere Ortsauflösung in x als in y), zum anderen muß in der Koordinate des äußeren Elektrons insgesamt ein viel größerer Bereich überdeckt werden als in der des inneren Elektrons, da die Zustände einer Serie durch unterschiedliche Ausdehnungen in z_1 gekennzeichnet

sind.

Auch die optimale Anzahl N_k der Floquet-Komponenten wird durch separate Variation von N_k bestimmt. Bei der Wahl von N_k ist zu beachten, daß neben sämtlichen autoionisierenden Zuständen der betrachteten Serie auch die niedrigsten Kontinuumszustände in die Rechnung miteinbezogen werden müssen, die um ein bis zwei Vielfache der treibenden Frequenz von der Ionisationsschwelle entfernt sind [156]. Es zeigt sich, daß Kopplungen zu autoionisierenden Zuständen, die Serien zu anderen Quantenzahlen angehören, keine Rolle spielen (d.h. die Ionisationsbreiten der uns interessierenden Zustände um weniger als 10^{-14} a.u. verändern). Typischerweise legen wir die Floquet-Zone genau in die Mitte zwischen der Energie des niedrigsten Zustands der Serie und der Kontinuumsschwelle. Die Summe (8.52) erstreckt sich dann von $-k_0$ bis k_0 , wobei das Produkt aus $N_k = 2k_0 + 1$ und ω etwas größer ist als der Abstand des niedrigsten Zustands der Serie von der Kontinuumsschwelle.

Der Parameter θ wurde zur Optimierung der Konvergenzgeschwindigkeit nicht variiert. Als gute Wahl hat sich $\theta = 0.1$ erwiesen.

Die auf diese Weise bestimmten Basislängen und Parameter werden dann zur eigentlichen Berechnung des Floquet-Spektrums kombiniert. Die numerische Konvergenz der Rechnung wird durch Variation von α_x , α_y und θ überprüft. Dabei hat sich gezeigt, daß die uns interessierenden Ionisationsbreiten bezüglich Variation dieser Parameter stabil sind. Wir erwarten daher, daß die Ionisationsbreiten in Tab. 9.2 und Tab. 10.1 bis auf einen Absolutfehler von 10^{-14} konvergiert sind.

Literaturverzeichnis

- [1] P. Lambropoulos, P. Maragakis, and J. Zhang, Phys. Rep. **305**, 203 (1998).
- [2] J. Purvis *et al.*, Phys. Rev. Lett. **71**, 3943 (1993).
- [3] J. Zhang and P. Lambropoulos, J. Phys. B **28**, L101 (1995).
- [4] J. Parker, K. T. Taylor, C. W. Clark, and S. Blodgett-Ford, J. Phys. B **29**, L33 (1996).
- [5] A. Scrinzi and B. Piraux, Phys. Rev. A **56**, R13 (1997).
- [6] B. Walker *et al.*, Phys. Rev. Lett. **73**, 1227 (1994).
- [7] A. Becker and F. H. M. Faisal, J. Phys. B **29**, L197 (1996).
- [8] J. B. Watson *et al.*, Phys. Rev. Lett. **78**, 1884 (1997).
- [9] D. Bauer, Phys. Rev. A **56**, 3028 (1997).
- [10] M. Lewenstein, K. Rzżewski, and P. Salières, in *Super-Intense Laser-Atom Physics*, edited by B. Piraux *et al.* (Plenum Press, New York, 1993), S. 425.
- [11] K. Rzżewski, M. Lewenstein, and P. Salières, Phys. Rev. A **49**, 1196 (1994).
- [12] P. B. Lerner, K. J. LaGattuta, and J. S. Cohen, Phys. Rev. A **49**, R12 (1994).
- [13] K. J. LaGattuta and J. S. Cohen, J. Phys. B **31**, 5281 (1998).
- [14] K. Richter, G. Tanner, and D. Wintgen, Phys. Rev. A **48**, 4182 (1993).
- [15] D. Wintgen, K. Richter, and G. Tanner, CHAOS **2**, 19 (1992).
- [16] K. Richter and D. Wintgen, Phys. Rev. Lett. **65**, 1965 (1990).
- [17] K. Richter, J. S. Briggs, D. Wintgen, and E. A. Solov'ev, J. Phys. B **25**, 3929 (1992).
- [18] A. Buchleitner, Thèse de doctorat, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1993.
- [19] A. Buchleitner and D. Delande, Phys. Rev. Lett. **75**, 1487 (1995).

- [20] D. Delande, J. Zakrzewski, and A. Buchleitner, *Europhys. Lett.* **32**, 107 (1995).
- [21] J. Zakrzewski, D. Delande, and A. Buchleitner, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4015 (1995).
- [22] A. Bürgers, D. Wintgen, and J. M. Rost, *J. Phys. B* **28**, 3163 (1995).
- [23] B. Grémaud and D. Delande, *Europhys. Lett.* **40**, 363 (1997).
- [24] J. M. Rost, K. Schulz, M. Domke, and G. Kaindl, *J. Phys. B* **30**, 4663 (1997).
- [25] N. Bohr, *Phil. Mag.* **26**, 488 (1913).
- [26] I. Langmuir, *Phys. Rev.* **17**, 339 (1921).
- [27] J. H. Van Vleck, *Phil. Mag.* **44**, 842 (1922).
- [28] H. A. Kramers, *Z. Phys.* **13**, 312 (1923).
- [29] A. Einstein, *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* **19**, 82 (1917).
- [30] G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **90**, 817 (1953).
- [31] J. B. Keller, *Ann. Phys. (N.Y.)* **4**, 180 (1958).
- [32] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **8**, 1979 (1967).
- [33] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **10**, 1004 (1969).
- [34] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **11**, 1791 (1970).
- [35] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **12**, 343 (1971).
- [36] J. G. Leopold and I. C. Percival, *J. Phys. B* **13**, 1037 (1980).
- [37] M. S. Dimitrijević and P. V. Grujić, *Z. Naturforsch.* **39a**, 930 (1984).
- [38] G. E. Wessenberg, D. W. Noid, and J. B. Delos, *Chem. Phys. Lett.* **118**, 72 (1985).
- [39] S. Watanabe, *Phys. Rev. A* **36**, 1566 (1987).
- [40] H. Klar, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 66 (1986).
- [41] H. Klar, *Z. Phys. D* **3**, 353 (1986).
- [42] H. Klar, *J. Opt. Soc. Am. B* **4**, 788 (1987).
- [43] M. Poirier, *Phys. Rev. A* **40**, 3498 (1989).
- [44] H. Friedrich and D. Wintgen, *Phys. Rep.* **183**, 37 (1989).

- [45] K. Richter and D. Wintgen, *J. Phys. B* **23**, L197 (1990).
- [46] D. Wintgen and K. Richter, *Comments At. Mol. Phys.* **29**, 261 (1994).
- [47] J. Kim and G. S. Ezra, in *Proceedings of the Adriatico Conference on Quantum Chaos*, edited by H. Cedeira *et al.* (World Scientific, Hong Kong, 1991).
- [48] G. S. Ezra, K. Richter, G. Tanner, and D. Wintgen, *J. Phys. B* **24**, L413 (1991).
- [49] R. Blümel and W. P. Reinhardt, in *Directions in Chaos*, edited by B. L. Hao *et al.* (World Scientific, Hong Kong, 1991), Vol. 4.
- [50] J. Yuan and Y. Gu, *CHAOS* **3**, 569 (1993).
- [51] X. Tang, Y. Gu, and J. Yuan, *Phys. Rev. A* **54**, 496 (1996).
- [52] Z. Bai, Y. Gu, and J. Yuan, *Physica D* **118**, 17 (1998).
- [53] J. Müller, J. Burgdörfer, and D. Noid, *Phys. Rev. A* **45**, 1471 (1992).
- [54] P. Grujić and N. Simonović, *J. Phys. B* **24**, 5055 (1991).
- [55] P. V. Grujić and N. S. Simonović, *J. Phys. B* **28**, 1159 (1995).
- [56] T. Yamamoto and K. Kaneko, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1928 (1993).
- [57] D. L. Shepelyansky, *J. Phys. B* **27**, L235 (1994).
- [58] V. N. Ostrovsky and N. V. Prudov, *Phys. Rev. A* **51**, 1936 (1995).
- [59] V. N. Ostrovsky and N. V. Prudov, *J. Phys. B* **28**, 4435 (1995).
- [60] A. López-Castillo, M. A. M. de Aguiar, and A. M. Ozorio de Almeida, *J. Phys. B* **29**, 197 (1996).
- [61] J. A. West, Z. D. Gaeta, and C. R. Stroud Jr., *Phys. Rev. A* **58**, 186 (1998).
- [62] N. Simonović, *Phys. Rev. A* **50**, 4390 (1994).
- [63] J. Müller and J. Burgdörfer, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 2375 (1993).
- [64] R. Artuso, E. Aurell, and P. Cvitanović, *Nonlinearity* **3**, 325 (1990).
- [65] P. Cvitanović and B. Eckhardt, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 823 (1989).
- [66] K. Richter and D. Wintgen, *J. Phys. B* **26**, 3719 (1993).
- [67] B. Grémaud and P. Gaspard, *J. Phys. B* **31**, 1671 (1998).

- [68] J. Botina and H. Rabitz, Phys. Rev. Lett. **75**, 2948 (1995).
- [69] K. Richter and D. Wintgen, J. Phys. B **24**, L565 (1991).
- [70] I. C. Percival, Proc. R. Soc. Lond. A. **353**, 289 (1977).
- [71] U. Eichmann, V. Lange, and W. Sandner, Phys. Rev. Lett. **64**, 274 (1990).
- [72] P. Camus *et al.*, Phys. Rev. Lett. **62**, 2365 (1989).
- [73] K.-D. Heber *et al.*, Phys. Rev. A **56**, 1255 (1997).
- [74] U. Eichmann, V. Lange, and W. Sandner, Phys. Rev. Lett. **68**, 21 (1992).
- [75] M. Seng, M. Halka, K.-D. Heber, and W. Sandner, Phys. Rev. Lett. **74**, 3344 (1995).
- [76] L. D. Landau and E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik; Band I: Mechanik* (Akademie-Verlag, Berlin, 1976).
- [77] P. M. Koch, Physica D **83**, 178 (1995).
- [78] A. J. Lichtenberg and M. A. Lieberman, *Regular and Stochastic Motion* (Springer-Verlag, New York, 1983).
- [79] J. G. Leopold and I. C. Percival, Phys. Rev. Lett. **41**, 944 (1978).
- [80] P. Kustaanheimo and E. Stiefel, J. Reine Angew. Math. **218**, 204 (1965).
- [81] S. J. Aarseth and K. Zare, Celest. Mech. **10**, 185 (1974).
- [82] C. L. Siegel, Ann. Math. **42**, 127 (1941).
- [83] B. I. Meerson, E. A. Oks, and P. V. Sasorov, J. Phys. B **15**, 3599 (1982).
- [84] J. G. Leopold and D. Richards, J. Phys. B **19**, 1125 (1986).
- [85] V. I. Arnold, Russ. Math. Surveys **18**, 85 (1964).
- [86] U. Smilansky, in *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches, Session LII, 1989, edited by M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (Elsevier, Amsterdam, 1991), S. 371.
- [87] F. Borgonovi, I. Guarneri, and P. Sempio, Nuovo Cimento **102 B**, 151 (1988).
- [88] Y.-C. Lai, C. Grebogi, R. Blümel, and M. Ding, Phys. Rev. A **45**, 8284 (1992).
- [89] C. F. Hillermeier, R. Blümel, and U. Smilansky, Phys. Rev. A **45**, 3486 (1992).
- [90] R. S. MacKay, J. D. Meiss, and I. C. Percival, Phys. Rev. Lett. **52**, 697 (1984).

- [91] J. D. Meiss and E. Ott, Phys. Rev. Lett. **55**, 2741 (1985).
- [92] Y.-C. Lai, M. Ding, C. Grebogi, and R. Blümel, Phys. Rev. A **46**, 4661 (1992).
- [93] A. Buchleitner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 3818 (1995).
- [94] M. J. Davis and E. J. Heller, J. Chem. Phys. **75**, 246 (1981).
- [95] O. Bohigas, S. Tomsovic, and D. Ullmo, Phys. Rev. Lett. **64**, 1479 (1990).
- [96] D. Delande, in *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches, Session LII, 1989, edited by M.-J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (Elsevier, Amsterdam, 1991), S. 667.
- [97] G. P. Berman and G. M. Zaslavsky, Phys. Lett. **61A**, 295 (1977).
- [98] J. Henkel and M. Holthaus, Phys. Rev. A **45**, 1978 (1992).
- [99] A. Buchleitner and D. Delande, Chaos, Solitons & Fractals **5**, 1125 (1995).
- [100] I. Bialynicki-Birula, M. Kaliński, and J. H. Eberly, Phys. Rev. Lett. **73**, 1777 (1994).
- [101] M. Kaliński and J. H. Eberly, Phys. Rev. Lett. **77**, 2420 (1996).
- [102] A. Brunello, T. Uzer, and D. Farrelly, Phys. Rev. Lett. **76**, 2874 (1996).
- [103] K. Sacha and J. Zakrzewski, Phys. Rev. A **58**, 3974 (1998).
- [104] L. Brillouin, J. Phys. Radium **7**, 353 (1926).
- [105] V. P. Maslov, *Théorie des Perturbations et Méthodes Asymptotiques* (Dunod, Paris, 1972).
- [106] I. C. Percival, Adv. Chem. Phys. **36**, 1 (1977).
- [107] K. Sohlberg, R. E. Tuzun, B. G. Sumpter, and D. W. Noid, Phys. Rev. A **57**, 906 (1998).
- [108] H. P. Breuer and M. Holthaus, Ann. Phys. (N.Y.) **211**, 249 (1991).
- [109] W. E. Cooke and T. F. Gallagher, Phys. Rev. Lett. **41**, 1648 (1978).
- [110] M. Domke *et al.*, Phys. Rev. A **53**, 1424 (1996).
- [111] J. G. Leopold and D. Richards, J. Phys. B **20**, 2369 (1987).
- [112] K. Sacha, J. Zakrzewski, and D. Delande, Eur. Phys. J. D **1**, 231 (1998).
- [113] B. Grémaud, private Mitteilung.

- [114] H. M. James and A. S. Coolidge, Phys. Rev. **51**, 857 (1937).
- [115] C. L. Pekeris, Phys. Rev. **112**, 1649 (1958).
- [116] M. G. Floquet, Ann. École Norm. Sup. **12**, 47 (1883).
- [117] J. H. Shirley, Phys. Rev. **138**, B979 (1965).
- [118] Ya. B. Zel'dovich, Sov. Phys. JETP **24**, 1006 (1967).
- [119] E. Balslev and J. M. Combes, Commun. Math. Phys. **22**, 280 (1971).
- [120] Y. K. Ho, Phys. Rep. **99**, 1 (1983).
- [121] W. P. Reinhardt, Ann. Rev. Phys. Chem. **33**, 223 (1982).
- [122] A. Maquet, S. Chu, and W. P. Reinhardt, Phys. Rev. A **27**, 2946 (1983).
- [123] B. R. Johnson and W. P. Reinhardt, Phys. Rev. A **28**, 1930 (1983).
- [124] A. Buchleitner, B. Grémaud, and D. Delande, J. Phys. B **27**, 2663 (1994).
- [125] J. M. Rescigno and V. McKoy, Phys. Rev. A **12**, 522 (1975).
- [126] S. Graffi and V. Grecchi, Commun. Math. Phys. **62**, 83 (1978).
- [127] I. Herbst, Commun. Math. Phys. **64**, 279 (1979).
- [128] S. Graffi and V. Grecchi, Commun. Math. Phys. **79**, 91 (1981).
- [129] I. Herbst and B. Simon, Commun. Math. Phys. **80**, 181 (1981).
- [130] K. Yajima, Commun. Math. Phys. **87**, 331 (1982).
- [131] S. Graffi, V. Grecchi, and H. J. Silverstone, Ann. Inst. Henri Poincaré **42**, 215 (1985).
- [132] R. Blümel and U. Smilansky, Z. Phys. D **6**, 83 (1987).
- [133] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, 10 ed. (National Bureau of Standards, Washington, 1972), Kap. 22.
- [134] T. Ericsson and A. Ruhe, Math. Comp. **35**, 1251 (1980).
- [135] D. Delande, A. Bommier, and J. C. Gay, Phys. Rev. Lett. **66**, 141 (1991).
- [136] G. H. Golub and C. F. van Loan, *Matrix Computations*, 3rd ed. (John Hopkins University Press, Baltimore, 1996).
- [137] M. J. Stevens and B. Sundaram, Phys. Rev. A **39**, 2862 (1989).

- [138] R. V. Jensen, M. M. Sanders, M. Saraceno, and B. Sundaram, Phys. Rev. Lett. **63**, 2771 (1989).
- [139] D. Delande, Thèse de doctorat d'état, Université Pierre et Marie Curie, Paris, 1988.
- [140] R. Grobe and J. H. Eberly, Phys. Rev. Lett. **68**, 2905 (1992).
- [141] R. Blümel and W. P. Reinhardt, in *Directions in Chaos*, edited by B.-L. Hao et al. (World Scientific, Hongkong, 1991), Vol. 4.
- [142] R. Blümel, Phys. Rev. A **54**, 5420 (1996).
- [143] T. Ericson, Phys. Rev. Lett. **5**, 430 (1960).
- [144] J. von Neumann and E. P. Wigner, Phys. Z. **30**, 467 (1929).
- [145] L. D. Landau, Phys. Z. Soviet. **2**, 46 (1932).
- [146] C. Zener, Proc. R. Soc. London **A 137**, 696 (1932).
- [147] *Resonance Ionization Spectroscopy 1994*, AIP Conf. Proc., edited by H. J. Kluge (AIP Press, New York, 1995).
- [148] O. Bohigas, S. Tomsovic, and D. Ullmo, Phys. Rep. **223**, 43 (1993).
- [149] S. Tomsovic and D. Ullmo, Phys. Rev. E **50**, 145 (1994).
- [150] J. Zakrzewski, D. Delande, and A. Buchleitner, Phys. Rev. E **57**, 1458 (1998).
- [151] K. Hornberger and A. Buchleitner, Europhys. Lett. **41**, 383 (1998).
- [152] K. T. Taylor *et al.*, in *Multiphoton Processes 1996*, edited by P. Lambropoulos and H. Walther (IOP Publishing, Bristol, 1997), S. 56.
- [153] *NAG Fortran Library*, Numerical Algorithms Group, 1993.
- [154] H.-D. Meyer, J. Chem. Phys. **84**, 3147 (1986).
- [155] J. von Milczewski, G. H. F. Diercksen, and T. Uzer, Phys. Rev. Lett. **76**, 2890 (1996).
- [156] A. Buchleitner, private Mitteilung.

Vorveröffentlichungen

Teile der Arbeit wurden in nachstehenden Artikeln veröffentlicht bzw. zur Veröffentlichung eingereicht:

- P. Schlagheck and A. Buchleitner, *Classical support for nondispersive two-electron wave packets in the driven helium atom*, J. Phys. B **31**, L489–L495 (1998).
- P. Schlagheck and A. Buchleitner, *Stable classical configurations in strongly driven helium*, Physica D, im Druck.
- P. Schlagheck and A. Buchleitner, *Nondispersive two-electron wave packets in the collinear driven helium atom*, Europhys. Lett., im Druck.

Weitere Veröffentlichungen des Autors:

- P. Schlagheck, P. Maragakis, and P. Lambropoulos, *Theory of laser-induced two-step electron-ion recombination*, Z. Phys. D **37**, 19–27 (1996).
- P. Schlagheck and P. Lambropoulos, *A theoretical description of laser-induced dielectronic recombination*, Hyperfine Interactions **108**, 267–271 (1997).
- P. Schlagheck and P. Lambropoulos, *Theory of laser-induced dielectronic recombination: a case study in helium*, Z. Phys. D **39**, 173–180 (1997).
- H. Bachau, R. Gayet, P. Lambropoulos, P. Schlagheck, and A. Wolf, *Laser-assisted dielectronic recombination in C^{4+} ions*, J. Phys. B **31**, 3263–3280 (1998).
- P. Schlagheck, K. Hornberger, and A. Buchleitner, *Comment on “Physical Reality of Light-Induced Atomic States”*, Phys. Rev. Lett. **82**, 664 (1999).