

# Numerische Behandlung der zeitlichen Entwicklung quantenmechanischer Wenigteilchensysteme

Bachelorarbeit im Fach Physik

an der Universität Greifswald

am 10. Juli 2010

eingereicht von

Andreas Pieper

1. Gutachter: Prof. Dr. H. Fehske
2. Gutachter: Prof. Dr. G. Wellein



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2. Zeitentwicklungsverfahren</b>	<b>3</b>
2.1. Grundlagen der zeitlichen Entwicklung quantenmechanischer Systeme . . .	3
2.2. Numerische Verfahren . . . . .	4
2.2.1. Differenzenverfahren . . . . .	4
2.2.2. Split-Operator-Methode . . . . .	5
2.3. Wenigteilchensysteme und Zentralfeldnäherung (Hartree-Näherung) . . .	7
<b>3. Anwendung der Split-Operator-Methode</b>	<b>9</b>
3.1. Gauß'sches Wellenpaket als freies Teilchen . . . . .	9
3.2. Einelektron-Zentralfeld-Problem im klassischen Grenzfall . . . . .	12
3.2.1. Elliptischer Zustand . . . . .	12
3.2.2. Trojaner Zustand . . . . .	18
3.3. Das Helium-Atom . . . . .	24
3.3.1. Elliptischer Zustand mit rotierendem Monopol . . . . .	25
3.3.2. Trojanischer Zustand mit rotierendem Dipol . . . . .	27
3.3.3. Selbstkonsistente Behandlung der Elektronen-Wellenfunktionen .	28
3.4. Zusammenfassung . . . . .	32
<b>A. Anhang</b>	<b>33</b>
A.1. Transformation der Schrödinger-Gleichung . . . . .	33
A.1.1. Translation im Ortsraum . . . . .	33
A.1.2. Translation im Impulsraum . . . . .	34
A.1.3. Rotation . . . . .	34
A.2. Diskrete Fourier-Transformation . . . . .	34
A.3. Eigenzustände des zweidimensionalen Coulomb-Potentials . . . . .	36
A.4. Anlage . . . . .	36

# 1. Einleitung

Durch die Begründung der Wellenmechanik 1926 hoffte E. Schrödinger mit der Wellenfunktion eine anschauliche Interpretation im klassischen Grenzfall zu liefern. Aber E. Schrödinger und H.A. Lorentz kamen zu dem Schluss, dass im Wasserstoff-Atom auf Grund der nicht äquidistanten Abständen der angeregten Energieniveaus ein Elektron als Wellenpaket nach anfänglicher Lokalisation auseinanderläuft [13].

Inzwischen hat sich herausgestellt, dass es möglich ist, mit starken externen Feldern klassisch verständliche Wellenfunktionen in Atomen zu stabilisieren. Experimentell kann dies mit zirkular polarisierten Mikrowellen oder Laserpulsen umgesetzt werden. So lassen sich sogenannte elliptische Zustände [1], welchen sich relativ nahe am Kern befinden, oder trojanische Wellenpakete [3], welche weit außen sind, stabilisieren.

Es konnte auch gezeigt werden, dass trojanische Wellenpakete existieren, wenn sich im Zentrum ein rotierender Dipol befindet [4], wie es zum Beispiel bei polaren Molekülen der Fall sein kann.

Darauf folgend ist der nächste Gedankengang die Elektronen eines Helium-Atoms so initialisieren, dass sie sich durch die gegenseitige Wechselwirkung stabilisieren, und somit keine externen Felder benötigt werden [7]. Ähnlich wie beim Sonnensystem, wo sich die Planeten auf der Äquatorialebene der Sonne bewegen, sollen sich die Elektronen im Helium-Atom auch in einer Ebene bewegen. Dazu wird für das innere Elektron der elliptische Zustand und für das äußere Elektron das trojanische Wellenpaket verwendet. Diese Konfiguration der Elektronen ist sehr interessant, da an diesem System die Analogie der klassischen Mechanik und der Quantenmechanik studiert werden kann.

Da es aber nicht möglich ist dieses quantenmechanische Zweielektronen-System in der Zeit analytisch zu propagieren, müssen numerische Verfahren eingesetzt werden.

In dieser Arbeit wird mit der Split-Operator-Methode [9] untersucht, ob sich im Helium-Atom diese Elektronen-Zustände halten können. Dazu wird es notwendig sein, zuerst den elliptischen und den trojanischen Zustand einzeln zu betrachten.

Für die Simulationen werden die kontinuierlichen Wellenfunktionen auf Gitter diskretisiert. Da es sich um Elektronen handelt, welche den Kern auf einer Ebene umkreisen,

wird das Problem in zwei Raumdimensionen betrachtet, um Rechenressourcen zu sparen. Aber dennoch lässt diese Vereinfachung erst qualitative Aussagen über die Existenz dieses Atoms zu. Durch den Einsatz der Fast-Fourier-Transformation (FFT) wird zusätzlich ein großer Teil an Rechenzeit eingespart.

## 2. Zeitentwicklungsverfahren

### 2.1. Grundlagen der zeitlichen Entwicklung quantenmechanischer Systeme

Bei der Beschreibung der zeitlichen Entwicklung von quantenmechanischen Systemen ist die Schrödinger-Gleichung

$$i\partial_t|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle \quad (2.1)$$

zu lösen.  $\hat{H}$  ist der Hamilton-Operator des betrachteten Systems, wobei  $\hbar = 1$  ist. In der Ortsdarstellung ist die Lösung eine Wellenfunktion

$$\Psi(x) = \langle x|\Psi(t)\rangle, \quad (2.2)$$

wobei das Absolutquadrat die Wahrscheinlichkeitsdichte wiedergibt:

$$\rho(x) = |\langle x|\Psi(t)\rangle|^2. \quad (2.3)$$

Der Zeitentwicklungsoperator ist definiert als:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \quad (2.4)$$

Für zeitunabhängige Hamilton-Operatoren ist der Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t-t_0)}. \quad (2.5)$$

Integriert man die Schrödinger-Gleichung mit einem zeitabhängigen Hamilton-Operator über die Zeit, so ergibt sich für den Zeitentwicklungsoperator

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbb{1}} - i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') \hat{U}(t, t_0). \quad (2.6)$$

Durch wiederholtes ineinander Einsetzen von  $\hat{U}(t, t_0)$  entsteht die sogenannte Dyson-Reihe:

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{\mathbb{1}} - i \int_{t_0}^t dt' \hat{H}(t') - \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \hat{H}(t') \hat{H}(t'') \pm \dots \quad (2.7)$$

Mit der Taylor-Reihe kann gezeigt werden, dass bei der genäherten Entwicklung

$$|\Psi(t_0 + \Delta t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t_0 + \Delta t/2)\Delta t} |\Psi(t_0)\rangle \quad (2.8)$$

der Fehler proportional zu  $\Delta t^3$  ist. Damit kann für  $\Delta t \rightarrow 0$  der Zeitentwicklungsoperator dargestellt werden als:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-i\hat{H}(t - \Delta t/2)\Delta t} \cdot \dots \cdot e^{-i\hat{H}(\Delta t/2 + t_0)\Delta t}, \quad (2.9)$$

welcher wieder unitär ist.

## 2.2. Numerische Verfahren

Die Anwendung des Zeitentwicklungsoperators auf einen Zustand kann mit unterschiedlichen numerischen Verfahren realisiert werden [8]. Hier ist zum einen das Differenzenverfahren und die Split-Operator-Methode zu nennen, welche im Weiteren genauer betrachtet werden.

Aber auch die Residuum-Methode [10] und die Chebychev-Methode [12] sind zu erwähnen, da bei diesen Methoden der numerische Aufwand durch größer wählbare Zeitschritte verringert werden kann. Die Idee dieser beiden Methoden ist es, dass der Zeitentwicklungsoperator durch ein Polynom ersetzt wird.

Im Folgenden soll zur einfacheren Betrachtung der Hamilton-Operator nicht von der Zeit abhängen.

### 2.2.1. Differenzenverfahren

Beim Differenzenverfahren wird die zeitabhängige Schrödingergleichung in der Zeit diskretisiert, was bedeutet, dass der Differentialoperator durch den Differenzenquotienten

$$i\partial_t |\Psi(t)\rangle \approx i \frac{|\Psi(t + \Delta t)\rangle - |\Psi(t - \Delta t)\rangle}{2 \Delta t} \quad (2.10)$$

ersetzt wird. Diese Art der Diskretisierung entspricht der Taylorentwicklung des Zeitentwicklungsoperators. Durch die symmetrische Aufspaltung (2-Schrittverfahren) wird erreicht, dass der Fehler erst mit der Ordnung  $\Delta t^3$  geht. Zum anderen wäre ein Einschrittverfahren numerisch instabil. Nach der Umstellung der Schrödinger-Gleichung ergibt sich die Gleichung

$$|\Psi(t + \Delta t)\rangle \approx |\Psi(t - \Delta t)\rangle - 2i \Delta t \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (2.11)$$

## 2. Zeitentwicklungsverfahren

mit welcher die Wellenfunktion zeitlich entwickelt werden kann.

Ein Nachteil dieses Verfahrens ist, dass zusätzlich zum Anfangszustand  $|\Psi(0)\rangle$  der erste entwickelte Zustand  $|\Psi(\Delta t)\rangle$  bekannt sein muss.

### 2.2.2. Split-Operator-Methode

Die Split-Operator-Methode ist eine simple aber zugleich effektive Methode, um die Zeitevolution von Quantenzuständen zu realisieren. Diese Methode nutzt die Zerlegung des Hamiltonoperators  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$  in kinetischen  $\hat{T}(\hat{p})$  und potentiellen Teil  $\hat{V}(\hat{x})$  aus:

$$e^{-i\hat{H}\Delta t} \approx e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t}. \quad (2.12)$$

Die symmetrische Abspaltung des kinetischen Teils führt dazu, dass durch die Nicht-Vertauschbarkeit von  $\hat{T}$  und  $\hat{V}$  der Fehler erst mit der Ordnung  $\Delta t^3$  geht. Dies kann leicht durch das Zusammenfassen der rechten Seite von der Gleichung (2.12) nach der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel nachvollzogen werden:

$$e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} = \exp\left(-i\hat{H}\Delta t + \frac{i}{12}\left[[\hat{T}, \hat{V}], \frac{\hat{T}}{2} + \hat{V}\right]\Delta t^3 + \dots\right). \quad (2.13)$$

Durch diese Aufspaltung (2.12) wird erreicht, dass mit der Exponentialfunktion entweder nur Ortsoperatoren oder nur Impulsoperatoren auf den Zustand wirken. Dies ist von großen Vorteil, da in der jeweiligen Darstellung die Operatoren zu Eigenwerten werden:

$$\langle x_i | e^{-i\hat{V}(\hat{x})\Delta t} | \Psi \rangle = \sum_j \langle x_i | e^{-i\hat{V}(\hat{x})\Delta t} | x_j \rangle \langle x_j | \Psi \rangle \quad (2.14)$$

$$\text{mit } \langle x_i | e^{-i\hat{V}(\hat{x})\Delta t} | x_j \rangle = \begin{pmatrix} e^{-iV(x_0)\Delta t} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{-iV(x_{N-1})\Delta t} \end{pmatrix}, \quad (2.15)$$

$$\langle p_i | e^{-i\frac{\hat{T}(\hat{p})}{2}\Delta t} | \Psi \rangle = \sum_j \langle p_i | e^{-i\frac{\hat{T}(\hat{p})}{2}\Delta t} | p_j \rangle \langle p_j | \Psi \rangle \quad (2.16)$$

$$\text{mit } \langle p_i | e^{-i\frac{\hat{T}(\hat{p})}{2}\Delta t} | p_j \rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{T(p_0)}{2}\Delta t} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{-i\frac{T(p_{N-1})}{2}\Delta t} \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

So können die Exponentialfunktionen wie skalare Funktionen mit der Wellenfunktion multipliziert werden. Damit ist der numerische Aufwand für die Propagation auf ein Minimum reduziert. In der numerischen Simulation nimmt die Transformation der Wellenfunktion von Orts- zu Impulsdarstellung und zurück einen wesentlich größeren Teil der Rechenzeit ein. Dieser Wechsel wird durch die Fourier-Transformation vollzogen. Für numerische Simulationen muss die diskrete Fourier-Transformation verwendet werden, welche im Anhang A.2 genauer beschrieben wird.

Wenn mehrere Zeitschritte nacheinander ausgeführt werden, kann im Impulsraum der zweite Halbschritt und der erste Halbschritt des darauf folgenden Entwicklungsschritts zusammen ausgeführt werden. Dies ist möglich, da der Operator für die kinetische Energie in der Regel nicht von der Zeit abhängt:

$$\dots e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} \cdot e^{-i\frac{\hat{T}}{2}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} \dots = \dots e^{-i\hat{V}\Delta t} e^{-i\hat{T}\Delta t} e^{-i\hat{V}\Delta t} \dots \quad (2.18)$$

Die Propagation eines Zustands gestaltet sich damit folgendermaßen:

- Diskretisierung von  $|\Psi\rangle$  auf einem Ortsgitter
- Fourier-Transformation in den Impulsraum
- Multiplikation mit  $e^{-i\frac{p_i^2}{2} \frac{\Delta t}{2}}$  (halber Zeitschritt)
- inverse Fourier-Transformation in den Ortsraum
- Multiplikation mit  $e^{-iV(x_i)\Delta t}$  (voller Zeitschritt)
- Fourier-Transformation in den Impulsraum
- Multiplikation mit  $e^{-i\frac{p_i^2}{2} \Delta t}$  (voller Zeitschritt)
- inverse Fourier-Transformation in den Ortsraum

Dies geht so weiter, bis am Ende nur noch ein halber Zeitschritt im Impulsraum nötig ist. Gegebenenfalls muss die Wellenfunktion in den Ortsraum zurücktransformiert werden, um den entwickelten Zustand in dieser Darstellung auswerten zu können.

Diese Methode ist unabhängig von der Zeitschrittgröße normerhaltend und somit numerisch stabil, da der genäherte Propagationsoperator (2.12) ebenfalls unitär ist. Allerdings setzt diese Methode voraus, dass sich der Hamilton-Operator geeignet zerlegen lässt. Das bedeutet, dass keine Nacheinanderausführungen (Produkte) von Impuls- und Ortsoperatoren vorkommen dürfen.

## 2. Zeitentwicklungsverfahren

Mit dieser Methode kann zum Beispiel kein System in einem rotierenden Bezugssystem A.1.3 propagiert werden, da hier im Hamilton-Operator der Drehimpulsoperator auftaucht. Das ist später für die Behandlung der Elektronen im rotierenden elektrischen Feld und im Helium-Atom relevant, da diese Systeme analytisch im rotierenden Bezugssystem behandelt werden.

## 2.3. Wenigteilchensysteme und Zentralfeldnäherung (Hartree-Näherung)

In der Quantenmechanik wird ein Wenigteilchensystem durch eine Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung beschrieben. Die Basis des Gesamtzustands wird dabei durch das Tensorprodukt der Basen von allen Teilchen aufgespannt. Für zwei unterschiedliche Teilchen soll die Notation wie folgt sein:

$$|\Phi(1, 2)\rangle = |1\rangle \otimes |2\rangle. \quad (2.19)$$

Für zwei Teilchen mit jeweils zwei Freiheitsgraden wäre die Gesamtwellenfunktion für dieses System vierdimensional (ohne die Zeitdimension mitzuzählen).

Handelt es sich um zwei identische Teilchen, so muss der Gesamtzustand die Vertauschungsrelation

$$|\Phi(2, 1)\rangle = \pm |\Phi(1, 2)\rangle \quad (2.20)$$

erfüllen, welche auch mit dem Permutationsoperator

$$\hat{P}_{1,2}|\Phi(1, 2)\rangle = \pm |\Phi(1, 2)\rangle \quad (2.21)$$

ausgedrückt werden kann. Denn die Messung einer Observablen muss nach der Vertauschung von identischen Teilchen das gleiche Resultat liefern:

$$\langle \Phi(1, 2) | \hat{A} | \Phi(1, 2) \rangle = \langle \Phi(2, 1) | \hat{A} | \Phi(2, 1) \rangle. \quad (2.22)$$

Unter anderem gilt für den Permutationsoperator

$$\hat{P}_{i,j}^2 = \hat{1} \iff \hat{P}_{i,j} = \hat{P}_{i,j}^{-1}, \quad (2.23)$$

welcher auch mit jedem anderen Operator kommutiert. Ist das Vorzeichen nach der Vertauschung in Gleichung (2.20) positiv, so ist der Gesamtzustand symmetrisch und man

spricht von Bosonen. Bei einem negativen Vorzeichen ist der Gesamtzustand antisymmetrisch und man spricht von Fermionen.

Um die Antisymmetrie sicher zu stellen, kann der Gesamtzustand durch die Slater-Determinante erzeugt werden. Damit wäre für zwei Fermionen die Antisymmetrie mit

$$|\Phi(1, 2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle \otimes |2\rangle - |2\rangle \otimes |1\rangle) \quad (2.24)$$

erfüllt.

Bei numerischen Simulationen ist es sehr aufwendig mit höherdimensionalen Wellenfunktionen zu arbeiten. Eine häufig verwendete Approximation ist die Zentralfeldnäherung. Hierbei wird jedes Teilchen durch eine Einteilchen-Schrödinger-Gleichung beschrieben. Die Wechselwirkung mit anderen Teilchen wird durch ein effektives Potential vermittelt.

Im Folgenden beschränken wir uns auf das Helium-Atom mit zwei Elektronen. Der Hamilton-Operator für die Vielteilchen-Schrödinger-Gleichung lautet

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}_1|} - \frac{2}{|\mathbf{r}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|}, \quad (2.25)$$

wobei der Kern fest und  $e = m_e = 1$  ist. In der Hartree-Näherung, in welcher unterscheidbare Teilchen betrachtet werden, ergeben sich für die beiden Elektronen die Hamilton-Operatoren

$$H_1 = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + \int d\mathbf{r}' \frac{|\langle \mathbf{r}' | \Psi_2 \rangle|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.26)$$

$$H_2 = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + \int d\mathbf{r}' \frac{|\langle \mathbf{r}' | \Psi_1 \rangle|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.27)$$

In der Simulation ist die Berechnung der Wechselwirkungspotentiale

$$V_{j,i}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho_i(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (2.28)$$

sehr aufwendig, da für jeden Gitterpunkt über das ganze Feld summiert werden muss. Dieses Problem kann mit der Poisson-Gleichung

$$\Delta V(\mathbf{r}') = -4\pi\rho(\mathbf{r}') \quad (2.29)$$

umgangen werden. Hier kann man sich wieder der Fourier-Transformation bedienen, um im Spektralraum mit Eigenwerten zu arbeiten. Diese Methode kann allerdings nur für dreidimensionale Probleme verwendet werden.

# 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

Die Split-Operator-Methode ist eine der gängigsten Verfahren um Wellenfunktionen zu propagieren. Durch die Diagonalisierung der Operatoren ist diese Methode einfach in der numerischen Handhabung. Der numerische Hauptaufwand ist die diskrete Fourier-Transformation, da diese für jeden Entwicklungsschritt zwei mal angewendet werden muss. Durch den geschickten FFT-Algorithmus, welcher allgemein J.W. Cooley und J.W. Tukey zugeschrieben wird, kann der numerische Aufwand wesentlich verringert werden [11]. Somit können sehr gute Ergebnisse bei relativ geringem analytischen und numerischen Aufwand erzielt werden. Des Weiteren ist bei der Split-Operator-Methode die Normerhaltung gegeben. Dieses Verfahren ist aber aufgrund der Trennung nach Orts- und Impulsoperatoren auf Systeme beschränkt, die keine gemischten Terme im Hamilton-Operator aufweisen.

## 3.1. Gauß'sches Wellenpaket als freies Teilchen

Bevor wir uns den interessanten Problemen zuwenden, sollen die speziellen Eigenschaften des verwendeten Verfahrens an einem einfachen System demonstriert werden.

Das Gauß'sche Wellenpaket spielt in der Quantenmechanik eine große Rolle. Die Wahrscheinlichkeitsdichte dieses Wellenpakets entspricht sowohl in der Orts- als auch in der Impulsdarstellung der Form einer Gaußschen Glockenkurve. Für das Produkt der Unschärfen aus beiden Räumen gilt die Heisenbergsche Unschärferelation  $\Delta x^2 \Delta p^2 \geq \frac{1}{4}$ , wobei für das Minimalpaket

$$\langle x | \Psi \rangle = C_x e^{-\frac{(x-x_0)^2}{4\Delta x^2}} e^{ip_0 x}, \quad (3.1)$$

$$\langle p | \Psi \rangle = C_p e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\Delta p^2}} e^{-ix_0 p}, \quad (3.2)$$

die Gleichheit erfüllt ist. Daraus folgt, dass, wenn der Ort exakt bestimmt ist, der Impuls maximal unbestimmt ist und umgekehrt.

An einem freien Teilchen in Form eines Gauß'schen Wellenpaketes können nun die Eigenschaften der Split-Operator-Methode sehr gut untersucht werden, da dieses Problem analytisch exakt lösbar ist. Dies ist möglich, da der potentielle Teil des Hamilton-Operators wegfällt und der kinetische Teil zeitunabhängig ist. Darum braucht die Wellenfunktion nur in den Impulsraum transformiert und dort bis zum beliebigen Zeitpunkt entwickelt werden. Dadurch bleiben die Integrale, welche analytisch durch die Transformationen auftauchen, exakt bestimmbar.

Für die numerische Rechnung wird die Wellenfunktion auf einem zweidimensionalen Gitter  $256 \times 256$  mit der Länge  $L = 25.6$  diskretisiert, wobei der Ursprung im Zentrum liegt. Somit können nach Gleichung (A.19) Impulse bis  $|p| \leq 10\pi$  aufgelöst werden.

Als Beispiel soll ein Teilchen der Masse  $m = 1$  als Gauß'sches Minimalpaket mit folgenden Startparametern entwickelt werden:

$$\begin{aligned} x_0 &= -10, & \Delta x &= 0.2, & p_{x0} &= 10, \\ y_0 &= -5, & \Delta y &= 0.5, & p_{y0} &= 5. \end{aligned}$$

Abbildung 3.1 zeigt den zeitlichen Verlauf der Wellenfunktion. Da sich die Impulsdichte im zeitlichen Verlauf nicht ändert, ist die Impulsdarstellung nur einmal zu Beginn abgebildet. In den beiden Darstellungen zu  $t = 0$  spiegelt sich die Heisenbergsche Unschärferelation wieder. In  $x$ -Richtung wurde die Wellenfunktion stärker lokalisiert als in  $y$ -Richtung. Folglich ist der Impuls in  $p_y$ -Richtung schärfer als in  $p_x$ -Richtung.

In der zeitlichen Entwicklung sieht man, dass sich der Schwerpunkt des Wellenpakets bei  $t = 1.0$  auf den Ursprung verlagert hat. Aufgrund der größeren Impulsunschärfe in  $p_x$ -Richtung ist die Wellenfunktion in  $x$ -Richtung wesentlich breiter geworden als in  $y$ -Richtung. Im weiteren zeitlichen Verlauf wird das Wellenpaket auf den rechten Rand zulaufen. In diesem Verfahren läuft das Wellenpaket aber nicht einfach aus dem Gitter heraus. Sondern, wie zum Zeitpunkt  $t = 1.6$  zu sehen ist, wird es auf der gegenüberliegenden Seite wieder herein laufen. Dies gilt auch für die Impulsdarstellung, falls sich diese durch ein nicht konstantes Potential verändern würde. Dieser Effekt kommt durch die diskrete Fourier-Transformation zustande, welche periodische Randbedingungen implementiert.

Wenn die Wellenfunktion im Orts- oder Impulsraum durch die Ränder läuft, wird die Numerik das physikalische System nicht mehr richtig behandeln und die Simulation gibt keine sinnvollen Resultate mehr wieder. Darum muss immer darauf geachtet werden, dass die Wellenpakete in beiden Darstellungen einen ausreichenden Abstand zu den Rändern der Gitter haben. Um Systeme länger zu propagieren, können die Effekte der

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

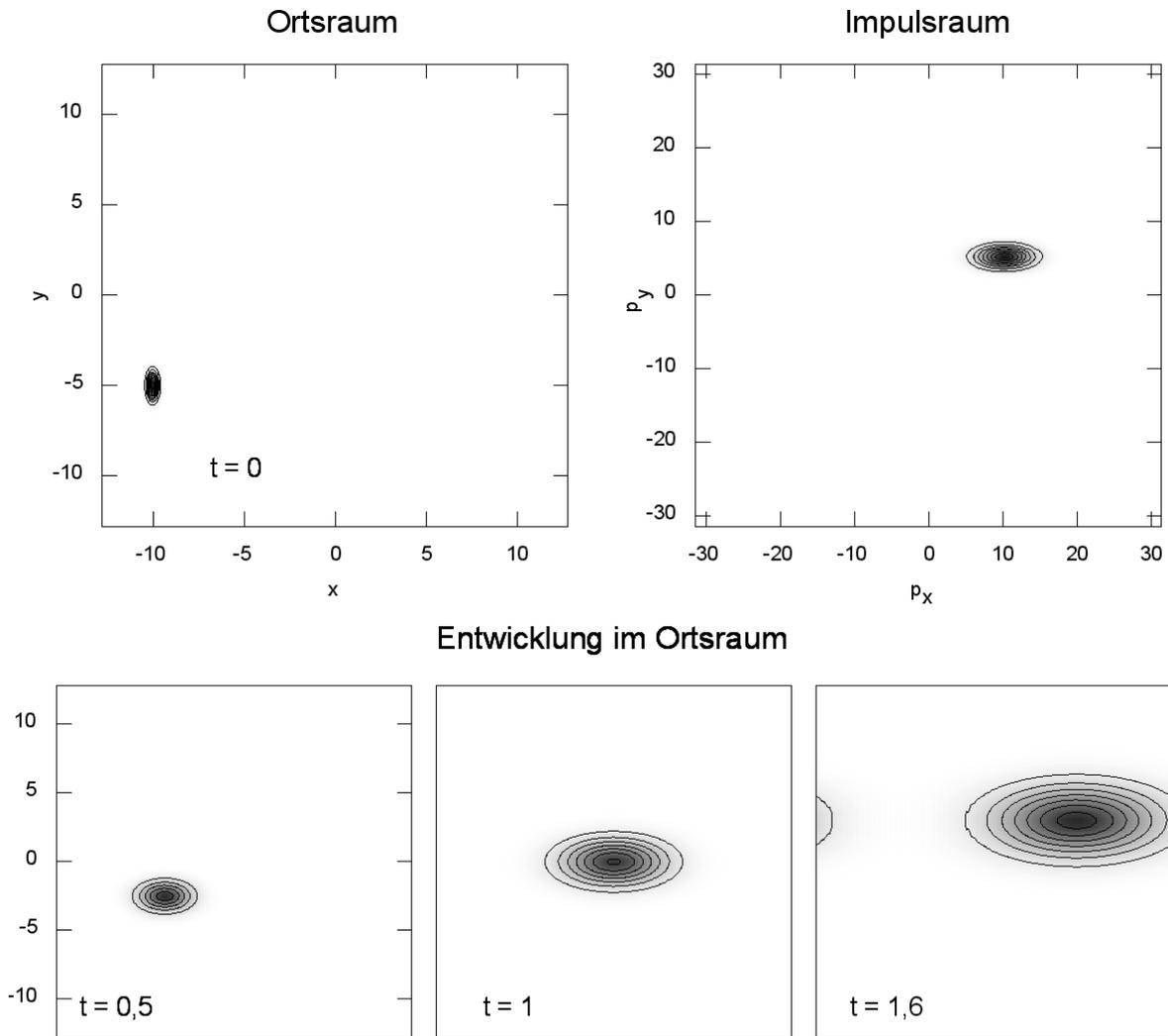


Abbildung 3.1.: Zeitliche Entwicklung des freien Gauß'schen Wellenpakets. Oben: Wahrscheinlichkeitsdichte zu Beginn. Unten: Zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum.

periodischen Randbedingungen durch absorbierende Ränder kompensiert werden, welche aber die Norm der Wellenfunktion nicht erhalten.

## 3.2. Einelektron-Zentralfeld-Problem im klassischen Grenzfall

Um später das Helium-Atom im klassischen Grenzfall zu betrachten, muss man sich überlegen, wie die Elektronen initialisiert werden sollen. Eine Bedingung dafür ist, dass sich die Elektronen weit voneinander entfernt befinden. Ein anderer Aspekt ist die zeitliche Stabilität der Elektronen-Wellenfunktionen. Dazu ist es notwendig, vorerst Einelektron-Systeme im Coulomb-Potential zu behandeln, in denen die Wellenfunktionen klassisch verständlich sind.

Zum einen gibt es den Ansatz eines elliptischen Zustands [1, 2] und zum anderen den eines Rydberg-Elektrons als Gauß'sches Wellenpaket [3, 6], welches auch als trojanisches Wellenpaket bezeichnet wird. Die Zustände werden in beiden Ansätzen durch zirkular polarisierte Mikrowellen stabilisiert, die in der zweidimensionalen Betrachtung homogene rotierende elektrische Felder sind.

Im Abschnitt 3.3 wird beim Helium-Atom das eine Elektron innen auf den elliptischen Zustand gesetzt, währenddessen sich das andere Elektron weit draußen auf dem trojanischen Zustand befindet [7]. Dabei soll das eine Elektron durch sein wechselwirkendes Potential, welches in diesem Abschnitt noch das externe  $E$ -Feld ist, jeweils das andere stabilisieren.

Die Kreisfrequenz der rotierenden  $E$ -Felder sei in diesen Simulationen deshalb so gewählt, dass sich das äußere Elektron auf einer Bahn mit einem Radius  $R \approx n_1^2 = \omega^{-2/3}$  ( $n_1 = 60$ ) befindet, wobei atomare Einheiten verwendet werden. Die Zeit  $t$  wird im Folgenden immer in Einheiten von  $2\pi/\omega$  angegeben. Die Aufgabe ist es nun, die Systeme soweit zu analysieren und zu optimieren, dass die Elektronen-Zustände möglichst lange stabil bleiben.

### 3.2.1. Elliptischer Zustand

Der in diesem Unterabschnitt behandelte elliptische Zustand soll später für das innere Elektron im Helium-Atom verwendet werden. Dazu wird die Kernladungszahl  $Z = 2$

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

gewählt. Der Hamilton-Operator für dieses System ist

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + E \cos(\omega t)x + E \sin(\omega t)y. \quad (3.3)$$

Hierbei ist  $E$  die Amplitude des elektrischen Felds und  $\omega$  die Kreisfrequenz. Die Parameter eines elliptischen Zustandes sind die Hautquantenzahl  $n$  und die Exzentrizität  $\epsilon$  bzw. der Exzentrizitätswinkel  $\sin \alpha = \epsilon$ . Der elliptische Zustand wird durch die Anwendung von

$$|\Psi\rangle = e^{-i\alpha A_y} |n, n-1, n-1\rangle \quad (3.4)$$

erzeugt [1, 7]. Dabei ist  $A_y$  die  $y$ -Komponente des quantenmechanischen Runge-Lenz-Vektors

$$\mathbf{A} = \frac{n}{2} \left( \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}}{2} - \frac{2\mathbf{r}}{r} \right), \quad (3.5)$$

wobei  $\mathbf{L}$  der Drehimpulsoperator ist.

Die Expansion dieses Zustands gestaltet sich analytisch sehr schwierig. Für das zweidimensionale Problem kann der elliptische Zustand in Eigenfunktionen des Coulomb-Potential-Problems (Anhang A.3) entwickelt werden:

$$|\Psi\rangle = \sum_{m=-n+1}^{m=n-1} c_m(\alpha) |n, m\rangle. \quad (3.6)$$

Dabei sind die Koeffizienten [1]

$$c_m(\alpha) = \left( \frac{(2n-2)!}{(n-1+m)!(n-1-m)!} \right)^{1/2} \sin^{n-1-m}(\alpha/2) \cos^{n-1+m}(\alpha/2). \quad (3.7)$$

Damit der elliptische Zustand möglichst stabil bleibt, muss die Bestimmungsgleichung

$$\tan \alpha = \frac{3nE}{4\omega} \quad (3.8)$$

erfüllt sein [2].

In unserem Beispiel soll ein Zustand mit den Parametern

$$\begin{aligned} n &= 21 \\ \epsilon &= 0.25 \\ \omega &= 4.62963 \cdot 10^{-6} \\ E &= 7.58962 \cdot 10^{-8} \end{aligned}$$

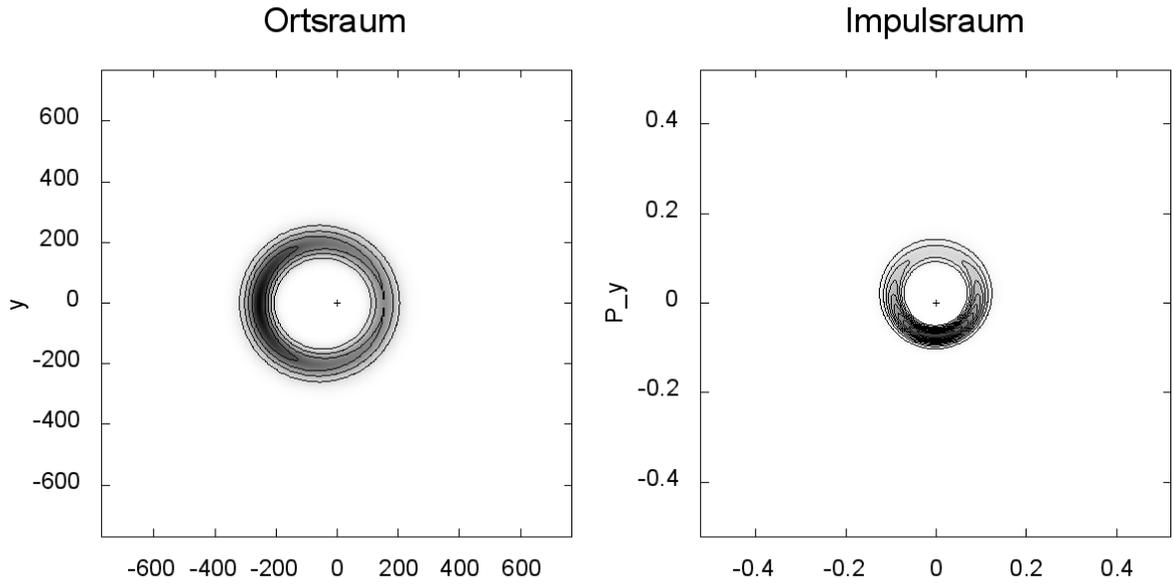


Abbildung 3.2.: Wahrscheinlichkeitsdichte des elliptischen Zustands (3.6).

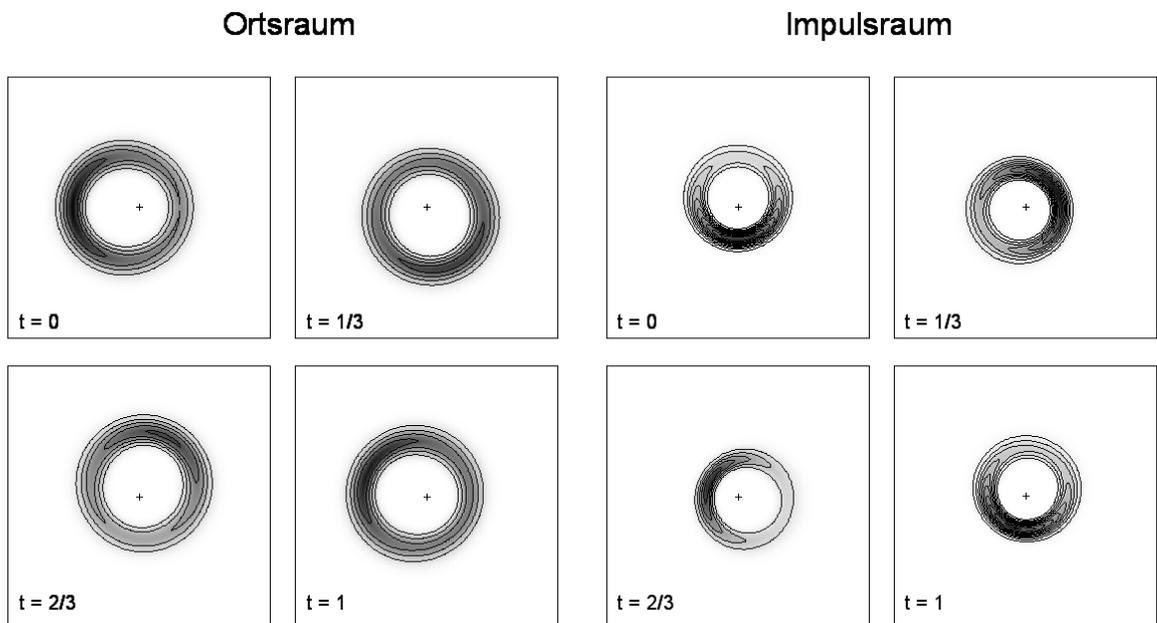


Abbildung 3.3.: Zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte des elliptischen Zustands (3.6) im Orts- und Impulsraum.

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

zeitlich entwickelt werden. Für dieses Problem eignet sich die Split-Operator-Methode, da die Wellenfunktion durch das Coulomb-Potential in der Mitte des Gitters gehalten wird. Für die Diskretisierung wurde ein  $256 \times 256$ -Gitter der Länge  $L = 1536$  im Ortsraum verwendet.

Abbildung 3.2 zeigt das Absolutquadrat in beiden Darstellungen. Hierbei ist wichtig, dass die Wellenfunktion in beiden Räumen ausreichend gut abgebildet wird. Für die Simulation ist der Zeitschritt mit  $\Delta t \approx \frac{1}{10000} \frac{2\pi}{\omega}$  ausreichend klein gewählt. Zu beachten ist, dass der Zeitschritt auch nicht zu klein gewählt werden darf, da sonst durch die erhöhte Anzahl von Rechenoperationen verstärkt numerisches Rauschen auftritt.

In der zeitlichen Entwicklung, dargestellt durch Abbildung 3.3, ist zu sehen, dass sich die Hauptachse des elliptischen Zustandes im Orts- als auch im Impulsraum mit dem  $E$ -Feld mitdreht. Bei einer genaueren Betrachtung im Video (siehe A.4 Anlage) ist zu erkennen, dass es Phasen gibt, in denen es so scheint, als wenn Wellenpakete auf der Ellipse den Kern linksdrehend umkreisen. (In Momentaufnahmen wäre dieses Verhalten nur sehr schwer zu erkennen.)

Im Folgenden wird nun der Erwartungswertvektor im Ortsraum

$$\langle \mathbf{r}(t) \rangle = \begin{pmatrix} \langle x(t) \rangle \\ \langle y(t) \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle \\ \langle \Psi(t) | \hat{y} | \Psi(t) \rangle \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

genauer untersucht. Dieser wird später für das Helium-Atom relevant, da mit ihm das genäherte Wechselwirkungspotential berechnet wird.

Abbildung 3.4 zeigt den zeitlichen Verlauf der Erwartungswerte  $\langle x(t) \rangle$  und  $\langle y(t) \rangle$  über eine Periode des externen  $E$ -Feldes. In diesem Diagramm ist als erstes zu erkennen, dass sich der Erwartungswertvektor ebenfalls um den Kern herum bewegt. Des Weiteren spiegeln sich in den kleinen Oszillationen die herumlaufenden Wellenpaketen wieder. Es ist klar zu erkennen, dass es Perioden gibt, in denen  $\langle x(t) \rangle$  und  $\langle y(t) \rangle$  stärker oszillieren als in anderen. Dies erinnert an das Schwebungsverhalten, wie es zum Beispiel in der Akustik oder beim gekoppelten Pendel auftritt.

Bei einer Schwebung überlagern sich zwei Schwingungen gleicher Amplitude und mit ähnlicher Frequenz. Diese Frequenzen heißen Fundamentalfrequenzen  $\omega_I$  und  $\omega_{II}$  und können durch die Fourier-Transformation sichtbar gemacht werden. Mit dem Additionstheorem

$$\cos \omega_I t + \cos \omega_{II} t = 2 \cos \left( \frac{\omega_I - \omega_{II}}{2} t \right) \cos \left( \frac{\omega_I + \omega_{II}}{2} t \right) \quad (3.10)$$

kann eine Schwebungsfrequenz  $\omega_S = \frac{\omega_I - \omega_{II}}{2}$  und eine Trägerfrequenz  $\omega_T = \frac{\omega_I + \omega_{II}}{2}$  definiert werden. In unserem Beispiel ist  $\omega_T = 4,647 \cdot 10^{-4}$ .

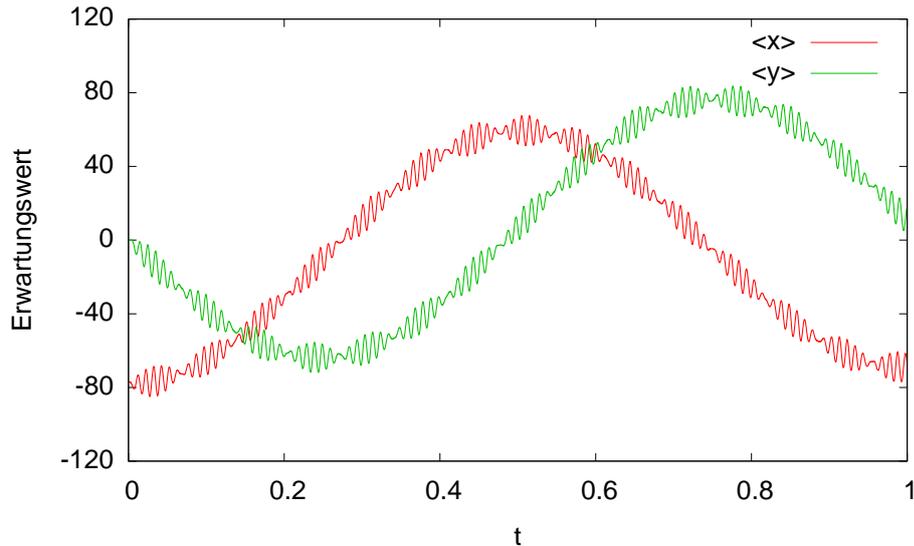


Abbildung 3.4.: Ortserwartungswerte des elliptischen Zustands über die Zeit.

Aus der klassischen Mechanik ist die Lösung des Keplerproblems [14] bekannt und es kann mit  $\omega_T$  der klassische Grenzfall betrachtet werden. Mit der Exzentrizität  $\epsilon$  und der Umlauffrequenz kann der klassische elliptische Orbit

$$\frac{(x + a\epsilon)^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (3.11)$$

für das Problem ohne  $E$ -Feld mit den Gleichungen

$$\omega_T^2 = \frac{a^3}{Z}, \quad (3.12)$$

$$b = a\sqrt{1 - \epsilon^2}, \quad (3.13)$$

$$L = xp_y - yp_x = ab\omega_T, \quad (3.14)$$

komplett bestimmt werden.

In Abbildung 3.5 ist zu erkennen, dass die klassische elliptische Bahn auf dem elliptischen Orbital liegt. Auf Grund des Korrespondenzprinzips kann der Hamilton-Operator (3.3) als Hamilton-Funktion für ein klassisches Teilchen verstanden werden:

Wird ein Teilchen auf dieser Ellipse mit linksdrehendem Umlaufsinn positioniert und die Trajektorie berechnet, so ergibt sich eine Teilchenbahn wie in Abbildung 3.6. Hier rotiert ebenfalls die Hauptachse der Ellipse mit der Ausrichtung des  $E$ -Felds mit.

Mit Hinblick auf das Helium-Atom ist vom großen Interesse, wie sich der Radius und Winkel des Erwartungswertvektors im zeitlichen Verlauf verhält, da das äußere Elektron

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

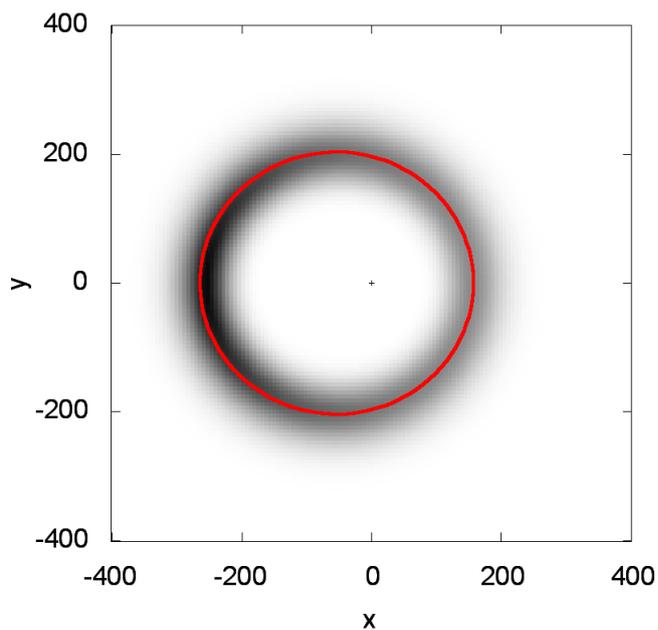


Abbildung 3.5.: Vergleich des klassischen Orbits (rot) mit Wahrscheinlichkeitsdichte des elliptischen Zustands (grau).

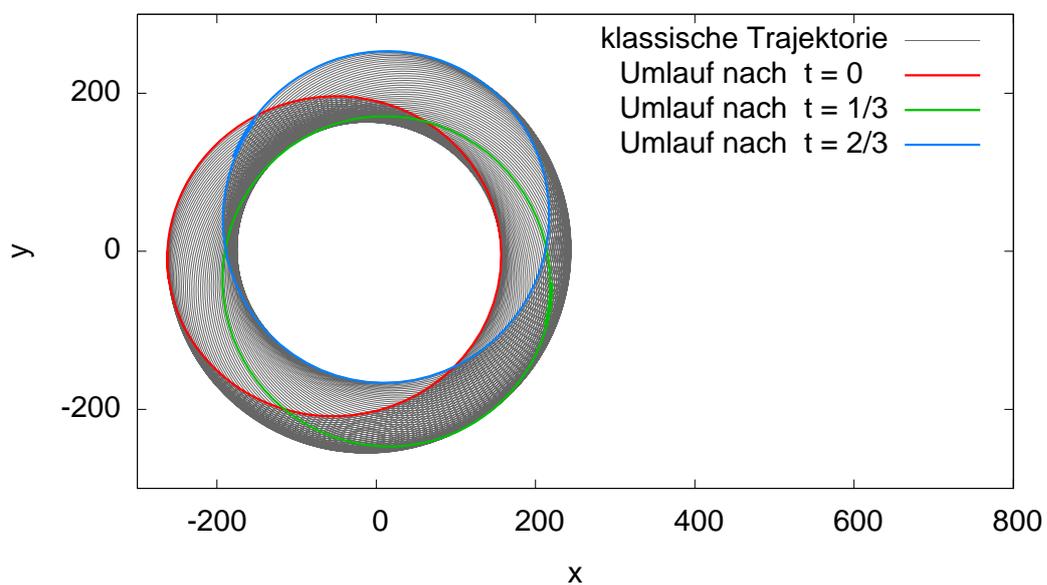


Abbildung 3.6.: Klassische Teilchenbahn des Elektrons mit der Hamilton-Funktion  $H = \mathbf{p}^2/2 - 2/|\mathbf{r}| + E \cos(\omega t)x + E \sin(\omega t)y$ .

später im Helium-Atom durch ein annähernd konstant rotierendes Dipolfeld stabilisiert werden soll.

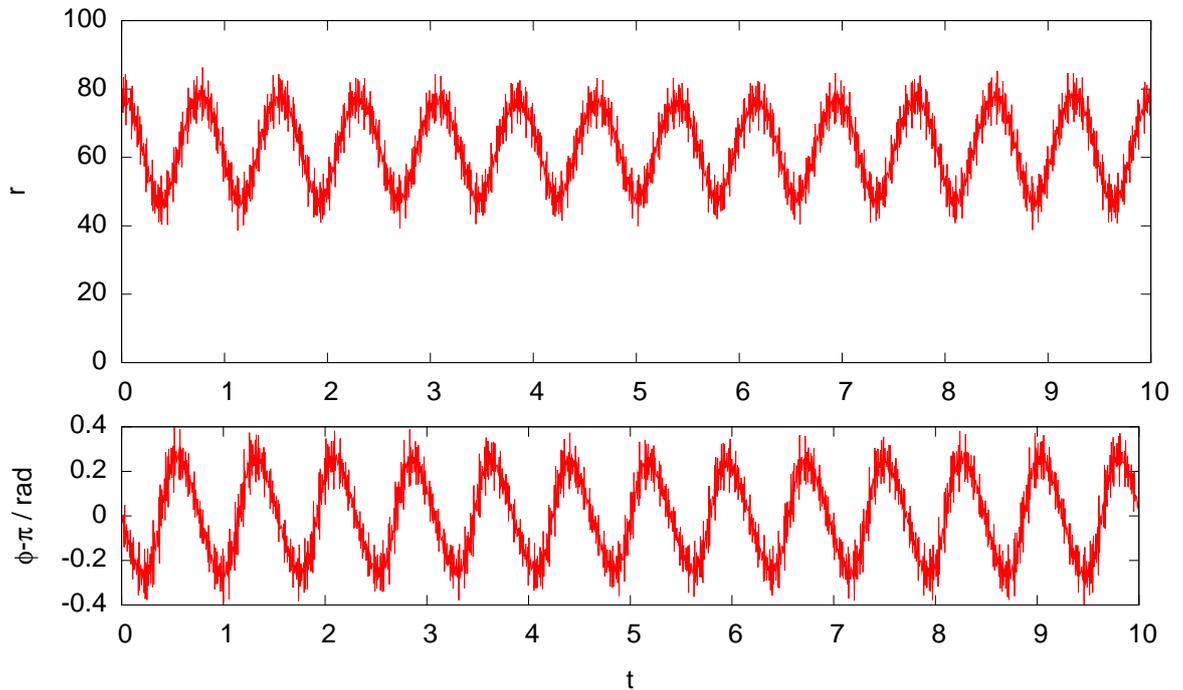


Abbildung 3.7.: Erwartungswertvektor des elliptischen Zustands über die Zeit. Oben: Radius. Unten: Winkel im mitrotierenden System.

Abbildung 3.7 zeigt, dass sowohl der Radius als auch der Winkel bezüglich des  $E$ -Feldes über große Zeiten (in etwa der Periode des rotierenden  $E$ -Feldes) sehr starken relativen Schwankungen unterliegen. Ideal wäre ein konstantes Dipolmoment (3.27). Die kleinen und schnellen Oszillationen durch das Herumlaufen von Wellenpaketen auf der Ellipse würden nur einen geringen Einfluss auf die Stabilität des äußeren Elektrons haben, da es eine wesentlich geringere Dynamik als das innere Elektron aufweisen wird. Allerdings werden die sehr großen Modulationen des Dipols aus Abbildung 3.7 über Zeitspannen der Umlaufperiode des äußeren Elektrons dieses destabilisieren.

### 3.2.2. Trojaner Zustand

Der im letzten Abschnitt konstruierte elliptische Zustand hat nur sehr vage klassisches Verhalten gezeigt. Ein anderer Ansatz eine klassisch verständliche Wellenfunktion für Elektronen im Coulomb-Potential zu konstruieren, geht auf den Artikel von I. Bialynicki-

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

Birula, M. Kalinski und J.H. Eberly [3] zurück. Dabei haben sich die Autoren von Asteroiden-Trojanern auf der Jupiter-Bahn inspirieren lassen. Diese Asteroiden befinden sich im mitrotierenden System auf den stabilen Lagrange-Punkte  $L_4$  und  $L_5$ . Die Lagrange-Punkte sind Gleichgewichtspunkte des eingeschränkten Dreikörperproblems der Himmelsmechanik.

Für ein Elektron im Coulomb-Potential kann solch ein Stabilitätspunkt ebenfalls durch ein homogenes rotierendes  $E$ -Feld erzeugt werden. Im mitrotierten System (Anhang A.1.3) erweitert sich der Hamilton-Operator zu

$$H' = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}|} - Ex - \omega L_z. \quad (3.15)$$

Hierbei wurde für das Helium-Atom  $Z = 1$  gewählt, da das innere Elektron eine positive Elementarladung abschirmt. Aus dem Heisenberg-Bild ergibt sich ein Gleichgewichtspunkt bei  $\mathbf{r}_0 = (R, 0)$  und  $\mathbf{p}_0 = (0, \omega R)$ , für den die transzendente Bestimmungsgleichung

$$\omega^2 R + E = \frac{1}{R^2} \quad (3.16)$$

gilt. An diesem Gleichgewichtspunkt wird nun der Hamiltonoperator (3.15) bis zur zweiten Ordnung in eine Taylor-Reihe entwickelt. Nach aufwendiger Rechnung folgt für den Grundzustand des genäherten Hamilton-Operators das Gauß'sche Wellenpaket mit der Wellenfunktion

$$\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = N e^{i\omega R y} e^{-\frac{\omega}{2}(Ay^2 + B(x-R)^2 + 2iC(x-R)y)}. \quad (3.17)$$

$N$  ist dabei die Normierungskonstante.  $A$ ,  $B$  und  $C$  werden mit dem Parameter  $q = \frac{Z}{R^3\omega^2}$ , welcher im Intervall von  $8/9 < q < 1$  liegen muss, bestimmt:

$$A = \frac{1}{3q} \sqrt{(1-q)(8+4q-9q^2-8s(q))}, \quad (3.18)$$

$$B = \frac{s(q)A(q)}{1-q}, \quad (3.19)$$

$$C = \frac{2+q-2s(q)}{3q}, \quad (3.20)$$

$$s = \sqrt{(1-q)(1+2q)}. \quad (3.21)$$

Da der Hamilton-Operator (3.15) im rotierten Bezugssystem den  $L_z$ -Operator enthält, muss die Entwicklung mit der Split-Operator-Methode wieder im ruhenden System erfolgen:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}|} - Ex \cos(\omega t) - Ey \sin(\omega t). \quad (3.22)$$

Als erstes wird das kartesische trojanische Wellenpaket (3.17) mit den Parametern

$$\begin{aligned} R &= 3649.32 \\ q &= 0.96 \\ \omega &= 4.62963 \cdot 10^{-6} \\ E &= -3.1287 \cdot 10^{-9} \end{aligned}$$

zeitlich entwickelt. Bei der Initialisierung der Wellenfunktion auf dem Ortsgitter ist wieder darauf zu achten, dass nach der Transformation auch der wesentliche Impulsteil richtig abgebildet wird. Dies ist für ein  $256 \times 256$ -Gitter mit der Gitterlänge  $L = 20480$  im Ortsraum der Fall. Als Zeitschrittintervall reicht hier  $\Delta t = \frac{1}{100} \frac{2\pi}{\omega}$  vollkommen aus. Die zeitliche Entwicklung dieses Wellenpakets ist in Abbildung 3.8 dargestellt. Diese

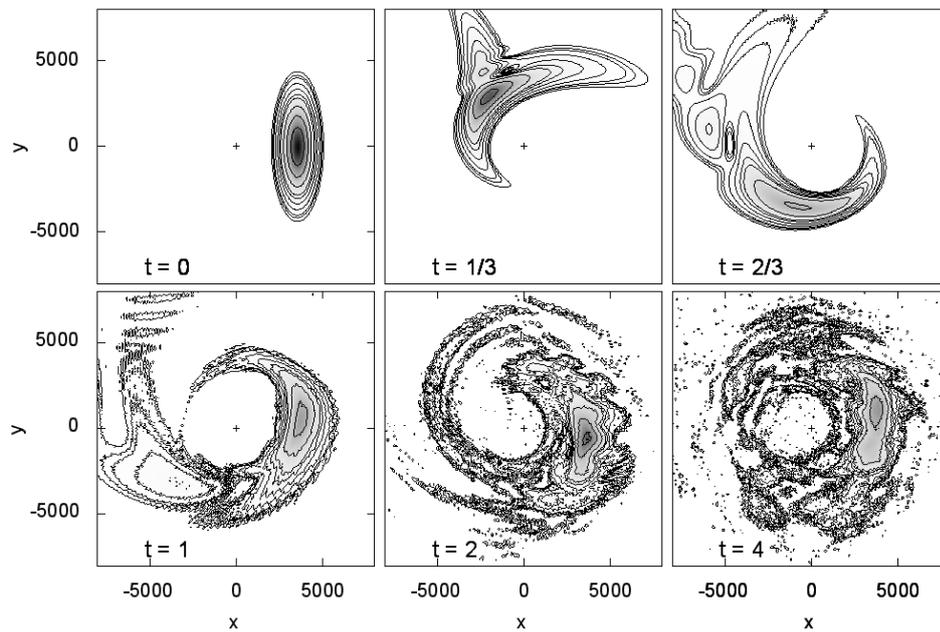


Abbildung 3.8.: Zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte des kartesischen trojanischen Wellenpakets (3.17) im Ortsraum.

Abbildung macht den Umlauf des Teilchens als Wellenpaket deutlich, wobei die Konturlinien logarithmisch skaliert sind. Die Aufgabe besteht darin einen Anfangszustand zu finden, welcher möglichst lange und kompakt das Zentrum umrundet. Gerade zu Beginn der Entwicklung wird deutlich, dass das trojanische Wellenpaket in kartesischen Koordinaten nicht sonderlich gut an das System angepasst ist.

Ein weitaus sinnvollerer Ansatz ist das Wellenpaket in Polarkoordinaten

$$\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = N e^{i\omega R^2 \varphi} e^{-\frac{\omega}{2} (A(R\varphi)^2 + B(r-R)^2 + 2i(C-1)(r-R)R\varphi)} \quad \text{mit} \quad -\pi \leq \varphi < \pi, \quad (3.23)$$

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

welches die Rotation besser berücksichtigt [6]. Die Koeffizienten  $A$ ,  $B$  und  $C$  dieser Wellenfunktion berechnen sich genauso wie die des kartesischen Wellenpakets aus dem Parameter  $q$ .

Abbildung 3.9 zeigt das polare trojanische Wellenpaket (3.23) über eine längere Zeitspanne. Es zeigt sich, dass ein sichtbares „Verrauschen“ erst nach 20 Umläufen einsetzt. Eine qualitativ bessere Aussage über die zeitliche Stabilität des Wellenpakets lässt sich durch die Projektion von  $\langle \mathbf{r} \rangle$  gewinnen. Diese Projektion ist wieder durch das Helium-Atom motiviert. Dort soll das innere Elektron als elliptischer Zustand durch das zweite Elektron, welches sich weit draußen auf einer Kreisbahn befindet, stabilisiert werden. Zu sehen ist, dass der Radius stark abnimmt, weil das Elektron mit der Zeit beginnt, das Zentrum zu „umschlingen“, wie es sich zum Zeitpunkt  $t = 30$  andeutet. Damit wird es immer schwieriger das Elektron als klassisches Teilchen zu verstehen.

Wenn aber die Stärke des  $E$ -Felds in unserem Beispiel um 20% auf  $E = -3.75445 \cdot 10^{-9}$  erhöht wird, so tritt dieser Effekt wesentlich schwächer auf. Die Resultate dieser Rechnung sind in Abbildung 3.10 dargestellt. Somit kann ein sehr stabiles und kompaktes Wellenpaket konstruiert werden, welches wie ein klassisches Elektron den Kern auf einer großen Kreisbahn umrundet. Allerdings fluktuiert der Radius des Erwartungswertvektors noch um ca. 10% und das Wellenpaket läuft dem Stabilitätspunkt etwas nach. Diese Schwankungen sind allerdings wesentlich schwächer als beim elliptischen Zustand.

Diese Diskrepanz zwischen der Stärke des  $E$ -Felds aus der Bestimmungsgleichung (3.16) und dem durch die Simulation gefundenen Wert ist auf Näherungsannahmen in der Herleitung zurückzuführen.

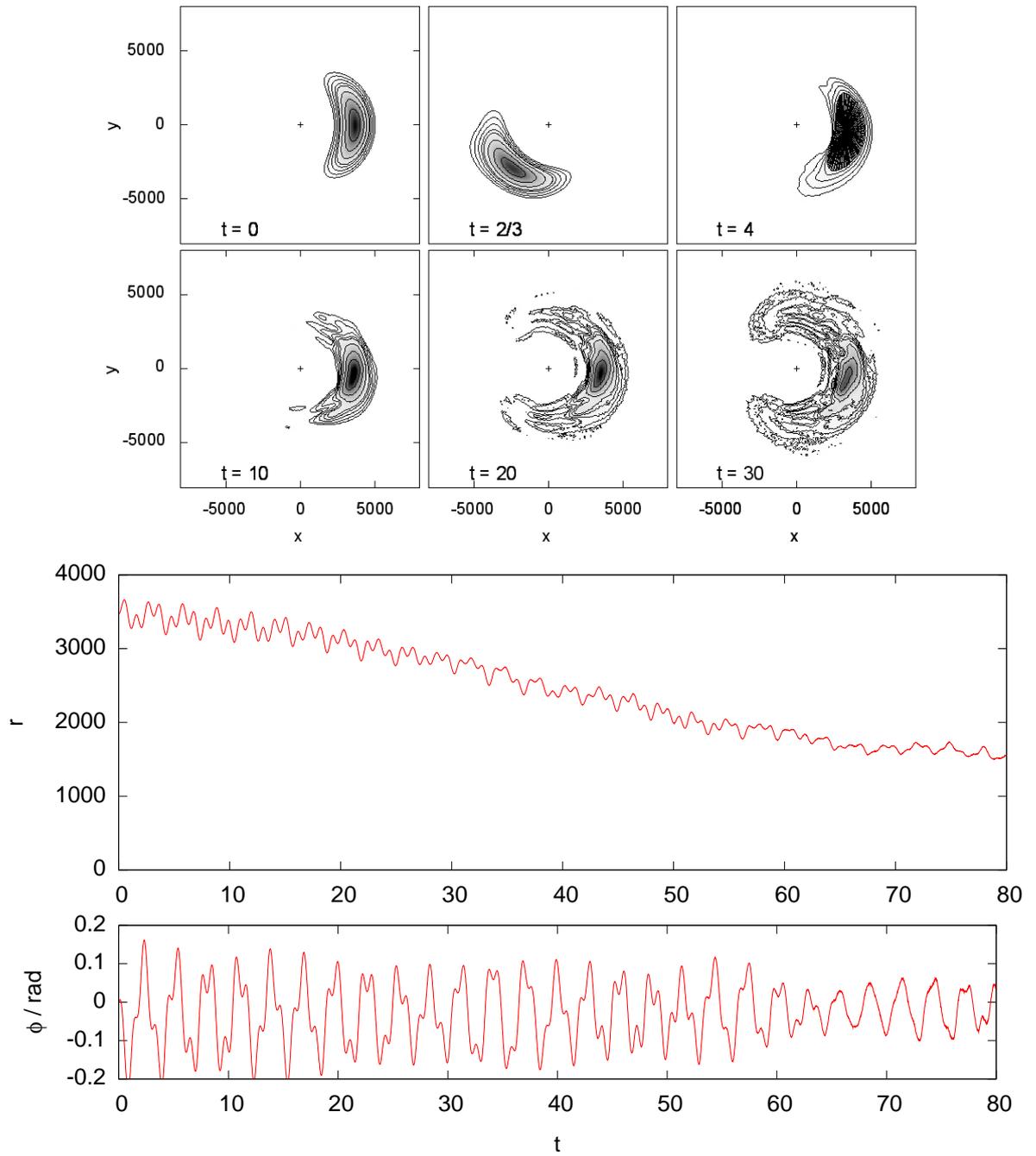


Abbildung 3.9.: Zeitliche Entwicklung des polaren trojanischen Wellenpakets (3.23).  
 Oben: Momentaufnahmen der Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum.  
 Mitte: Radius des Erwartungswertvektors. Unten: Winkel des Erwartungswertvektors im mitrotierenden System.

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

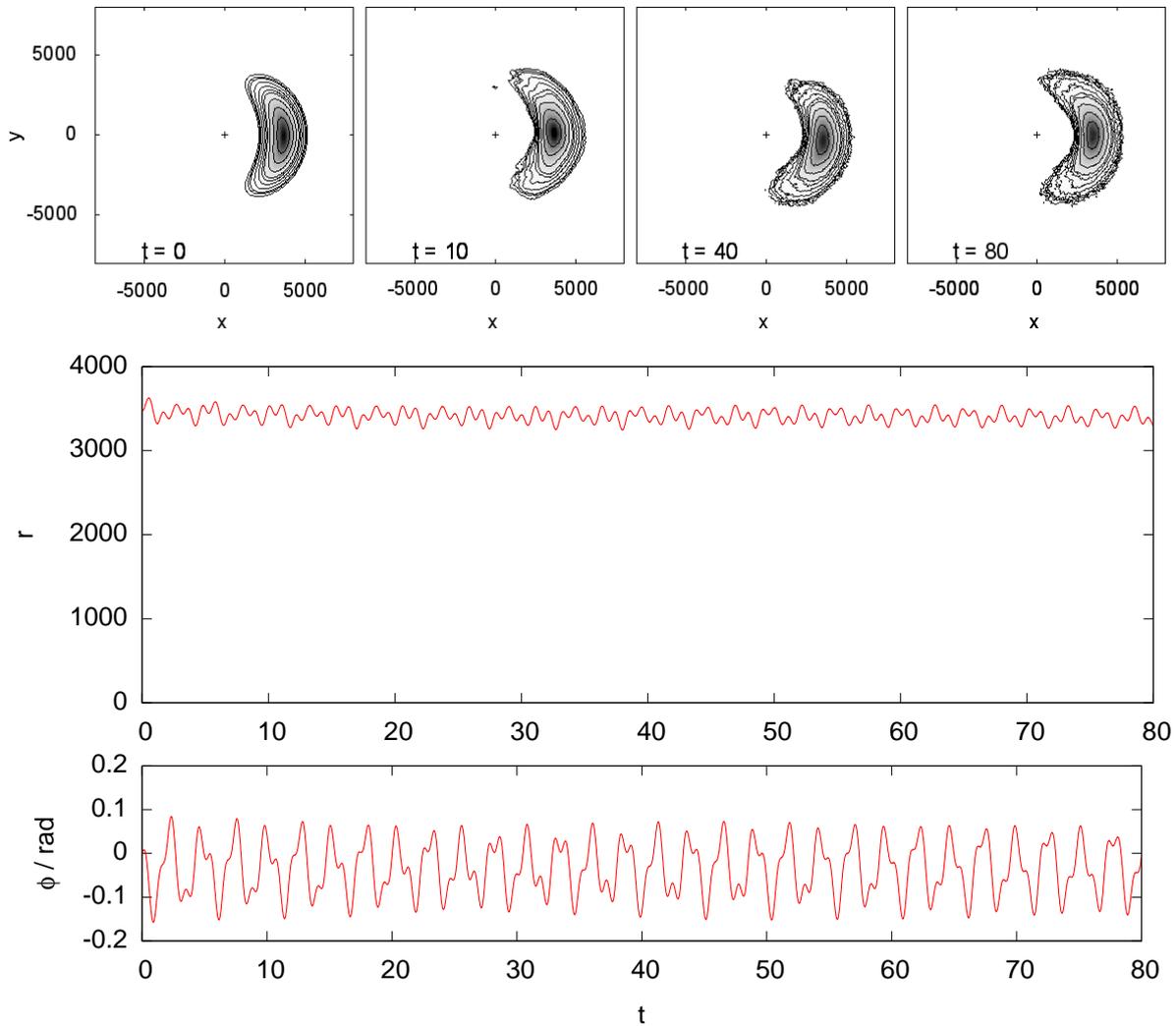


Abbildung 3.10.: Zeitliche Entwicklung des polaren trojanischen Wellenpakets (3.23) mit  $E = -3.75445 \cdot 10^{-9}$ . Oben: Momentaufnahmen der Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum. Mitte: Radius des Erwartungswertvektors. Unten: Winkel des Erwartungswertvektors im mitrotierenden System.

### 3.3. Das Helium-Atom

Das Helium-Atom ist das einfachste gebundene Mehr-Elektronen-System und macht es somit für die zeitliche Behandlung als Wenigquantensystem mit der Split-Operator-Methode interessant. Dieses System wird in der Hartree-Näherung behandelt. Für die zeitliche Entwicklung müssen so die zeitabhängigen Hartree-Gleichungen gelöst werden:

$$i\partial_t|\Psi_1\rangle = \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + \int d\mathbf{r}' \frac{|\langle \mathbf{r}' | \Psi_2 \rangle|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] |\Psi_1\rangle, \quad (3.24)$$

$$i\partial_t|\Psi_2\rangle = \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + \int d\mathbf{r}' \frac{|\langle \mathbf{r}' | \Psi_1 \rangle|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] |\Psi_2\rangle. \quad (3.25)$$

Im Weiteren soll untersucht werden, ob sich die Elektronen so initialisieren lassen, dass sich möglichst lange klassisches Verhalten zeigt. Dazu soll das eine Elektron  $|\Psi_1\rangle$  weit draußen auf einen trojanischen Zustand gesetzt werden. Das zweite Elektron  $|\Psi_2\rangle$  wird auf einen inneren elliptischen Zustand positioniert (Abbildung 3.11). Da sich diese

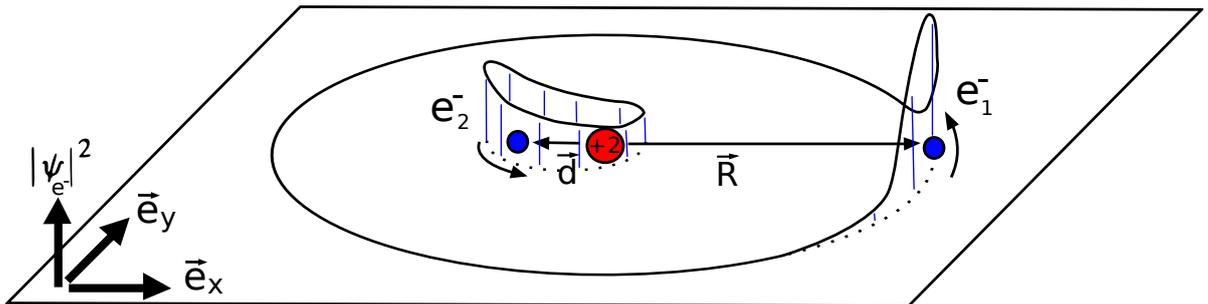


Abbildung 3.11.: Schematische Darstellung des zu behandelnden Helium-Atoms im klassischen Grenzfall (Kern rot und Elektronen blau).

Zustände kaum überlappen

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \approx 0, \quad (3.26)$$

ist es gerechtfertigt, dieses System mit unterscheidbaren Teilchen zu betrachten, weil die Austauschsterme in der Hartree-Fock-Näherung sehr klein sind.

Zudem sind die Elektronen stark lokalisiert, weswegen die wechselwirkenden Potentiale

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

durch Monopol- bzw. Dipolfelder approximiert werden können:

$$i\partial_t|\Psi_1\rangle = \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}|} + \frac{\mathbf{d}(t)\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} \right] |\Psi_1\rangle \quad (3.27)$$

$$\text{mit } \mathbf{d}(t) = \langle \Psi_2 | \mathbf{r} | \Psi_2 \rangle, \quad (3.28)$$

$$i\partial_t|\Psi_2\rangle = \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}(t)|} \right] |\Psi_2\rangle \quad (3.29)$$

$$\text{mit } \mathbf{R}(t) = \langle \Psi_1 | \mathbf{r} | \Psi_1 \rangle. \quad (3.30)$$

Das innere Elektron schirmt in dieser vereinfachten Betrachtung eine positive Ladungseinheit des Kerns ab. Im letzten Abschnitt wurden die Zustände mit externen homogen rotierenden E-Feldern stabilisiert. Somit ist vorerst zu diskutieren, wie diese Zustände an die veränderten Potentiale angepasst werden müssen.

#### 3.3.1. Elliptischer Zustand mit rotierendem Monopol

In diesem Unterabschnitt soll nun untersucht werden, ob der elliptische Zustand statt durch ein homogenes  $E$ -Feld durch ein Elektron auf einer äußeren Kreisbahn stabilisiert werden kann. Dazu wird

$$\mathbf{R}(t) = R \cos(\omega t) \mathbf{e}_x + R \sin(\omega t) \mathbf{e}_y \quad (3.31)$$

vorgegeben. Dabei wird der Radius so bestimmt, dass das äußere Elektron im Zentrum ein effektives  $E$ -Feld generiert, welches nötig ist um den elliptischen Zustand zu stabilisieren [7]:

$$E = \frac{1}{R^2}. \quad (3.32)$$

Somit verändert sich die Bestimmungsgleichung (3.8) zu

$$\tan \alpha = \frac{3n_2}{4R^2\omega}. \quad (3.33)$$

Um dies auf die in Abschnitt 3.2.1 verwendeten Parameter anzupassen muss  $R = 3629.86$  sein. Dies ist in etwa auch der Radius, welcher für den trojanischen Zustand in Abschnitt 3.2.2 verwendet wurde.

Aus Abbildung 3.12 ist zu entnehmen, dass es beim Übergang vom rotierenden homogenen  $E$ -Feld zum Elektron auf einer äußeren Kreisbahn keine nennenswerten Einbußen der Stabilität auftreten. Das heißt, dass sich der elliptische Zustand auch durch ein zweites Elektron, welches sich weit draußen befindet, stabilisieren lässt. Allerdings ist auch zu beobachten, dass der Radius des Erwartungswertsvektor wieder relativ stark oszilliert.

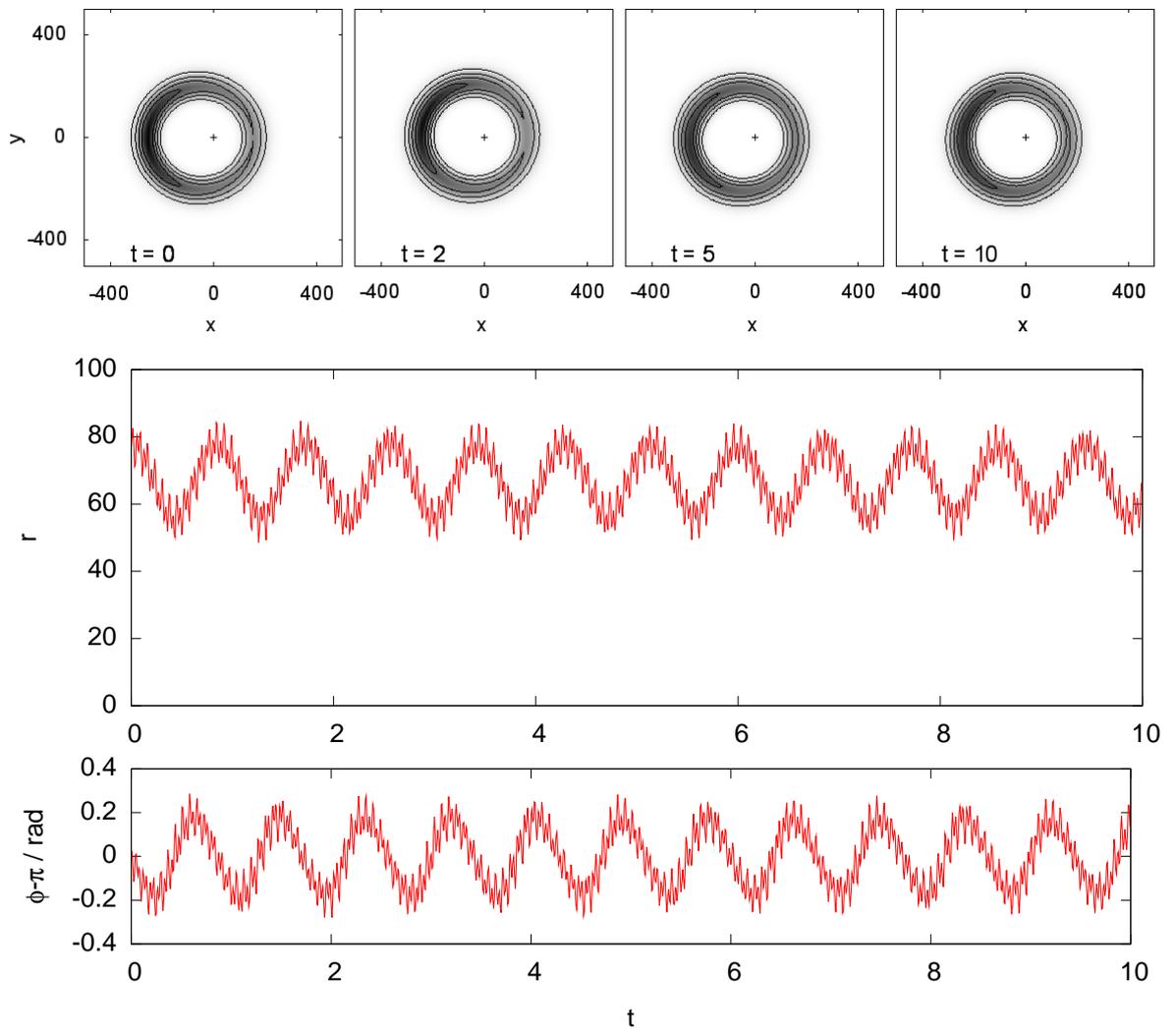


Abbildung 3.12.: Zeitliche Entwicklung des elliptischen Zustands (3.6) mit ideal rotierenden äußeren Elektron (3.29). Oben: Momentaufnahmen der Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum. Mitte: Radius des Erwartungswertvektors. Unten: Winkel des Erwartungswertvektors im mitrotierenden System.

### 3.3.2. Trojanischer Zustand mit rotierendem Dipol

Als zweites ist zu prüfen, ob auch der trojanische Zustand durch einen im Zentrum rotierenden Dipol stabilisiert werden kann. Dazu wird

$$\mathbf{d}(t) = d \cos(\omega t) \mathbf{e}_x + d \sin(\omega t) \mathbf{e}_y. \quad (3.34)$$

vorgegeben. In der ersten Variante wird die Stärke des Dipols so bestimmt, dass im Stabilitätspunkt  $\mathbf{r}_0 = (R, 0)$  des rotierenden Bezugssystems ein ausreichend starkes effektives  $E$ -Feld erzeugt wird, welches das äußere Elektron stabilisiert [7]. Damit ergibt sich die Relation

$$E = \frac{2d}{R^3}. \quad (3.35)$$

Für die am Ende in Abschnitt 3.2.2 verwendeten Parameter ist  $d = -76.0275$ . Dies entspricht in etwa auch dem Dipolmoment, welchen der elliptische Zustand am Anfang der Entwicklung aufweist (siehe Abbildung 3.7). Allerdings zeigt sich in der zeitlichen Entwicklung, dargestellt durch Abbildung 3.13, dass das trojanische Wellenpaket nicht sonderlich kompakt und stabil bleibt.

Um in diesem System bessere Resultate zu erzielen, sollte wie in [4] vorgegangen werden. In der zweiten Variante wird der feste Kern und der rotierende Dipol zusammen wie ein im Innern rotierender Monopol betrachtet:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{d}(t)|}. \quad (3.36)$$

Wir behandeln dieses Problem wieder im rotierenden Bezugssystem. Mit einer Verschiebung in  $x$ - und in  $p_y$ -Richtung (Anhang A.1)

$$|\Psi\rangle = e^{-i\omega L_z t} e^{idp_x} e^{id\omega y} |\Psi_T\rangle \quad (3.37)$$

kann das Problem auf den bekannten Hamilton-Operator (3.15) zurückgeführt werden:

$$H_T = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}|} - d\omega^2 x - \omega L_z - \frac{d^2\omega^2}{2}. \quad (3.38)$$

Der  $d^2\omega^2/2$ -Term ist dabei eine triviale Konstante. Somit wird mit

$$E = d\omega^2 \quad (3.39)$$

das Problem eines homogen rotierenden  $E$ -Feldes auf das Problem eines rotierenden Dipols übertragen. Allerdings muss der Anfangszustand gemäß der Gleichung (3.37) transformiert werden. Für die am Ende in Abschnitt 3.2.2 gewählten Parameter ergibt

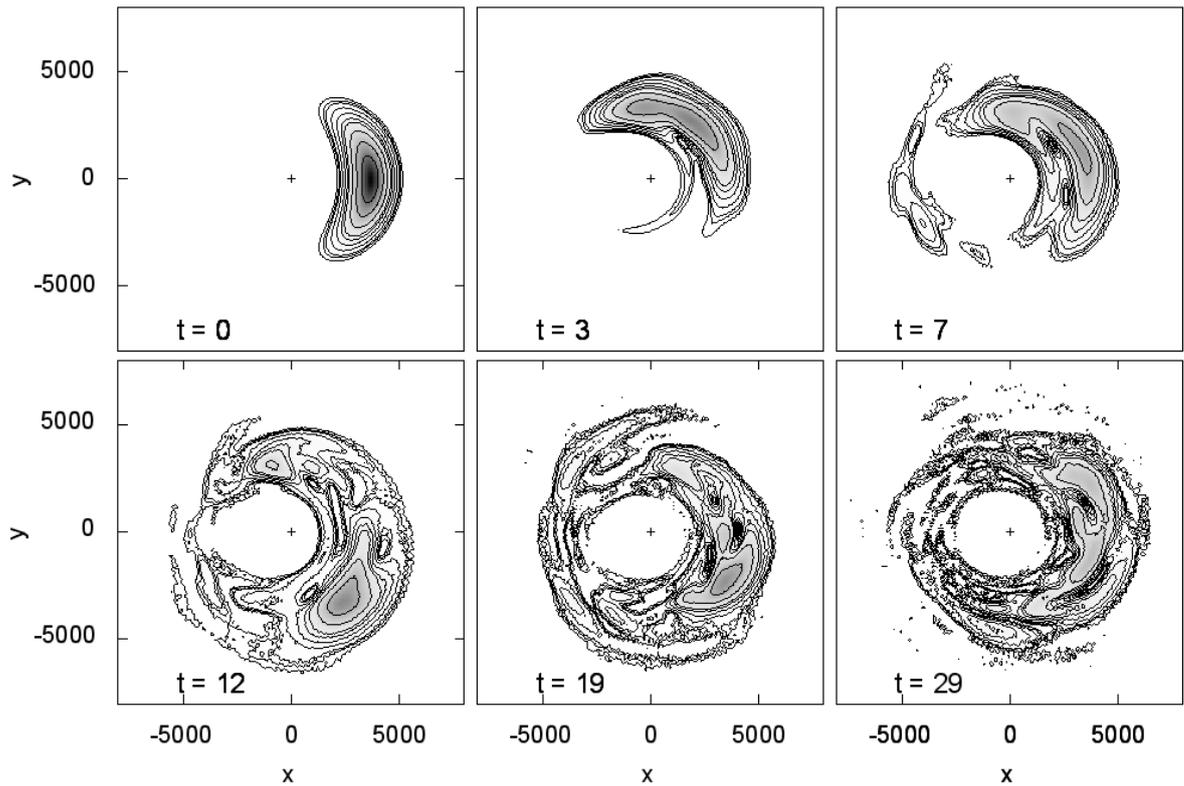


Abbildung 3.13.: Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte des trojanischen Zustands mit vorgegebenem rotierendem Dipolmoment / Variante 1

sich  $d = -145.973$ . Dies ist ein wesentlich stärkeres Dipolmoment, als der elliptische Zustand mit den Parametern  $n_2 = 21$  und  $\epsilon = 0,25$  generiert (siehe Abbildung 3.7).

In der Rechnung Abbildung 3.14 wurde die Wellenfunktion (3.37) mit dem Hamilton-Operator (3.27) und dem ideal rotierenden Dipol (3.34) zeitlich entwickelt. Es ist zu sehen, dass sich das Wellenpaket wesentlich kompakter und stabiler verhält. Diese Variante ist gegenüber der Ersten, die ein effektives  $E$ -Feld am Stabilitätspunkt verlangt [7], vorzuziehen.

### 3.3.3. Selbstkonsistente Behandlung der Elektronen-Wellenfunktionen

Nach der ausführlichen Diskussion des elliptischen und trojanischen Zustands wird klar, dass bei den gewählten Parametern das innere Elektron durch das äußere Elektron stabilisiert werden kann. Aber umgekehrt ist dies nicht möglich. Anders als in [7] vorherge-

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

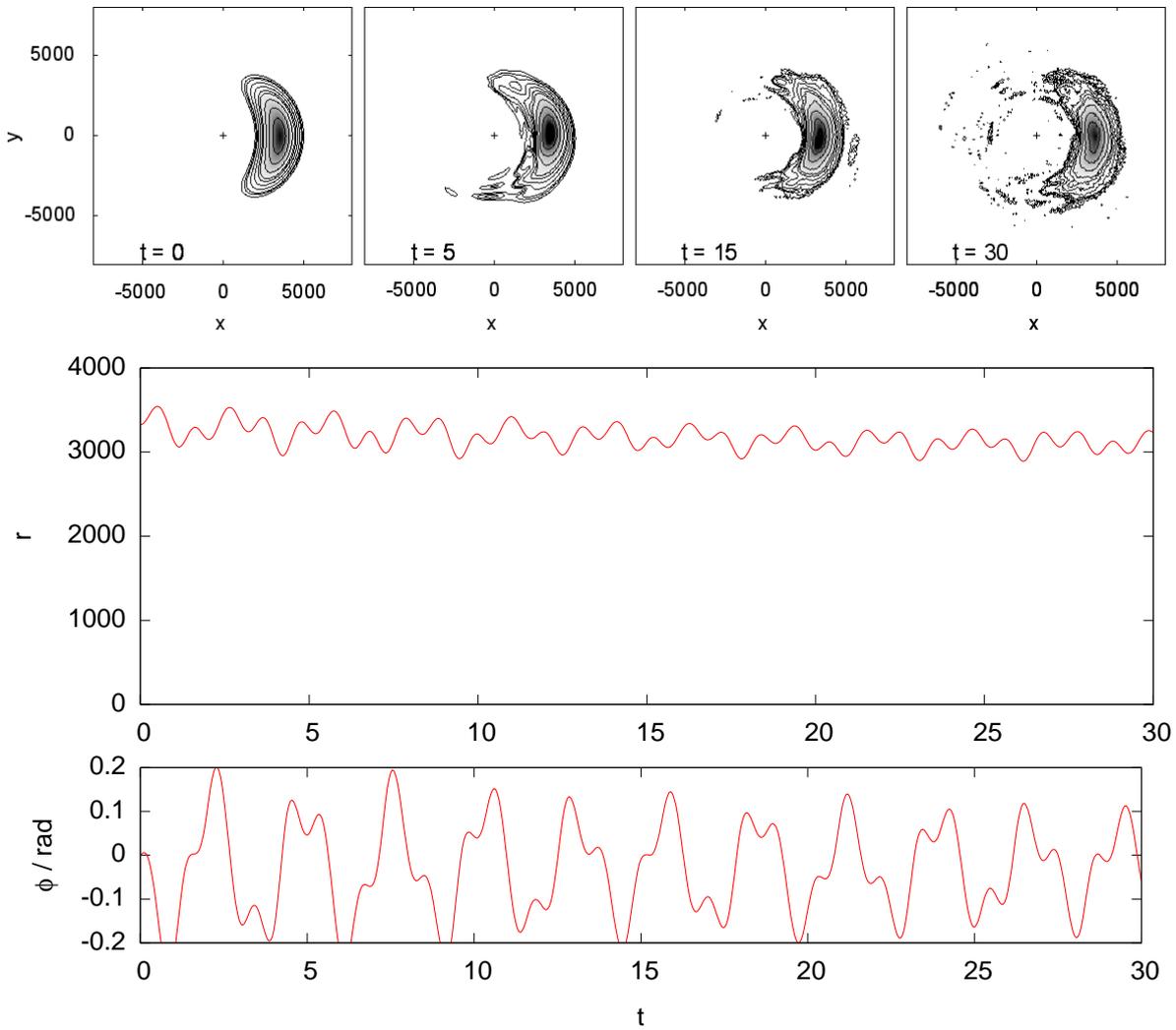


Abbildung 3.14.: Zeitliche Entwicklung des trojanischen Zustands (3.6) mit vorgegebenem rotierendem Dipolfeld (3.27) / Variante 2. Oben: Momentaufnahmen der Wahrscheinlichkeitsdichte im Ortsraum. Mitte: Radius des Erwartungswertvektors. Unten: Winkel des Erwartungswertvektors im mitrotierenden System.

sagt, werden sich die Elektronen nicht gegenseitig stabilisieren können. Denn zum einen schwankt der Erwartungswertvektor des innen Elektrons sehr stark und zudem ist das Dipolmoment im zeitlichen Mittel viel zu schwach. Demnach wird das äußere Elektron als trojanisches Wellenpaket in der zeitlichen Entwicklung nicht lange bestehen können, woraufhin auch der elliptische Zustand des inneren Elektrons zerfällt.

Um doch noch ein schwach dispersives Verhalten im Helium-Atom simulieren zu können, muss das System so modifiziert werden, dass das äußere Elektron stabilisiert wird. Dies kann durch ein externes homogenes rotierendes  $E$ -Feld geschehen. Das zusätzlich angelegte Feld wirkt natürlich auch auf das innere Elektron. Die Wirkung auf das innere Elektron ist aber sehr gering, da das äußere Elektron ein wesentlich stärkeres effektives  $E$ -Feld im Zentrum erzeugt als das externe  $E$ -Feld.

Während der Entwicklung wird das äußere Elektron eine nicht unerhebliche Ortsunschärfe gegenüber dem inneren Elektron aufweisen. Demzufolge ist es nicht mehr gerechtfertigt, den Erwartungswertvektor des äußeren Elektrons im Ortsraum zu bestimmen und das Wechselwirkungspotential durch einen Monopol zu approximieren. Also muss die Berechnung des Wechselwirkungspotentials über die Wahrscheinlichkeitsdichte des äußeren Elektrons erfolgen. Somit sind die zeitabhängigen Hartree-Gleichungen zu lösen:

$$i\partial_t|\Psi_1\rangle = \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}|} + \frac{\mathbf{d}(t)\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^3} - E x \cos(\omega t) - E y \sin(\omega t) \right] |\Psi_1\rangle \quad (3.40)$$

$$\text{mit } \mathbf{d}(t) = \langle \Psi_2 | \mathbf{r} | \Psi_2 \rangle, \quad (3.41)$$

$$i\partial_t|\Psi_2\rangle = \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + V_{12} - E x \cos(\omega t) - E y \sin(\omega t) \right] |\Psi_2\rangle \quad (3.42)$$

$$\text{mit } V_{12} = \int d\mathbf{r}' \frac{|\langle \mathbf{r}' | \Psi_1 \rangle|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (3.43)$$

Bei der numerischen Umsetzung müssen die Wellenfunktionen der beiden Elektronen parallel entwickelt werden. Dazu wird immer aus der Wellenfunktion des vorherigen Entwicklungsschritts jeweils das wechselwirkende Potential für das andere Elektron berechnet. Da das äußere Elektron eine wesentlich geringere Dynamik aufweist, ist es numerisch effektiv, nur für das innere Elektron den kleinen Zeitschritt von  $\Delta t_2 = \frac{1}{10000} \frac{2\pi}{\omega}$  zu verwenden. Für das äußere reicht ein Zeitschritt von  $\Delta t_1 = \frac{1}{100} \frac{2\pi}{\omega}$  vollkommen aus. Für das wechselwirkende Potential des inneren Elektrons ist die Wahrscheinlichkeitsdichte zeitlich zu mitteln. Das Potential, das durch das äußere Elektron erzeugt wird, wird in der Rechnung durch ein Mehr-Gitter-Verfahren und durch Interpolation auf das feinere Gitter des inneren Elektrons berechnet.

### 3. Anwendung der Split-Operator-Methode

Für die zeitliche Entwicklung des Helium-Atoms im homogen rotierenden  $E$ -Feld werden die Parameter

$$\begin{array}{ll}
 \text{Externes } E\text{-Feld:} & \omega = 4,62963 \cdot 10^{-6} \\
 & E = 2,36127 \cdot 10^{-9} \\
 \text{Äußeres } e^- / \text{Trojanischer Zustand (3.23):} & q = 0,96 \\
 & d_{\text{eff}} = 65 \\
 \text{Inneres } e^- / \text{Elliptischer Zustand (3.6):} & n = 21 \\
 & \epsilon = 0,25
 \end{array}$$

verwendet. Die Wellenfunktion des äußeren Elektrons wird dabei gemäß Gleichung (3.37) am Anfang mit dem mittleren Dipolmoment  $d_{\text{eff}}$  transformiert;  $d_{\text{eff}}$  wurde hierzu aus der Abbildung 3.9 grafisch abgeschätzt.

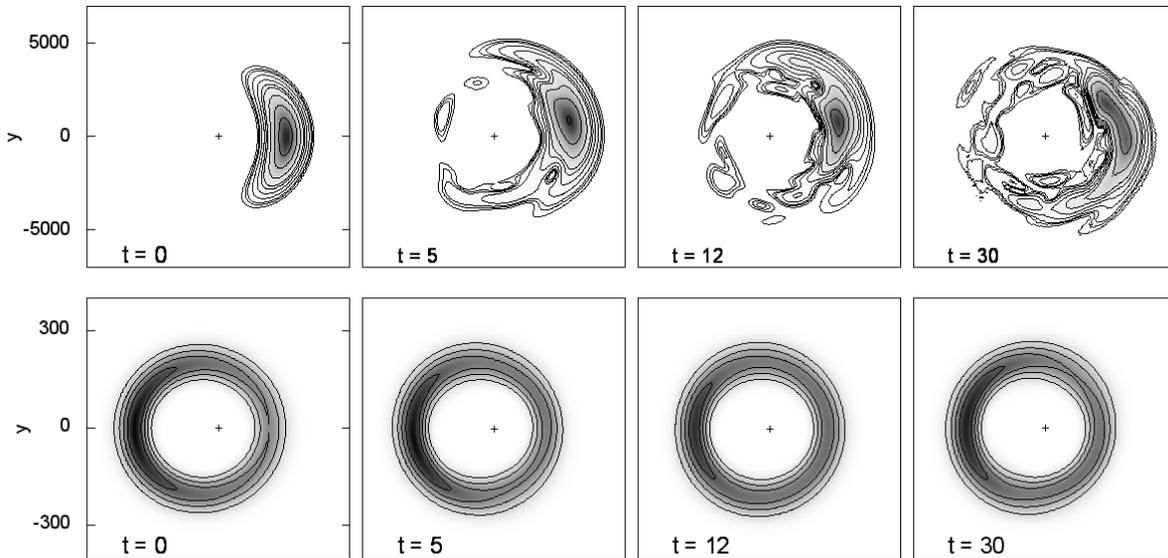


Abbildung 3.15.: Momentaufnahmen der zeitliche Entwicklung der Elektronen-Wellenfunktionen im Helium-Atom. Oben: äußeres Elektron (3.37). Unten: inneres Elektron (3.6).

Abbildung 3.15 visualisiert die zeitliche Entwicklung des Zweielektronen-Systems. Es zeigt sich, dass das äußere Elektron auch nach vielen Umläufen kompakt gehalten werden kann. Somit bleibt auch die Wellenfunktion des inneren Elektrons in der elliptischen Form. Es zeigt sich aber auch, dass dieses System wesentlich fragiler ist als die behandelten Einelektron-Systeme. Dies liegt daran, dass trotz des hinzugefügten  $E$ -Feldes die starken Schwankungen des inneren Dipols das äußere Elektron destabilisierten.

### 3.4. Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden quantenmechanische Systeme simuliert, bei denen die Wellenfunktionen in der zeitlichen Entwicklung kompakt gehalten werden konnten. Es hat sich aber herausgestellt, dass der elliptische Zustand nicht die notwendigen Eigenschaften besitzt, um im Helium-Atom das äußere Elektron als trojanisches Wellenpaket zu stabilisieren. Dementsprechend war im Gegensatz zur Theorie aus [7] ein externes Feld notwendig, um gering dispersives Verhalten zu demonstrieren. Dieses Resultat war auch zu erwarten, da diese Elektronenkonfiguration kein natürlich vorkommender Zustand des Helium-Atoms ist.

Aber dennoch ist dieses System trotz des externen Feldes sehr fragil und läuft wesentlich schneller auseinander als die behandelten Einelektron-Systeme. Um auf längere Zeit das klassische Verhalten zu demonstrieren, wäre es denkbar mit Hilfe von genetischen Algorithmen die Parameter und Konstanten besser anzupassen.

Weiterhin ist zu sagen, dass in diesem Modell sehr viele Näherungsannahmen gemacht wurden. Zum einen würde in der Hartree-Fock-Näherung der Austauschterm ein schnelleres Verzerren der Wellenfunktionen verursachen. Zum anderen ist zu sagen, dass in diesen Rechnungen das Problem in zwei Raumdimensionen behandelt wurde. Desweiteren müssten für längere Entwicklungszeiten mit der Split-Operator-Methode absorbierende Ränder verwendet werden, welche bei diesen Rechnungen nicht eingesetzt wurden.

# A. Anhang

## A.1. Transformation der Schrödinger-Gleichung

Für die Transformationen in andere Bezugssysteme soll an dieser Stelle der mathematische Hintergrund beleuchtet werden. Eine hilfreiche Entwicklung für nicht kommutierende Operatoren  $\hat{A}$  und  $\hat{B}$  ist

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{[\hat{A}, \hat{B}]_m}{m!} \quad \text{mit} \quad [\hat{A}, \hat{B}]_m = [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]_{m-1}] \quad \text{und} \quad [\hat{A}, \hat{B}]_0 = \hat{B}. \quad (\text{A.1})$$

### A.1.1. Translation im Ortsraum

Das Ausgangssystem sei durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\partial_t|\Psi\rangle = \hat{H}(\hat{p}, \hat{x})|\Psi\rangle \quad (\text{A.2})$$

beschrieben. Für die Translation wird für den Zustand der Separationsansatz

$$|\Psi\rangle = e^{ix_0\hat{p}}|\Psi_T\rangle \quad (\text{A.3})$$

vollzogen und in die Schrödinger-Gleichung eingesetzt. Anschließend wird auf die Schrödinger-Gleichung der Operator  $e^{-ix_0\hat{p}}$  von links angewendet:

$$e^{-ix_0\hat{p}}i\partial_t e^{ix_0\hat{p}}|\Psi_T\rangle = e^{-ix_0\hat{p}}\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})e^{ix_0\hat{p}}|\Psi_T\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Auf der linken Seite kommutiert dieser mit  $\partial_t$ . Auf der rechten Seite wirkt auf Grund von  $[\hat{x}, \hat{p}] = i$  der Operator nur auf  $\hat{x}$  im Hamilton-Operator. Mit der Entwicklung (A.1) ergibt sich

$$e^{-ix_0\hat{p}}\hat{x}e^{ix_0\hat{p}} = \hat{x} - x_0, \quad (\text{A.5})$$

da die Reihe nach  $m = 1$  abbricht. Damit hat die transformierte Schrödinger-Gleichung die Form

$$i\partial_t|\Psi_T\rangle = \hat{H}(\hat{p}, \hat{x} - x_0)|\Psi_T\rangle \quad (\text{A.6})$$

### A.1.2. Translation im Impulsraum

Die Verschiebung im Impulsraum gestaltet sich analog zum Ortsraum. Hier wird der Separationsansatz

$$|\Psi\rangle = e^{-ip_0\hat{x}}|\Psi_T\rangle \quad (\text{A.7})$$

verwendet. Damit transformiert sich die Schrödinger-Gleichung zu

$$i\partial_t|\Psi_T\rangle = \hat{H}(\hat{p} - p_0, \hat{x})|\Psi_T\rangle. \quad (\text{A.8})$$

### A.1.3. Rotation

Um ein System in ein rotierendes Bezugssystem zu transformieren, verwendet man den Separationsansatz

$$|\Psi\rangle = e^{-i\omega\hat{L}_zt}|\Psi_R\rangle \quad \text{mit} \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \quad (\text{A.9})$$

Hier wird wieder der Operator  $e^{i\omega\hat{L}_zt}$  von links auf die Schrödinger-Gleichung angewendet:

$$e^{i\omega\hat{L}_zt}i\partial_t e^{-i\omega\hat{L}_zt}|\Psi_R\rangle = e^{i\omega\hat{L}_zt}\hat{H}(\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{x}, \hat{y})e^{-i\omega\hat{L}_zt}|\Psi_R\rangle. \quad (\text{A.10})$$

Durch die Anwendung von  $\partial_t$  entsteht auf der linken Seite nun der zusätzliche Operator  $\omega\hat{L}_z$ . Dieser wird anschließend auf die rechte Seite zum Hamilton-Operator gebracht. Auf der rechten Seite müssen unter Verwendung von Gleichung (A.1) die Orts- und Impulsoperatoren entwickelt werden:

$$e^{i\omega\hat{L}_zt}\hat{x}e^{-i\omega\hat{L}_zt} = \hat{x}\cos(\omega t) - \hat{y}\sin(\omega t) = \hat{x}', \quad (\text{A.11})$$

$$e^{i\omega\hat{L}_zt}\hat{y}e^{-i\omega\hat{L}_zt} = \hat{x}\sin(\omega t) + \hat{y}\cos(\omega t) = \hat{y}', \quad (\text{A.12})$$

$$e^{i\omega\hat{L}_zt}\hat{p}_xe^{-i\omega\hat{L}_zt} = \hat{p}_x\cos(\omega t) - \hat{p}_y\sin(\omega t) = \hat{p}'_x, \quad (\text{A.13})$$

$$e^{i\omega\hat{L}_zt}\hat{p}_ye^{-i\omega\hat{L}_zt} = \hat{p}_x\sin(\omega t) + \hat{p}_y\cos(\omega t) = \hat{p}'_y. \quad (\text{A.14})$$

Somit transformiert sich die Schrödinger-Gleichung zu

$$i\partial_t|\Psi_R\rangle = \left(\hat{H}(\hat{p}'_x, \hat{p}'_y, \hat{x}', \hat{y}') - \omega\hat{L}_z\right)|\Psi_R\rangle. \quad (\text{A.15})$$

## A.2. Diskrete Fourier-Transformation

Aus der Quantenmechanik ist bekannt, dass die Fourier-Transformation Wellenfunktionen zwischen dem Orts- und Impulsraum transformiert. Dies ist ein Integral über den

ganzen Raum. Auf endlichen Gittern wird eine diskrete Fourier-Transformation verwendet [17]. Bei dieser Transformation geht man von periodischen Randbedingungen aus:

$$\langle x_i | \Psi \rangle, \quad x_i = i \Delta x + x_0, \quad i = 0, 1, \dots, N - 1, \quad (\text{A.16})$$

$$\langle p_i | \Psi \rangle = \sum_j \langle p_i | x_j \rangle \langle x_j | \Psi \rangle \quad \text{mit} \quad \langle p_i | x_j \rangle = \frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} e^{-i p_i x_j}, \quad (\text{A.17})$$

$$\langle x_i | \Psi \rangle = \sum_j \langle x_i | p_j \rangle \langle p_j | \Psi \rangle \quad \text{mit} \quad \langle x_i | p_j \rangle = \frac{\Delta p}{\sqrt{2\pi}} e^{+i p_i x_j}. \quad (\text{A.18})$$

Für die Gitterabstände aus beiden Darstellungen gilt die Relation  $\Delta x \Delta p = \frac{2\pi}{N}$ . Da das Gitter in Ortsraum nur einen endlichen Bereich abbildet, wird im Impulsraum auch nur ein endlicher Bereich abgebildet:

$$-\frac{N\pi}{L} \leq p_i \leq \frac{N\pi}{L} = \frac{\pi}{\Delta x}. \quad (\text{A.19})$$

Für die praktische Umsetzung ist zu beachten, dass bei einer Indizierung von  $i = 0, 1, \dots, N - 1$  in beiden Darstellungen, die positiven Impulse von  $p_0 = 0$  bis  $p_{N/2} = \frac{N\pi}{L}$  und die negativen Impulse von  $p_{N/2} = -\frac{N\pi}{L}$  bis  $p_{N-1} = -\frac{2\pi}{L}$  abgebildet werden.

Wichtig zu wissen ist, dass Impulse, welche außerhalb dieses Spektrums liegen, auf Grund der periodischen Randbedingungen wieder in diesem Bereich abgebildet werden. Das liegt daran, dass das Ortsgitter zu schnelle Oszillationen der Wellenfunktion nicht auflösen kann. Um dieser Problematik aus dem Weg zu gehen, ist es nur möglich, sich auf einen kleineren Bereich in Ortsraum zu beschränken, oder die Anzahl der Gitterpunkte zu erhöhen.

Ein Problem der diskreten Fourier-Transformation ist es, dass die Rechenzeit um eine komplette Wellenfunktion zu transformieren mit  $N^2$  skaliert. Um die Transformation effektiver zu gestalten, wird die Fast-Fourier-Transformation (FFT) verwendet [11]. Die Idee der FFT ist, dass Zwischensummen mehrfach verwendet und somit arithmetische Rechenoperationen gespart werden. Damit skaliert die Rechenzeit der FFT nur noch mit  $N \log_2 N$ , ohne Einschränkungen in der Genauigkeit hinnehmen zu müssen. Diesen Vorteil bekommt man allerdings nur, wenn  $N$  eine Zweierpotenz ist ( $N = 2^m$  mit  $m \in \mathbb{N}$ ). Für die numerische Umsetzung empfiehlt sich die Nutzung der *FFTW3*-Bibliothek (<http://www.fftw.org/>).

### A.3. Eigenzustände des zweidimensionalen Coulomb-Potentials

Für den elliptischen Zustand (3.6) werden die zweidimensionalen Energieeigenzustände des einfach ionisierten Helium-Atoms ( $Z = 2$ ) benötigt. Dazu muss also das Eigenwertproblem

$$E\Psi(r, \varphi) = \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{Z}{r} \right] \Psi(r, \varphi) \quad (\text{A.20})$$

gelöst werden. Dabei wird der Ansatz

$$\Psi(r, \varphi) = R(r) r^{|m|} e^{-\beta r/2} e^{im\varphi} \quad (\text{A.21})$$

gemacht, wobei  $\beta^2 = -8E$  ist. Daraus folgt schnell, dass  $m \in \mathbb{Z}$  ist. Weiter führt dieser Ansatz für die Radialfunktion auf die Laguerresche Differentialgleichung [15]

$$(\beta r) \frac{d^2 R}{d(\beta r)^2} + (2|m| + 1 - (\beta r)) \frac{dR}{d(\beta r)} + \left( \frac{2Z}{\beta} - \frac{1}{2} - |m| \right) R = 0. \quad (\text{A.22})$$

Dieser Differentialgleichung genügen die zugeordneten Laguerre-Polynome

$$L_{n_p=n-|m|-1}^{2|m|}(\beta r) = \sum_{k=0}^{n_p} \binom{n_p + 2|m|}{n_p - k} \frac{(-\beta r)^k}{k!}. \quad (\text{A.23})$$

Dabei gilt für die beiden Quantenzahlen

$$n = \frac{2Z}{\beta} + \frac{1}{2} = 1, 2, \dots \quad \text{und} \quad m = -n + 1, \dots, n - 1. \quad (\text{A.24})$$

Daraus folgen die orthonormierten Eigenzustände

$$\langle \mathbf{r} | n, m \rangle = \sqrt{\frac{Z^2}{\pi (n - 1/2)^3} \frac{(n - 1 - |m|)!}{(n - 1 + |m|)!}} (\beta r)^{|m|} e^{-\beta r/2} L_{n-|m|-1}^{2|m|}(\beta r) e^{im\varphi}. \quad (\text{A.25})$$

Um die zugeordneten Laguerre-Polynome in einem C-Programm einzubinden, empfiehlt sich die Nutzung der *GNU Scientific Library* (<http://www.gnu.org/software/gsl>).

### A.4. Anlage

Dieser Arbeit ist eine Daten-CD beigelegt, auf der sich ein Video befindet. Auf diesem Video ist der elliptische Zustand in der zeitlichen Entwicklung im Ortsraum zu sehen. Hier ist zu erkennen, dass es Phasen gibt, in denen Wellenpakete auf der Ellipse links herumlaufen. Dies konnte mit einzelnen Konturplots nicht dargestellt werden.

# Literaturverzeichnis

- [1] J.C. Gay D. Delande, A. Bommier: *Atomic quantum states with maximum localization on classical elliptical orbits*: *Phy. Rev. A* **39**, 6587 (1989)
- [2] J.A. West, Z.D. Gaeta, C.R. Stroud: *Classical limit states of the helium atom*: *Phy. Rev. A* **58**, 186 (1998)
- [3] I. Bialynicki-Birula, M. Kalinski, J.H. Eberly: *Lagrange Equilibrium Points in Celestial Mechanics and Nonspreading Wave Packets for Strongly Driven Rydberg Electrons*: *Phy. Rev. Lett.* **73**, 1777 (1994)
- [4] I. Bialynicki-Birula, Z. Bialynicki-Birula: *Nonspreading Wave Packets for Rydberg Electrons in Rotating Molecules with Electric Dipole Moments*: *Phy. Rev. Lett.* **77**, 4298 (1996)
- [5] M. Kalinski, J.H. Eberly: *Numerical observation of stable field-supported Rydberg wave packets*: *Phy. Rev. A* **52**, 2460 (1995)
- [6] M. Kalinski, J.H. Eberly: *Trojan wave packets: Mathieu theory and generation from circular states*: *Phy. Rev. A* **53**, 1715 (1996)
- [7] M. Kalinski, J.H. Eberly, J.A. West, C.R. Stroud: *Rutherford atom in quantum theory*: *Phy. Rev. A* **67**, 032503 (2003)
- [8] N. Balakrishnan, C. Kalyanaraman, N. Sathyamurthy: *Time-dependent quantum mechanical approach to reactive scattering and related processes*: *Physics Report* **280**, 79-144 (1997)
- [9] M.D. Feit, J.A. Fleck Jr., A. Steiger: *Solution of the Schrödinger equation by a spectral method*: *J. Comp. Phys.* **47**, 412 (1982)
- [10] H.T. Ezer, R. Kosloff, C. Cerjan: *Low-order polynomial approximation of propagators for the time-dependent Schrödinger equation*: *J. Comp. Phys.* **100**, 179 (1992)

- [11] J.W. Cooley, J.W. Tukey: *An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series*: Math. Comput. **19**, 297 (1965)
- [12] H. Fehske, R. Schneider, A. Weiße: *Computational Many-Particle Physics*: Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (2008), S. 566
- [13] E. Schrödinger , M. Planck, A. Einstein, H.A. Lorentz: *Briefe zur Wellenmechanik*. Herausgegeben im Auftrage der Österreichischen Akademie d. Wissenschaften von K. Przibram: Springer-Verlag, Wien (1963)
- [14] T. Fließbach: *Mechanik*. Lehrbuch zur Theoretischen Physik I: Spektrum Akademischer Verlag, München 5. Auflage (2007), S. 141-143
- [15] Bronstein, Semendjajew, Musionl, Mühlig: *Taschenbuch der Mathematik*: Verlag Harri Deutsch, Frankfurt am Main 6. Auflage (2005), S. 531
- [16] F. Schwabl: *Quantenmechanik (QM I)*: Springer-Verlag, Berlin 7. Auflage (2007), S. 293
- [17] P.L. DeVries: *Computerphysik*: Spektrum Akademischer Verlag, Berlin (1995), S. 318
- [18] M. Hintenender: *Propagation von Wellenpaketen*. Numerische Integration der zeitabhängigen Schrödingergleichung: <http://www.mpq.mpg.de/cms/mpq/institute/service/library/reports/docs/mpq163.html>, Aufruf 25.06.2010, (1992), S. 8

## **Danksagung**

Einen besonderen Dank gilt Herrn Prof. Dr. H. Fehske für die geduldige Betreuung, Unterstützung und die Möglichkeit, in seiner Arbeitsgruppe diese Arbeit anzufertigen. Außerdem möchte ich mich bei Herrn Dr. F.X. Bronold bedanken für die Themenstellung und ebenfalls der geduldigen Betreuung und Unterstützung während der ganzen Arbeit. Mein Dank gilt auch Herrn Prof. Dr. G. Wellein für die Betreuung als Zweitgutachter. Bedanken möchte ich mich auch bei Herrn Prof. Dr. R. Schneider für die Technische und moralische Unterstützung bei der Programmierung. Ebenfalls danke ich Dr. A. Alvermann für die Diskussion über die grundlegenden Sachverhalte dieser Arbeit. Mein Dank gilt auch meinen Mitstreiter M. Pamperin, der den theoretischen Teil dieses Themas bearbeitet hat, und mir immer bei Fragen zur Seite stand. Und nicht zuletzt möchte ich meinen WG-Mitbewohner B. G. Sölter für das Korrekturlesen danken.